

Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki
Wydział Inżynierii Lądowej
Instytut Mechaniki Budowli
Katedra Wytrzymałości Materiałów

Rozprawa doktorska

**ZASTOSOWANIE
AUTOMATÓW KOMÓRKOWYCH
W OPISIE ROZWOJU USZKODZEŃ
W WARUNKACH PEŁZANIA**

mgr inż. Krzysztof Nowak

Promotor: prof. dr hab. inż. Marcin Chrzanowski

Kraków 2009



Podziękowania

Chciałbym serdecznie podziękować wszystkim osobom, które pomogły mi w ukończeniu tej pracy, w szczególności:

Profesorowi Marcinowi Chrzanowskiemu za inspiracje do podjęcia tematu pracy, za wiele uwag i pytań czasami bardzo ogólnych, a czasem szczegółowych oraz za owocne dyskusje nad tymi pytaniami.

Koleżankom i kolegom z Katedry Wytrzymałości Materiałów za różnorodną pomoc podczas przygotowywania pracy.

Mojej rodzinie za nieustające wsparcie.



Spis treści

Ważniejsze oznaczenia	4
1 Wstęp. Tematyka i cel pracy.....	9
2 Opis rozwoju uszkodzeń w warunkach pełzania	11
2.1 Poziom makroskopowy.....	11
2.2 Poziom mikroskopowy	27
3 Zastosowanie automatów komórkowych.....	49
3.1 O automatach komórkowych	49
3.2 Zastosowany w pracy automat komórkowy	61
3.3 Modelowanie struktury materiałów	63
3.4 Modelowanie procesów rozwoju uszkodzeń	69
3.5 Ograniczenia zastosowanego modelowania CA	81
4 Symulacje rozwoju uszkodzeń w materiałach polikrystalicznych	85
4.1 Wzrost pustek	85
4.2 Zniszczenie międzykrystaliczne	98
4.3 Zniszczenie transkrystaliczne	119
4.4 Zniszczenie mieszane	125
4.5 Podsumowanie użytych algorytmów	129
5 Model wieloskalowy rozwoju uszkodzeń CAFE	131
5.1 Budowa modelu	131
5.2 Symulacja doświadczenia dla miedzi	135
5.3 Symulacja doświadczenia dla żelaza	147
6 Wnioski	153
7 Literatura	157
Dodatek	169
D.1 Zmiana objętości w zależności od wartości parametru uszkodzenia.....	169
D.2 Przykład działania algorytmu deformacji	170
D.3 Skala czasowa i przestrzenna automatu	171
Szczegółowy spis treści	173

Ważniejsze oznaczenia

Zmienne i stałe makroskopowe

- B, n – stałe materiałowe w równaniu Nortona
- C, m – stałe w równaniu Kaczanowa
- C*, β – stałe materiałowe w równaniu Monkmana-Granta
- C_{MG} – stała (parametr) Monkmana-Granta
- ε_c – odkształcenie pełzania (w stanie jednoosiowym)
- ε_f – odkształcenie przy zniszczeniu
- $\dot{\varepsilon}_s$ – prędkość odkształcenia pełzania ustalonego
- $\dot{\varepsilon}_c$ – prędkość odkształcenia pełzania
- λ_{tol} – parametr tolerancji uszkodzenia
- S_i – parametry strukturalne
- S_{ij} – składowe tensora dewiatora naprężenia
- σ – naprężenie (w stanie jednoosiowym)
- σ_{ij} – składowe tensora naprężenia
- σ_0 – naprężenie początkowe (nominalne)
- $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_i$ – wartości naprężeń głównych
- σ_{eff} – intensywność naprężenia
- σ_m – naprężenie średnie
- σ_{eq} – naprężenie ekwiwalentne – miara trójosiowego stanu naprężenia
- $\tilde{\sigma}$ – tensor naprężenia efektywnego
- $\bar{\sigma}$ – naprężenie efektywne (w przekroju zredukowanym o uszkodzenie)
- t – czas (liczony od początku próby)
- t_f – czas do zniszczenia
- T – temperatura
- T_m – temperatura topnienia
- ω – parametr uszkodzenia

Zmienne i stałe mikroskopowe

- d – średnica ziarna
- D_v – współczynnik dyfuzji objętościowej
- δD_{gb} – współczynnik dyfuzji po granicach ziaren
- δD_s – współczynnik dyfuzji powierzchniowej
- δ – grubość granicy
- f_v – gęstość objętościowa pustek (ang. *void volume fraction*)
- f_a – oczekiwana gęstość objętościowa pustek
- f_c – gęstość objętościowa pustek przy początku koalescencji (ang. *void volume fraction on onset of coalescence*)
- γ_s, γ_{gb} – energie powierzchni swobodnej i powierzchni granicy między ziarnami
- h(ψ) – stosunek objętości pustki do objętości kuli o tym samym promieniu
- k – stała Boltzmana (1.38E-23 J/K)
- λ – odstęp między pustkami
- Λ – rozmiar pola dyfuzyjnego
- N_a – gęstość powierzchniowa liczby pustek – liczba pustek na jednostkę powierzchni granicy
- N_v – gęstość liczby pustek – liczba pustek na jednostkę objętości

\dot{N}_v – prędkość nukleacji pustek
 r – promień pustki
 r_0 – początkowy promień pustki
 R – stała gazowa (8.315 J/K/mol)
 ρ – gęstość masy
 ρ_0 – gęstość początkowa masy
 ω – udział pustek w powierzchni granic ziaren (powierzchniowa gęstość pustek)
 ω_f – wartość powierzchniowej gęstości pustek w momencie połączenia się pustek (koalescencji)
 ψ – kąt powierzchni pustki z powierzchnią granicy
 t_c – czas do połączenia się pustek (koalescencji)
 v – objętość pustki
 Ω – objętość atomowa

Oznaczenia użyte w opisie automatu komórkowego

$\mathbf{a}=[a_0 \dots a_5]$ – wektor opisujący algorytm procesu rozwoju uszkodzeń
 $a_0 - a_0=0$ – nieściśliwość zewnętrzna (równ. 3.41) lub $a_0=1$ – wewnętrzna (równ. 3.44)
 a_1 – dla stałej objętości ($a_0=0$): $a_1=0$ – stała gęstość, $a_1=1$ – potęgowe prawo zmiany gęstości lub $a_1=2$ – wykładnicze; dla $a_0=1$ parametr jest nieistotny (zapisane jako $a_1=0$)
 $a_2 - a_2=0$ – wytrzymałość granicy mniejsza od wytrzymałości ziarna lub $a_2=1$ gdy jest jej równa
 $a_3 - a_3=0$ – pustki szczelinowe ($w_{e-m}=0, w_{g-g}=1$), $a_3=1$ – pustki owalne ($w_{e-m}=2, w_{g-g}=1$), $a_3=2$ – inne określone bezpośrednio przez w_{e-m} i w_{g-g}
 $a_4 - a_4=0$ – współczynnik $B(z)$ przyjęty wg tabeli 3.6 w zależności od liczby pustek i ziaren w sąsiedztwie lub $a_4=1$ – stały niezależny od sąsiedztwa
 $a_5 - a_5=1$ – pustki mogą się rozwijać wszędzie lub $a_5=0$ – tylko w punktach zarodkowania pustek – kontrola stanu S_{IV}
 α_{all} – parametr oznaczający proporcje komórek pustych po pierwszym etapie do wszystkich komórek pustych $\alpha_{all} = E^1(t_i)/E(t_i)$
 α_{new} – parametr oznaczający proporcje nowych komórek utworzonych w pierwszym etapie do wszystkich nowo utworzonych komórek w chwili t_i
 $\alpha_{new}=(E^1(t_i)-E(t_i-1))/(E(t_i)-E(t_i-1))$
 $d(x,y)$ – miara odległości punktów (komórek) x i y
 d – średnica ziarna w komórkach
 D – wymiar przestrzeni automatu
 $E(t_i)$ – liczba komórek pustych w RVE, $E(t_i)= V(t_i)-M(t_i)$
 $E^1(t_i)$ – liczba komórek pustych po pierwszym etapie (krok odkształcenia)
 $E^2(t_i)$ – liczba komórek utworzonych w drugim etapie (krok lokalnego rozwoju uszkodzenia)
 f_{v0} – początkowa gęstość pustek (liczba komórek pustych w stosunku do powierzchni RVE w komórkach)
 f_{vmin} – minimalna gęstość pustek wymagana do zniszczenia
 F – reguła przejścia
 g – numer ziarna (stan komórki >0)
 g_{max} – numer ziarna o największej masie ułamkowej w danej komórce
 G – maksymalny numer ziarna
 H, γ – parametry w potęgowym prawie zmiany gęstości

l_{e-m}, l_{g-g} – długości granic pomiędzy pustką i masą oraz pomiędzy dwoma sąsiednimi ziarnami
 lv_{seed} – liczba punktów zarodkowych pustek
 $m(x, g, t_i)$ – masa ułamkowa komórki (stan przejściowy)
 m_{th} – wartość progowa masy ułamkowej
 $M(t_i)$ – całkowita masa komórek automatu (liczba komórek o stanie >0) w chwili t_i
 M_0 – całkowita masa komórek automatu w chwili początkowej
 $M^1(t_i)$ – liczba komórek niepustych (masowych) po pierwszym etapie
 n_{seed} – liczba punktów zarodkowych ziaren
 $N_1(t_i), N_2(t_i)$ – rozmiar RVE (w komórkach) w kierunku 1 i 2 w chwili t_i
 $N_0=N_1(t_0)=N_2(t_0)$ – rozmiar RVE w chwili początkowej
 $O(x)$ – otoczenie komórki x
 q_0 – parametr w wykładniczym prawie zmiany gęstości
 $s(x, t_i)$ – stan komórki x w chwili t_i
 s_{iv} – druga zmienna stanu dla automatu
 t_i – dyskretna chwila czasu
 t_0 – chwila początkowa, start reguł automatu modelujących procesu rozwoju uszkodzeń
 Δt – krok czasowy iteracji automatu
 $\Delta \tau$ – krok czasowy iteracji FEM (inkrementu)
 T_{def} – liczba iteracji między krokami odkształcenia
 $V(t_i)$ – objętość RVE w chwili t ($V(t_i)= N_1(t_i) \cdot N_2(t_i)$)
 w_{e-m} – waga granicy pustka-masa w algorytmie etapu dyfuzyjnego
 w_{g-g} – waga granicy między ziarnami w algorytmie etapu dyfuzyjnego
 Δx – rozmiar komórki automatu
 x, y – punkty (komórki) automatu
 x_1, \dots, x_3 – współrzędne komórki automatu
 Z, Y – oznaczenia ziaren (zbiór komórek o takim samym numerze ziarna)

Inne

δ_{ij} – delta Kroneckera
 e – podstawa logarytmu naturalnego
 e_i – wektor jednostkowy kierunku i
 π – stała pi
 $int()$ – funkcja zwracającą część całkowitą argumentu
 $\ln()$ – logarytm naturalny
 $\log()$ – logarytm o podstawie 10
 $odd()$ – zaokrąglenie do liczby nieparzystej

Skróty

- BEM – metoda elementów brzegowych (ang. *Boundary Element Method*)
CA – automaty komórkowe (ang. *Cellular Automata*)
CAFE – model wieloskalowy: automaty komórkowe – elementy skończone (ang. *Cellular Automata – Finite Element*)
CDM – kontynuowana mechanika uszkodzeń (ang. *Continuous Damage Mechanics*)
DLA – agregacja ograniczona dyfuzją (ang. *Diffusion-Limited Aggregation*)
FEM – metoda elementów skończonych (ang. *Finite Element Method*)
FHP – model gazu sieciowego (Frisch, Hasslacher, Pomeau)
FDM – metoda różnic skończonych (ang. *Finite Differential Method*)
GTN – zmodyfikowany model Gursona (Gurson, Tvergaard, Needleman)
HPP – model gazu sieciowego (Hardy, Pomeau, de Pazzis)
JMAK – model rekrytalizacji (Johnson, Mehl, Avrami, Kolmogorov)
LPS – model Gursona dla materiałów wiskoplastycznych (Leblond, Perrin, Suquet)
MCA – ruchome automaty komórkowe (ang. *Movable Cellular Automata*)
RVE – reprezentatywny element objętościowy (ang. *Representative Volume Element*)

1 Wstęp. Tematyka i cel pracy

W podwyższonych temperaturach materiały polikrystaliczne pod wpływem stałego obciążenia wykazują powoli rosnące, trwałe odkształcenie, które nazywane jest pełzaniem. Odkształcenie to po odpowiednio długim czasie doprowadza do zniszczenia struktury materiału i – w konsekwencji – do zniszczenia konstrukcji, która staje się niezdolna do przenoszenia obciążenia. Zniszczenie w warunkach pełzania charakteryzowane jest przez dwa podstawowe parametry: czas do zniszczenia i odkształcenie przy zniszczeniu. Zbudowanie modelu, który poprawnie przewidywałby wartości tych parametrów w danych warunkach, jest głównym celem badaczy zajmujących się modelowaniem tego zjawiska. Ponieważ są to wielkości mierzone w skali makro, pierwsze modele operowały głównie na zmiennych występujących w tej samej skali, głównie na naprężeniu i odkształceniu (zob. np. [94], [116]). Opis taki okazał się jednak niewystarczający do poprawnego zamodelowania badanego zjawiska. Dalsze badania wykazały, że zniszczenie w warunkach pełzania jest rezultatem różnych zjawisk zachodzących w strukturze materiału, które nie zawsze są odzwierciedlone w mierzalnych makroskopowo wielkościach. Aby uwzględnić ten efekt, wprowadzono dodatkową zmienną, zwaną parametrem uszkodzenia, która ma cechy zmiennych makroskopowych, ale nie jest w sposób makroskopowy mierzalna (zob. [86], [145]). Dalszy rozwój tej metodologii w ramach kontynualnej mechaniki uszkodzeń (CDM ang. *Continuous Damage Mechanics*) doprowadził do powstania wielu modeli (zwanych tu makroskopowymi) opisujących poprawnie zmiany odkształcenia oraz rozwój procesu zniszczenia (zob. np. [77]).

Modele makroskopowe, choć wystarczające z punktu widzenia inżynierii konstrukcji, opierają się głównie na odtworzeniu wyników doświadczeń. Zawierają szereg parametrów, które powinny być zidentyfikowane dla każdego materiału w każdych warunkach niezależnie. Nie wyjaśniają one w pełni przyczyn rozwoju uszkodzeń, a jedynie opisują jego skutki. Równoległe do nich rozwijały się więc modele mikroskopowe, które opisują zmiany odkształcenia i zjawisko zniszczenia w warunkach pełzania przy pomocy zmiennych i parametrów mierzonych w sposób mikroskopowy. Modele te powiązały rozwój uszkodzeń z istnieniem pustek w strukturze materiału, które powiększając się, doprowadzają do zniszczenia (zob. np. [16]). Ale nie wykluczono także innych mechanizmów, które mogą rozwijać się równoległe i w niektórych warunkach dominować. Rozwój modeli mikroskopowych doprowadził do wielu poprawnych rezultatów, potrafią one prawidłowo przewidzieć czas do zniszczenia jedynie na podstawie parametrów opisujących strukturę i właściwości materiału (zob. [150]).

W ostatnich latach podejmowane są prace, których celem jest powiązanie kontynualnej mechaniki uszkodzeń z modelami mikroskopowymi. Parametr uszkodzenia prawie od samego początku próbowano identyfikować jako stosunek powierzchni pustek do powierzchni całego przekroju. Wiele modeli mikromechanicznych traktuje różne parametry opisujące osłabienie materiału podobnie do zmiennych kontynualnych CDM. Barię do rozwoju tych metod okazał się problem skali. Równania CDM są przestrzennymi równaniami różniczkowymi; zmienne, na których operują, muszą więc być funkcjami ciągłymi. Aby rozwiązać ten problem wprowadzono pojęcie reprezentatywnego elementu objętościowego (RVE ang. *Representative Volume Element*), w obszarze którego dokonuje się homogenizacji zmiennych. Traci się jednak w ten sposób możliwość opisu zjawisk zachodzących w skali mniejszej od rozmiarów RVE, a w skali tej, jak się powszechnie uważa, rozwijają się mechanizmy decydujące o rozwoju uszkodzeń. Aby zamodelować te mechanizmy

potrzebne są modele operujące w skali mikro, a rezultaty ich działania muszą być przeniesione na poziom zmiennych makroskopowych poprzez techniki modelowania wieloskalowego (ang. *multiscale modelling*, zob. np. [139], [104]).

W pracy do zamodelowania zjawisk rozwoju uszkodzeń w skali mikro zaproponowano technikę automatów komórkowych (CA ang. *Cellular Automata*), które od czasów swojego twórcy – von Neumanna (zob. [174]) – znajdują coraz szersze zastosowanie, także w mechanice materiałów. Automaty komórkowe posiadają bardzo prostą budowę składającą się z wielu jednakowych komórek, które synchronicznie zmieniają swój stan, uwzględniając w tym przejściu stan swoich sąsiadów. Pozwala to na opisanie wielu złożonych procesów przy pomocy stosunkowo prostych reguł (zob. [179]). Zmiany struktury materiału opisane w pracy przy pomocy automatu komórkowego służą do wyznaczenia parametru uszkodzenia, używanego w modelu w skali makro. Model w skali makro został zbudowany przy pomocy metody elementów skończonych (FEM ang. *Finite Element Method*) i oparty jest na równaniach CDM. Odształcenia wyznaczone w nim służą do przekazania obciążenia na poziom modelu CA. Został w ten sposób zbudowany model wieloskalowy zgodny z metodologią CAFE (zob. [13]).

Celem pracy jest wykazanie, że metodologia użyta do zbudowania modelu wieloskalowego przy wykorzystaniu techniki automatów komórkowych do zamodelowania mikroskopowych mechanizmów rozwoju uszkodzeń, pozwala na poprawne opisanie makroskopowych efektów zniszczenia dla materiałów polikrystalicznych pracujących w warunkach pełzania dla przypadku jednoosiowego rozciągania.

W pracy dokonano przeglądu istniejących modeli makroskopowych i mikroskopowych. Następnie opisano dokładnie istniejące modele zbudowane przy pomocy CA służące badaniu rozwoju uszkodzeń i będące inspiracją do budowy własnego modelu. Opis tego modelu został podzielony na część służącą modelowaniu struktury materiału polikrystalicznego i właściwą część modelującą rozwój uszkodzeń. Następnie dokonano wszechstronnej analizy zachowania się modelu przy wymuszeniu stałą prędkością odształcenia w jednym kierunku. Analiza ta pozwoliła na ustalenie parametrów automatu służącego do zbudowania modelu wieloskalowego, którego działanie zostało porównane z wynikami makroskopowych doświadczeń jednoosiowego rozciągania.

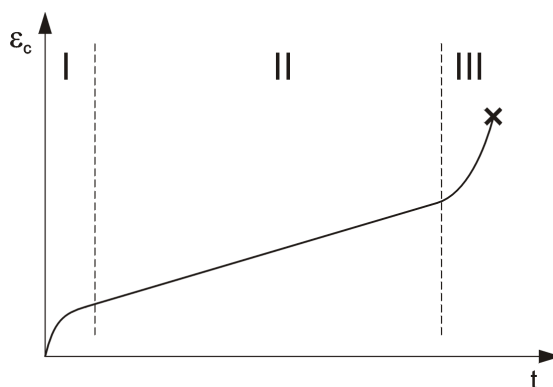
2 Opis rozwoju uszkodzeń w warunkach pełzania

2.1 Poziom makroskopowy

2.1.1 Obserwacje doświadczalne odkształceń i czasu do zniszczenia

2.1.1.1 Krzywa pełzania

Pełzanie jest procesem zmiany obciążenia przy stałym obciążeniu. Dla metali i ich stopów proces ten zachodzi w temperaturze pomiędzy 0.3 a 0.7 temperatury topnienia. Przykładowy wykres zmiany obciążenia w próbie jednoosiowego rozciągania przy stałym naprężeniu i w stałej temperaturze został przedstawiony na rys 2.1.



Rys. 2.1. Typowy przebieg krzywej pełzania z zaznaczonym pierwszym (I), drugim, (II) i trzecim (III) okresem pełzania.

Wykres ten można podzielić na trzy okresy. Pierwszy, nazywany też pełzaniem nieustalonym (przejściowym – ang. *transient creep*), charakteryzuje się nieliniową zmianą odkształcenia w czasie. Wartość odkształcenia rośnie, poczynając od wartości odpowiedzi sprężystej, a prędkość tej zmiany maleje. Wartość odkształcenia pierwszego okresu pełzania jest zwykle niewielka i często jest pomijana.

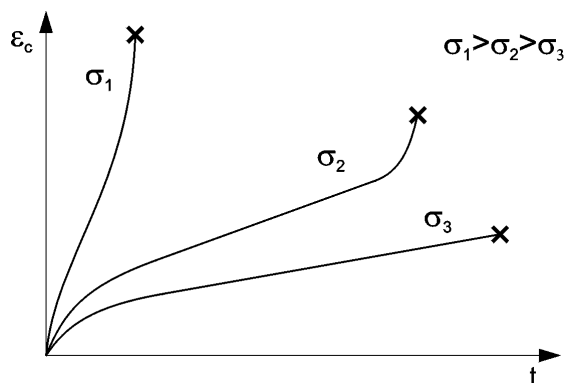
Z chwilą ustalenia prędkości odkształcenia następuje drugi okres pełzania, nazywany pełzaniem ustalonym (ang. *steady-state creep*). Ponieważ prędkość odkształcenia nie zmienia się, odkształcenie zmienia się liniowo z czasem. Okres ten zwykle trwa najdłużej i w związku z tym może spowodować bardzo duże odkształcenia. Prędkość odkształcenia pełzania ustalonego jest ważnym parametrem procesu pełzania.

Trzeci okres pełzania charakteryzuje się wzrastającą prędkością odkształcenia i kończy się zniszczeniem próbki. Okres ten jest zwykle krótki w porównaniu z drugim, ale odkształcenia mogą wzrosnąć znacząco, nazywa się go też pełzaniem przyspieszonym.

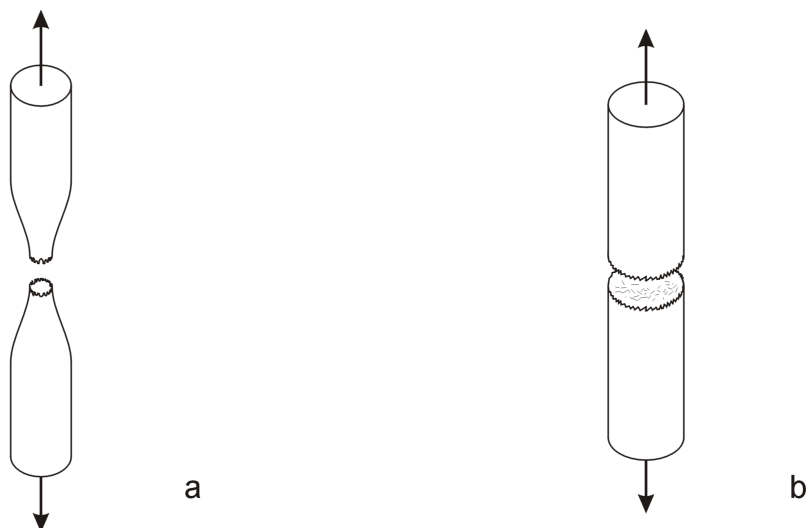
W nie każdym przypadku występują zawsze wszystkie trzy okresy. W niektórych warunkach pełzanie może zakończyć się na pierwszym etapie (pełzanie niskotemperaturowe zob. [181]). W przypadku tym prędkość pełzania maleje do zera i odkształcenie ustala się. Przy wysokim poziomie obciążenia może nie wystąpić drugi okres pełzania i pełzanie pierwszego okresu przechodzi od razu w fazę pełzania przyspieszonego. W wypadku, kiedy nie występuje ustalona prędkość odkształcenia za charakterystyczny parametr próby przyjmuje się prędkość minimalną. Najbardziej niebezpieczny jest trzeci przypadek, kiedy nie występuje trzeci okres pełzania. Do zniszczenia dochodzi wtedy bez żadnego ostrzeżenia w trakcie pełzania ustalonego.

2.1.1.2 Charakterystyka zniszczenia

Przebieg krzywej pełzania w istotny sposób zależy od poziomu przyłożonego naprężenia. Dla dużych naprężeń czas do zniszczenia jest mały, a odkształcenie przy zniszczeniu jest duże (krzywa dla σ_1 na rys. 2.2). Zniszczenie ma charakter ciągliwy, charakteryzuje się zwykle pojawieniem się szyjki i następuje przy wyraźnym przewężeniu (rys. 2.3a).



Rys. 2.2. Przebieg krzywej pełzania dla trzech różnych poziomów obciążenia.



Rys. 2.3. Schematyczny obraz zniszczenia ciągliwego (a) i kruchego (b) przy pełzaniu.

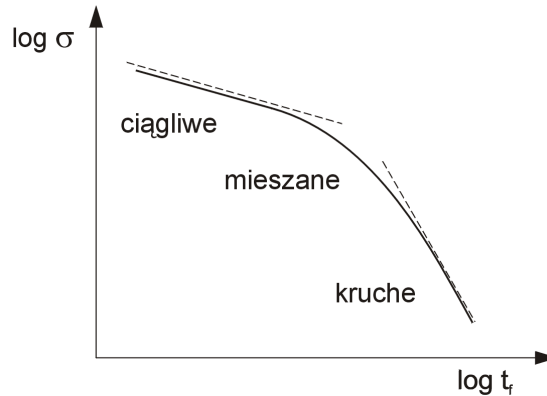
Dla małych naprężeń czas do zniszczenia jest duży, natomiast prędkość zmiany odkształcenia jest mała (zob. krzywa dla σ_3 na rys. 2.2). Charakter zniszczenia jest kruchy, odkształcenie przy zniszczeniu jest małe i może pojawić się nagle bez żadnych wyraźnych oznak zewnętrznych (rys. 2.3b).

Zależność czasu zniszczenia od wartości przyłożonego naprężenia przedstawia się zwykle na wykresie logarytmicznym (rys. 2.4). Wyniki ograniczone są przez dwie linie proste. Jedna, dla dużych naprężeń odpowiada zniszczeniu ciągliwemu, a druga, dla małych, zniszczeniu kruchemu. Prosta zniszczenia ciągliwego ma mniejsze nachylenie niż zniszczenia kruchego. Przejściu od jednego rodzaju zniszczenia do drugiego dla pośrednich wartości naprężenia odpowiada zniszczenie o charakterze mieszanym.

2.1.1.3 Stała siła a stałe naprężenie

Badania pełzania starano się przeprowadzać przy stałym naprężeniu. Jednakże różne mechanizmy (zob. np. [89]) zapewniające stałość naprężenia wymagają uprzedniej znajomości zależności pomiędzy wydłużeniem a zmianą przekroju, co

szczególnie w przypadku pojawiania się szybkowania nie zawsze jest możliwe. Dlatego ostatnio częściej przeprowadza się próby przy stałej sile. Należy jednak pamiętać, że o ile dla zniszczenia kruchej czas do zniszczenia przy stałej sile nieznacznie różni się od czasu do zniszczenia przy stałym naprężeniu (ponieważ zmiany przekroju są małe), to dla zniszczenia ciągliwego różnice mogą być znaczne.



Rys. 2.4. Zależność czasu zniszczenia od wartości przyłożonego naprężenia przedstawiona na wykresie logarymicznym.

2.1.2 Reguły empiryczne

2.1.2.1 Równanie Monkmana-Granta

Ważne wnioski można wyciągnąć z obserwacji doświadczalnej pomiędzy prędkością odkształcenia pełzania ustalonego a czasem do zniszczenia. Relacja między tymi wielkościami została podana w 1956 przez Monkmana i Granta [116]:

$$\dot{\epsilon}_s^\beta t_f = C^*, \quad (2.1)$$

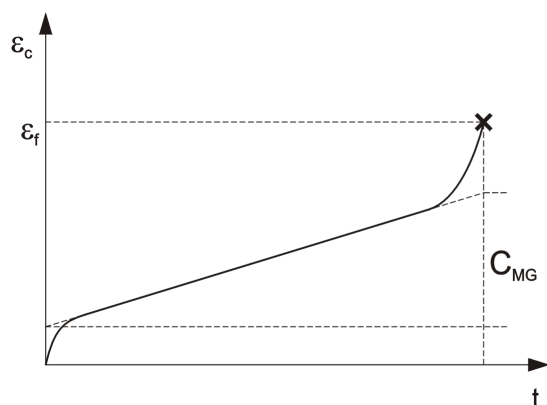
gdzie β i C^* są stałymi materiałowymi, t_f oznacza czas do zniszczenia, $\dot{\epsilon}_s$ prędkość pełzania ustalonego. Relacja ta została potwierdzona wieloma doświadczeniami (np. [48]). Najczęściej obserwowana wartość wykładnika β jest bliska 1. Wartość taka świadczy o odkształceniowym mechanizmie zniszczenia. Relacja Monkmana-Granta przyjmuje wtedy postać:

$$\dot{\epsilon}_s t_f = C_{MG}. \quad (2.2)$$

Stała występująca w tym równaniu nazywana jest stałą (lub parametrem) Monkmana-Granta C_{MG} . Ma ona wymiar odkształcenia i można ją określić jako wartość odkształcenia drugiego etapu pełzania przy zniszczeniu, przy pominięciu pierwszego i trzeciego (zob. rys. 2.5). Wielkość ta wykazuje dużo mniejszy rozrzut niż wartość całkowitego odkształcenia przy zniszczeniu. Stosunek odkształcenia przy zniszczeniu ϵ_f do stałej Monkmana-Granta jest nazywany parametrem tolerancji uszkodzenia λ_{tol} :

$$\lambda_{tol} = \frac{\epsilon_f}{C_{MG}}. \quad (2.3)$$

Parametr ten opisuje tolerancje materiału na koncentracje odkształceń. Przyjmuje on wartości od 1 do 20 (według [5]). Mała wartość świadczy o łatwej inicjacji zniszczenia (np. szczeliny) w punktach koncentracji odkształceń. Duża wartość oznacza dużą tolerancję dla lokalnych koncentracji odkształcenia.



Rys. 2.5. Definicja stałej Monkmana-Granta.

Istnieją też sytuacje, gdy wartość wykładnika β jest mniejsza od jedności. Według Evansa [48] przyjmuje on wartości pomiędzy 0.7 a 1. Świadczy to, że o czasie do zniszczenia decyduje degradacja wewnętrznej struktury materiału niezwiązana bezpośrednio z odkształceniem. Stałej Monkmana-Granta (poprawniej nazywanej wówczas parametrem Monkmana-Granta) C_{MG} używa się też w tych przypadkach ($\beta < 1$), a równanie (2.2) należy wtedy traktować jako jej definicję, a nie zależność doświadczalną.

Wartości stałych materiałowych w równaniu Monkmana-Granta nie zawsze są stałymi w całym zakresie temperatur i prędkości odkształcenia. Podobnie jak na wykresie naprężeniowym można wskazać obszar zniszczenia ciągłego, kruchego i mieszanego.

Relacja Monkmana-Granta jest ważną weryfikacją modeli mikroskopowych.

2.1.2.2 Parametryczne metody szacowania czasu do zniszczenia

Jednym z najważniejszych zadań inżynierskich w projektowaniu konstrukcji pracujących w warunkach pełzania jest oszacowanie czasu do zniszczenia. Określenie czasu do zniszczenia metodami doświadczalnymi jest bardzo czasochłonne, gdyż typowy poziom obciążenia i temperatura, w jakich pracują konstrukcje inżynierskie wymagałyby testów trwających wiele lat. Dlatego konieczny stał się rozwój metod ekstrapolacyjnych, które pozwoliłyby oszacować czas do zniszczenia konstrukcji inżynierskich na podstawie badań wykonanych przy większym poziomie naprężenia lub przy wyższych temperaturach.

Najbardziej popularnymi metodami ekstrapolacji czasu do zniszczenia są metody parametryczne. Polegają one na znalezieniu funkcjonału tworzącego jednoznacznie relację pomiędzy naprężeniem, czasem do zniszczenia i temperaturą.

Larson i Miller [94] zaproponowali parametr wiążący czas do zniszczenia i temperaturę. Wykorzystując relację Monkmana-Granta (dla $\beta=1$) i temperaturową zależność prędkości pełzania (równanie Arrheniusa):

$$\dot{\epsilon}_c = A e^{-\frac{Q}{RT}}, \quad (2.4)$$

gdzie A jest stałą niezależną od temperatury, Q energią aktywacji, $\dot{\epsilon}_c$ prędkością odkształcenia pełzania, T temperaturą, R stałą gazową, wprowadzili parametr:

$$P_{LM}(\sigma) = T(20 + \log t_f), \quad (2.5)$$

zakładając, że energia aktywacji Q zależy od przyłożonego naprężenia. Rodzina prostych dla różnych naprężeń na wykresie $1/T$ w zależności od $\log(t_f)$ przecina się w jednym punkcie dla $1/T=0$ i $\log(t_f)=-20$.

Bliższy danym doświadczalnym jest parametr Dorna (nazywany też Orr-Sherby'ego-Dorn'a 1954 [131]), który wyszedł z tych samych równań, ale założył, że funkcją naprężenia jest stała A w równaniu Arrheniusa (2.4):

$$P_D(\sigma) = t_f e^{-\frac{Q}{RT}}. \quad (2.6)$$

Wartość stałej Q/R można wyznaczyć z wykresu $1/T$ w zależności od $\log(t_f)$, gdzie tym razem wartości dla różnych naprężeń układają się jako linie równoległe o nachyleniu

$$\frac{R}{Q \cdot \log e}.$$

Istnieje wiele innych parametrów (np. Mansona-Haferda, Zenera-Hollomona), ale ich wartość jako narzędzia ekstrapolacji dla dużych czasów do zniszczenia jest ograniczona. Dla każdego z nich można znaleźć przykłady doświadczalne, których te parametry nie spełniają. Korzystając z nich, przede wszystkim należy odpowiedzieć na pytanie, czy mechanizm odpowiedzialny za zniszczenie jest taki, sam jak dla danych użytych do ekstrapolacji.

2.1.2.3 Reguła sumacji uszkodzeń

Innym ważnym zagadnieniem jest problem określenia czasu do zniszczenia dla zmiennego obciążenia. Niewielkie różnice naprężenia w próbie jednoosiowego rozciągania skutkują dużo większymi zmianami czasu do zniszczenia. Metodę, która pozwoliłaby obliczyć czas do zniszczenia dla materiału pracującego w różnych warunkach, zaproponował Robinson [151]. Oznaczając przez t_f czas do zniszczenia przy naprężeniu σ_i , uszkodzenie materiału po czasie t_i działania naprężenia σ_i możemy wyliczyć jako $\frac{t_i}{t_{fi}}$.

Zakładając, że zniszczenie przy jednym poziomie naprężenia nie jest zależne od zniszczenia przy innym poziomie, całkowite uszkodzenie możemy obliczyć sumując uszkodzenia przy poszczególnych poziomach naprężenia. Materiał ulegnie zniszczeniu, gdy tak obliczony parametr uszkodzenia osiągnie wartość jednostkową:

$$\sum_i \frac{t_i}{t_{fi}} = 1. \quad (2.7)$$

Ta bardzo prosta reguła, nazywana regułą sumacji uszkodzeń (ang. *life fraction rule*) uzyskała bardzo dobre potwierdzenie doświadczalne. Błędy w wyznaczaniu czasu do zniszczenia nie są większe od 20% (zob. [136]).

W podobny sposób, ale w oparciu o odkształcenie przy zniszczeniu sformułowany jest postulat wyczerpania odkształcenia (ang. *ductility exhaustion*):

$$\sum_i \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_{fi}} = 1, \quad (2.8)$$

gdzie ε_i jest przyrostem odkształcenia przy obciążeniu σ_i , a ε_{fi} odkształceniem przy zniszczeniu przy danym poziomie obciążenia. Podejście to jest zalecane przez Evansa [48] i brytyjską normę R5 [3].

2.1.3 Opis fenomenologiczny

2.1.3.1 Opis deformacji pełzania w jednoosiowym stanie naprężenia

Do opisu krzywej pełzania (rys. 2.1) w próbie jednoosiowego rozciągania przy stałym naprężeniu i temperaturze używa się funkcji trzech głównych parametrów: czasu t , naprężenia σ i temperatury T :

$$\varepsilon_c = f(t, \sigma, T), \quad (2.9)$$

gdzie ε_c oznacza odkształcenie pełzania.

Powszechnie przyjmuje się założenie o rozdzieleniu wpływu tych parametrów. Funkcję odkształcenia pełzania możemy wtedy zapisać jako iloczyn:

$$\varepsilon_c = f_1(t)f_2(\sigma)f_3(T). \quad (2.10)$$

Odzwierciedlenie kształtu krzywej pełzania (przy stałym naprężeniu i stałej temperaturze) zależy od funkcji czasu $f_1(t)$. Funkcję, którą można dopasować do trzech okresów pełzania podał w 1910 Andrade [4]:

$$\varepsilon_c = (1 + bt^{1/3})e^{kt} - 1, \quad (2.11)$$

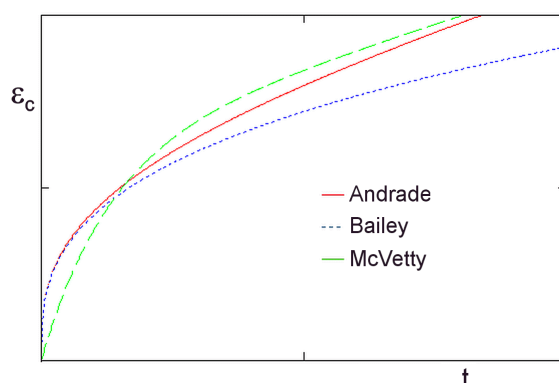
gdzie b , k to stałe uzyskane przez najlepsze dopasowanie do krzywej pełzania. Do opisu pierwszego okresu pełzania stosuje się równanie Bailey'a [8]:

$$\varepsilon_c = bt^\mu, \quad (2.12)$$

gdzie $1/3 \leq \mu \leq 1/2$. Dla małych t i $k \rightarrow 0$, równanie Andrade'go (2.11) sprowadza się do równania Bailey'a ($\mu=1/3$). Do opisu pierwszego i drugiego etapu pełzania najlepsze dopasowanie można uzyskać stosując równanie McVetty'ego [112]:

$$\varepsilon_c = \varepsilon_T(1 - e^{-qt}) + \dot{\varepsilon}_s t, \quad (2.13)$$

gdzie ε_T , q są stałymi wyznaczonymi z pierwszego okresu pełzania, a $\dot{\varepsilon}_s$ to prędkość pełzania ustalonego. Zaletą tego równania w porównaniu do poprzednich jest, że dla $t \rightarrow 0$ otrzymuje się skończoną prędkość przyrostu odkształcenia. Porównanie krzywych otrzymanych przy pomocy równań (2.11-2.13) przedstawiono na rys. 2.6.



Rys. 2.6. Porównanie krzywych dla pierwszego okresu pełzania otrzymanych przy pomocy równań: Andradego (2.11), Bailey'a (2.12) i McVetty'ego (2.13).

Największy wpływ na całkowite odkształcenie ma prędkość pełzania ustalonego, dlatego istotne znaczenie ma ustalenie zależności tej prędkości od naprężenia.

Najbardziej popularne jest równanie Nortona [128] zaproponowane w 1929, które wyraża tę zależność jako funkcję potęgową:

$$\dot{\epsilon}_s = B\sigma^n, \quad (2.14)$$

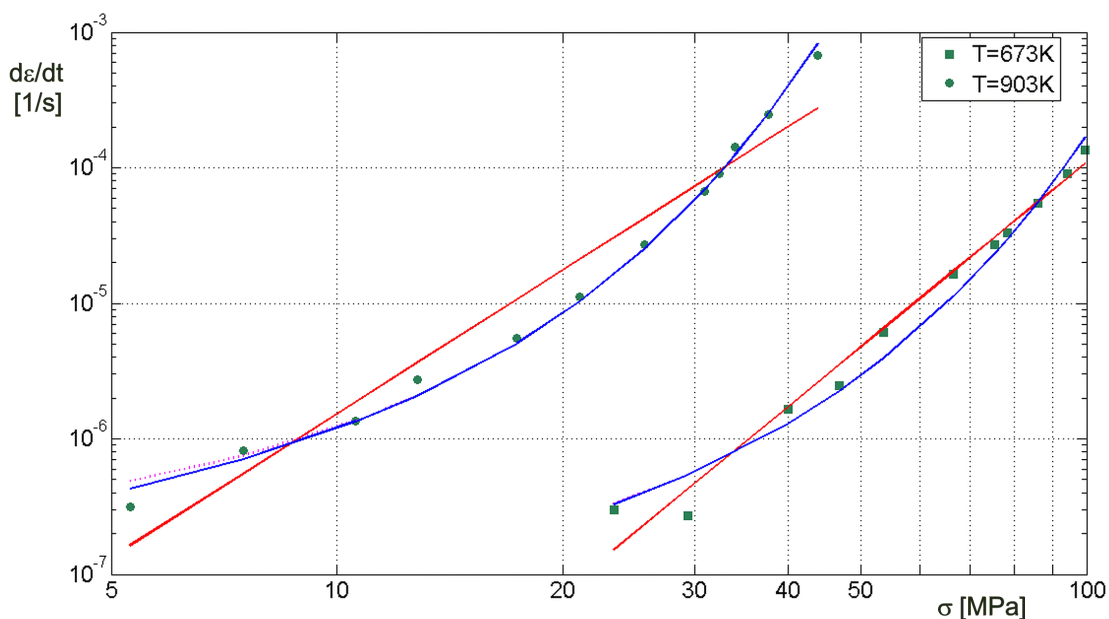
gdzie B i n to stałe materiałowe (wykładnik n – jest nazywany indeksem pełzania). Indeks pełzania jest współczynnikiem kierunkowym prostej na wykresie logarymicznym prędkości pełzania ustalonego w zależności od naprężenia. Typowe wartości indeksu pełzania zawierają się pomiędzy 3 a 7. Dla dużych naprężeń zależność prędkości pełzania lepiej przybliża funkcja wykładnicza zaproponowana pierwszy raz w 1908 przez Ludwika [101]:

$$\dot{\epsilon}_s = B_1 \exp(\alpha\sigma), \quad (2.15)$$

stałą materiałową α odczytuje się z wykresu, gdzie prędkość pełzania jest w skali logarymicznej a naprężenie w skali liniowej. Aby poprawić dopasowanie dla mniejszych naprężeń stosuje się funkcje sinusa hiperbolicznego zaproponowaną w 1938 przez Nadai [121], a nazywaną też równaniem McVetty'ego [113]:

$$\dot{\epsilon}_s = B_2 \sinh(\alpha\sigma). \quad (2.16)$$

Porównanie trzech ostatnich równań jest przedstawione na wykresie prędkości pełzania ustalonego w zależności od naprężenia w skali dwu-logarymicznej (rys. 2.7).



Rys. 2.7. Porównanie dopasowania prędkości pełzania ustalonego dla wyników uzyskanych w pracy [49] przy pomocy równań (2.14) – linia czerwona, (2.15) – linia niebieska i (2.16) – linia fioletowa przerywana.

2.1.3.2 Opis zniszczenia w jednoosiowym stanie naprężenia

Zniszczenie ciągłe

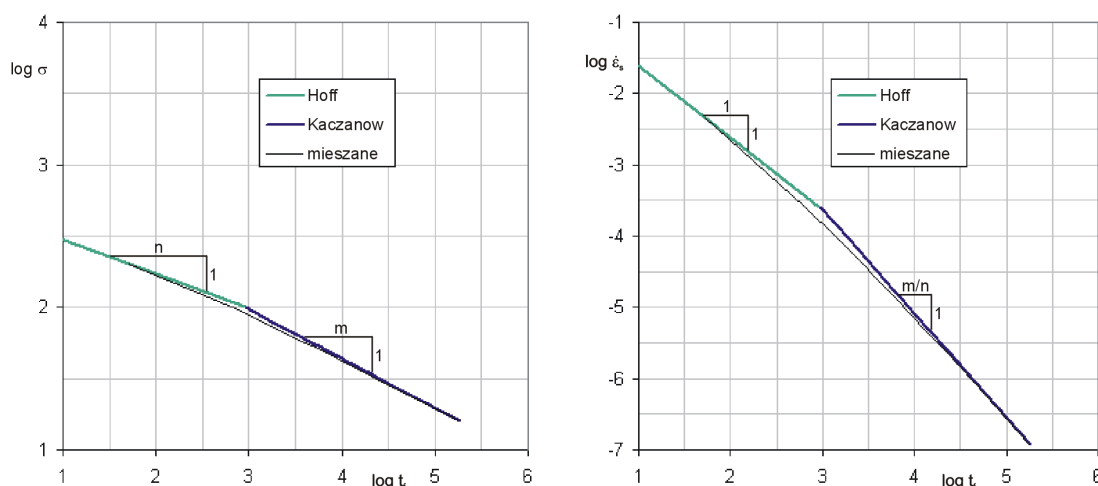
Zniszczenie ciągłe w warunkach pełzania charakteryzuje się dużym odkształceniem – powyżej kilkunastu procent. Towarzyszy mu także duże przewężenie, najczęściej w postaci szyjki. Dlatego określa się je też zniszczeniem geometrycznym lub zniszczeniem poprzez utratę przekroju nośnego.

Już w 1953 Hoff [80] zauważył, że potęgowe prawo pełzania przy obciążeniu stałą siłą prowadzi do zaniku przekroju zewnętrznego próbki w skończonym czasie. Prawo to, przy założeniu nieściśliwości powoduje, że im mniejszy przekrój, to prędkość odkształcenia jest większa. Dlatego małe zmiany przekroju mogą doprowadzić do niestabilności, co objawia się utworzeniem się szyjki i w efekcie zniszczeniem materiału w tzw. czasie Hoffa. Z uwagi na tę niestabilność niemożliwe jest w zasadzie przeprowadzenie próby przy obciążeniu stałym naprężeniem w całym czasie trwania doświadczenia. Stabilnie zachowuje się tylko materiał, dla którego indeks pełzania jest bliski 1. Materiały takie, które nie wykazują szyjkowania i mogą odkształcić się do bardzo dużych wartości nazywa się nadplastycznymi (zob. [48]).

Czas, w którym przekrój zanika do zera przy obciążeniu stałą siłą, można łatwo wyliczyć, zakładając nieściśliwość materiału. Przy założeniu równomiernego odkształcenia całej próbki, z warunku nieściśliwości wynika, że wydłużenie dąży do nieskończoności. W rzeczywistości, jak wspomniano wyżej, odkształcenie nigdy nie jest jednorodne, zatem nieskończone wydłużenie może być, co najwyżej, osiągnięte w jednym przekroju. Czas ten nazywa się czasem zniszczenia Hoffa lub czasem zniszczenia ciągłego i wynosi on:

$$t_f = \frac{1}{n\dot{\epsilon}_0} = \frac{1}{nB\sigma_0^n}, \quad (2.17)$$

gdzie n , B stałe z prawa pełzania Nortona, σ_0 , $\dot{\epsilon}_0$ – początkowe naprężenie (nominalne) i prędkość pełzania ustalonego. Równaniu temu odpowiada prosta o nachyleniu $1/n$ na wykresie logarytmicznym czasu do zniszczenia w zależności od naprężenia (rys. 2.8), a na wykresie logarytmicznym czasu do zniszczenia w zależności od prędkości pełzania prosta o nachyleniu 1.



Rys. 2.8. Model zniszczenia ciągłego Hoffa (2.17), kruchego Kaczanowa (2.22) i mieszanego (2.27) na wykresach logarytmicznych naprężenia i prędkości pełzania ustalonego.

Dla małych wartości odkształcenia niestabilność jest niewielka, dopiero przy większych wartościach zaczyna być ona znacząca i doprowadza do szyjkowania. Szacunkowe odkształcenie na początku szyjkowania podali Burke i Nix [21]:

$$\epsilon_f = \frac{2}{n-1}. \quad (2.18)$$

Odształcenie to można uznać za odształcenie przy zniszczeniu, szczególnie dla cienkich elementów. Stała Monkmana-Granta dla przypadku zniszczenia opisanego przez Hoffa wynosi:

$$C_{MG} = \frac{1}{n}, \quad (2.19)$$

a parametr tolerancji uszkodzenia można oszacować jako

$$\lambda_{tol} = \frac{2n}{n-1} \approx 2. \quad (2.20)$$

Często stała Monkmana-Granta wyznaczona doświadczalnie jest mniejsza od $1/n$, którą uznaje się za wartość maksymalną. Oznacza to, że mechanizm zniszczenia jest związany z odształceniem, jednak uszkodzenia wewnętrzne doprowadzają do zniszczenia szybciej, niż gdyby miało się to dokonać wyłącznie przez redukcję przekroju zewnętrznego.

Zniszczenie kruche

Zniszczenie kruche charakteryzowane jest małym odształceniem przy zniszczeniu, dochodzi ono do kilku procent. W warunkach pełzania odbywa się to w długim czasie przy małym poziomie naprężeń i tym samym przy małych prędkościach odształcenia. Do zniszczenia kruchego dochodzi przede wszystkim na skutek rozwoju uszkodzeń wewnętrznych.

Opis rozwoju uszkodzeń wewnętrznych zaproponował w 1958 Kaczanow [86], który wprowadził parametr ciągłości materiału ψ . Dla materiału bez uszkodzeń przyjmuje on wartość 1, a dla całkowicie zniszczonego wartość 0. Do opisu uszkodzenia wewnętrznego częściej używa się parametru uszkodzenia $\omega=1-\psi$, zaproponowanego przez Rabotnowa [145]. Wyrażone przy jego pomocy równanie rozwoju uszkodzeń przyjmuje postać:

$$\dot{\omega} = C \left(\frac{\sigma}{1-\omega} \right)^m, \quad (2.21)$$

gdzie C , m to stałe materiałowe. Całkując to równanie przy stałym naprężeniu dla parametru ω zmieniającego się od 0 do 1, można wyliczyć czas zniszczenia kruchego:

$$t_f = \frac{1}{(m+1)C\sigma^m}. \quad (2.22)$$

Równanie to wyznacza prostą o nachyleniu $1/m$ na wykresie logarytmicznym czasu do zniszczenia w zależności od naprężenia (rys. 2.8). Prosta ta przecina się z prostą zniszczenia ciągłego dla naprężenia:

$$\sigma_{H-K} = \left(\frac{(m+1)C}{nB} \right)^{\frac{1}{n-m}}. \quad (2.23)$$

Jeżeli zamiast naprężenia użyje się we wzorze na czas zniszczenia prędkości pełzania ustalonego (2.14), otrzymuje się następujący wzór:

$$t_f = \frac{B^{m/n}}{(m+1)C\dot{\epsilon}_s^{m/n}}. \quad (2.24)$$

Wynika stąd, że równanie Kaczanowa spełnia równanie Monkmana-Granta (2.1) dla $\beta=m/n$ i stałej $C^* = \frac{B^{m/n}}{(m+1)C}$.

Równanie Kaczanowa spełnia też regułę sumacji uszkodzeń Robinsona. Całkując równanie (2.21) przy zmiennym naprężeniu, otrzymuje się

$$\int_0^{t_f} (m+1)C\sigma^m dt = \int_0^{t_f} \frac{dt}{t_f(\sigma)} = 1, \quad (2.25)$$

dla parametru zniszczenia od 0 do 1, przy oznaczeniu $t_f(\sigma) = \frac{1}{(m+1)C\sigma^m}$. Równanie (2.25) jest całkową formą równania (2.7).

Wprowadzając czas zniszczenia kruchego do równania Nortona, można wyznaczyć odkształcenie przy zniszczeniu:

$$\epsilon_f = \frac{B}{(m+1)C} \sigma^{n-m}. \quad (2.26)$$

Tak określone odkształcenie jest też równe parametrowi Monkmana-Granta, czyli parametr tolerancji uszkodzenia jest równy 1. Jest to zgodne z danymi doświadczalnymi dla zniszczenia kruchego.

Zniszczenie mieszane

Obliczając czas do zniszczenia zgodnie z równaniem Kaczanowa, ale przy zmniejszającym się przekroju i zwiększającym naprężeniu rzeczywistym, tak jak w teorii Hoffa można wyznaczyć czas do zniszczenia dla mechanizmu mieszanego:

$$t_f = \frac{1}{nB} \left(\frac{1}{\sigma^n} - \left(\frac{1}{\sigma^{n-m}} - \frac{(n-m)B}{(m+1)C} \right)^{\frac{n}{n-m}} \right). \quad (2.27)$$

Równanie to wyznacza krzywą zaznaczoną na wykresie na rys. 2.8. Dla małych naprężeń krzywa ta dąży asymptotycznie do prostej zniszczenia kruchego, a dla większych naprężeń jest ograniczona przez punkt przecięcia się z prostą zniszczenia kruchego. Wartość naprężenia w tym punkcie wyznacza granicę stosowalności teorii zniszczenia mieszanego Kaczanowa-Hoffa, która wynosi:

$$\hat{\sigma} = \left(\frac{(m+1)C}{(n-m)B} \right)^{\frac{1}{n-m}}. \quad (2.28)$$

2.1.4 Kontynuualna mechanika uszkodzeń

2.1.4.1 Równania konstytutywne

Równania sprzężone w stanie jednoosiowym

Parametr uszkodzenia można interpretować jako współczynnik osłabienia przekroju nośnego na skutek rozwoju uszkodzeń (zob. [28]). Naprężenie działające na nieuszkodzoną część przekroju nazywane naprężeniem efektywnym $\tilde{\sigma}$ można wyrazić wówczas jako:

$$\tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{1 - \omega}. \quad (2.29)$$

Podejście polegające na zastąpieniu naprężenia w równaniach mechaniki kontynuualnej naprężeniem efektywnym zaowocowało rozwojem kontynuualnej mechaniki uszkodzeń (ang. CDM – *Continuous Damage Mechanics* – termin użyty po raz pierwszy w roku 1977 przez Jansona i Hultha [84]). Parametr uszkodzenia stał się nową zmienną stanu z własnym prawem ewolucji.

Równania konstytutywne mechaniki uszkodzeń można zapisać w postaci:

$$\dot{\varepsilon} = f(\sigma, \varepsilon, \omega) \quad (2.30)$$

$$\dot{\omega} = g(\sigma, \varepsilon, \omega). \quad (2.31)$$

Jest to szczególny przypadek równań konstytutywnych dla ciała jednoosiowego, gdzie uszkodzenie jest przykładem tzw. parametru strukturalnego. Dla pełzania koncepcję parametrów strukturalnych przedstawił Rabotnow [146]:

$$\dot{\varepsilon} = f(\sigma, T, s_i) \quad (2.32)$$

$$\dot{s}_i = g(\sigma, T, s_j), \quad (2.33)$$

gdzie T to temperatura, a s_i są parametrami strukturalnymi; znalazła ona swoje rozwinięcia w pracach m.in. Perzyny [137].

Dla jednoosiowego rozciągania równanie rozwoju uszkodzeń (2.21) tworzy komplet z równaniem rozwoju odkształceń, w którym naprężenie zostało zastąpione przez naprężenie efektywne:

$$\dot{\varepsilon}_c = B \left(\frac{\sigma}{1 - \omega} \right)^n. \quad (2.34)$$

Równanie to opisuje drugi i trzeci okres pełzania. Jeżeli połączymy to równanie z opisem pierwszego okresu, można otrzymać równanie opisujące całą krzywą pełzania. Na przykład, wykorzystując teorię umocnienia odkształceniowego, można przedstawić prawo wzrostu odkształcenia pełzania w postaci równania (por. [27]):

$$\dot{\varepsilon}_c = B_2 \left(\frac{\sigma}{1 - \omega} \right)^n \varepsilon_c^{-v}, \quad (2.35)$$

gdzie v jest stałą opisującą umocnienie materiału w pierwszym okresie pełzania.

Inną często spotykaną postacią równań konstytutywnych dla jednoosiowego rozciągania jest układ wykorzystujący do opisu pierwszego okresu pełzania zależność czasową Bailey'a (2.12) zaproponowany przez Othmana i Hayhursta [134]:

$$\dot{\epsilon}_c = B_3 \left(\frac{\sigma}{1-\omega} \right)^n t^\mu, \quad (2.36)$$

$$\dot{\omega} = \frac{C'}{(1+\phi)(1-\omega)^\phi} \sigma^\chi t^\mu. \quad (2.37)$$

W ostatnim równaniu parametr χ odpowiada za czas do zniszczenia, a parametr ϕ za kształt krzywej pełzania.

Dla materiałów, w których za zniszczenie i odkształcenia trzeciego okresu pełzania odpowiadają różne mechanizmy, wprowadza się dwie zmienne stanu opisujące rozwój uszkodzenia (zob. [45]).

Stany wieloosiowe

W stanach wieloosiowych skalarne zmienne stanu stają się wielkościami tensorowymi. Zakładając jednak, że uszkodzenie ma charakter izotropowy, można opisać je przy pomocy zmiennej skalarnej. Prędkość odkształcenia pełzania zależy głównie od intensywności naprężeń:

$$\sigma_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{3}{2} s_{ij} s_{ij}}, \quad (2.38)$$

gdzie s_{ij} jest dewiatorem naprężenia $s_{ii} = \sigma_{ii} - \sigma_m \delta_{ij}$, σ_m jest średnim naprężeniem głównym (równanie jest zapisane przy pomocy konwencji sumacyjnej Einsteina).

Ze stowarzyszonego prawa płynięcia (warunek plastyczności jest wyrażony tą samą zależnością, co potencjał płynięcia) wynika, że składowe tensora prędkości odkształcenia są proporcjonalne do składowych dewiatora naprężenia. Daje to prawo rozwoju odkształceń pełzania w postaci:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^c = \frac{3}{2} B \sigma_{\text{eff}}^{n-1} s_{ij}, \quad (2.39)$$

a uwzględniając sprzężenie uszkodzeń:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^c = \frac{3}{2} B \frac{\sigma_{\text{eff}}^{n-1}}{(1-\omega)^n} s_{ij}. \quad (2.40)$$

Równanie w takiej postaci zapewnia spełnienie warunku nieściśliwości przez odkształcenia pełzania, który jest praktycznie spełniony dla pełzania ustalonego. Dla trzeciego okresu pełzania względna zmiana objętości może dochodzić do kilku procent (zob. np. [16]).

Doświadczenia wykazały, że czas do zniszczenia wykazuje inną zależność od stanu naprężenia niż odkształcenie. Hayhurst [76] wykazał, że różnice pomiędzy zachowaniem się miedzi i aluminium można zamodelować, jeżeli użyje się w prawie rozwoju uszkodzeń naprężenia ekwiwalentnego zdefiniowanego jako:

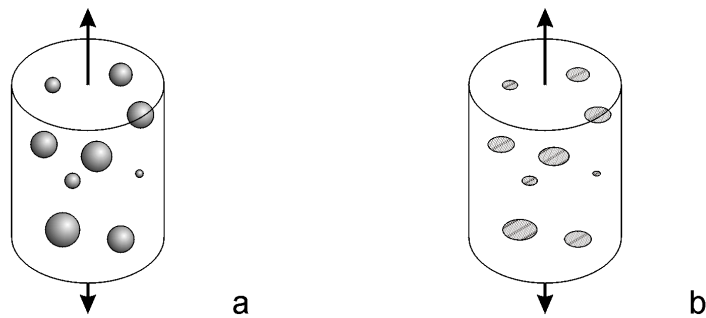
$$\sigma_{\text{eq}} = \alpha_1 \sigma_{\text{max}} + 3\alpha_2 \sigma_m + \alpha_3 \sigma_{\text{eff}}, \quad (2.41)$$

dla $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1$, gdzie σ_{\max} jest maksymalnym, niezerowym naprężeniem głównym, a $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ parametrami materiałowym. Miedź jest materiałem, gdzie rozwojem uszkodzeń kieruje głównie naprężenie maksymalne, a aluminium intensywność naprężeń. Często używane jest też uproszczone równanie Sdobyreva [157]:

$$\sigma_{\text{eq}} = \alpha \sigma_{\max} + (1 - \alpha) \sigma_{\text{eff}}. \quad (2.42)$$

Anizotropia wymuszona uszkodzeniem

Istnieją doświadczenia wykazujące, że zniszczenie wywołuje w materiale zachowania anizotropowe (zob. np. [89]). Schematycznie zostało to przedstawione na rys 2.9. Lewy rysunek obrazuje zniszczenie izotropowe w postaci pustek sferycznych, natomiast prawy w postaci równoległych szczelin – zniszczenie anizotropowe.



Rys. 2.9. Schematyczny obraz zniszczenia izotropowego w postaci sferycznych pustek (a) i zniszczenia anizotropowego w postaci płaskich szczelin (b).

Do opisanego zniszczenia anizotropowego należy użyć parametru uszkodzenia, który jest tensorem pierwszego lub wyższego rzędu (zob. [162]). Wektor uszkodzenia wprowadził już w 1963 Kaczanow [87] wiążąc uszkodzenia z płaszczyznami przekrojów prostopadłych do naprężeń głównych. Podobnie można interpretować definicję tensora uszkodzenia podaną przez Murakami i Ohno [119]:

$$\boldsymbol{\omega} = \sum_{i=1}^3 \omega_i \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i, \quad (2.43)$$

gdzie ω_i są wartościami uszkodzenia w kierunkach głównych, \mathbf{e}_i wektorami jednostkowymi tych kierunków, a \otimes jest symbolem operatora iloczynu diadycznego. W oparciu o tensor uszkodzenia naprężenie efektywne może być zdefiniowane w różny sposób, jednak, jeżeli osie główne tensora naprężenia i uszkodzenia pokrywają się, sprowadza się to zwykle do definicji:

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{bmatrix} \frac{\sigma_1}{1 - \omega_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sigma_2}{1 - \omega_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sigma_3}{1 - \omega_3} \end{bmatrix}, \quad (2.44)$$

lub

$$\bar{\sigma}_i = \frac{\sigma_i}{1 - \omega_i} \text{ dla } i=1,2,3, \quad (2.45)$$

gdzie $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ są wartościami naprężeń głównych. Model ten jest modelem ortotropowym. Komplet równań konstytutywnych dla tego przypadku podali Skrzypek i Ganczarski (według [163]):

$$\dot{\epsilon}_i^c = \frac{3}{2} B \bar{\sigma}_{\text{eff}}^{n-1} (\bar{\sigma}_i - \bar{\sigma}_m) \quad (2.46)$$

$$\dot{\omega}_i = C_i \left\langle \frac{\sigma_i}{1 - \omega_i} \right\rangle^{m_i}, \quad (2.47)$$

gdzie $\bar{\sigma}_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{1}{2} [(\bar{\sigma}_1 - \bar{\sigma}_2)^2 + (\bar{\sigma}_2 - \bar{\sigma}_3)^2 + (\bar{\sigma}_3 - \bar{\sigma}_1)^2]}$ jest efektywną intensywnością naprężeń, $\bar{\sigma}_m = \frac{1}{3}(\bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3)$ efektywnym naprężeniem średnim, C_i, m_i stałymi materiałowymi określającymi rozwój uszkodzenia w kierunku i , a $\langle \cdot \rangle$ oznacza operator McCauley'a:

$$\langle x \rangle = \begin{cases} x & \text{dla } x > 0 \\ 0 & \text{dla } x \leq 0 \end{cases}. \quad (2.48)$$

Jeżeli nieuszkodzony materiał ma właściwości izotropowe, stałe C_i, m_i nie zależą od kierunku, a anizotropia pojawia się tylko w związku ze zmianami stanu naprężenia. Równania te zachowują nieściśliwość materiału podczas pełzania gdyż:

$$\dot{\epsilon}_1^c + \dot{\epsilon}_2^c + \dot{\epsilon}_3^c = 0. \quad (2.49)$$

2.1.4.2 Homogenizacja uszkodzeń

Definicje naprężenia i odkształcenia w mechanice kontynualnej (a w związku z tym i równania konstytutywne) są określone w punkcie materialnym. Definicje te wymagają, aby pewne wielkości fizyczne (siły wewnętrzne, przemieszczenie) miały rozkład ciągły w przestrzeni materialnej. Jednak już w najprostszym przypadku widać, że dla przemieszczeń przy poślizgach dyslokacyjnych lub na granicach ziaren ciągłość ta nie jest zachowana.

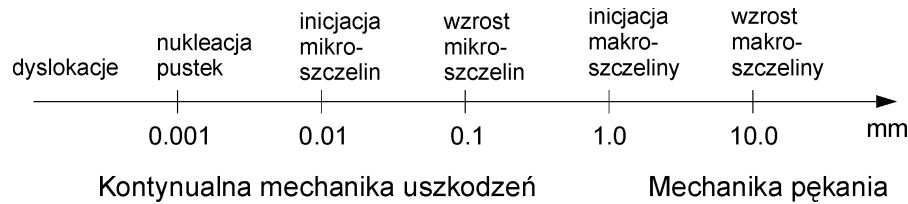
Podobny problem występuje przy definicji parametru uszkodzenia. Definiując go jako iloraz powierzchni uszkodzonej do powierzchni całkowitej (Odqvist i Hult [130]), w skrajnym przypadku można wyznaczyć go jako granicę przy powierzchni dążącej do punktu:

$$\omega = \lim_{A \rightarrow 0} \frac{A_d(A)}{A}, \quad (2.50)$$

gdzie A_d to uszkodzona część powierzchni A . Na zdjęciach mikroskopowych widać, że miara taka jest funkcją nieciągłą (a stosując dokładnie tę definicję wręcz binarną zero-jedynkową). Dlatego aby móc stosować pojęcia mechaniki kontynualnej wprowadza się homogenizację, czyli przyjmuje się, że przestrzenny rozkład zmiennych stanu zależy nie od granicy w punkcie, a od wartości średniej w pewnej objętości. Objętość, dla której dokonuje się homogenizacji, jest nazywana objętością reprezentatywną (ang. RVE –

Representative Volume Element). Według [163] objętość ta musi być wystarczająco duża, by zawierać reprezentatywną liczbę defektów i równocześnie wystarczająco mała, by stan naprężenia i odkształcenia można było uznać za jednorodny.

Z drugiej strony rozmiar tej objętości jest określony przez skalę zjawiska, które jest modelowane. Szczególnie istotne znaczenie ma to dla CDM, gdyż szczelinę lub pustkę nazywa się mikroszczeliną lub mikropustką wtedy, gdy jej rozmiar jest mniejszy od rozmiaru RVE, a parametr uszkodzenia przyjmuje wartości mniejsze od 1. Gdy szczelina lub pustka osiąga rozmiar odpowiadający rozmiarowi RVE nazywana jest makroszczeliną lub makropustką, a wartość parametru uszkodzenia jest równa 1 (por. rys. 2.10).



Rys. 2.10. Skala przestrzenna procesów związanych z rozwojem uszkodzeń (za [162]).

Rozmiar RVE przyjmuje się też w zależności od struktury materiału (zob. [96]). Jeżeli materiał globalnie wykazuje właściwości izotropowe, RVE też powinno mieć taką cechę. Więc dla materiału polikrystalicznego powinno zawierać tyle ziaren, by ich orientacja i granice nie wpływały na wielkość zmiennych stanu (np. według [77], [10] $6\div 7$ ziaren – w wymiarze liniowym). Wielkości definiowane dla zhomogenizowanego RVE nazywane będą wielkościami makroskopowymi.

2.1.4.3 Zastosowanie metod numerycznych

Rozwiązanie zadań CDM w ogólnym przypadku jest zadaniem wymagającym użycia zaawansowanych technik numerycznych. W prostych przypadkach istnieją jednak rozwiązania analityczne lub proste algorytmy różnicowe (zob. [14]).

Obecnie do rozwiązywania problemów z zakresu CDM używa się głównie metody elementów skończonych (FEM, np. [141], [114], [77], [67]), różnic skończonych (FDM np. [163]) czy elementów brzegowych (BEM, np. [12]). Równania CDM zawarte są w niektórych komercyjnych pakietach numerycznych (np. ANSYS, ABAQUS). Z uwagi na silną nieliniowość zawartą w równaniach konstytutywnych ($n > 1$ i $m > 1$) przy używaniu tych metod należy zwracać szczególną uwagę na rozmiar elementu i dobór kroku czasowego. I tak, o ile krok czasowy może być dowolnie mały, zapewniając zbieżność rozwiązania, to zmniejszanie elementu, by otrzymać dokładniejsze rozwiązanie nie ma sensu, gdyż ciągłe zmienne stanu nie mają znaczenia fizycznego dla rozmiarów mniejszych niż RVE. Uwzględnienie charakterystycznego wymiaru (ang. *internal length scale*) w równaniach kontynualnych doprowadziło do rozwoju metod gradientowych także dla mechaniki uszkodzeń (zob. przegląd w [135]), które pozwalają na uniezależnienie rozwiązania od wielkości elementu.

Równania CDM rozwiązywane przy pomocy FEM mogą określić nie tylko czas pojawienia się pierwszego makroskopowego uszkodzenia, ale także czas zniszczenia całej konstrukcji (np. [77], [15]). Wymaga to zmiany geometrii w trakcie zadania – wyłączenia uszkodzonych elementów.

Przykładowy stan w chwili zniszczenia pełzającej wolnopodpartej płyty obciążonej równomiernie rozmieszczonym ciśnieniem na górnej powierzchni przedstawiono na rys 2.11. W pracy [15] obliczenia przy pomocy równań CDM były kontynuowane nie tylko do momentu pojawienia się pierwszego makroskopowego zniszczenia, ale do zniszczenia całego przekroju, co pozwoliło na uzyskanie siatki

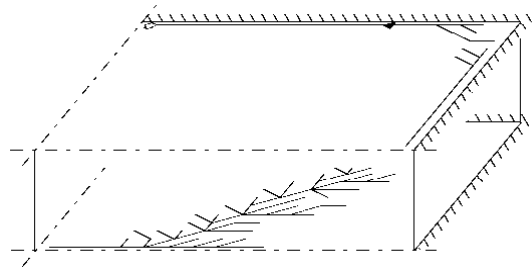
spękań. Do obliczeń zostały użyte równania (2.40), uzupełnione równaniem rozwoju uszkodzenia

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = C \left(\frac{\sigma_{eq}}{1 - \omega} \right)^m, \quad (2.51)$$

gdzie napężenie ekwiwalentne jest zdefiniowane przy pomocy równania (2.42). A całkowite odkształcenie jest sumą odkształcenia sprężystego i odkształcenia pełzania:

$$\varepsilon_{ij} = D_{ijkl}^{-1} \sigma_{kl} + \varepsilon_{ij}^c, \quad (2.52)$$

gdzie D_{ijkl} to elementy macierzy stałych sprężystych. Symulacje zostały przeprowadzone dla stopu tytanu Ti-6Al-2Cr-2Mo w temperaturze 675 K.



Rys. 2.11. Obraz zniszczenia na dolnej i górnej powierzchni ćwiartki płyty wolnopodpartej obciążonej równomiernie od góry, otrzymany przy pomocy równań CDM (za [15]).

2.2 Poziom mikroskopowy

2.2.1 Obserwacje i mechanizmy deformacji

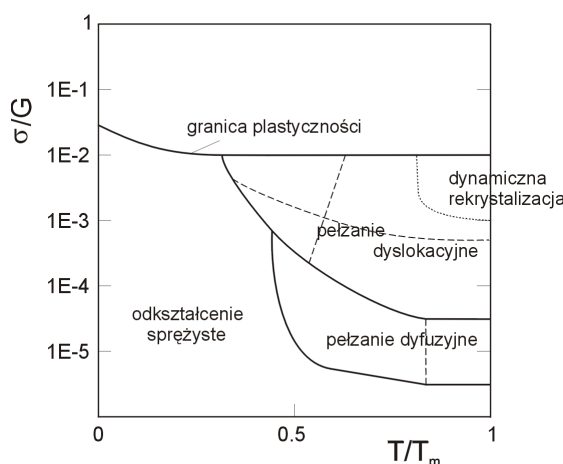
Zanim zostaną szczegółowo omówione mechanizmy zachodzące podczas zniszczenia materiałów polikrystalicznych w warunkach pełzania, należy przyjrzeć się bliżej samej deformacji na mikroskopowym poziomie obserwacji, gdyż zjawiska te są ze sobą ściśle powiązane.

2.2.1.1 Zmiany w czasie

Przebieg krzywej pełzania (rys. 2.1) jest odzwierciedleniem różnych mechanizmów mikroskopowych, które dominują w poszczególnych okresach. W okresie pełzania nieustalonego przeważa mechanizm umocnienia odkształceń poprzez sploty dyslokacji lub podstruktur dyslokacyjnych [41]. W drugim okresie pełzania zostaje on zrównoważony poprzez termicznie aktywowane zdrowienie struktury dyslokacji. Prędkość odkształcenia jest kontrolowana przez proces wspinania dyslokacji krawędziowych ponad przeszkodami. Zjawisko to wymaga dyfuzji wakansów, która jest szczególnie intensywna w podwyższonych temperaturach [150]. Wzrost odkształcenia w trzecim etapie następuje głównie na skutek rozwoju i kumulacji uszkodzeń. Podawane są także i inne przyczyny związane z degradacją mikrostruktury materiału – np. rozrost wtrąceń (ang. *precipitate coarsening*) [5]. Pełzanie przyspieszone może także być stowarzyszone ze wzrostem prędkości zdrowienia [48].

2.2.1.2 Zmiany w przestrzeni parametrów naprężenia i temperatury (mapy deformacji)

Mechanizmy odpowiedzialne za deformację materiału w warunkach pełzania zależą przede wszystkim od poziomu przyłożonego obciążenia i temperatury, w jakiej pracuje materiał. Zależność tego rodzaju najlepiej przedstawić na tzw. mapie deformacji, której schematyczny obraz został przedstawiony na rys. 2.12. Mapy deformacji dla wielu materiałów zostały opracowane przez Frosta i Ashby'ego [52]. Wyróżnia się dwa podstawowe rodzaje pełzania: pełzanie dyslokacyjne i pełzanie dyfuzyjne.



Rys. 2.12. Schematyczna mapa mechanizmów deformacji w przestrzeni temperatury homologicznej i naprężenia znormalizowanego (na podstawie [150]).

Obszar *pełzania dyslokacyjnego* jest podzielony mniej więcej poziomą linią oddzielającą obszar niższego naprężenia, gdzie poślizg na granicach ziaren wpływa

znacząco na całkowitą prędkość deformacji i obszar większych naprężeń, gdzie granice ziaren są mniej podatne. Dominujący w tym obszarze jest poślizg wewnątrz ziaren. Pionowa linia oddziela pełzanie niskotemperaturowe, gdzie dyfuzja odbywa się wzdłuż linii dyslokacji od pełzania wysokotemperaturowego, gdzie dominuje dyfuzja objętościowa.

Pełzanie niskotemperaturowe występuje w temperaturach niższych niż 0.5 temperatury homologicznej i przy większych naprężeniach (powyżej $10^{-4}G$, gdzie G - sprężysty moduł ścinania). Jego prędkość spada do zera, gdyż ruch dyslokacji zostaje zahamowany na przeszkodach, a temperatura jest za niska, by umożliwić wspinanie się dyslokacji. Zmiany odkształcenia wyraża się najczęściej przy pomocy równania logarytmicznego, dlatego pełzanie to nazywane jest też pełzaniem logarytmicznym. Natomiast prędkość odkształcenia wyraża się równaniem [181]:

$$\dot{\epsilon}_c = \frac{A_1}{1 + \nu t}, \quad (2.53)$$

gdzie A_1 , ν – stałe materiałowe, $\dot{\epsilon}_c$ – prędkość odkształcenia pełzania, t – czas. Odkształcenia pełzania niskotemperaturowego są nieznaczne (do 1%), dlatego nie ma ono większego znaczenia.

Pełzanie wysokotemperaturowe (pełzanie Andrade) jest kontrolowane przez samodyfuzję. Na jej skutek możliwe staje się wspinanie dyslokacji i proces pełzania osiąga dodatnią prędkość ustaloną. Pełzanie wysokotemperaturowe może powodować duże deformacje (do 300% według [181]). Do opisu pełzania dyslokacyjnego – wysokotemperaturowego powszechnie stosuje się potęgowe prawo Nortona [128] (zob. równ. 2.14). Późniejsze, dokładniejsze badania wykazały, że zależność ta ma charakter sinusa hiperbolicznego, dlatego czasami używa się też równania McVetty'ego [113] (zob. równ. 2.16).

Dla obciążenia poniżej ok. $10^{-4}G$ pełzanie dyslokacyjne słabnie i w temperaturach powyżej 0.5 temperatury homologicznej dominuje **pełzanie dyfuzyjne**. Mechanizmem, który powoduje odkształcenie ziaren jest bezpośrednio zjawisko dyfuzji. Rozciągane granice ziaren (prostopadłe do kierunku rozciągania) cechują się zwiększoną koncentracją wakansów, a granice ściskane (równoległe do kierunku rozciągania) posiadają zmniejszoną ich koncentrację, dlatego powstaje gradient koncentracji, który jest siłą napędową dyfuzyjnego ruchu wakansów w kierunku od granic rozciąganych do granic ściskanych. Równocześnie w kierunku przeciwnym następuje ruch atomów, powodując wydłużanie się ziaren w kierunku rozciągania. Prędkość pełzania dyfuzyjnego została opisana jako proporcjonalna do naprężenia. Jeżeli dyfuzja następuje przez objętość ziarna, to można ją opisać równaniem Nabarro-Herringa ([120], [78]):

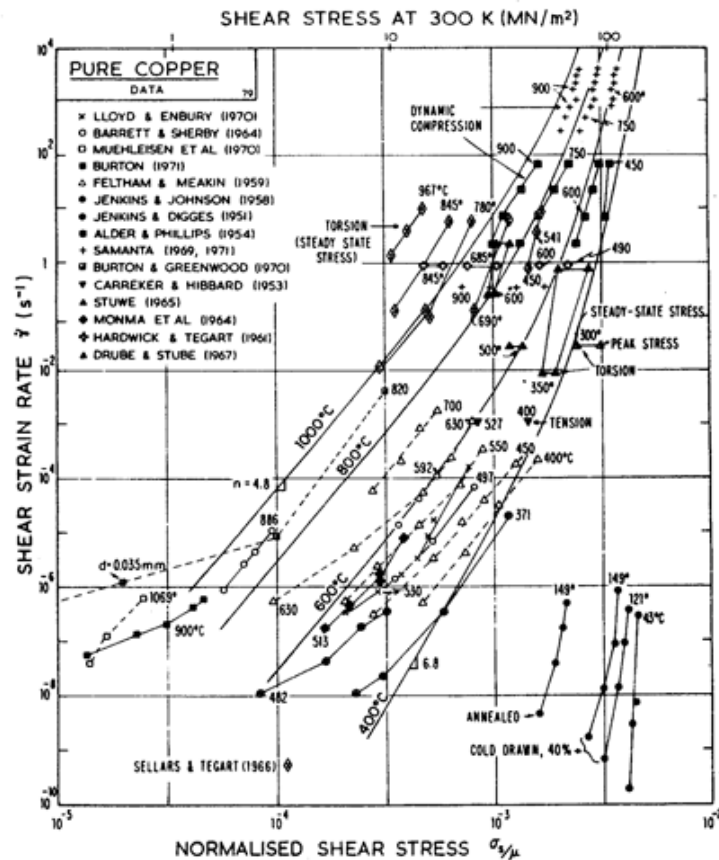
$$\dot{\epsilon}_s = \frac{A_2}{d^2 T} D_v \sigma, \quad (2.54)$$

gdzie A_2 – stała materiałowa, D_v – współczynnik dyfuzji objętościowej, d – średnica ziarna, T – temperatura. Jednak w niższych temperaturach dużo szybciej zachodzi dyfuzja po granicach ziaren, co pierwszy opisał Coble [31]:

$$\dot{\epsilon}_s = \frac{A_3}{d^3 T} \delta D_{gb} \sigma, \quad (2.55)$$

gdzie A_3 – stała materiałowa, δD_{gb} – współczynnik dyfuzji po granicach ziaren.

W ramach pełzania dyslokacyjnego można wyróżnić też różne bardziej szczegółowe mechanizmy (zob. [181]). Wskazuje na to np. zależność indeksu pełzania od naprężenia (por. rys. 2.13).



Rys. 2.13. Zależność prędkości pełzania ustalzonego od poziomu obciążenia dla miedzi [52].

2.2.2 Obserwacje doświadczalne zniszczenia

2.2.2.1 Obserwacje przełomów zniszczenia (mapy zniszczenia)

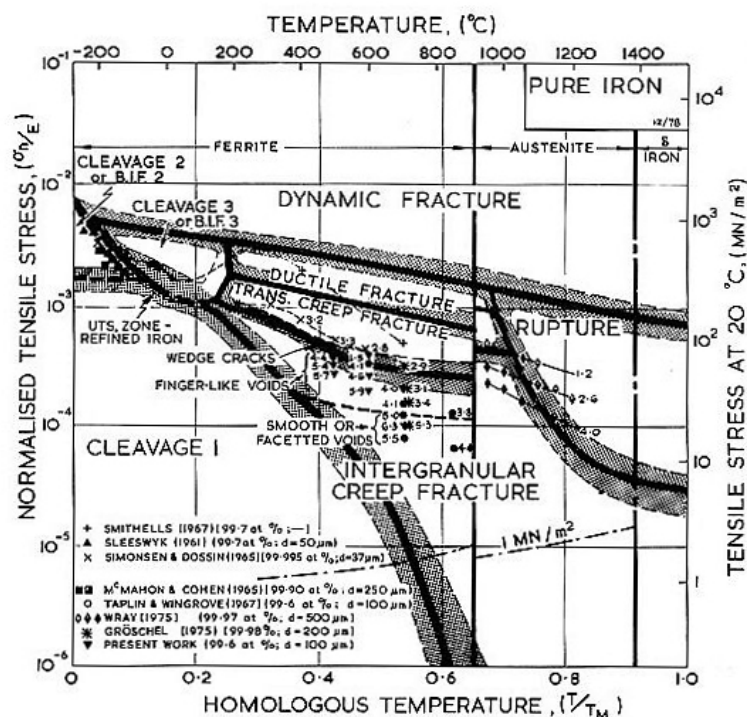
Obserwacje mikroskopowe przełomów zniszczenia ujawniają, że zniszczenie w warunkach pełzania, czyli w temperaturze pomiędzy 0.3 a 0.7 temperatury homologicznej i przy poziomie naprężenia poniżej granicy plastyczności, jest spowodowane głównie przez rozwój pustek i szczelin. Sposób zniszczenia materiałów polikrystalicznych (metali i stopów) w tych warunkach zależy w dużym stopniu od wartości tych dwóch parametrów tj. temperatury i naprężenia. Oprócz różnic makroskopowych (opisanych w poprzednim rozdziale), występują też istotne różnice na poziomie mikroskopowym. Ponieważ różnice te dotyczą głównie zachowania się ziaren krystalicznych i ich granic, wyodrębniono dwa główne mechanizmy tj. zniszczenie transkrystaliczne i międzykrystaliczne. Już w roku 1917 Jefferies [85] określił temperaturę graniczną, poniżej której zniszczeniu ulegają ziarna, a powyżej której zniszczenie odbywa się poprzez ich granice. Temperatura ta zdefiniowana, jako temperatura równej wytrzymałości (kohezji) ziaren i granic została nazwana temperaturą ekwikohezyjną.

Dokładne badania zależności mechanizmu zniszczenia dla próby jednoosiowego rozciągania w zależności od naprężenia i temperatury zostały przeprowadzone przez Ashby'ego i jego zespół (zob. [6], [55], [50]). Wyniki tych badań dla różnych

materiałów polikrystalicznych zostały podsumowane przy pomocy map zniszczenia, które w czytelny sposób obrazują zmiany tych mechanizmów w przestrzeni naprężenia znormalizowanego i temperatury homologicznej.

Aby dokładnie zidentyfikować mechanizm oprócz obserwacji samego zniszczenia konieczna jest też obserwacja rozwoju uszkodzeń, które doprowadzają do zniszczenia. Dokonuje się tego poprzez obserwacje przekrojów w pobliżu przelomu lub zatrzymując test przed zniszczeniem. Ponieważ określenie rodzaju zniszczenia jest prawie nie możliwe bez zniszczenia próbki, mimo wielu badań pozostaje ciągle wiele niejasności.

Mechanizmy zniszczenia i ich obserwowane cechy zostaną omówione na przykładzie żelaza. Mapa zniszczenia dla tego materiału została pokazana na rys. 2.14.



Rys. 2.14. Mapa mechanizmów zniszczenia dla żelaza [50].

Przy niskim poziomie obciążenia małe, soczewkowate pustki powstają, a potem rosną na granicach ziaren. Same ziarna nie podlegają istotnej deformacji, a powierzchnia przelomu jest w 100% zniszczona w sposób *międzykrystaliczny*. Pustki na granicach ziaren są kuliste. Pojawiają się też pustki palcowe lub szczelinowe, które rosną w powierzchni granicy (zob. rys. 2.15a). Doświadczenia pokazują, że większość zniszczonych granic leży w płaszczyznach nachylonych pod kątem 60°-90° do kierunku rozciągania.

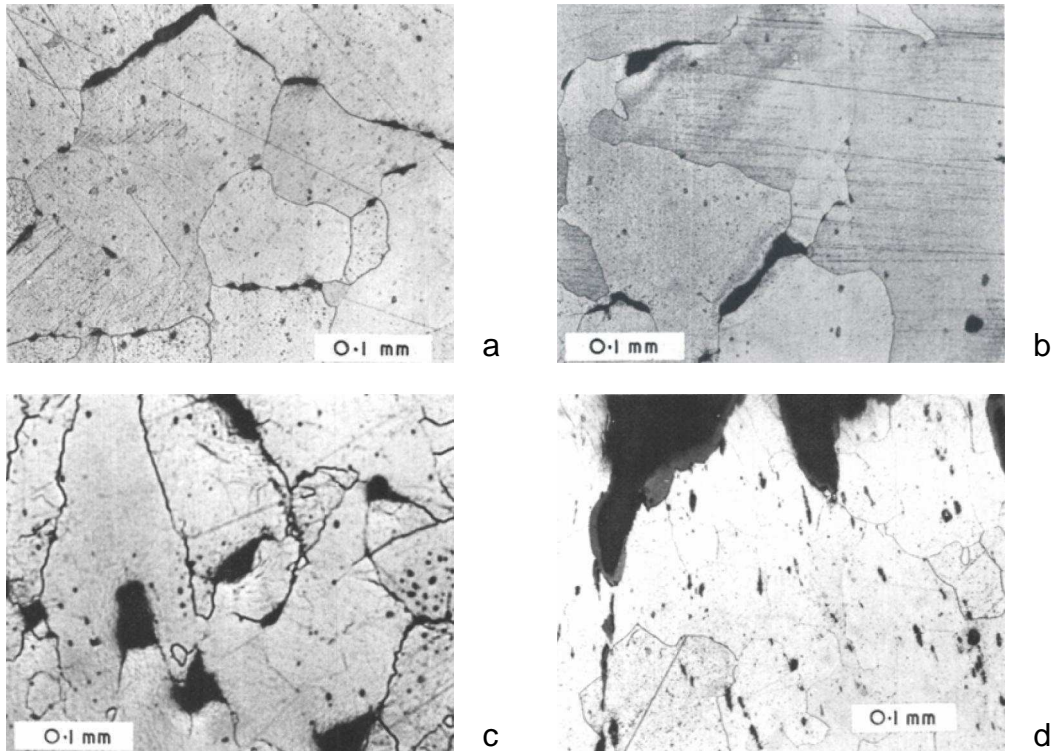
Przy trochę wyższych naprężeniach pustki i szczeliny na granicach ziaren stają się podobne do szczelin klinowych. Ziarna ulegają częściowej deformacji. Szczeliny palcowe stają się większe. Widoczne są też ślady poślizgów na granicach, a zniszczenie w dalszym ciągu ma charakter międzykrystaliczny (zob. rys. 2.15b). Przy tym poziomie naprężenia oprócz pustek na granicach poprzecznych obserwuje się czasami pustki na granicach ukośnych do kierunku rozciągania.

Przy jeszcze wyższych naprężeniach szczeliny klinowe są dużo bardziej otwarte a odkształcenia są znaczne. Powierzchnia zniszczenia ma charakter *mieszany* (zob. rys. 2.15c).

Przy najwyższych naprężeniach pustki inicjują się wewnątrz ziaren i w warunkach pełzania rosną i łączą się szybko, podobnie jak w temperaturze pokojowej, powodując

pękanie w 100% *transkrystaliczne*. Pustek międzykrystalicznych w tych warunkach nie obserwuje się (zob. rys. 2.15d).

Mapy zniszczenia obejmują także obszary, w których pełzanie nie zachodzi. Ponieważ nie są one przedmiotem zainteresowania pracy, zostaną tylko pokrótce omówione.



Rys. 2.15. Zdjęcia mikroskopowe zniszczenia międzykrystalicznego (a) i (b), mieszanego (c) i transkrystalicznego (d) dla żelaza obciążonego w kierunku pionowym w temperaturze 973 K naprężeniem 18.7 (a) 24.9 (b) 26.1 (c) 50 (d) MPa [50].

W *niskich temperaturach* niektóre metale cechuje łupliwość, czyli kruche zniszczenie transkrystaliczne (ang. *cleavage*). W podobnych warunkach może też wystąpić zniszczenie międzykrystaliczne.

Dla *dużych naprężeń* materiały niszczą się w sposób plastyczny. Zniszczenie takie może nastąpić albo poprzez pasma ścinania, albo poprzez rozwój pustek wewnątrz ziaren. Towarzyszy temu zwykle utworzenie się szyjki będącej oznaką początkowego etapu zniszczenia. Mechanizm rozwoju pustek plastycznych jest bardzo podobny do zniszczenia transkrystalicznego w warunkach pełzania.

W *wysokich temperaturach* dochodzi do zerwania przy dynamicznej rekrytalizacji. W warunkach tych struktura ziaren jest niestabilna, powstające pustki są anihilowane, możliwe są więc duże odkształcenia, które doprowadzają do szyjkowania i zniszczenia.

2.2.2.2 Zależność od wielkości ziaren

Oprócz zależności od temperatury i poziomu naprężenia materiały w warunkach pełzania wykazują różne właściwości w zależności od innych parametrów makroskopowych (stan naprężenia) lub szeregu parametrów materiałowych (rozmiar ziarna, struktura wtrąceń, ilości zanieczyszczeń i domieszek).

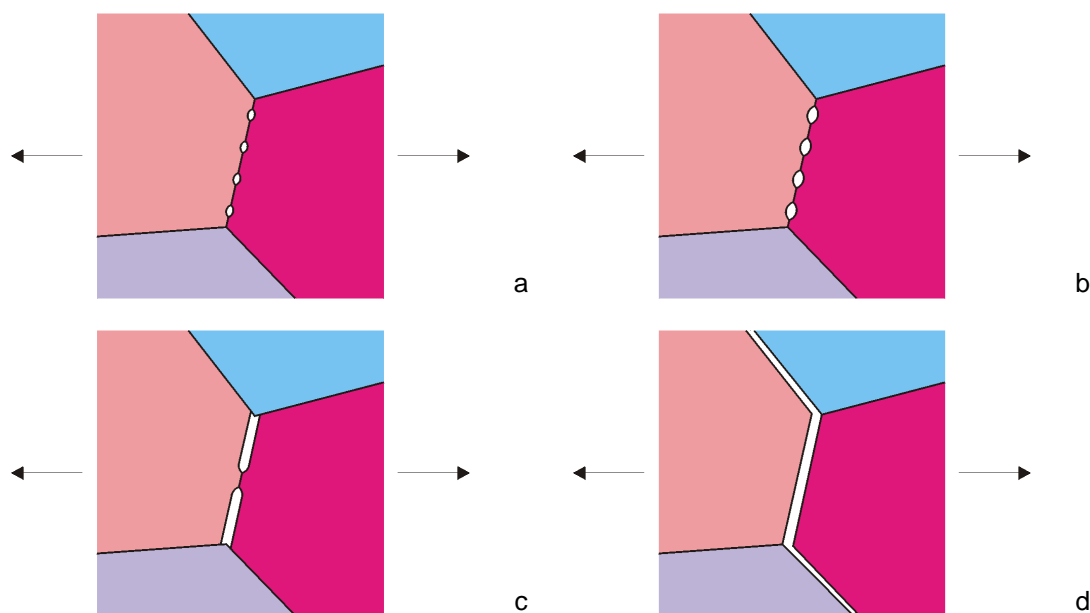
Zależność pełzania od wielkości ziarna jest bardzo złożona. Dla metali czystych przy pełzaniu dyslokacyjnym dla ziaren dużych (pow. 100 μm) nie obserwuje się takiej zależności. Wraz ze zmniejszaniem się ziarna prędkość powoli rośnie. W stopach

austenitycznych wzrost wielkości ziarna zwiększa odporność na pełzania, ale np. w stopach ferrytycznych zależność ta nie jest jednoznaczna. Stopy niezelazne o strukturze drobnoziarnistej są bardziej odporne na pełzanie w temperaturze niższej od temperatury ekwikohezyjnej, a stopy gruboziarniste powyżej tej temperatury (według [83]).

Zwykle uważa się, że małe ziarna są bardziej odporne na zniszczenie kawitacyjne, a duże ziarna pękają bardziej krucho (zob. [124]). Aby powstała szczelina o krytycznej długości dla małych ziaren musi ona połączyć wiele ścianek sąsiednich ziaren, natomiast dla dużych ziaren do otrzymania szczeliny krytycznej może wystarczyć jedna ścianka (zob. [48]). Nie wszystkie doświadczenia potwierdzają taką zależność. Np. eksperyment przeprowadzony dla stopu aluminium (zob. [166]) pokazał, że próbka z materiału o małych ziarnach ulega zniszczeniu przy mniejszym odkształceniu, niż próbka o dużych ziarnach.

2.2.3 Mechanizmy rozwoju uszkodzeń

Proces rozwoju uszkodzeń zaczyna się od nukleacji pustek lub szczelin. Potem następuje okres ich wzrostu początkowo niezależnego, ale przy malejących odległościach między pustkami wpływ sąsiednich pustek jest coraz większy. Pustki i szczeliny następnie łączą się, tworząc makroszczelinę, czyli szczelinę obserwowaną w skali makro. Szczelina taka propaguje się, aż do osiągnięcia długości krytycznej, co doprowadza do lawinowego wzrostu i zniszczenia materiału. Schematycznie proces ten został przedstawiony na rysunku 2.16.



Rys. 2.16. Schematyczny obraz rozwoju uszkodzeń: nukleacja pustek (a), wzrost pustek (b), koalescencja (c) i powstanie makroszczeliny (d).

2.2.3.1 Zniszczenie transkrystaliczne

Obszar wysokiego poziomu naprężeń na mapach zniszczenia Ashby'ego zajmowany jest przez dwa mechanizmy zniszczenia ciągłego (ang. *ductile fracture*) i zniszczenia transkrystalicznego przy pełzaniu (ang. *transgranular creep fracture*). Podział ten został dokonany na podstawie dominującego mechanizmu deformacji, jednak mechanizm zniszczenia w obu przypadkach jest bardzo podobny, dlatego obszary te omówione zostaną łącznie.

Charakterystyczną cechą zniszczenia transkrystalicznego jest występowanie pustek, które rozwijają się wewnątrz ziaren. Pustki te łączą się ze sobą tworząc linie

przełomu, która charakteryzuje się występowaniem dolin i grzbietów [55]. Przed połączeniem pustki wewnątrzkrystaliczne rosną do dużych rozmiarów i dlatego też odkształcenie przy zniszczeniu jest duże. Ponieważ proces odbywa się przy dużych naprężeniach i dużych prędkościach odkształceń, czas do zniszczenia jest krótki.

Za miejsce inicjacji pustek transkrystalicznych uważa się wtrącenia cząstek drugiej fazy znajdujące się we wnętrzu ziaren. Różne są natomiast bezpośrednio przyczyny zarodkowania. Najczęściej uważa się, że koncentracje naprężeń powstające na wtrąceniach powodują dekohezję wiązania pomiędzy wtrąceniem i osnową (zob. [155], [41]). Jeżeli wtrącenia są kruche to one pierwsze mogą ulec zniszczeniu, inicjując pustkę (zob. [6]). Odpowiedzialne za powstanie pustek mogą być też spiętrzenia dyslokacji, które powstają, gdy ich ruch zostanie zatrzymany na wtrąceniach. Spiętrzenia takie dostarczają też niezbędnej koncentracji wakansów. Niejasna jest kwestia momentu powstania pustek. Obecnie przeważa teza o ciągłej nukleacji pustek w trakcie całego procesu pełzania. Jako alternatywny rozważa się mechanizm natychmiastowej nukleacji pustek (po przekroczeniu naprężenia progowego).

Wzrost pustek kontrolowany jest głównie poprzez mechanizm deformacji. Zakłada się, że pustki rosną przeważnie w kierunku rozciągania proporcjonalnie do odkształcenia. Według [6] prędkość wzrostu pustki sferycznej w kierunku rozciągania jest dwa razy większa niż prędkość odkształcenia próbki. Oprócz zmiany kształtu dokonuje się także wzrost objętości, który uważa się za proporcjonalny do naprężenia średniego (σ_m). Krytyczna wartość względnej objętości pustek dla materiałów ciągliwych może wynosić do 0.2 (zob. [170]).

Etap wzrostu doprowadza do łączenia się pustek i zniszczenia materiału. Przy odkształceniach plastycznych wzrost pustek jest zwykle bardzo szybki i zniszczenie jest natychmiastowe, natomiast w warunkach pełzania wzrost może się ustabilizować, nie doprowadzając w skrajnym przypadku ($n=1$) do połączenia się pustek.

Jeżeli wymiary pustek są małe w porównaniu do odległości między nimi, pustki rosną niezależnie od siebie. Zaobserwowano, że wpływ sąsiednich pustek następuje w momencie osiągnięcia przez nie wymiaru równego odległości pomiędzy pustkami (zob. [155]). Na skutek lokalnych dużych naprężeń mogą się tam utworzyć pasma poślizgu pomiędzy sąsiednimi pustkami, rozpoczynając wewnętrzne szyjkowanie. Szyjkowanie może się też rozpocząć na skutek niestabilności odkształcenia pełzania podobnie jak w szyjkowaniu zewnętrznym. Jeżeli proces przybiega przy dużych prędkościach zamiast utworzenia się szyjki może dojść do zniszczenia na skutek powstania płaszczyzny ścinania przechodzącej przez wiele pustek (ang. *void sheeting*, zob. [6], [81]). Niektórzy dopuszczają także możliwość niezależnego wzrostu pustek aż do momentu bezpośredniego połączenia się sąsiednich pustek (zob. [81]).

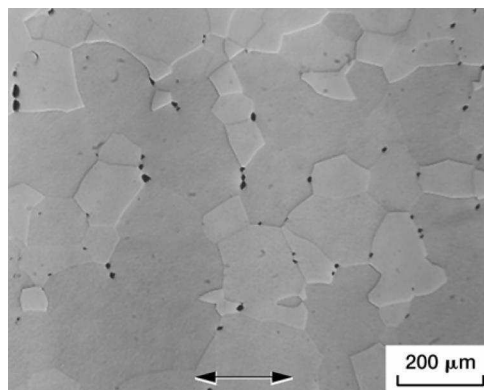
2.2.3.2 Zniszczenie międzykrystaliczne

Zniszczenie poprzez pustki lub szczeliny na granicach ziaren jest dominującym mechanizmem zniszczenia wielu metali, stopów i materiałów ceramicznych w temperaturach pomiędzy 0.3 a 0.7 temperatury topnienia i przy niskim poziomie obciążenia. Jest ono zwykle powiązane z małą ciągliwością (małe odkształcenie przy zniszczeniu), dlatego jest bardziej niebezpieczne, gdyż zniszczenie występuje bez ostrzegawczego wzrostu odkształcenia. Ścieżka pęknięcia jest międzykrystaliczna. Dla większych naprężeń mechanizm ten zostaje zastąpiony przez pęknięcie transkrystaliczne ciągliwe lub łupliwe (dla niskich temperatur). W wysokich temperaturach granice ziaren zaczynają migrować i dynamiczna rekrytalizacja zatrzymuje wzrost pustek na granicach ziaren.

Nukleacja pustek na granicach ziaren

Chociaż stwierdzono, że pustki powstające na granicach ziaren są główną przyczyną zniszczenia międzykrystalicznego, nie jest w pełni wyjaśniony mechanizm ich powstawania (por. [88]). Pustki obserwuje się głównie na granicach prostopadłych do kierunku rozciągania (np. zob. rys. 2.17). Pustki na granicach ukośnych pojawiają się tylko dla wysokiego poziomu naprężeń.

Pierwszą teorią próbującą wyjaśnić nukleację pustek była teoria samorzutnej **kondensacji wakansów** zaproponowana w 1952 przez Greenwooda J.N. [70]. Została początkowo ona odrzucona jako mało prawdopodobna – wyliczone koncentracje wakansów okazały się za małe, ale później zaakceptowana po poprawieniu (w 1975) przez Raja i Ashby’ego [147]. Założyli oni, że źródłem przesylenia wakansów (czyli koncentracji powyżej równowagi) jest naprężenie mechaniczne (w miejscach jego koncentracji) i wyliczyli energię, jaką musi ono pokonać, aby wytworzyć pustkę. Z ich wyliczeń wynika, że przy naprężeniu 100 MPa wystarczy 10% przesylenie wakansów, aby utworzyć pustkę (dla modelu Greenwooda różnica wynosiła kilka rzędów). Jednak nie wszyscy uznali to za wystarczające (np. Evans [48] uważa, że przesylenie wakansów wynosi około 0.1%). Dodatkowo według modelu Raja i Ashby’ego istnieją konfiguracje styków ziaren, gdzie znika bariera energetyczna, czyli tworzenie się pustek powinno następować samorzutnie (czego się nie obserwuje).



Rys. 2.17. Pustki międzykrystaliczne na granicach prostopadłych do kierunku rozciągania dla stopu NiAl po 9114.2 h pełzania w temperaturze 1200 K przy obciążeniu naprężeniem nominalnym 10 MPa (za [148]).

W oparciu o doświadczenia z 1956 Chena i Machlina [24] przyjmowano, że proces nukleacji pustek wiąże się z **poślizgiem na granicach ziaren**. W swoim doświadczeniu pokazali oni, że dla bikryształu, który był wstępnie obciążony w kierunku preferującym poślizg na granicy, a następnie prostopadle do tej granicy, nukleują się pustki. Natomiast dla bikryształu, który był obciążony tylko prostopadle do granicy, nie wytworzyły się pustki. Jako miejsce nukleacji pustek przyjmowano istniejące uskoki granicy, wyjścia pasm poślizgu na granicę, styki ziarna z granicą podziarna, czy wtrącenia obecne w granicy. Jednak teorie te nie tłumaczyły, dlaczego pustki obserwuje się głównie na granicach poprzecznych, dla których poślizg jest mały. Dodatkowo Gandhi i Raj [56] wykonali doświadczenia na bikryształach rozciąganych prostopadle do granicy, gdzie wykazali, że poślizg nie jest konieczny do nukleacji pustki.

Wiele doświadczeń wykazuje powiązanie odległości między pustkami z odległością pomiędzy **pasdami poślizgu**. Zjawisko to nie jest do końca wytłumaczone. Najstarszy (z 1956) model Gifkinsa [63] zakładał utworzenie się uskoku na granicy ziarna na skutek wyjścia pasma poślizgu i jego zatrzymania w tej granicy. Następnie taki uskok byłby miejscem nukleacji pustki na skutek poślizgu po granicy ziarna. Z

analizy naprężeń jednak wynika, że uskok powstały poprzez naprężenia rozciągające, byłby zamykany, natomiast otwarcie uskoku musiałby powstać poprzez naprężenia ściskające (co zostało potwierdzone przez doświadczenia, zob. [48]). Teoria ta nie wyjaśnia też tworzenia się pustek na granicach poprzecznych do kierunku rozciągania. Za przyczynę powstania pustek, podaje się więc koncentracje naprężenia wytworzone przez spiętrzone dyslokacje na granicy ziarna i związane z tym akumulacje wakansów.

W stopach obserwuje się, że najczęstszym miejscem występowania pustek są **wtrącenia** lub zanieczyszczenia obecne w **graniczy ziaren**. Zaobserwowano, że w nadstopach niklu węgliki są wypychane przez pasma poślizgu na granicę ziarna, tworząc miejsca nukleacji pustek. Dlatego obecnie za najbardziej prawdopodobną przyczynę powstawania pustek uważa się spiętrzenia dyslokacji na wtrąceniach w granicy (zob. [88]).

Evans [48] przychylił się do teorii, że nukleacja pustek następuje natychmiastowo, a obserwowany wzrost liczby pustek jest tylko wynikiem przekraczania coraz większej liczby pustek przez granice ich detekcji. Jednak późniejsze obserwacje potwierdzają, że proces nukleacji ma charakter ciągły. Krytyczny rozmiar pustki wynosi około $2\div 5$ nm, a obecne mikroskopy potrafią zaobserwować pustki o rozmiarze 3 nm (zob. [88]). Obserwacje te potwierdzają także, że liczba pustek jest głównie funkcją odkształcenia, a nie czasu lub naprężenia.

Rozwój pustek na granicach ziaren

Mechanizmy wzrostu pustek dzielą się na dyfuzyjne i odkształceniowe. Początkowo były one opisywane oddzielnie, jednak okazało się, że, aby otrzymać poprawny opis tego zjawiska, należy je połączyć ze sobą.

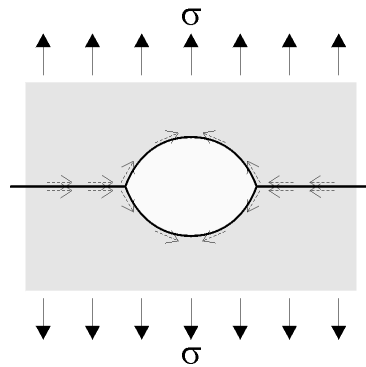
Zależność Monkmana-Granta sugeruje (wykładnik bliski 1), że mechanizm zniszczenia jest ściśle powiązany z mechanizmem odkształceniowym. Początkowo zakładano, że wzrost pustek jest spowodowany poprzez **odkształcenie otaczającej materii**. Jednak symulacje liczbowe wskazują, że wyłącznie odkształceniowy mechanizm wzrostu pustek powodowałby dużą ciągliwość materiału (odkształcenie przy zniszczeniu ok. 400%), co nie odpowiada warunkom zniszczenia międzykrystalicznego. Według [88] czysto odkształceniowy mechanizm wzrostu pustek jest istotny dla dużych odkształceń i dużych prędkości odkształceń.

Poślizg po granicach ziaren jest uważany za ważny odkształceniowy mechanizm wzrostu pustek. Rosną one pod wpływem naprężeń stycznych jako płaskie dyski (płytki) w powierzchni granicy. Pustki takie obserwuje się w niektórych warunkach, np. dla dużych naprężeń. Doświadczenia wykazują, że prędkość wzrostu pustek jest podobna do prędkości poślizgu dla dużych wartości prędkości (np. Sklenicka i in. 1980 [161]). Według Dysona [43] poślizg na ukośnych granicach ziaren umożliwia rozwój pustek na granicach poprzecznych, gdyż może on akomodować przemieszczenia między sąsiednimi ziarnami. Jeżeli przyjmie się, że pustki na granicach poprzecznych mogą rosnąć z taką prędkością, na jaką pozwala prędkość poślizgu granic ukośnych, można tym wytłumaczyć obserwowaną zależność między prędkością wzrostu, a prędkością poślizgu (zob. [150]).

Podstawowym mechanizmem wzrostu pustek w warunkach pełzania jest ruch dyfuzyjny atomów z pustek do granic ziaren. Towarzyszy temu ruch wakansów z granicy do pustki. Siłą napędową dyfuzji są różnice potencjału chemicznego, które wynikają z rozkładu naprężeń normalnych na granicy ziaren. W wielu modelach uważa się, że granice ziaren są idealnymi źródłami wakansów. Ruch wakansów odbywa się głównie przez **dyfuzję po granicach ziaren** (Hull i Rimmer 1959 [82]), choć niektórzy dodawali do niej też **dyfuzję objętościową** (poprzez ziarno) lub za Greenwoodem [70]

uznawali, że źródłem wakansów są wnętrza ziaren lub sąsiedztwo granic. Uważa się jednak, że w warunkach pełzania dyfuzja po granicach jest dominująca (zob. [150], [147]). W dyfuzyjnej teorii wzrostu pustek występuje też naprężenie progowe, poniżej którego wzrost pustek jest niemożliwy. Hull i Rimmer powiązali to naprężenie z krytyczną wielkością pustki $\sigma > 2\gamma/r_0$, gdzie γ to energia powierzchniowa, r_0 – promień początkowy pustki. Naprężenie progowe ma wartość mniejszą od 10 MPa dla czystych metali i poniżej 100 MPa dla stopów.

Za kształt pustek odpowiedzialna jest dyfuzja po powierzchni pustki zwana **dyfuzją powierzchniową**. Jeżeli dyfuzja ta jest wystarczająco szybka, kształt pustki osiąga równowagowy soczewkowaty kształt (zob. rys. 2.18). Jest on kolisty w powierzchni granicy i soczewkowaty w przekroju. Ponieważ dla wielu materiałów energia powierzchni swobodnej jest 2 razy większa od energii powierzchni granicy, kąt nachylenia pustki wynosi około 75° (zob. [147]). Obserwuje się też pustki dużo bardziej płaskie – szczelinowe, o kształcie dendrycznym. Pojawiają się one, gdy dyfuzja powierzchniowa jest wolniejsza. Granica ziarna drenuje obszar pustki bezpośrednio do niej przyległy, powodując jej spłaszczenie. W powierzchni granicy drobne wypukłości rosną dużo szybciej niż wklęsłości nadając pustce kształt podłużny (ang. *finger-like*) lub dendryczny.



Rys. 2.18. Owalny, optymalny kształt pustki powstałej w wyniku dyfuzji wakansów po granicach i dyfuzji powierzchniowej.

Pomimo, iż w 1975 Raj i Ashby [147] uznali, że model dyfuzyjny wyjaśnia wzrost pustek, okazało się, że posiada on szereg wad. Czas do zniszczenia nie jest zgodny z zależnością Monkmana-Granta, słaba jest zgodność z mierzoną prędkością wzrostu pustek – prędkości są za duże, a czas do zniszczenia za mały, a także niewytłumaczony jest wpływ wtrąceń i mikrostruktury (zob. [48]).

W 1976 roku Dyson [43] zaproponował teorię **ograniczonego dyfuzyjnego wzrostu**. Pustki mogą rosnąć przez dyfuzję, ale z prędkością ustaloną przez pełzanie matrycy. Jeżeli materia otaczająca pustkę jest podatna, to może ona łatwo akomodować wzrost pustki, który jest kontrolowany przez dyfuzję. Jeżeli natomiast ziarno otaczające pustkę jest sztywne, to nie może ona swobodnie rosnąć i jej wzrost jest ograniczony przez deformację otaczającej materii. Sztywne ziarno powoduje ściskanie granicy i wypadkowe naprężenie normalne (które uważa się za sterujące dyfuzją) jest takie, aby wzrost dyfuzyjny pustki odpowiadał deformacji ziarna. Ma to znaczenie szczególnie dla małych prędkości odkształcenia. Dla dużych, akomodacja jest łatwa i prędkości wzrostu pustek zbliżają się do wielkości wyznaczonych z teorii dyfuzyjnego wzrostu. Wyniki te są zgodne z doświadczeniami (zob. [150]).

W inny sposób oba mechanizmy łączy **model sprzężony dyfuzyjno-odkształceniowy**. Beere i Speight [10] założyli, że pustka otoczona jest przez pole dyfuzyjne, które ograniczone jest przez pełzającą materię. Wzajemne sprzężenie obu

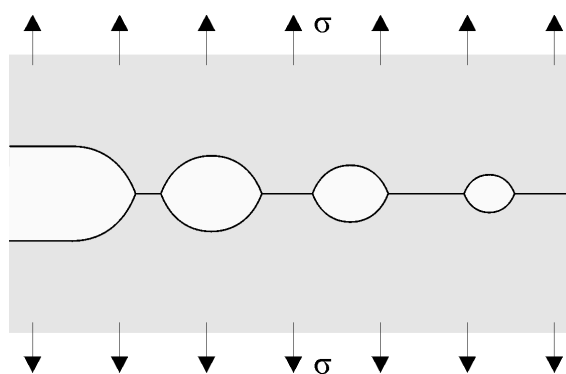
pól kontroluje wzrost pustki. Wielkość pola dyfuzyjnego jest wyznaczona przez odległość, na jaką są odkładane atomy z pustki. W modelu dyfuzyjnym atomy musiały być odkładane na całej granicy, natomiast w modelu sprzężonym przyrost grubości granicy (czyli odkształcenie pola dyfuzyjnego) może być akomodowany przez odkształcenie pola pełzania. Jeżeli dyfuzja jest silniejsza, to pole dyfuzyjne jest większe i wzrost pustki jest kontrolowany głównie przez dyfuzję. Zachodzi to dla niskich prędkości odkształcenia w wysokich temperaturach. W niskich temperaturach pole dyfuzyjne jest mniejsze i proces jest kontrolowany przez odkształcenie pełzania. W obszarze, gdzie sprzężenie jest istotne, prowadzi ono do większych wartości prędkości wzrostu pustek, niż suma obu mechanizmów. Według Needlemana i Rice'a [125] dla czystych metali jest to zakres dla temperatur większych niż 0.5 temperatury homologicznej i naprężeń większych niż 10^{-3} modułu ścinania.

Dla bardzo niskich naprężeń i temperatur pustki rosną bardzo powoli lub nawet nie rosną wcale. Z rozważań energetycznych wynika, że poniżej naprężenia progowego rozmiar pustki maleje (zob. [150]).

Inicjacja i wzrost szczelin klinowych

Przy zwiększeniu prędkości odkształcenia i zmniejszeniu temperatury oprócz pustek międzykrystalicznych pojawiają się szczeliny klinowe. Szczeliny klinowe obserwuje się na granicach pod kątem powyżej 60° do kierunku rozciągania. Inicjują się one w tzw. punktach potrójnych – styku trzech lub więcej ziaren. Szczeliny te powstają głównie na skutek poślizgu sąsiednich granic, opis ich powstawania przedstawili Chang i Grant [23].

Według różnych prac teoretycznych zakres parametrów, dla których wzrost szczelin klinowych jest stabilny, jest bardzo mały. Dlatego powszechnie przyjmuje się, że ich wzrost następuje poprzez mechanizm kawitacyjny (rys. 2.19). Dodatkowo bardzo trudno odróżnić, czy szczelina powstała jako szczelina klinowa, czy poprzez połączenie się pustek, gdyż szczeliny o gładkich ściankach mają swoją kontynuację w postaci pustek na granicy ziaren.



Rys. 2.19. Schemat wzrostu szczeliny poprzez łączenie się pustek.

2.2.3.3 Zniszczenie mieszane

Z obserwacji wynika, że istnieje znaczny obszar w przestrzeni naprężenie – temperatura, gdzie występuje zarówno zniszczenie transkrystaliczne i międzykrystaliczne. Na mapach zniszczenia Ashby'ego (rys. 2.14) oznaczone to jest przez zacienioną strefę wokół granicy rozdzielającej oba te obszary.

W trakcie próby jeden mechanizm może też zamieniać się w drugi, dając w efekcie powierzchnie przełomu o cechach obydwu mechanizmów. Przedstawiony powyżej model sprzężonego dyfuzyjnego-odkształceniowego wzrostu pustek zakłada, że małe pustki rosną dyfuzyjnie, co sprzyja zniszczeniu międzykrystalicznemu,

natomiast duże rosną odkształceniowo. Jeżeli więc w materiale, w danych warunkach, występują pustki małe i duże, linia przelomu może mieć charakter mieszany.

Zmiana taka może też następować z powodu wzrostu naprężenia efektywnego (redukcja przekroju) i uaktywnienia się mechanizmów związanych z większą prędkością odkształceń. Innym powodem może być też zmiana stanu naprężenia w związku z redystrybucją naprężeń. Nie jest do końca zbadane, jaki stan naprężenia sprzyja rozwojowi pustek wewnątrz ziaren, a jaki na ich granicach. W testach rozciągania próbki z karbem obserwuje się zmianę rodzaju zniszczenia z jednego w drugi w zależności od promienia karbu (zob. np. [127]).

2.2.3.4 Formowanie i wzrost makroszczelin

Po etapie wzrostu pustek następuje proces ich łączenia się (koalescencja). Jeżeli szczelina przekroczy rozmiar kilku ziaren, staje się makroszczeliną. Większość obserwowanych szczelin ma rozmiar będący wielokrotnością rozmiaru ścianki ziarna. Sugeruje to, że prędkość wzrostu szczeliny wzdłuż jednej ścianki jest dużo większa niż propagacja z jednej ścianki na drugą, a propagacja szczeliny odbywa się skokowo (zob. [48], [41]). Makroszczelina może przez długi okres czasu rozwijać się stabilnie. Stabilny rozwój szczeliny odbywa się głównie poprzez wzrost i łączenie się pustek ze szczeliną. Po osiągnięciu długości krytycznej wzrost szczeliny staje się niestabilny i materiał ulega zniszczeniu.

2.2.4 Modele mikromechaniczne

Na podstawie poznanych mechanizmów rozwoju uszkodzeń w materiale powstało wiele modeli mikromechanicznych, próbujących powiązać parametry struktury materiału z rozwojem uszkodzeń i dla znanego wymuszenia (np. naprężenie), w danych warunkach (temperatura), wyznaczyć odpowiedź materiału (odkształcenie, czas do zniszczenia). Weryfikacji takich modeli można dokonać nie tylko przez pomiar wielkości makroskopowych, ale także mikroskopowych.

2.2.4.1 Mikromechaniczne miary uszkodzenia

W modelach mikromechanicznych przyjmuje się różne miary uszkodzenia.

Najprostszą miarą jest *gęstość liczby pustek*, czyli liczba pustek na jednostkę objętości. Używa się też miary, gdzie liczbę pustek odnosi się do powierzchni przekroju lub do powierzchni ścianek granic ziaren. Parametry są te ze sobą powiązane poprzez relacje stereologiczne [44]. Wynika z nich, że badając dowolny przekrój, nie da się dokładnie wyznaczyć liczby pustek na jednostkę objętości, gdyż pomiar zależy też od średniej wielkości pustki, czyli nie da się precyzyjnie odseparować ilości od wielkości pustki. Dyson i McLean [46] używali stosunku ilości pustek do odkształcenia jako miary ciągliwości materiału. Gęstość liczby pustek nie może być samodzielnym parametrem opisującym zniszczenie, gdyż nie uwzględnia wzrostu pustek, ani ich koalescencji, dlatego łącząc liczbę pustek z modelem wzrostu pojedynczej pustki, można otrzymać miary bardziej adekwatne, jak gęstość powierzchniowa pustek lub gęstość objętościowa pustek (zob. [115]).

Gęstość powierzchniowa pustek jest parametrem najbliższym parametrowi uszkodzenia Kaczanowa. Liczy się ją zwykle jako powierzchnię zajętą przez pustki w stosunku do powierzchni granic prostopadłych do kierunku rozciągania. Jako miarę zniszczenia można uznać wtedy wielkość 100%. Jeżeli gęstość powierzchniowa pustek jest liczona w stosunku do powierzchni przekroju, wtedy staje się podobna do następnej miary – gęstości objętościowej, w tym wypadku przy zniszczeniu osiąga ona wartość kilku procent (zob. [155]).

Gęstość objętościową pustek jest liczona jako stosunek objętości pustek do objętości całkowitej. Mierzy się ją głównie przy pomocy dokładnych pomiarów gęstości. Inne metody pomiaru polegają na zliczaniu i mierzeniu pustek przy pomocy np. mikroskopów skaningowych (zob. [150]). Dla początkowego okresu pełzania gęstość objętościowa pustek jest proporcjonalna do odkształcenia, jednak potem zależność staje się silniejsza i gęstość objętościowa pustek rośnie szybciej niż odkształcenie, co opisano dokładniej w dalszej części pracy (rozdz. 2.2.4.4).

Do wyznaczenia czasu do zniszczenia można też użyć miary związanej z **długością szczeliny** magistralnej (głównej), co stanowi przedmiot badań mechaniki pęknięcia – w zastosowaniu do warunków pełzania zob. np. [77], [5].

Innego rodzaju miarą jest też **liczba zniszczonych ścianek** w RVE w stosunku do wszystkich ścianek o określonym kącie nachylenia względem kierunku rozciągania. Miarę tego typu stosował np. Delph [38] w probabilistycznym modelu zniszczenia regularnej struktury ziarnistej, porównując liczbę zniszczonych ścianek z liczbą wyznaczoną doświadczalnie. Podobną miarę zalecał też Riedel [150], który analizując teorię ograniczonego wzrostu pustek doszedł do wniosku, że właściwą miarą uszkodzenia materiału nie może być liczba i rozmiar pustek, a powinna nią być liczba ścianek nieprzenoszących obciążenia.

2.2.4.2 Modele nukleacji pustek

Na podstawie doświadczeń uważa się, że ilość pustek w początkowym okresie pełzania jest proporcjonalna do odkształcenia. Powszechnie stosuje się model Greenwooda [68], [69]:

$$\dot{N}_v = A_4 \sigma^2 \dot{\epsilon}, \quad (2.56)$$

gdzie A_4 oznacza stałą materiałową, N_v liczbę pustek na jednostkę objętości, σ przyłożone naprężenie normalne, $\dot{\epsilon}$ prędkość odkształcenia w kierunku rozciągania. Model ten został rozwinięty przez Raja i Ashby'ego [147], którzy policzyli zmianę energii swobodnej potrzebnej do utworzenia pustki o rozmiarze r :

$$\Delta G = -r^3 F_v \sigma + r^2 \gamma_s F_s - r^2 \gamma_{gb} F_{gb}, \quad (2.57)$$

gdzie F_v , F_s , F_{gb} to współczynniki zależne od kształtu pustki, γ_s , γ_{gb} energie powierzchni swobodnej i powierzchni granicy między ziarnami. Prędkość nukleacji jest określona jako

$$\dot{N}_a = N_0 D_{gb} \exp\left(\frac{-\Delta G^*}{kT}\right), \quad (2.58)$$

gdzie N_a jest liczbą pustek na jednostkę powierzchni ścianki granicy, N_0 jest gęstością powierzchniową potencjalnych miejsc nukleacji (na jednostkę powierzchni granicy), D_{gb} współczynnikiem dyfuzji po granicach ziaren, ΔG^* zmianą energii swobodnej dla pustki o rozmiarze krytycznym, T oznacza temperaturę, k stałą Boltzmana. W modelu tym prędkość nukleacji zależy głównie od naprężenia i kształtu pustki. Krytyczny rozmiar pustki można obliczyć znajdując ekstremum ΔG w zależności od r .

Rozwiązanie równania $\frac{\partial \Delta G}{\partial r} = 0$ prowadzi do:

$$r_0 = \frac{2\gamma_s}{\sigma}. \quad (2.59)$$

Model ten wraz z licznymi jego modyfikacjami ma jednak szereg wad. Po pierwsze, wyliczone naprężenie potrzebne do nukleacji jest za wysokie w stosunku do obserwowanego, po drugie wynika z niego, że nukleacja następuje natychmiastowo, a obserwuje się ciągłą nukleację, po trzecie z doświadczeń wynika, że nukleacja zależy od odkształcenia, a nie od naprężenia. Opisuje to empiryczne równanie (por. [44]):

$$\dot{N}_a = \alpha' \dot{\epsilon}, \quad (2.60)$$

gdzie α' oznacza stałą materiałową.

Dokładniejsza analiza różnych doświadczeń przeprowadzona przez Dysona [44] wykazała, że liczba pustek jest liniowa do pewnej granicy, gdzie następuje jej nasycenie. Dyson powiązał to zjawisko z gęstością wtrąceń w granicy i uzyskał następujący wzór na ilość pustek na powierzchnię granicy:

$$N_a = f(\sigma_1) N_p (1 - \exp(-K\epsilon)), \quad (2.61)$$

gdzie K jest stałą materiałową, N_p jest gęstością wtrąceń, $f(\sigma_1)$ jest funkcją opisującą zależność od maksymalnego naprężenia głównego. Dla małych odkształceń wzór ten określa zależność liniową $N_a = f(\sigma_1) N_p K\epsilon$, natomiast dla dużych dąży asymptotycznie do $f(\sigma_1) N_p$.

2.2.4.3 Modele wzrostu pustek

Modele wzrostu odkształceniowego

Najprostszy model wzrostu pustek polega na wzroście poprzez odkształcenie pełzania otaczającej materii. Analogiczny do wzoru na wzrost pustki w polu odkształcenia plastycznego McClintock'a [111] z 1968, wzór na wzrost promienia pustki w przypadku liniowej lepkosprężystości podał w 1976 Hancock [73]:

$$\dot{r} = r\dot{\epsilon} - \frac{\gamma}{2\mu}, \quad (2.62)$$

gdzie μ to lepkosprężysty moduł ścinania, γ energia powierzchniowa, $\dot{\epsilon}$ prędkość odkształcenia w kierunku rozciągania.

Podobny wzór dla pełzania podał Riedel [150], który uwzględnił kształt pustki i stan naprężenia:

$$\dot{r} = \frac{\Lambda r \dot{\epsilon}}{3h(\psi)}, \quad (2.63)$$

gdzie $h(\psi)$ oznacza stosunek objętości pustki do objętości kuli o tym samym promieniu, ψ oznacza kąt, jaki tworzy powierzchnia pustki z powierzchnią granicy (zob. rys. 2.20, np. $h=0.61$ dla $\psi=70^\circ$), a stała Λ zależy od stanu naprężenia (np. dla jednoosiowego rozciągania $\Lambda=1.1$).

Rozważając kolistą pustką otoczoną przez pełzającą materię Cocks i Ashby [32] wyprowadzili komplet równań określających zarówno wzrost pustki, jak i całkowite odkształcenie:

$$\dot{\omega} = \frac{\dot{\epsilon}_{\min}}{\alpha} \left\{ \frac{1}{(1-\omega)^n} - (1-\omega) \right\}, \quad (2.64)$$

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_{\min} \left\{ 1 + \frac{2r_0}{\alpha d} \left(\frac{1}{(1-\omega)^n} - 1 \right) \right\}, \quad (2.65)$$

gdzie $\omega = (2r/\lambda)^2$ jest gęstością powierzchniową pustek (λ to odległość między pustkami), $\dot{\epsilon}_{\min}$ to minimalna prędkość odkształcenia, r_0 – początkowy promień pustki, d – średnica ziarna. Parametr α określa stan naprężenia:

$$\alpha = \frac{1}{\sinh \left(2 \frac{n-1/2}{n+1/2} \left(\frac{\sigma_{\min}}{\sigma_{\text{eff}}} \right) \right)}, \quad (2.66)$$

np. dla jednoosiowego rozciągania i $n=5$ $\alpha=1.745$. Cocks i Ashby zwrócili też uwagę na podobieństwo tych wzorów do równań kontynuualnej mechaniki uszkodzeń, gdzie parametr ω jest parametrem uszkodzenia.

Modele wzrostu dyfuzyjnego (nieograniczonego)

Pierwszy model dyfuzyjnego wzrostu pustek zaproponowali Hull i Rimmer [82] (w 1959). Później rozwijali go Speight i Harris [164], Raj i Ashby [5] i in. Wzór na pochodną po czasie promienia pustki sferycznej dla dyfuzyjnego wzrostu pustek można przedstawić następująco (por. [88]):

$$\dot{r} = \frac{\Omega \delta D_{\text{gb}} \left(\sigma - \frac{2\gamma_s}{r} \right)}{2kT\lambda r}, \quad (2.67)$$

gdzie Ω to objętość atomowa, δ grubość granicy, λ odstęp między pustkami, D_{gb} współczynnik dyfuzji po granicach ziaren, γ_s energia powierzchniowa granicy między ziarnami, σ przyłożone naprężenie.

W modelu wzrostu dyfuzyjnego zakłada się, że naprężenie działające na granicy jest źródłem nadmiarowej kondensacji wakansów, umożliwiając ich dyfuzyjny ruch. Riedel [150] poprawił rozkład naprężenia na granicy ziarna wokół pustki, a także uwzględnił kształt pustki oraz efekt „jacking” – przemieszczenie się ziaren na skutek odkładania się atomów na granicy. Oznaczając przez $\omega = \left(\frac{2r}{\lambda} \right)^2$ udział pustek w powierzchni granic ziaren (powierzchniowa gęstość pustek), przyrost pustki można wyrazić jako:

$$\dot{r} = \frac{2\Omega \delta D_{\text{gb}} (\sigma - (1-\omega)\sigma_0)}{h(\psi)q(\omega)r^2kT}, \quad (2.68)$$

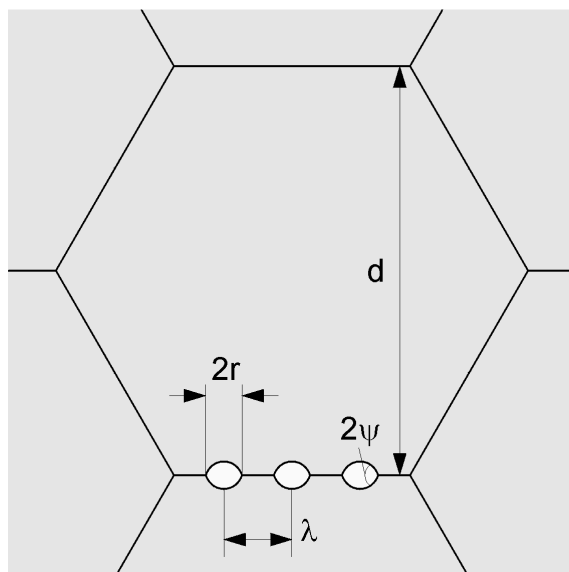
gdzie

$$q(\omega) = -2\ln \omega - (3-\omega)(1-\omega), \quad (2.69)$$

natomiast naprężenie progowe:

$$\sigma_0 = \frac{2\gamma_s \sin \psi}{r}. \quad (2.70)$$

Dla pustek, gdzie dyfuzja powierzchniowa zapewnia kształt równowagowy ψ wynosi ok. 75° – kąt ten zależy od stosunku energii powierzchni granicy ziaren do energii powierzchni swobodnej.



Rys. 2.20. Parametry używane w równaniach wzrostu pustek.

W przypadku, gdy dyfuzja powierzchniowa ogranicza wzrost pustek powstają pustki płaskie, szczelinowe. Model taki opisywali: Chuang i Rice [30], Needleman i Rice [125], Cocks i Ashby [33]. Model wzrostu takich pustek charakteryzuje się zależnością od trzeciej potęgi naprężenia:

$$\dot{r} = \frac{\Omega \delta D_s}{2kT\gamma_s^2} \sigma^3, \quad (2.71)$$

gdzie D_s jest współczynnikiem dyfuzji powierzchniowej. Dokładniejszy wzór wyprowadzony przez Riedla [150] można przybliżyć do dwóch skrajnych przypadków – zależności od trzeciej potęgi naprężenia dla bardzo powolnej dyfuzji powierzchniowej:

$$\dot{r} = \frac{\Omega \delta D_s}{8kT\gamma_s^2} \left(\frac{\sigma}{(1-\omega)\sin(\psi/2)} \right)^3 \quad (2.72)$$

i zależności od $3/2$ potęgi naprężenia dla trochę szybszej dyfuzji powierzchniowej oraz większych naprężeń:

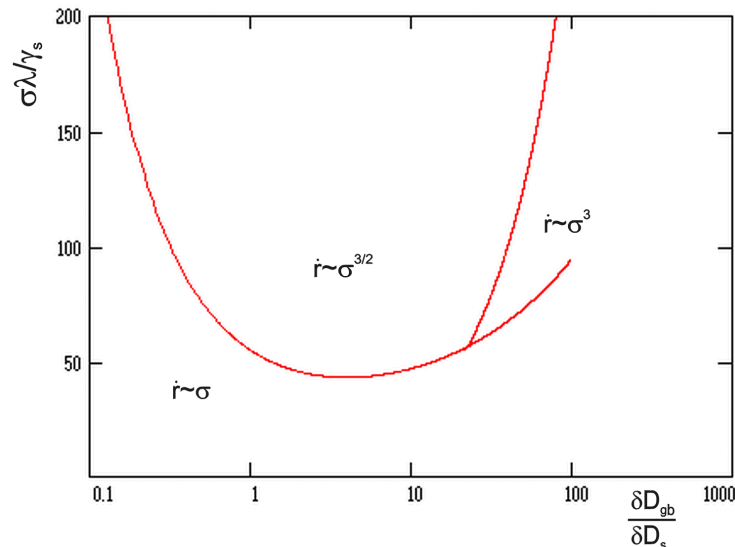
$$\dot{r} = \frac{\Omega}{kT\sqrt{\gamma_s\delta D_s}} \left(\frac{3\delta D_{gb}\sigma}{2\lambda Q(1-\omega)^2 \sin(\psi/2)} \right)^{3/2}, \quad (2.73)$$

gdzie Q jest określone wzorem:

$$Q = \frac{3\sqrt{\omega q(\omega)}}{4(1-\omega)^3}. \quad (2.74)$$

Teoretyczną mapę dominującego mechanizmu przedstawia rys. 2.21. W zależności od poziomu naprężenia i relacji dyfuzji po granicach ziaren do dyfuzji powierzchniowej wyróżnia on trzy obszary. Dla bardzo szybkiej dyfuzji

powierzchniowej lub niskiego poziomu naprężenia występuje zależność prędkości wzrostu promienia pustki od pierwszej potęgi naprężenia, z kolei dla wolniejszej dyfuzji powierzchniowej od potęgi 3/2 a dla najwolniejszej dyfuzji powierzchniowej zależność od 3 potęgi.



Rys. 2.21. Teoretyczna mapa mechanizmów wzrostu pustek (według [150]).

Modele ograniczonego dyfuzyjnego wzrostu

Oryginalny model ograniczonego dyfuzyjnego wzrostu pustek Dysona [43] był rozwijany przez wielu badaczy: Rice'a [149], Cocksa i Ashby'ego [33], Tvergaard [171] i innych. W modelach tych założony jest dyfuzyjny wzrost pustek, przy czym naprężenie rozciągające działające na granicy jest zmniejszone o naprężenie ściskające, wynikające z odkształcenia ziaren. Riedel [150] wyliczył naprężenie wypadkowe, korzystając z założenia, że prędkość wzrostu dyfuzyjnego jest równa prędkości wzrostu poprzez odkształcenia pełzania (por. z równaniem 2.68):

$$\dot{r} = \frac{\sigma - (1 - \omega)\sigma_0}{\frac{h(\psi)q(\omega)r^2kT}{2\Omega\delta D_{gb}} + \frac{\pi^2 h(\psi)\omega\sigma_{eff}\sqrt{1+3/n}}{4d\dot{\epsilon}_s}}, \quad (2.75)$$

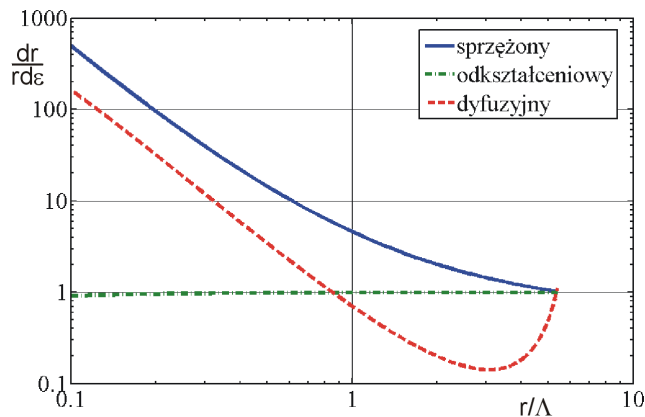
gdzie σ_0 i $q(\omega)$ są zdefiniowane przez równania (2.70) i (2.69), σ to przyłożone naprężenie normalne, σ_{eff} , $\dot{\epsilon}_s$ intensywność naprężenia i prędkość pełzania ustalonego. Wzór ten daje dobrą zgodność z doświadczeniami, gdy modele nieograniczonego wzrostu dają zbyt duże prędkości wzrostu pustek. Dla dużych naprężeń, gdy akomodacja wzrostu przez ziarna jest łatwa, oba modele zbliżają się do siebie i dają podobne wartości.

Modele sprzężonego dyfuzyjno-odkształceniowego wzrostu

Pierwsi (w 1978) model sprzężonego dyfuzyjno-odkształceniowego wzrostu zaproponowali Beere i Speight [10]. Istotnym parametrem tego modelu jest rozmiar pola dyfuzyjnego Λ . Według Needlemana i Rice'a [125] wynosi ono:

$$\Lambda = \left(\frac{\Omega\delta D_{gb}\sigma}{kT\dot{\epsilon}} \right)^{1/3}, \quad (2.76)$$

gdzie σ oznacza przyłożone naprężenie normalne, $\dot{\epsilon}$ prędkość pełzania.



Rys. 2.22. Względna prędkość wzrostu promienia pustki według modelu sprężonego Chena-Argona w porównaniu z modelem wzrostu dyfuzyjnego i odkształceniowego.

Natomiast Chen i Argon [25] podają następujący wzór na przyrost objętości pustki przez mechanizm sprężony :

$$\dot{v} = \frac{2\pi\Lambda^3\dot{\epsilon}}{\ln\left(\frac{r+\Lambda}{r}\right) + \left(\frac{r}{r+\Lambda}\right)^2 \left(1 - \frac{1}{4}\left(\frac{r}{r+\Lambda}\right)^2\right) - \frac{3}{4}}. \quad (2.77)$$

Z modelu tego wynika, że zmiana mechanizmu następuje podczas wzrostu pustek. Małe pustki rosną głównie dyfuzyjnie, natomiast dla większych pustek zaczyna dominować wzrost odkształceniowy (zob. rys. 2.22). Z wykresu widać, że zmiana mechanizmu następuje dla $r = \Lambda$ (w przybliżeniu).

2.2.4.4 Fenomenologiczne modele zmiany objętości pustek

Pomiary ilości i wielkości pustek obarczone są ze swej natury błędem (niemożliwe jest całkowite odseparowanie pomiaru ilości i wielkości zob. [44], [122]), dlatego nie da się dokładnie zweryfikować teorii mikromechanicznych w oparciu o te parametry. Bardziej niezależną miarą jest objętość pustek, którą można zmierzyć przy pomocy dokładnych pomiarów gęstości. Oczywiście pomiary te także są obarczone błędem, jednak natura ich jest inna, przez co mogą służyć do dodatkowej weryfikacji teorii.

Znając równanie na wielkość pojedynczej pustki v i przyrost liczby pustek w czasie \dot{N} można obliczyć całkowitą objętość pustek V_v w czasie t :

$$V_v(t) = \int_0^t v\dot{N}d\tau. \quad (2.78)$$

Używając na przykład zależności Greenwooda (2.56), gdzie $N \sim \epsilon\sigma^2$ i prostego modelu wzrostu dyfuzyjnego $v \sim t\sigma$, całkowitą objętość pustek można określić jako $\sim \epsilon t\sigma^2$. Tak wyznaczona zależność teoretyczna jest porównywalna z wielkością określoną doświadczalnie na podstawie pomiarów gęstości.

Jako miarę rozwoju uszkodzeń przyjmując się często względną zmianę gęstości $-\frac{\Delta\rho}{\rho_0}$, gdzie $\Delta\rho = \rho - \rho_0$ oznacza zmianę gęstości, ρ_0 gęstość początkowa.

Zakładając, że gęstość materii poza pustakami jest stała, miara ta jest proporcjonalna do objętości pustek:

$$-\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = -\frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \frac{M}{M} = \frac{V_0 - V}{V_0} = \frac{V_v}{V_0}, \quad (2.79)$$

gdzie M jest masą rozważanej próbki, V , V_0 są bieżącą i początkową całkowitą objętością próbki, a V_v jest objętością pustek. Miara ta jest podobna do objętościowej gęstości pustek, która jest definiowana następująco:

$$f_v = \frac{V - V_m}{V} = \frac{V_v}{V}, \quad (2.80)$$

gdzie V_m jest objętością fazy stałej (masowej), którą można uznać za równą objętości początkowej V_0 , pomijając początkową objętość pustek.

Pierwsze badania zmiany gęstości podczas pełzania zostały wykonane przez Hansona i Wheelera w 1931 [74] dla aluminium. Wynika z nich, że dla danego obciążenia i temperatury zmiana gęstości jest proporcjonalna do t^3 . Następne dokładne badania zostały przeprowadzone dopiero 30 lat później. Boettner, Robertson [16] badali miedź w różnych warunkach i o różnej mikrostrukturze. Zaobserwowali zmiany gęstości do ok. 3%. Wykazali m.in., że pojedynczy kryształ nie zmienia gęstości podczas pełzania, czyli obecność pustek jest związana z granicami ziaren. Według badań Gittinsa [64] gęstość miedzi dla badanego obciążenia i temperatury zmienia się jak $t^{1.5}$. Bowering, Davies, Wilshire [18] dla stopu niklu również zaobserwowali zależność od czasu ($\sim t^{1.7}$), ale zwrócili uwagę na liniową zależność od odkształcenia dla późniejszych etapów pełzania $-\frac{\Delta\rho}{\rho_0} \sim (\epsilon - \epsilon^*)$, gdzie ϵ^* jest pewnym

charakterystycznym odkształceniem związanym z początkiem drugiego etapu pełzania. W 1969 roku Woodford wykazał [180], że w stałej temperaturze dane Boettnera i Robertsona można opisać zależnością:

$$-\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = A\epsilon t\sigma^{2.3}, \quad (2.81)$$

gdzie A jest stałą zależną m.in. od temperatury. Podobny wzór empiryczny uzyskał dla niklu:

$$-\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = A\epsilon t\sigma^q, \quad (2.82)$$

gdzie wykładnik $q=7.5$. Piatti, Kellerer i Geel [140] dla stopu aluminium przy stałej sile i temperaturze uzyskali zależność $\sim \epsilon^{1.3}$. Needham, Wheatley i Greenwood w 1975 [124] dla magnezu wykazali, że zmianę gęstości można opisać równaniem (2.82) dla $q=3$, jednak dla większych zmian gęstości zależność ta przyjmuje postać $\sim (\epsilon t\sigma^3)^{1.5}$. Wykazali też, że dane Boweringa, Daviesa i Wilshire'a można opisać zależnością (2.82) dla $q=2.2$. Belloni, Bernasconi i Piatti [11] zestawili dotychczasowe badania nad zmianami gęstości oraz wyniki uzyskane we własnych doświadczeniach dla stali austenicznej AISI 310. Przy pomocy metod analizy statystycznej, badali, od jakiego parametru zależy zmiana gęstości, uzyskując wynik, że zależy ona przede wszystkim od odkształcenia:

$$-\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = H\epsilon^\gamma. \quad (2.83)$$

Parametr γ dla badanej stali w przedziale naprężeń 216÷270 MPa i temperatur 600÷670°C wykazał niewielką zmienność w zakresie 0.65÷0.85.

Needham i Gladman [122] badając zależność od czasu wyznaczyli, że zmiana gęstości $\sim t^p$, gdzie $p=1.6\div 2.8$ w zależności od naprężenia i temperatury lub od odkształcenia $\sim \epsilon^\gamma$, gdzie $\gamma=1.3\div 4.9$. Dopasowali też swoje wyniki do równania (2.82) otrzymując $q=4$. Miller i Langdon [115] wprowadzili do wzoru (2.82) znormalizowane naprężenie (dzieląc przez moduł ścinania G) i porównując wyniki Boettnera i Robertsona z innymi, późniejszymi wynikami dla miedzi zauważyli, że mniejsze ziarna dają większą względną zmianę gęstości.

Z powyższego przeglądu wynika, że trudno jest ustalić jednoznaczne prawo fenomenologiczne, które opisywałoby poprawnie wszystkie doświadczenia. Nawet najczęściej stosowane równanie (2.82) przy bliższym przyjrzeniu się danym nie zawsze jest spełnione. Prawdopodobnie nie jest możliwe ustalenie jednego prawa opisującego zmianę gęstości. Różnice mogą też wynikać z różnych metod pomiaru gęstości (np. różnie mierzona gęstość początkowa). Niezależnie od tego dane doświadczalne stanowią w miarę dokładny ilościowy opis zjawiska wzrostu pustek podczas pełzania i mogą służyć weryfikacji modeli teoretycznych.

2.2.4.5 Kryteria zniszczenia

Oszacowanie czasu do zniszczenia materiału na podstawie modelu mikromechanicznego jest zagadnieniem dużo bardziej złożonym niż oszacowanie prędkości wzrostu pustek. Często czas zniszczenia jest utożsamiany z czasem do połączenia się (koalescencji) pustek. Czas ten można policzyć przy założeniu natychmiastowej nukleacji, całkując równanie wzrostu pustek od promienia $r=r_0$ do promienia $r=\lambda/2$.

Dla odkształceniowego wzrostu pustek opisanego równ. (2.64)-(2.65) Cocks i Ashby [32] wyznaczyli następujące równanie na czas do koalescencji pustek przy obciążeniu stałym naprężeniem:

$$t_c = t_0 + \frac{\alpha}{(n+1)\dot{\epsilon}_s} \ln\left(\frac{1}{(n+1)\omega_0}\right), \quad (2.84)$$

gdzie t_0 jest czasem nukleacji pustek, ω_0 jest gęstością powierzchniową pustek podczas nukleacji, α jest określone przez równ. (2.66). Przy założeniu obciążenia stałą siłą równania wzrostu odkształceniowego dają następujący czas do koalescencji:

$$t_c = \left\{ (n+1)\omega_0 \right\}^{\frac{n}{n+1}\alpha} t_0 + \frac{1 - \left\{ (n+1)\omega_0 \right\}^{\frac{n}{n+1}\alpha}}{n\dot{\epsilon}_s}. \quad (2.85)$$

Z równań tych dla bardzo dużych uszkodzeń początkowych $\omega_0 > 0.1$ otrzymuje się bardzo podobne wyniki. Natomiast dla uszkodzeń zmierzających do 0 ($\omega_0 \rightarrow 0$) równanie (2.85) daje wyniki dążący do czasu Hoffa (2.17), natomiast z równania (2.84) otrzymuje się czasy nieskończenie duże.

Dla ograniczonego dyfuzyjnego wzrostu pustek Riedel [150] podał następujący wzór (zakładając, że r_0 jest pomijalnie małe):

$$t_c = 0.006 \frac{h(\psi)kT\lambda^3}{\Omega\delta D_{gb}\sigma_1} + 0.4 \frac{h(\psi)\lambda\sqrt{1+3/n}}{\dot{\epsilon}_{eff}(\sigma_1/\sigma_{eff})d}, \quad (2.86)$$

gdzie σ_1 maksymalne naprężenie główne, σ_{eff} intensywność naprężenia, $\dot{\epsilon}_{eff}$ intensywność prędkości pełzania). Pierwszy człon tego wzoru odpowiada czasowi do połączenia pustek dla nieograniczonego dyfuzyjnego wzrostu, natomiast drugi człon wskazuje na zwiększenie czasu na skutek ograniczenia wzrostu.

Czas do połączenia się pustek na pojedynczej ściance przy założeniu ciągłej nukleacji (o stałej prędkości) i modelu ograniczonego dyfuzyjnego wzrostu pustek można wyrazić wzorem (por. [88]):

$$t_c = 0.38 \left(\frac{\pi(1+3/n)}{\dot{N}_a} \right)^{1/3} \frac{\omega_f}{(\dot{\epsilon}_{eff}d)^{2/3}}, \quad (2.87)$$

gdzie \dot{N}_a jest prędkością nukleacji pustek na jednostkę powierzchni granicy, ω_f – wartość powierzchniowej gęstości pustek w momencie połączenia się pustek. W niektórych przypadkach wzór ten daje bardzo dobrą zgodność z doświadczeniem (zob. [150], [88]).

Czas do połączenia się pustek można uznać za czas do zniszczenia tylko wtedy, gdy dalszy proces przebiega natychmiastowo. Tak nie jest w każdym przypadku. Model ograniczonego wzrostu zakłada, że nie wszystkie ścianki (z tych prostopadłych do kierunku rozciągania) kawitują w tym samym czasie. Potrzebny jest dodatkowy czas, by na skutek relaksacji naprężenia zaczęły się rozwijać pustki na pozostałych ściankach i łączyć w szczelinę główną. Podobnie jest dla modeli zniszczenia ciągłego. Lemaitre i Desmorat [97] podają, że gęstość objętościowa pustek przy zniszczeniu plastycznym wynosi ok. 0.25, a przy koalescencji tylko 0.09. Ograniczenia te powodują rozwój innych metod szacowania czasu do zniszczenia. Metodami uwzględniającymi wpływ losowości struktury są metody probabilistyczne (zob. np. [38], [133]). Natomiast metody dyskretne (automaty komórkowe, dynamiki molekularnej zob. np. [118]) dobrze modelują interakcję pomiędzy sąsiednimi elementami struktury.

Innym sposobem na wyznaczenie kryterium zniszczenia jest doświadczalne oszacowanie krytycznej wartości mikromechanicznego parametru uszkodzenia (np. [11]). Wymaga to dużego zbioru danych eksperymentalnych. Podobnie też, jak w metodach makroskopowych ekstrapolacja poza zakres parametrów, dla których były wykonywane doświadczenia, wymaga dużej ostrożności (zob. [114]).

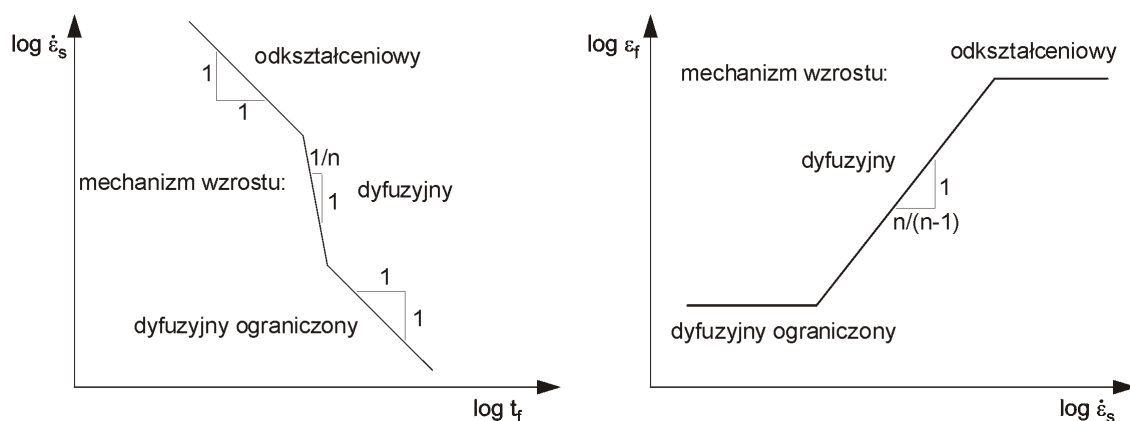
2.2.4.6 Wpływ mechanizmów na czas do zniszczenia i uszkodzenie przy zniszczeniu

Podsumowując, można stwierdzić, że na zniszczenie materiałów polikrystalicznych mają wpływ dwa mechanizmy: odkształceniowy i dyfuzyjny.

Mechanizm odkształceniowy powoduje stałe odkształcenie przy zniszczeniu, zatem czas do zniszczenia jest odwrotnie proporcjonalny do prędkości odkształcenia (zależnej od przyłożonego obciążenia). Obserwuje się dwa obszary dominacji mechanizmu odkształceniowego: dla dużych prędkości, gdy dyfuzja jest zbyt wolna, by brać zauważalną rolę w procesie rozwoju uszkodzeń i dla małych prędkości, gdzie dyfuzja jest ograniczona przez powoli zmieniające się odkształcenie.

Mechanizm dyfuzyjny dominuje w obszarze pośrednim. Jest to obszar bardzo istotny, gdyż w nim najczęściej znajdują się konstrukcje pracujące w warunkach pełzania. Także stopy żarowytrzymałe pracują głównie w warunkach sprzyjających

wzrostowi pustek przez dyfuzję (zob. [150]). Mechanizm dyfuzyjny zależy jest od wzajemnej relacji trzech rodzajów dyfuzji występujących w materiałach polikrystalicznych: dyfuzji objętościowej, dyfuzji po granicach ziaren i dyfuzji powierzchniowej. Dominacja dyfuzji objętościowej powinna sprzyjać wzrostowi pustek transkrystalicznych, natomiast dyfuzja po granicach ziaren zasila głównie pustki międzykrystaliczne. Szybka dyfuzja powierzchniowa zapewnia optymalny energetycznie sferyczny kształt pustek, natomiast powolna dyfuzja powierzchniowa sprzyja pustkom płaskim (szczelinowym), o wydłużonych kształtach (pustki dendryczne, palcowe).



Rys. 2.23. Schematyczny wykres czasu do zniszczenia (a) i odkształcenia przy zniszczeniu (b) dla różnych poziomów naprężeń uwzględniający różne modele rozwoju pustek (według [72]).

Schematyczny wykres czasu do zniszczenia dla różnych poziomów obciążenia uwzględniający różne modele rozwoju pustek, a także wykres ciągliwości (ang. *ductility*) w zależności od prędkości odkształcenia zostały przedstawione na rys. 2.23 według [72]. Mechanizmy o naturze odkształceniowej dają na wykresie logarytmicznym czasu do zniszczenia nachylenie równe -1. Jest to zgodne z relacją empiryczną Monkmana-Granta. Natomiast część dyfuzyjna jest nachylona dużo bardziej – współczynnik kierunkowy wynosi $1/n$. W doświadczeniach makroskopowych raczej nie spotyka się tak małych wartości wykładnika β z równ. (2.1), indeks pełzania n dla wielu metali jest równy około 5 (zob. np. rys. 2.13). Dla zniszczenia kruchego wartość wykładnika β wynosi około 0.7 (zob. [129]), można stąd wywnioskować, że na czas do zniszczenia nie wpływa tylko dyfuzyjny mechanizm wzrostu pustek, ale też odkształceniowy mechanizm nukleacji.

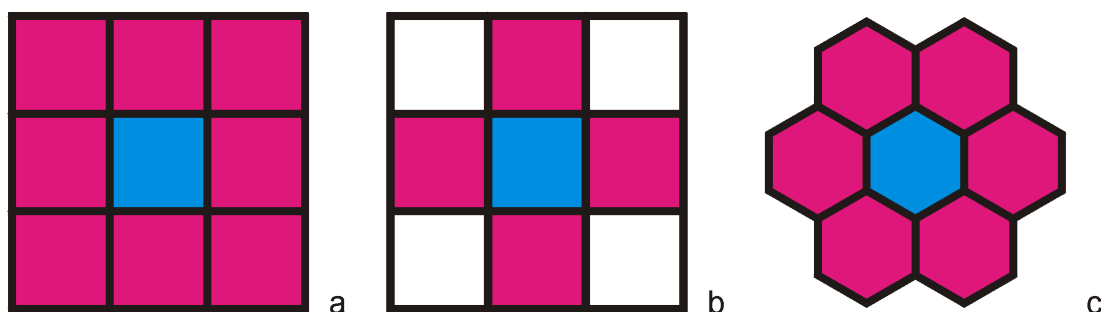
3 Zastosowanie automatów komórkowych

3.1 O automatach komórkowych

3.1.1 Historia

Pod koniec lat 40-tych ubiegłego wieku von Neumann (zob. [173], [174]), węgierski matematyk, pracujący w Princeton, chciał utworzyć sztuczny system, który naśladowałby ludzki mózg. System, w którym komórki pamięci i przetwarzania informacji nie są odseparowane, przetwarzanie odbywa się równolegle, elementy systemu są w stanie naprawiać się i rozbudowywać. Za sugestią Ulama utworzył dwuwymiarową siatkę prostych maszyn stanu zwanych komórkami, oddziałujących lokalnie na siebie, synchronicznie zmieniających swój stan. Wszystkie komórki używają tej samej reguły – system jest homogeniczny (jednorodny), na podobieństwo wielu systemów biologicznych i fizycznych.

Automaty dwuwymiarowe rozwijały się znacznie intensywniej niż prostsze automaty jednowymiarowe. Otoczenie 5-elementowe było wprowadzone przez von Neumanna (w 1952 według [179]), 9-elementowe otoczenie zdefiniował w 1962 Moore [117], Golay [66] używał do przetwarzania obrazów otoczenia heksagonalnego (7-elementowego). Obrazy otoczeń dwuwymiarowych przedstawiono na rys. 3.1. Ulam w latach 60-tych XX wieku badał wzory utworzone przez dwuwymiarowe automaty. Szczególną popularność w latach 70-tych zyskała Conway'a *Gra w życie* (ang. *Life*, zob. [59]), gdzie przy pomocy prostej reguły symulowano złożone zachowania populacji.



Rys. 3.1. Typowe otoczenia dwuwymiarowe: von Neumanna (a), Moora (b), heksagonalne (c).

Od lat 80-tych automaty komórkowe były rozpropagowane przez Wolframa jako narzędzie do modelowania złożonych procesów przy pomocy prostych reguł (zob. [178], [179]). Wolfram pokazał, że nawet dla najprostszej klasy jednowymiarowych automatów z 3-elementowym otoczeniem i binarną zmienną stanu (tzw. automaty elementarne) można utworzyć bardzo skomplikowane struktury. Wprowadził też najpowszechniejszą obecnie klasyfikację automatów, choć problem klasyfikacji nie został nigdy ostatecznie rozwiązany.

Możliwość zastosowania automatów komórkowych do wielu zagadnień fizycznych pojawiła się wraz ze wzrostem mocy komputerów (por. [102]). Znajdują one także zastosowanie do modelowania procesów chemicznych, biologicznych, socjologicznych i ekonomicznych (zob. [179], [106]).

W ostatnich latach pojawiło się wiele prac, które wykorzystują automaty komórkowe do modelowania zjawisk zachodzących w materiałach polikrystalicznych (np. [39], [143], [61]). W ostatnim 10-leciu pojawiły się też pierwsze próby opisanie rozwoju uszkodzeń przy pomocy automatów komórkowych (np. [110], [160]).

W latach 90-tych do uwzględnienia na poziomie makroskopowym zjawisk zachodzących w strukturze materiału zaczęto łączyć automaty komórkowe z metodą elementów skończonych (zob. [58]). Sukcesy w modelowaniu różnych mechanizmów jak: krystalizacji (zob. [57]), statycznej rekrytalizacji (zob. [144]), zniszczenia warstw tlenkowych (ang. *oxide scale failure*, zob. [36]) doprowadziły w 2002 do sformalizowania metody noszącej nazwę CAFE (ang. *Cellular Automata Finite Elements*, zob. [13]).

3.1.2 Podstawowe definicje

Według klasycznej definicji *automat komórkowy* składa się z (por. [92]):

- sieci komórek w dyskretnej przestrzeni D -wymiarowej \mathbf{X}^D ;
- zbioru stanów komórki $\mathbf{S}=\{s_j\}$
- reguły przejścia F określającej stan komórki w dyskretnej chwili t_{i+1} , w zależności od stanu komórki i komórek jej otaczających w chwili poprzedniej t_i .

$$s(\mathbf{x}, t_{i+1}) = F(\{s(y, t_i)\}), y \in O(\mathbf{x}). \quad (3.1)$$

Wszystkie komórki uaktualniane są jednocześnie. Otoczenie punktu definiuje się przy pomocy zbioru wektorów V należącego do przestrzeni \mathbf{X}^D o długości mniejszej lub równej promieniowi otoczenia r :

$$V = \{v \in \mathbf{X}^D : \|v\| \leq r\}, \quad (3.2)$$

gdzie norma $\| \cdot \|$ zależy od przyjętej miary odległości (por. [168], [2]), a otoczenie punktu x należącego do \mathbf{X}^D to

$$O(x) = \{x + v : v \in V\}. \quad (3.3)$$

Najczęściej używa się otoczenia o promieniu $r=1$. Najpowszechniejsze otoczenia to otoczenie von Neumanna, gdzie:

$$\|v\|_1 = |v_1| + \dots + |v_D| \quad (3.4)$$

i otoczenie Moore'a:

$$\|v\|_\infty = \max(|v_1|, \dots, |v_D|). \quad (3.5)$$

Dla przypadku dwuwymiarowego otoczenia te przedstawiono na rys 3.1.

Dla uniknięcia anizotropii wbudowanej w te otoczenia, często używa się też otoczenia heksagonalnego (zob. [61]) lub pseudoheksagonalnego (zob. [138]). To ostatnie jest bardzo wygodne do symulowania siatki sześciokątnej przy pomocy siatki kwadratowej.

Stan wszystkich komórek automatu w danej chwili nazywa się *konfiguracją automatu*. Konfiguracja jest elementem przestrzeni $\mathbf{S}^{\mathbf{X}^D}$. Istotnymi parametrami są też stan początkowy i rozmiar automatu.

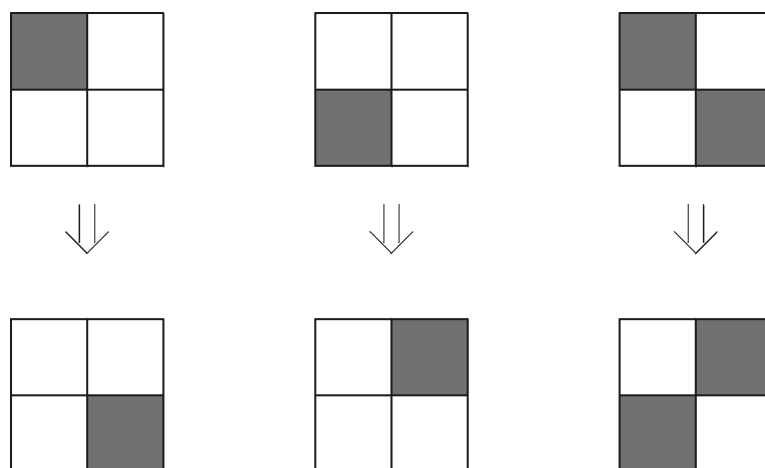
Idealny automat komórkowy ma nieskończone rozmiary. Jednak idea ta jest niemożliwa do realizacji. Jako przybliżenie automatów nieskończonych można uznać automaty, które zachowują stan próżni (ang. *quiescent state*). Jest to pewien wyróżniony stan (oznaczany zwykle jako 0) taki, że jeżeli wszystkie komórki otoczenia są w stanie próżni, to komórka centralna w następnym kroku też będzie w stanie próżni. W automatach takich, jeżeli obszar o „niezerowym” stanie początkowym zajmuje

skończony obszar, można wyznaczyć, jak szybko to początkowe zaburzenie będzie się rozprzestrzeniać (ang. *damage spreading*, por. [169], [7]), czyli wyznaczyć skończony rozmiar, który w zadanym czasie symulacji nie będzie przekroczony. Automaty o skończonym rozmiarze muszą mieć zdefiniowane warunki brzegowe. Najczęściej stosuje się stałe warunki brzegowe, poprzez dodanie komórek na brzegu automatu o takiej samej, niezmienniej wartości stanu. Innym rozwiązaniem są cykliczne warunki brzegowe, gdzie lewym sąsiadem pierwszej komórki jest ostatnia komórka, a prawym sąsiadem ostatniej komórki jest pierwsza.

3.1.2.1 Prawa zachowania

Wiele z ważnych zagadnień fizycznych ograniczonych jest przez prawa zachowania pewnych wielkości (masa, energia, pęd itp.). W automatach komórkowych symulujących zjawiska fizyczne wprowadza się też wielkości zachowawcze. Wielkość taka, będąca funkcją konfiguracji automatu, zachowuje stałą wartość dla wszystkich chwil czasowych. Najprostszym przykładem wielkości, które może podlegać prawu zachowania jest np. liczba jedynek w automacie zero-jedynkowym.

Szczególnie wygodne do tworzenia automatów spełniających prawo zachowania jest otoczenie Margolusa (zob. [108]). Polega ono na wyodrębnieniu bloków 2x2 zaczynając np. od nieparzystych współrzędnych. Reguła automatu działa w taki sposób, że żądana wielkość jest zachowana wewnątrz bloku (zob. rys. 3.2). W następnej iteracji układ bloków jest przesunięty, tak, by każdy z bloków zaczynał się od współrzędnej parzystej.



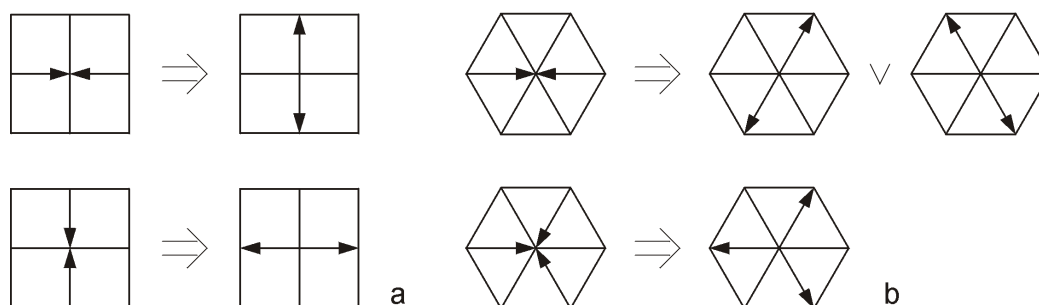
Rys. 3.2. Przykłady zmiany stanów dla bloku Margolusa zachowujące liczbę komórek „ciemnych”.

3.1.2.2 Automaty probabilistyczne

Automaty probabilistyczne to automaty, w których reguła przejścia określa prawdopodobieństwo zmiany stanu komórki w zależności od stanów komórek otoczenia (por. [53]). Spośród automatów probabilistycznych bardzo popularny jest model Isinga (zob. [42]). Pierwotnie służył on do opisu ferromagnetyków, gdzie komórki automatu opisywały spin atomu, przyjmujący ustaloną wartość dodatnią lub ujemną. Model ten preferuje stany, w których sąsiednie atomy mają taki sam spin, dodatkowo uwzględnia się działanie zewnętrznego pola magnetycznego. Układ dąży do stanu równowagi, który interpretuje się jako stan o minimalnej energii własnej. Reguła deterministyczna odpowiada temperaturze równej zero. Wpływ większych temperatur osiąga się przez wprowadzenie większego rozrzutu zmiennej losowej. Automaty probabilistyczne, w których używa się generatorów liczb losowych należą do szerszej klasy metod nazywanych metodami Monte Carlo.

3.1.2.3 Gaz sieciowy

Automaty komórkowe służące symulacji ruchu cząsteczek gazu lub cieczy są nazywane gazem sieciowym lub komórkowym (ang. *lattice gas*). Pierwszy model zaproponowany w 1973 przez Hardy'ego, Pomeau, de Pazzisa od nazwisk twórców nosi nazwę HPP (zob. [75]). Używa on siatki kwadratowej i sąsiedztwa von Neumanna. Zmienna stanu określa, czy w węźle sieci jest cząstka i z jaką prędkością się porusza. W najprostszym modelu prędkość jest jednostkowa i określona przez zwrot. Dla siatki kwadratowej w jednym węźle, w jednej chwili mogą się znaleźć cztery cząsteczki o czterech różnych prędkościach. Każda cząstka ma jednakową masę. Reguła automatu składa się z dwóch faz: pierwsza nazywana propagacją określa ruch cząsteczki z jednego węzła do drugiego zgodnie z jej prędkością, druga nazywana kolizją definiuje ewentualną zmianę kierunku ruchu, gdy dwie lub więcej cząstek znajdą się w jednym węźle. Model HPP spełnia równania przepływu płynu nieściśliwego Naviera-Stokes'a. Choć jest bardzo prosty i o ograniczonym zastosowaniu, doczekał się wielu udoskonaleń. Aby modelować zjawiska izotropowe, używa się siatki heksagonalnej zamiast kwadratowej (model FHP [51], zob. rys. 3.3b).



Rys. 3.3. Przykładowe reguły zderzeń dla modeli gazu sieciowego HPP (a) i FHP (b).

Do reguły opisującej kolizje wprowadzane mogą też być elementy probabilistyki. Istotny postęp został zrobiony po zastąpieniu pojedynczej cząstki gęstością cząstek w danym węźle sieci poruszających się w danym kierunku. Model taki nazywany jest gazem sieciowym Boltzmanna, ponieważ można go wyprowadzić z uproszczonych równań Boltzmanna (zob. [152]). Po kolizji następuje zmiana rozkładu gęstości w nowym stanie równowagi, zgodnie z prawami zachowania masy i energii.

Jednym z ważnych problemów badanych przy pomocy modeli rozwiniętych na podstawie gazu komórkowego jest *dyfuzja*. Prosty model dyfuzji polega na zamodelowaniu ruchu dwóch rodzajów cząstek poprzez wprowadzenie dodatkowej zmiennej stanu odpowiadającej rodzajowi cząstki (zob. [153]). Otrzymuje się w ten sposób mieszaninę, która zachowuje się zgodnie z prawem dyfuzji. Współczynnik dyfuzji zależy od reguły definiującej kolizję między różnymi cząsteczkami.

Przy pomocy automatów komórkowych można modelować też inne zjawiska związane z dyfuzją jak rozrost wtrąceń (ang. *precipitate coarsening*; zob. np. [182]) lub wzrost dendryczny w środowisku dyfuzyjnym (ang. *Diffusion-Limited Aggregation*, zob. np. [177]).

3.1.3 Zastosowania w materiałoznawstwie i mechanice materiałów

Od lat dziewięćdziesiątych automaty komórkowe zaczęły być intensywnie używane do modelowania ewolucji mikrostruktury w materiałoznawstwie (zob. [143]). Umożliwiają one połączenie pomiędzy symulacjami zjawisk zachodzących w skali mikroskopowej a makroskopowymi cechami materiału.

Automaty komórkowe opisują krystalizację, rekrystalizację, wzrost ziaren, przemiany fazowe, pozwalają na lepsze zrozumienie dynamiki i topologii mikrostruktur. Symulacje mogą być przeprowadzane na poziomie atomów, klastrów atomów, segmentów dyslokacji lub małych elementów. W odróżnieniu od metod operujących na funkcjach ciągłych ważny jest problem skali: wymiar jednostkowej komórki musi odpowiadać skali modelowanego zjawiska. Podobnie ze skalą czasową: dynamika reguły musi odpowiadać skali czasowej zjawiska. Szereg przykładów zastosowania automatów komórkowych do modelowania procesów statycznej rekrystalizacji i zdrowienia, formacji struktur dendrytycznych podczas krystalizacji, zjawiska nukleacji przedstawiono w pracy [143].

Do zamodelowania dendrytycznego wzrostu ziaren podczas krystalizacji Gandin i Rappaz [58] wykorzystują automat komórkowy sprzężony z metodą elementów skończonych (CAFE). Przy pomocy automatu opisują dendrytyczny wzrost kryształów, który zależy od rozkładu temperatury. Każda komórka zmienia swój stan od ciekłego do stałego. Przepływ ciepła jest liczony na poziomie makroskopowym używając MES. Sprzężenie jest dwukierunkowe, ponieważ stan komórek automatu wpływa zwrotnie na rozkład temperatury. Dendryczna krystalizacja opisana jest też m.in. w pracach [20], [107].

Dużo modeli opisuje procesy przemian fazowych. Np. symulacja przemiany fazowej austenitu w ferryt i perlit została przedstawiona w pracy [172]. Zmienne stanu każdej komórki opisują aktualną fazę lub granicę międzyfazową, a także koncentrację węgla.

Przemiany mikrostruktury stopów w procesie tiksformingu są opisane w pracach [60], [61] przy pomocy metody CAFE. Stan komórki reprezentuje fazę (stała lub ciekła) lub granicę międzyfazową, a reguły automatu opisują przejścia pomiędzy fazami. W zależności od udziału poszczególnych faz liczony jest współczynnik lepkości wykorzystywany w równaniach makroskopowych rozwiązywanych przy pomocy MES.

Stosunkowo mało jest prac modelujących zjawiska mechaniczne przy pomocy automatów komórkowych. Jako przykład można podać symulowanie kontaktu ciała sprężystego z ciałem sztywnym (zob. [1]). W modelu tym stany komórek reprezentują odkształcenie cząsteczek ciała sprężystego. Częściej spotkać można prace opisujące odkształcenia plastyczne lub rozwój uszkodzeń (zob. rozdz. 3.1.3.2 i 3.1.4).

Większość prac prezentuje modele dwuwymiarowe. Modele trójwymiarowe, choć bliższe rzeczywistości wymagają dużo większych zasobów mocy obliczeniowej. Automaty takie można znaleźć w pracach: [57], [37], [109].

3.1.3.1 Rekrystalizacja

Bardzo wiele różnych automatów komórkowych zostało zaprojektowanych do modelowania zjawiska rekrystalizacji (zob. m.in. [79], [138], [99], [65], [40], [143], [90], [91], [62], [165]).

Pierwsza (wg [90]) próba zastosowania automatu komórkowego do opisu statycznej rekrystalizacji została dokonana w 1991 przez Hesselbarth'a i Göbel'a [79].

Do zamodelowania procesu rozrostu ziaren Liu, Baudin, Penelle [99] użyli dwuwymiarowego automatu o bardzo prostej probabilistycznej regule. Zmienna stanu reprezentuje orientację krystalograficzną komórki. Komórki o tej samej orientacji tworzą ziarno. Stan początkowy jest otrzymywany poprzez losowe ustawienie orientacji każdej komórki. Zmiana orientacji następuje na skutek wpływu sąsiednich komórek. Badane jest sąsiedztwo von Neumanna. Stabilny jest stan komórki wówczas, gdy ma ona przynajmniej trzech sąsiadów o takiej samej orientacji jak komórka centralna.

Zmiana może nastąpić, gdy takich sąsiadów jest mniej. Nowa orientacja jest wybierana losowo spośród sąsiadów.

Goetz i Seetharaman [65] przy pomocy automatu komórkowego modelują krzywą rozciągania w warunkach dynamicznej rekrytalizacji. Zmienną stanu w każdej komórce jest gęstość dyslokacji, która ma losowy rozkład początkowy. Wzrost gęstości dyslokacji jest proporcjonalny do prędkości odkształcenia. Dwa procesy współuczestniczą w zmniejszeniu gęstości dyslokacji: dynamiczna rekrytalizacja nowych ziaren i dynamiczne zdrowienie. W zależności od założonej prędkości odkształcenia jeden z tych dwóch procesów dominuje i autorzy otrzymują dwa jakościowo różne obrazy, zgodne z doświadczeniami.

Raabe [143] opisuje probabilistyczny automat komórkowy dwu- lub trzymiarowy. Zmienną stanu jest orientacja krystalograficzna, a wartości początkowe są brane z eksperymentu lub symulacji. Ziarna i podziarna są definiowane jako obszary o identycznej orientacji krystalograficznej. Reguła przejścia oparta jest na fizycznym opisie zjawiska rekrytalizacji, gdzie dla komórki niezrekrytalizowanej liczone jest prawdopodobieństwo zmiany orientacji, uwzględniając orientację sąsiednich komórek oraz kierunek i wartość siły napędowej krystalizacji.

W swojej pracy Raabe zwraca także uwagę, że prędkość ruchu granicy ziarna powinna być niezależna od rozmiaru skalującego (ang. *scaling length*). Aby to osiągnąć rozmiar komórki powinien być związany ze skalą czasową zależnością:

$$\Delta t = \Delta x / \dot{d} \quad (3.6)$$

gdzie Δx – rozmiar komórki, \dot{d} prędkość ruchu granicy.

Gawąd i in. [62] używają automatu komórkowego do modelowania procesu rekrytalizacji dynamicznej podczas odkształcania plastycznego na gorąco. Zmienne stanu komórek automatu opisują gęstość dyslokacji (obliczoną poprzez równanie analityczne i rozdzieloną losowo pomiędzy komórki), liczbę rekrytalizacji danej komórki i aktualne ziarno, do której należy. Reguły automatu opisują proces migracji dyslokacji pomiędzy komórkami. Jeżeli gęstość dyslokacji komórki przekroczy wartość krytyczną i leży ona w sąsiedztwie granicy, staje się zarodkiem rekrytalizacji, która w następnych krokach może się propagować na sąsiednie komórki. Porównując wyniki dla różnych rodzajów otoczeń, najlepsze wyniki z uwagi na jego izotropowość uzyskano dla otoczenia heksagonalnego.

Zjawisko rekrytalizacji dynamicznej wykazuje pewne podobieństwo do procesu inicjacji i powstawania pustek. Oba procesy wymagają istnienia pewnej struktury początkowej ziaren, tworzonej najczęściej przez symulacje rekrytalizacji statycznej. Podobnie też do zarodków pustek, zarodki rekrytalizowanych ziaren powstają na granicach istniejących ziaren lub na wtrąceniach w matrycy.

3.1.3.2 Odkształcenia plastyczne

Automatów komórkowych używa się też do opisu zjawisk zachodzących w materiale podczas przeróbki plastycznej.

Madej i Pietrzyk [103], [102] używają modelu wieloskalowego (CAFE) do opisu nukleacji i rozwoju pasm ścinania. W zależności od skali zjawiska rozróżniono kilka poziomów analizy. Mikropasma ścinania rozwijają się w skali mikro, natomiast pasma ścinania w mezoskali, oddziałując na odkształcenia w skali makro. Do opisanego obu zjawisk użyto trójwymiarowych przestrzeni automatów komórkowych, które komunikują się ze sobą poprzez zmienne stanu odpowiednich komórek. Wyniki symulacji przy pomocy metody CAFE zostały porównane z wynikami MES dla próby kanalikowej.

Formowanie plastycznych pasm poślizgu przy pomocy automatów komórkowych opisuje też praca [39].

Balokhonov i in. [9] przy pomocy automatu komórkowego modelują propagację pasm Lüdersa uzyskując charakterystyczny kształt krzywej rozciągania.

3.1.4 Zastosowania w opisie rozwoju uszkodzeń

Istnieje kilka prac, które opisują rozwój uszkodzeń przy pomocy automatów komórkowych. Dotyczą one głównie pęknięcia materiałów w warunkach sprężystych (np. [132], [176]). Metodę opisu zniszczenia na pograniczu automatu komórkowego i dynamiki molekularnej nazwanej MCA (ang. *Movable Cellular Automata*) opracował Psakhi z zespołem [142] (przykład zastosowania zob. np. [17]). Zniszczenie w warunkach plastycznych opisują też prace [105], [110], [13], [160]. Dwa modele spośród nich stanowiły inspirację dla niniejszej pracy. Poniżej są one dokładniej omówione.

3.1.4.1 Model Matica-Geltmachera

Dwuwymiarowy, probabilistyczny automat komórkowy do opisu uszkodzeń plastycznych został zaproponowany przez Matica i Geltmachera [110]. Ponieważ stanowi on podstawę automatu zaproponowanego w niniejszej pracy, zostanie on dokładniej opisany.

Zamodelowany został przypadek dwuosioowego równomiernego rozciągania w płaskim stanie odkształcenia. Wewnątrz nieskończonej przestrzeni komórek automatu zdefiniowano reprezentatywny element objętościowy (RVE), który rozciąga się symetrycznie wokół punktu centralnego. Rozmiar RVE, określony przez $N_1(t_i)$, $N_2(t_i)$ (liczbę komórek na bokach RVE w chwili t_i), zmienia się w każdym kroku czasowym, zgodnie z założonym odkształceniem. Z założonej symetrii wynika, że w jednym kroku rozmiar ten może się zmienić o wielokrotność dwóch komórek, w każdym kierunku. Aby uzyskać początkowe odkształcenie rzędu 2,5% autorzy pracy [110] przyjęli początkowy rozmiar RVE $N_1(t_0)=N_2(t_0)=N_0=81$. Każda komórka automatu wewnątrz RVE może przyjmować dwa stany: „masowy” oznaczony przez 1 lub „pusty” oznaczony przez 0.

Podstawowym założeniem, które jest spełnione w każdej chwili działania automatu jest **prawo zachowania masy**. Utożsamiając masę komórki z wartością jej stanu, masę całej objętości RVE można wyliczyć jako:

$$M(t_i) = \sum s(x, t_i). \quad (3.7)$$

Prawo zachowania masy stanowi, że masa w każdym czasie jest taka sama, równa masie początkowej:

$$M(t_i) = M(t_0) \stackrel{\text{df}}{=} M_0. \quad (3.8)$$

Znając masę RVE można w każdym kroku czasowym wyznaczyć liczbę komórek pustych:

$$E(t_i) = V(t_i) - M(t_i) = N_1(t_i) \cdot N_2(t_i) - M_0, \quad (3.9)$$

gdzie $V(t_i)$ jest powierzchnią RVE w chwili t_i .

Reguła automatu uruchamiana w każdym kroku czasowym jest podzielona na dwa etapy: pierwszy ma charakter odkształceniowy (oryg. ang. *plastic convection*), drugi polega na lokalnym rozwoju uszkodzenia.

W *etapie odkształceniowym* powierzchnia RVE jest rozciągana we wszystkich kierunkach. Ponieważ równomierne odkształcenie powoduje nadmierną koncentrację pustych komórek w niektórych obszarach, wprowadzono wewnętrzne zaburzenie rozciąganej siatki o pewną losową wartość. Współrzędne siatki w tym pośrednim etapie można opisać równaniem:

$$\mathbf{x}_k^*(t_{i+1}) = \kappa_k(t_{i+1})\mathbf{x}_k(t_i) + \mathbf{r}_k(t_i), \quad (3.10)$$

gdzie $\kappa_k(t_{i+1}) = \frac{N_k(t_{i+1})}{N_k(t_i)}$, k jest oznaczeniem kierunku, $\mathbf{r}_k(t_i)$ liczbą losową z przedziału pomiędzy -0.5 i 0.5 . Konfiguracja uszkodzenia jest następnie rzutowana na siatkę automatu komórkowego. Dla każdej komórki jest obliczana masa ułamkowa $m(\mathbf{x}, t_{i+1})$ oznaczająca, jaka część powierzchni komórki jest pokryta przez masowe komórki rozciągniętej siatki RVE. Masa ułamkowa jest porównywana z wartością progową m_{th} :

$$s^1(\mathbf{x}, t_{i+1}) = \begin{cases} 1 & \text{gdym}(\mathbf{x}, t_{i+1}) > m_{th}, \\ 0 & \text{w p.p.} \end{cases}, \quad (3.11)$$

gdzie s^1 oznacza wartość stanu komórki na koniec etapu odkształceniowego. W pracy [110] zaproponowano dwie metody wyznaczania wartości progowej. Pierwszy „naturalny” zakłada, że liczba komórek pustych zwiększy się w takim samym stopniu, jak liczba komórek zawartych w RVE, tzn.:

$$E^1(t_{i+1}) = \kappa_1(t_{i+1})\kappa_2(t_{i+1})E(t_i). \quad (3.12)$$

Drugi algorytm zakłada stały współczynnik proporcji pomiędzy nowo utworzonymi komórkami pustymi w pierwszym i drugim etapie. Oznaczając ten współczynnik jako α_{new} liczbę pustych komórek po pierwszym etapie można wyznaczyć jako:

$$E^1(t_{i+1}) = E(t_i) + \alpha_{new}(E(t_{i+1}) - E(t_i)), \quad (3.13)$$

gdzie $E(t_{i+1})$ jest wyznaczone przez równanie (3.9). Mając określoną liczbę pustych komórek, które należy utworzyć w etapie odkształceniowym, można zdefiniować wartość progową masy ułamkowej m_{th} jako taką wartość, że liczba komórek, których masa ułamkowa jest mniejsza lub równa m_{th} , jest równa $E^1(t_{i+1})$:

$$\text{count}(\mathbf{x} : m(\mathbf{x}, t_{i+1}) \leq m_{th}) = E^1(t_{i+1}). \quad (3.14)$$

Liczba pustych komórek wymaganych przez prawo zachowania masy jest uzupełniana w drugim etapie: *lokalnego rozwoju uszkodzenia*. Używa się do tego celu probabilistycznej reguły zmiany stanu komórki masowej na komórkę pustą z prawdopodobieństwem:

$$p(0 | z, t_{i+1}) = W(z, t_{i+1})p_0(t_{i+1}), \quad (3.15)$$

gdzie z oznacza stan otoczenia komórki o stanie równym 1, p_0 jest prawdopodobieństwem średnim, a $W(z)$ funkcją wagową. Otoczenie komórki jest dziewięcioelementowym otoczeniem Moore’a. Komórka, która jest pusta po pierwszym etapie, nadal pozostanie pustą. Prawdopodobieństwo średnie wynika wyłącznie z prawa zachowania masy (określającego liczbę komórek pustych na koniec kroku czasowego) i liczby komórek pustych utworzonych w pierwszym etapie:

$$p_0(t_{i+1}) = \frac{E(t_{i+1}) - E^1(t_{i+1})}{V(t_{i+1}) - E^1(t_{i+1})}. \quad (3.16)$$

Wartości funkcji wagowej obliczane są na podstawie wartości czynnika $B(z)$ zależnego wyłącznie od otoczenia komórki i czynnika naprężeniowego $\sigma(z)$ znormalizowanych tak, by prawdopodobieństwo średnie w całej objętości RVE zostało niezmiennione:

$$W(z, t_{i+1}) = \frac{\sigma(z)B(z) \sum_z \text{count}(z, t_{i+1})}{\sum_z (\sigma(z)B(z) \text{count}(z, t_{i+1}))}, \quad (3.17)$$

gdzie sumacja dokonywana jest po wszystkich stanach otoczenia, dla których komórka centralna ma wartość 1, a funkcja $\text{count}(z, t_{i+1})$ zlicza liczbę komórek masowych mających otoczenie o stanie z po pierwszym etapie kroku czasowego t_{i+1} . Łatwo wykazać, że

$$\sum_z \text{count}(z, t_{i+1}) = V(t_{i+1}) - E^1(t_{i+1}) = M^1(t_{i+1}), \quad (3.18)$$

czyli funkcję wagową dla komórki x można obliczyć jako:

$$W(x, t_{i+1}) = \frac{\sigma(z(x))B(z(x))M^1(t_{i+1})}{\sum_{x: s^1(x, t_{i+1})=1} (\sigma(z(x))B(z(x)))}, \quad (3.19)$$

gdzie funkcja $z(x)$ zwraca stan otoczenia komórki x .

Czynnik naprężeniowy został tu wyznaczony przy pomocy metody elementów skończonych, rozciągając dwuosiowo sprężystą tarczę w płaskim stanie odkształcenia. Tarcza została zamodelowana tak, by odzwierciedlić stan otoczenia – komórki puste zostały wypełnione materią o module sprężystości 100 razy mniejszym od komórek masowych. Jako czynnik naprężeniowy $\sigma(z)$ zostało przyjęte naprężenie średnie w komórce centralnej.

Drugi czynnik $B(z)$ zależy od rozkładu pustych komórek w sąsiedztwie komórki centralnej. Jest on wyliczany na podstawie dwóch funkcji $C(z)$ i $D(z)$. Funkcja $C(z)$ określa liczbę spójnych klastrów pustek w otoczeniu. Rozpatrując zmianę wartości $C(z)$ dla z zmieniającego się od z_0 (komórka centralna jest pusta) do z_1 (komórka centralna jest masowa), przy pozostałych komórkach otoczenia pozostających bez zmian, otrzymuje się trzy sytuacje:

- inicjacji, gdy $C(z_0) < C(z_1)$,
- propagacji, gdy $C(z_0) = C(z_1)$,
- koalescencji, gdy $C(z_0) > C(z_1)$.

Funkcja $D(z)$ określa wielkość największego klastra pustek w otoczeniu z . W zależności od jej wartości wyróżniono trzy kształty:

- wklęsły, dla $D \in \{0;1;2\}$,
- przejściowy, dla $D \in \{3;4\}$,
- wypukły, dla $D \in \{5;6;7;8\}$.

W oparciu o te funkcje zostało utworzonych pięć reguł opisujących rozwój uszkodzeń. Pierwsza reguła preferująca rozwój mikropustek została opisana w tabeli 3.1. Druga reguła opisuje rozwój mikroszczelin i została przedstawiona w tabeli 3.2. Trzecia, przedstawiona w tabeli 3.3 powoduje powstawanie dużych pustek. Czwarta

reguła preferuje duże pustki wklęsłe (tabela 3.4). Piąta natomiast jest połączeniem dużych pustek wklęsłych z mikroszczelinami (tabela 3.5).

Tabela 3.1. Wartości czynnika **B** w zależności od stanu otoczenia dla reguły „mikropustki”.

	wklęsły			przejściowy		wypukły			
	0	1	2	3	4	5	6	7	8
inicjacja	1	1	-	-	-	-	-	-	-
propagacja	-	1	1	1	1	1	1	1	1
koalescencja	-	1	1	1	1	1	-	-	-

Tabela 3.2. Wartości czynnika **B** w zależności od stanu otoczenia dla reguły „mikroszczeliny”.

	wklęsły			przejściowy		wypukły			
	0	1	2	3	4	5	6	7	8
inicjacja	1	1	-	-	-	-	-	-	-
propagacja	-	100	1	1	1	1	1	1	1
koalescencja	-	100	100	1	1	1	-	-	-

Tabela 3.3. Wartości czynnika **B** w zależności od stanu otoczenia dla reguły „duże pustki”.

	wklęsły			przejściowy		wypukły			
	0	1	2	3	4	5	6	7	8
inicjacja	1	1	-	-	-	-	-	-	-
propagacja	-	0,01	1	1	1	100	100	100	100
koalescencja	-	0,01	0,01	1	1	100	-	-	-

Tabela 3.4. Wartości czynnika **B** w zależności od stanu otoczenia dla reguły „pustki wklęsłe”.

	wklęsły			przejściowy		wypukły			
	0	1	2	3	4	5	6	7	8
inicjacja	1	1	-	-	-	-	-	-	-
propagacja	-	1	1	1	1	10000	10000	10000	10000
koalescencja	-	1	1	1	1	10000	-	-	-

Tabela 3.5. Wartości czynnika **B** w zależności od stanu otoczenia dla reguły „mieszana”.

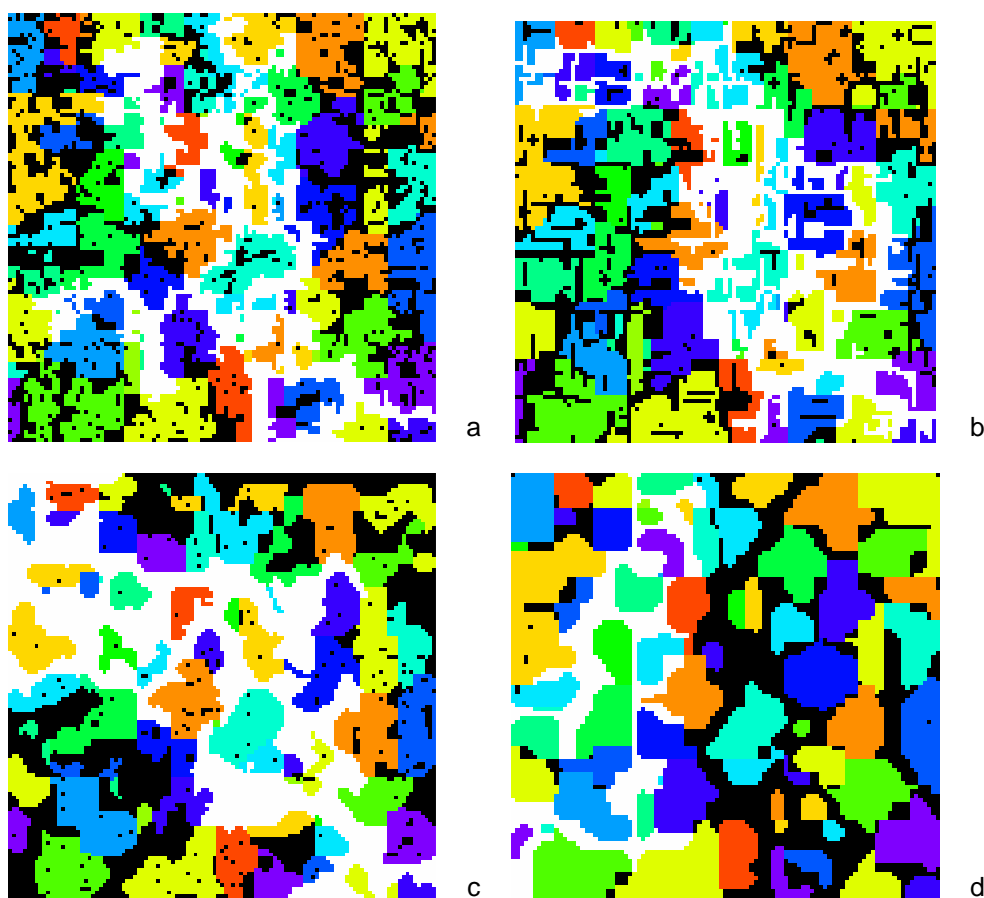
	wklęsły			przejściowy		wypukły			
	0	1	2	3	4	5	6	7	8
inicjacja	1	1	-	-	-	-	-	-	-
propagacja	-	100	1	1	1	10000	10000	10000	10000
koalescencja	-	100	100	1	1	10000	-	-	-

W oparciu o te reguły zostały otrzymane różne morfologie uszkodzenia plastycznego. Symulacje zostały przeprowadzone do wielkości RVE $N_1=N_2=101$, co

odpowiada odkształceniu ok 20%. Wyniki tych symulacji przeprowadzono zarówno dla wartości „naturalnej” progu masy ułamkowej, jak i dla stałych wartości współczynnika α_{new} równych 0.25 i 0.75.

Automat Matica-Geltmachera nie jest automatem komórkowym w sensie definicji (3.1), gdyż wartość stanu komórek w nowym kroku czasowym zależy nie tylko od jej otoczenia, ale także od parametrów globalnych (prawo zachowania masy). Ponieważ w każdym kroku odkształcenia są dużo większe od odkształceń sprężystych, wątpliwe wydaje się użycie sprężystego rozkładu naprężeń, a czynnik naprężeniowy może być zastąpiony przez odpowiedni dobór czynnika B.

Próba zastosowania zmodyfikowanego modelu Matica-Geltmachera do opisu zniszczenia materiału polikrystalicznego w warunkach pełzania została przedstawiona w pracy [29]. Na rys. 3.4 przedstawiono otrzymane przy jej pomocy stany zniszczenia w RVE dla struktury zbudowanej ze 103 ziaren.



Rys. 3.4. Stany zniszczenia otrzymane przy pomocy reguły Matica-Geltmachera dla struktury 103 ziaren i reguły rozwijającej mikropustki (a), mikroszczeliny (b), duże pustki (c) oraz reguły mieszanej (d).

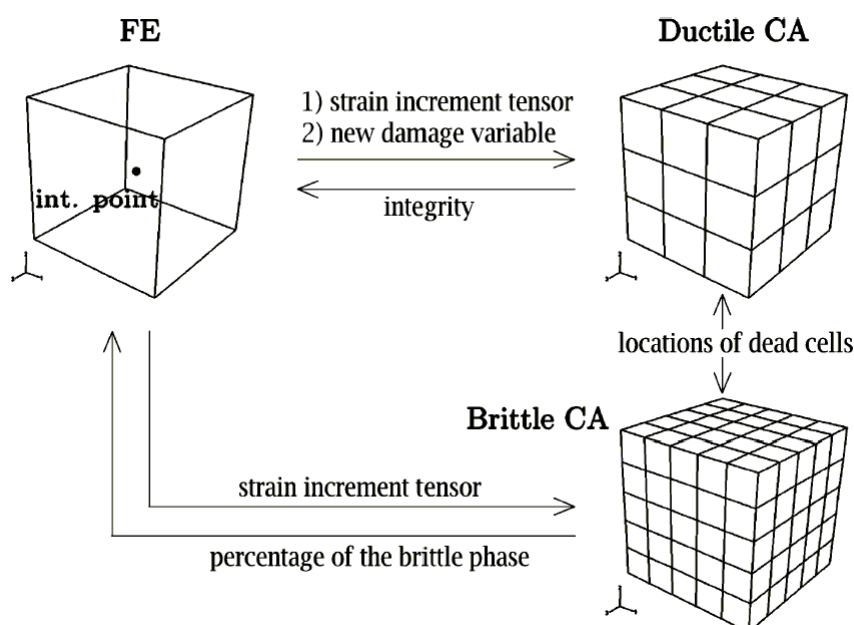
Kolorami oznaczono komórki masowe tworzące ziarna, białe komórki to komórki puste tworzące szczelinę łączącą krawędzie RVE, czarne to pozostałe puste komórki (za [29]).

3.1.4.2 Model Howarda-Shterenlikhta

Zespół prof. Howarda rozwinął metodę połączenia automatu komórkowego z metodą elementów skończonych CAFE (zob. [13], [159], [160], [35]). Odseparowując własności mikrostruktury materiału od makroskopowych zmiennych stanu, obliczenia MES stały się bardziej efektywne (rozmiar elementów zależy tylko od gradientu odkształcenia).

Model Howarda-Shterenlikhta ([158], [159], [160]) wprowadza dwie skale, osobno dla zniszczenia plastycznego ciągliwego i osobno dla kruchego (łupliwego).

Każda skala posiada osobne automaty komórkowe wymieniające dane między sobą (zob. rys. 3.5). Komórki automatu dla zniszczenia ciągliwego są większe (0.2 mm) i jest ich 5x5x5, natomiast dla kruchego mniejsze (0.1 mm) i tworzą siatkę 10x10x10. Zniszczenie ciągliwe opisane jest przez makroskopowe równanie Rousselier'a: gdy parametr uszkodzenia osiągnie wartość krytyczną, następuje zniszczenie komórki. Komórki automatu kruchego mogą osiągnąć stan zniszczenia poprzez mapowanie zniszczenia ciągliwego lub przez inicjację zniszczenia kruchego (gdy w sąsiedztwie jest komórka z węglikiem podatnym na pęknięcie i naprężenie osiągnie wartość krytyczną; przyjęto, że komórek takich jest 10%) lub przez propagację zniszczenia ciągliwego lub kruchego (gdy różnica pomiędzy kątami orientacji ziaren jest mniejsza od wartości krytycznej). Aby zasymulować przejście od zniszczenia łupliwego do ciągliwego wraz ze wzrostem temperatury, wartość krytyczna kąta dezorientacji zmienia się od 60° do 0°. Jeżeli poziom zniszczenia opisany przez komórki automatu (miarą jest liczba komórek zniszczonych: 10% dla ciągliwych, 20% dla kruchych) osiągnie wartość krytyczną, to element odpowiadający temu punktowi jest usuwany z siatki elementów skończonych w następnej iteracji. Porównanie z danymi doświadczalnymi dla próby Charpy'ego pokazały, że otrzymane rezultaty są poprawne.



Rys. 3.5. Schemat wymiany danych pomiędzy warstwami modelu Howarda-Shterenlikhta [160].

3.2 Zastosowany w pracy automat komórkowy

Postawione zadanie, tj. rozwój uszkodzeń dla materiałów polikrystalicznych w warunkach pełzania, zostało wielokrotnie opisane przy pomocy różnych modeli makro- i mikroskopowych (zob. rozdz. 2). Wszystkie te modele używają do opisu równań różniczkowych, których najbardziej ogólna forma została przedstawiona w zestawie równań (2.32), (2.33). W większości przypadków równania te są rozwiązywane numerycznie. W tym celu są one transformowane w równania różnicowe i następnie rozwiązywane przy pomocy komputerów.

Równania różniczkowe operują na funkcjach ciągłych. Podobnie też funkcjami ciągłymi są wartości naprężeń, odkształceń i uszkodzeń zdefiniowane w mechanice kontynualnej. Podejście takie jest uprawnione, jeżeli pozostajemy w skali makro i zadawaliśmy się opisem fenomenologicznym zjawiska. Chcąc jednak zrozumieć mechanizmy, które nim rządzą potrzebne jest zejście do skali mikro. W skali tej pojawiają się nieciągłości takie jak granice ziaren, dyslokacje, pustki. Traci sens pojęcie granicy funkcji, a tym samym kontynualna definicja naprężenia, czy odkształcenia. Nie obowiązują także niektóre równania mechaniki kontynualnej, np. równanie nierozdzielności odkształceń. Możliwe jest oczywiście opisanie wszystkich tych nieciągłości przy pomocy odpowiednich równań i zamodelowanie ich przy pomocy metod numerycznych (np. przez elementy kontaktowe), jednak prowadzi to do coraz bardziej skomplikowanych modeli, gubiąc w ten sposób istotę zjawiska.

Z drugiej strony istnieje szereg modeli mikromechanicznych, które koncentrują się głównie na mechanizmach wzrostu pojedynczej pustki. Ale nawet to zadanie nie jest jednoznacznie rozwiązane. Poszczególni autorzy badając np. dyfuzyjny wzrost pustki przyjmują różne rozkłady naprężenia w otoczeniu pustki, od którego zależy koncentracja wakansów. Problem się komplikuje jeszcze bardziej przy uwzględnieniu sąsiednich pustek oraz innych defektów struktury (np. dyslokacje, granice ziaren i podziaren).

Automaty komórkowe proponują sposób ominięcia tych szczegółowych problemów. Fascynacja Wolframa (zob. [179]) automatami polega na możliwości modelowania złożonych procesów przy pomocy prostych reguł. Ukryta jest w tym wiara, że prawa mechaniki w skali mikro są proste, a skomplikowany jest jedynie ich widoczny rezultat, po którym je oceniamy, podobnie jak proste prawo grawitacji opisuje złożone zachowania całych galaktyk.

Cechą zjawisk w skali mikro, która dobrze pasuje do idei automatu komórkowego, jest bardzo ograniczony zasięg bezpośrednich oddziaływań, przy równoczesnym daleko rozprzestrzeniającym się ich skutku. W takich wypadkach przestaje być istotne, jaka funkcja dokładnie opisuje to oddziaływanie, a staje się ważne, jaki przyniesie ono skutek w najbliższym otoczeniu (np. agregacja wakansów w mikropustkę). Jakościowy opis zjawiska pozwala na dyskretyzację stanu elementów przestrzeni (pustka-masa), a tym samym opis przy pomocy automatu komórkowego.

Podobny charakter ma dyskretyzacja czasu i przestrzeni. Przy jakościowym opisie zjawiska możliwe jest wyróżnienie charakterystycznych odległości i czasu trwania poszczególnych zjawisk. Oddziaływanie jest „silne” w najbliższym sąsiedztwie przestrzennym i czasowym, czyli zasięg oddziaływania pozwala na ustalenie kroku przestrzennego i czasowego. Obie skale są powiązane ze sobą poprzez prędkość rozchodzenia się badanego zjawiska (por. równ. 3.6).

Posługując się automatem komórkowym bardzo łatwo wprowadzić jest do modelu elementy prawdopodobieństwa. Rozrzut wyników badań doświadczalnych rzeczywistych materiałów jest konsekwencją niepowtarzalności ich mikrostruktury, a

także losowości w procesach zachodzących podczas deformacji i rozwoju uszkodzenia (zob. [88]).

Specyfikacja zastosowanego automatu

W niniejszej pracy został zastosowany automat komórkowy zdefiniowany przez:

- dyskretną, nieskończoną przestrzeń 2-wymiarową \mathbf{X}^2 ;
- zbiór stanów $\mathbf{S}=\{-1,0,1,\dots,G\}\times\{0,1\}$, gdzie dla pierwszej zmiennej stanu -1 oznacza komórkę poza obszarem bieżącego RVE, 0 oznacza *komórkę pustą* wewnątrz RVE, liczba dodatnia $g\in\{1,\dots,G\}$ oznacza *komórkę masową* wewnątrz RVE należącą do ziarna o numerze g ; druga (dodatkowa) zmienna stanu s_{IV} określa, czy komórka pusta jest swobodna (podlega dyfuzji bez kryterium zatrzymania $s_{IV}=0$) czy związana ($s_{IV}=1$);
- reguła jest probabilistyczną regułą złożoną, odnoszącą się do modelowania struktury i modelowania procesu; zostanie opisana w następnych rozdziałach.

Nieskończona przestrzeń automatu została zaimplementowana jako skończony, symetryczny obszar wokół punktu centralnego o współrzędnych (0,0), o rozmiarze maksymalnego, rozpatrywanego RVE. Poza tym obszarem znajduje się stan próżni oznaczony jako -1.

Model został zaimplementowany w dwóch wersjach. Pierwsza wersja została napisana w języku C++ i skompilowana przy pomocy Microsoft Visual Studio C++ 6.0. Została ona użyta do wszechstronnego przetestowania algorytmu oraz zanalizowania wyników dla modelu z samodzielnym automatem komórkowym. Druga wersja w języku Fortran została napisana jako podprogram procedury UMAT programu Abaqus. Posłużyła ona jako element modelu wieloskalowego.

3.3 Modelowanie struktury materiałów

Jednym z celów modelowania w skali mikro jest pokazanie zależności od struktury materiału. Jak pokazują badania mikroskopowe głównym mechanizmem pęknięcia kruchego w warunkach pełzania jest pęknięcie międzykrystaliczne. Dlatego też istotne znaczenie ma wpływ struktury krystalicznej materiału na rozwój uszkodzeń. Mniejszą rolę odgrywa struktura przy zniszczeniu ciągliwym, choć i one jest zależne od pewnych jej elementów jak rozkład i wielkość wtrąceń.

Istnieje wiele sposobów zamodelowania struktury ziaren. Pierwotna struktura materiału może być zainicjowana na podstawie fotografii rzeczywistej struktury (por. [98]), przy pomocy teselacji Voronoi'a (por. [100]) lub symulacji procesów krystalizacji (np. [99], [79]). Ciekawą propozycję przedstawił też Kroc [90], wprowadzając prawdopodobieństwo do reguły wzrostu, osiągając ziarna bardziej kuliste w fazie wzrostu. Wadą tego rozwiązania jest nieregularny kształt granicy, co sztucznie hamuje wzrost uszkodzeń.

W niniejszej pracy zastosowano dyskretną wersję teselacji Voronoi'a, zamodelowaną przy pomocy automatu komórkowego. Zaletą jej jest duża łatwość generowania struktur o różnym rozkładzie ziaren, podstawową wadą uprzywilejowanie niektórych kierunków dla podstawowych sąsiedztw (von Neumanna, Moore'a).

3.3.1 Dyskretna teselacja Voronoi'a

Teselacja Voronoi'a na płaszczyźnie jest powszechnie stosowanym narzędziem do modelowania ziarnistej struktury metali dla problemów dwuwymiarowych (np. [100], [133]). Definiuje ona podział płaszczyzny dla n_{seed} punktów, nazywanych punktami zarodkowymi, na n_{seed} wielokątów, z których każdy jest przypisany do swojego punktu zarodkowego. Oznaczając zbiór punktów zarodkowych przez \mathbf{P} , definicję teselacji Voronoi'a przestrzeni \mathbf{X} można zapisać jako podział na rozłączne zbiory punktów spełniające regułę, że punkt należy do zbioru $\mathbf{Z}(z)$ wtedy i tylko wtedy, gdy jego odległość do punktu zarodkowego $z \in \mathbf{P}$ jest mniejsza niż do jakiegokolwiek innego punktu zarodkowego, czyli, że

$$\mathbf{Z}(z) = \{x \in \mathbf{X} : \forall (p \in \mathbf{P} \wedge p \neq z) d(x, z) < d(x, p)\}, \quad (3.20)$$

gdzie $d(x, y)$ jest miarą odległości. Punkty równoodległe od sąsiednich punktów zarodkowych tworzą granicę pomiędzy elementami teselacji. Podział płaszczyzny z euklidesową miarą odległości zdefiniowany w ten sposób jest jednoznaczny i zbudowany z wielokątów wypukłych. W metaloznawstwie wielokąt taki uznawany jest za obraz pojedynczego ziarna. Średnia wielkość ziaren zależy od gęstości punktów zarodkowych. Jeżeli rozkład punktów jest równomierny to rozkład wielkości ziaren można opisać rozkładem gamma (zob. [93]).

Przestrzeń automatu komórkowego jest przestrzenią dyskretną. Do generacji struktury ziaren użyto zatem dyskretnej wersji teselacji Voronoi'a. Podejście to wybrano ze względu na łatwość implementacji teselacji Voronoi'a przy pomocy automatu komórkowego, co daje możliwość przebadania struktur opisanych szerokim zakresem parametrów.

Dyskretna teselacja Voronoi'a opisana jest definicją (3.20), a ponieważ przestrzeń \mathbf{X} jest przestrzenią dyskretną, dyskretna też musi być miara odległości w tej przestrzeni. Dla automatów komórkowych miara ta jest ściśle związana z rodzajem otoczenia (równ. 3.2÷3.5). Dla teselacji dyskretniej jednoznacznie jest określona granica pomiędzy ziarnami. Problem ten został szeroko omówiony w pracy Adamatzky'ego [2].

Zastosowano następujący algorytm uzyskania dyskretnej teselacji Voronoi'a przy pomocy automatu opisanego w rozdz. 3.2. Obszar RVE wypełniony jest komórkami o stanie 0, poza RVE -1. Początkowy rozmiar RVE oznaczany jest przez N_0 , ze względu na symetrię musi on być liczbą nieparzystą. Punkty zarodkowe utworzone są jako jednorodny proces punktowy Poissona wewnątrz obszaru RVE. Każdemu punktowi przypisany jest losowo numer ziarna $g \in \{1, \dots, G\}$. Następnie uruchamiany jest automat o następującej regule:

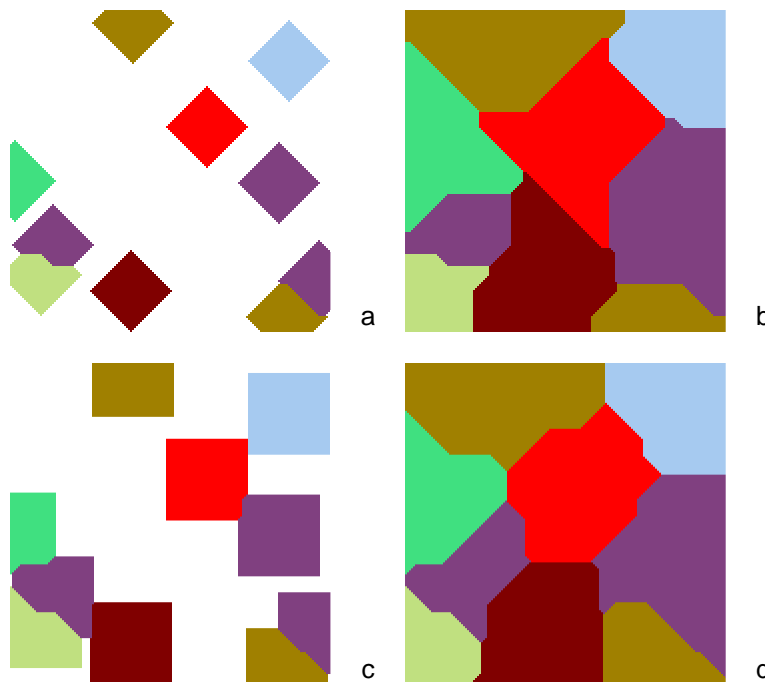
$$s(x, t_{i+1}) = \begin{cases} s(x, t_i) & \text{dla } s(x, t_i) \neq 0 \\ \max(s(y, t_i) : y \in O(x) \wedge s(y, t_i) > 0) & \text{dla } s(x, t_i) = 0 \end{cases}. \quad (3.21)$$

Reguła jest uruchamiana do momentu, gdy wszystkie komórki wewnątrz RVE będą przypisane do konkretnego ziarna, czyli ich stan będzie większy od 0. W regule tej problem granicy rozwiązano przypisując punkty równoodległe od punktów zarodkowych do ziarna o większym numerze porządkowym.

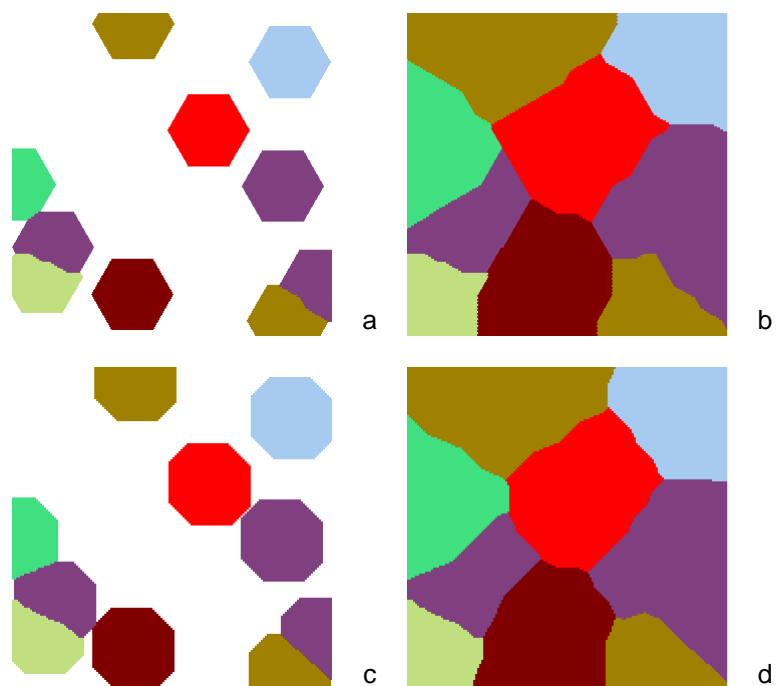
Końcowa liczba ziaren nie zawsze jest równa liczbie punktów zarodkowych. Numer ziarna jest losowany, dlatego może się zdarzyć, że sąsiednie punkty zarodkowe mają ten sam numer. Powstające ziarna w takim przypadku połączą się tworząc jedno większe ziarno.

3.3.1.1 Wpływ rodzaju otoczenia i rozkładu punktów zarodkowych na generowaną strukturę

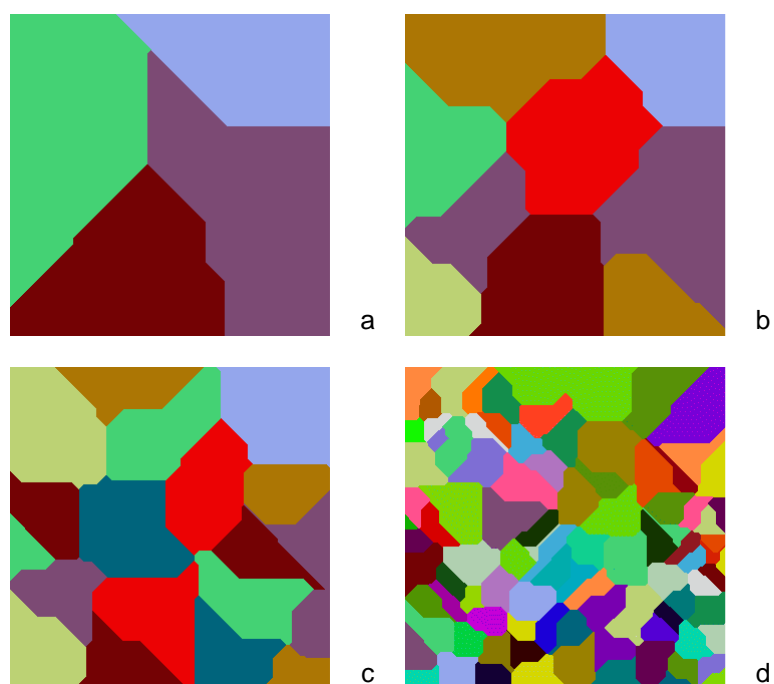
W zależności od wybranego otoczenia otrzymuje się ziarna o różnych kształtach. Otoczenia von Neumanna i Moore'a generują podziały o granicach nachylonych pod kątami 0° i 45° do krawędzi siatki (zob. rys. 3.6). Jest to przyczyną anizotropii objawiającej się we właściwościach takiej struktury (zob. też [79], [60], [62]). Wady tej nie ma struktura wygenerowana przez automat z sąsiedztwem heksagonalnym lub pseudoheksagonalnym (rys. 3.7).



Rys. 3.6. Obrazy po 20 iteracjach (a,c) i końcowej strukturze ziaren (b,d) uzyskane dla opisanego automatu z sąsiedztwem von Neumanna (a,b) i Moore'a (c,d) dla identycznie rozmieszczonych 10 punktów zarodkowych.



Rys. 3.7. Obrazy po 20 iteracjach (a,c) i końcowej struktury ziaren (b,d) uzyskane dla automatu z sąsiedztwem heksagonalnym (a,b) i pseudoheksagonalnym (c,d) dla identycznie rozmieszczonych 10 punktów zarodkowych.



Rys. 3.8. Struktury ziaren otrzymane dla opisanego automatu dla 5 (a), 10 (b), 20 (c) i 100 (d) punktów zarodkowych ($N_0=321$) dla sąsiedztwa Moore'a.

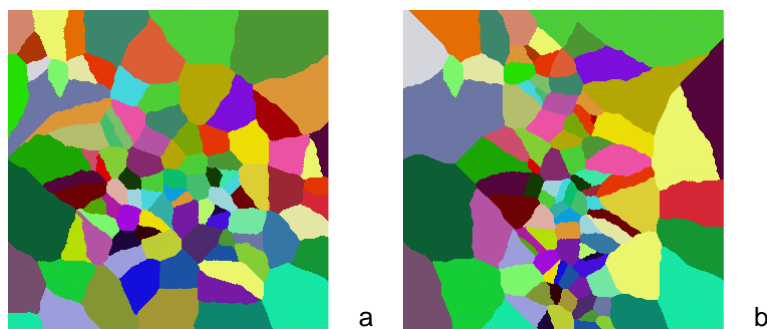
Niezależnie jednak od rodzaju otoczenia średnia wielkość ziarna zależy wyłącznie od liczby punktów zarodkowych:

$$d_{sr} = \frac{N_0}{\sqrt{n_{seed}}}, \quad (3.22)$$

gdzie d_{sr} to średni liniowy rozmiar ziarna w komórkach. Na rys. 3.8 przedstawiono struktury otrzymane dla 5, 10, 20, 100 punktów zarodkowych ($N_0=321$) dla sąsiedztwa Moore'a. Wielkość ziarna jest jednym z ważniejszych parametrów mikrostruktury decydującym o rozwoju uszkodzeń w materiale.

Przy pomocy niejednorodnego rozkładu punktów zarodkowych można generować ziarna o różnych kształtach i wielkościach. Np. jeżeli punkty zarodkowe zostaną umieszczone w centralnej części RVE, otrzymać można duże ziarna przy brzegach i małe w części centralnej (zob. rys. 3.9).

Obecna praca ogranicza się do badania struktur o rozkładzie równomiernym.



Rys. 3.9. Przykłady struktur niejednorodnych otrzymane dla 100 punktów zarodkowych ($N_0=321$) dla sąsiedztwa psueudoheksagonalnego.

3.3.1.2 Dobór podstawowych parametrów struktury

Wielkość ziaren w metalach jest bardzo różna. Może wynosić od kilku do kilkuset mikrometrów. W modelu wielkość tę należy porównać z wielkością mikropustek.

Obserwowane najmniejsze mikropustki mają rozmiar ok. 20 nm. Podobny rząd wielkości ma minimalny promień pustki wyznaczony z równania (2.59) – 10 do 100 nm (zob. [150]). Natomiast wg nowszej pracy (zob. [88]) krytyczny rozmiar pustki wynosi około 2÷5 nm, a obserwowane są pustki o rozmiarze 3 nm. Przyjmując 10 nm czyli 10^{-2} μm za minimalny rozmiar pustki otrzymujemy proporcje rozmiaru dużego ziarna do pustki jak 10 000:1, natomiast dla małego ziarna 100:1.

Jako podstawowy przyjęto w niniejszej pracy rozmiar RVE $N_0=321$ i liczbę punktów zarodkowych $n_{seed}=10$, co daje średnią średnicę ziarna około 100 komórek (równ. 3.22). Oznacza to, że dla automatu proporcja rozmiaru ziarna do rozmiaru pustki wynosi 100:1, co odpowiada małym ziarnom. Dla zamodelowania większych ziaren przyjęto $n_{seed}=5$, wtedy dla $N_0=641$ średnica ziarna wynosi około 285 komórek.

Początkowy rozmiar RVE N_0 związany jest też z rozdzielczością przestrzenną automatu. Oznaczając przez L_0 początkowy rozmiar RVE w jednostkach fizycznych otrzymuje się zależność:

$$\frac{L_0}{N_0} = \Delta x, \quad (3.23)$$

gdzie Δx oznacza rozmiar jednej komórki w jednostkach fizycznych. Czyli przy ustalonym L_0 , zwiększając N_0 zwiększa się rozdzielczość. Im większa rozdzielczość tym mniejsza pustka i mniejsze odkształcenie mogą być zauważone przez automat.

3.3.2 Uszkodzenie początkowe

Uszkodzenia w warunkach pełzania rozwijają się głównie na skutek obecności w strukturze krystalicznej różnego rodzaju defektów. Obecny model jest bardzo

uproszczoną symulacją zjawisk zachodzących w strukturze, jednak oddający istotę wzrostu pustek. Jak wynika z analizy mechanizmów rozwoju uszkodzeń wzrost ten ma charakter dyfuzyjny lub odkształceniowy. O ile wzrost odkształceniowy nie wymaga dodatkowych elementów struktury (poza ziarnami i pustkami) i wynika z samego prawa zachowania masy (lub stałej gęstości materii poza pustkami), to wzrost dyfuzyjny wymaga obecności składnika dyfundującego. Elementem tym są głównie defekty punktowe, czyli wakanse. Rozmiar wakansów, który jest porównywalny z rozmiarami atomów, jest rzędu 10^{-4} μm . Natomiast rozmiar najmniejszych modelowanych mikropustek jest rzędu 10^{-2} μm , dlatego trudno jest zamodelować oba te elementy przy pomocy jednego narzędzia (gdyż RVE powinno zawierać przynajmniej kilka ziaren). Aby więc być bliższym fizycznej stronie modelowanego zjawiska, każda masowa komórka automatu powinna być określona przez dodatkowy, zhomogenizowany parametr – gęstość defektów. Dla uproszczenia aktualnego modelu, zrezygnowano jednak z tego parametru, zastępując go losowo rozrzuconymi komórkami pustymi o podobnej średniej gęstości. Takie pojedyncze puste komórki mogą przemieszczać się zgodnie z prawem dyfuzji i symulują zachowanie dużo mniejszych wakansów, podobnie jak ma to miejsce w prostych modelach gazu sieciowego.

Według wyników różnych doświadczeń gęstość objętościowa defektów w materiałach polikrystalicznych waha się pomiędzy 10^{-4} a 10^{-5} (por. [48], [163]). W analizie badanego modelu przyjęto, że początkowa gęstość uszkodzeń może przyjmować wartości pomiędzy 0 a 0.025. Brak uszkodzeń początkowych implikuje, że puste komórki mogą się pojawić wyłącznie na skutek odkształcenia (co wydaje się rozsądne – por. równ. 2.56). Jest to bliskie hipotezie o ciągłej nukleacji pustek. Natomiast nadmiar komórek pustych (na początku) może przy dużych czasach doprowadzić do samozniszczenia wyłącznie na skutek dyfuzji, bez udziału odkształcenia (co jest raczej nieprawdopodobne). Przyjęte maksymalne wielkości gęstości początkowej pustek odpowiadają hipotezie o natychmiastowej nukleacji pustek.

Gęstość uszkodzeń początkowych f_{v0} jednoznacznie określa początkową liczbę pustych komórek:

$$E(t_0) = f_{v0} N_0^2. \quad (3.24)$$

3.3.3 Wtrącenia

Do inicjacji pustek transkrytalicznych konieczna jest obecność wtrąceń wewnątrz ziaren (zob. rozdz. 2.2.3.1). Także, według niektórych autorów, pustki międzykrytaliczne inicjują się na wtrąceniach w granicy ziaren. Rolę taką pełnią niektóre komórki puste, które są pozbawione możliwości swobodnej dyfuzji. Do opisu tej cechy służy dodatkowa zmienna stanu S_{iv} . Punkty zarodkowe pustek mogą się tworzyć podczas procesu (co jest opisane w rozdz. 3.4.2.2) lub mogą istnieć w strukturze początkowej. Parametr lv_{seed} określa ile zarodków pustek jest losowo rozmieszczonych w strukturze początkowej.

W używanym w pracy modelu punkty zarodkowe pustek nie są inicjowane na początku, natomiast mogą powstać w trakcie procesu w tzw. punktach potrójnych, czyli punktach, które graniczą z przynajmniej trzema ziarnami.

3.3.4 Lista parametrów automatu opisujących strukturę

G – maksymalny numer ziarna

N_0 – początkowy rozmiar RVE (ilość komórek na jednym boku)

n_{seed} – liczba punktów zarodkowych ziaren

f_{v0} – gęstość uszkodzeń początkowych

lv_{seed} – liczba zarodków pustek w strukturze początkowej

3.4 Modelowanie procesów rozwoju uszkodzeń

Automat o strukturze początkowej utworzonej w sposób opisany w poprzednim rozdziale, poddany jest probabilistycznej, złożonej regule zmiany stanu, symulującej rozwój uszkodzeń, aż do konfiguracji uznanej za opisującą zniszczenie. Głównymi czynnikami stymulującymi rozwój uszkodzeń jest odkształcenie i czas. Odkształcenie traktowane jest jako zadany proces, który jednoznacznie określa wymiary RVE (lub przynajmniej jeden wymiar) w każdej chwili czasu. Rozwój uszkodzeń w czasie jest zależny od procesu dyfuzji. Reguła automatu uwzględnia oba te czynniki w procesie rozwoju uszkodzenia.

3.4.1 Założenia

3.4.1.1 Odkształcenie

Przy pomocy automatu komórkowego badane jest zachowanie RVE w płaskim stanie odkształcenia dla zadania jednoosiowego rozciągania. Dla automatu komórkowego deformacja RVE jest wielkością zadaną. Rozmiar RVE może się zmieniać w czasie tylko o wielokrotność komórki, a z uwagi na symetrię o wielokrotność dwóch komórek. Najmniejsze możliwe odkształcenie, jakie może być zadane wynosi:

$$\varepsilon_{\min} = \ln\left(\frac{N_0 + 2}{N_0}\right), \quad (3.25)$$

przykładowo dla automatu o $N_0=321$ wynosi ono ok. 0.006. W typowych przypadkach próby pełzania znaczny czas jej trwania zajmuje pełzanie ustalone, ze stałą prędkością odkształcenia. Stała prędkość odkształcenia może być w prosty sposób zadana RVE modelowanemu przez automat poprzez skokowy wzrost rozmiaru RVE w kierunku rozciągania o jedną komórkę w obie strony w każdej iteracji. Ponieważ przyrost czasu odbywa się jednostajnie

$$t_i = \Delta t \cdot i, \quad (3.26)$$

gdzie Δt to krok czasowy automatu, i numer iteracji, odkształcenie liniowe wyraża się wzorem:

$$\varepsilon(t_i) = \ln\left(\frac{N_0 + 2i}{N_0}\right), \quad (3.27)$$

a prędkość odkształcenia dla $i \ll N_0/2$ wynosi:

$$\dot{\varepsilon}_s \cong \dot{\varepsilon}_0 = \frac{2}{N_0 \Delta t}. \quad (3.28)$$

Dla założonych wielkości N_0 i Δt jedyną metodą spowolnienia prędkości odkształcenia, jest wykonywanie kroku rozciągania, co którąś iterację. Jeżeli przez parametr T_{def} oznaczymy liczbę iteracji pomiędzy iteracjami zmieniającymi odkształcenie, wtedy odkształcenie w chwili t_i wyniesie:

$$\varepsilon(t_i) = \ln \left(\frac{N_0 + 2 \operatorname{int} \left(\frac{t_i}{T_{\text{def}} \Delta t} \right)}{N_0} \right), \quad (3.29)$$

gdzie $\operatorname{int}()$ jest funkcją zwracającą część całkowitą argumentu, a prędkość odkształcenia:

$$\dot{\varepsilon}_0 = \frac{2}{N_0 T_{\text{def}} \Delta t}. \quad (3.30)$$

3.4.1.2 Prawo zachowania masy

Jednym z podstawowych praw fizycznych jest prawo zachowania masy. Symulowany obszar RVE jest uważany za model elementu objętości materii, która nie wymienia masy ze swoim otoczeniem. Masa RVE powinna być podczas całego procesu stała. Założono, że materia wewnątrz RVE (poza pustkami) jest jednorodna. Jako odpowiednik masy uznano liczbę komórek masowych, czyli

$$M(t_i) = \operatorname{count}(x \in X^2 : s(x, t_i) > 0), \quad (3.31)$$

gdzie $\operatorname{count}()$ jest funkcją zliczającą. Prawo zachowania masy wymaga, by wielkość ta pozostała stała podczas całego procesu, czyli, że

$$M(t_{i+1}) = M(t_i) \stackrel{\text{df}}{=} M(t_0) = M_0, \quad (3.32)$$

gdzie M_0 oznacza masę w chwili początkowej.

W trakcie badania pierwszych wersji modelu okazało się jednak, że dokładne przestrzeganie równania (3.32) powoduje niepożądane skutki uboczne. Wymiary RVE mogą się zmieniać w czasie tylko o wielkości całkowite, dlatego objętość liczona jako

$$V(t_i) = N_1(t_i) N_2(t_i) \quad (3.33)$$

w przypadku zmiany tylko jednego wymiaru, może się zmienić o wielokrotność $N_1(t_i)$ lub $N_2(t_i)$. Prowadzi to do dużej skokowej zmiany objętości. Przy stosowaniu założenia (3.32) zmiany te całkowicie przenoszą się na liczbę komórek pustych:

$$E(t_i) = V(t_i) - M_0. \quad (3.34)$$

Wymiary RVE są funkcjami przyłożonego do RVE odkształcenia, zaokrąglonego do wielokrotności rozmiaru pojedynczej komórki. Zaokrąglenie to powoduje, że objętość RVE liczona w komórkach jest różna od objętości wynikającej z założonej deformacji. Błąd ten dla $N_0=321$ wynosi ok. 1%. Jednak ten niewielki błąd przeniesiony na liczbę pustych komórek, które stanowią też np. 1% objętości powoduje wahania liczby komórek pustych o ok. 100%. Ponieważ stan uszkodzenia w dużym stopniu zależy od tej liczby, błąd ten mógłby wpływać znacząco na otrzymywane rezultaty (zob. wykres na rys. 3.10a).

Aby uniknąć tego błędu zdecydowano się na zmianę formuły zachowania masy tak, by błąd objętości przenieść z komórek pustych na komórki masowe, których jest znacznie więcej. Objętość RVE w danej chwili czasowej wynika ze zmiany objętości pochodzącej od założonej deformacji ΔV^{def} i z błędów zaokrągleń ΔV^{err} :

$$V(t_i) = V_0 + \Delta V^{\text{def}}(t_i) + \Delta V^{\text{err}}(t_i). \quad (3.35)$$

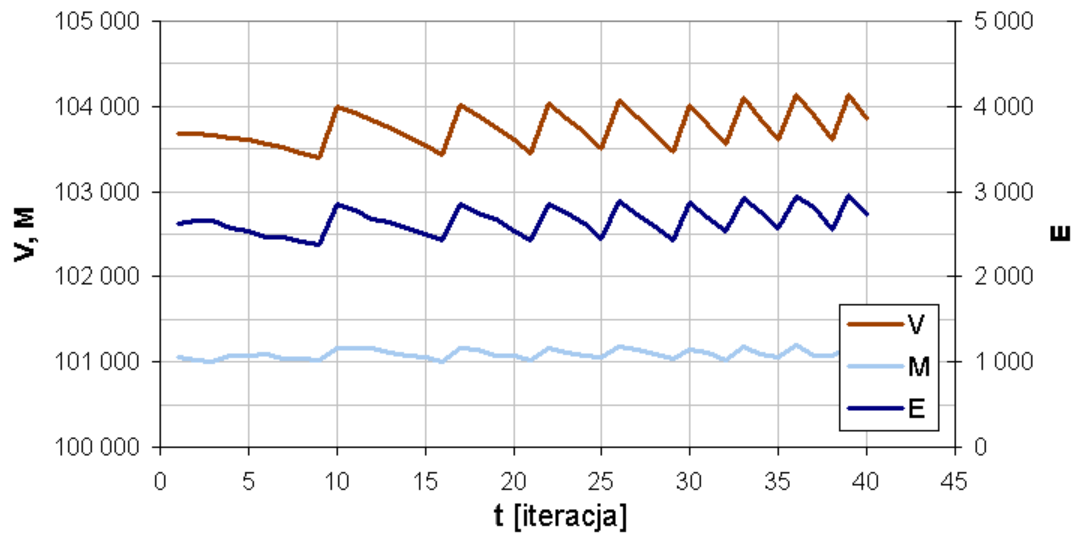
Natomiast pożądana liczba komórek pustych powinna wynikać tylko z deformacji RVE, czyli:

$$E(t_i) = V_0 + \Delta V^{\text{def}}(t_i) - M_0. \quad (3.36)$$

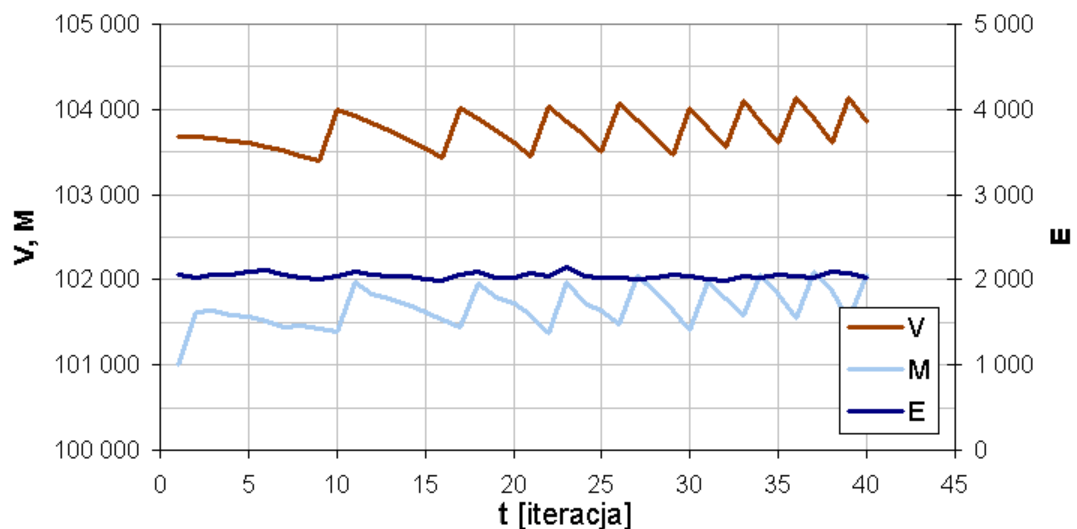
Przy tym założeniu masę RVE w dowolnej chwili można wyznaczyć jako:

$$M(t_i) = V(t_i) - E(t_i) = M_0 + \Delta V^{\text{err}}(t_i). \quad (3.37)$$

Nowa formuła prawa zachowania masy kontroluje zatem liczbę komórek pustych, zamiast masowych. Błąd w liczbie komórek masowych (w stosunku do oryginalnego prawa zachowania masy) jest tego samego rzędu, co błąd objętości (ok. 1%) i nie powoduje zauważalnych efektów ubocznych (zob. wykres na rys. 3.10b).



Rys. 3.10a. Zmiany objętości RVE (V), liczby komórek masowych (M) i komórek pustych (E) dla algorytmu deformacji kontrolującego stałość masy (3.34).



Rys. 3.10b. Zmiany objętości RVE (V), liczby komórek masowych (M) i komórek pustych (E) dla algorytmu deformacji kontrolującego liczbę pustych komórek (3.36).

3.4.1.3 Nieściśliwość (zewnętrzna i wewnętrzna)

Według powszechnie przyjętych teorii makroskopowych materiały w stanie pełzania cechują się nieściśliwością, czyli objętość dowolnego fragmentu materii pozostaje stała. Dopuszczalne są jedynie zmiany objętości wynikające z odkształceń sprężystych. Warunek ten dla odkształceń pełzania zapisuje się jako:

$$\sum_{i=1}^3 \dot{\epsilon}_{ii}^c = 0. \quad (3.38)$$

Ponieważ odkształcenia sprężyste są często dużo mniejsze od odkształceń pełzania, warunek ten, w sposób przybliżony, jest spełniony także dla odkształceń całkowitych.

Dla automatu warunek ten oznacza stałą objętość RVE w każdej chwili czasowej:

$$V(t_i) = N_1(t_i)N_2(t_i) = \text{const} = V_0. \quad (3.39)$$

Dla zadania jednoosiowego rozciągania ze stałą prędkością odkształcenia w kierunku 1 rozmiar $N_1(t_i)$ jest wyznaczony przez to zadane odkształcenie:

$$N_1(t_i) = N_0 + 2 \text{int} \left(\frac{t_i}{T_{\text{def}} \Delta t} \right), \quad (3.40)$$

natomiast rozmiar RVE w drugim kierunku można wyznaczyć ze wzoru:

$$N_2(t_i) = \text{odd} \left(\frac{V_0}{N_1(t_i)} \right), \quad (3.41)$$

gdzie $\text{odd}()$ oznacza zaokrąglenie do liczby nieparzystej. Widać stąd, że warunek stałej objętości może być spełniony z pewną dokładnością zależną od rozmiaru początkowego N_0 , będącego miarą rozdzielczości automatu. Konsekwencje błędu zaokrąglenia spowodowane przez tę zależność zostały opisane w rozdziale dotyczącym prawa zachowania masy.

Dotychczas opisany warunek nieściśliwości może zostać nazwany nieściśliwością zewnętrzną, gdyż dotyczy zewnętrznych granic RVE. W połączeniu z prawem zachowania masy prowadzi on do warunku stałej gęstości. Jednak dokładne pomiary gęstości wykazują, że maleje ona w warunkach pełzania na skutek wzrostu pustek. Jest to szczególnie widoczne dla trzeciego okresu pełzania międzykrystalicznego, gdzie objętości pustek są duże (por. rozdz. 2.2.3.1). Dlatego odnosząc warunek nieściśliwości do materii z wyłączeniem pustek można go nazwać nieściśliwością wewnętrzną. Taką definicję nieściśliwości przyjęto w modelach uwzględniających objętość pustek plastycznych (np. modele: Gursona [71], Rousselier [154], GTN [126], LPS [95]).

Interpretując parametr uszkodzenia ω jako uszkodzoną część powierzchni prostopadłej do kierunku rozciągania warunek nieściśliwości wewnętrznej można zapisać (zob. dodatek D.1):

$$\dot{\epsilon}_1(1 - \omega) + \dot{\epsilon}_2 = 0. \quad (3.42)$$

Wynika stąd względna zmiana objętości RVE:

$$\frac{d(\Delta V / V)}{dt} = \dot{\epsilon}_1 + \dot{\epsilon}_2 = \dot{\epsilon}_1 \omega, \quad (3.43)$$

a dla automatu komórkowego daje to następujący wzór na rozmiar w kierunku prostopadłym do rozciągania:

$$N_2(t_i) = \text{odd} \left(N_2(t_{i-1}) \left(1 - \frac{2}{N_1(t_i)} (1 - \omega(t_{i-1})) \right) \right). \quad (3.44)$$

Wzór (3.44) w skrajnych przypadkach stanu uszkodzenia oznacza, że element nieuszkodzony ($\omega=0$) nie zmienia objętości, a element zniszczony ($\omega=1$) nie odkształca się w kierunku poprzecznym do rozciągania.

3.4.1.4 Zmiana gęstości

Innym sposobem wprowadzenie zmian liczby komórek pustych jest zamodelowanie zmian gęstości. Dla materiału zewnętrznie nieściśliwego gęstość jest stała w całym procesie:

$$\rho = \frac{M}{V} = \frac{M_0}{V_0} = \rho_0, \quad (3.45)$$

gdzie ρ oznacza gęstość, indeks 0 oznacza wartości początkowe.

Jeżeli chcemy uwzględnić wpływ objętości pustek na zmianę objętości całkowitej, zamiast powiększać objętość RVE (wtedy RVE jest związany z określoną masą), można określić RVE jako element o stałej objętości, z którego na skutek wzrostu pustek masa „wycieka” na zewnątrz $M < M_0$, a gęstość się zmniejsza $\rho < \rho_0$. Do kontroli gęstości zastosowano prawo fizyczne oparte na zachowaniu rzeczywistego materiału.

W pracy zaproponowano dwie reguły zmiany gęstości, obie oparte na zależności gęstości od odkształcenia. Pierwsza została oparta na potęgowej zmianie gęstości według równania (2.83). Regułę tę można zapisać jako:

$$\rho = \rho_0 (1 - H\varepsilon^\gamma), \quad (3.46)$$

gdzie H i γ to parametry, a ε odkształcenie liniowe w kierunku rozciągania. Objętościowa gęstość pustek zmienia się w tym wypadku następująco:

$$f_v = f_{v0} + (1 - f_{v0}) H \varepsilon^\gamma, \quad (3.47)$$

gdzie f_{v0} jest początkową gęstością pustek. Zakładając, że objętość jest stała, równanie (3.46) można zapisać dla masy wewnątrz RVE:

$$M(t_i) = M_0 (1 - H\varepsilon(t_i)^\gamma), \quad (3.48)$$

odkształcenie wyliczane jest w każdym kroku zgodnie z równ. (3.27). Ponieważ należy uwzględnić jeszcze błąd związany z zachowaniem stałej objętości (zob. równ. 3.37), ostatecznie otrzymuje się zależność:

$$M(t_i) = M_0 (1 - H\varepsilon(t_i)^\gamma) + \Delta V^{\text{err}}. \quad (3.49)$$

Druga reguła pozwala na uwzględnienie mechanizmu koalescencji. Jeżeli duże pustki są blisko siebie, a dokładniej – ich odległość jest rzędu ich wymiarów – następuje znaczne przyspieszenie rozwoju uszkodzeń na skutek koalescencji pustek. Wzrost objętości pustek na skutek koalescencji jest widoczny np. na wykresie zmian gęstości powierzchniowej pustek dla stali 1045 (zob. [167]). Ma on znaczenie szczególnie dla

zniszczenia ciągłego. Aby uwzględnić ten efekt wprowadzono zamiast funkcji potęgowej występującej w równaniu (3.47) funkcję wykładniczą:

$$f_v = f_{v0} \theta^\varepsilon, \quad (3.50)$$

gdzie θ jest parametrem, f_v to gęstość objętościowa pustek, f_{v0} początkowa gęstość objętościowa. W algorytmie zamiast z odkształcenia wygodniej jest korzystać z czasu albo numeru iteracji. Zakładając, że w przybliżeniu $\varepsilon = \frac{2t_i}{N_0 T_{def} \Delta t} = \frac{2i}{N_0 T_{def}}$ równanie

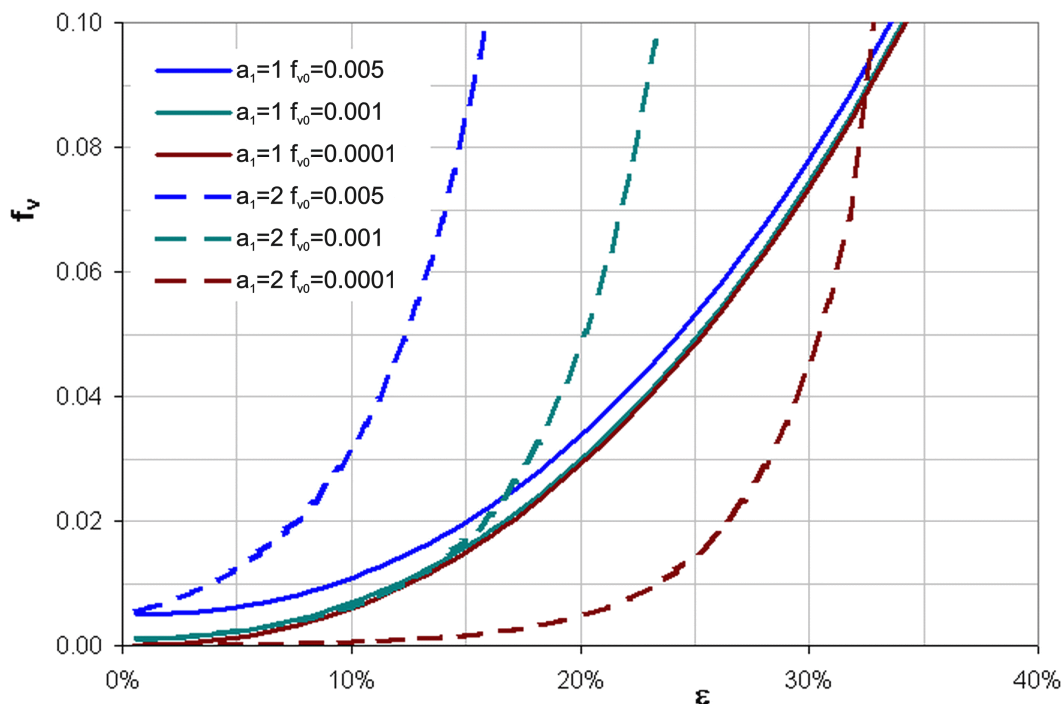
(3.50) można zapisać jako funkcję czasu (a dokładniej iteracji), wygodniejszą do użycia w algorytmie numerycznym:

$$f_v = f_{v0} q^{\frac{i}{T_{def}}} = f_{v0} q_0^{\frac{321 i}{N_0 T_{def}}}, \quad (3.51)$$

lub powracając do zapisu gęstości pustek w funkcji odkształcenia (dla małych odkształceń):

$$f_v = f_{v0} q_0^{\frac{321 \varepsilon}{2}}. \quad (3.52)$$

Parametr q został tak dobrany, aby wartość gęstości objętościowej przy koalescencji, którą przyjęto za $f_c=0.09$ (za [97]) była taka sama dla obu metod (por. rys. 3.11). Dodatkowo wprowadzono parametr q_0 , by uniezależnić gęstość pustek od rozmiaru N_0 . Przyjmując np. dla miedzi $H=1.17$ $\gamma=2.3$ (dopasowując równ. 2.83 do wyników doświadczenia opisanego w [16]) otrzymuje się dla prawa wykładniczego parametr $q_0=1.075$ dla $f_{v0}=0.001$, a $q_0=1.115$ dla $f_{v0}=0.0001$.



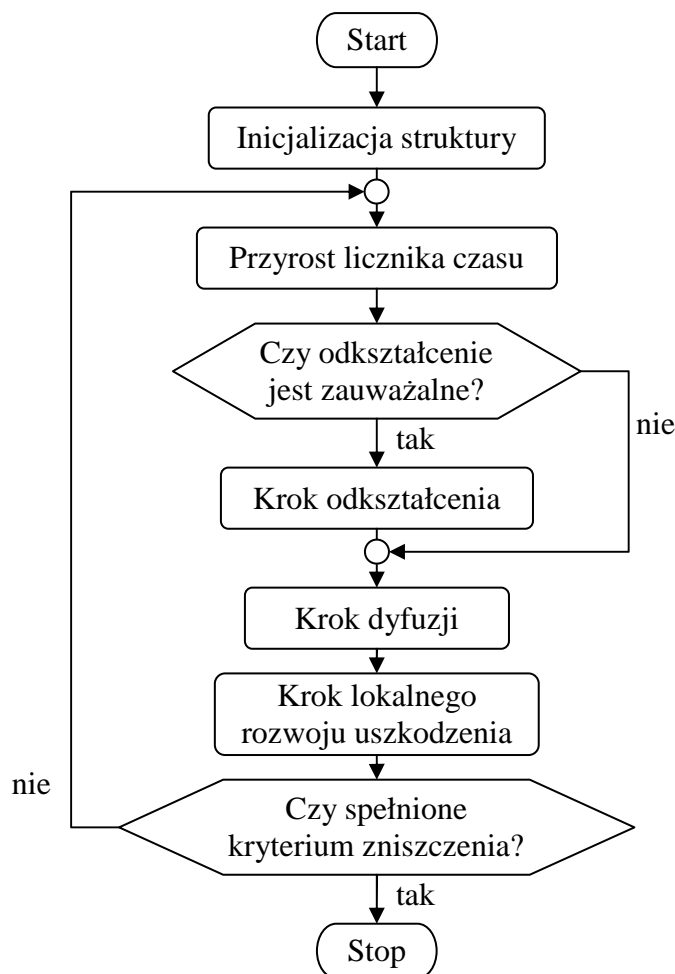
Rys. 3.11. Porównanie potęgowej ($a_1=1$) i wykładniczej ($a_1=2$) funkcji zmiany gęstości pustek dla różnych gęstości początkowych ($H=1.17$, $\gamma=2.3$, $q_0=1.115$).

3.4.2 Rozwój uszkodzeń

Algorytm rozwoju uszkodzeń jest to główny algorytm całego modelu. Składa się on z trzech kroków:

- odkształcenia,
- dyfuzji,
- lokalnego rozwoju uszkodzenia.

Umieszczenie ich w ramach całego algorytmu zostało przedstawione na schemacie (zob. rys. 3.12). Celem kroku odkształcenia jest przeniesienie odkształcenia zewnętrznego na strukturę RVE. Otrzymuje się w ten sposób odkształceniowy wzrost pustek. Dyfuzyjny wzrost pustek jest modelowany przy pomocy następnego kroku – dyfuzji. Trzeci krok – lokalnego rozwoju uszkodzenia – ma na celu wytworzenie nowych pustych komórek, nie poprzez wzrost odkształceniowy, który jest proporcjonalny w całej objętości RVE, ale symulując przy pomocy reguł automatu wzrost w wyniku lokalnych koncentracji odkształceń.



Rys. 3.12. Schemat blokowy zastosowanego algorytmu.

3.4.2.1 Krok odkształcenia

Krok odkształcenia jest wykonywany w tych iteracjach automatu komórkowego, w których zadana zmiana odkształcenia jest zauważalna przez automat. Zgodnie ze wzorem (3.25) minimalne możliwe zauważalne odkształcenie zależy od początkowego rozmiaru RVE, np. dla $N_0=321$ $\epsilon_{\min}=0.6\%$.

Algorytm kroku odkształcenia oparty jest na zmodyfikowanym algorytmie Matica-Geltmachera [110] (zob. rozdz. 3.1.4.1). Zgodnie z tym algorytmem liczba pustych komórek po kroku odkształceniowym wynosi (zob. równ. 3.13):

$$E^1(t_{i+1}) = E(t_i) + \alpha_{\text{new}} (E(t_{i+1}) - E(t_i)), \quad (3.53)$$

gdzie α_{new} jest parametrem algorytmu. Przy założeniu stałej objętości i masy liczba komórek pustych jest stała. W takim wypadku parametr α_{new} nie ma sensu i algorytm używa innego parametru α_{all} , odnoszącego się do całkowitej liczby pustek:

$$E^1(t_{i+1}) = \alpha_{\text{all}} E(t_{i+1}). \quad (3.54)$$

Kolejna różnica w porównaniu z algorytmem Matica-Geltmachera wynika z wprowadzenia ziaren. Masa ułamkowa każdej komórki jest obliczana osobno dla każdego ziarna $m(x, t_{i+1}, g)$, gdzie g jest numerem ziarna, x położeniem komórki. Rozróżniono dwa przypadki. Pierwszy z nich zachodzi, gdy wytrzymałość granicy ziaren jest porównywalna z wytrzymałością wnętrza ziaren. Stosuje się wtedy wzór podobny do wzoru (3.11), przy czym nowy stan jest określony przez to ziarno, które ma największą masę ułamkową (dla danej komórki):

$$s^1(x, t_{i+1}) = \begin{cases} g_{\max}(x, t_{i+1}) & \text{gd}y \sum_g m(x, t_{i+1}, g) > m_{\text{th}} \\ 0 & \text{w p.p.} \end{cases}, \quad (3.55)$$

gdzie $g_{\max}(x, t_{i+1}) = g_{\max} : \forall g \in \{1, \dots, G\} \quad m(x, t_{i+1}, g_{\max}) \geq m(x, t_{i+1}, g)$.

Drugi przypadek obowiązuje, gdy wytrzymałość granicy jest słabsza od wytrzymałości ziarna. W tym wypadku wartość progowa jest porównywana z największą masą ułamkową:

$$s^1(x, t_{i+1}) = \begin{cases} g_{\max}(x, t_{i+1}) & \text{gd}y m(x, t_{i+1}, g_{\max}) > m_{\text{th}} \\ 0 & \text{w p.p.} \end{cases}. \quad (3.56)$$

Wartość masy progowej oblicza się tak, by otrzymać pożądaną liczbę pustych komórek $E^1(t_{i+1})$ zgodnie ze wzorem (3.14), przy czym z lewej strony nierówności występuje wyrażenie ze wzoru (3.55) lub (3.56).

Krok odkształceniowy traktuje deformację RVE jako równomierną w całej swojej objętości. Jedyne zaburzenie, opisane równaniem (3.10), jest wprowadzone przez parametr r_k , zatem niemożliwe jest przy pomocy tej metody opisanie lokalnej koncentracji odkształcenia, jeżeli obszar tej koncentracji jest mniejszy od RVE.

Przykład kroku deformacji dla bardzo uproszczonego RVE o rozmiarze początkowym $N_0=3$, zbudowanego z 2 ziaren został umieszczony w dodatku D.2.

3.4.2.2 Krok dyfuzji

Algorytm dyfuzyjnego wzrostu pustek został oparty na:

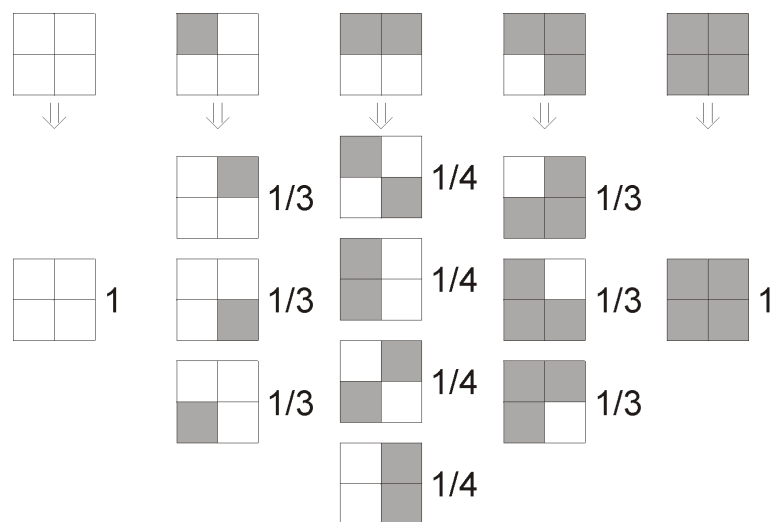
- przypadkowym ruchu swobodnych pustych komórek,
- agregacji pustych komórek w pustki.

Przykładowy ruch pustych komórek symuluje dyfuzyjny ruch wakansów. Jest on zrealizowany przy pomocy sąsiedztwa Margolusa [108], powstałego w wyniku podzielenia siatki automatu na bloki 2x2. Ruch pustej komórki odbywa się losowo wewnątrz bloku poprzez wymianę stanów. Wszystkie możliwe ruchy są tak samo prawdopodobne (zob. przykładowe stany końcowe dla wybranych stanów

początkowych na rys. 3.13). W następnej iteracji siatka bloków jest przesuwana o jedną komórkę w losowo wybranym kierunku. Algorytm ten zapewnia stałą liczbę pustych komórek w każdej iteracji. Współczynnik dyfuzji D dla takiego modelu można oszacować ze wzoru:

$$D = p \frac{\Delta x^2}{\Delta t}, \quad (3.57)$$

gdzie p jest średnim prawdopodobieństwem ruchu komórki pustej w określonym kierunku, Δt to krok czasowy automatu, a Δx rozmiar liniowy jednej komórki. Wartość p dla przyjętego algorytmu wynosi około $1/6$ (jest to wartość przybliżona, gdyż pomija mniej prawdopodobne kombinacje dwóch pustych komórek w bloku).



Rys. 3.13. Reguły przejścia dla wybranych stanów początkowych dla kroku dyfuzyjnego wraz z ich prawdopodobieństwem.

Agregacja pustych komórek w pustki realizowana jest przy pomocy kryterium energetycznego, według którego w wyniku dyfuzji powstaje konfiguracja o mniejszym poziomie energii. Czyli niedozwolone są takie ruchy dyfuzyjne, które zwiększają energię układu. Miarą energii jest długość granicy, która jest proporcjonalna do energii powierzchniowej. Dla procesu powstawania pustek na granicach ziaren mają znaczenie energia powierzchni pomiędzy ziarnami i energia powierzchni swobodnej między pustką a masą (por. [147]). Krok dyfuzji automatu komórkowego dąży więc do minimalizacji funkcjonału:

$$J = w_{e-m} l_{e-m} + w_{g-g} l_{g-g}, \quad (3.58)$$

gdzie l_{e-m} , l_{g-g} są to długości granic pomiędzy pustką i masą oraz pomiędzy dwoma sąsiednimi ziarnami, natomiast w_{e-m} , w_{g-g} to współczynniki wagowe dla tych rodzajów granic. Wskaźnik J jest obliczany dla bloku powiększonego o jedną komórkę w każdą stronę (czyli 4x4). Jeżeli w wyniku kroku dyfuzyjnego wartość J dla bloku uległaby zwiększeniu stany komórek pierwotnego bloku (2x2) nie ulegają zmianie, jeżeli wartość J miałaby ulec zmniejszeniu lub nie zmienić się, dokonywana jest zamiana stanów. Blok jest powiększony, aby uwzględnić „dalsze” oddziaływania lokalne, a tym samym zapewnić większą stabilność metody.

Zaproponowano dwie pary wartości współczynników wagowych. Pierwsza została oparta na naturalnej proporcji pomiędzy wartościami energii powierzchniowej powierzchni swobodnej i powierzchni granicy ziaren, która dla wielu materiałów

wynosi około 2 (wg [150] od 2.5 do 2.8). Przy takich parametrach pustki dają naturalny soczewkowaty przekrój (por. rys. 2.18). Aby zamodelować takie pustki, przyjęto $w_{e-m}=2$, $w_{g-g}=1$. Druga para współczynników wagowych modeluje pustki szczelinowe, dla których dyfuzja powierzchniowa gra pomijalną rolę. Dla takich pustek przyjęto $w_{e-m}=0$, $w_{g-g}=1$.

Sposób obliczania długości granic został przyjęty po różnych próbach, tak by uzyskać rozwiązanie najbardziej zbliżone do naturalnego. Ponieważ reguły automatu zostały ustalone dla sąsiedztwa Moore'a, takie też sąsiedztwo wydawało się najwłaściwsze do liczenia długości granic. Jednak takie samo traktowanie komórek, które sąsiadują tylko „rogami” z komórkami sąsiadującymi „ściankami” powodowało, że obszar powstającej pustki nie był zawsze spójny. Dlatego zdecydowano się na podwójne liczenie sąsiedztwa po „ściankach” w stosunku do sąsiedztwa po „rogu”.

Oprócz algorytmu, w którym wszystkie puste komórki są ograniczone kryterium energetycznym, rozważano także algorytm, w którym kryterium to jest związane z punktami zarodkowania pustek (zob. rozdz. 3.3.3). Stan taki został opisany przez dodatkową zmienną stanu s_{iv} . Puste komórki, dla których $s_{iv}=0$ są „swobodne”, tzn. nie podlegają kryterium energetycznemu. Ich stan się zmienia na $s_{iv}=1$, jeżeli znajdują się w sąsiedztwie innej pustki o $s_{iv}=1$. Punkty takie są „związane” kryterium energetycznym. Kryterium temu podlegają także puste komórki próbujące „przekroczyć” granicę ziaren. Zapobiega to zbyt niemu zniekształceniu granicy. Zarodki pustek, czyli początkowe komórki o $s_{iv}=1$ mogą być rozmieszczane losowo, symulując wtrącenia w matrycy ziarna lub na granicy. Mogą być też tworzone w trakcie symulacji w punktach potrójnych, tzn. w pustych komórkach, które sąsiadują z trzema (lub więcej) różnymi ziarnami. Zmienna stanu s_{iv} jest zachowywana dla pustych komórek w kroku odkształceniowym. W trakcie odkształcenia, jeżeli na miejscu komórki z wartością $s_{iv}=1$ powstaje jakakolwiek komórka pusta ma ona wartość $s_{iv}=1$.

3.4.2.3 Krok lokalnego rozwoju uszkodzenia

Krok lokalnego rozwoju uszkodzenia został wzorowany na analogicznym kroku w modelu Matica-Geltamachera (zob. rozdz. 3.1.4.1). Komórki masowe stają się komórkami pustymi, tak by ich liczba na koniec iteracji osiągnęła pożądaną wielkość – określoną przez równanie (3.36). Krok ten wykonywany jest w każdej iteracji, pomimo iż teoretycznie powinno wystarczyć, aby był wykonywany tylko po kroku odkształcenia – krok dyfuzji nie zmienia liczby pustych komórek. Jednak algorytm zastosowany w kroku lokalnego rozwoju uszkodzenia nie jest idealny i wymagana wielkość pustych komórek jest osiągana po kilku iteracjach.

Podobnie jak w modelu Matica-Geltamachera zastosowana została probabilistyczna reguła zmiany stanu określona przez równanie (3.15), gdzie średnie prawdopodobieństwo p_0 jest zdefiniowane we wzorze (3.16). Odmienne natomiast przyjęto sposób liczenia współczynnika wagowego $W(z,t_i)$, gdzie z oznacza typ sąsiedztwa. Współczynnik ten jest znormalizowaną funkcją współczynników $B(z)$, wyliczoną dla każdej komórki x :

$$W(x,t_{i+1}) = \frac{B(z(x))M^1(t_{i+1})}{\sum_{x: s^1(x,t_{i+1})=1} B(z(x))}, \quad (3.59)$$

gdzie $z(x)$ jest typem sąsiedztwa komórki x , suma w mianowniku jest dokonywana po wszystkich komórkach masowych istniejących po poprzednim kroku, a $M^1(t_i)$ oznacza

liczbę tych komórek. Zdefiniowane zostały dwie reguły różniące się definicją współczynnika $B(z)$.

Pierwsza reguła promuje rozwój pustek po granicy ziaren. Wartości parametru $B(z)$ w zależności od otoczenia komórki opisane są w tabeli 3.6.

Tabela 3.6. Definicja współczynnika $B(z)$ w zależności od otoczenia dla reguły promującej rozwój pustek po granicy ziaren ($a_4=0$).

$B(z)$	opis otoczenia
0	jednorodne wnętrze ziarna
10	granica dwóch ziaren
100	granica trzech ziaren
1000	pustka na granicy ziaren

Druga reguła jest przeciwieństwem poprzedniej i przyjmuje, że współczynnik B nie zależy od rodzaju sąsiedztwa i zawsze jest równy 1. Oznacza to, że każda komórka masowa może stać się pustą z takim samym prawdopodobieństwem p_0 .

3.4.3 Miara uszkodzenia i stan zniszczenia RVE

Na koniec każdej iteracji dokonywana jest ocena stanu uszkodzenia RVE. Uszkodzenie jest liczone niezależnie dla szczelin poziomych i pionowych, a następnie za miarę uszkodzenia uznaje się większą z tych wartości. Uszkodzenie pionowe liczone jest jako stosunek maksymalnej długości rzutu klastrera pustych komórek na oś pionową w stosunku do długości pionowej krawędzi RVE:

$$\omega_1(t_i) = \frac{\max(d_{j2}(t_i))}{N_2(t_i)}, \quad (3.60)$$

gdzie $d_{j2}(t_i)$ oznacza rozmiar pionowy j -tego klastrera pustek w chwili t_i . Analogicznie definiowane jest uszkodzenie poziome $\omega_2(t_i)$. Miarą uszkodzenia jest większa z wartości $\omega_1(t_i)$, $\omega_2(t_i)$:

$$\omega(t_i) = \max(\omega_1(t_i), \omega_2(t_i)). \quad (3.61)$$

Miara ta jest używana jako parametr uszkodzenia w równaniach makroskopowych.

Za stan zniszczenia uznano taką konfigurację automatu, która nie jest w stanie przenosić dalszych obciążeń, czyli puste komórki tworzą spójny obszar (klastr) łączący przeciwległe krawędzie elementu; odpowiada mu wartość $\omega=1$ (por. rys. 2.16d). Z uwagi na to, że rozważano tylko rozciąganie w kierunku poziomym, za stan zniszczenia powinna być uznana taka konfiguracja, gdzie połączone są tylko krawędź górna z dolną. Ponieważ jednak badano też elementy o bardzo małej liczbie ziaren, dla których taka ścieżka nie zawsze była możliwa, zdecydowano się na uproszczenie i takie same traktowanie szczelin pionowych i poziomych.

3.4.4 Lista parametrów opisujących proces

Oprócz parametrów liczbowych opisujących proces w algorytmie występuje szereg znaczników (flag), które uaktywniają lub wyłączają poszczególne procedury. Zostały one opisane przy pomocy wektora \mathbf{a} – wskazującego użyty algorytm, złożonego z poszczególnych flag:

$$\mathbf{a} = [a_0 \quad \dots \quad a_{A-1}], \quad (3.62)$$

gdzie A oznacza liczbę parametrów flagowych. Przyjęto zasadę, że wartość 0 oznacza procedurę promującą rozwój zniszczenia kruchego, a wyższe liczby zniszczenia bardziej ciągłego.

T_{def} – liczba iteracji między krokami odkształcenia;

a_0 – $a_0=0$ – nieściśliwość zewnętrzna (równ. 3.41) lub $a_0=1$ – wewnętrzna (równ. 3.44);

a_1 – dla stałej objętości ($a_0=0$): $a_1=0$ – stała gęstość, $a_1=1$ – potęgowe prawo zmiany gęstości lub $a_1=2$ – wykładnicze; dla $a_0=1$ parametr jest nieistotny (zapisane jako $a_1=0$);

H, γ – parametry w potęgowym prawie zmiany gęstości (dla $a_1=1$);

q_0 – parametr w wykładniczym prawie zmiany gęstości (dla $a_1=2$);

a_2 – $a_2=0$ – wytrzymałość granicy mniejsza od wytrzymałości ziarna lub $a_2=1$ gdy jest jej równa;

α_{all} – parametr oznaczający proporcje komórek pustych po pierwszym etapie do wszystkich komórek pustych $\alpha_{\text{all}} = E^1(t_i)/E(t_i)$ (dla $a_0=0$ i $a_1=0$);

α_{new} – parametr oznaczający proporcje nowych komórek pustych utworzonych w pierwszym etapie do wszystkich nowo utworzonych komórek w chwili t_i
 $\alpha_{\text{new}}=(E^1(t_i)-E(t_i-1))/(E(t_i)-E(t_i-1))$ (dla $a_0=1$ lub $a_1=1$ lub $a_1=2$);

a_3 – $a_3=0$ – pustki szczelinowe ($w_{e-m}=0, w_{g-g}=1$), $a_3=1$ – pustki owalne ($w_{e-m}=2, w_{g-g}=1$), $a_3=2$ – inne określone bezpośrednio przez w_{e-m} i w_{g-g} ;

w_{e-m} – waga granicy pustka-ziarno w algorytmie etapu dyfuzyjnego;

w_{g-g} – waga granicy między ziarnami w algorytmie etapu dyfuzyjnego;

a_4 – $a_4=0$ – współczynnik $B(z)$ przyjęty wg tabeli 3.6 w zależności od liczby pustek i ziaren w sąsiedztwie lub $a_4=1$ – stały niezależny od sąsiedztwa;

a_5 – $a_5=1$ – pustki mogą się rozwijać wszędzie lub $a_5=0$ – tylko w punktach zarodkowania pustek – kontrola stanu s_{lv} .

Dla algorytmu opisanego w niniejszej pracy $A=6$. Pomimo, iż nie wszystkie kombinacje są dopuszczalne, to i tak pozostaje możliwość wyboru 64 różnych algorytmów. W następnych rozdziałach 4 i 5 omówiono te kombinacje, które zostały wybrane jako istotne dla opisanego rozważanych procesów.

3.5 Ograniczenia zastosowanego modelowania CA

Przedstawiony powyżej model posiada szereg własności, które ograniczają jego stosowalność. Poniżej omówiona najważniejsze z nich. Zwrócono uwagę także na to, czy ograniczenia te są cechą samego modelu, czy też zjawisk, które opisują.

Wymiar przestrzeni

Podstawowym uproszczeniem przyjętego modelu w stosunku do opisywanego zjawiska jest przyjęcie 2-wymiarowej przestrzeni. Spowodowane jest to przede wszystkim ograniczeniami sprzętowymi. Nie ma żadnych przeszkód, by zaproponowany algorytm zastosować dla automatu 3-wymiarowego.

Rozmiary

Kluczowym parametrem modelu jest rozmiar początkowy RVE mierzony przez liczbę komórek automatu, zwany także rozdzielczością automatu. Jego wybór zależy od wymiaru najmniejszego defektu, który jest przedmiotem badania. Gdy pojedyncza komórka ma rozmiar wakansu, czyli 10^{-10} m, natomiast RVE zajmuje ok. 100 ziaren, czyli ok. 10 ziaren na krawędzi, każde po 10^{-5} m, to daje to razem rozmiar 10^{-4} m. Automat taki miałby $N_0=10^6$, czyli razem 10^{12} komórek w stanie początkowym. W praktyce dużo bardziej realne jest założenie, że rozmiar komórki odpowiada rozmiarowi minimalnej pustki (zob. rozdz. 3.3.1.2). Daje to automaty o początkowej wielkości około $10^3 \times 10^3$ komórek. Istotne jest więc pytanie, jak wielkość ta wpływa na wyniki symulacji. Odpowiedź na to pytanie jest utrudniona przez fakt, że nakładają się na siebie dwa efekty: rozdzielczość automatu (czyli, jak mała jest najmniejsza zauważalna pustka) i wielkość RVE mierzona w ilości ziaren.

Rozmiar RVE (w komórkach) ma także istotny wpływ na ilość komórek pustych potrzebnych od osiągnięcia stanu zniszczenia. Jest to szczególnie istotne w przypadku zniszczenia kruchego, gdzie odkształcenia są małe i można uznać, że rozmiar RVE w stanie zniszczenia jest w przybliżeniu równy rozmiarowi początkowemu N_0 . Wynika stąd, że minimalna wielkość pustych komórek: $E_{\min} \geq N_0$. Czyli dla modelu nieściśliwego zewnętrznie minimalna gęstość pustek niezbędna do zniszczenia $f_{v\min} = \frac{1}{N_0}$, co dla $N_0=321$ daje wartość $f_{v\min}=0.3\%$. Porównując tę wielkość z początkową wielkością gęstości wakansów, wydaje się ona o wiele za duża. Można porównać ją jednak do zmiany gęstości przy zniszczeniu, a ta jest już podobnego rzędu (np. wg [11] 0.25%).

Modelowanie koncentracji odkształceń i poślizgów

Definicja RVE (zob. rozdz. 2.1.4.2) wymaga, by wielkości makroskopowe były jednorodne w jego obszarze. Dotyczy to także odkształcenia. Jednak w wypadku materiału z pustkami jest to warunek niemożliwy do spełnienia, gdyż w okolicach pustek pojawiają się silne koncentracje odkształceń. Dlatego należałoby wprowadzić mikroodkształcenia, których rozkład wewnątrz RVE byłby zależny od struktury materiału, a ich wielkość po zhomogenizowaniu odpowiadałaby odkształceniom w skali makro. Przyjęty model tego nie uwzględnia. Jako szczególny rodzaj koncentracji odkształceń można uznać też mikroślizgi, które są jednym z mechanizmów koalescencji pustek, istotnego dla dużych prędkości odkształceń.

Wpływ tych mechanizmów na czas do zniszczenia próbowano uwzględnić w inny sposób – stosując wykładniczą funkcję zmiany gęstości lub przy pomocy kroku

lokalnego rozwoju uszkodzenia, jednak sposoby te nie zawsze dawały oczekiwane skutki.

Parametry globalne

Niektóre z reguł opisanego algorytmu korzystają z parametrów globalnych, tzn. wyznaczonych dla całego RVE (np. liczba komórek masowych). Jest to sprzeczne z ideą automatów komórkowych, gdzie komórki powinny być zależne tylko od swoich najbliższych sąsiadów, a nie od wszystkich komórek w elemencie. Parametry globalne wykorzystywane są w kroku odkształceniowym, gdzie prawo zachowania masy jest realizowane globalnie, a także w kroku lokalnego rozwoju uszkodzenia do wyznaczenia prawdopodobieństwa p_0 . Oprócz niezgodności z ideą, użycie parametrów globalnych spowalnia także samo wykonanie algorytmu, utrudniając użycie automatów o dużej rozdzielczości.

Efekt wysycenia dyfuzji

W niektórych warunkach dla bardzo wolnych wymuszeń proponowana reguła wykazuje zjawisko wysycenia. Zaczyna brakować swobodnych pustych komórek, które mogłyby poprzez dyfuzję zwiększyć pustkę. Oprócz wspomnianego powyżej niedostatku mechanizmu koalescencji powoduje to dodatkowe zwiększenie czasu do zniszczenia i odkształcenia niszczącego, a czasami nawet uniemożliwia osiągnięcie stanu zniszczenia RVE. Efekt ten jest zauważalny przede wszystkim dla algorytmu o stałej liczbie pustych komórek (model zakładający nieściśliwość zewnętrzną).

Podobny efekt, ale wywołany przez inne przyczyny, występuje w modelach dyfuzyjnego wzrostu pustek. W równaniach opisujących te modele występuje naprężenie progowe (zob. równ. 2.70), którego rola jest bardzo podobna do opisanego powyżej efektu, bo naprężenie równe progowemu hamuje wzrost pustek (zob. [150]).

Samozniszczenie

Przeciwny efekt do opisanego powyżej daje nadmiar swobodnych komórek pustych w stanie początkowym. Dla powolnych odkształceń, przy dużej liczbie pustych komórek, RVE może się zniszczyć w pierwszym kroku odkształcenia, wyłącznie w wyniku działania kroków dyfuzji. Gęstości objętościowe pustek, przy których dochodzi do tego efektu są duże (większe od 1%) i niespotykane w doświadczeniach (bez wymuszenia).

Rodzaje dyfuzji

W materiałach polikrystalicznych z pustkami wyróżnia się trzy rodzaje dyfuzji: objętościową, po granicach ziaren i powierzchniową (po powierzchni pustek). Pierwsza z nich ma charakter trójwymiarowy, a dwie pozostałe dwuwymiarowy. W modelu dwuwymiarowym wymiar ruchów dyfuzyjnych jest obniżony o jeden, co na pewno zniekształca ogólny obraz procesu.

Dla wielu materiałów współczynniki dyfuzji powierzchniowej są dużo większe niż dyfuzji po granicach ziaren, dając równowagowy, soczewkowaty kształt pustek. Przyjęty w pracy model dyfuzji nie wykazuje takiej różnicy, co preferuje pustki o kształcie dendrycznym (por. rys. 4.9). Soczewkowatemu kształtowi pustek powinna sprzyjać przyjęta dla ($a_3=1$) proporcja energii powierzchniowych granicy ziaren i powierzchni swobodnej pustek, jednak warunek ten bez wzmocnienia dyfuzji powierzchniowej okazuje się niewystarczający.

Koncentracja wakansów

Według teorii dyfuzyjnego wzrostu pustek koncentracja wakansów zależy od przyłożonego naprężenia. Różne modele, w różny sposób przenoszą to naprężenie na naprężenie lokalne panujące na granicy ziaren, w sąsiedztwie powstającej pustki. Jednak występuje ono w każdym modelu. Zdefiniowany tu automat nie zawiera żadnej zmiennej opisującej naprężenie, ani lokalnie, ani globalnie, dlatego też nie jest w stanie uwzględnić tego zjawiska.

Koncentracja wakansów jest modelowana przy pomocy rozkładu swobodnych pustych komórek. Rozważyć można dwa skrajne przypadki. Pierwszy, odpowiadający teorii o natychmiastowej nukleacji pustek, został zamodelowany poprzez dużą początkową gęstość pustek. Gęstość ta w sposób pośredni może odpowiadać przyłożonemu naprężeniu. Model taki odpowiada teorii nieograniczonego wzrostu dyfuzyjnego pustek. W drugim skrajnym przypadku początkowa gęstość pustek wynosi zero, a nowe puste komórki powstają wyłącznie na skutek odkształcenia. Dla małych prędkości odkształcenia prowadzi to do sytuacji wysycenia swobodnych pustych komórek i daje obraz podobny do teorii dyfuzyjnego wzrostu pustek ograniczonego odkształceniem.

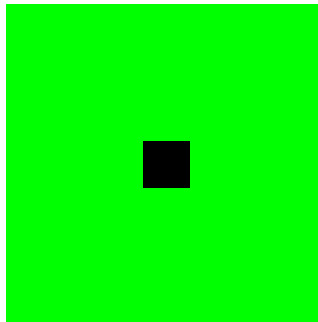
4 Symulacje rozwoju uszkodzeń w materiałach polikrystalicznych

4.1 Wzrost pustek

4.1.1 Odkształceniowy wzrost pojedynczej pustki

Aby przeanalizować cechy odkształceniowego wzrostu pustek dla różnych reguł jako stan początkowy wybrano pojedyncze ziarno z centralną pustką. Początkowa pustka zajmowała około 2% powierzchni początkowej RVE ($f_{v0}=0.02$). Aby wyłączyć dyfuzję do analizy ustalono parametr $\alpha_{all}=1$ tak, by nowe komórki puste mogły powstać wyłącznie w wyniku deformacji. Ponieważ algorytm deformacji nie zawsze wytwarza pożądaną liczbę pustych komórek, dodatkowo ustalono flagę $a_4=0$, co nie pozwala na tworzenie nowych pustych komórek w kroku lokalnego rozwoju uszkodzenia w przypadku pojedynczego ziarna.

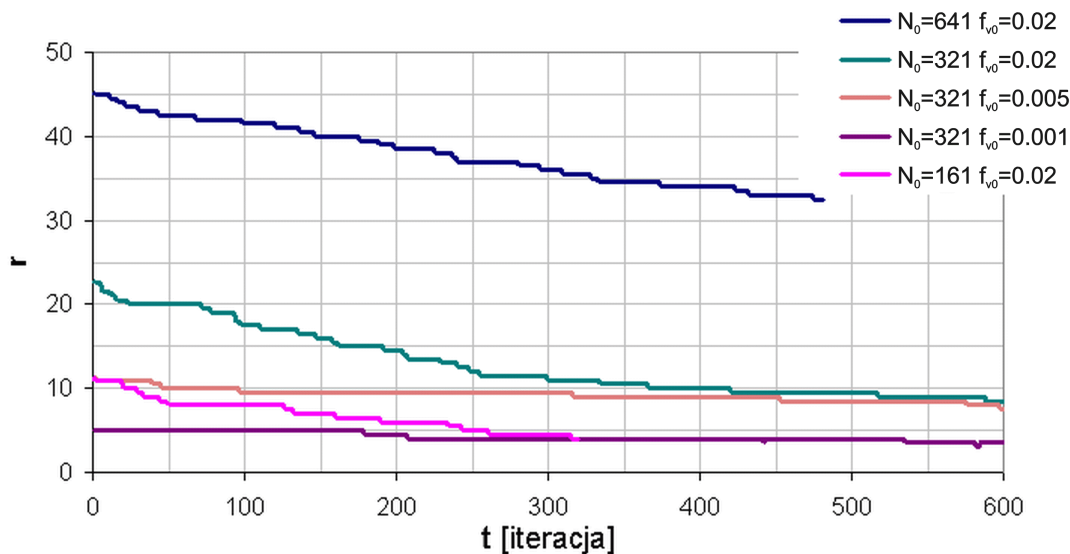
Porównano wzrost pustki dla czterech algorytmów, różniących się przede wszystkim wpływem deformacji na rozwój pustki, określonych przez wartości wektora flag **a**: 00xx0x, 10xx0x, 01xx0x, 02xx0x, gdzie x oznacza parametr nieistotny w tym przykładzie. Dla każdego z wybranych algorytmów przeprowadzono symulację dla trzech różnych wielkości RVE (rozdzielczości automatu) $N_0=161, 321, 641$. Obraz struktury początkowej dla $f_{v0}=0.02$ przedstawiono na rys. 4.1. Dodatkowo dla $N_0=321$ porównano wyniki z mniejszą pustką początkową – o wymiarze w komórkach odpowiadającej $N_0=161$, co dało początkową powierzchnię pustki $f_{v0}=0.005$, a także z bardzo małą pustką $f_{v0}=0.001$. Początkowy kształt pustki był kwadratowy. Parametry zmiany gęstości zostały użyte takie jak podano przykładowo na końcu rozdz. 3.4.1.4 ($H=1.17, \gamma=2.3, q_0=1.075$). Rozciąganie wykonywane było zawsze w kierunku poziomym, oznaczanym jako 1.



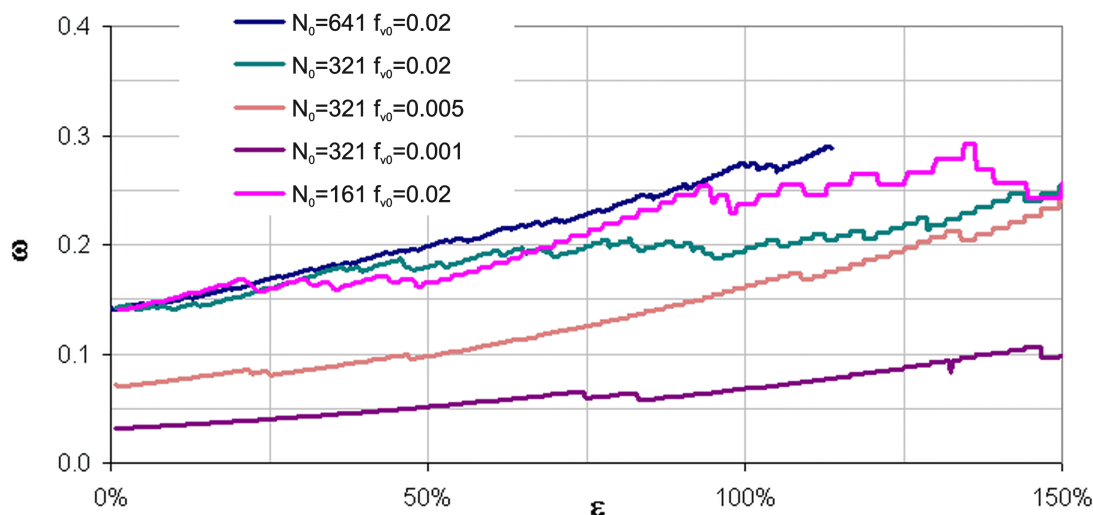
Rys. 4.1. Obraz struktury początkowej pojedynczego ziarna z centralną pustką $N_0=321, f_{v0}=0.02$.

4.1.1.1 Reguła 00xx0x

Reguła ta zapewnia w trakcie całego procesu w przybliżeniu stałą objętość i masę, a dokładnie kontroluje liczbę komórek pustych. Działanie tego algorytmu opisanego w rozdz. 3.4.1.2 obrazuje wykres na rys. 3.10b. Zachowanie stałej liczby komórek pustych przy jednorodnym odkształceniu powoduje, że promień poprzeczny pustki r – liczony w komórkach automatu jako połowa wymiaru liniowego pustki w kierunku poprzecznym do rozciągania – maleje (zob. rys. 4.2a). Jednocześnie maleje też wymiar poprzeczny RVE, co powoduje wzrost parametru uszkodzenia (zob. rys. 4.2b). Po osiągnięciu pewnej wielkości kształt pustki zmienia się proporcjonalnie do rozmiaru RVE i wartość parametru uszkodzenia ustala się na poziomie ok. $0.2 \div 0.25$.



Rys. 4.2a. Wykres zmian promienia pojedynczej pustki r dla algorytmu 00xx0x.



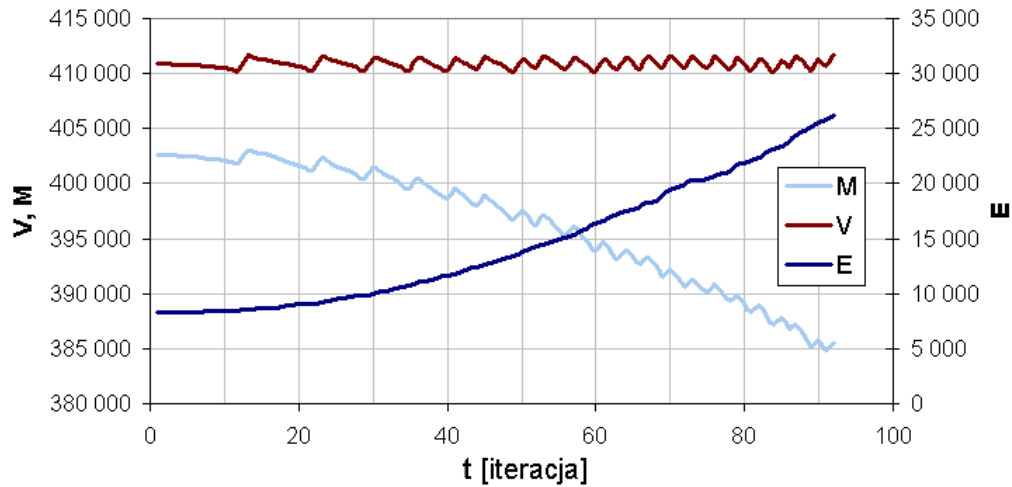
Rys. 4.2b. Wykres zmian parametru uszkodzenia w zależności od odkształcenia dla wzrostu pojedynczej pustki i algorytmu 00xx0x.

4.1.1.2 Reguła 01xx0x

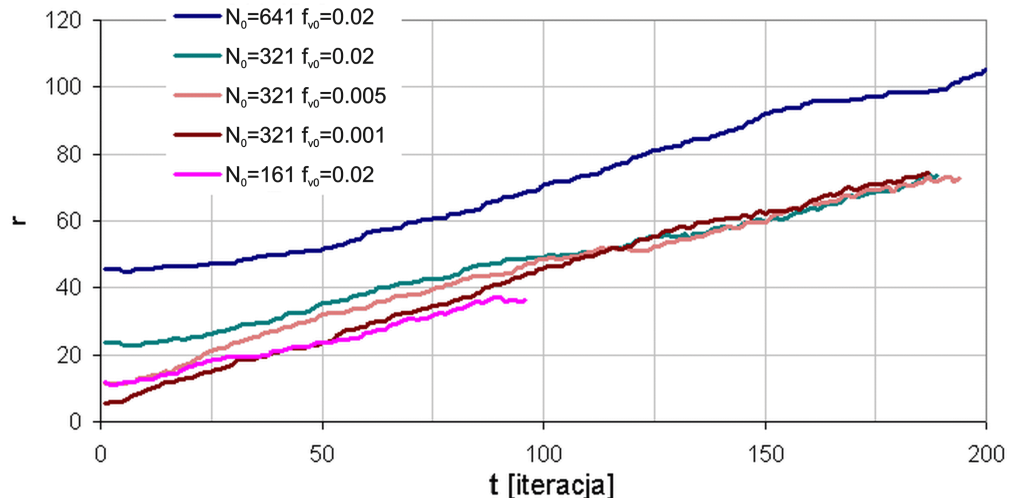
Jest to reguła, w której objętość elementu jest zachowana, natomiast liczba pustych komórek rośnie kosztem komórek masowych (zob. rys. 4.3). Prędkość bezwzględnej zmiany promienia pustki jest najbardziej stała spośród wszystkich badanych reguł (rys. 4.4a). Dlatego prędkość względnej zmiany promienia dla początkowych czasów jest duża, natomiast później stabilizuje się na poziomie zbliżonym do prędkości odkształcenia. Kształt pustek jest proporcjonalny, wymiar poprzeczny jest zbliżony do podłużnego, dzięki czemu możliwe jest osiągnięcie stanu zniszczenia. Odkształcenie przy zniszczeniu jest w przybliżeniu stałe i wynosi pomiędzy 0.7 a 0.8 (rys. 4.4b). Świadczy to o niezależności wzrostu odkształceniowego wg tej reguły od rozdzielczości automatu.

Pustka o mniejszej względnej średnicy początkowej ($N_0=321$, $f_{v0}=0.005$) zachowuje się początkowo podobnie jak pustka o podobnej średnicy liczonej w komórkach ($N_0=161$, $f_{v0}=0.02$), później jednak prędkość rośnie tak, by osiągnąć wielkość podobną dla automatu o tej samej rozdzielczości, czyli końcowy rozmiar

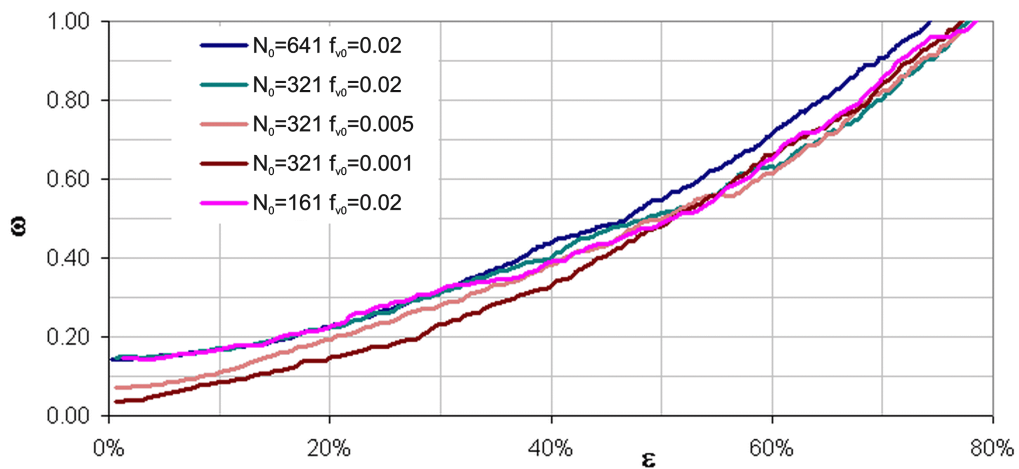
poprzeczny pustki nie zależy też od wielkości początkowej (od wielkości tej zależy natomiast rozmiar podłużny).



Rys. 4.3. Zmiany objętości RVE (V), liczby komórek masowych (M) i pustych (E) dla algorytmu potęgowej zmiany gęstości pustek 01xx0x, $N_0=641$, $f_{v0}=0.02$.



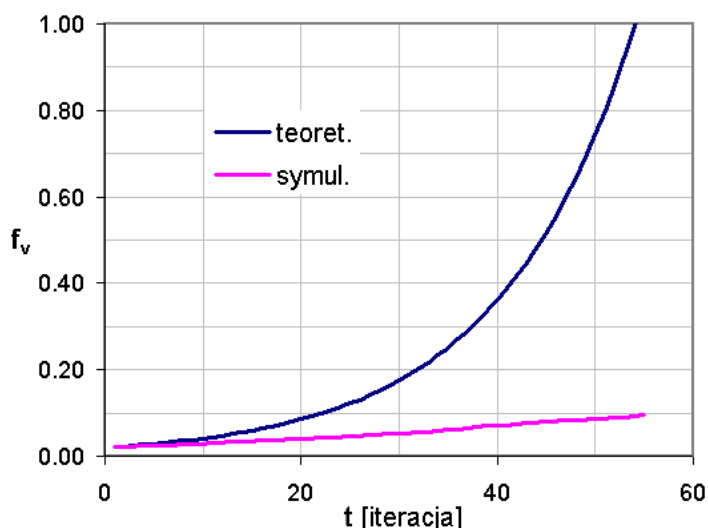
Rys. 4.4a. Wykres zmian promienia pojedynczej pustki r dla reguły 01xx0x.



Rys. 4.4b. Wykres zmian parametru uszkodzenia w zależności od odkształcenia dla wzrostu pojedynczej pustki i reguły 01xx0x.

4.1.1.3 Reguła 02xx0x

Jest to reguła, w której podobnie, jak w poprzedniej występuje wzrost liczby komórek pustych przy stałej objętości zewnętrznej RVE. Równanie opisujące ten wzrost ma charakter potęgowy i dla przyjętej stosunkowo dużej gęstości początkowej $f_{v0}=0.02$ prędkość wzrostu promienia pustki przyjmuje maksymalną możliwą wartość. Całkowita liczba pustych komórek wynika z liczby komórek pustych wymaganych przez algorytm zmiany gęstości i możliwości odkształcenia pustki przez deformację. W przypadku reguły 02xx0x i postawionego zadania rozbieżność pomiędzy założoną wartością gęstości objętościowej pustek i możliwościami utworzenia nowych pustek przez deformację jest znaczna (zob. rys. 4.5). Ograniczenie rozprzestrzenia się dowolnego zaburzenia jest znaną cechą automatów komórkowych (por. [7]) – nie może ono rozprzestrzeniać się szybciej niż o jedną komórkę (dokładniej o promień otoczenia) na iterację. Dlatego nowych pustych komórek może powstać tylko tyle, ile jest komórek masowych sąsiadujących z istniejącymi komórkami pustymi. Reguła 02xx0x zatrzymuje się dla odkształcenia równego ok. 30%, gdy założona wartość gęstości objętościowej pustek staje się większa niż 1. Uzyskana wartość gęstości objętościowej wynosi wtedy ok. 0.1, natomiast wartość parametru uszkodzenia dochodzi do ok. 0.35. W zadaniu o mniejszej gęstości początkowej pustek odkształcenie graniczne było większe, natomiast pozostałe wielkości graniczne są na tym samym poziomie.



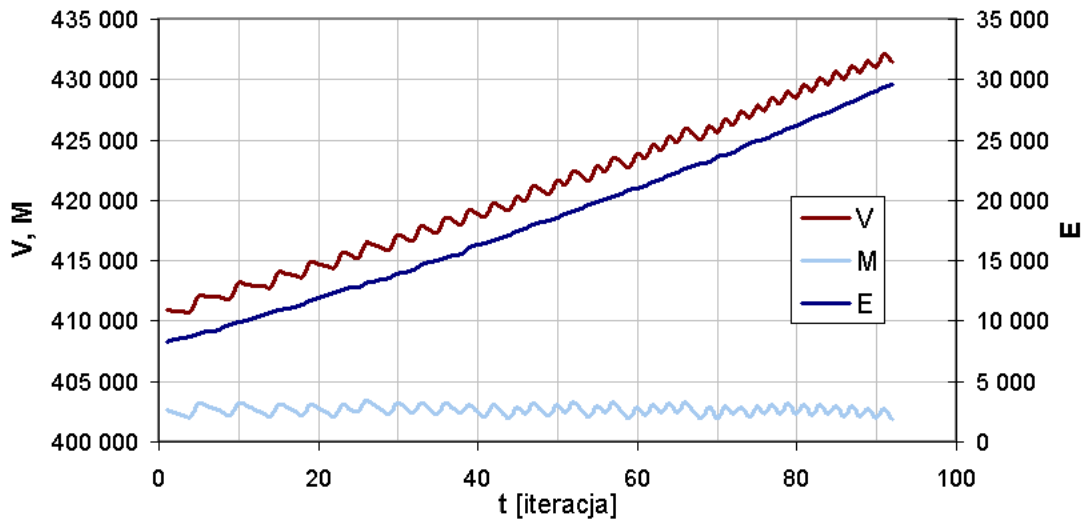
Rys. 4.5. Wymagana (teoret.) gęstość pustek (zgodnie z równ. 3.51) w porównaniu z gęstością uzyskaną w symulacji dla zadania wzrostu pojedynczej pustki $a=02xx0x$, $N_0=321$, $f_{v0}=0.02$.

Aby osiągnąć stan zniszczenia, należałoby spowolnić proces odkształcania, pozwalając na tworzenie brakujących pustych komórek w kroku lokalnego rozwoju uszkodzenia. Przy założeniach postawionych dla niniejszego zadania jest to jednak niemożliwe.

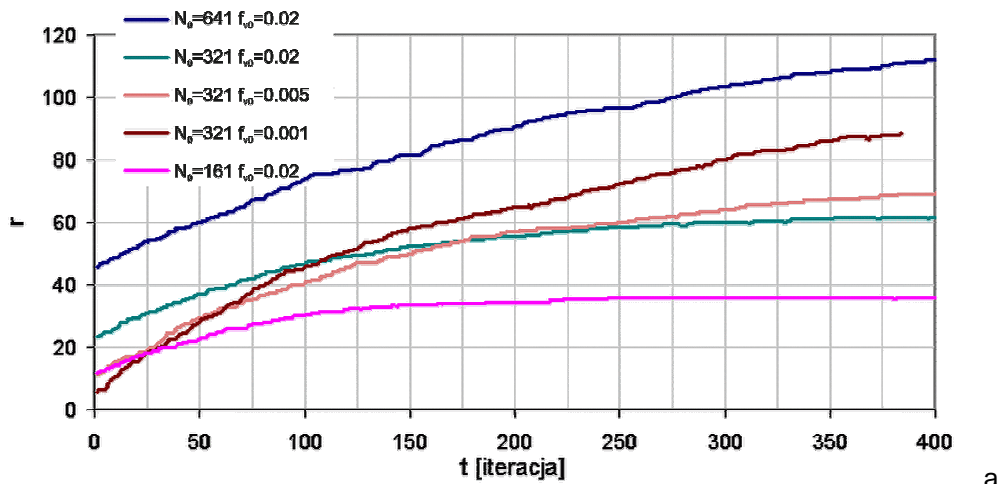
4.1.1.4 Reguła 10xx0x

Reguła ta pozwala na wzrost objętości RVE w zależności od wartości parametru uszkodzenia. Wzrost objętości i odpowiadający mu wzrost liczby komórek pustych został przedstawiony na wykresie na rys. 4.6. Ponieważ początkowa wartość parametru uszkodzenia jest duża (ok. 0.14), wzrost objętości jest stosunkowo szybki (por. równ. 3.43). Odpowiada temu duża prędkość zmiany promienia poprzecznego pustki r (zob. rys. 4.7a). Początkowa prędkość względnej zmiany promienia ($\Delta r/r$) jest większa od odpowiedniej prędkości odkształcenia (por. równ. 2.63), jednak później maleje, by

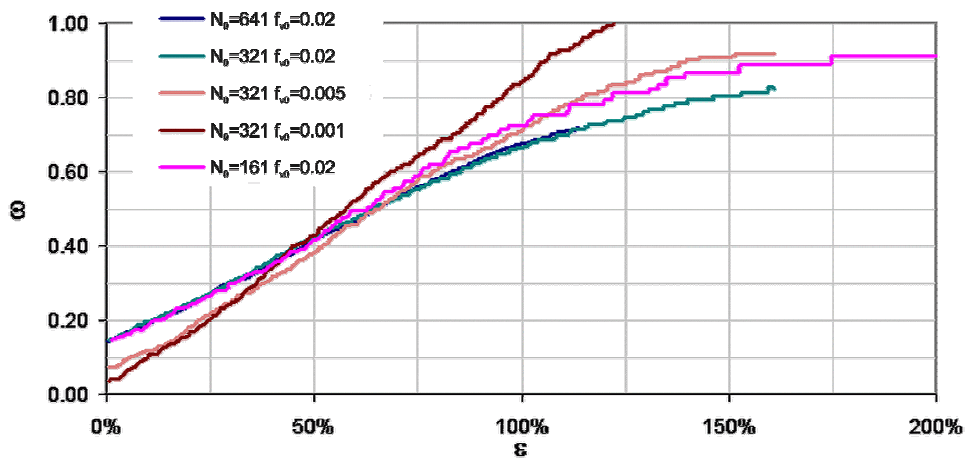
spaść praktycznie do zera. Spowodowane to jest tym, że dla tej reguły, dla dużych ω wzrost pustki odbywa się głównie w kierunku rozciągania.



Rys. 4.6. Zmiany objętości RVE (V), liczby komórek masowych (M) i komórek pustych (E) dla algorytmu zmiany objętości na skutek wzrostu uszkodzeń $20 \times 0 \times$, $N_0=641$, $f_{v0}=0.02$.



a



b

Rys. 4.7. Wykres zmian promienia pojedynczej pustki r (a) oraz parametru uszkodzenia w zależności od odkształcenia (b) dla wzrostu pojedynczej pustki według reguły $10 \times 0 \times$.

Podobnie na wykresie parametru uszkodzenia (rys. 4.7b) dla ok. 150% odkształcenia prędkość zmiany uszkodzenia spada praktycznie do zera. Dla mniejszej pustki

początkowej prędkość wzrostu jest większa i w efekcie pustka po takim samym czasie jest większa. Nie udało się osiągnąć stanu całkowitego zniszczenia (poza jednym przypadkiem dla $f_{v0}=0.001$). Modelowany element wykazuje bardzo dużą ciągliwość i jego zachowanie jest podobne do zachowania materiałów nadplastycznych.

4.1.2 Dyfuzyjny wzrost pustek

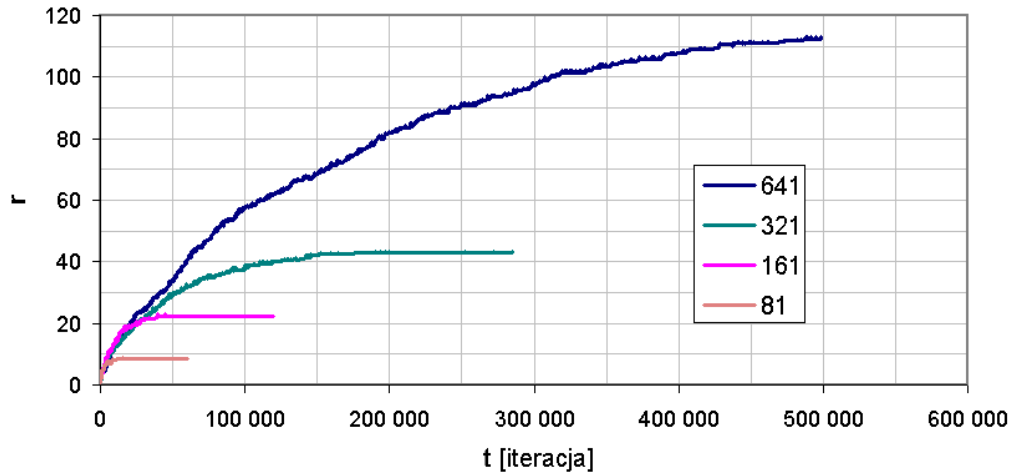
Aby przeanalizować zachowanie algorytmu dyfuzyjnego wzrostu pustek przeprowadzono symulacje rozwoju pojedynczej pustki wyłącznie na skutek dyfuzji. Kształt i objętość RVE nie ulegał zmianie, natomiast w stanie początkowym utworzono stosunkowo dużo pustych komórek rozmieszczonych losowo o gęstości początkowej $f_{v0}=0.02$. Rozpatrzono dwa zadania: pierwsze polegało na rozwoju pustki wewnątrz ziarna, drugie na granicy dwóch ziaren. W obu przypadkach w środku RVE został umieszczony jeden punkt zarodkowy pustki. Przyjęto dla nich algorytm $a_5=0$ tak, by pustka mogła się rozwijać wyłącznie wokół tego punktu. Aby odkształcenie nie zakłócało symulacji, parametr T_{def} ustalono na bardzo dużą, nieosiągalną wartość.

4.1.2.1 Pojedyncza pustka wewnątrz ziarna

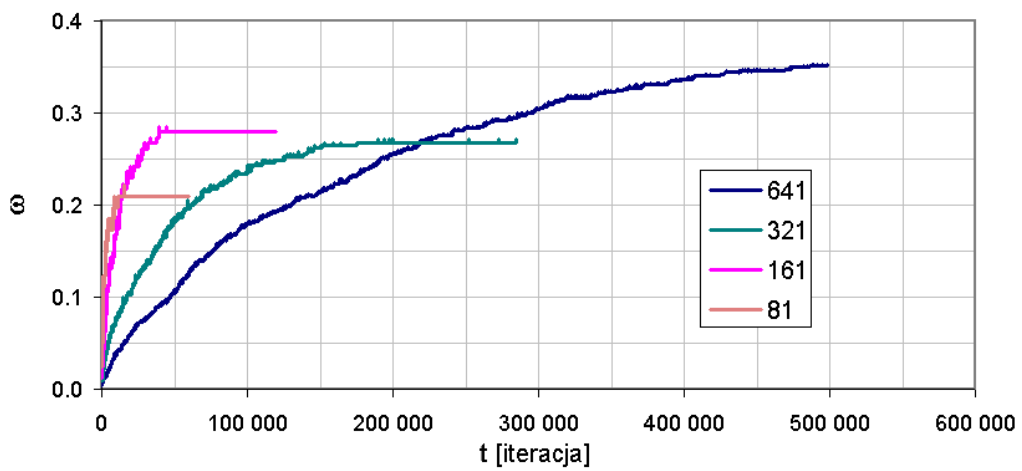
W zadaniu tym badano rozwój w czasie pustki wewnątrz ziarna wokół punktu zarodkowego. Aby taka pustka mogła się rozwijać w kryterium energetycznym (równ. 3.58) należy przyjąć współczynnik wagowy dla granicy masa-pustka $w_{e-m}>0$. Przyjęto zatem wartość flagi $a_3=1$, więc regułę automatu można zapisać jako $xxx1x0$. Przebadane zostały automaty o 4 rozmiarach początkowych $N_0=81, 161, 321, 641$.

We wszystkich przypadkach prędkość wzrostu pustki jest w początkowym okresie w przybliżeniu stała i wynosi ok. $1/600$ komórek/iterację (zob. rys. 4.8a). W porównaniu do maksymalnej możliwej wartości (1 komórka/iterację) jest to bardzo mało. Widać stąd, że wzrost dyfuzyjny może być istotny tylko dla małych prędkości odkształcenia. Dla większych promieni prędkość wzrostu maleje, co jest cechą także wzorów analitycznych (np. zob. równ. 2.68). Z czasem ilość swobodnych pustych komórek maleje tak, że pustka przestaje rosnąć. Czas wysycenia jest tym większy, im większy jest rozmiar RVE. Wartości końcowe parametru uszkodzenia $\omega = \frac{2r}{N_0}$, który

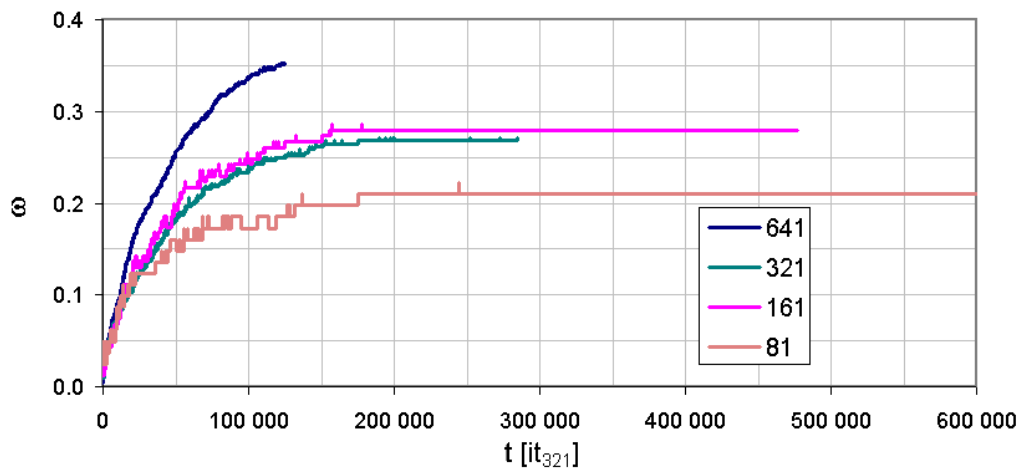
jest miarą niezależną od rozmiaru RVE, są także różne (rys. 4.8b). Wynika to z kształtu pustek (zob. rys. 4.9). Gdyby dyfuzja po granicy pustki miała prędkość dużo większą od dyfuzji objętościowej (por. rozdz. 2.2.3.2), to kształt pustki byłby owalny i parametr uszkodzenia stałby się niezależny od rozmiaru. W analizowanym automacie dyfuzja ta jest wolniejsza, co sprzyja dendrycznemu wzrostowi pustek (por. przykłady zastosowania tej cechy automatów do modelowania krystalizacji [20], [107]). Dodatkowo na rys. 4.9 można zauważyć anizotropię wynikającą z przyjętej siatki i sąsiedztwa – dendryty rozwijają się w kierunkach równoległych do krawędzi RVE.



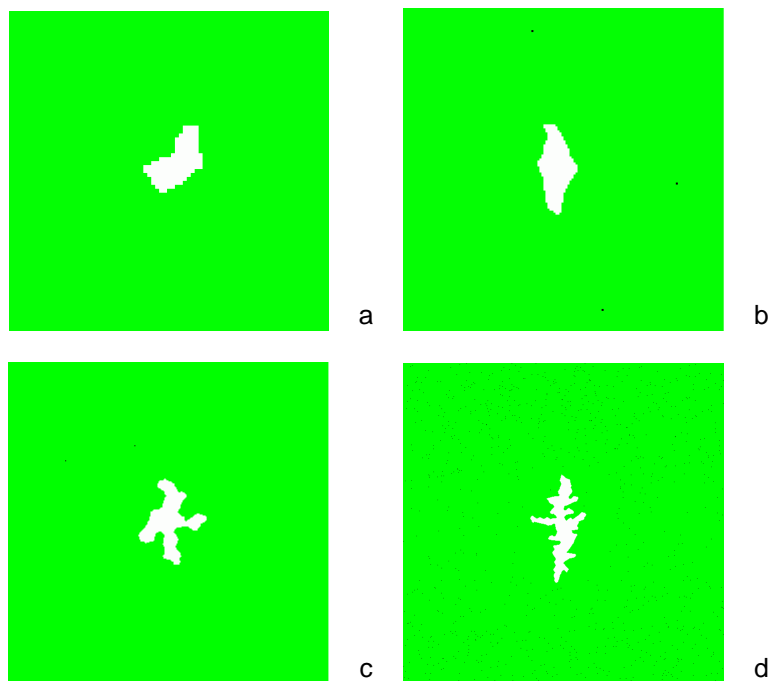
Rys. 4.8a. Wykres zmian promienia pustki r dla wzrostu dyfuzyjnego $xxx1x0$ i różnych N_0 , $f_{v0}=0.02$.



Rys. 4.8b. Wykres zmian parametru uszkodzenia dla wzrostu dyfuzyjnego $xxx1x0$ i różnych N_0 , $f_{v0}=0.02$.



Rys. 4.8c. Wykres zmian parametru uszkodzenia dla wzrostu dyfuzyjnego $xxx1x0$, dla różnych N_0 , $f_{v0}=0.02$, w czasie znormalizowanym według równ. (4.1); jako jednostkę przyjęto czas jednej iteracji dla $N_0=321$.



Rys. 4.9. Obrazy pustek otrzymane przy pomocy reguły dyfuzyjnego wzrostu $xxx1x0$ i centralnego zarodka pustki, $f_{v0}=0.02$, $N_0=81$ (a), $N_0=161$ (b), $N_0=321$ (c), $N_0=641$ (d).

Jak wcześniej wspomniano ilość komórek na brzegu RVE można także traktować jako miarę rozdzielczości automatu. Zgodnie ze wzorem (3.57) zamodelowanie dyfuzji o tym samym współczynniku dyfuzji i różnej skali liniowej wymaga przeskalowania czasu. Na przykład, jeżeli dla automatów o różnych rozdzielczościach, wymiary pojedynczej komórki wynoszą odpowiednio Δx_1 , Δx_2 , to kroki czasowe tych automatów powinny być związane zależnością:

$$\frac{\Delta t_1}{\Delta t_2} = \frac{\Delta x_1^2}{\Delta x_2^2} = \frac{N_{02}^2}{N_{01}^2}, \quad (4.1)$$

gdzie N_{01} i N_{02} to rozmiary początkowe pierwszego i drugiego automatu. Przeskalowując czas zgodnie z tym wzorem, otrzymuje się wykres (rys. 4.8c), na którym widać, że stała wartość parametru uszkodzenia jest osiągana w tym samym znormalizowanym czasie.

4.1.2.2 Rozwój pustek na granicy dwóch ziaren

Kolejne zadanie polegało na badaniu rozwoju pustki na granicy dwóch ziaren przy rozciąganiu w kierunku prostopadłym do tej granicy. Punkty zarodkowe ziaren zostały ustalone na przeciwległych bokach badanego elementu, symetrycznie wobec osi pionowej. Powierzchnia RVE została podzielona w ten sposób na dwa równe ziarna z granicą pionową w środku elementu. Z uwagi na obecność granicy zbadano dwie reguły: jedną rozwijającą pustki „owalne” ($a_3=1$) i drugą tworzącą pustki szczelinowe ($a_3=0$). Pozostałe parametry były identyczne jak w poprzednim zadaniu.

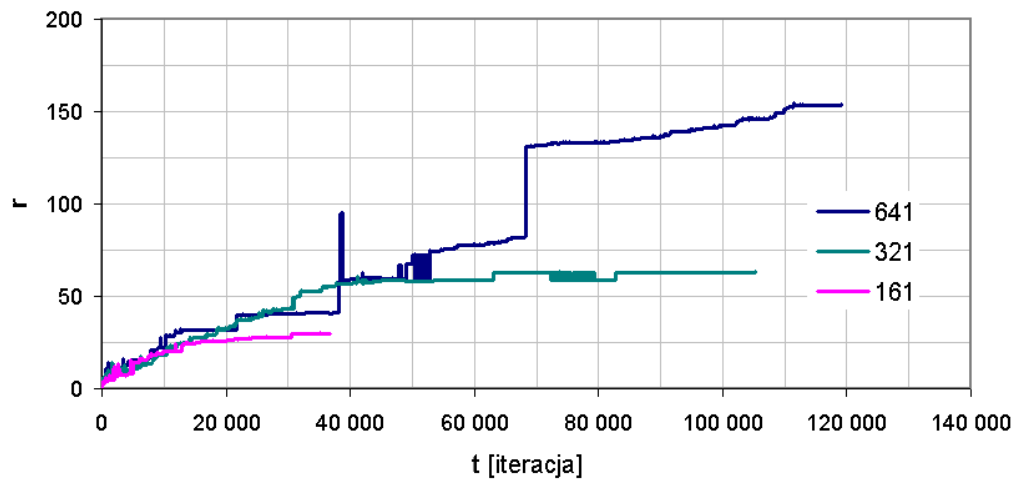
Reguła $xxx1x0$ – pustki owalne

Początkowy etap rozwoju pustki dla automatów o wszystkich badanych rozmiarach przebiega podobnie. Promień poprzeczny pustki (liczony w kierunku pionowym tj. kierunku rozwoju pustki wzdłuż granicy i będący połową długości szczeliny) podobnie jak w przypadku jednego ziarna, zaczyna się po pewnym czasie

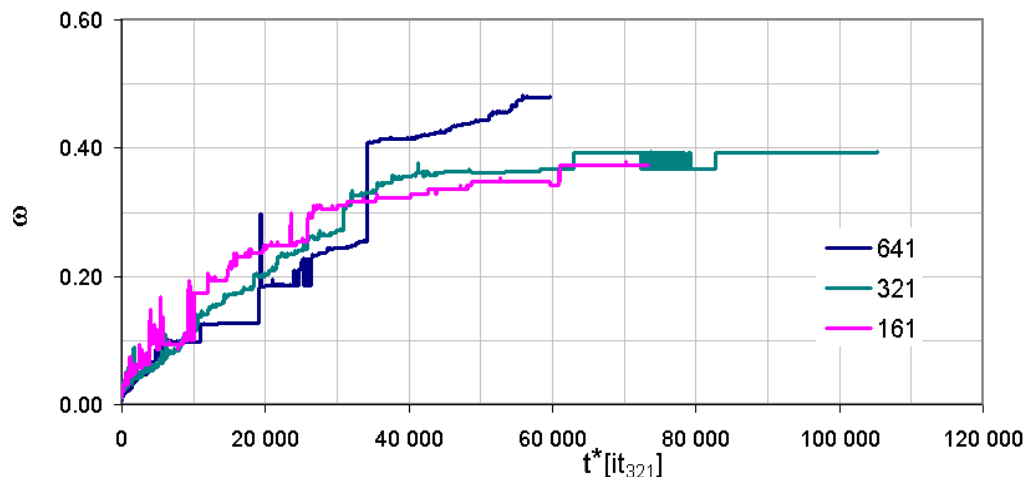
stabilizować (rys. 4.10a). Ponieważ rozwój pustki jest ukierunkowany przez granicę ziarna, promień pustek rośnie do większych rozmiarów. Widoczne są też dendryty w kierunku poziomym, są one jednak dużo mniejsze (rys. 4.11). Dla automatu o $N_0=621$ widoczne są duże skoki wartości promienia, wynika to z łączenia się pustki głównej z pustkami sąsiednimi, które początkowo rozwijały się niezależnie. Aby znormalizować czas dla tego przypadku, niewystarczające jest posłużenie się wzorem (4.1). Okazuje się, że gęstość pustek „swobodnych” po pewnym czasie rośnie wraz z odległością od granicy ziaren (w kierunku poziomym), natomiast słabo zależy od odległości od środka elementu w kierunku pionowym (poza okolicami granicy pustki). Daje to liniową zależność czasu od rozmiaru RVE w komórkach:

$$\frac{\Delta t_1}{\Delta t_2} \approx \frac{N_{02}}{N_{01}}. \quad (4.2)$$

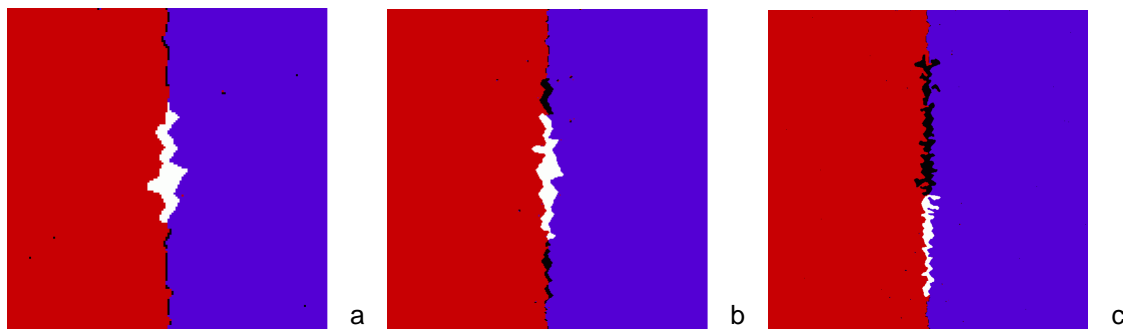
Porównanie rozwoju parametru uszkodzenia dla czasu znormalizowanego według wzoru (4.2) przedstawiono na rys. (rys. 4.10b).



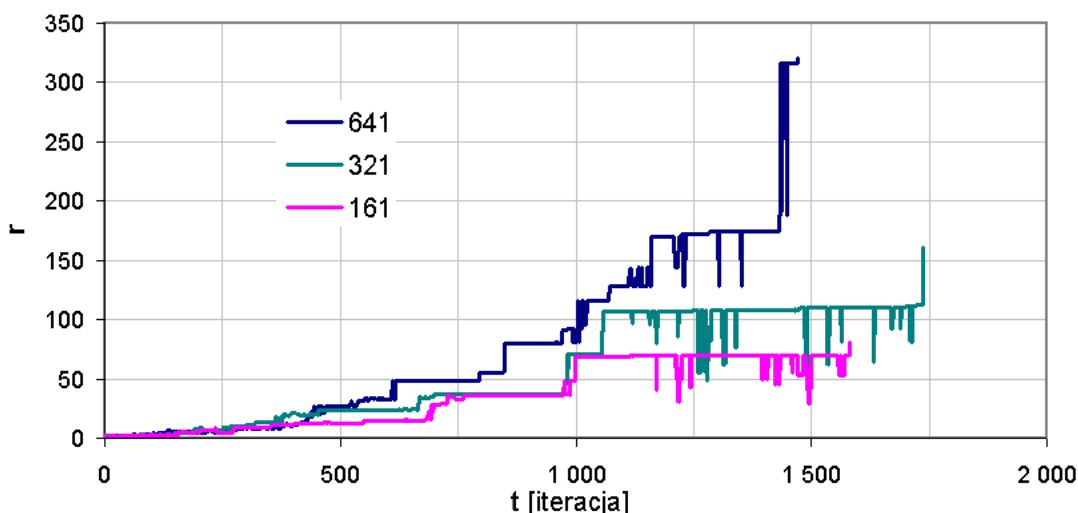
Rys. 4.10a. Wykres zmian promienia pustki r na granicy dwóch ziaren dla wzrostu dyfuzyjnego na granicy dwóch ziaren $a=xxx1x0$, $f_{v0}=0.02$ i różnych N_0 .



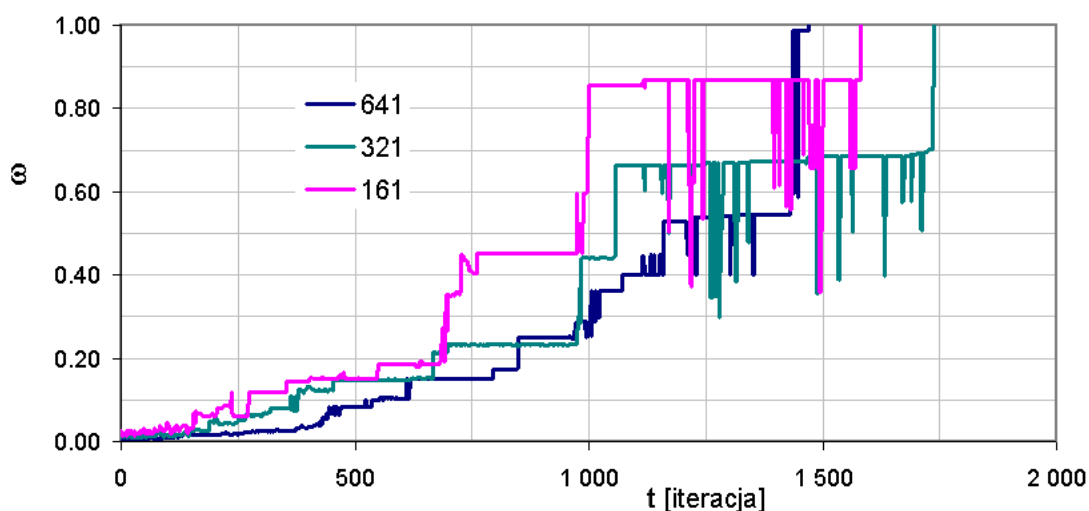
Rys. 4.10b. Wykres zmian parametru uszkodzenia dla wzrostu dyfuzyjnego pustki na granicy dwóch ziaren $a=xxx1x0$, $f_{v0}=0.02$ i różnych N_0 . Czas t^* znormalizowany według równ. (4.2); jako jednostkę przyjęto czas jednej iteracji dla $N_0=321$.



Rys. 4.11. Obrazy pustek otrzymane przy pomocy reguły dyfuzyjnego wzrostu xxx1x0 dla centralnego zarodka pustki na granicy dwóch ziaren, $f_{v0}=0.02$, $N_0=161$ (a), $N_0=321$ (b), $N_0=641$ (c). Na biało jest zaznaczona pustka o największej długości, na czarno pozostałe pustki.



Rys. 4.12a. Wykres zmian promienia pustki r na granicy dwóch ziaren dla wzrostu dyfuzyjnego na granicy dwóch ziaren $a=xxx0x0$, $f_{v0}=0.02$ i różnych N_0 .



Rys. 4.12b. Wykres zmian promienia pustki r na granicy dwóch ziaren dla wzrostu dyfuzyjnego na granicy dwóch ziaren $r=xxx0x0$, $f_{v0}=0.02$ i różnych N_0 .

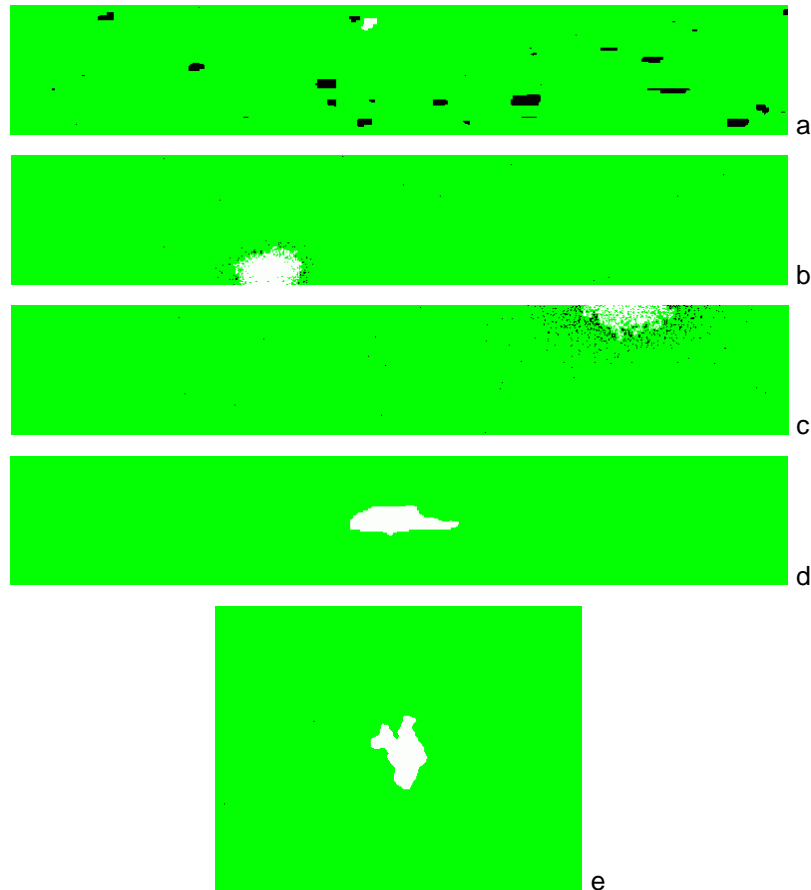
Reguła xxx0x0 – pustki szczelinowe

Przy zastosowaniu tej reguły pustka rozwija się wyłącznie wzdłuż granicy ziaren. Podobnie jak w poprzednich przypadkach początkowy wzrost długości szczeliny nie zależy od rozmiaru automatu N_0 . Później sąsiednie pustki łączą się, powodując

skokowe zmiany długości. Dla automatu o większych rozmiarach więcej jest pustek, które mogą się połączyć, dlatego wzrost staje się szybszy. Jest on jednak proporcjonalny do rozmiaru N_0 i we wszystkich przypadkach zniszczenie następuje w mniej więcej tym samym czasie liczonym w iteracjach (rys. 4.12).

4.1.3 Mieszany dyfuzyjno-odkształceniowy wzrost pustek

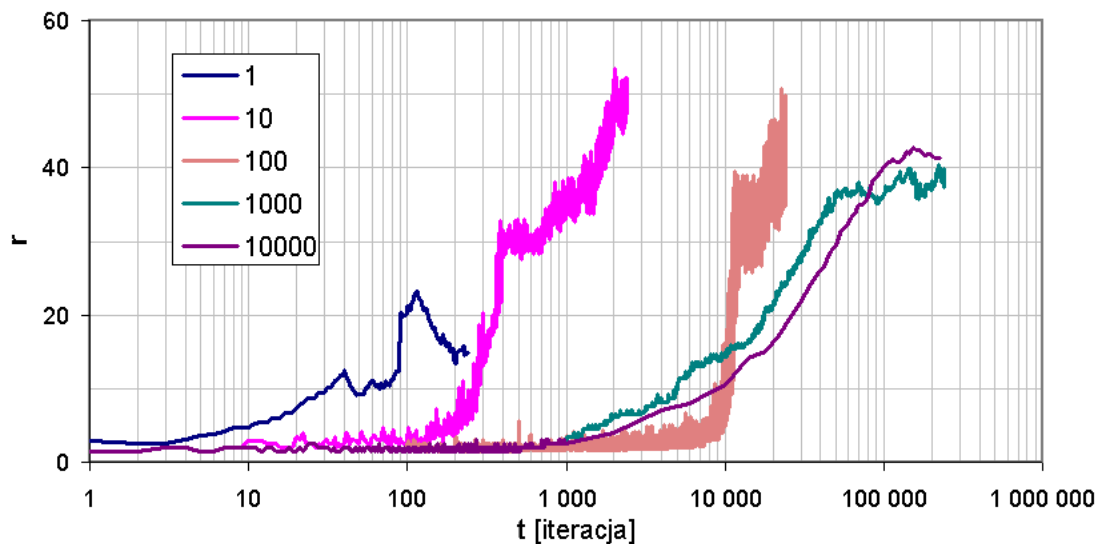
Zanim zostanie przeanalizowane zachowanie się modelu dla struktury ziarnistej, będącego głównym celem tego rozdziału, przedstawiony zostanie jeszcze przykład algorytmu łączącego wzrost dyfuzyjny z odkształceniem dla wnętrza pojedynczego ziarna.



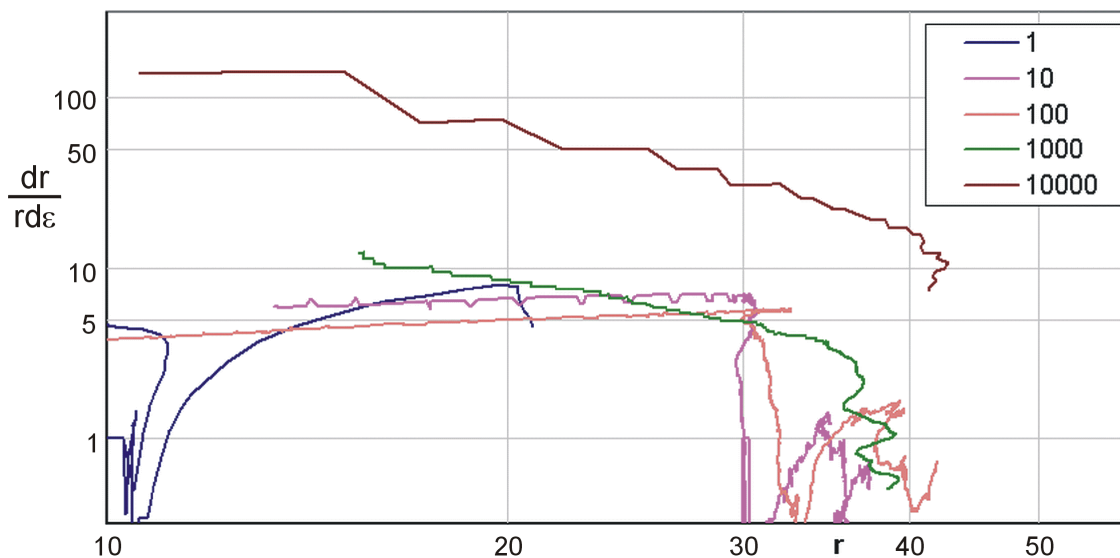
Rys. 4.13. Obrazy pustek otrzymane przy pomocy reguły wzrostu dyfuzyjno-odkształceniowego 00×110 przy centralnym zarodku pustki, $f_{v0}=0.02$, $N_0=321$, $T_{def}=1$ (a), $T_{def}=10$ (b), $T_{def}=100$ (c), $T_{def}=1000$ (d), $T_{def}=10000$ (e). Dla przypadków (a), (b), (c), (d) końcowa wartość $N_1=801$, dla przypadku (e) $N_1=365$. Na biało jest zaznaczona pustka o największej względnej długości, na czarno pozostałe pustki.

Podobnie jak w poprzednich zadaniach w środku elementu ustawiono jeden zarodek pustki i założono losowy rozkład pustych komórek o gęstości $f_{v0}=0.02$. Do analizy wybrano model odkształcenia RVE opisany parametrami: $\mathbf{a}=00 \times 110$, $\alpha_{all}=1$, co oznacza model o stałej masie i objętości, możliwość rozwoju pustek tylko wokół punktów zarodkowych oraz ewentualną możliwość tworzenia nowych pustych komórek w całej objętości (to jednak ma marginalne znaczenia wobec przyjętego parametru $\alpha_{all}=1$ oznaczającego, że wszystkie puste komórki powinny powstać w kroku odkształcenia). Zostało przeanalizowanych 5 prędkości odkształcenia RVE dla $T_{def}=1, 10, 100, 1000, 10000$. Rozmiar początkowy ustalono na $N_0=321$.

Analizując stany końcowe (symulacje były zakończone przy $N_1=801$, oprócz przypadku dla $T_{def}=10000$) pokazane na rys. 4.13 i wykres zmian promienia maksymalnej pustki (rys. 4.14), można wyróżnić trzy typy rozwoju pustek. Dla $T_{def}=1$ otrzymano wiele małych pustek o wydłużonych kształtach. Dla $T_{def}=10$ i 100 puste komórki tworzą „chmurę” skoncentrowaną wokół jednego losowego punktu. Natomiast dla $T_{def}=1000$ i 10000 tworzy się jedna centralna pustka.



Rys. 4.14a. Wykres zmian promienia pustki r dla wzrostu dyfuzyjnego-odkształceniowego 00x110, $f_{v0}=0.02$, $N_0=321$ i różnych T_{def} .



Rys. 4.14b. Zmiany względnej prędkości wzrostu pustki (uśrednione) w zależności od promienia pustki dla centralnej pustki i reguły 00x110, $f_{v0}=0.02$, $N_0=321$ i różnych T_{def} .

W pierwszym przypadku ($T_{def}=1$), gdy jednemu krokowi odkształcenia odpowiada jeden krok dyfuzji, pustka rośnie wyłącznie na skutek odkształcenia. Pojedynczy zarodek pustki jest ignorowany, dyfuzja jest zbyt wolna, by wokół niego mogła powstać większa pustka. Natomiast krok odkształcenia preferuje miejsca o większych koncentracjach pustych komórek, powodując łączenie się ich w pustki rosnące odkształceniowo – podobnie jak pustka opisana w rozdz. 4.1.1, tylko o wiele mniejszym rozmiarze początkowym. Po okresie początkowego wzrostu, wynikającego z pochłaniania pojedynczych pustych komórek, promień pustek zaczyna maleć (por. rys. 4.2a).

W drugim przypadku prędkość dyfuzji jest także za mała na to, aby powstała pustka w punkcie zarodkowym. Efektem dyfuzji jest natomiast wyrównywanie rozkładu gęstości pustych komórek poprzez rozpraszanie ich. Przeciwdziała to oddziaływaniu algorytmu odkształcania, który je koncentruje. W efekcie tego powstaje „chmura” rozbiegających pustych komórek wokół punktów ich zagęszczania przez odkształcenie. Większe „chmury” wyłapują pojedyncze puste komórki z mniejszych „chmur”, w wyniku czego zostaje tylko jedna, największa „chmura”. Na wykresie zmian promienia maksymalnej pustki objawia się to szybkim jego wzrostem. Potem pustka przestaje praktycznie rosnać, choć cały czas są widoczne duże wahania promienia wynikające z rozbiegania się pustych komórek i ponownego ich łączenia.

Trzeci przypadek opisuje dyfuzyjny wzrost pojedynczej pustki. Na wykresie 4.14a widoczny jest punkt poniżej 1000 iteracji, w którym pustka zaczyna rosnać. Odpowiada to wzrostowi pustki dyfuzyjnej, którego prędkość została oszacowana w przykładzie opisanym w rozdz. 4.1.2.1 na 1/600 komórek/iterację. Dla szybszego procesu odkształcania pustka rośnie szybciej, co można zinterpretować jako sprzężenie wzrostu dyfuzyjnego z odkształceniowym. Natomiast końcowy rozmiar promienia pustki jest większy dla wolniejszego procesu, gdyż pozwala on na wykształcenie się dendrycznych odgałęzień pustki (rys. 4.13e).

Na wykresie 4.14b przeprowadzono analizę zmian względnej prędkości wzrostu promienia pustki $\frac{dr}{rd\epsilon}$. Według równań teoretycznych (zob. rys. 2.22) dla pustek rosnących odkształceniowo względna prędkość jest stała. W badanym przypadku dla dużych prędkości odkształcenia ($T_{def}=1, 10$ lub 100) linia jest lekko wznoszącą, przy czym względny wzrost promienia jest ok. 5 razy szybszy niż zmiana odkształcenia (por. równ. 2.62). Inny charakter ma wykres dla wzrostu dyfuzyjnego ($T_{def}=10000$). Podobnie jak dla modelu teoretycznego dla większych pustek prędkość ta znacznie maleje.

4.2 Zniszczenie międzykrystaliczne

4.2.1 Element o stałej masie i objętości

Przypadek rozwoju uszkodzeń międzykrystalicznych dla elementu o stałej masie i objętości jest opisany parametrami automatu o $\mathbf{a}=000xxx$ (x oznacza tu element zmienny).

Przypadek ten wymaga względnie dużego uszkodzenia początkowego. Dla elementu o szerokości N potrzeba przynajmniej N pustych komórek, aby uzyskać szczelinę łączącą krawędzie elementu. Czyli dla RVE o $N_0=641$ f_{v0} musi być większe od $1/641=0.0016$. W rzeczywistości szczelina nigdy nie jest idealnie prosta, ani nie ma szerokości jednej komórki na całej swojej długości, dlatego liczba początkowych pustych komórek musi być kilkakrotnie większa. Lepsze oszacowanie koniecznej do zniszczenia gęstości pustek można uzyskać zakładając, że zniszczeniu muszą ulec wszystkie granice ziaren. Średnia średnica ziarna d_{sr} została oszacowana w równaniu (3.22). Zakładając, że obwód ziarna wynosi $4d_{sr}$, całkowitą długość granic można oszacować jako:

$$\frac{4N_0 n_{seed}}{2\sqrt{n_{seed}}} = 2N_0 \sqrt{n_{seed}}, \quad (4.3)$$

gdź każda granica sąsiaduje z dwoma ziarnami. Zatem minimalna wartość gęstości pustek (równa w tym przypadku wartości uszkodzenia początkowego) potrzebna do zniszczenia wynosi:

$$f_{vmin} \cong \frac{2\sqrt{n_{seed}}}{N_0} = \frac{2}{d_{sr}}. \quad (4.4)$$

Wzór ten obrazuje znany z doświadczeń fakt, że materiały o dużych ziarnach są bardziej kruche – potrzeba mniejszej gęstości pustek, aby je zniszczyć. Jak pokazały symulacje szacunek opisany równaniem (4.4) jest trochę zawyżony (nie wszystkie granice każdego ziarna są wewnątrz RVE). Uwzględnienie granic poza RVE prowadzi do wzoru:

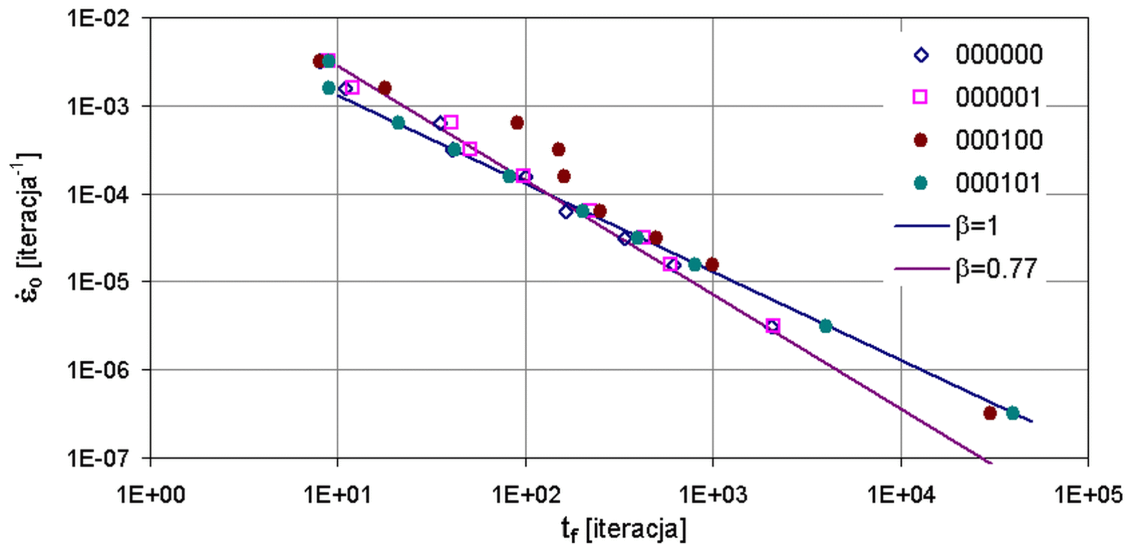
$$f_{vmin} \cong \frac{2(\sqrt{n_{seed}} - 1)}{N_0}. \quad (4.5)$$

Dla $N_0=641$ i $n_{seed}=5$ wzór (4.4) daje on wartość 0.007 a wzór (4.5) 0.004, natomiast najmniejsza wartość f_{v0} , przy której uzyskano zniszczenie to 0.005. Symulacje dla innych reguł pokazały, że wzór ten stanowi dobre oszacowanie dolne minimalnej gęstości pustek.

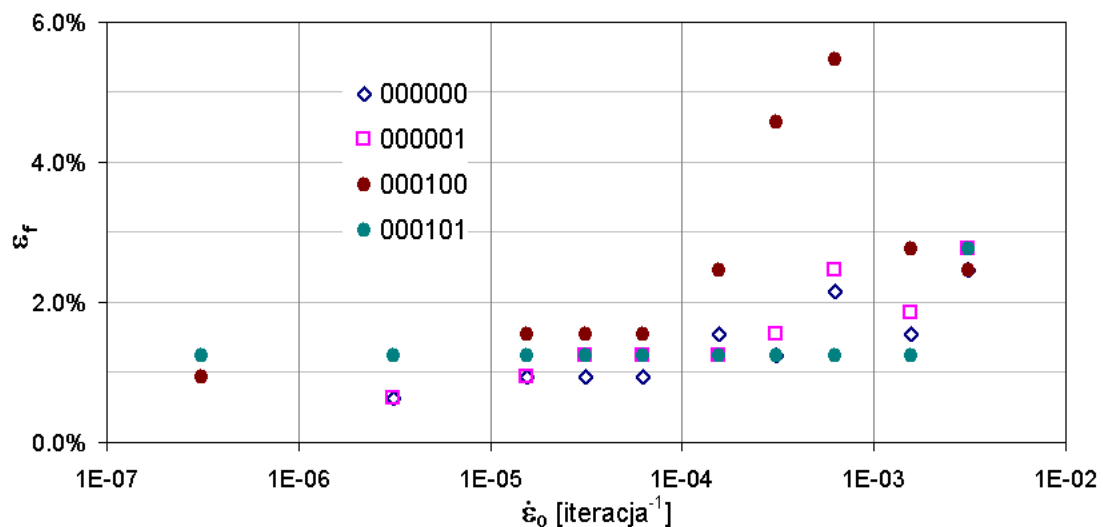
W badanym automacie przyjęto $N_0=641$, $n_{seed}=5$, $f_{v0}=0.01$, $\alpha_{all}=0.75$, $lv_{seed}=0$, natomiast zbadano wpływ reguł opisanych przez różne \mathbf{a}_3 , \mathbf{a}_4 i \mathbf{a}_5 . Symulowano różne prędkości odkształcenia zmieniając parametr T_{def} w zakresie od 1 do 10 000. Wszystkie algorytmy badano dla tej samej struktury początkowej przedstawionej na rys. 3.8a.

Algorytm dla $\mathbf{a}_4=1$ nie daje zadowalających rezultatów. Wzrost pustek szczelinowych ($\mathbf{a}_3=0$) dokonuje się głównie poprzez dyfuzję doprowadzając dla małych prędkości odkształcenia do zniszczenia w stałym (niezależnym od prędkości czasie). Dla większych prędkości częsty krok odkształcenia hamuje rozwój pustek dając duże odkształcenia przy zniszczeniu, ale też i duże czasy, co nie jest zgodne z

doświadczeniem. Pustki owalne ($a_3=1$) rozwijają się bardzo wolno i nie udało się doprowadzić tego algorytmu do etapu zniszczenia elementu.



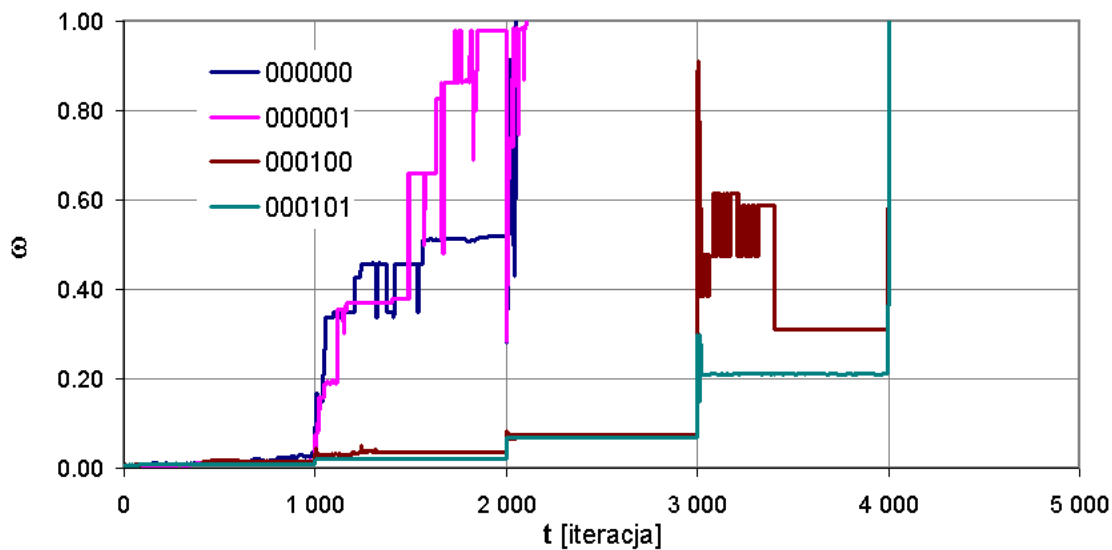
Rys. 4.15a. Wyniki symulacji (czas do zniszczenia w iteracjach i początkowa prędkość pełzania) dla różnych reguł przy stałej objętości i masie ($N_0=641$, $n_{seed}=5$, $f_{v0}=0.01$, $\alpha_{all}=0.75$, $lv_{seed}=0$). Linie ciągłe są prostymi o współczynnikach kierunkowych ($-\beta$).



Rys. 4.15b. Wyniki symulacji (początkowa prędkość pełzania i odkształcenie przy zniszczeniu) dla różnych reguł przy stałej objętości i masie ($N_0=641$, $n_{seed}=5$, $f_{v0}=0.01$, $\alpha_{all}=0.75$, $lv_{seed}=0$).

Dużo bardziej zadawalające rezultaty zostały osiągnięte dla reguły $a_4=0$. Dla algorytmu rozwijającego pustki szczelinowe ($a_3=0$) czasy do zniszczenia spełniają relację Monkmana-Granta (2.1) dla dużego zakresu prędkości odkształcenia. Parametr β równania (2.1) wynosi dla badanej struktury 0.77. Wyniki przedstawiono na wykresie na rys. 4.15a. Na wykresie rozwoju parametru uszkodzenia dla $T_{def}=1000$ (rys. 4.16) można zaobserwować dwa etapy rozwoju uszkodzeń: początkowy okres wzrostu pustek, a następnie ich koalescencji. Drugi etap charakteryzuje się skokowymi zmianami wartości parametru uszkodzenia. Rozwój pustek owalnych ($a_3=1$) ma charakter odkształceniowy. Widoczny jest dla tego algorytmu wpływ kontroli stanu S_{IV} . Dla $a_5=1$ parametr β równania (2.1) jest bardzo bliski jedności (rys. 4.15a). Odkształcenie do zniszczenia jest niezależne od prędkości pełzania i wynosi nieco powyżej 1% (zob. rys. 4.15b). Urozmaicony charakter ma zależność czasu do

zniszczenia od prędkości odkształcenia dla $a_5=0$. Dla bardzo dużych prędkości odkształcenia dyfuzja, a zatem i kontrola dyfuzyjnego wzrostu pustek (a_5) nie ma zauważalnego wpływu. Dla średnich prędkości coraz większy wpływ na wzrost pustek ma krok dyfuzji. Pustki nie rozwijają się na całej granicy, a jedynie wokół punktów zarodkowych. Dlatego czasy do zniszczenia są dużo większe (niż dla $a_5=1$). Parametr β osiąga wartość ok. 0.5. Odkształcenie do zniszczenia również jest stosunkowo duże (ok. 5%). Dla małych prędkości obszar o stanie $s_{IV}=1$ obejmuje większość rejonu granicy ziaren i stan zniszczenia jest osiągany w czasie podobnym jak dla $a_5=1$; parametr $\beta=0.9$. W zakresie tym dyfuzja odpowiada za wzrost pojedynczych pustek, a odkształcenie za ich łączenie (zob. rys. 4.16). Wartość odkształcenia do zniszczenia tak jak i w poprzednim przypadku jest bliska 1%.



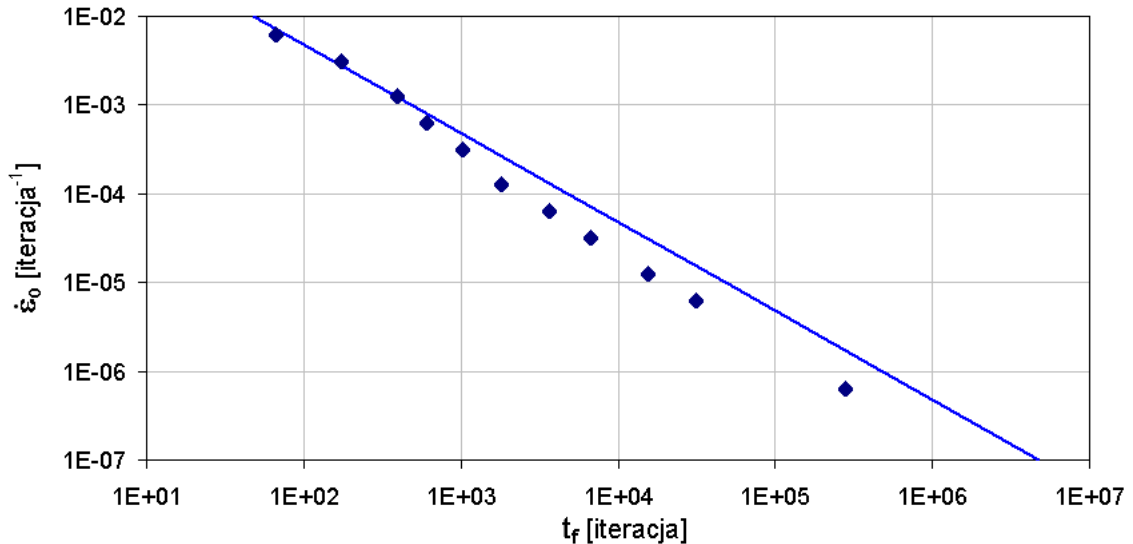
Rys. 4.16. Rozwój parametru uszkodzenia dla różnych reguł przy stałej objętości i masie ($N_0=641$, $n_{seed}=5$, $f_{v0}=0.01$, $\alpha_{all}=0.75$, $lv_{seed}=0$, $T_{def}=1000$).

4.2.2 Element o stałej objętości i malejącej masie

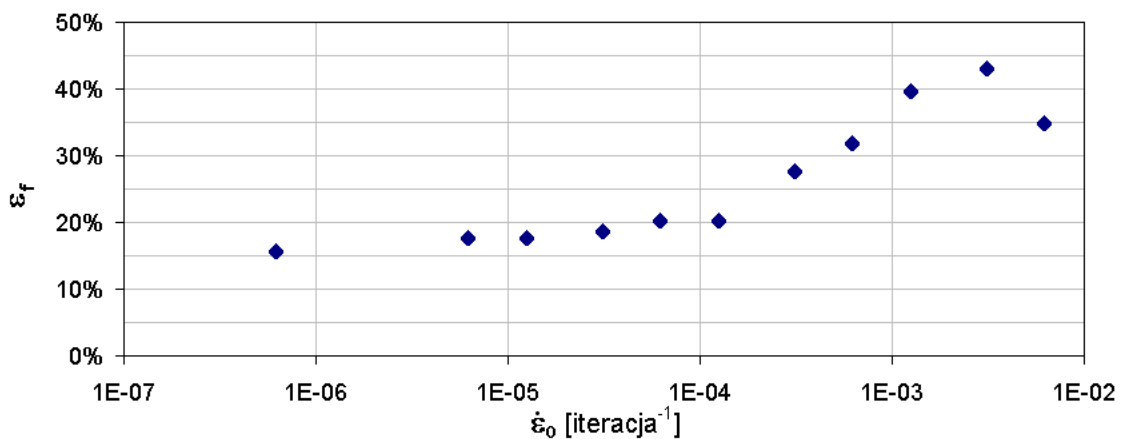
4.2.2.1 Reguła 010011

Jako reprezentatywny przypadek dla klasy reguł opisujących zniszczenie międzykrystaliczne dla elementu o malejącej gęstości (0x0xxx) wybrano automat o regule 010011 przy $\alpha_{new}=0.25$ (jak w jednym z przypadków rozpatrywanych w pracy [110]). Jest to reguła promująca rozwój pustek szczelinowych (pęknięć) na granicach ziaren. Gęstość pustek rośnie wraz ze wzrostem odkształcenia i jest opisana empirycznym równaniem (3.47). Wartości parametrów przyjęto $H=1.17$, $\gamma=2.3$. Do analizy użyto elementu o strukturze opisanej parametrami $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.0001$. Odpowiada to ziarnom o średniej średnicy około 100 komórek, natomiast gęstość początkowa uszkodzeń odpowiada doświadczalnie mierzonej gęstości wakansów. Struktura początkowa była taka sama we wszystkich rozpatrywanych symulacjach, została ona pokazana na rys 3.8b.

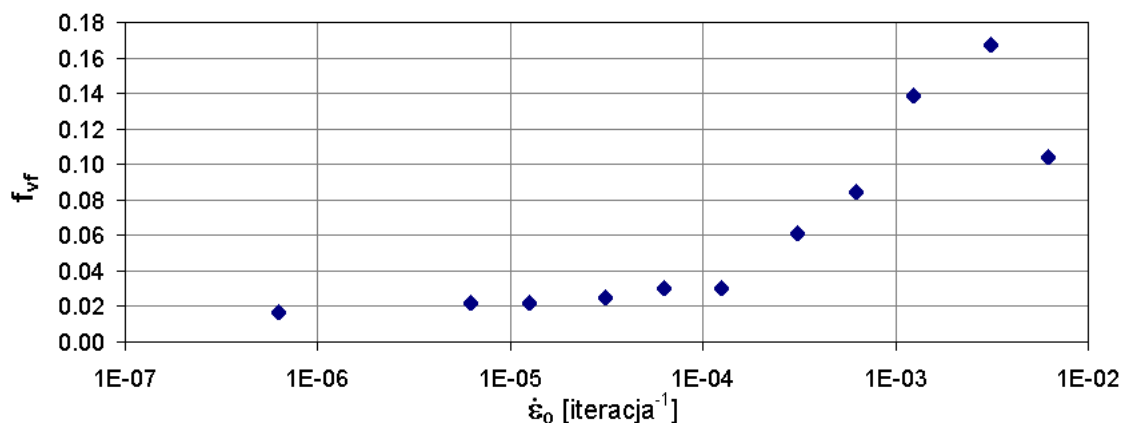
Korzystając ze wzoru (4.5) można oszacować dla badanej struktury minimalną gęstość pustek potrzebną do zniszczenia f_{vmin} na 0.013, co odpowiada odkształceniu przy zniszczeniu ok. 14% (zgodnie ze wzorem 3.47). W doświadczeniach (np. [50], [26], [47]) spotyka się zniszczenie kruche przy kilkakrotnie mniejszych odkształceniach. Aby zamodelować te przypadki należałoby użyć automatu o znacznie większej rozdzielczości lub użyć innej zależności gęstości pustek od odkształcenia.



Rys. 4.17a. Wykres czasu do zniszczenia w iteracjach i początkowej prędkości pełzania dla reguły 010011, $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$. Linia ciągła jest prostą o współczynniku kierunkowym (-1) dopasowaną do punktów o dużej prędkości odkształcenia.



Rys. 4.17b. Wykres odkształcenia przy zniszczeniu w zależności od początkowej prędkości pełzania dla reguły 010011, $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$.



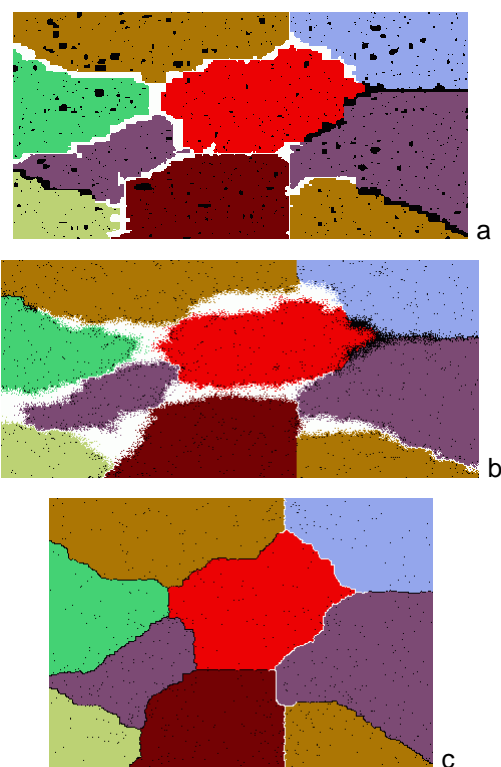
Rys. 4.17c. Wykres gęstości pustek przy zniszczeniu w zależności od początkowej prędkości pełzania dla reguły 010011, $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$.

Zbadane zostało zachowanie się automatu dla szerokiego zakresu prędkości odkształcenia. Prędkość regulowano zmieniając parametr T_{def} w zakresie od 1 do

10 000, co daje zmianę prędkości odkształcenia w zakresie od $6E-3$ do $6E-7$ na jedną iterację (wielkość o wymiarze iteracja^{-1}). Na rysunku 4.17a przedstawiono otrzymane czasy do zniszczenia (w iteracjach) dla badanych prędkości. Na rysunkach 4.17b i 4.17c - odpowiadające im odkształcenia przy zniszczeniu i końcową gęstość pustek.

W rozważanym przedziale prędkości można wyróżnić trzy obszary. Dla dużych prędkości dominuje odkształceniowy mechanizm rozwoju uszkodzenia, dla pośrednich mechanizm dyfuzyjny, a dla małych prędkości wzrost dyfuzyjny ograniczony.

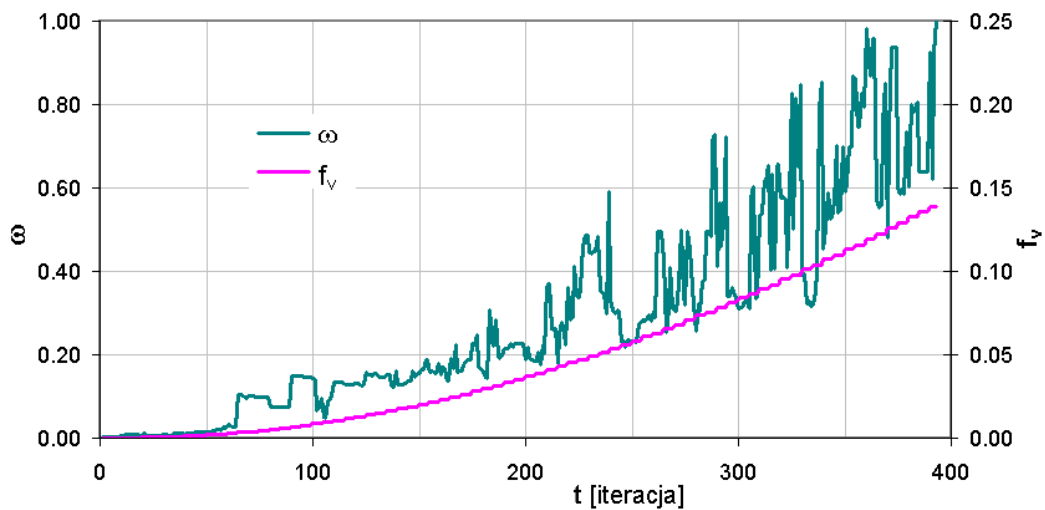
Dla dużych prędkości odkształcenia zniszczenie następuje przy dużych wartościach odkształcenia (ok. 40%) i względnie dużej gęstości pustek (pow. 0.1). Charakter zniszczenia podobny jest do zniszczenia w przypadku pojedynczego ziarna (zob. rozdz. 4.1.3), choć widoczny jest wpływ granic ziaren. W przypadku czysto odkształceniowego wzrostu ($T_{\text{def}}=1$) pustki rozwijają się zarówno wewnątrz ziaren jak i na ich granicach (zob. rys. 4.18a). Pustki wewnątrz ziaren nie rosną do dużych rozmiarów i nie mają udziału w końcowym zniszczeniu. Podobnej wielkości są też pustki na granicach ziaren, one jednak łączą się ze sobą po linii wyznaczonej przez granicę doprowadzając do zniszczenia elementu. Gdy udział dyfuzji staje się większy (zob. rys. 4.18b dla $T_{\text{def}}=5$) pustki na granicach ziaren rosną kosztem mniejszych pustek wewnątrz ziaren doprowadzając do powstania dużych pustek wokół granic. Kształt pustek przypomina pustki o charakterze mieszanym (por. rys. 2.15c). Mechanizm zniszczenia jest w dalszym ciągu odkształceniowy, co na wykresie na rys. 4.17a obrazuje prosta równania Monkmana-Granta (2.1) dla współczynników $\beta=1$ i $C^*=C_{\text{MG}}=0.48$.



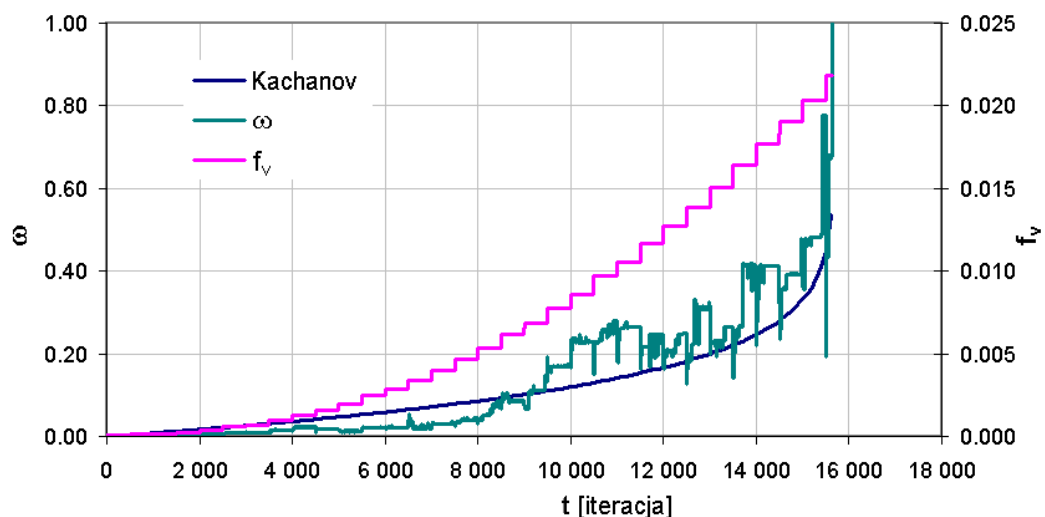
Rys. 4.18. Obrazy stanów końcowych dla reguły 010011, $f_{v0}=0.0001$, $n_{\text{seed}}=10$, $N_0=321$, $\alpha_{\text{new}}=0.25$ oraz dla $T_{\text{def}}=1$ $t_f=67$ iteracji (a), $T_{\text{def}}=5$ $t_f=393$ iteracje (b), $T_{\text{def}}=500$ $t_f=15\ 633$ iteracje (c). Na biało zaznaczona jest szczelina łącząca krawędzie RVE, na czarno pozostałe pustki.

Dla prędkości odkształcenia większych od $1E-3$ iteracja^{-1} udział dyfuzji powoduje znaczne zmniejszenie odkształcenia przy zniszczeniu, a współczynnik β równania Monkmana-Granta osiąga wartość 0.73 co jest bliskie wartości wyznaczonej doświadczalnie dla różnych przypadków zniszczenia kruchego (por. [129]). Pustki

rozwijają się wyłącznie w szczeliny wzdłuż granic ziaren, co obrazuje np. rys. 4.18c dla $T_{\text{def}}=500$. Jednak dla prędkości mniejszych, od symulacji dla $T_{\text{def}}=50$ o $\varepsilon_f=20\%$ zaczyna być widoczny wpływ ograniczenia dyfuzji. Wpływ na czas do zniszczenia ma minimalna gęstość pustek potrzebna do zniszczenia, a pośrednio związana z nią deformacja (granice tę przy pomocy równ. (4.5) i (3.47) oszacowano na odkształcenie ok. 14%). Oryginalny model ograniczonego dyfuzyjnego wzrostu pustek Dysona [43] wynika z nierównomiernego rozwoju pustek dyfuzyjnych na granicach ziaren. Ziarna bez pustek na granicach hamują rozwój uszkodzeń w sąsiednich ziarnach. W rozpatrywanym modelu podobny efekt osiągnięto poprzez zwiążanie liczby pustych komórek z odkształceniem. Dla tych bardzo małych prędkości współczynnik β równania Monkmana-Granta wynosi 0.95, a minimalne odkształcenie przy zniszczeniu 15.5%.



Rys. 4.19a. Rozwój parametru uszkodzenia i gęstości pustek dla $\mathbf{a}=010011$, $f_{v0}=0.0001$, $n_{\text{seed}}=10$, $N_0=321$, $\alpha_{\text{new}}=0.25$, $T_{\text{def}}=5$ ($\dot{\varepsilon}_0=1.25\text{E-}3$ iteracja $^{-1}$).



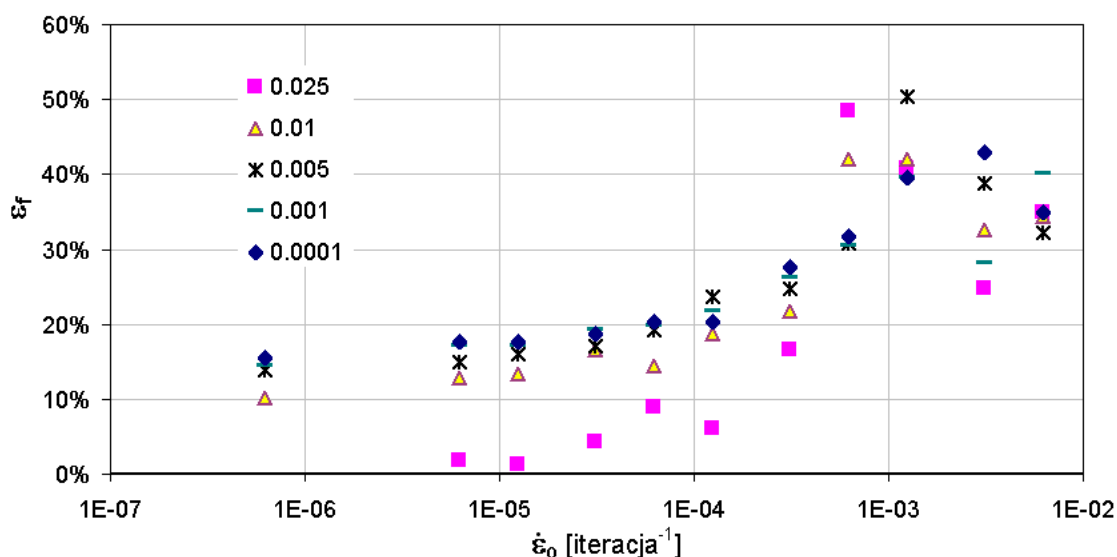
Rys. 4.19b. Rozwój parametru uszkodzenia i gęstości pustek dla $\mathbf{a}=010011$, $f_{v0}=0.0001$, $n_{\text{seed}}=10$, $N_0=321$, $\alpha_{\text{new}}=0.25$, $T_{\text{def}}=500$ ($\dot{\varepsilon}_0=1.25\text{E-}5$). Niebieska linia – rozwój parametru uszkodzenia według Kaczanowa (2.21) dla wykładnika $m=7$.

Różny charakter zniszczenia w zależności od prędkości odkształcenia widoczny też jest na wykresach rozwoju uszkodzeń w czasie. Na rys. 4.19 przedstawiono zmiany parametru uszkodzenia dla $T_{\text{def}}=5$ i $T_{\text{def}}=500$. Dla dużej prędkości odkształcenia

($T_{\text{def}}=5$) rozwój uszkodzenia w czasie jest równomierny i proporcjonalny do gęstości pustek. Dla małej prędkości odkształcenia ($T_{\text{def}}=500$) rozwój uszkodzenia wydaje się niezależny od gęstości pustek, która jest o rząd wielkości mniejsza niż w poprzednim przypadku. Przebieg rozwoju uszkodzenia w tym przypadku został porównany z rozwojem parametru uszkodzenia opisanego przy pomocy równania Kaczanowa (2.21) dla wykładnika $m=7$, które wydaje się dobrze opisywać ten rodzaj rozwoju uszkodzeń.

Wpływ uszkodzenia początkowego

Jednym ze sposobów zamodelowania bardziej kruchego mechanizmu zniszczenia jest zwiększenie początkowej gęstości pustych komórek. Aby zbadać wpływ początkowej gęstości pustek przeprowadzono symulacje dla wybranej reguły przy wartościach początkowej gęstości pustek $f_{v0}=0.025, 0.01, 0.005, 0.001$ i 0.0001 . Otrzymane wartości odkształcenia przy zniszczeniu przedstawiono na rys. 4.20. Widać, że zgodnie z oczekiwaniami dla dużych gęstości początkowych otrzymuje się mniejsze odkształcenie przy zniszczeniu, co można interpretować jako większą kruchość. Jednak różnica jest wyraźna tylko dla gęstości początkowej większej od gęstości minimalnej $f_{v\text{min}}$ (oszacowanej na ok. 0.013). Dla gęstości początkowych mniejszych od minimalnej, odkształcenie przy zniszczeniu (dla małych prędkości) tylko nieznacznie różni się od wartości granicznej – 14%.

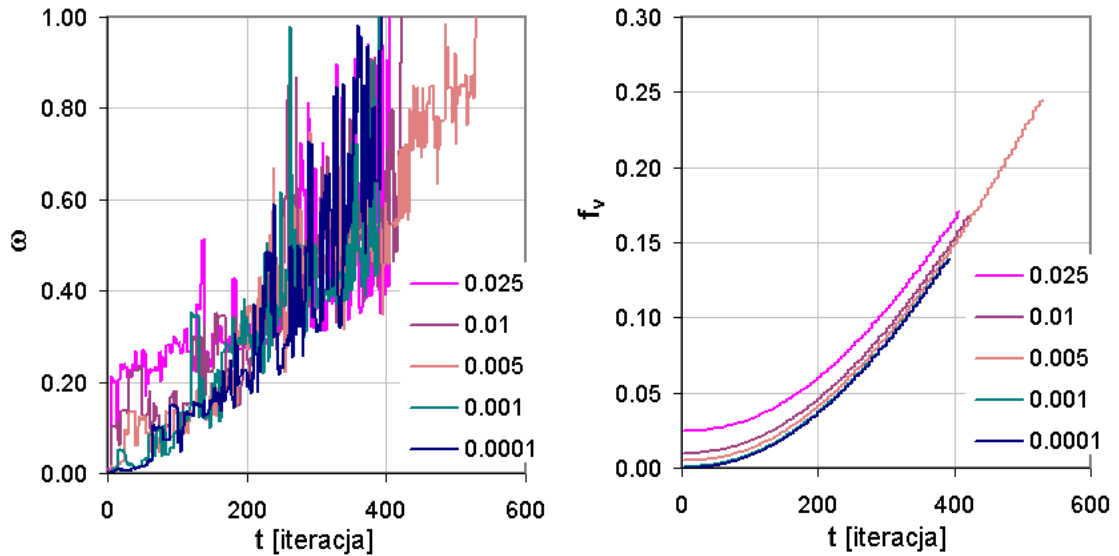


Rys. 4.20. Zależność odkształcenia przy zniszczeniu od prędkości odkształcenia dla $a=0.10011$, $n_{\text{seed}}=10$, $N_0=321$, $\alpha_{\text{new}}=0.25$ przy różnych f_{v0} .

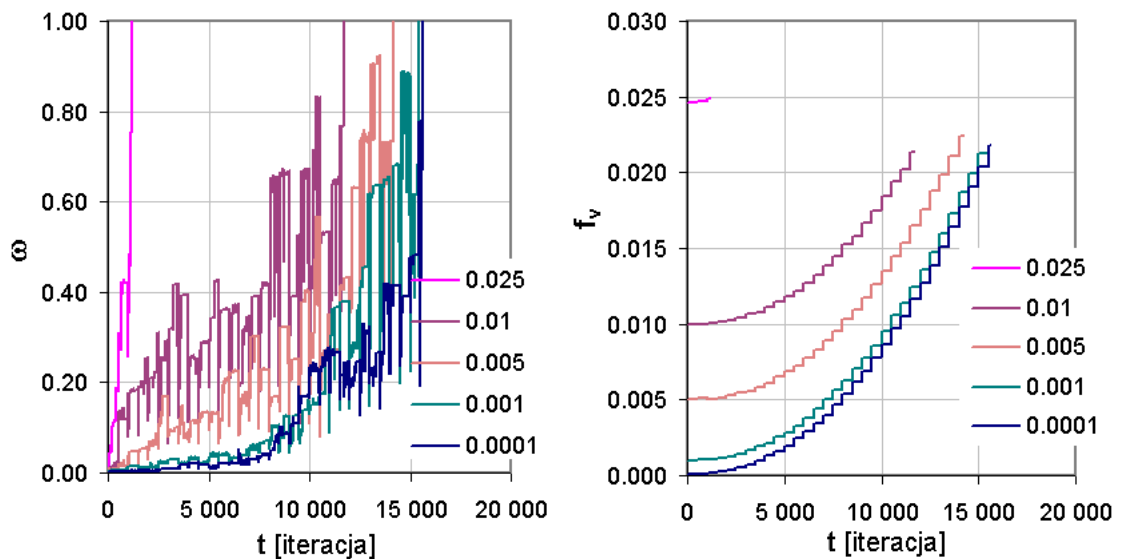
Dla dużych prędkości odkształcenia obserwuje się duży rozrzut wartości odkształcenia przy zniszczeniu i brak wyraźnej zależności od wartości gęstości początkowej. Aby to zrozumieć, należy przeanalizować przebiegi czasowe rozwoju uszkodzenia (zob. rys. 4.21). Rozwój parametru uszkodzenia pomimo początkowych różnic, po około 200 iteracjach, staje się niezależny od początkowej liczby pustek. Cechuje się on dużymi wahaniami, które w sposób przypadkowy doprowadzają do zniszczenia po około 400 iteracjach, tylko w jednym przypadku następuje to znacznie później. Gęstość pustek w chwili zniszczenia dla tej prędkości odkształcenia jest stosunkowo duża i wynosi ok. 0.15. Przy tej wartości początkowe różnice są mało istotne, co tłumaczy podobny przebieg rozwoju uszkodzenia.

Przebiegi dla małej prędkości przedstawiono na rys. 4.22. W tym wypadku istotną rolę odgrywa wartość minimalna gęstości pustek $f_{v\text{min}}$. We wszystkich przypadkach zniszczenie następuje po przekroczeniu tej wartości. Jeżeli wartość początkowa

przekracza tę wartość zniszczenie następuje bardzo szybko. W pozostałych przypadkach ($f_{v0} < f_{vmin}$) czas do zniszczenia zależy od momentu osiągnięcia przez gęstość pustek wartości minimalnej, dając wyraźną zależność od gęstości początkowej.



Rys. 4.21. Wykres rozwoju parametru uszkodzenia (a) i gęstości pustek (b) dla $\mathbf{a}=010011$, $n_{seed}=10$, $N_0=321$, $\alpha_{new}=0.25$, $T_{def}=5$ ($\dot{\epsilon}_0=1.25E-3$ iteracja $^{-1}$) przy różnych f_{v0} .



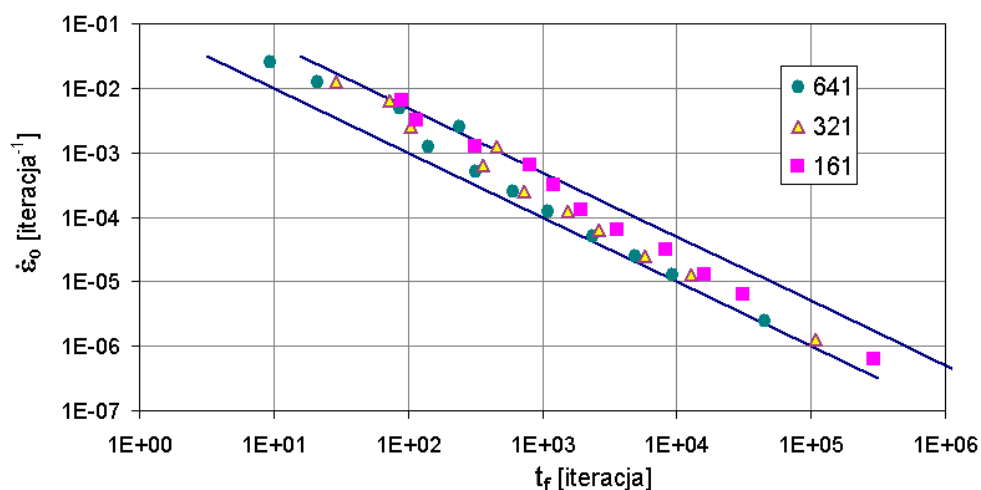
Rys. 4.22. Wykres rozwoju parametru uszkodzenia (a) i gęstości pustek (b) dla $\mathbf{a}=010011$, $n_{seed}=10$, $N_0=321$, $\alpha_{new}=0.25$, $T_{def}=500$ ($\dot{\epsilon}_0=1.25E-5$ iteracja $^{-1}$) przy różnych f_{v0} .

Wpływ rozdzielczości przestrzennej automatu

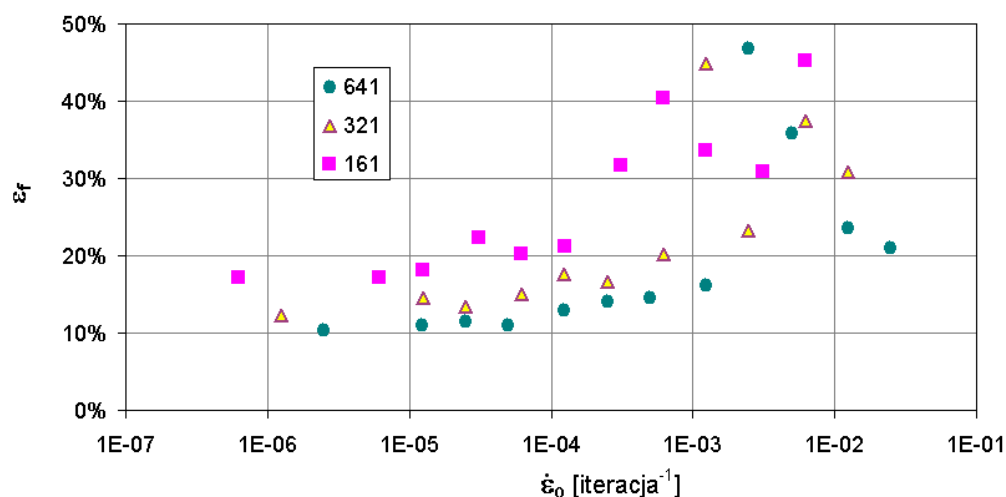
Najczęstszym sposobem poprawy dokładności obliczeń numerycznych jest powiększenie skali modelu, np. poprzez zagęszczenie siatki. Powszechnie uważa się (zob. np. [133]), że skala modelu powinna być dopasowana do skali fizycznej, w której badane zjawisko zachodzi. W badanym modelu za wielkość charakterystyczną przyjęto wielkość pustki. Przy czym nie jest do końca sprecyzowane, który rozmiar przyjąć, czy: wielkość minimalnej możliwej pustki, czy szerokość pustki (szczeliny) inicjującej zniszczenie. To pierwsze podejście zostało uwzględnione przy algorytmie o parametrze $a_3=1$ i zostało opisane w rozdziale omawiającym regułę 010101. Drugie podejście jest

stosowane przy aktualnie omawianym algorytmie z flagą $a_3=0$. Dlatego zwiększenie rozdzielczości w tym modelu należy traktować jako uwzględnienie węższych szczelin w opisie zjawiska, co daje nie tyle poprawę dokładności, a zmianę parametrów fizycznych zadania.

Do analizy wybrano trzy automaty o początkowej liczbie komórek wzdłuż jednego boku RVE N_0 równej 161, 321 i 641. Dla uproszczenia symulacji w RVE umieszczono 5 punktów zarodkowych ziaren ($n_{seed}=5$), co pozwoliło na utworzenie struktury o 4 ziarnach przedstawionej na rys 3.8a. Zakładając, że modelowany materiał posiada ziarna o średnicy ok. 30 μm badane automaty dają rozmiar komórki automatu równy odpowiednio ok. 0.4, 0.2, 0.1 μm .



Rys. 4.23a. Wykres czasu do zniszczenia i początkowej prędkości pełzania dla reguły 010011, $n_{seed}=5$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$ i różnych N_0 . Linie ciągłe to proste o współczynniku kierunkowym -1.



Rys. 4.23b. Zależność odkształcenia przy zniszczeniu od prędkości odkształcenia dla $a=010011$, $n_{seed}=5$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$ i różnych N_0 .

Skala przestrzenna musi być powiązana ze skalą czasową tak, aby zachować dynamikę procesu (por. równ. 3.6). Skala czasowa w badanym zjawisku jest wyznaczona przez dwa procesy. Pierwszy jest związany z prędkością odkształcenia, drugi z procesem dyfuzji. Model zawiera też dwa parametry skalujące czas: Δt i T_{def} . Aby więc porównać automaty o różnych rozdzielczościach, należy właściwie

wyskalować czas (zob. dodatek D.3). Przyjmując jako wzorcowy krok czasowy dla automatu o $N_0=321$ i $n_{seed}=10$, krok czasowy dowolnego automatu wynosi:

$$\Delta t = \frac{321^2}{N_0^2} \frac{n_{seed}}{10}, \quad (4.6)$$

a jego prędkość odkształcenia:

$$\dot{\epsilon}_0 = \frac{2N_0}{T_{def}} \frac{10}{321^2 n_{seed}}. \quad (4.7)$$

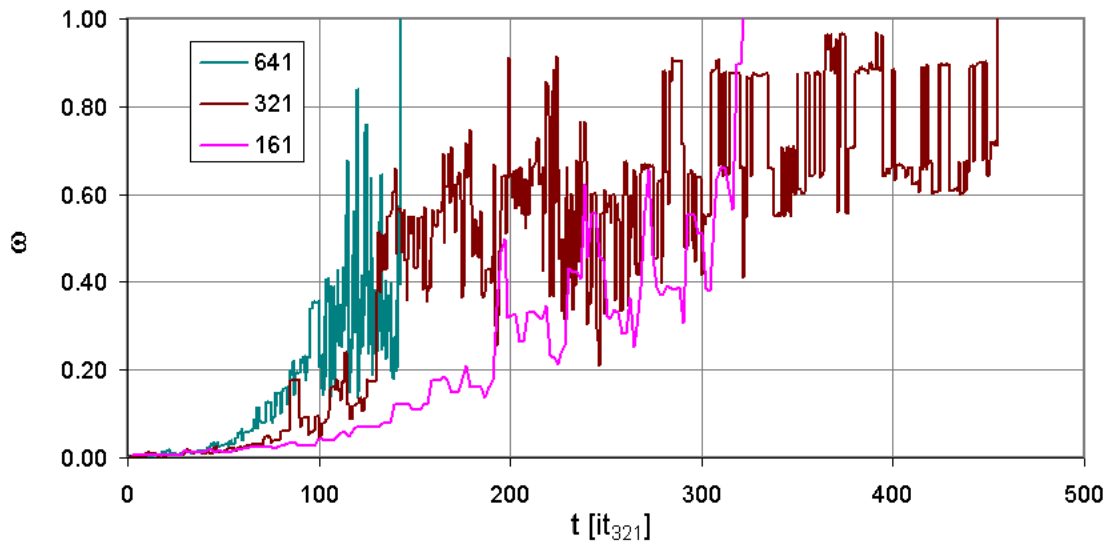
Używając czasu znormalizowanego według powyższych wzorów wyniki symulacji dla automatów o różnych N_0 przedstawiono na rys. 4.23. Wykres czasu do zniszczenia dla wszystkich przypadków jest ograniczony dla małych i dużych prędkości prostymi o nachyleniu -1, przy czym różnica w wartości stałej Monkmana-Granta dla małych prędkości wynika z różnych wartości minimalnej gęstości pustek (ich wartości przedstawiono w tabeli 4.1). Wyraźna różnica pojawia się w obszarze przejściowym; automat o dużej rozdzielczości zmienia mechanizm zniszczenia dla większych prędkości odkształcenia i najbardziej gwałtownie, natomiast zmiana dla automatu o $N_0=161$ następuje dla najmniejszych prędkości. W obszarze tym dla każdego z badanych automatów można wyróżnić punkty, które leżą na liniach niemal równoległych do siebie. Odpowiadają one wykładnikowi β równania (2.1) równemu w przybliżeniu 0.87.

Tabela 4.1. Minimalne gęstości pustek f_{vmin} wymagane do zniszczenia elementu o strukturze opisaną parametrami N_0 i n_{seed} wg równania (4.5) oraz odkształcenie odpowiadające tym gęstościom wg równania (3.47) dla $f_{v0}=0.0001$.

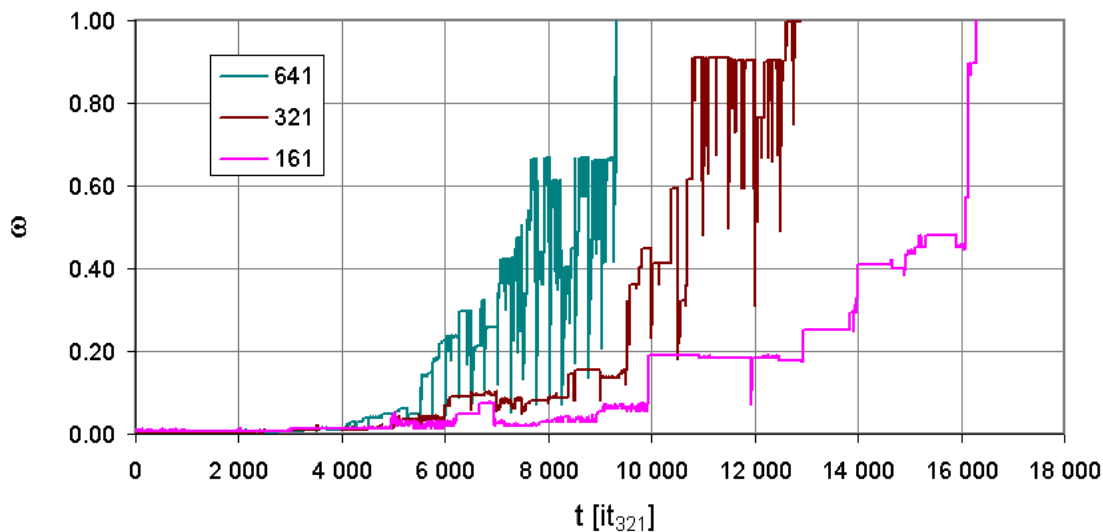
N_0	$1/N_0$	n_{seed}			n_{seed}		
		5	10	20	5	10	20
		f_{vmin}			ϵ_{min}		
161	0.006	0.015	0.027	0.043	15%	19%	24%
321	0.003	0.008	0.013	0.022	11%	14%	18%
641	0.002	0.004	0.007	0.011	8%	11%	13%

Porównanie przebiegów czasowych dla prędkości około $1.25E-3$ i $1.25E-5$ it_{321}^{-1} (gdzie it_{321} jest znormalizowaną jednostką czasu według równ. 4.6) przedstawiono na rys. 4.24. W każdym z pokazanych przypadków wyróżnić można pierwszy okres niezależnego wzrostu uszkodzenia, gdzie prędkość jest stała i nie zależy od rozdzielczości automatu, oraz drugi okres gdzie większa rozdzielczość automatu powoduje szybszy wzrost uszkodzenia.

Analizując otrzymane wyniki symulacji można stwierdzić, że dla omawianej reguły ($\mathbf{a}=010011$) dla dużych prędkości powinno się stosować automat o mniejszej rozdzielczości, aby natomiast zamodelować mniejszą prędkość, rozdzielczość automatu powinna wzrosnąć.



Rys. 4.24a. Rozwój parametru uszkodzenia dla $\mathbf{a}=010011$, $f_{v0}=0.0001$, $n_{seed}=5$, $\alpha_{new}=0.25$, $T_{def}=5$ ($\dot{\epsilon}_0=1.25E-3 \text{ it}_{321}^{-1}$) i różnych N_0 .



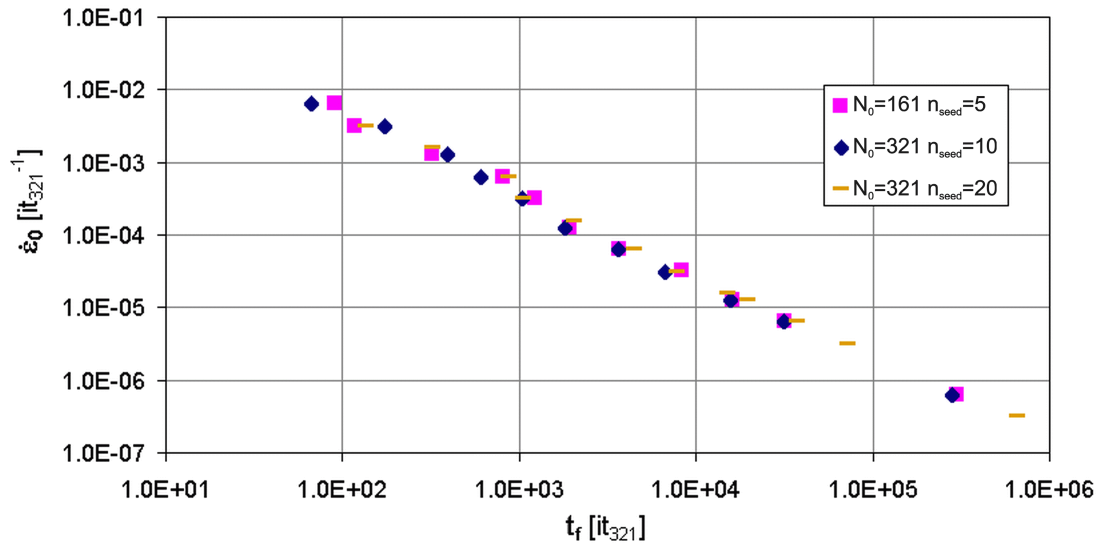
Rys. 4.24b. Rozwój parametru uszkodzenia dla $\mathbf{a}=010011$, $f_{v0}=0.0001$, $n_{seed}=5$, $\alpha_{new}=0.25$, $T_{def}=500$ ($\dot{\epsilon}_0=1.25E-5 \text{ it}_{321}^{-1}$) i różnych N_0 .

Wpływ wielkości RVE

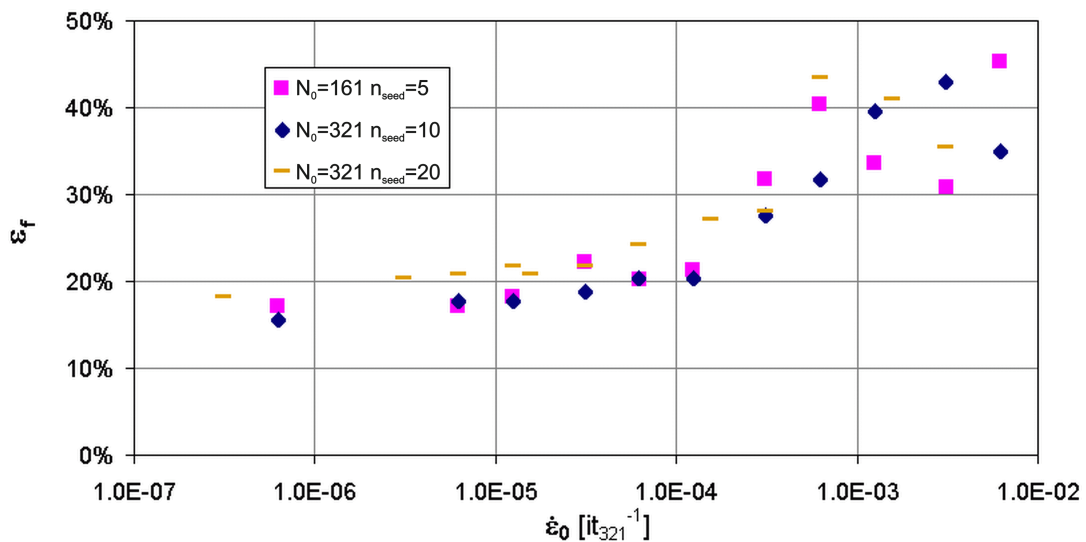
Dla założonego modelu nie da się zbudować dwóch automatów, które różniłyby się tylko wielkością RVE. Wynika to z istnienia dwóch różnych skal czasowych, związanych z procesami dyfuzji i odkształcenia. Zakładając, że wymiar komórki dwóch automatów jest taki sam oraz zachowana jest średnia powierzchnia ziarna, natomiast różna jest liczba ziaren, otrzymać można dwa automaty, które różnią się wielkością RVE. Zgodnie ze wzorem (4.6) krok czasowy tych automatów jest identyczny. Aby jednak zamodelować taką samą prędkość odkształcenia, według wzoru (4.7) automaty te muszą mieć różny parametr T_{def} . Oznacza to różną rozdzielczość czasową przy modelowaniu odkształcenia.

Dla zobrazowania tych zależności porównano wyniki dla automatu o $N_0=161$ i $n_{seed}=5$ z automatem o dwa razy większym (liniowo) RVE tj. $N_0=321$ i $n_{seed}=20$. Dodatkowo wyniki te porównane z omawianym już automatem o $N_0=321$ i $n_{seed}=10$,

który różni się zarówno rozdzielczością przestrzenną i wymiarem RVE, natomiast posiada tę samą skalę czasową odkształcenia co automat o $N_0=161$ i $n_{seed}=5$. Przy porównaniu użyto wzorów (4.6) i (4.7) normując czas według automatu o $N_0=321$ i $n_{seed}=10$. Wyniki symulacji zostały przedstawione na rys. 4.25 i 4.26.

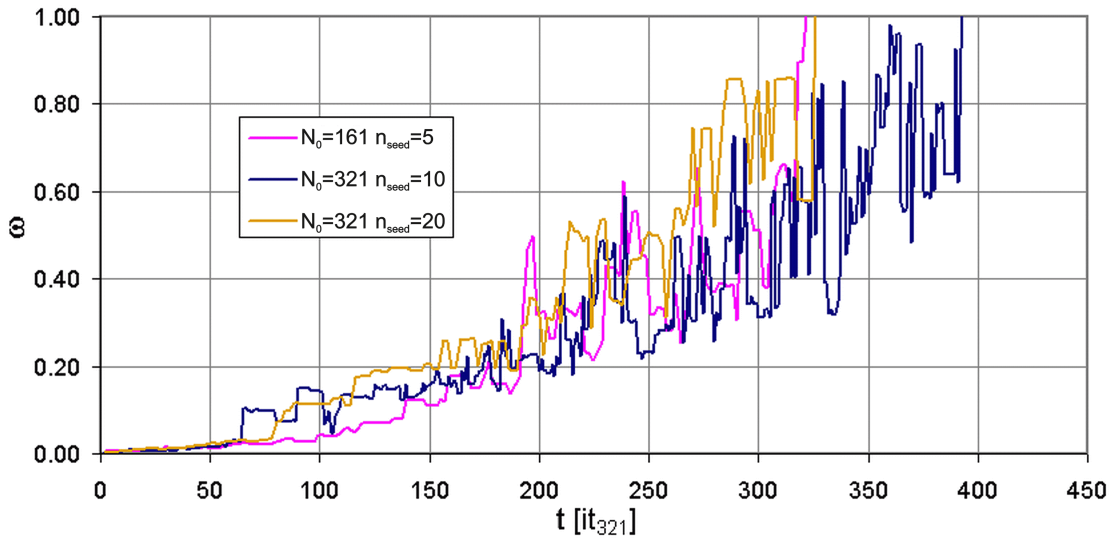


Rys. 4.25a. Wykres zależności pomiędzy czasem do zniszczenia i początkową prędkością pełzania dla reguły 010011, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$ i wybranych N_0, n_{seed} .

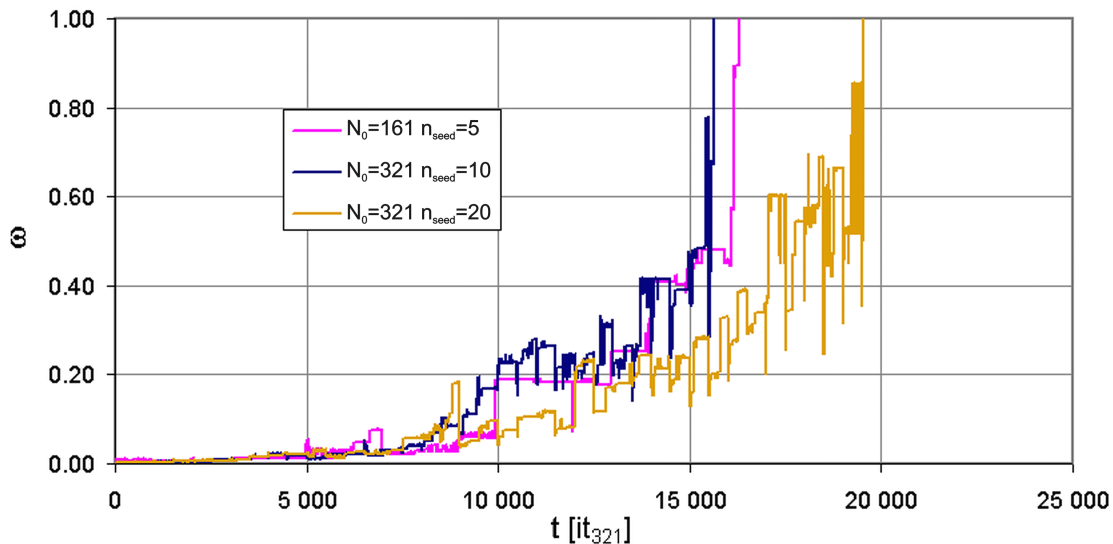


Rys. 4.25b. Zależność odkształcenia przy zniszczeniu od początkowej prędkości odkształcenia dla $a=010011$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$ i wybranych N_0, n_{seed} .

Logarytmiczny wykres czasu do zniszczenia dla badanych trzech automatów nie wykazuje wyraźnych różnic. Są one natomiast widoczne na wykresie odkształcenia przy zniszczeniu. Dla dużych prędkości wyniki przedstawiają podobny charakter o dużym rozrzucie. Dla pośrednich prędkości wielkość RVE wydaje się nie mieć większego znaczenia, natomiast widoczny jest wpływ rozdzielczości przestrzennej (omówiony w poprzednim punkcie). Ciekawe wyniki otrzymano dla najmniejszych prędkości. Uwidocznił się tu wpływ minimalnej wartości gęstości pustek. Różnica pomiędzy automatem $N_0=161, n_{seed}=5$ a $N_0=321, n_{seed}=20$ polega też na różnej długości granic zawartych w RVE, która nie jest w proporcji takiej jak powierzchnia RVE. Powoduje to różne wartości minimalne gęstości pustek i odkształcenia wymagane do zniszczenia, wyliczone w tabeli 4.1 i potwierdzone na wykresie 4.25b.



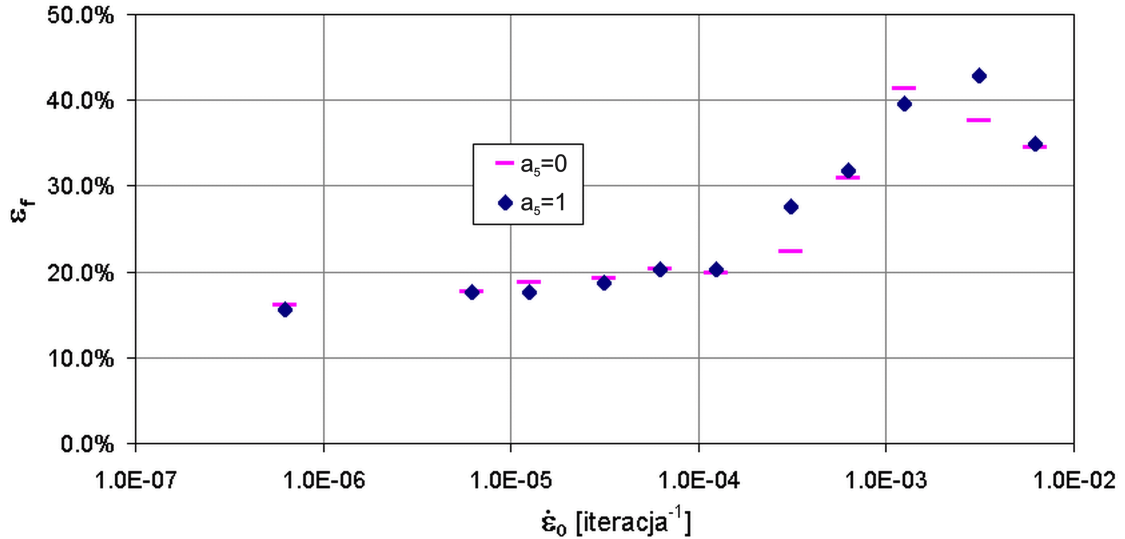
Rys. 4.26a. Rozwój parametru uszkodzenia dla $\mathbf{a}=010011$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{\text{new}}=0.25$, $T_{\text{def}}=5$ ($\dot{\epsilon}_0=1.25\text{E-}3 \text{ it}_{321}^{-1}$) i wybranych N_0 , n_{seed} .



Rys. 4.26b. Rozwój parametru uszkodzenia dla $\mathbf{a}=010011$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{\text{new}}=0.25$, $T_{\text{def}}=500$ ($\dot{\epsilon}_0=1.25\text{E-}5 \text{ it}_{321}^{-1}$) i wybranych N_0 , n_{seed} .

4.2.2.2 Reguła 010010

Różnica pomiędzy regułą 010010 a regułą analizowaną w poprzednim rozdziale polega na wprowadzeniu algorytmu kontrolującego rozwój pustek wokół punktów zarodkowania ($\mathbf{a}_5=0$). Dla analizowanego przypadku algorytm ten nie ma większego wpływu na wynik symulacji. Na rys. 4.27 przedstawiono porównanie reguły 010010 z regułą 010011 dla automatu o $N_0=321$, $n_{\text{seed}}=10$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{\text{new}}=0.25$, $lv_{\text{seed}}=0$. Ponieważ flaga $\mathbf{a}_3=0$ dopuszcza tworzenie się pustek tylko o charakterze szczelinowym wzdłuż granic ziaren, obecność punktów zarodkowych w rejonie granic nieznacznie tylko zmienia rozwój uszkodzenia. Tworzenie się zarodków pustek wewnątrz ziaren, nie jest rozważane. Nieznaczną różnicę pomiędzy algorytmami widać jedynie w obszarze przejściowym. Algorytm o $\mathbf{a}_5=1$ cechuje się współczynnikiem β równania Monkmana-Granta o wartości 0.73, natomiast algorytm $\mathbf{a}_5=0$ daje tę wartość w obszarze przejściowym dużo mniejszą tj. $\beta=0.49$.

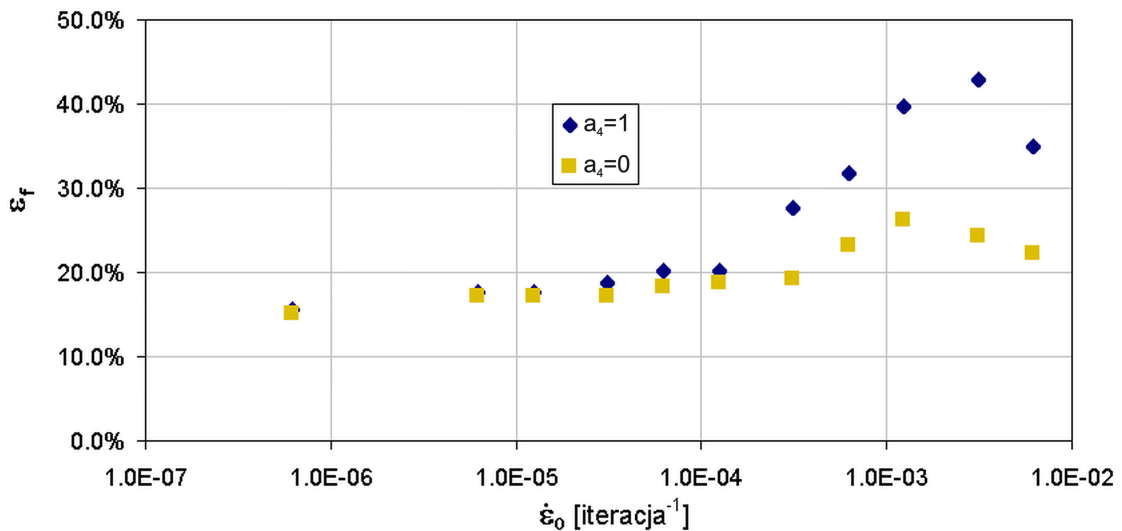


Rys. 4.27. Zależność odkształcenia przy zniszczeniu od prędkości odkształcenia dla $\mathbf{a}=01001x$, $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$ i różnej fladze a_5 .

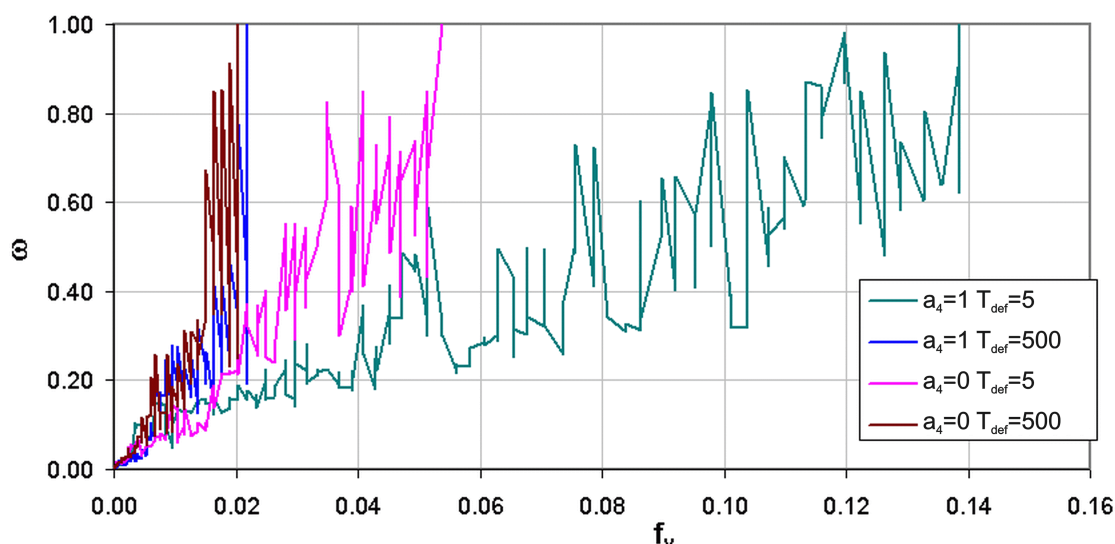
4.2.2.3 Reguła 010001

Flaga a_4 decyduje o miejscu powstawania nowych pustych komórek w kroku lokalnego rozwoju uszkodzenia. Dla $a_4=0$ powstają one przede wszystkim w punktach leżących na granicy ziaren. Ma to na celu zwiększenie, wpływu dyfuzji po granicy, która w rzeczywistych materiałach jest zwykle szybsza od dyfuzji objętościowej, a nie jest to uwzględnione w modelu.

Wyniki dla reguły 010001 porównano z wynikami dla reguły 010011, natomiast zachowano pozostałe parametry automatu ($N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$). Wykres odkształcenia przy zniszczeniu przedstawiono na rys. 4.28, natomiast na rys. 4.29 pokazano rozwój parametru uszkodzenia w zależności od wartości gęstości pustek dla dwóch prędkości odkształcenia.

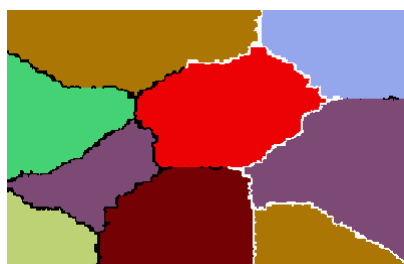


Rys. 4.28. Zależność odkształcenia przy zniszczeniu od prędkości odkształcenia dla $\mathbf{a}=0100x1$, $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$ i różnej fladze a_4 .



Rys. 4.29. Rozwój parametru uszkodzenia w zależności od gęstości pustek dla $\mathbf{a}=0100 \times 1$, $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$ i dwóch wartości T_{def} .

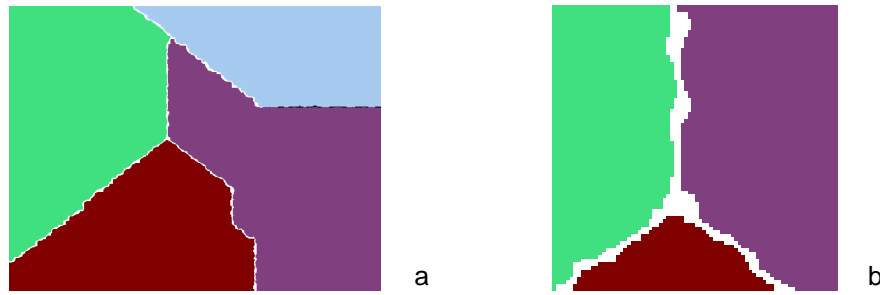
Wyraźna różnica widoczna jest dla dużych prędkości odkształcenia. Reguła ta nie pozwala na tworzenie się pustek wewnątrz ziaren (zob. rys. 4.30), ani też dużych „chmur” pustych komórek, dając dużo mniejsze czasy i odkształcenia przy zniszczeniu. Dla małych prędkości odkształcenia rozwój uszkodzenia przebiega podobnie jak dla reguły z $a_4=1$. Widoczne jest (na rys. 4.29) przyspieszenie rozwoju uszkodzenia po przekroczeniu wartości $f_{vmin}=0.013$.



Rys. 4.30. Obrazy stanu końcowego dla reguły 010001, $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$, $T_{def}=1$. Na biało zaznaczona jest szczelina łącząca krawędzie RVE, na czarno pozostałe pustki. Wzrost pustek według mechanizmu odkształceniowego.

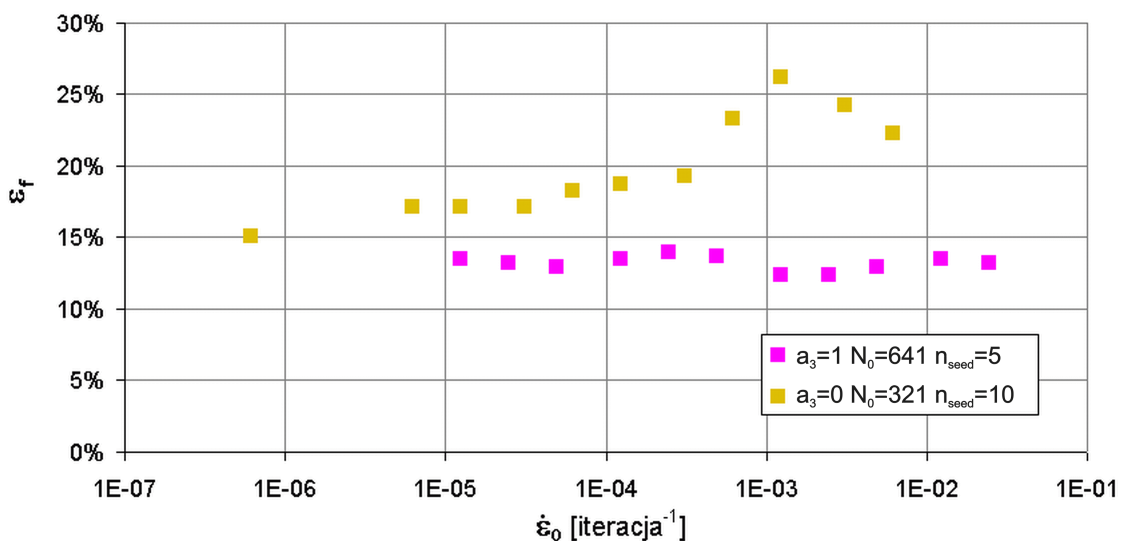
4.2.2.4 Reguła 010101

Reguła, dla której $a_3=1$ opisuje jakościowo inny mechanizm powstawania pustek. Flaga ta oznacza, że współczynniki wagowe w równaniu (3.58) przyjęto $w_{e-m}=2$, $w_{g-g}=1$, co promuje wzrost pustek o kształcie owalnym. Osiąga się dzięki temu kształt pustek bardziej zbliżony do naturalnego, a szczelina powstaje poprzez połączenie się sąsiednich pustek. Tym samym minimalna szerokość szczeliny liczona w komórkach jest większa niż 1. Model ten można więc uznać za model o większej rozdzielczości niż w przypadku $a_3=0$, gdyż dokładniej wnika w budowę pustki. Aby zachować pozostałe parametry struktury, liniowy wymiar jednej komórki powinien być więc mniejszy. Szerokość pustek uzyskana w symulacjach wynosi od 3 do 7 komórek (zob. rys. 4.31). Zmiany odkształcenia nie pozwalają na wykształcenie tak szerokich pustek jak na rys. 4.11. Zakładając, że minimalny rozmiar pustki to 3 komórki, chcąc zachować proporcję szerokości ziarna do szerokości pustki 100:1 (zob. rozdz. 3.3.1.2), należy przyjąć szerokość ziarna ok. 300 komórek. Warunek ten spełnia automat o $N_0=641$ i $n_{seed}=5$.

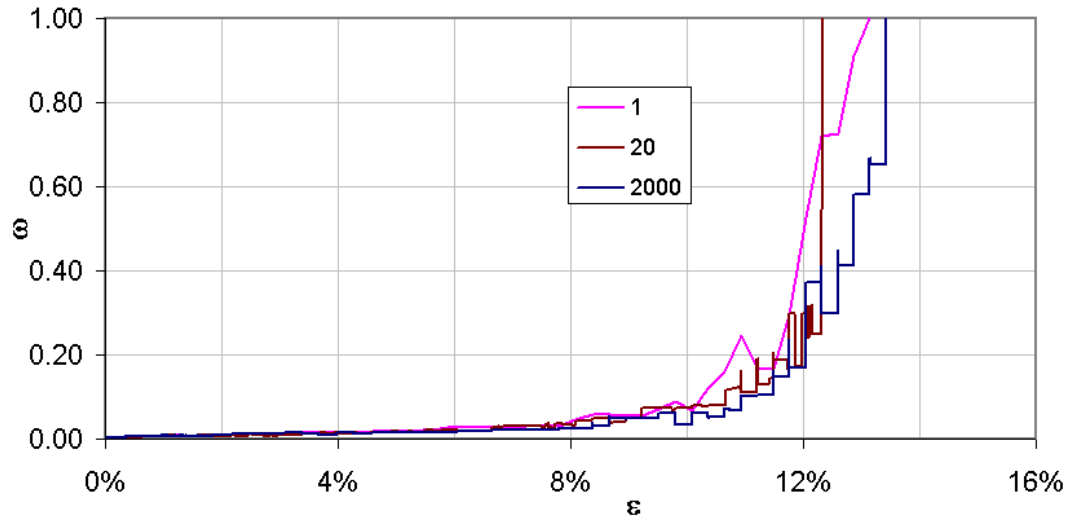


Rys. 4.31. Obrazy stanu końcowego dla reguły 010101, $N_0=641$, $n_{seed}=5$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$, $T_{def}=2000$. Na białą zaznaczona jest szczelina łącząca krawędzie RVE, na czarno pozostałe pustki. Wzrost pustek według mechanizmu dyfuzyjnego ograniczonego. Na rys. (b) 7-krotne powiększenie fragmentu.

Na rysunku 4.32 przedstawiono wyniki symulacji dla automatu o $\mathbf{a}=010101$, $N_0=641$ i $n_{seed}=5$, porównane z automatem $\mathbf{a}=010001$, $N_0=321$ i $n_{seed}=10$. Pozostałe parametry w obu przypadkach to $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$. Automat o fladze $\mathbf{a}_3=1$ charakteryzuje się niezależnością odkształcenia przy zniszczeniu od prędkości odkształcenia. Spełnia on zależność Monkmana-Granta (2.1), przy $\beta=1$ i $C_{MG}=0.13$. Wartość stałej Monkmana-Granta jest nieznacznie mniejsza od minimalnego odkształcenia przy zniszczeniu możliwego do osiągnięcia dla automatu $N_0=321$, $n_{seed}=10$ (14% – zob. tabela 4.1). Jest to zrozumiałe, gdyż szczelina łącząca pustki, ma odcinkami szerokość mniejszą niż 3 komórki, zatem komórek pustych potrzebnych do zniszczenia jest mniej. Wartość wykładnika $\beta=1$ świadczy o wyłącznie odkształceniowym charakterze zniszczenia i znikomym wpływie dyfuzji. W istocie w modelu tym dyfuzja nie odgrywa roli we wzroście pustek, a jedynie w formowaniu ich kształtu. Widoczne jest to także na wykresie (rys. 4.33), gdzie porównano rozwój parametru uszkodzenia w zależności od odkształcenia, dla 3 różnych prędkości odkształcenia. Przez porównanie z wykresami na rys. 4.19 widać, że ma on charakter rozwoju dyfuzyjnego ograniczonego odkształceniem (a ściślej gęstością pustek). Aby zamodelować czysto dyfuzyjny charakter rozwoju uszkodzenia przy tej regule należałoby dokładniej odzwierciedlić skalę badanych mechanizmów, zwiększając rozdzielczość automatu, a także uwzględnić ich 3-wymiarowy charakter.



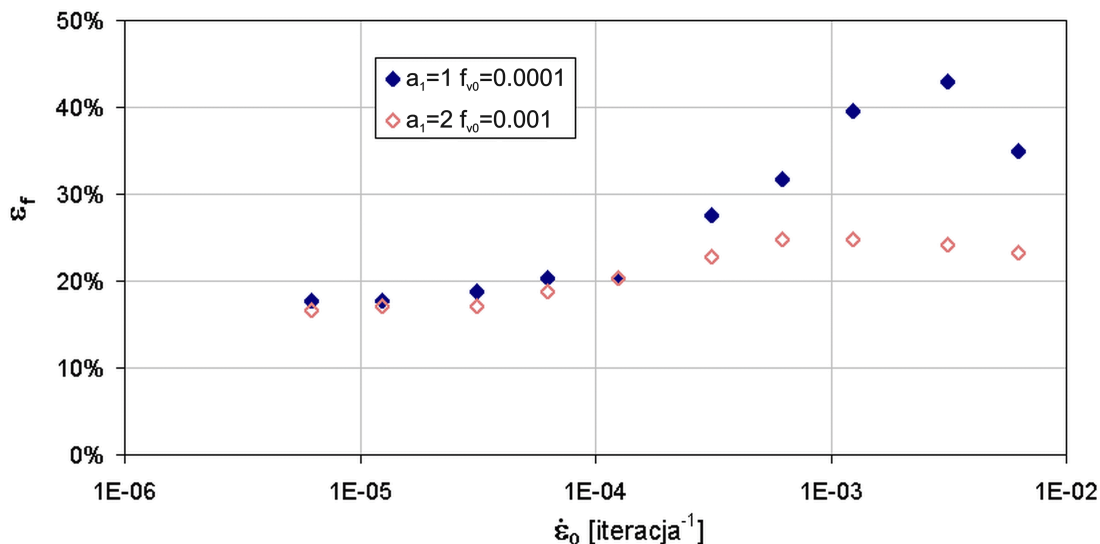
Rys. 4.32. Zależność odkształcenia przy zniszczeniu od prędkości odkształcenia dla $\mathbf{a}=010x01$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$, różnej fladze \mathbf{a}_3 i wybranych wartościach N_0 i n_{seed} .



Rys. 4.33. Rozwój parametru uszkodzenia w zależności od odkształcenia dla $\mathbf{a}=010x01$, $N_0=641$, $n_{seed}=5$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$ i wybranych wartości T_{def} .

4.2.2.5 Reguła 020011

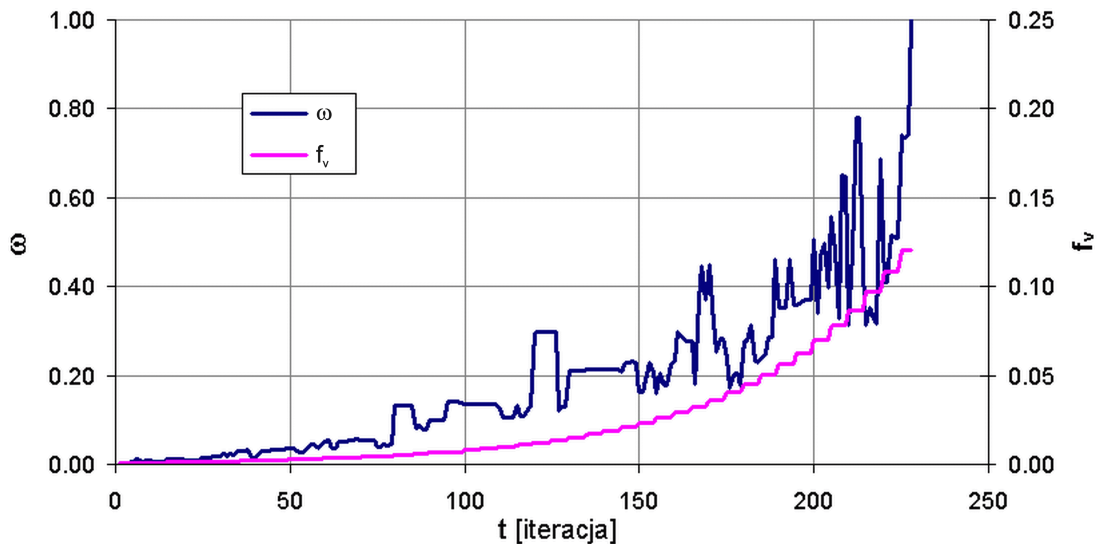
Z dotychczasowych analiz wynika, że decydujący wpływ na czas do zniszczenia i odkształcenie przy zniszczeniu ma gęstość pustek. Istotna jest nie tylko jej wartość w chwili zniszczenia, ale także jej rozwój w czasie. Algorytm o $a_1=2$ różni się od poprzednio rozważanego właśnie zależnością gęstości pustek od odkształcenia – funkcja potęgowa została zastąpiona wykładniczą. Z rysunku 3.11 wynika, że dobrym porównaniem dla algorytmu $a_1=1$ z parametrami $H=1.17$, $\gamma=2.3$, $f_{v0}=0.0001$ jest algorytm $a_1=2$, $q_0=1.115$, $f_{v0}=0.001$. Do odkształcenia 15% rozwój gęstości pustek przebiega podobnie, potem dla $a_1=2$ wzrost jest dużo szybszy.



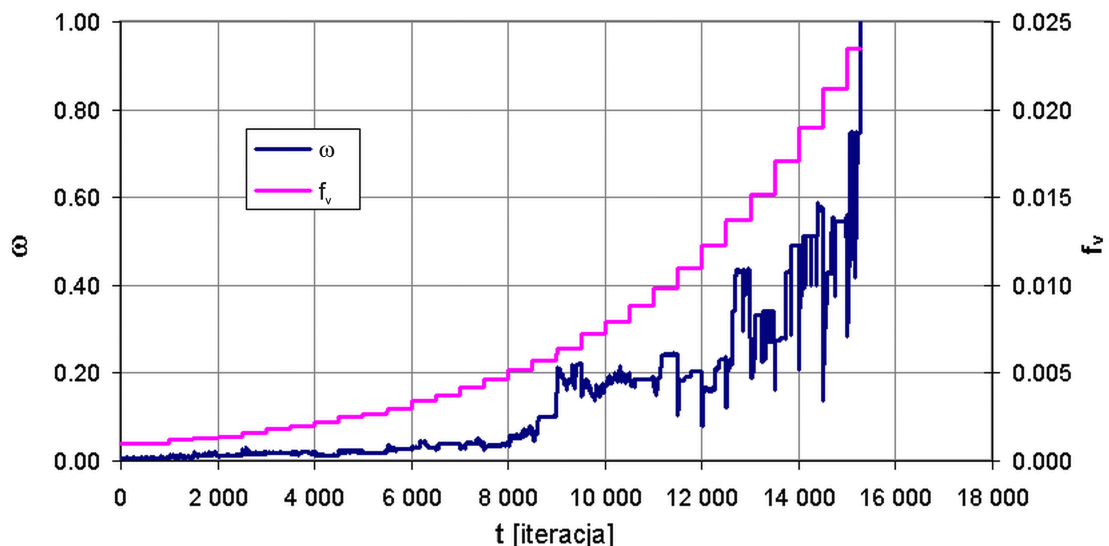
Rys. 4.34. Wykres odkształcenia przy zniszczeniu i początkowej prędkości pełzania dla reguły 010011, $f_{v0}=0.0001$ w porównaniu z regułą 020011, $f_{v0}=0.001$. Pozostałe parametry: $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $\alpha_{new}=0.25$.

Na wykresie na rys. 4.34 przedstawiono wyniki symulacji (odkształcenie przy zniszczeniu) dla automatu $\mathbf{a}=020011$, $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $q_0=1.115$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$ w porównaniu z automatem $\mathbf{a}=010011$, $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $H=1.17$, $\gamma=2.3$, $f_{v0}=0.0001$, $\alpha_{new}=0.25$. Dla małych prędkości odkształcenia, pomimo iż odkształcenie przy zniszczeniu przekracza 15%, nie występuje żadna różnica między badanymi

algorytmami. Dopiero przy dużych prędkościach przy odkształceniach powyżej 20% różnica jest zauważalna. Dla takich odkształceń względna różnica pomiędzy gęstościami pustek sięga ok. 100%. Różnicę tę widać także na wykresach rozwoju parametru uszkodzenia (zob. rys. 4.35). W porównaniu z rys. 4.19 widać, że dla małej prędkości $T_{\text{def}}=500$, rozwój ten przebiega bardzo podobnie, natomiast dla większej prędkości ($T_{\text{def}}=5$), zmienia się charakter rozwoju uszkodzenia. Dla algorytmu $a_1=1$ był on w miarę równomierny, natomiast dla $a_1=2$ stał się podobny do wykresu dla małych prędkości – osiągając znaczne przyspieszenie rozwoju przy zbliżaniu się do wartości niszczonej.



Rys. 4.35a. Rozwój parametru uszkodzenia i gęstości pustek dla $\mathbf{a}=020011$, $f_v=0.001$, $N_0=321$, $n_{\text{seed}}=10$, $\alpha_{\text{new}}=0.25$, $T_{\text{def}}=5$ ($\dot{\epsilon}_0=1.25\text{E-}3$).

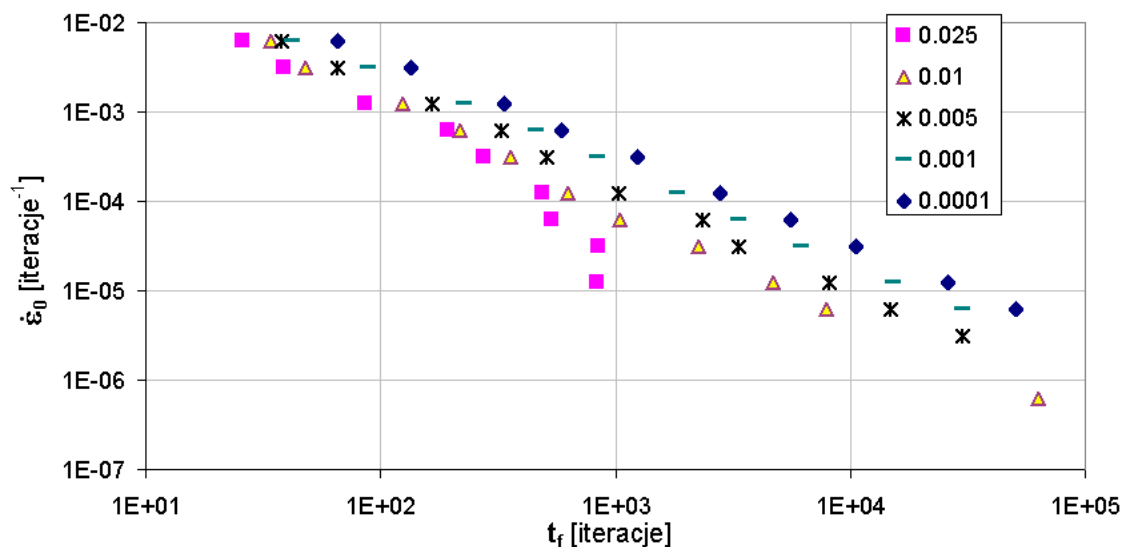


Rys. 4.35b. Rozwój parametru uszkodzenia i gęstości pustek dla $\mathbf{a}=020011$, $f_v=0.001$, $N_0=321$, $n_{\text{seed}}=10$, $\alpha_{\text{new}}=0.25$, $T_{\text{def}}=500$ ($\dot{\epsilon}_0=1.25\text{E-}5$).

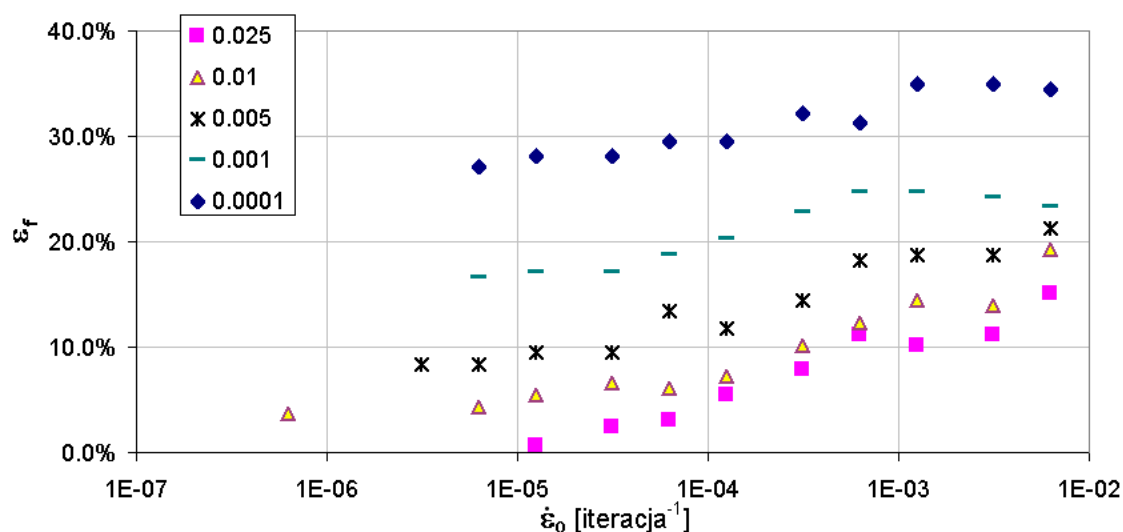
Wpływ uszkodzenia początkowego

Różnice pomiędzy regułą 020011 a 010011 uwiadcniają się przy analizie wpływu początkowej gęstości pustek (por. rys. 3.11). Przede wszystkim zauważalna jest różnica w odkształceniu przy zniszczeniu, którego wartość dla małych prędkości waha się od 0.6% do 27% (zob. rys. 4.36). Podobnie w dużym zakresie zmienia się wartość

wykładnika β w równaniu Monkmana-Granta (2.1). Dla dużej gęstości początkowej pustek wynosi on średnio 0.60 i rośnie dla małej gęstości do 0.96. Różnice te stwarzają duże możliwości modelowania całej gamy materiałów: od bardzo kruchych, charakteryzujących się małym odkształceniem przy zniszczeniu i małą wartością współczynnika β , do materiałów ciągliwych o dużej wartości odkształcenia przy zniszczeniu i wartości współczynnika β bliskiej 1.



Rys. 4.36a. Zależność czasu do zniszczenia od prędkości odkształcenia dla $a=020011$, $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $\alpha_{new}=0.25$ przy różnych f_{v0} .

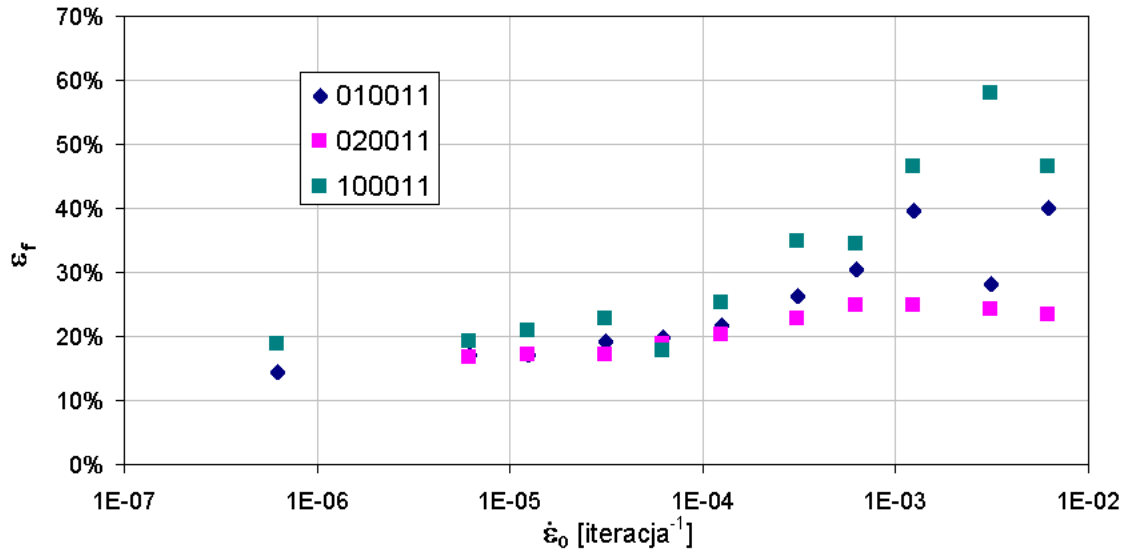


Rys. 4.36b. Zależność odkształcenia przy zniszczeniu od prędkości odkształcenia dla $a=020011$, $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $\alpha_{new}=0.25$ przy różnych f_{v0} .

4.2.3 Element o stałej masie i rosnącej objętości

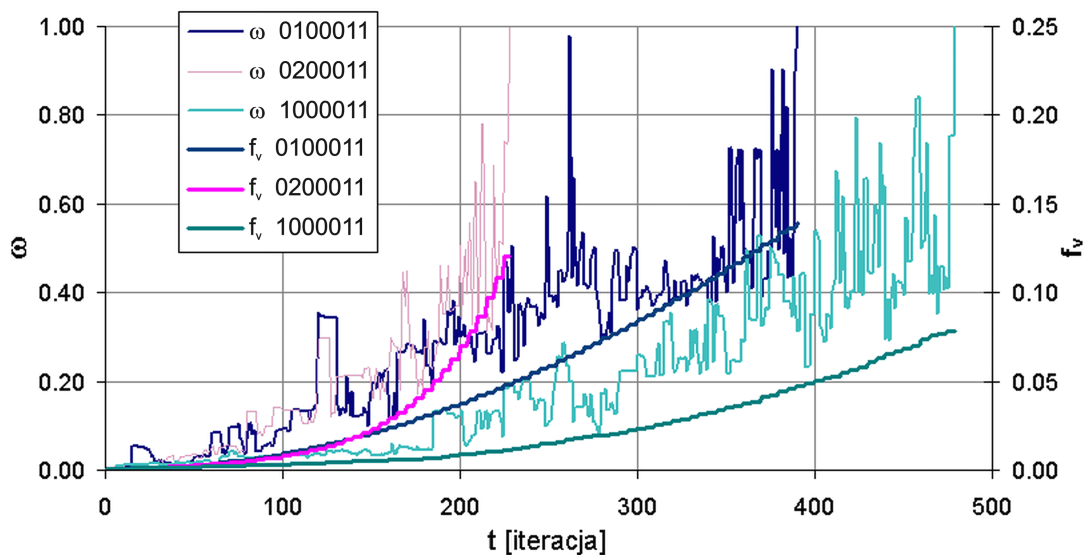
Z dotychczasowych analiz wynika, że decydujący wpływ na rozwój uszkodzenia mają prędkość odkształcenia i gęstość pustek. W poprzednio analizowanych algorytmach gęstość pustek była powiązana z odkształceniem poprzez zależność analityczną. Jednak w rzeczywistości funkcja gęstości pustek zależy też od przyłożonego obciążenia. Np. dla doświadczenia Boettnera i Robertsona [16] dopasowując wyniki do równania (2.83) otrzymano dla szerokiego zakresu danych parametry $H=1.17$ $\gamma=2.3$, ale już zawężając wyniki dla temperatury 773 K i obciążenia

$\sigma=24.1$ MPa otrzymuje się $H=0.67$ $\gamma=1.86$, a dla obciążenia $\sigma=34.5$ MPa parametry te wynoszą $H=3.32$, $\gamma=2.92$. Widoczna jest więc zależność wartości parametrów od poziomu naprężenia. Celowym może być odejście od analitycznego powiązania gęstości pustek z odkształceniem i zastąpienia tej zależności modelem mechanizmu zmiany gęstości pustek. Próbą opisu takiego mechanizmu jest reguła oznaczona flagami $a_{01}=[a_0 a_1]=10$, gdzie objętość, a przez nią gęstość pustek, jest sprzężona z makroskopowym parametrem uszkodzenia (zob. równ. 3.43).

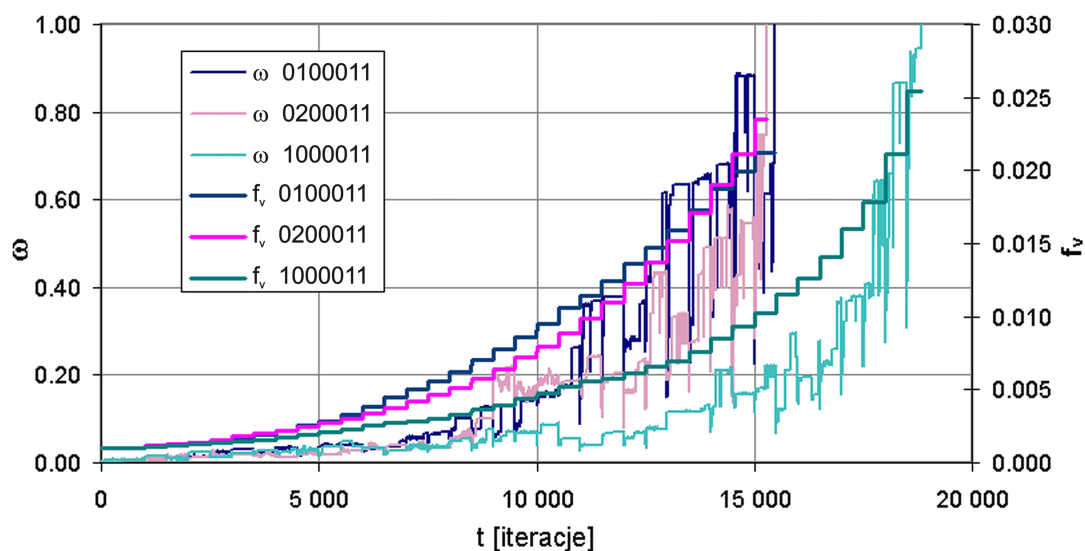


Rys. 4.37. Zależność odkształcenia przy zniszczeniu od prędkości odkształcenia dla różnych reguł zmiany objętości (lub gęstości) przy $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$.

Analizę reguły o stałej masie i objętości zależnej od parametru uszkodzenia przeprowadzono na przykładzie algorytmu 100011 przy $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$. Na rys. 4.37 przedstawiono wyniki symulacji (odkształcenie przy zniszczeniu w zależności od prędkości odkształcenia) w porównaniu do wyników otrzymanych przy pomocy reguł 010011 i 020011. Odształcenie przy zniszczeniu zbliżone jest do wyników otrzymanych przy pomocy potęgowego prawa zmiany gęstości. Współczynnik β równania Monkmana-Granta (2.1) dla środkowej części wykresu wynosi około 0.66. Dla małych prędkości widoczny jest wpływ ograniczonej ilości pustych komórek, pomimo braku jawnej zależności pomiędzy odkształceniem a gęstością pustek. Analiza przebiegów czasowych (rys. 4.38) dla małej i większej prędkości odkształcenia pokazuje, że kształt krzywej gęstości pustek dla reguły 100011 jest zbliżony do krzywej potęgowej, ale o większym wykładniku γ – dla $T_{def}=5$ parametry funkcji potęgowej gęstości pustek wynoszą $H=0.87$, $\gamma=3.2$, natomiast dla $T_{def}=500$ przybierają wartości $H=9.32$, $\gamma=3.9$. Występuje więc zależność parametrów funkcji gęstości pustek od poziomu obciążenia, ale tendencja zmian tych parametrów jest odwrotna niż w doświadczeniu Boettnera i Robertsona.



Rys. 4.38a. Rozwój parametru uszkodzenia i gęstości pustek dla różnych reguł zmiany objętości (lub gęstości) przy $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$, dla $T_{def}=5$ ($\dot{\epsilon}_0=1.25E-3$).



Rys. 4.38b. Rozwój parametru uszkodzenia i gęstości pustek dla różnych reguł zmiany objętości (lub gęstości) przy $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$, dla $T_{def}=500$ ($\dot{\epsilon}_0=1.25E-5$).

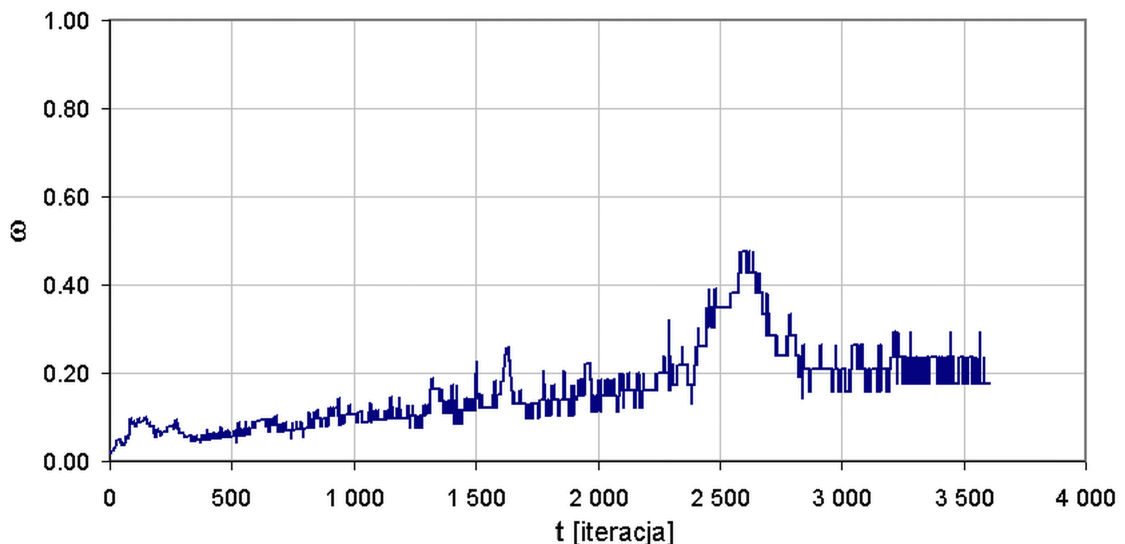
4.3 Zniszczenie transkrystaliczne

Do zamodelowania zniszczenia transkrystalicznego użyty został automat o parametrach preferujących rozwój pustek niezależnych od przebiegu granicy ziaren. Przede wszystkim wytrzymałość granicy ziaren w kroku odkształcenia uznana za równą wytrzymałości wnętrza ziaren (flaga $a_2=1$). Powstawanie nowych pustek może odbywać się w całej objętości z jednakowym prawdopodobieństwem (flaga $a_4=1$). Dopuszczony został tylko owalny kształt pustek (flaga $a_3=1$). Założenia te dają ogólny zapis reguły rozwoju pustek transkrystalicznych w postaci $xx111x$.

Dla zniszczenia transkrystalicznego można użyć automatu o mniejszym rozmiarze początkowym (w komórkach). Pustki transkrystaliczne są zazwyczaj większe od pustek międzykrystalicznych, dlatego do ich opisu wystarcza automat o mniejszej rozdzielczości. Dodatkowo mniejsza wartość N_0 pozwala na osiągnięcie większych prędkości odkształcenia (zob. równ. 3.30).

4.3.1 Element o stałej masie i objętości

W przypadku reguły $a_{01}=00$ bardzo trudno jest otrzymać zniszczenie transkrystaliczne. Wymaga to bardzo dużej początkowej gęstości pustek. Przeprowadzone zostały symulacje dla $f_{v0}=0.025$ jednak okazało się to niewystarczające do uzyskania stanu zniszczenia dla odkształceń mniejszych od 230%. Typowy przebieg zmian parametru uszkodzenia w tym przypadku został pokazany na rys. 4.39. Po początkowym szybszym wzroście rozmiar pustek stabilizuje się i dalsze zmiany parametru uszkodzenia wynikają jedynie ze zmiany wymiaru poprzecznego RVE. Widoczne są chwilowe wzrosty parametru uszkodzenia, które mogłyby doprowadzić do zniszczenia, gdyby model uwzględniał inne mechanizmy zniszczenia związane głównie z lokalizacją odkształceń (np. ścinanie, szyjkowanie). Bez tych mechanizmów wszystkie większe pustki zostają wydłużone w kierunku rozciągania, co zmniejsza ich udział w ogólnym zniszczeniu.

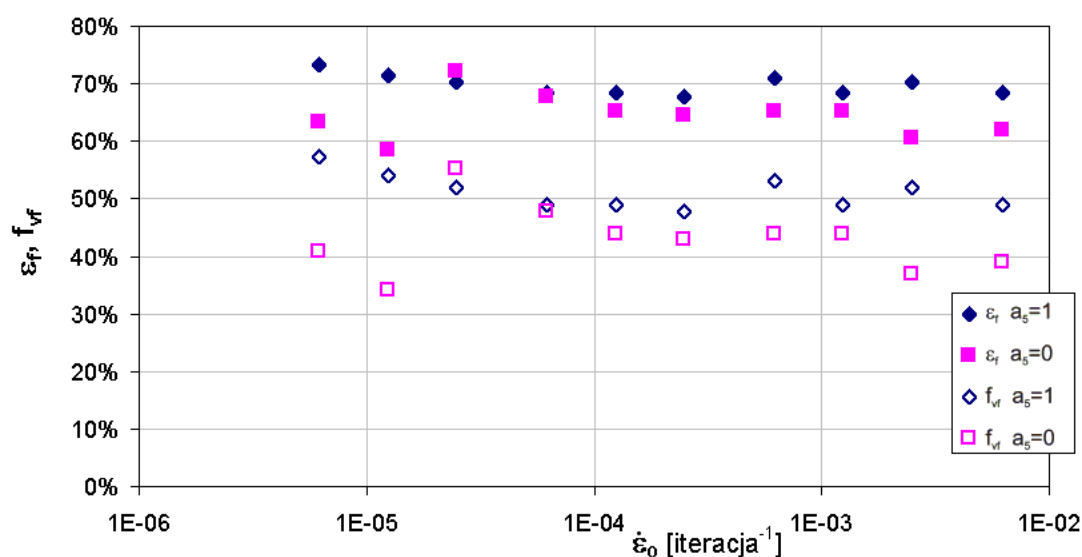


Rys. 4.39. Zmiany parametru uszkodzenia dla automatu o regule 001111, $N_0=161$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.025$, $\alpha_{all}=0.75$, $T_{def}=5$.

4.3.2 Element o stałej objętości i malejącej masie

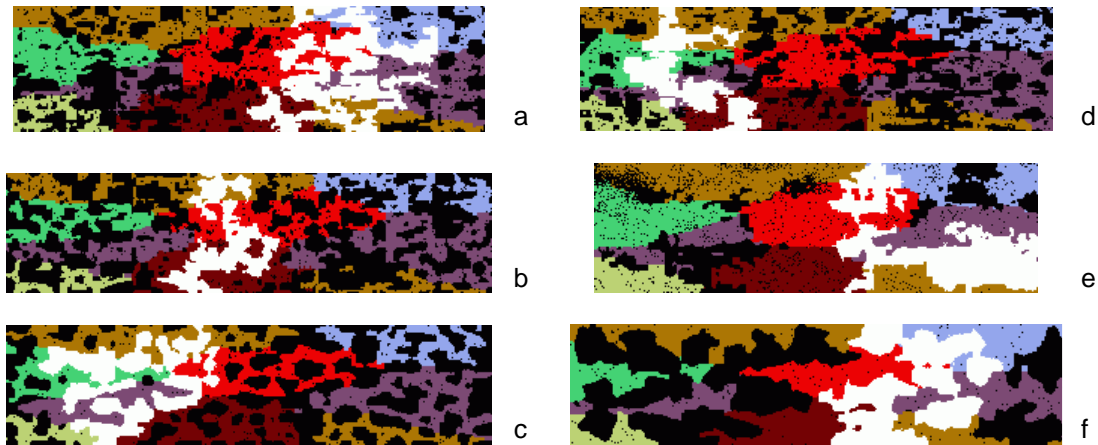
4.3.2.1 Reguła 01111x

Symulacje zostały przeprowadzone dla automatu o $N_0=161$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$, $H=1.17$ $\gamma=2.3$, dla dwóch przypadków $a_5=0$ i 1 , dla różnych prędkości odkształcenia zadawanych przez parametr T_{def} w zakresie od 1 do 2000. Otrzymane odkształcenia przy zniszczeniu wraz z odpowiadającymi im końcowymi wartościami gęstości pustek zostały przedstawione na rys. 4.40. Wynika z niego, że odkształcenie przy zniszczeniu praktycznie nie zależy od prędkości odkształcenia, czyli mechanizm zniszczenia jest wyłącznie odkształceniowy. Wykładnik β w równaniu Monkmana-Granta (2.1) jest bardzo bliski 1. Średnie odkształcenie przy zniszczeniu dla $a_5=0$ wynosi 64.6%, a odchylenie standardowe 3.6%. Dla $a_5=1$ wartości te nieznacznie się różnią: wartość średnia 69.4%, odchylenie standardowe 2.1%. Z uwagi na ścisłą zależność pomiędzy odkształceniem a gęstością pustek, niewielkie są też wahania tej drugiej wielkości; wartości średnie wynoszą dla $a_5=0$ – $f_{vf}=0.431$, natomiast dla $a_5=1$ – $f_{vf}=0.506$. Są to wartości dużo większe, niż przyjmowane w literaturze (np. 0.2 w [170]). Należy jednak uwzględnić nieprzystawalność koncepcji RVE do modelowania zjawisk cechujących się silną lokalizacją odkształceń. Obserwując np. zniszczenie transkryystaliczne na rys. 2.15d widać dużą różnicę w wielkości pustek, które tworzą strefę zniszczenia (ok. $85 \times 30 \mu\text{m}$), w stosunku do pustek sąsiednich (największe $18 \times 4 \mu\text{m}$). Podobnego rzędu mogą być też różnice pomiędzy odkształceniem w strefie zniszczenia, a odkształceniem w strefie bezpośrednio przyległej. Widać wyraźnie, że wartość gęstości pustek, która jest liczona jako wielkość zhomogenizowana w RVE, zależy bardzo silnie od wielkości tego RVE.



Rys. 4.40. Odkształcenie przy zniszczeniu i gęstość pustek w zależności od początkowej prędkości pełzania dla reguły 01111x, $N_0=161$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$.

Przykładowe stany końcowe uzyskane w wyniku symulacji zostały pokazane na rys. 4.41. Porównując obrazy uzyskane dla różnych prędkości widać, że mniejsza prędkość odkształcenia, poprzez większy wpływ dyfuzji, wpływa głównie na kształt pustek. Pustki otrzymane przy małej prędkości mają bardziej zaokrąglone kształty. Nie jest to cecha obserwowana w rzeczywistości, a wynika z niedoskonałości mechanizmu odkształcenia w badanym modelu.



Rys. 4.41. Stany końcowe dla zniszczenia transkrystalicznego ($N_0=161$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$, $H=1.17$ $\gamma=2.3$); reguła 011111 $T_{def}=1$ (a), $T_{def}=5$ (b), $T_{def}=500$ (c), reguła 011110 $T_{def}=1$ (d), $T_{def}=5$ (e), $T_{def}=500$ (f).

Dla małych prędkości widać też wyraźnie różnicę pomiędzy algorytmem pozwalającym na swobodny wzrost pustek w całej objętości ($a_5=1$ – lewa kolumna na rys. 4.41), a algorytmem pozwalającym na wzrost wyłącznie wokół punktów zarodkowych ($a_5=0$ – prawa kolumna). W badanym modelu punkty zarodkowe mogą się tworzyć wyłącznie na granicach ziaren, dlatego też na rys. e i f pustki rosną jako pustki międzykrystaliczne. W odróżnieniu od modelu zniszczenia międzykrystalicznego rosną one do dużych rozmiarów i często łączą się ze sobą poprzez ziarna, dając w efekcie mieszaną ścieżkę zniszczenia. Zmiana charakteru zniszczenia nie powoduje jednak zauważalnej zmiany w wykładniku β , tłumaczy natomiast mniejsze średnie odkształcenie i gęstość pustek przy zniszczeniu dla tego przypadku.

Tabela 4.2. Średnie wartości odkształcenia i gęstości pustek przy zniszczeniu dla algorytmu 011111 i różnych parametrów N_0 , n_{seed} , f_{v0} .

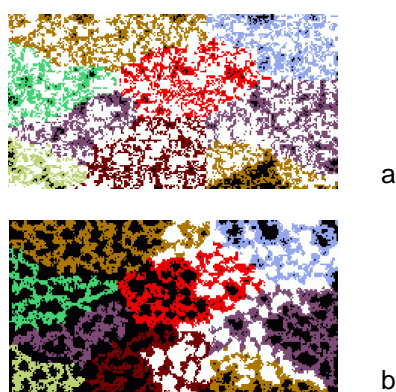
	$n_{seed}=10, f_{v0}=0.001$			$N_0=161, f_{v0}=0.001$			$N_0=161, n_{seed}=10$		
	N_0			n_{seed}			f_{v0}		
	41	81	161	5	10	20	0.0001	0.001	0.01
ϵ_f [%]	63.2	66.1	69.4	69.9	69.4	70.2	70.2	69.4	68.2
f_{vf}	0.413	0.454	0.506	0.515	0.506	0.520	0.521	0.506	0.492

Ważną cechą badanego algorytmu jest niezależność od wielkości RVE i ziarna. W tabeli 4.2 zestawiono średnie wartości odkształcenia i gęstości pustek przy zniszczeniu dla algorytmu 011111 i różnych parametrów N_0 , n_{seed} , f_{v0} . Wpływ tych parametrów na rezultaty jest nieznaczny. Wyraźnie, choć słabo, zaznacza się jedynie zależność od rozdzielczości automatu N_0 .

4.3.2.2 Reguła 02111x

Algorytm o wykładniczej funkcji wzrostu gęstości pustek został wprowadzony, by w sztuczny sposób wspomóc koalescencję pustek. Po przekroczeniu pewnej wartości, odpowiadającej początkowi koalescencji, gęstość pustek gwałtownie zaczyna rosnąć (zob. rys. 3.11). W ten sposób, na całą objętość RVE, rozciąga się efekt koncentracji

odkształcenia występujący w rzeczywistych materiałach w ograniczonym obszarze, a niemożliwy do zamodelowania w przyjętym algorytmie odkształcenia.



Rys. 4.42. Stany końcowe dla zniszczenia transkrystalicznego ($N_0=161$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$, $q_0=1.115$), reguła 021111 $T_{def}=1$ (a), $T_{def}=500$ (b).

Podobnie, jak w poprzednim przypadku symulacje zostały przeprowadzone dla automatu o $N_0=161$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$, $a_5=1$. Dla parametru q_0 przyjęto wartość 1.115. Dla prędkości odkształcenia zadawanych przez parametr T_{def} w zakresie od 1 do 1000, co odpowiada prędkościom odkształcenia od $1.24E-5$ do $1.24E-2$ iteracja⁻¹, otrzymano praktycznie stałą wartość odkształcenia przy zniszczeniu wynoszącą 31.7%. Odpowiada tej wartości gęstość pustek 0.543. Wartość ta jest tylko nieznacznie większa od wartości dla algorytmu z potęgową funkcją zmiany gęstości pustek ($a_1=1$). Można zatem przyjąć, że wartość krytyczna gęstości pustek dla zniszczenia transkrystalicznego, wynosi około 0.5. Obrazy stanów końcowych jednak wykazują pewną różnicę (zob. rys. 4.42). Szybszy wzrost pustek nie pozwolił na naturalne połączenie się pustek, jak dla $a_1=1$, ale powstały mostki łączące sąsiednie pustki, co w pewien sposób przybliża mechanizm koalescencji przez wewnętrzne szybkowanie.

Tabela 4.3. Średnie wartości odkształcenia i gęstości pustek przy zniszczeniu dla algorytmu 021111 i różnych parametrów N_0 , n_{seed} , f_{v0} .

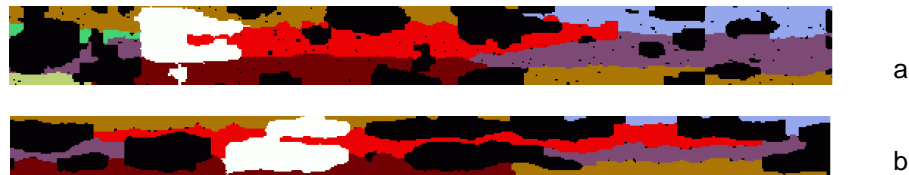
	$n_{seed}=10, f_{v0}=0.001$			$N_0=161, f_{v0}=0.001$			$N_0=161, n_{seed}=10$		
	N_0			n_{seed}			f_{v0}		
	41	81	161	5	10	20	0.0001	0.001	0.01
ϵ_f [%]	35.0	33.1	31.7	31.7	31.7	31.7	41.0	31.7	21.8
f_{vf}	0.700	0.615	0.543	0.544	0.543	0.543	0.521	0.543	0.570

Porównanie otrzymanych rezultatów dla różnych parametrów wejściowych zostało przedstawione w tabeli 4.3. Najsilniejszy jest wpływ początkowej gęstości pustek, co jest oczywiste, gdyż wraz ze zmianą f_{v0} znacznie zmienia się wartość odkształcenia, przy której gęstość pustek osiąga wartość krytyczną. Zależność od rozdzielczości (N_0) jest odwrotna niż w przypadku $a_1=1$. Wynika to z dużych skoków gęstości pustek pojawiających się dla automatu o małej rozdzielczości i nienadążaniem automatu w formowaniu pustek. Podobnie jak dla wzrostu potęgowej wartość końcowa odkształcenia nie zależy od liczby ziaren, a tym samym i od ich struktury.

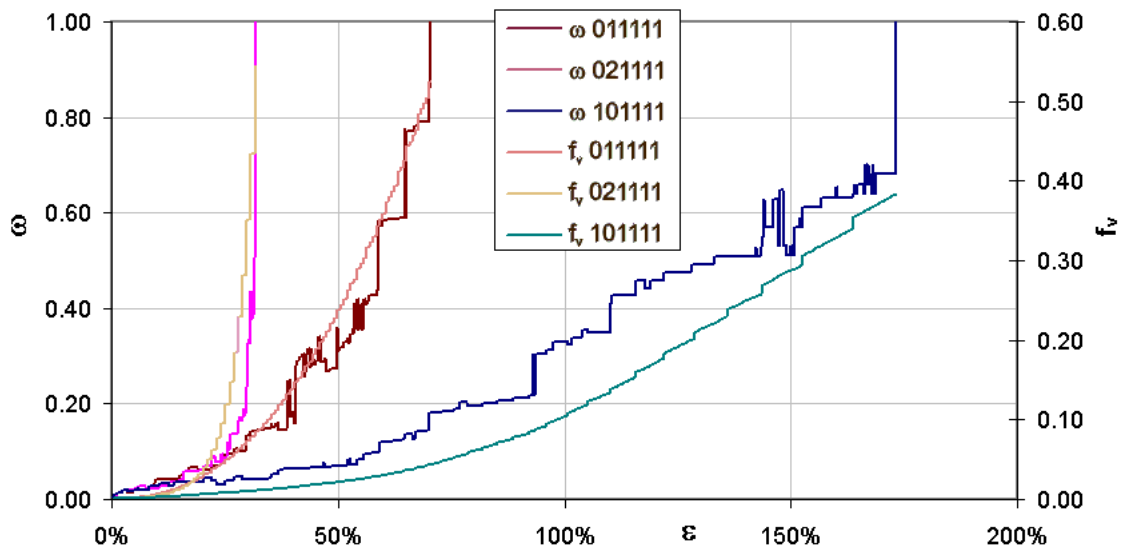
4.3.2.3 Reguła 10111x

Ostatnia z rozpatrywanych reguł 10111x wzrostu pustek transkrystalicznych cechuje się wzrostem objętości RVE wraz z rozwojem uszkodzenia przy zachowaniu stałej masy. Uzyskany w wyniku tej procedury przyrost gęstości pustek jest znacznie wolniejszy niż w poprzednich przypadkach (zob. rys. 4.44). Dlatego też otrzymane odkształcenie przy zniszczeniu jest dużo większe i wynosi około 170%. Podobnie jak w poprzednich przypadkach nie zależy ona od prędkości odkształcenia. Ponieważ funkcja gęstości pustek nie jest określona jawnie, a zależy od bieżących zmian parametru uszkodzenia, rozrzut odkształcenia jest większy (odchylenie standardowe wynosi 11%).

W przypadku tym nieco inaczej wygląda mechanizm koalescencji pustek (rys. 4.43). Pustki rosną wolniej i osiągają większe rozmiary, ich kształt jest znacznie wydłużony w kierunku rozciągania. Połączenie pustek następuje poprzez bezpośrednie zetknięcia się sąsiednich pustek, a sporadycznie tworzą się mostki między pustkami. W wyniku tego mechanizmu gęstość pustek przy zniszczeniu jest mniejsza niż dla reguł 01111x i 02111x i wynosi około 0.35.



Rys. 4.43. Stany końcowe dla zniszczenia transkrystalicznego ($N_0=161$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$), reguła 101110 $T_{def}=1$ (a), $T_{def}=500$ (b).



Rys. 4.44. Rozwój parametru uszkodzenia i gęstości pustek dla zniszczenia transkrystalicznego przy $N_0=161$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$, $T_{def}=5$.

Dla reguły 10111x wyraźny jest wpływ rozdzielczości automatu (zob. tabela 4.4). Automat o mniejszej rozdzielczości daje dużo mniejsze odkształcenie przy zniszczeniu. Efekt ten można też wytłumaczyć opisanym wyżej mechanizmem koalescencji. Podobnie jak dla reguły 011111 otrzymane rezultaty nie zależą od struktury ziaren w RVE i słabo zależą od uszkodzenia początkowego.

Tabela 4.4. Średnie wartości odkształcenia i gęstości pustek przy zniszczeniu dla algorytmu 101111 i różnych parametrów N_0 , n_{seed} , f_{v0} .

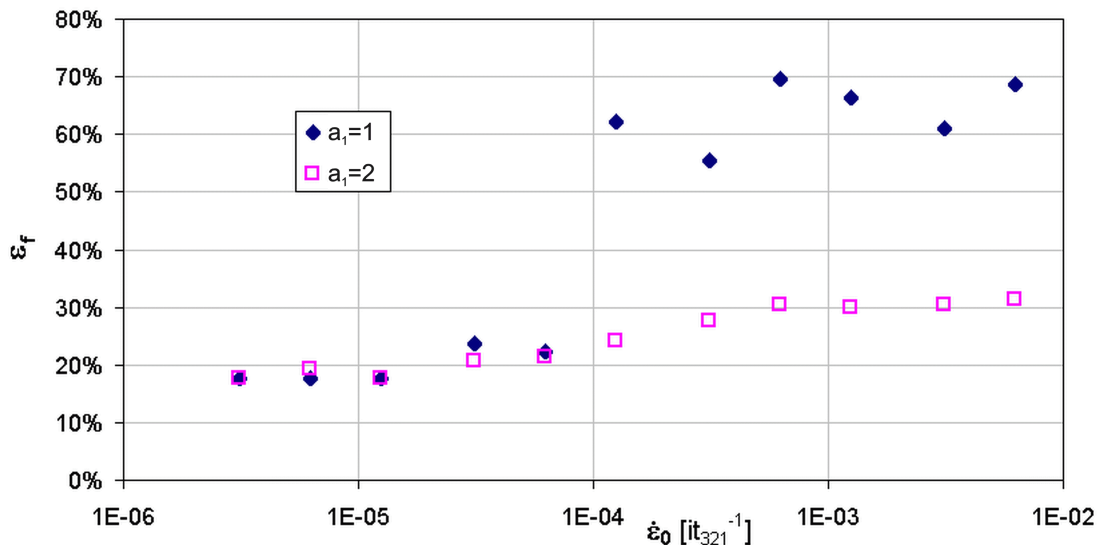
	$n_{seed}=10, f_{v0}=0.001$			$N_0=161, f_{v0}=0.001$			$N_0=161, n_{seed}=10$		
	N_0			n_{seed}			f_{v0}		
	41	81	161	5	10	20	0.0001	0.001	0.01
ε_f [%]	135	147	171	168	171	165	162	171	163
f_{vf}	0.313	0.348	0.384	0.374	0.384	0.362	0.346	0.384	0.362

4.4 Zniszczenie mieszane

Opis zniszczenia o charakterze mieszanym można otrzymać łącząc mechanizm preferujący pustki transkrystaliczne, rosnące na skutek odkształcenia ($a_2=1$, $a_4=1$), ze szczelinami międzykrystalicznymi, rosnącymi dzięki dyfuzji ($a_3=0$). Otrzymany, w ten sposób algorytm o regule $xx101x$ został przebadany w wybranych przypadkach.

4.4.1 Odształcenie przy zniszczeniu

Do analizy wybrano automat o regule $0x1011$ ($a_1=1$ lub 2 – prawo zmiany gęstości pustek potęgowe lub wykładnicze). Otrzymane odkształcenie przy zniszczeniu dla $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$ przedstawiono na rys. 4.45.

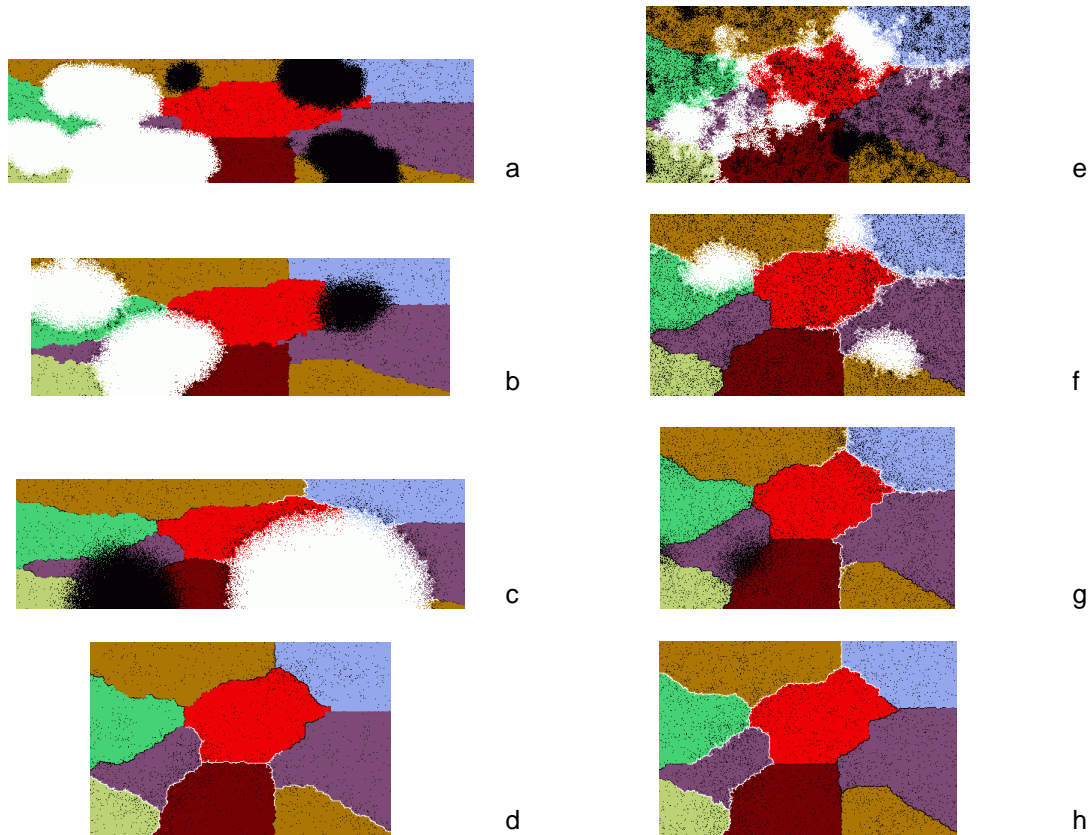


Rys. 4.45. Odształcenie przy zniszczeniu w zależności od początkowej prędkości pełzania dla reguły $0x1011$, $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$.

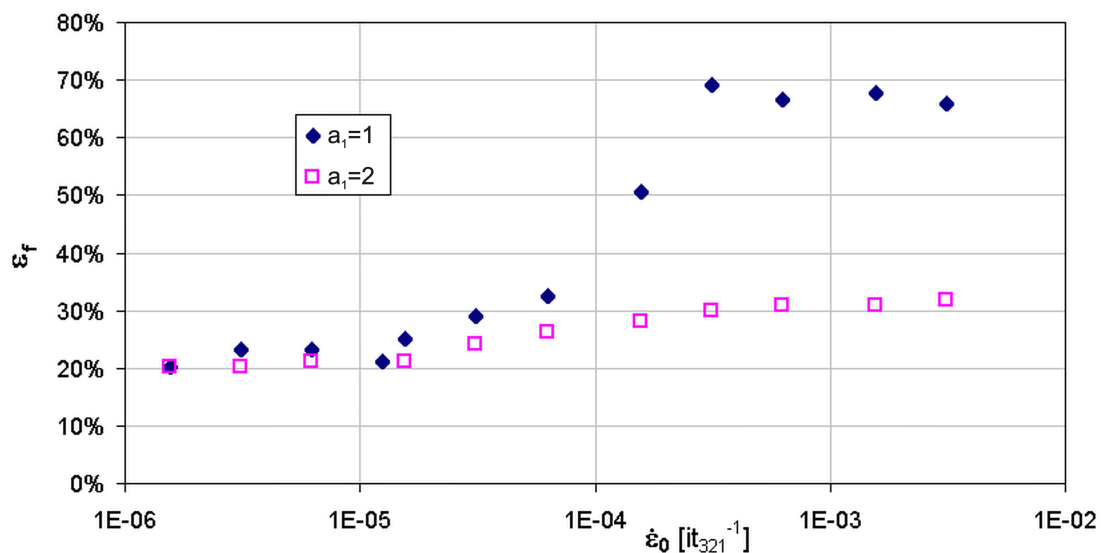
Dla dużych prędkości odkształcenia uzyskane odkształcenie przy zniszczeniu jest bardzo podobne jak dla reguły z $a_3=1$, czyli wynosi około 70% dla reguły $a_1=1$, a 30% dla reguły $a_1=2$ (por. tabele 4.2 i 4.3). Charakter zniszczenia jest też transkrystaliczny, choć kształt pustek jest inny niż dla reguły $a_3=1$ (zob. rys. 4.46a). Ponieważ wagi w funkcjonale (3.58) są inne niż dla przypadku $a_3=1$, kryterium energetyczne nie wymusza wygładzania brzegu pustek. Pustki są postrzępione, przypominające wyglądem chmury (por. rys. 4.13). Większe pustki przechwytyują puste komórki z mniejszych, dlatego pustki są większe i jest ich mniej.

Przy symulacjach z mniejszą prędkością odkształcenia zaczynają się tworzyć szczeliny na granicach ziaren (zob. rys. 4.46c,e). Powstaje zniszczenie o charakterze mieszanym trans- i międzykrystalicznym. W zakresie tym widoczne są oba rodzaje zniszczenia: duże pustki „chmurowe” i szczeliny międzykrystaliczne rozwijają się równolegle a o ostatecznym charakterze zniszczenia decyduje to, które z nich rozwiną się szybciej. Strefa przejściowa inaczej wygląda na wykresie 4.45 dla $a_1=1$, a inaczej dla $a_1=2$. Dla algorytmu, dla którego gęstość pustek rośnie wolniej ($a_1=1$) odkształcenie przy zniszczeniu przyjmuje dużą wartość, gdy o zniszczeniu decydują odkształceniowe pustki „chmurowe”, a małą wartość, gdy decydują szczeliny międzykrystaliczne. Na wykresie nie widać strefy przejściowej; widoczny jest natomiast nagły przeskok pomiędzy tymi dwoma sytuacjami, pomimo, iż obrazy stanów końcowych sugerują możliwość równoczesnego występowania obu mechanizmów. Dla

algorytmu o szybkim wzroście gęstości pustek ($a_1=2$) na wykresie występuje wyraźna strefa przejściowa, której odpowiada wykładnik $\beta=0.83$ w równaniu Monkmana-Granta (2.1).



Rys. 4.46. Stany końcowe dla reguły 011011 ($N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$, $H=1.17$ $\gamma=2.3$); $T_{def}=5$ (a), $T_{def}=20$ (b), $T_{def}=50$ (c), $T_{def}=100$ (d) i reguły 021011 ($q_0=1.115$, pozostałe parametry bez zmian), $T_{def}=5$ (e), $T_{def}=20$ (f), $T_{def}=50$ (g), $T_{def}=100$ (h).



Rys. 4.47. Odształcenie przy zniszczeniu w zależności od początkowej prędkości pełzania dla reguły 0x1011, $N_0=161$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$. Prędkość w jednostkach znormalizowanych zgodnie z równ. (4.7).

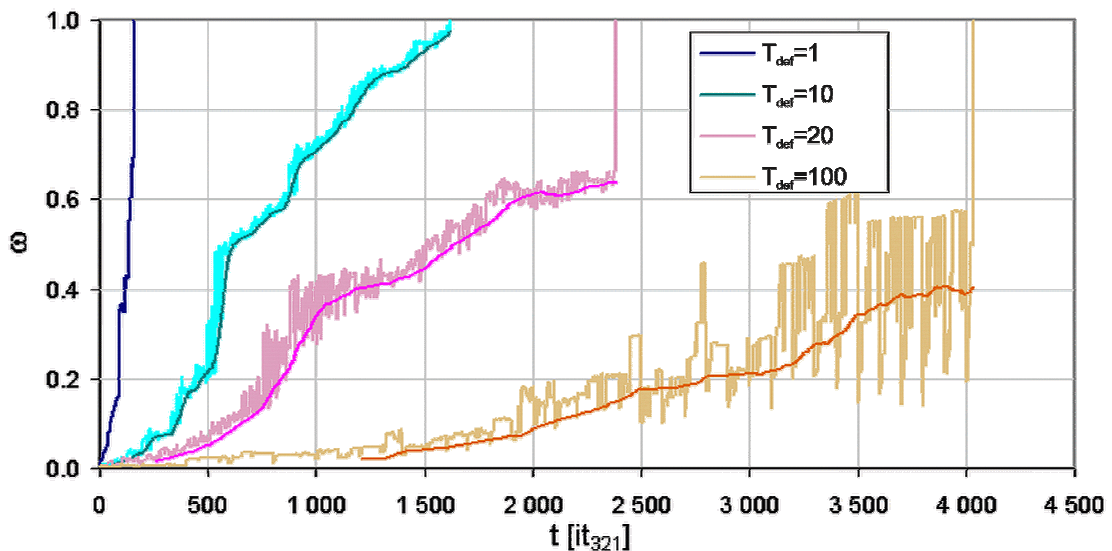
Dla bardzo małych prędkości oba algorytmu zachowują się podobnie. Odształcenie przy zniszczeniu jest prawie stałe i wynosi około 18%. Zachowanie to

jest takie same jak omówione w rozdz. 4.2 dla przypadku modelu zniszczenia międzykrystalicznego (zob. rys. 4.46d, h).

Przeskok mechanizmu zniszczenia występujący dla reguły o $a_1=1$ dla $N_0=321$ nie pojawia się dla automatu o mniejszej rozdzielczości. W przypadku, gdy $N_0=161$ strefa przejściowa na wykresie odkształcenia przy zniszczeniu dla obu algorytmów wygląda podobnie (zob. rys. 4.47).

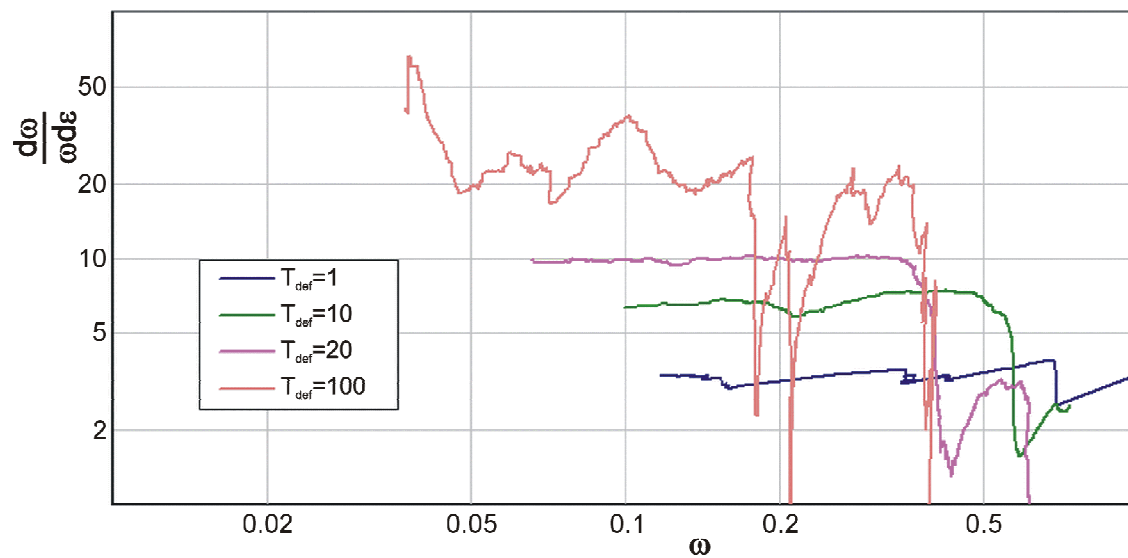
4.4.2 Prędkość wzrostu uszkodzenia

Aby przeanalizować dokładnie wpływ mechanizmów dyfuzyjnego i odkształceniowego na wzrost uszkodzenia w obszarze, gdzie może wystąpić zniszczenie o charakterze mieszanym, zbadano zmiany parametru uszkodzenia w czasie. Dla automatu o regule 011011 i parametrach $N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$ dla czterech wybranych prędkości zostały one przedstawione na rys. 4.48. Ponieważ parametr uszkodzenia podlega znacznym oscylacjom, dla wyciągnięcia wniosków posłużono się wartością uśrednioną, przedstawioną również na wykresie 4.48. Na wykresie widoczne są fazy szybszego i wolniejszego wzrostu uśrednionego parametru uszkodzenia.



Rys. 4.48. Rozwój parametru uszkodzenia dla automatu 011011 ($N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$) przy prędkościach odkształcenia: $6.23E-3 \text{ it}_{321}^{-1}$ ($T_{def}=1$), $6.23E-4 \text{ it}_{321}^{-1}$ ($T_{def}=10$), $3.12E-4 \text{ it}_{321}^{-1}$ ($T_{def}=20$) i $6.23E-5 \text{ it}_{321}^{-1}$ ($T_{def}=100$). Ciemniejszym odcieniem zaznaczono wartość uśrednioną.

W rozdz. 2 (rys. 2.22) został przedstawiony wykres pokazujący zmiany względnej prędkości wzrostu promienia dla pustek rosnących według teorii dyfuzyjnej, odkształceniowej i sprzężonej dyfuzyjno-odkształceniowej. Analogiczny wykres (promień pustki został zastąpiony tu przez uśrednioną wartość parametru uszkodzenia) dla badanego algorytmu został przedstawiony na rys. 4.49. Dla dużych i średnich prędkości odkształcenia ($T_{def}=1$, 10 i 20) widoczne są poziome fragmenty wykresu, które pokazują odkształceniowy charakter wzrostu uszkodzenia, przy czym wartość względnej prędkości uszkodzenia jest zawsze większa od 1, czyli więcej niż określa to teoria McClintocka (2.62). Wyraźny obszar dyfuzyjnego wzrostu jest widoczny dla krzywej $T_{def}=100$, charakteryzuje się on znacznym spadkiem względnej prędkości uszkodzenia wraz z wzrostem parametru uszkodzenia. Okresy spadku prędkości występują tu naprzemiennie z okresami jej wzrostu, który spowodowany jest łączeniem się sąsiednich pustek.



Rys. 4.49. Względna prędkość parametru uszkodzenia w zależności od wartości parametru uszkodzenia dla automatu 011011 ($N_0=321$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.001$, $\alpha_{new}=0.25$) przy prędkości odkształcenia określonej przez parametr T_{def} .

4.5 Podsumowanie użytych algorytmów

Zniszczenie materiałów w warunkach pełzania charakteryzuje bardzo duży przedział, w jakim lokują się rezultaty doświadczeń. Materiały polikrystaliczne mogą ulec zniszczeniu przy odkształceniu rzędu ułamka procenta jak i kilkuset procent. Czas do zniszczenia może wynosić ułamki sekund jak i parę lat. Nawet koncentrując się na jednym mechanizmie, np. zniszczeniu poprzez rozwój pustek wewnętrznych otrzymuje się bardzo duży zakres możliwych rezultatów. Idealnym rozwiązaniem byłoby opisanie tego złożonego procesu przy pomocy jednego algorytmu. Jednak okazało się to trudne do realizacji. W pracy zaproponowano więc całą rodzinę algorytmów, dzięki którym możliwe jest opisanie bardzo różnych zachowań materiałów.

Zaproponowane algorytmy opisane są dużą liczbą różnych parametrów. Parametry te powinny być identyfikowane na podstawie zmierzonych parametrów mikrostruktury. Nie we wszystkich przypadkach jest to możliwe.

Podstawowe problemy wynikają z trudności opisanie trójwymiarowej rzeczywistości przy pomocy dwuwymiarowego modelu. Innego rodzaju trudnością jest niemożność dokładnego określenia rozmiarów RVE, spełniającego wszystkie założenia teorii. Pozostaje dobór wartości parametrów użytych w zaproponowanych algorytmach poprzez dopasowanie ich do wyników doświadczeń makroskopowych.

4.5.1 Mechanizm zniszczenia

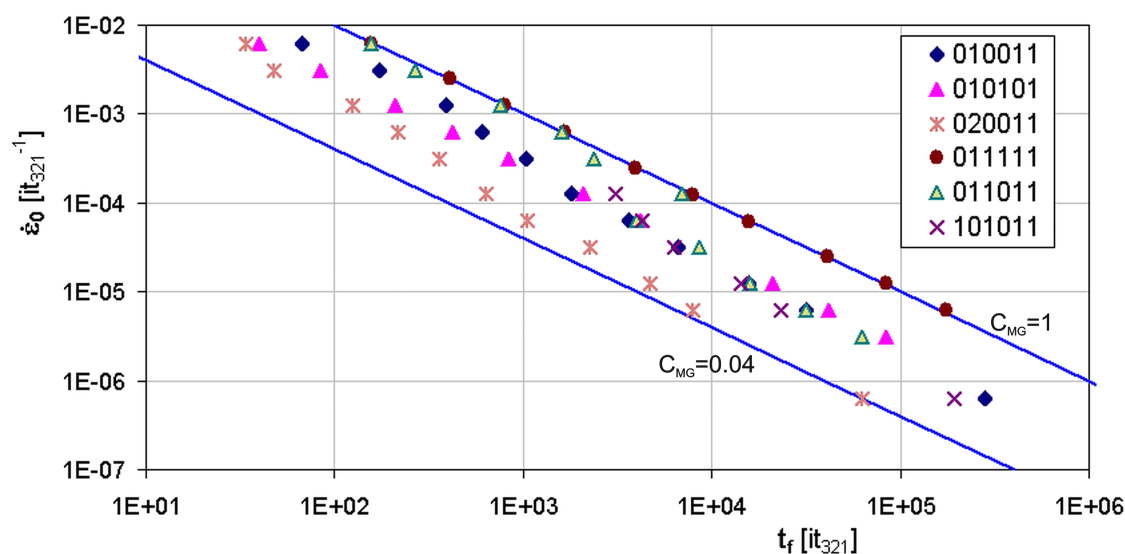
Podobnie, jak dla rzeczywistych materiałów większość badanych algorytmów charakteryzuje odkształceniowy charakter zniszczenia. Objawia się to wartością wykładnika β w równaniu Monkmana-Granta (2.1) bliską 1. Evans [48] dodatkowo odróżnia w tym przypadku zniszczenie geometryczne, gdy stała Monkmana-Granta C_{MG} jest równa $1/n$ i zniszczenie wewnętrzne gdy $C_{MG} < 1/n$. Dla badanego modelu nie można określić indeksu pełzania n , gdyż model nie zawiera naprężeń. Ale z zestawienia zrobionego na rysunku 4.50 widać, że możliwe są modele prowadzące do różnej wartości stałej Monkmana-Granta (por. dane dla reguły 010101 i 011111). Świadczy to o tym, że rozważane w pracy modele mogą bardzo dobrze symulować zachowanie materiałów ciągliwych.

Dla zniszczenia kruchego wykładnik β przyjmuje wartości mniejsze od 1, najczęściej około 0.7 (zob. [129]), sporadycznie spotyka się wartości mniejsze od 0.5 (np. [183]). Ponieważ dla czysto dyfuzyjnego mechanizmu wykładnik ten powinien wynosić $1/n$ (zob. rys. 2.23), świadczy to o mieszanym dyfuzyjno-odkształceniowym charakterze zniszczenia, przy czym wzrost pustek może mieć charakter dyfuzyjny, a ich nukleacja odkształceniowy. Podobny mieszany charakter ma też badany model zniszczenia kruchego, a otrzymane wykładniki β są zbliżone do tych obserwowanych w rzeczywistych materiałach. Problem pojawia się dla bardzo kruchych materiałów (o odkształceniach przy zniszczeniu około 1% i mniejszych), gdyż zamodelowanie ich wymaga bardzo dużej rozdzielczości automatu. Można to rozwiązać w sztuczny sposób, zakładając dużą początkową gęstość pustek (zob. reguła 020011 na rys. 4.50).

Innym problemem jest kształt pustek w przypadku zniszczenia kruchego. Nie udało się utworzyć reguły, która dawałaby pustki o kształcie soczewkowatym przy wykładniku β wyraźnie mniejszym od 1. Wynika to ze zbyt małej rozdzielczości automatu. Zniszczenie takie jest możliwe dla algorytmu tworzącego pustki szczelinowe.

Zaproponowany model mechanizmu zniszczenia mieszanego jest połączeniem dwóch różnych mechanizmów wzrostu pustek. Dla dużych prędkości czasy do zniszczenia są porównywalne z czasami uzyskanymi dla zniszczenia ciągliwego, a dla małych dla zniszczenia kruchego (zob. reguła 011011 na rys. 4.50). W przypadku tym

ciekawie wygląda strefa przejściowa, gdyż zmiana mechanizmu odbywa się na zasadzie przeskoku.



Rys. 4.50. Zestawienie czasów do zniszczenia w zależności od prędkości odkształcenia dla różnych reguł. Reguły 010011, 010101 dla $N_0=321$, $f_{v0}=0.0001$; reguła 020011 dla $N_0=321$, $f_{v0}=0.01$; reguły 011011 i 101011 dla $N_0=161$, $f_{v0}=0.001$; reguła 011111 dla $N_0=321$, $f_{v0}=0.001$; dla wszystkich reguł: $n_{seed}=10$, $\alpha_{new}=0.25$. Linie proste odpowiadają stałym Monkmana-Granta 0.04 i 1.

4.5.2 Miara uszkodzenia

Interesujące jest porównanie obu stosowanych miar uszkodzenia tj. parametru uszkodzenia ω , zdefiniowanego jako liniowy wymiar największej pustki i gęstości pustek f_v , czyli stosunkowi powierzchni pustek do powierzchni elementu. Zniszczenie jest definiowane przy pomocy parametru uszkodzenia natomiast gęstość pustek przy zniszczeniu osiąga różne wartości. Wyraźna jest różnica gęstości pustek przy zniszczeniu w zależności od mechanizmu zniszczenia. Wydaje się też, że tylko w ramach jednego mechanizmu można ustalić wartość krytyczną gęstości pustek, przy której następuje zniszczenie. Otrzymana wartość krytyczna dla zniszczenia kruchego wynosi około 0.02 (zob. rys. 4.17c). Podobne wartości są podawane w literaturze (np. [16]), choć spotykane są też wartości dużo mniejsze (np. w [11] przyjęto wartość krytyczną 0.0025). Aby zamodelować materiał o takiej wartości krytycznej gęstości pustek, należałoby znacznie zwiększyć rozdzielczość modelu.

Dla zniszczenia ciągłego krytyczna wartość gęstości pustek wynosi pomiędzy 0.3 a 0.7 (zob. rys. 4.40). Jest to wartość większa niż podawana w literaturze (np. 0.2 według [170]). Różnica ta wynika z braku uwzględnienia w modelu lokalizacji odkształceń, a co za tym idzie z przyjętej wielkości obszaru, w którym była wyznaczana doświadczalnie uśredniona wartość krytyczna gęstości pustek.

5 Model wieloskalowy rozwoju uszkodzeń CAFE

5.1 Budowa modelu

Przedstawiony w rozdziale 3 i analizowany w rozdziale 4 model rozwoju uszkodzeń w warunkach pełzania, zbudowany przy pomocy automatu komórkowego, operuje dwiema makroskopowymi zmiennymi stanu: odkształceniem na wejściu i uszkodzeniem na wyjściu. Dla pełnej oceny możliwości przenoszenia obciążeń przez konstrukcję konieczna jest znajomość naprężeń spełniających równanie równowagi. Są one powiązane z odkształceniami poprzez makroskopowe równania konstytutywne (pełzania), których przykłady przedstawiono w rozdz. 2.1. W proponowanym tu powiązaniu poziomów analizy makroskali i mikroskali zadanie w skali makro jest rozwiązywane przy pomocy metody elementów skończonych (FEM – ang. *Finite Element Method*), a następnie odkształcenia wyznaczone w punktach Gaussa (który jest makroskopowym odpowiednikiem RVE) przenoszone są na poziom mikro, gdzie przy pomocy automatu komórkowego, wyznaczana jest wartość makroskopowego parametru uszkodzenia. Powstaje w ten sposób model dwuskalowy. Wykorzystane są dwa warianty tego modelu. W pierwszym odkształcenia i naprężenia nie zależą od uszkodzeń; jest to model niesprężony. W drugim parametr uszkodzenia jest uwzględniany przy wyznaczaniu odkształcenia (sprężenie zwrotne) co tworzy to model sprężony. Symulacja jest kończona, gdy w przynajmniej jednym punkcie zostanie osiągnięty stan zniszczenia ($\omega=1$). Możliwa jest również kontynuacja obliczeń do wyłączenia elementu, w którym osiągnięto stan zniszczenia, a nawet do zniszczenia całego przekroju.

5.1.1 Model odkształcenia (FEM)

Do zbudowania modelu odkształcenia użyty został komercyjny pakiet numeryczny Abaqus Standard wersja 8.3.1 z kompilatorem Intel Fortran 10.1. Program ten umożliwia zamodelowanie struktury wielu konstrukcji korzystając z wbudowanej biblioteki elementów, a równocześnie daje możliwość wprowadzenia własnych równań konstytutywnych oraz zmiennych stanu przy pomocy procedury użytkownika UMAT. Rozmiar elementów powinien być taki by odkształcenie wewnątrz elementu można było uważać za jednorodne. Jest to warunek trudny do spełnienia, szczególnie w zadaniach badających zniszczenie.

Układ równań konstytutywnych używa odkształceń rozdzielonych na odkształcenia sprężyste i odkształcenia pełzania (równ. 2.52). Odkształcenia pełzania są wyznaczane przy pomocy wieloosiowej wersji równania Nortona niesprężonej (równ. 2.39) lub sprężonej z uszkodzeniem (równ. 2.40). Ponieważ zaimplementowany automat komórkowy jest tylko dwuwymiarowy założono płaski stan odkształcenia w modelu FEM. Do zamodelowania tego stanu użyto 4-węzłowych elementów liniowych CPE4I. Dla porównania wyników symulacji z doświadczeniami wykonywanymi w stanie jednoosiowego rozciągania, użyto intensywności naprężenia.

Procedura UMAT wymaga, by w oparciu o znane wartości składowych tensora odkształcenia ε_{ij} i tensora naprężenia σ_{ij} wyznaczyć przyrost naprężenia przy zmianie czasu o $\Delta\tau$. Dlatego równania (2.52) i (2.39) zostały przetransformowane do postaci różnicowej z wykorzystaniem całkowania jawną metodą Eulera:

$$\Delta\sigma_{ij} = 2G\Delta\varepsilon_{ij} + \delta_{ij}\lambda\Delta\varepsilon_{kk} - 3GB\sigma_{\text{eff}}^{n-1}s_{ij}\Delta\tau, \quad (5.1)$$

gdzie s_{ij} jest dewiatorem naprężenia, G , λ są to stałe sprężyste Lamego, B i n to stałe materiałowe w prawie pełzania Nortona, δ_{ij} oznacza deltę Kroneckera. W wersji sprzężonej natomiast użyte jest następujące równanie:

$$\Delta\sigma_{ij} = 2G\Delta\varepsilon_{ij} + \delta_{ij}\lambda\Delta\varepsilon_{kk} - 3GB\frac{\sigma_{\text{eff}}^{n-1}}{(1-\omega)^n}s_{ij}\Delta\tau. \quad (5.2)$$

Przy użyciu obu równań powinno otrzymać się taką samą prędkość odkształcenia przy tym samym obciążeniu. Dlatego stałą B wyznaczoną na podstawie doświadczeń można użyć bezpośrednio tylko w modelu niesprężonym. W modelu sprzężonym powinna zostać ona skorygowana tak by uwzględnić wpływ uszkodzenia.

Stabilność rozwiązania numerycznego wymaga, by krok czasowy był ograniczony. Ograniczenie takie dla lepkosprężystości podał Cormeau [34], a dla zadania pełzania z rozwojem uszkodzeń zmodyfikowali Gadomski i Wojewódzki [54]:

$$\Delta\tau \leq \frac{2(1-\omega)^n}{3nBG\sigma_{\text{eff}}^{n-1}}. \quad (5.3)$$

W wersji niesprężonej czynnik z ω jest pominięty. Jeżeli krok czasowy, z jakim program wchodzi do procedury UMAT nie spełnia warunku Cormeau (5.3), iteracja jest powtarzana z mniejszym krokiem czasowym. Jeżeli natomiast krok czasowy jest dużo mniejszy od kroku wyliczonego z tego warunku, w następnej iteracji jest on zwiększany.

Iteracje metody elementów skończonych będą nazywane *inkrementami*, żeby odróżnić je od iteracji automatów komórkowych.

5.1.2 Model uszkodzenia (CA)

W każdym punkcie Gaussa elementów siatki zadania powinien być uruchomiony automat komórkowy do modelowania rozwoju uszkodzeń. Ponieważ symulacje przy pomocy wielu równoległe uruchomionych automatów komórkowych wymagają wielu zasobów komputerowych (pamięć i czas procesora), w praktyce liczba automatów jest ograniczona tylko do stref, w których spodziewany jest intensywny rozwój uszkodzeń.

Automat komórkowy został zaimplementowany w procedurze fortranowskiej uruchamianej z procedury UMAT programu Abaqus. Główne parametry wejściowe do tej procedury to tensor deformacji i czas.

Wielkością wyjściową z modelu CA jest wartość parametru uszkodzenia w punkcie Gaussa.

Ponieważ w przeciwieństwie do modelu opisanego w rozdz. 3 odkształcenie i czas nie są zadane, lecz wyliczane w każdym inkreencie przez model FEM, wielkości te są nieco inaczej traktowane.

Odształcenie

Tensor deformacji jest używany do określenia aktualnej wielkości RVE. Z uwagi na dwuwymiarowość i brak ścinania przy odkształceniu, w algorytmie wykorzystywanym przez CA brane pod uwagę są tylko dwa pierwsze elementy przekątnej tensora deformacji F_{11} i F_{22} . Wartość jednostkowa elementów tensora deformacji odpowiada początkowej liczbie komórek wzdłuż boku automatu N_0 , będącej parametrem zadania. Każda inna wartość jest przeliczana proporcjonalnie na liczbę komórek. Jeżeli w inkreencie zmienia się liczba komórek wzdłuż boku RVE wykonywana jest odpowiednia liczba kroków deformacji przez CA, przy czym liczba

komórek może ulec zwiększeniu lub zmniejszeniu (np. w kierunku prostopadłym do rozciągania).

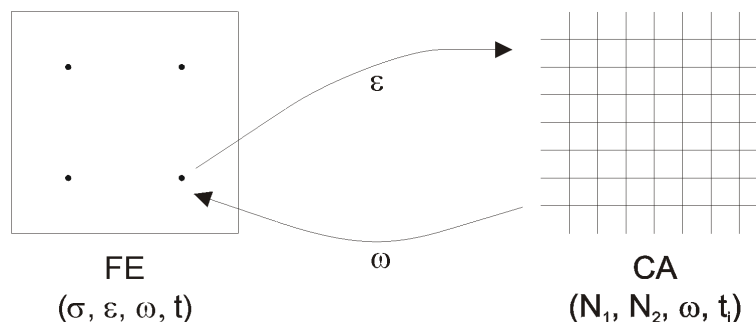
Czas

W modelu wieloskalowym dla automatu komórkowego czas i odkształcenie są niezależne, dlatego nie ma sensu używanie parametru T_{def} , jako parametru metody. Ma on znaczenie tylko w przypadku pełzania stacjonarnego, gdy odkształcenie jest proporcjonalne do czasu. Zamiast niego jako parametr używana jest bezpośrednio długość kroku czasowego automatu Δt . Jeżeli czas zadania od ostatniej iteracji CA wzrośnie o wartość większą lub równą Δt wykonywana jest odpowiednia liczba iteracji automatu zredukowanych o krok deformacji (wykonywane są tylko kroki dyfuzji i lokalnego rozwoju uszkodzenia, por. schemat blokowy algorytmu, rys. 3.12).

Na końcu każdej iteracji obliczana jest wartość parametru uszkodzenia. Jeżeli osiągnie ona wartość 1 (z zadaną tolerancją) w czasie mniejszym niż krok czasowy inkrementu $\Delta \tau$, do modelu FEM przekazywana jest informacja o potrzebie zmniejszenia kroku czasowego inkrementu, tak by można było wyznaczyć dokładnie czas do zniszczenia w danym punkcie.

5.1.3 Wymiana danych między skalami

Jak już wspomniano, analiza konstrukcji dokonuje się na poziomie modelu makro (FEM). Wyznaczane są w nim w każdym inkreencie wartości tensorów naprężenia i odkształcenia. Wyznaczone odkształcenie przenoszone jest do modelu w skali mikro (CA), gdzie na jego podstawie wyznaczane są rozmiary RVE w komórkach N_1 i N_2 (zob. rys. 5.1). Model CA wyznacza wartość parametru uszkodzenia w punkcie Gaussa, który w zadaniu sprzężonym wpływa na odkształcenie w następnym inkreencie FEM, a także – pośrednio – na sąsiednie punkty w siatce elementów skończonych. W ten sposób model ten jest zgodny z założeniami metodologii CAFE (ang. *Cellular Automata Finite Elements*).



Rys. 5.1. Schemat wymiany danych w modelu wieloskalowym.

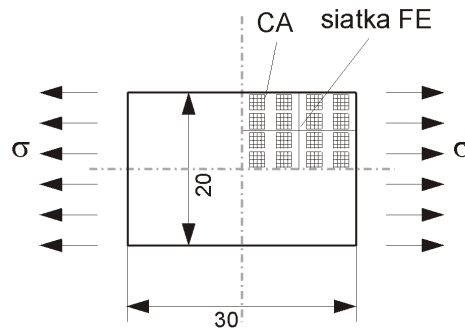
W zadaniu niesprężonym wartość parametru uszkodzenia jest jedynie miarą poziomu uszkodzenia, bez bezpośredniego wpływu na równania w modelu FEM.

Automaty w sąsiednich punktach Gaussa nie komunikują się bezpośrednio między sobą i uszkodzenie z jednego punktu nie może się „przenieść” na sąsiedni. W modelu sprzężonym jest to możliwe, gdyż parametr uszkodzenia wpływa na redystrybucję naprężenia i w ten pośredni sposób uszkodzenie może przenosić się na sąsiednie punkty.

5.1.4 Geometria zadania

Wszystkie rozważane przykłady ograniczają się do zadania prostego jednoosiowego rozciągania w płaskim stanie odkształcenia. Analizowano prostokątny

fragment płaskiej próbki o wymiarach 30x20 mm i grubości 10 mm (zob. rys. 5.2). Z uwagi na symetrię zamodelowano jedną czwartą próbki, zastępując odrzuconą część symetrycznymi warunkami brzegowymi.



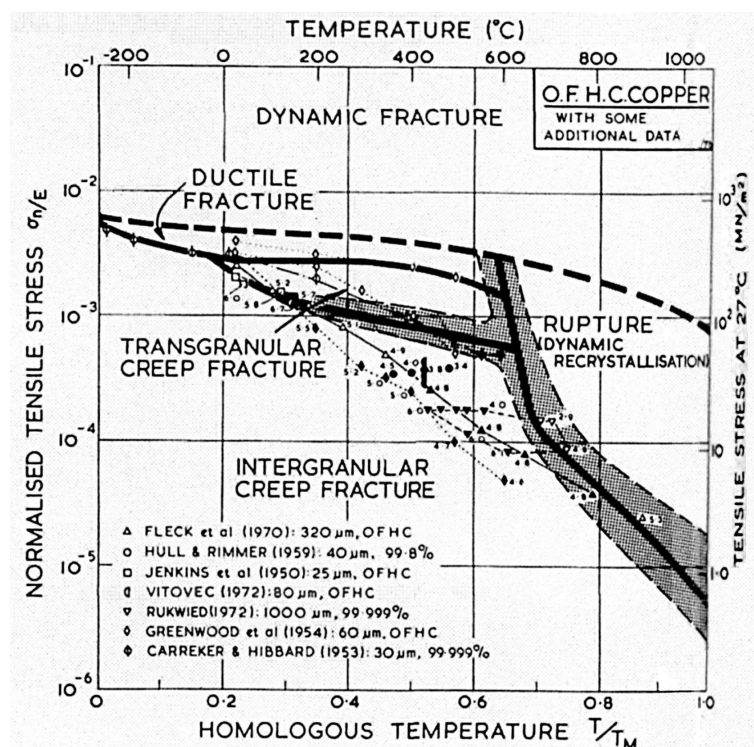
Rys. 5.2. Badana próbka ze strefą zniszczenia modelowaną przy pomocy modelu wieloskalowego CAFE.

Aby przyspieszyć obliczenia badany obszar podzielono tylko na 4 elementy, co z uwagi na 4 punkty Gaussa w każdym elemencie daje 16 automatów komórkowych. Każdy automat opisuje inną strukturę materiału, utworzoną losowo przy pomocy tych samych parametrów.

5.2 Symulacja doświadczenia dla miedzi

5.2.1 Opis doświadczenia

Miedź jest materiałem, dla którego zostało wykonanych bardzo wiele doświadczeń dotyczących zniszczenia w warunkach pełzania (zob. m.in. [49], [16], [123], [161], [19], [156]). Na podstawie doświadczeń została opracowana mapa zniszczenia dla miedzi przez zespół Ashby'ego [6] (zob. rys. 5.3). W zakresie pełzania wyróżnione na niej zostały obszary zniszczenia transkrystalicznego i międzykrystalicznego, a także strefa przejściowa zniszczenia mieszanego. W bliskim 0.5 temperatury topnienia (T_m) strefa ta odpowiada obciążeniu pomiędzy 75 a 140 MPa.



Rys. 5.3. Mapa zniszczenia dla miedzi OFHC [6].

Pomimo wielu doświadczeń tylko niektóre z nich zawierają kompletne dane, które mogłyby posłużyć do przeprowadzenia symulacji. Z uwagi na dokładny opis przeprowadzonych eksperymentów wybrana została praca Felthama i Meakina [49]. Do ich doświadczenia została użyta miedź OFHC (ang. *oxygen-free high-conductivity*) o czystości 99.99% i rozmiarze ziarna około 30 μm . Próby były przeprowadzone przy obciążeniu stałym naprężeniem, jednak, jak przyznają autorzy, było ono trudne do utrzymania w przypadku pojawieniu się szyjki przed zniszczeniem. W pracy [49] przebadano miedź w temperaturach od 673 do 973 K. Do symulacji wybrano wyniki doświadczeń dla temperatur 723 i 823 K (które stanowią ok. 0.53 i 0.60 T_m) przedstawione w tabeli 5.1. Odształcenia przy zniszczeniu dla temperatury 823 K zostały odczytane z krzywych pełzania zamieszczonych w pracy [49].

Tabela 5.1. Wyniki doświadczenia Felthama i Meakina na podstawie [49], gdzie C_{MG} oznacza stałą Monkmana-Granta zdefiniowaną równ. (2.2), λ_{tol} parametr tolerancji uszkodzenia (równ. 2.3).

σ	T	t_f	$\dot{\epsilon}_s$	ϵ_f	C_{MG}	λ_{tol}
MPa	K	s	1/s	%	-	-
25.7	723	4.17E+04	6.70E-07		0.028	
32.4	723	2.28E+04	2.02E-06		0.046	
34.0	723	2.57E+04	2.46E-06		0.063	
37.0	723	1.49E+04	4.31E-06		0.064	
42.3	723		5.48E-06			
43.8	723	9.17E+03	9.05E-06		0.083	
49.1	723	5.65E+03	1.35E-05		0.076	
53.6	723	3.70E+03	2.10E-05		0.078	
55.1	723	3.08E+03	2.23E-05		0.069	
56.6	723	2.73E+03	2.23E-05		0.061	
66.4	723	1.10E+03	5.48E-05		0.060	
77.7	723	5.32E+02	1.11E-04		0.059	
26.4	823		7.45E-06			
28.4	823	4.74E+03	9.21E-06	6.5	0.044	1.5
33.3	823	3.69E+03	1.85E-05	9.9	0.068	1.5
40.1	823	1.74E+03	4.37E-05	12.2	0.076	1.6
50.5	823	6.10E+02	1.71E-04	17.5	0.104	1.7
51.9	823	4.00E+02	2.12E-04	17.6	0.085	2.1

Na podstawie prędkości pełzania ustalonego wyznaczone zostały stałe materiałowe równania Nortona (2.14) użyte w symulacjach. Stałe sprężyste przyjęto za [52] (zob. tabela 5.2).

Tabela 5.2. Stałe materiałowe (pełzania i sprężystości) użyte w symulacjach doświadczenia dla miedzi.

T	zakres obc.	n	B	E	v
K	MPa	-	(MPa) ⁻ⁿ s ⁻¹	MPa	-
723	15÷78	4.17	1.18E-12	82 700	0.34
823	10÷52	4.22	8.63E-12	79 400	0.34

Zostały wyznaczone także stałe równania Kaczanowa (2.21), przy czym wykorzystano tylko te punkty doświadczalne, które odpowiadają zniszczeniu kruchemu.

Tabela 5.3. Parametry materiałowe równania Kaczanowa dla miedzi.

T	zakres obc.	m	C	$\beta=m/n$	σ_{H-K}	$\hat{\sigma}$
K	MPa	-	(MPa) ^{-m} s ⁻¹	-	MPa	MPa
723	25÷37	2.87	5.04E-10	0.69	99	242
823	28÷40	3.12	1.36E-09	0.74	96	325

Pomimo, że dla małych naprężeń współczynnik β równania (2.1) jest mniejszy od 1, to dla całego badanego zakresu temperatur i naprężeń punkty doświadczalne spełniają zależność Monkmana-Granta dla $\beta=1$ i stałej $C_{MG}=0.055$ (w pracy [49]

błędnie podano tą wartość jako 0.33). Korzystając z wyżej wyznaczonych stałych można wyliczyć też teoretyczne granice pomiędzy zniszczeniem kruchym wg Kaczanowa a zniszczeniem ciągliwym wg Hoffa σ_{H-K} (równ. 2.23) i pomiędzy zniszczeniem mieszanym a zniszczeniem ciągliwym $\hat{\sigma}$ (równ. 2.28). Wartości te zostały umieszczone w tabeli 5.3. Obie te wartości są dużo większe od górnej granicy przyjętego zakresu zniszczenia kruchego.

5.2.2 Równania mikromechaniczne

Punkty powyżej zakresu zniszczenia kruchego leżą na prostych (zob. rys. 5.4a i b) równoległych do wyznaczonych z równania Hoffa, ale przy stałej Monkamna-Granta dużo mniejszej niż $1/n \approx 0.24$ (w dodatku doświadczenie przeprowadzono przy stałym naprężeniu, czyli wartość stałej Monkamna-Granta mogłaby być większa niż $1/n$). Według Evansa [48] odpowiada to odkształceniowemu mechanizmowi zniszczenia, ale przez zmiany w mikrostrukturze materiału, a nie przez zewnętrzne przewężenie próbki. Równania opisujące odkształceniowy wzrost pustek podali Cocks i Ashby [32] (zob. równ. 2.64 i 2.65), gdzie przy zwiększającym się początkowym promieniu pustki (odpowiadającym uszkodzeniu początkowemu $\omega_0 = (2r_0/\lambda)^2$, gdzie λ to odległość między pustkami) uzyskuje się malejącą wartość stałej C_{MG} . By jednak dopasować czas do zniszczenia wyznaczony z tego modelu (równ. 2.85) do wyników opisywanego doświadczenia, uszkodzenie początkowe musiałoby przyjąć bardzo dużą wartość pow. 0.1.

Duże lepsze rezultaty daje teoria ograniczonego wzrostu dyfuzyjnego pustek. Przy założeniu natychmiastowej nukleacji pustek czas do zniszczenia jest opisany równaniem (2.86). Na rysunkach 5.4a i b przedstawione zostały krzywe otrzymane przy pomocy tego równania (kolor fioletowy) dla parametrów zamieszczonych w tabeli 5.4. Średnicę ziarna przyjęto $30\mu\text{m}$, a odległość między pustkami $0.1d$, $h(\psi)=1$ (według [88]). Wartość współczynnika dyfuzji wyznaczona została ze wzoru:

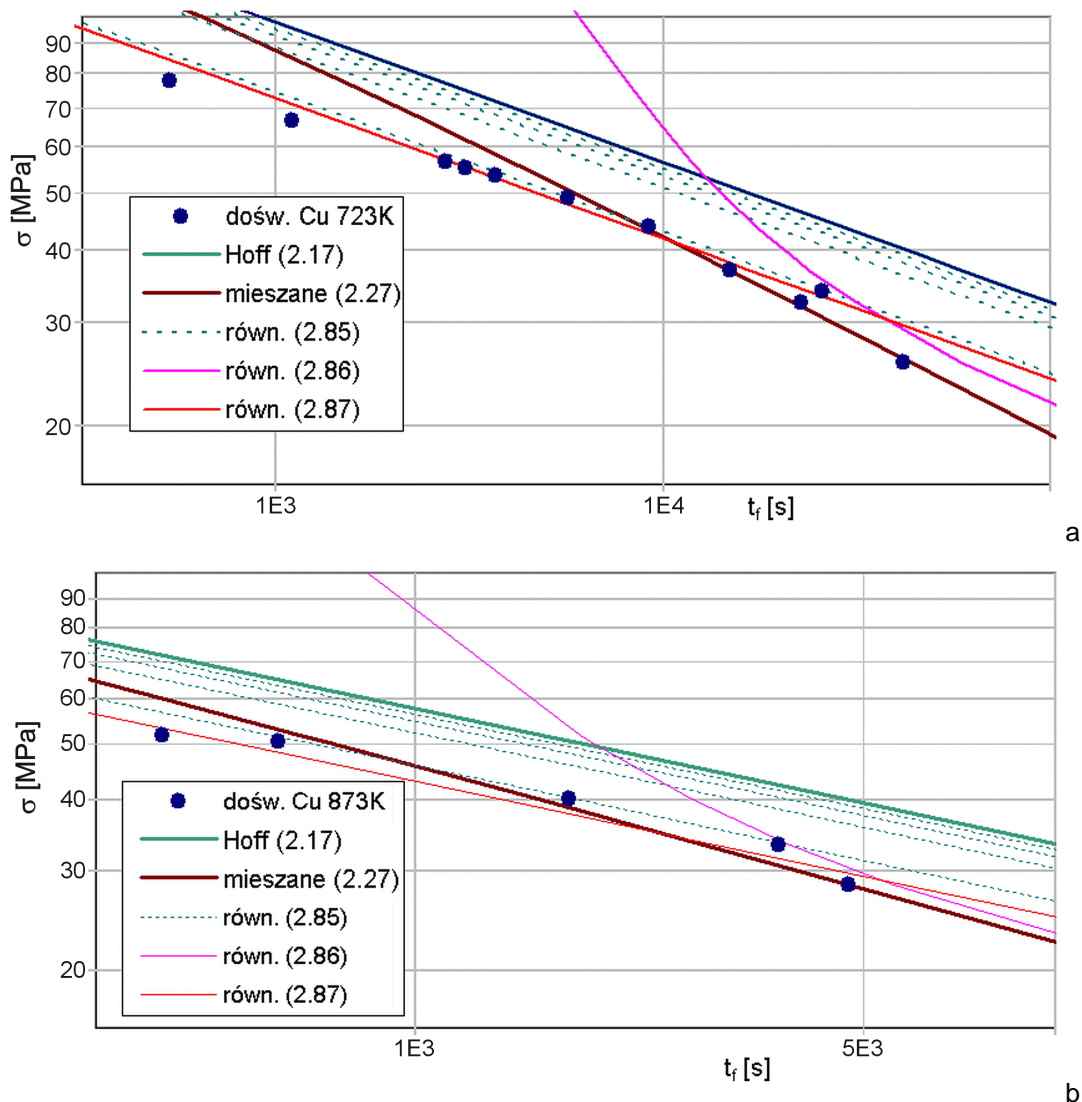
$$\delta D_{gd} = \delta D_{gd0} \exp\left(-\frac{Q_{gb}}{RT}\right). \quad (5.4)$$

Tabela 5.4. Parametry mikromechaniczne dla miedzi według Riedla [150].

Ω	δD_{gd0}	Q_{gb}
m^3	m^3/s	J/mol
1.18E-29	5E-15	1.04E+05

Założenie o natychmiastowej nukleacji pustek daje dobre wyniki tylko dla najmniejszych naprężeń. Dla większego zakresu danych doświadczalnych lepsze wyniki uzyskuje się przy założeniu o ciągłej nukleacji pustek. Czas do koalescencji w tym przypadku opisuje równanie (2.87). Na rysunkach 5.4a i b odpowiada mu linia prosta (kolor czerwony) równoległa do prostej Hoffa, gdyż przy założeniu, że prędkość nukleacji jest opisana empirycznym równaniem (2.60) czas do zniszczenia w równaniu (2.87) jest odwrotnie proporcjonalny do prędkości odkształcenia (co jest cechą wspólną modeli odkształceniowych). Wartość krytyczną gęstości powierzchniowej pustek przyjęto jako $\omega_f = \pi/4$ za [150]. Natomiast parametr równania nukleacji pustek $\alpha' = 5E11 \text{ m}^{-2}$ ustalono tak, by uzyskać najlepsze dopasowanie do wyników

doświadczenia. Wartość ta jest podobnego rzędu jak wartości dla różnych stali zamieszczonych w [150].



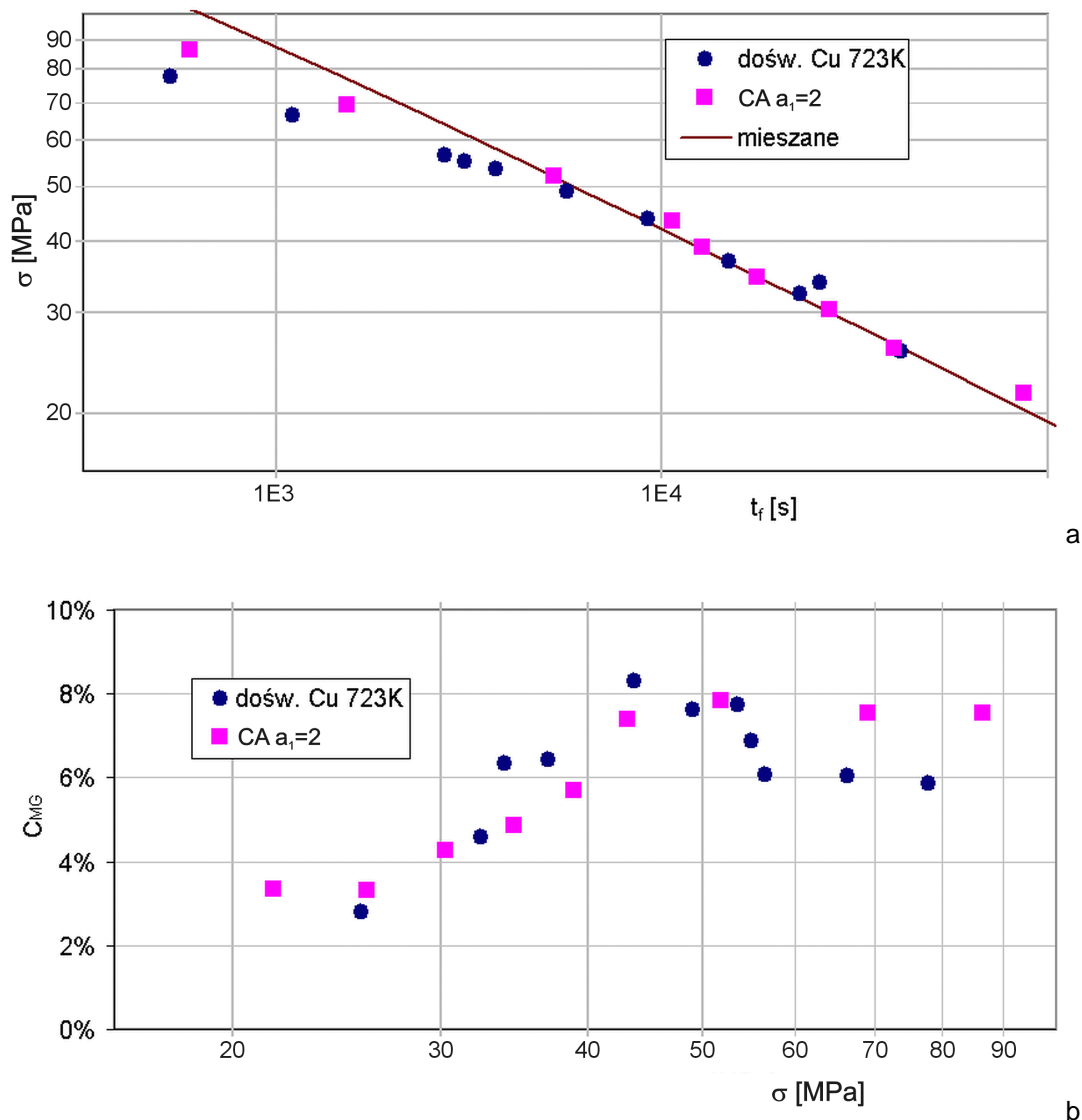
Rys. 5.4. Wyniki doświadczenia [49] dla miedzi w temperaturze 723 K (a) i 823 K (b) w porównaniu z różnymi modelami makroskopowymi i mikroskopowymi. Dla równ. (2.85) proste otrzymano dla ω_0 równego kolejno (od najwyższej położonej) 0.01, 0.025, 0.05, 0.12.

5.2.3 Wyniki symulacji CA dla temperatury 723 K

Dla zamodelowania struktury materiału o ziarnach wielkości $30\mu\text{m}$ przyjęto strukturę automatu o $N_0=641$ i $n_{\text{seed}}=10$. Struktura taka ma średnią wielkość ziarna około 200 komórek, co daje rozmiar komórki automatu $\Delta x=150$ nm, rozmiar ten jest minimalną szerokością szczeliny możliwą do zamodelowania.

Aby uzyskać współczynnik β równania Monkana-Granta (2.1) oraz wartości parametru Monkmana-Granta zgodne z symulowanym doświadczeniem, na podstawie analiz przeprowadzonych w rozdziale 4 wybrano regułę opisaną parametrami $\mathbf{a}=020011$. Ponieważ wartość parametru Monkmana-Granta jest stosunkowo mała (pomiędzy 0.028 a 0.083) dobre dopasowanie uzyskano przy parametrach funkcji gęstości pustek dających znaczne wartości tej funkcji, tj. $f_{v0}=0.005$ i $q_0=1.25$. Natomiast, aby dopasować zmiany wartości parametru Monkmana-Granta do poziomu obciążenia ustalono krok czasowy $\Delta t=30$ s. Najmniejsze znaczenie dla wyników

symulacji ma parametr α_{new} , jego wartość ustalono na $\alpha_{\text{new}}=0.25$. Wyniki symulacji w porównaniu z doświadczeniem zostały przedstawiony na rys. 5.5.



Rys. 5.5. Wyniki symulacji: czas do zniszczenia (a) i stała Monkmana-Granta (b) dla modelu wieloskalowego z automatem $\mathbf{a}=020011$ o parametrach $N_0=641$, $n_{\text{seed}}=10$, $f_{v0}=0.005$, $q_0=1.25$, $\Delta t=30$ s, $\alpha_{\text{new}}=0.25$ w porównaniu z rezultatami doświadczenia dla miedzi w temperaturze 723 K.

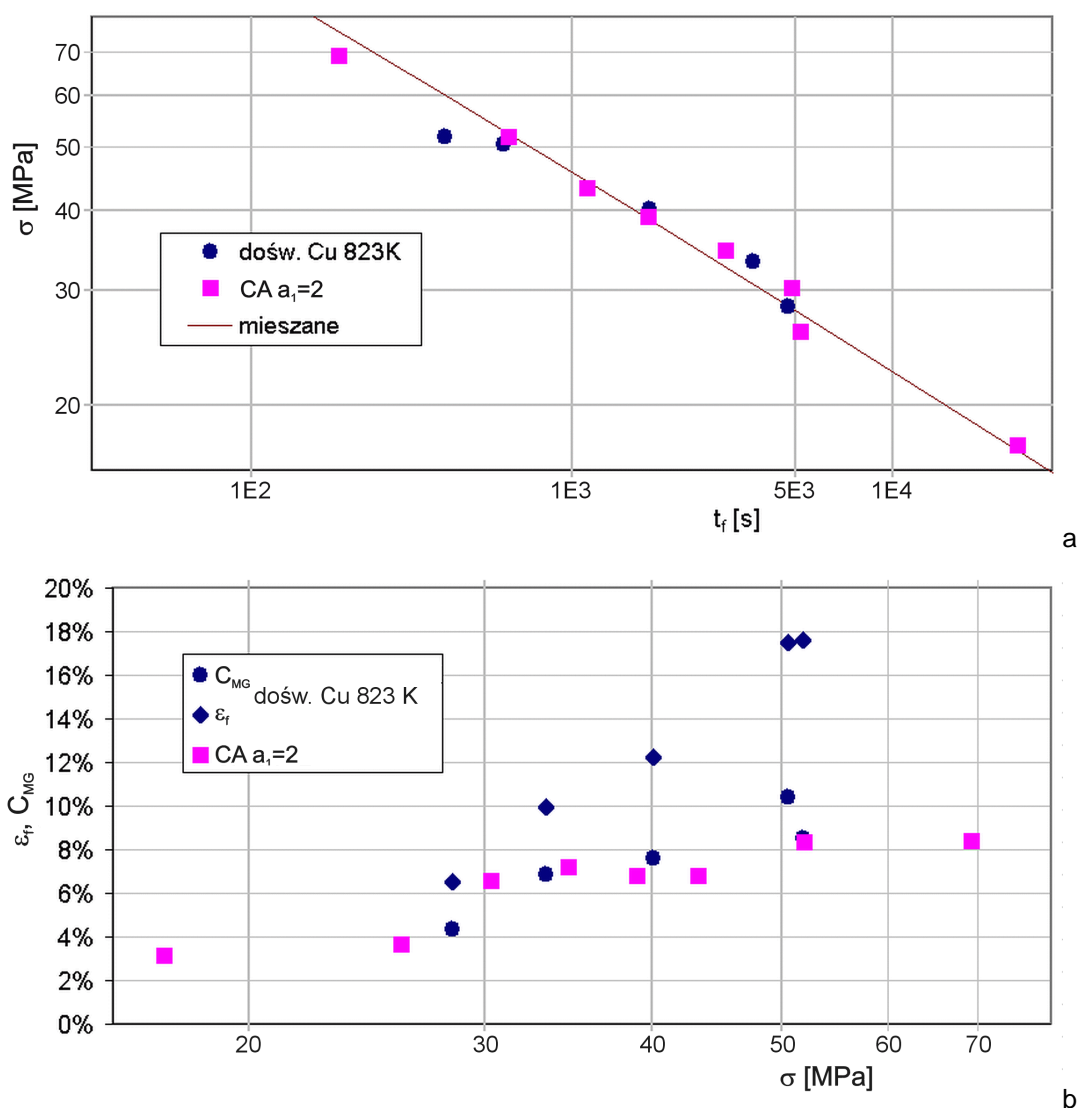
Ponieważ do porównania użyto wyłącznie czasu do zniszczenia i powiązane z nim parametru Monkmana-Granta (nie są dostępne wartości odkształcenia przy zniszczeniu) w symulacji użyto modelu niesprężonego, gdzie przy stałym obciążeniu prędkość odkształcenia nie zmienia się, czyli modelowany jest tylko drugi okres pełzania. W wynikach symulacji wartość odkształcenia przy zniszczeniu różni się od wartości parametru Monkmana-Granta tylko o odkształcenie sprężyste.

Wyniki symulacji dobrze opisują punkty doświadczalne dla zniszczenia kruchego, czyli dla wartości naprężenia poniżej 50 MPa. Wyraźna jest natomiast różnica dla wyników w strefie zniszczenia mieszanego (powyżej 50 MPa). Wyniki symulacji wykazują ustalenie się wartości parametru Monkmana-Granta na poziomie około 0.075, gdy natomiast w doświadczeniu punkty po osiągnięciu wartości maksymalnej 0.083 dla 42.3 MPa, stabilizują się na poziomie 0.06. Zachowanie takie świadczy o nagłej zmianie pomiędzy jednym mechanizmem zniszczenia a drugim – strefa przejściowa obejmuje naprężenia pomiędzy 43.8 a 56.6 MPa. Podobne maksimum związane ze

zmianą mechanizmu występuje także w opisywanym modelu (zob. np. rys. 4.17b), ale bardzo trudno tak dobrać parametry symulacji, by dokładnie odpowiadało doświadczeniu (strefa przejściowa wyznaczona w wyniku symulacji jest znacznie szersza).

5.2.4 Wyniki symulacji CA dla temperatury 823 K – model niesprężony

Symulacje doświadczenia dla temperatury 823 K przeprowadzono przy pomocy tego samego modelu co dla temperatury 723 K. Aby w miarę poprawnie opisać czas do zniszczenia i parametr Monkmana-Granta zmieniono krok czasowy na $\Delta t=10$ s. Wartość ta stanowi 0.333 wartości użytej dla $T=723$ K, gdy tymczasem stosunek stałych dyfuzji, wyznaczonych ze wzoru (5.4) i korzystając z danych z tabeli 5.4 wynosi 0.122. Wyniki symulacji w porównaniu z doświadczeniem zostały przedstawione na rys. 5.6.



Rys. 5.6. Wyniki symulacji: czas do zniszczenia (a) i stała Monkmana-Granta (b) dla modelu wieloskalowego z automatem $a=020011$ o parametrach $N_0=641$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.005$, $q_0=1.25$, $\Delta t=30$ s, $\alpha_{new}=0.25$ w porównaniu z rezultatami doświadczenia dla miedzi w temperaturze 823 K.

Dla tego doświadczenia dostępne są dane o odkształceniu przy zniszczeniu. Aby przeprowadzić symulację doświadczenia dającą poprawną wartość odkształcenia przy

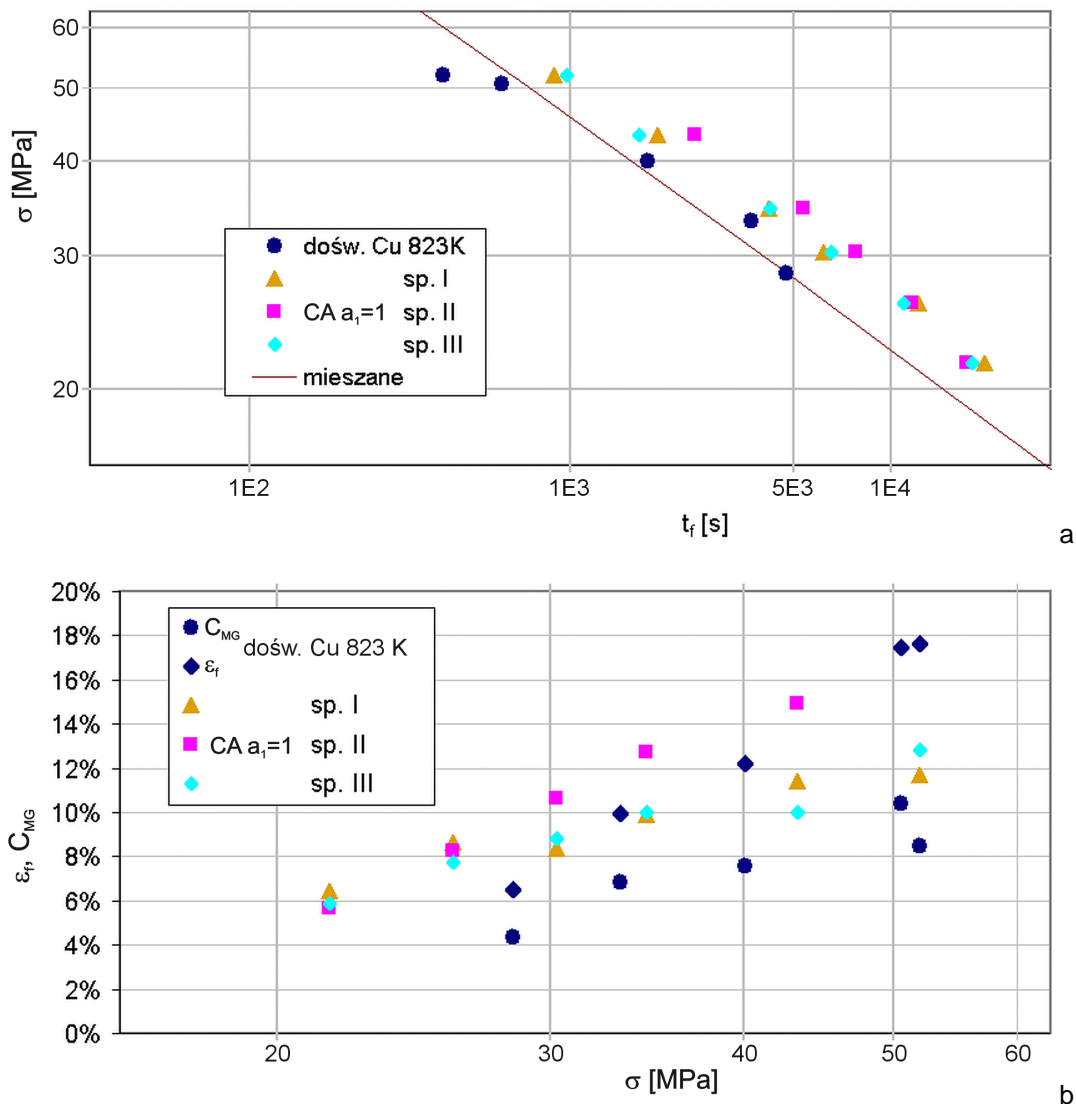
zniszczeniu należy użyć funkcji zmiany gęstości przy pomocy algorytmu o $a_1=1$, która lepiej odzwierciedla doświadczalne zmiany gęstości. Korzystając z danych Boettnera i Robertsona [16] wyznaczono trzy funkcje zmiany gęstości opisane równaniem (2.83). W pierwszej z nich parametry H i γ zostały wyznaczone przez najlepsze dopasowanie do wszystkich wyników doświadczenia opisanych w [16] dla temperatur w zakresie $673 \div 823$ K i naprężeń w zakresie $20 \div 35$ MPa. W drugiej przyjęto liniowy charakter zmian parametrów H i γ w zależności od wartości naprężenia. Do wyznaczenia parametrów funkcji liniowych przyjęto wartości wyznaczone z najlepszego dopasowania funkcji (2.83) do wyników dla temperatury 773 K oraz naprężeń 24.1 MPa i 34.5 MPa. W trzecim sposobie za wartości parametrów H i γ dla całego przedziału zmienności naprężeń przyjęto wartość wyznaczoną dla 30 MPa. Wszystkie trzy wartości parametrów H i γ umieszczono w tabeli 5.5.

Tabela 5.5. Wartości parametrów funkcji zmiany gęstości (2.83) użyte w symulacjach.

sposób	H	γ
I	1.17	2.3
II	$0.0392 \text{ MPa}^{-1} \sigma + 1.3997$	$0.0481 \text{ MPa}^{-1} \sigma + 1.1354$
III	2.58	2.58

Wyniki symulacji dla potęgowej funkcji zmiany gęstości ($\mathbf{a}=010011$) w porównaniu z doświadczeniem zostały przedstawione na rys. 5.7. Okazało się, że aby wyniki symulacji zbliżyły się do wyników doświadczenia, należy znacznie zmniejszyć krok czasowy automatu: zbliżone wartości odkształcenia przy zniszczeniu uzyskano dla $\Delta t=0.5$ s. Można to wytłumaczyć tym, że dla wolniej zmieniającej się funkcji dynamika procesu dyfuzji musi być większa, by otrzymać podobny efekt. Pomimo zbliżonych wartości odkształcenia przy zniszczeniu, otrzymane czasy do zniszczenia są znacznie większe od wyników doświadczalnych. Wynika to z utrzymania stałej prędkości odkształcenia, a tym samym braku osłabienia charakterystycznego dla trzeciego okresu pełzania.

Odkształcenie przy zniszczeniu, otrzymane przy pomocy wartości parametrów H i γ wyznaczonych sposobem I, najbliższe jest punktom doświadczalnym dla wartości intensywności naprężenia w zakresie $30 \div 35$ MPa. Dla naprężeń mniejszych otrzymane wartości są za duże, dla naprężeń większych za małe. Podobny charakter mają wyniki dla parametrów określonych sposobem III. Odkształcenia przy zniszczeniu otrzymane dla funkcji liniowej (sposób II) w miarę dobrze oddają charakter doświadczenia, choć są w całym zakresie większe od wartości doświadczalnych. We wszystkich trzech przypadkach otrzymane minimalne odkształcenie przy zniszczeniu jest ograniczone przez minimalną gęstość pustek potrzebną do zniszczenia oszacowaną w tym przypadku według wzoru (4.5) na $f_{vmin} \approx 0.007$. Korzystając z zależności pomiędzy gęstością pustek a odkształceniem (3.47) można wyznaczyć minimalne odkształcenie umożliwiające zniszczenie, które we wszystkich 3 przypadkach wynosi około $5 \div 6\%$.



Rys. 5.7. Wyniki symulacji: czas do zniszczenia (a) i stała Monkmana-Granta (b) dla modelu wieloskalowego z automatem $\mathbf{a}=010011$ o parametrach $N_0=641$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.005$, $\Delta t=0.5$ s, $\alpha_{new}=0.25$, H i γ według tabeli 5.5 w porównaniu z rezultatami doświadczenia dla miedzi w temperaturze 823 K.

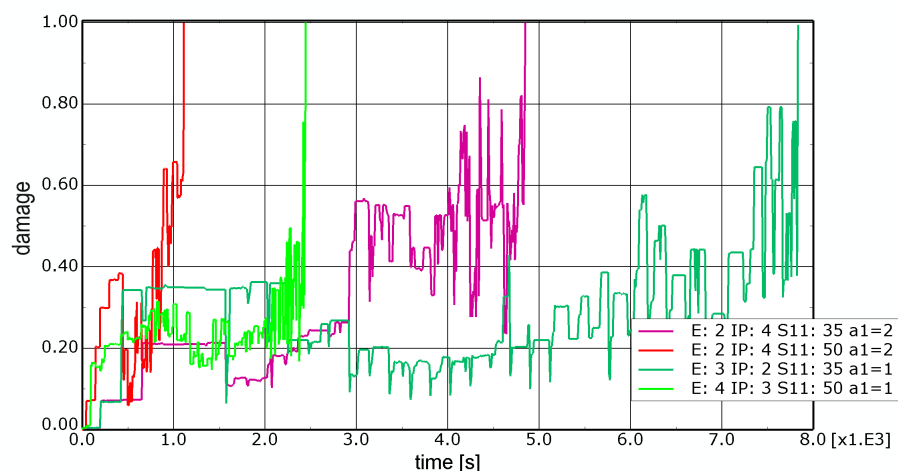
5.2.5 Wyniki symulacji CA dla temperatury 823 K – model sprzężony

Model niesprężony nie uwzględnia trzeciego okresu pełzania, który ma wpływ zarówno na czas do zniszczenia, jak i odkształcenie przy zniszczeniu (miarą tego wpływu jest wartość parametru tolerancji λ_{tol}). Wykładnicza funkcja zmiany gęstości ($a_1=2$) uwzględnia wpływ trzeciego okresu pełzania na czas do zniszczenia przy odkształceniu pozostającym na poziomie drugiego okresu.

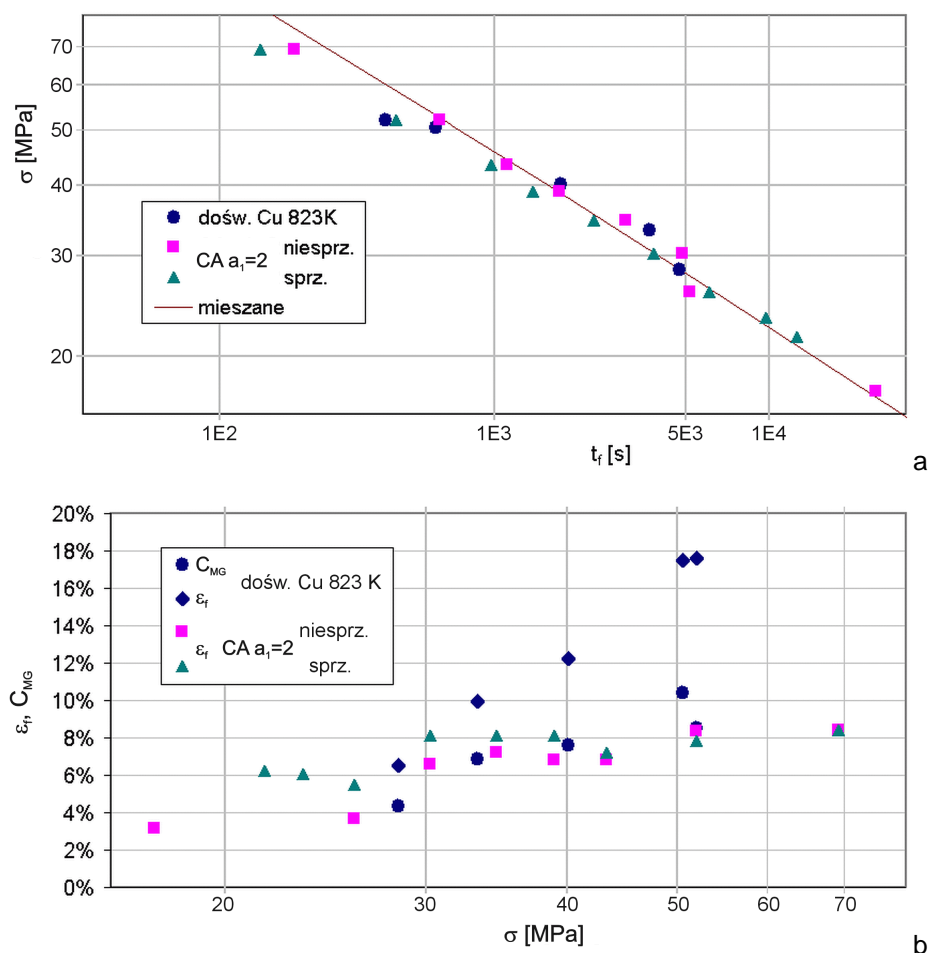
Model sprzężony wymaga skorygowania wartości stałej B w równaniu (5.2). Analiza przebiegów czasowych dla modelu niesprężonego (zob. rys. 5.8) pokazuje, że przy pominięciu początkowego i końcowego okresu rozwoju uszkodzenia, dla automatu o przyjętych parametrach średnia wartość parametru uszkodzenia wynosi około $\omega_{sr}=0.2$. Przyjęto więc:

$$B_{sprz} = B(1 - \omega_{sr})^n, \quad (5.5)$$

gdzie B_{sprz} oznacza parametr używany w modelu sprzężonym.



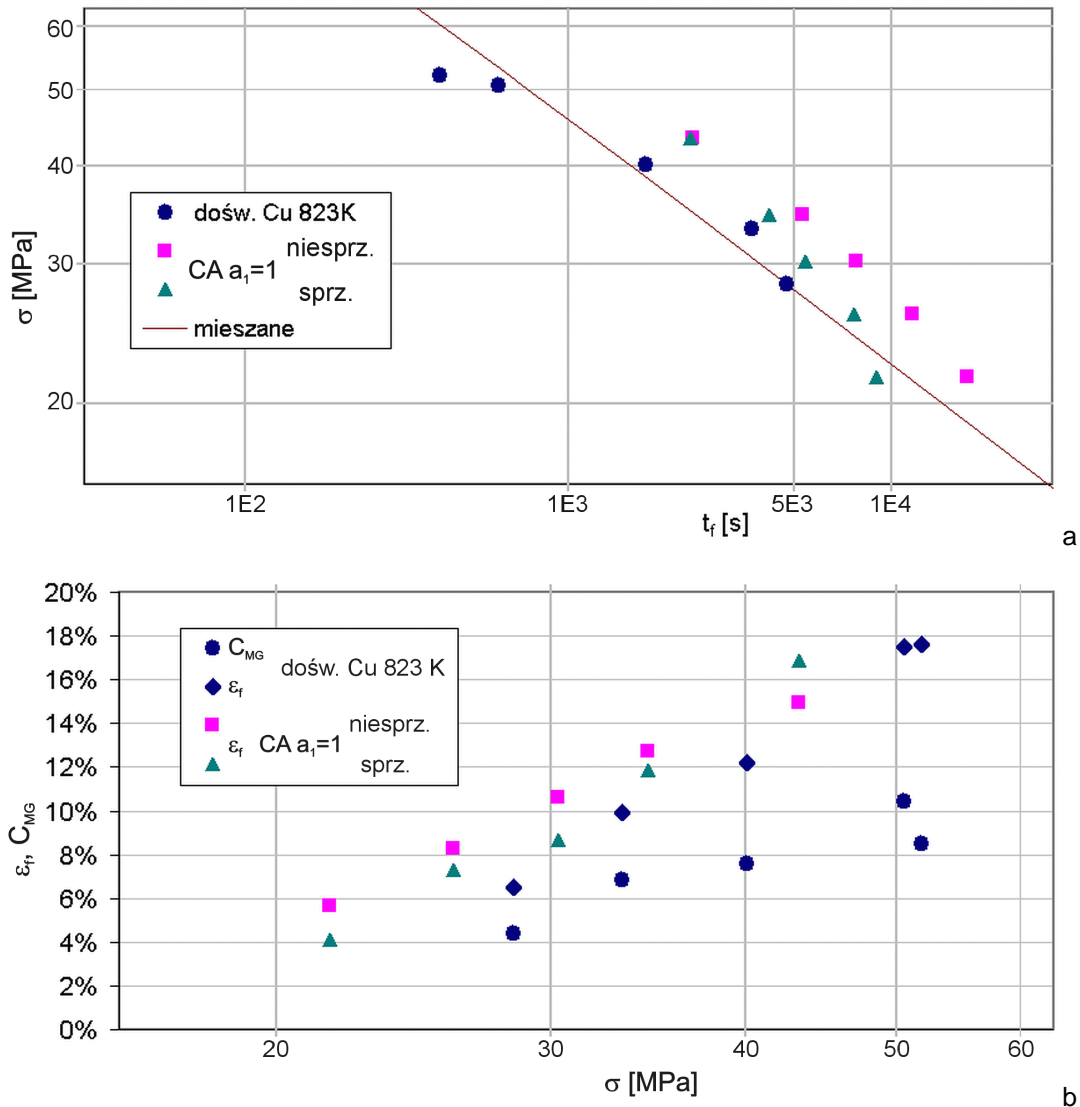
Rys. 5.8. Porównanie przebiegów parametru uszkodzenia w punktach Gaussa, których osiągnięto stan zniszczenia, dla modelu niesprzężonego i automatów: 020011 i 010011 o parametrach $N_0=641$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.005$, $\Delta t=0.5$ s, $\alpha_{new}=0.25$, dla $a_1=2$ $q_0=1.25$, dla $a_1=1$ H i γ według tabeli 5.5 sposób II, i dla obciążenia 35 MPa ($\sigma_{eff}=30.3$ MPa) i 50 MPa ($\sigma_{eff}=43.3$ MPa).



Rys. 5.9. Wyniki symulacji: czas do zniszczenia (a) i odkształcenie przy zniszczeniu (b) dla modeli niesprzężonego i sprzężonego (automat $a=020011$ o parametrach $N_0=641$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.005$, $q_0=1.25$, $\Delta t=30$ s, $\alpha_{new}=0.25$) w porównaniu z rezultatami doświadczenia dla miedzi w temperaturze 823 K.

Wprowadzenie sprzężenia do modelu powoduje, że zniszczenie traci kruchy charakter dla niskich obciążeń, gdyż redystrybucja naprężenia powoduje lokalny wzrost naprężenia do znacznych wartości, co z kolei wymusza większe odkształcenie przy zniszczeniu (zob. rys. 5.9). Ten dodatkowy wzrost odkształcenia wymaga dodatkowego

czasu, dlatego czasy dla małych naprężeń w modelu sprężonym i niesprężonym są porównywalne. Odmienna sytuacja zachodzi dla większych obciążeń. Odształcenie przy zniszczeniu jest porównywalne dla obu modeli, natomiast sprężenie powoduje, że jest ono osiągane szybciej, w efekcie czas do zniszczenia w modelu sprężonym jest mniejszy.

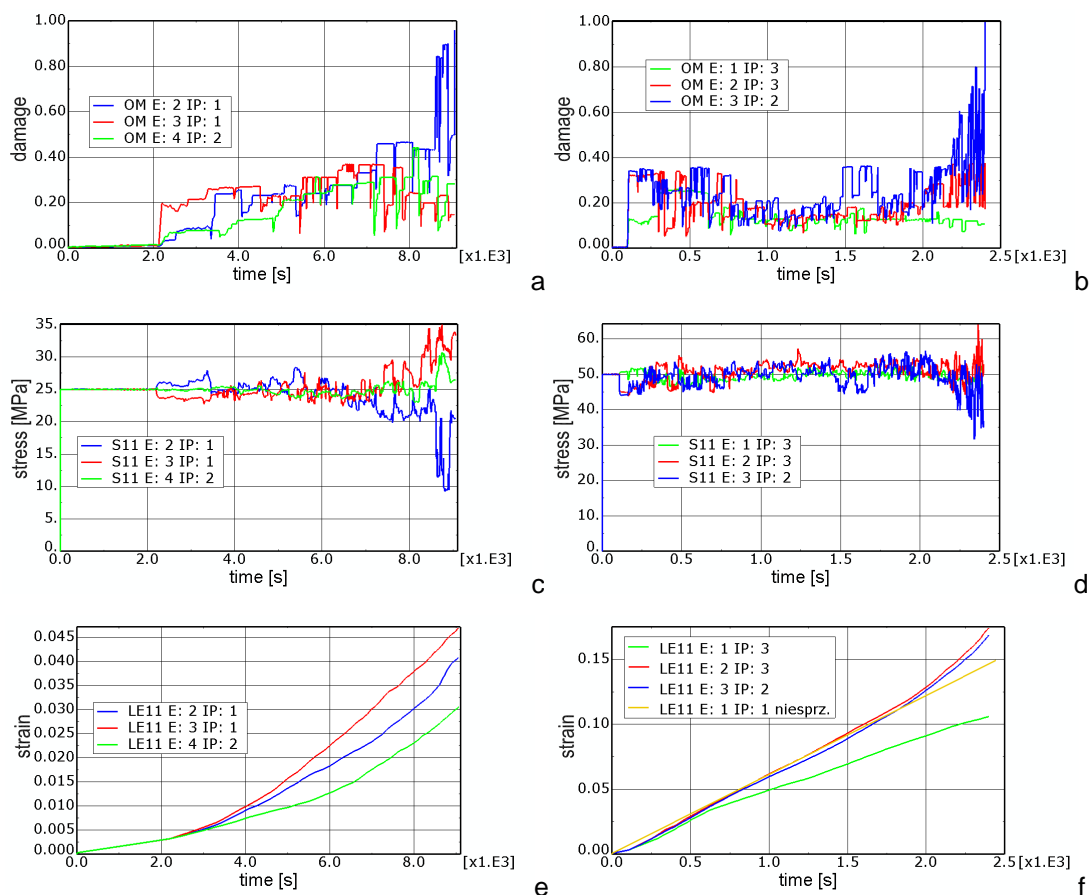


Rys. 5.10. Wyniki symulacji: czas do zniszczenia (a) i odkształcenie przy zniszczeniu (b) dla modeli niesprężonego i sprężonego (automat $a=010011$ o parametrach $N_0=641$, $n_{seed}=10$, $\Delta t=0.5$ s, $\alpha_{new}=0.25$, H i γ według tabeli 5.5 sp. II) w porównaniu z rezultatami doświadczenia dla miedzi w temperaturze 823 K.

Funkcja potęgowa ($a_1=1$) natomiast nie odzwierciedla bezpośrednio przyspieszenia wzrostu uszkodzenia, co powoduje, że zamodelowanie trzeciego okresu pełzania odbywa się wyłącznie przez sprężenie odkształceń z uszkodzeniem. Do analizy modelu sprężonego wybrano automat, który najlepiej (jakościowo) zachowywał się przy modelu niesprężonym, tzn. z liniowo zmieniającymi się parametrami funkcji zmiany gęstości (zob. tabela 5.5 sposób II). Pozostałe parametry to $N_0=641$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.005$, $\Delta t=0.5$ s.

Na rys. 5.10 pokazano otrzymane czasy do zniszczenia i odkształcenie przy zniszczeniu w najbardziej uszkodzonym punkcie w porównaniu z modelem niesprężonym. Otrzymane w symulacji odkształcenie przy zniszczeniu jest podobne

dla obu modeli. Wyraźna różnica uwidacznia się natomiast na wykresie czasu do zniszczenia. Dla większych naprężeń czas do zniszczenia według modelu sprzężonego jest zbliżony do czasu do zniszczenia według modelu niesprężonego (zob. rys. 5.11f), natomiast dla małych naprężeń sprzężenie powoduje znaczny jego spadek. Otrzymane czasy do zniszczenia dla małych naprężeń zbliżone są do czasów otrzymanych doświadczalnie. Wpływ sprzężenia najlepiej widoczny jest na wykresie zmian naprężenia σ_{11} (zob. rys. 5.11c,d). Względne zmiany naprężenia związane z redystrybucją naprężenia w trzecim etapie pełzania w poszczególnych punktach są stosunkowo duże, natomiast dla większego obciążenia zmiany te są relatywnie małe.



Rys. 5.11. Zmiany w czasie parametru uszkodzenia (a,b), naprężenia σ_{11} (c,d) oraz odkształcenia ε_{11} (e,f) dla trzech wybranych punktów modelu sprzężonego (automat $\mathbf{a}=010011$ o parametrach $N_0=641$, $n_{seed}=10$, $\Delta t=0.5$ s, $\alpha_{new}=0.25$, H i γ według tabeli 5.5 sp. II). Na rys. (a,c,e) przedstawiono wyniki dla obciążenia 25 MPa ($\sigma_{eff}=21.7$ MPa), na rys. (b,d,f) dla 50 MPa ($\sigma_{eff}=43.3$ MPa). Kolorem niebieskim przedstawione są wyniki dla punktu, w którym parametr uszkodzenia osiągnął stan zniszczenia, kolorem czerwonym dla punktu o największym odkształceniu końcowym, a kolorem niebieski o najmniejszym odkształceniu końcowym. Dodatkowo na rys. (f) zaznaczono przebieg odkształcenia dla analogicznego modelu niesprężonego.

Przyjęty model w miarę poprawnie odzwierciedla drugi i trzeci okres pełzania. Natomiast nie uwzględnia on rzeczywistych zmian odkształcenia w pierwszym okresie pełzania (zob. rys. 5.11). Utrudnia to wyznaczenie stałej Monkmana-Granta i parametru tolerancji. Przyjmując w równaniu (2.2) zamiast prędkości pełzania ustalonego początkową prędkość odkształcenia otrzymuje się w wyniku symulacji wartość parametru tolerancji około 3. Jest to wartość około 2 razy za duża w porównaniu z wynikami doświadczalnymi (zob. tabela 5.1). Dodatkowo nie maleje on do 1 dla małych obciążeń, gdzie zniszczenie powinno mieć kruchy charakter, a wręcz przeciwnie – rośnie. Potwierdza to, powyżej opisane różnice wartości czasu do zniszczenia dla

modeli niesprężonego i sprężonego, gdzie silniejszy wpływ sprężenia zaobserwowano dla małych obciążeń.

5.3 Symulacja doświadczenia dla żelaza

5.3.1 Opis doświadczenia

Próby pełzania dla żelaza zostały przeprowadzone przez zespół Ashby'ego przy okazji opracowywania map zniszczenia. Wyniki tych doświadczeń zostały przedstawione w pracy [50] i dla wybranej temperatury 973 K (0.54 T_m) zebrane w tabeli 5.6.

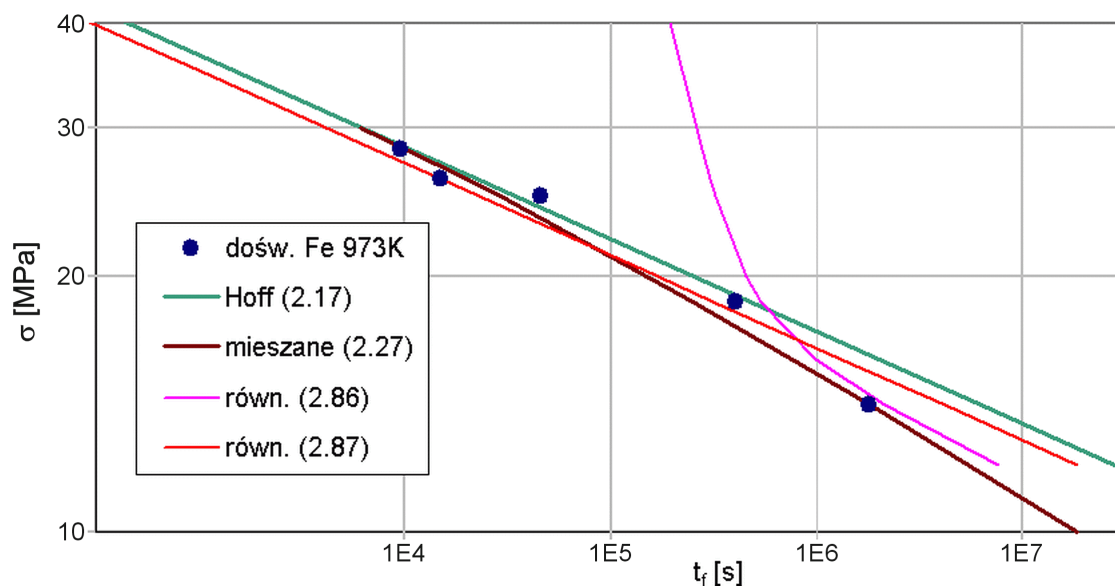
Tabela 5.6. Wybrane wyniki doświadczenia dla żelaza [50]. Typy zniszczenia: TG oznacza transkryystaliczny, T/IG – mieszany, IG – międzykryystaliczny.

σ_0	T	t_f	$\dot{\epsilon}_s$	$\ln(A_0/A_f)$	$\ln(l_f/l_0)$	typ zniszczenia	C_{MG}	λ_{tol}
MPa	K	s	1/s	-	-	-	-	-
>50	973	1.00E+01		1.64		TG		
28.3	973	9.58E+03	1.04E-05	1.03	0.20	T/IG	0.100	2.0
26.1	973	1.49E+04	7.72E-06	0.98	0.20	T/IG	0.115	1.7
24.9	973	4.54E+04	2.31E-06	0.28	0.11	IG	0.105	1.0
18.7	973	4.01E+05	1.61E-07	0.24	0.08	IG	0.065	1.2
14.1	973	>1.80E+06	2.15E-08	>0.09	>0.04	IG	0.039	1.0

Doświadczenie zostało przeprowadzone dla żelaza α o średnicy ziarna 95 μm . Wybrany zakres zawiera 6 prób przy obciążeniach od 14 do 50 MPa, przy czym dla próby przy 50 MPa nie jest podana minimalna prędkość odkształcenia. Podane jest też odkształcenie przy zniszczeniu i przewężenie próbki ($\ln(A_0/A_f)$). Ponieważ odkształcenie poprzeczne jest znacznie mniejsze niż podłużne można stąd wnosić, że baza pomiarowa dla wydłużenia znacznie przekraczała obszar zmierzonego przewężenia. Nie są dostępne przebiegi czasowe dla tych prób. Doświadczenie było wykonywane przy obciążeniu stałą siłą.

Wyraźna jest różnica pomiędzy próbkami dla naprężenia poniżej 25 MPa, a powyżej. Trzy próby o mniejszym obciążeniu zostały zakwalifikowane jako zniszczenie międzykryystaliczne, natomiast dwie próby powyżej jako zniszczenie mieszane. Różnica w mechanizmie zniszczenia jest widoczna w wartościach parametru tolerancji uszkodzenia. Dla zniszczenia międzykryystalicznego jest on bliski 1, natomiast dla zniszczenia mieszanego wynosi około 2 (por. równ. 2.20). Można stąd wywnioskować, że zniszczenie międzykryystaliczne miało charakter bardzo kruchy, o prawie niezauważalnym trzecim okresie pełzania.

Dla przedstawionych danych doświadczalnych wyznaczono stałe materiałowe równania Nortona $n=9.18$, $B=4.91E-19$ (MPa) $^{-n}s^{-1}$ oraz Kaczanowa $m=6.54$, $C=1.97E-15$ (MPa) $^{-m}s^{-1}$ (dla zakresu 14÷25 MPa). Stałe sprężystości w temperaturze 973 K przyjęto $E=134\ 000$ MPa, $\nu=0.3$ [50]. Dla zniszczenia kruchego wartość współczynnika $\beta=0.71$, co świadczy o tym, że zniszczenie następuje na skutek zmian mikrostruktury materiału. Natomiast dla zniszczenia mieszanego średnia wartość stałej Monkmana-Granta wynosi 0.107 co jest bardzo bliskie $1/n=0.109$, czyli odpowiada to dokładnie przypadkowi zniszczenia poprzez redukcję przekroju zewnętrznego opisanego przez Hoffa [80]. Wszystkie punkty doświadczalne dobrze aproksymuje teoria zniszczenia mieszanego opisana równaniem (2.27) – zob. rys. 5.12. Także wyznaczona teoretycznie granica pomiędzy zniszczeniem kruchym i ciągliwym (2.23) $\sigma_{H-K}=21.6$ MPa dobrze przybliża doświadczalną granicę pomiędzy tymi rodzajami zniszczenia.



Rys. 5.12. Wyniki doświadczenia [50] dla żelaza w temperaturze 973 K w porównaniu z różnymi modelami makroskopowymi i mikroskopowymi.

5.3.2 Równania mikromechaniczne

Dobre dopasowanie do otrzymanych czasów do zniszczenia daje teoria ograniczonego wzrostu dyfuzyjnego pustek. Dla natychmiastowej nukleacji pustek (2.86) przybliża ona dobrze czasy otrzymane dla dwóch najmniejszych naprężeń (zob. rys. 5.12). Natomiast teoria ciągłej nukleacji (2.87) daje wyniki bardzo zbliżone do czasu zniszczenia według Hoffa (2.17), a tym samym dobrze przybliża wyniki dla naprężenia większego od 18 MPa. Parametry materiałowe użyte do wyznaczenia czasu do zniszczenia według tych teorii zostały pokazane w tabeli 5.7 dla średnicy ziarna 95 μm . Współczynnik prędkości nukleacji pustek wyznaczony przez Dysona [44] na podstawie doświadczenia Cane i Greenwooda [22] wynosi $\alpha' = 3.2 \times 10^{10} \text{ m}^{-2}$. Pozostałe parametry przyjęto podobnie jak w przykładzie dla miedzi.

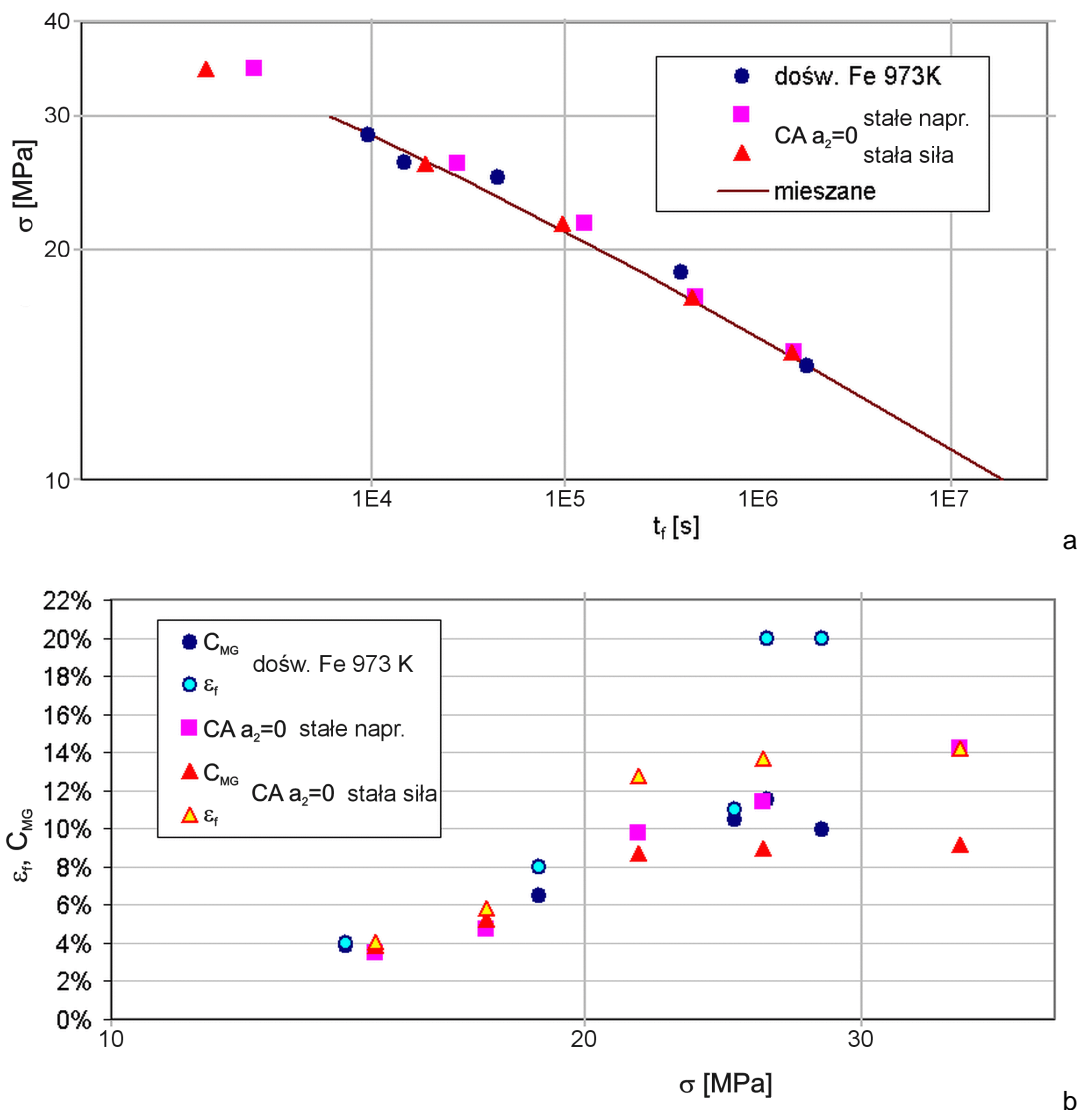
Tabela 5.7. Parametry mikromechaniczne dla żelaza α według [150].

Ω	δD_{gd0}	Q_{gb}
m^3	m^3/s	J/mol
1.18E-29	1.1E-12	1.74E+05

5.3.3 Wyniki symulacji CA – model kruchy

W przedziale zniszczenia kruchego współczynnik β równania Monkamna-Granta (2.1) wynosi 0.71, co jest wartością podobną jak w opisanym doświadczeniu dla miedzi, dlatego zdecydowano na użycie podobnego automatu o regule $\mathbf{a}=020011$ i takich samych parametrach struktury $N_0=641$ i $n_{seed}=10$. Ponieważ użyte w doświadczeniu żelazo miało większy niż w przypadku miedzi wymiar ziarna (95 μm), rozmiar komórki automatu wynosi $\Delta x=470 \text{ nm}$. Dla punktów doświadczalnych, które zostały opisane jako zniszczenie międzykrystaliczne, parametr tolerancji uszkodzenia jest bliski 1 ($\epsilon_f \approx C_{MG}$), dlatego w symulacji numerycznej użyto początkowo obciążenia stałym naprężeniem i model niesprężony. Dobre dopasowanie do wyników doświadczenia dla zniszczenia kruchego uzyskano dla parametrów $f_{v0}=0.005$ i $q_0=1.115$, $\Delta t=100 \text{ s}$,

$\alpha_{new}=0.25$ (zob. rys. 5.13). Dla punktów ze zniszczeniem o charakterze mieszanym model ten daje za duże wartości odkształcenia.

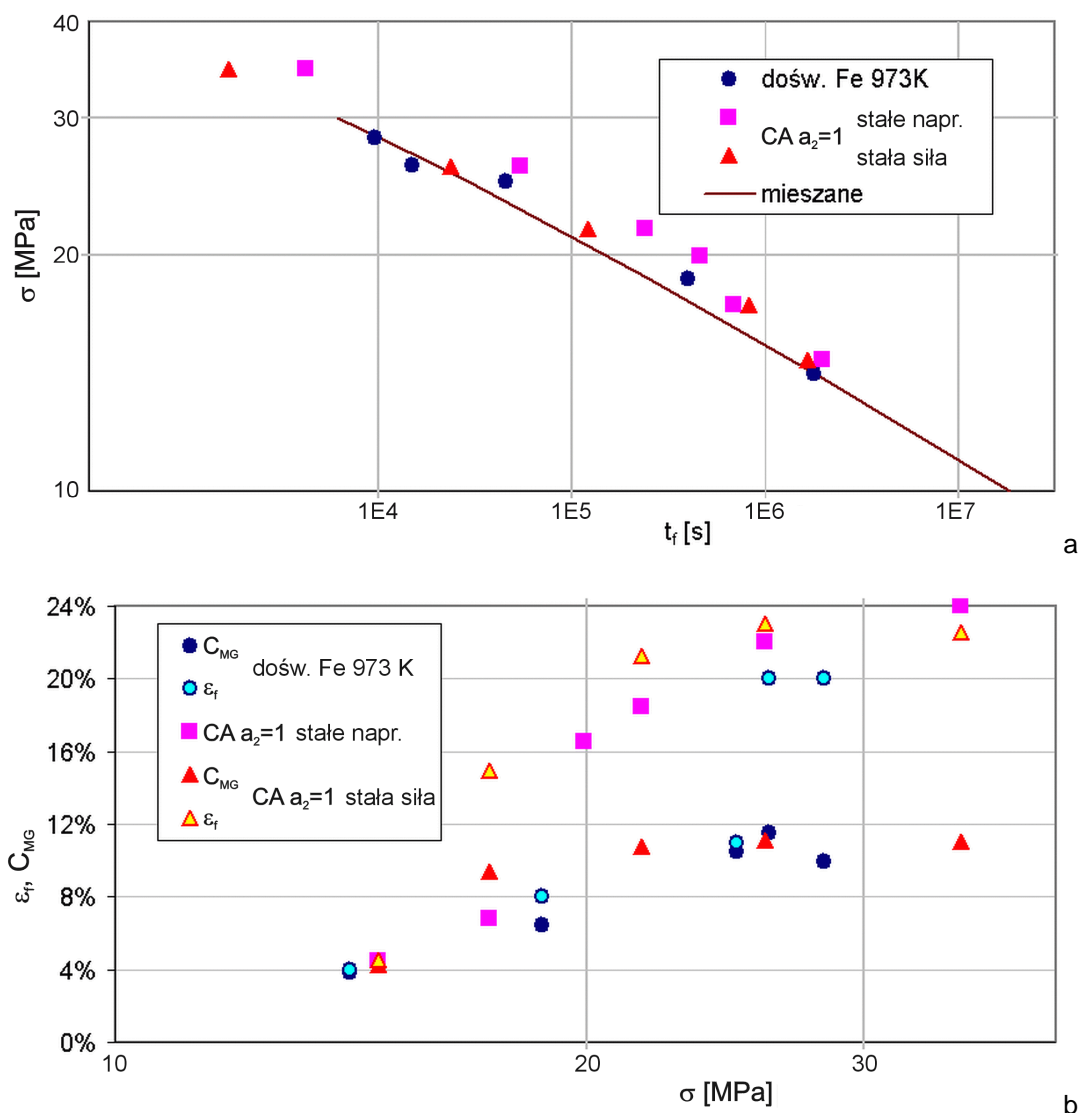


Rys. 5.13. Wyniki symulacji: czas do zniszczenia (a) i odkształcenie przy zniszczeniu z parametrem Monkmana-Granta (b) dla modelu niesprężonego przy obciążeniu stałym naprężeniem lub stałą siłą (automat $a=020011$ o parametrach $N_0=641$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.005$, $q_0=1.115$, $\Delta t=100$ s, $\alpha_{new}=0.25$) w porównaniu z rezultatami doświadczenia dla żelaza w temperaturze 973 K.

Ponieważ jednak doświadczenie było wykonywane przy obciążeniu stałą siłą, w następnym kroku porównano jak zmieniają się wyniki symulacji, przy zamodelowaniu obciążenia rzeczywistym naprężeniem – dającym wzrost prędkości odkształcenia. Zgodnie z oczekiwaniami wyniki dla punktów o najmniejszym obciążeniu praktycznie nie zmieniły się, natomiast wzrosły odkształcenia przy zniszczeniu dla punktów o średnim obciążeniu. Dla wszystkich punktów leżących w zakresie zniszczenia mieszanego otrzymano mniejsze czasy do zniszczenia, co jest związane z mniejszymi wartościami stałej Monkmana-Granta. Otrzymane jednak wartości parametru tolerancji (ok. 1.5) i uszkodzenia przy zniszczeniu ok. 14% są za małe w porównaniu z wartościami doświadczalnymi (zob. rys. 5.13). Zdecydowano się więc na taką modyfikację modelu, która nie zmieniłaby własności w zakresie zniszczenia kruchego, natomiast zwiększyła ciągliwość dla zniszczenia mieszanego, co przedstawiono w następnym punkcie.

5.3.4 Wyniki symulacji CA – model mieszany

Do zamodelowania zniszczenia o charakterze mieszanym transkrystaliczno-międzykrystalicznym użyto zaproponowany w rozdz. 4.4 automat o fladze $a_2=1$. Oznacza ona takie samo traktowanie granicy i wnętrza ziarna w kroku odkształcenia, zwiększając ciągłość dla większych prędkości odkształcenia. Na rys. 5.14 przedstawiono wyniki symulacji otrzymane przy pomocy takiego modelu ($\mathbf{a}=021011$) dla obciążenia zarówno stałym naprężeniem i stałą siłą przy niezmienionych pozostałych parametrach ($N_0=641$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.005$ i $q_0=1.115$, $\Delta t=100$ s, $\alpha_{new}=0.25$).



Rys. 5.14. Wyniki symulacji: czas do zniszczenia (a) i odkształcenie przy zniszczeniu z parametrem Monkmana-Granta (b) dla modelu niesprężonego przy obciążeniu stałym naprężeniem lub stałą siłą (automat $\mathbf{a}=021011$ o parametrach $N_0=641$, $n_{seed}=10$, $f_{v0}=0.005$, $q_0=1.115$, $\Delta t=100$ s, $\alpha_{new}=0.25$) w porównaniu z rezultatami doświadczenia dla żelaza w temperaturze 973 K.

Oba modele dobrze pokazują zmiany czasu do zniszczenia przy zmianie obciążenia, przy czym model z obciążeniem stałą siłą lepiej zachowuje się dla większych obciążeń. Jest to zrozumiałe, gdyż doświadczenie było wykonane przy takim właśnie obciążeniu, dla mniejszych obciążeń zmiana przekroju podczas rozciągania jest stosunkowo mała, więc obie symulacje dają podobne rezultaty. Otrzymane przy pomocy modelu odkształcenie przy zniszczeniu jest zbliżone do rezultatów

doświadczenia dla małych i dużych obciążeń. Wyniki doświadczenia pokazują bardzo wyraźną granicę pomiędzy zniszczeniem mieszanym a zniszczeniem międzykrystalicznym dla około 25 MPa. Przy pomocy modelu też otrzymano granicę pomiędzy tymi mechanizmami, ale dla przypadku obciążenia stałym naprężeniem wynosi ono nieco poniżej 20 MPa, a dla obciążenia stałą siłą jeszcze mniej tj. około 15 MPa.

6 Wnioski

Wszystkie zaprezentowane klasy modeli, tj. modele makroskopowe, modele mikroskopowe oraz zaproponowany w pracy model oparty na symulacjach mikrostruktury dają rezultaty, które można dopasować do znanych wyników doświadczeń opisujących zniszczenie w warunkach pełzania. Modele makroskopowe poza odtworzeniem wartości parametrów makroskopowych takich jak czas do zniszczenia i odkształcenie przy zniszczeniu wnoszą niewiele informacji na temat mechanizmów odpowiedzialnych za rozwój uszkodzeń i doprowadzających do zniszczenia. Więcej szczegółów na ten temat zawierają modele mikroskopowe, ale i one nie dają jednoznacznej odpowiedzi. Aby poprawnie zidentyfikować mechanizm mikroskopowy do porównania modeli z doświadczeniem, konieczne jest użycie nie tylko parametrów makroskopowych, ale także związanych z strukturą materiału (np. zmiana gęstości materiału), czy obrazów przełomów zniszczenia lub przekrojów w jego pobliżu. Możliwości takie dają symulacje zmian struktury materiału opisujące rozwój uszkodzeń w materiale i model taki został zaproponowany w pracy. Zmiany struktury materiału w skali mikro zostały w nim opisane przy pomocy techniki automatów komórkowych, natomiast wyniki w skali makro zostały otrzymane poprzez połączenie modelu mikroskopowego z modelem makroskopowym w model wieloskalowy. Zastosowanie automatu komórkowego pozwoliło na zamodelowanie różnych mechanizmów rozwoju uszkodzeń prowadzących do zniszczenia międzykrystalicznego, transkrystalicznego i mieszanego. Otrzymane obrazy odpowiadają zdjęciom mikroskopowym obrazującym poszczególne typy zniszczenia. Przy pomocy modelu wieloskalowego uzyskano także zgodność z wynikami doświadczalnymi wartości makroskopowych: czasu do zniszczenia i odkształcenia przy zniszczeniu w zależności od przyłożonego naprężenia. Osiągnięto również jakościowy charakter zmian tych wielkości dla zniszczenia kruchego i ciągliwego odpowiadający obserwacjom doświadczalnym. Tym samym zrealizowano główny cel pracy.

Osiągnięcie tego celu wymagało zbudowania narzędzia (programu komputerowego) do przeprowadzania symulacji przy pomocy automatów komórkowych, a następnie dokładnego jego przetestowania, by osiągnąć pewność, że otrzymane wyniki są poprawne w ramach przyjętych założeń. Narzędzie to posłużyło zarówno do generacji struktury materiału jak i badaniu procesów rozwoju uszkodzeń. Dzięki odpowiedniemu sparametryzowaniu kodu możliwe było przeprowadzenie symulacji dla wielu różnych algorytmów, także takich, które później okazały nieprzydatne dla opisu rozważanego zjawiska. Testy te pozwoliły m.in. na wypracowanie poprawnej interpretacji prawa zachowania masy tak, by uniezależnić wyniki od skokowych zmian objętości RVE, które są cechą przyjętej technologii modelowania (zob. rozdz. 3.4.1.2).

Algorytm rozwoju uszkodzeń powstał głównie poprzez modyfikację algorytmów zbudowanych przez innych autorów do wykonywania symulacji przy pomocy automatów komórkowych. Pomimo wielu istniejących modeli dyfuzji autorowi nie udało się jednak znaleźć algorytmu, który pozwoliłby na agregację pustek ze swobodnie dyfundujących elementów (najbardziej zbliżone algorytmy z rodziny DLA pozwalają na modelowanie agregatów o kształcie dendrytów). Zastosowanie do agregacji kryterium energetycznego pozwoliło osiągnąć owalny kształt pustek.

Przeprowadzone symulacje pozwoliły na dokładną analizę zjawisk zachodzących podczas rozwoju uszkodzenia. Ważnym elementem tej analizy jest porównanie używanego w równaniach makroskopowych parametru uszkodzenia z miarą

mikroskopową - gęstością objętościową pustek - opisane w rozdz. 4.5. Wyróżniono dwa typy rozwoju parametru uszkodzenia. Pierwszy o charakterze rozwoju zbliżonym do parametru Kaczanowa (z wyraźnym przyspieszeniem wzrostu w trzecim okresie pełzania) oraz drugi (dla dużych prędkości odkształceń) o bardziej liniowym charakterze rozwoju, proporcjonalnym do zmian gęstości objętościowej pustek. Potwierdza to, że makroskopowe wyróżnianie typów zniszczenia jest umotywowane zróżnicowanymi mechanizmami mikroskopowymi.

Wprowadzenie gęstości objętościowej pustek jako istotnego parametru mierzącego rozwój uszkodzeń byłoby niemożliwe bez rezygnacji z założenia o nieściślności, powszechnie przyjmowanego w równaniach makroskopowych. Okazało się, że nie jest możliwe otrzymanie zadawalających wyników, przy utrzymaniu tego założenia na poziomie mikroskopowym, co sugeruje, że również na poziomie makroskopowym należałoby uwzględnić zmiany objętości.

Wyniki przeprowadzonych symulacji wykazały, jak ważny dla modeli dyskretnych jest właściwy dobór skali, zarówno przestrzennej jak i czasowej. Każde badane zjawisko charakteryzuje się własną skalą i łączenie zjawisk o różnej skali w jednym modelu jest możliwe tylko dla jednego zestawu parametrów opisujących tę skalę. Prowadzi to do wniosku, że nie jest możliwe zbudowanie modelu o większej rozdzielczości, który nie zmieniałby proporcji pomiędzy tymi skalami (zob. rozdz. 4.2.2.1).

Zastosowanie modelu wieloskalowego, w którym część mikroskopowa została oparta na symulacji rozwoju uszkodzeń w strukturze materiału polikrystalicznego, pozwoliło ponadto na zaobserwowanie zjawisk towarzyszących zmianie poszczególnych mechanizmów rozwoju uszkodzeń. Przejście pomiędzy zniszczeniem kruchym (międzykrystalicznym) a zniszczeniem ciągłym (transkrystalicznym) nie zawsze odbywa się w sposób płynny. W doświadczeniach objawia się to np. spadkiem wartości parametru Monkmana-Granta dla obciążeń większych niż w strefie przejściowej (zob. opis doświadczenia dla miedzi opisanego w rozdz. 5.2) lub skokową zmianą wartości parametru tolerancji uszkodzenia (zob. opis doświadczenia dla żelaza opisanego w rozdz. 5.3). Zjawiska te w sposób jakościowy zostały opisane przy użyciu narzędzia dyskretnego – automatu komórkowego.

Kierunki dalszych badań

Mimo, że otrzymane rezultaty są zadawalające pod względem jakościowym, to poprawa wyników ilościowych wymaga dalszych prac. Szczegółowe omówienie ograniczeń, narzuconych na bieżący model, opisane w rozdz. 3.5, stanowi podstawę do dalszych badań służących udoskonaleniu modelu. Głównym celem rozwoju powinna być taka modyfikacja, by parametry modelu były w całości oparte na parametrach materiałowych. Propozycje zmian omówione poniżej, mają przybliżyć do realizacji tej idei.

Podstawowym kierunkiem tych prac powinien być rozwój modelu trójwymiarowego, co pozwoliłoby na modelowanie stanów wieloosiowych, i tym samym zlikwidowałoby ograniczenie aktualnego modelu.

Celowe wydaje się też odejście od równomiernego odkształcenia RVE w kroku odkształceniowym. Zamodelowanie przy pomocy automatu komórkowego mikromechanizmów deformacji pozwoliłoby na rezygnację z i tak niespełnionego założenia o konieczności jednorodnego stanu odkształcenia wewnątrz RVE. Wprowadzenie do modelu mikropoślizgów, dużych lokalnych odkształceń ulepszyłoby model trzeciego okresu pełzania. Stosowane w obecnym modelu mechanizmy modelujące ten proces (wykładnicza funkcja zmiany gęstości, krok lokalnego rozwoju

uszkodzenia) okazały się niewystarczające, by otrzymać w pełni zadawalające rezultaty. Natomiast do ulepszenia opisu pierwszego okresu pełzania wystarczające wydaje się uwzględnienie mechanizmów tego okresu w opisie makroskopowym (zmiana użytego równania konstytutywnego), gdyż zmiany w mikrostrukturze materiałów w tym okresie wydają się nieistotne z punktu widzenia końcowego zniszczenia.

Ulepszenia wymagają też algorytmy używane w modelu rozwoju uszkodzenia. Istotnym zagadnieniem, wpływającym zasadniczo na otrzymane rezultaty, jest zależność pomiędzy odkształceniem i objętością pustek. Najbardziej obiecującym kierunkiem badań jest model wiążący objętość pustek z uszkodzeniem (opisany w dodatku D.1), który daje wyniki jakościowo zgodne z doświadczeniami, natomiast pod względem ilościowym rozwój uszkodzeń zamodelowany przy jego pomocy jest zbyt wolny. Być może lepszy model deformacji trzeciego okresu pełzania pozwoli także na poprawę rezultatów tego modelu. Niedoskonały jest także model dyfuzji wakansów. Bliższe rzeczywistości byłoby zastąpienie pojedynczych pustek przez gęstość wakansów. Model taki wymaga opracowania nowego mechanizmu agregacji wakansów w pustki, a także mechanizmów dyfuzji po powierzchni granic ziaren i po powierzchni pustek.

Osobnym zagadnieniem jest rozwój modelu sprzężonego, w którym uszkodzenie zwrotnie wpływa na odkształcenie. Mechanizm ten, który w modelu makroskopowym poprawnie odzwierciedla czas do zniszczenia przy uwzględnieniu trzeciego okresu pełzania, daje zbyt duże wartości odkształcenia przy zniszczeniu. Wynikają one z dużych różnic wartości składowych tensora naprężenia w sąsiednich punktach Gaussa, co wymaga dużego zagęszczenia siatki elementów skończonych, utrudniając tym samym modelowanie w skali mikro.

Dalszy rozwój modeli opartych na symulacjach zachowania się struktury odwzorowującej strukturę rzeczywistych materiałów i procesów jej destrukcji wydaje się ważnym kierunkiem badań mających na celu zrozumienie zjawisk zachodzących w świecie mikro, a w przyszłości świadome projektowanie materiałów o coraz lepszych właściwościach wytrzymałościowych.

7 Literatura

1. Abdellaoui M., El Jai A., Shillor M.; Cellular Automata Model for a Contact Problem; *Math. Comput. Modelling*, vol. 36, 1099-1114, 2002
2. Adamatzky A. I.; Voronoi-Like Partition of Lattice in Cellular Automata; *Math. Comput. Modelling*, vol. 23 (4), 51-66, 1996
3. Ainsworth R.A.; R5: assessment procedure for the high temperature response of structures; Issue 2, Revision 2, British Energy Generation Limited, Gloucester, 2001
4. Andrade E.N. da C.; On the viscous flow in metals and allied phenomena; *Proc. R. Soc. Lond. A.*, vol. 84 (567), 1-12, 1910
5. Ashby M. F., Dyson B.F.; Creep damage mechanics and micromechanisms; *Advances in fracture research, ICF 6*, vol. 1, 3-30, 1984
6. Ashby M. F., Gandhi C., Taplin D.M.R.; Fracture-Mechanism Maps and Their Construction for F.C.C. Metals and Alloys; *Acta Metall.*, vol. 27 (5), 699-729, 1979
7. Bagnoli F., Rechtman R., Ruffo S.; Damage spreading and Lyapunov exponents in cellular automata; *Phys. Lett. A*, vol. 172, 34-38, 1998
8. Bailey R.W.; The utilisation of creep test data in engineering design; *Proc. Inst. Mech. Eng.*, vol. 131, 209-284, 1935
9. Balokhonov R.R., Romanova V.A., Schmauder S. i in.; Simulation of meso-macro dynamic behavior using steel as an example; *Comp. Mat. Sci.*, vol. 28, 505-511, 2003
10. Beere W., Speight M.V.; Creep cavitation by vacancy diffusion in plastically deforming solid; *Metal Sci.*, vol. 12 (4), 172-176, 1978
11. Belloni G., Bernasconi G., Piatti G.; Creep damage and rupture in AISI 310 austenitic steel; *Meccanica*, vol. 12 (2), 84-96, 1977
12. Benallala A., Bottab A.S., Venturinib W.S.; On the description of localization and failure phenomena by the boundary element method; *Comput. Methods Appl. Mech. Engng*; vol. 195 (44-47), 5833-5856, 2006
13. Beynon J. H., Das S., Howard I.C. i in.; The combination of Cellular Automata and Finite Elements for the study of fracture; the CAFE model of fracture; *Proc. The 14th Biennial Conference on Fracture – ECF 14, Cracow, Poland, 8-13 September*, vol. I, 241-248, 2002
14. Bodnar A., Chrzanowski M., Latus P.; *Reologia konstrukcji prętowych*; Wyd. PK, Kraków 2006
15. Bodnar A., Chrzanowski M., Nowak K.; Brittle failure lines in creeping plates; *Int. J. Pressure Vessels and Piping*, vol. 66, 253-261, 1996
16. Boettner R.C., Robertson W.D.; A Study of the Growth of Voids in Copper During the Creep Process by Measurement of the Accompanying Change in Density; *Trans. Metall. Soc. AIME*, vol. 221 (3), 613-622, 1961

-
17. Bomba J., Czopor J., Rybaczuk M.; Simulation and Experimental Investigation of Two Dimensional Cracks Propagation in Ceramic Materials; *Lecture Notes in Computer Science*, vol. 3305, 670-677, 2004
 18. Bowring P., Davies P.W., Wilshire B.; The Strain-Dependence of Density Changes during Creep; *Metal Sci. J.*, vol. 2, 168-171, 1968
 19. Bowyer W.H.; Creep Deformation and Fracture Processes in OF and OFP Copper; SKI Report, 2005:18, 1-32, 2004
 20. Burbelko A.; Mezomodelowanie krystalizacji metodą automatu komórkowego; Wyd. AGH, Kraków 2004
 21. Burke M.A., Nix W.D.; Plastic instabilities in tension creep; *Acta Metall.*, vol. 23 (7), 793-798, 1975
 22. Cane B.J., Greenwood G.W.; The Nucleation and Growth of cavities in Iron during Deformation at Elevated Temperatures; *Metal Sci.*, vol. 9 (2), 55-60, 1975
 23. Chang H.C., Grant N.J.; Mechanism of Intercrystalline Fracture; *Journal of Metals - Trans. AIME*, vol. 206 (5), 544-551, 1956
 24. Chen C.W., Machlin E.S.; On the mechanism of intercrystalline cracking; *Acta Metall.*, vol. 4, 655-656, 1956
 25. Chen I.W., Argon A.S.; Diffusive growth of grain-boundary cavities; *Acta Metall.*, vol. 29 (10), 1759-1768, 1981
 26. Cho H.C., Jin Yu, Park I.S.; Creep cavitation in a NiCr steel; *Metall. Trans. A*, vol. 23A, 201-210, 1992
 27. Chrzanowski M.; O możliwości opisu pełnego procesu pełzania metali; *Mech. Teoret. i Stos.*, vol. 19 (1), 143-156, 1972
 28. Chrzanowski M.; Parametr uszkodzenia w Kontynuacyjnej Mechanice Zniszczenia; *Zast. Mech. Zniszcz. w Anal. Konstr. Inż.*, Materiały konf. szkol. Janowice 12-17 IX 1977, 127-160, 1977
 29. Chrzanowski M., Nowak K.; Cellular Automata in Damage Mechanics: Brittle Creep Rupture Case; *Arch. Mech.*, vol. 59 (4-5), 329-339, 2007
 30. Chuang T.J., Rice J.R.; The shape of intergranular creep cracks growing by surface diffusion; *Acta Metall.*, vol. 21 (12), 1625-1628, 1973
 31. Coble R.L.; A Model for Boundary Diffusion Controlled Creep in Polycrystalline Materials; *J. Appl. Phys.*, vol. 34 (6), 1679-1682, 1963
 32. Cocks A.C.F., Ashby M. F.; Intergranular fracture during power-law creep under multiaxial stresses; *Metal Sci.*, vol. 14 (8-9), 395-402, 1980
 33. Cocks A.C.F., Ashby M. F.; On creep fracture by void growth; *Progress in Materials Science*, vol. 27 (3-4), 189-244, 1982
 34. Cormeau I.; Numerical stability in quasi-static elasto/visco-plasticity; *Int. J. Numer. Meth. Engng*, vol. 9 (1), 109-127, 1975
 35. Das S., Abbod M.F., Zhu Q. i in.; A combined neuro fuzzy-cellular automata based material model for finite element simulation of plane strain compression; *Comp. Mat. Sci.*, vol. 40, 366-375, 2007

36. Das S., Palmiere E. J., Howard I.C.; CAFE: a new approach to the modelling of multipass hot rolling; Proc. of Modelling of Metal Rolling Processes Symposium, 33-40, 2001
37. Davies C.H.J.; Growth of nuclei in a cellular automaton simulation of recrystallisation; *Scr. Materialia*, vol. 36 (1), 35-40, 1997
38. Delph T.J.; Some Selected Topics in Creep Cavitation; *Metall. and Materials Trans. A*, vol. 33A (2), 383-390, 2002
39. Deryugin Ye.Ye., Lasko G.V., Schmauder S.; Formation and self-organization of the LPD bands within the range from meso- to macrolevel in polycrystals under tensile loading; *Comp. Mat. Sci.*, vol. 15, 89-95, 1999
40. Ding R., Guo Z.X.; Coupled Quantitative Simulation of Microstructural Evolution and Plastic Flow During Dynamic Recrystallization; *Acta Mater.*, vol. 49, 3163-3175, 2001
41. Dobrzański L.A.; Metaloznawstwo z podstawami nauki o materiałach; WN-T, Warszawa 1996
42. Domany E., Kinzel W.; Equivalence of Cellular Automata to Ising Models and Directed Percolation; *Phys. Review Letters*, vol. 53 (4), 311-314, 1984
43. Dyson B.F.; Constraints on diffusional cavity growth rates; *Metal Sci.*, vol. 10 (10), 349-353, 1976
44. Dyson B.F.; Continuous cavity nucleation and creep fracture; *Scr. Metall.*, vol. 17 (1), 31-37, 1983
45. Dyson B.F.; Creep and fracture of metals: mechanisms and mechanics; *Revue Phys. Appl.*, vol. 23 (4), 605-613, 1988
46. Dyson B.F., McLean D.; New Method of Predicting Creep Life; *Metal Sci. J.*, vol. 6, 220-223, 1972
47. Dyson B.F., Osgerby S.; Modelling and Analysis of Creep Deformation and Fracture in a 1 Cr 1/2 Mo Ferritic Steel; NPL Report, DMM(A) 116, August 1993, 1-43, 1993
48. Evans H.E.; Mechanisms of Creep Fracture; Elsevier Applied Science Publishers, London New York 1984
49. Feltham P., Meakin J.D.; Creep in Face-Centred Cubic Metals with Special Reference to Copper; *Acta Metall.*, vol. 7 (9), 614-627, 1959
50. Fields R.J., Weerasooriya T., Ashby M. F.; Fracture Mechanisms in Pure Iron, Two Austenitic Steels and One Ferritic Steel; *Metall. Trans. A*, vol. 11A (2), 333-347, 1980
51. Frisch U., Hasslacher B., Pomeau Y.; Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation; *Phys. Review Letters*, vol. 56, 1505-1508, 1986
52. Frost H.J., Ashby M. F.; Deformation-Mechanism Maps, The Plasticity and Creep of Metals and Ceramics; Pergamon Press, Oxford 1982
53. Fukś H.; Probabilistic cellular automata with conserved quantities; *Nonlinearity*, vol. 17, 159-173, 2004

-
54. Gadomski L., Wojewodzki W.; Analysis of the Creep Rupture of Structural Members by the Finite Element Method; Proc. of SMiRT-7, Chicago, IL, USA, August 22-26, vol. L, 515-522, 1983
 55. Gandhi C., Ashby M. F.; Fracture-mechanism maps for materials which cleave - F.C.C., B.C.C. and H.C.P. metals and ceramics; *Acta Metall.*, vol. 27, 1565-1602, 1979
 56. Gandhi C., Raj R.; Intergranular fracture in bicrystals II; *Acta Metall.*, vol. 30 (2), 505-511, 1982
 57. Gandin Ch.A., Desbiolles J.-L., Rappaz M. i in.; A Three-Dimensional Cellular Automaton-Finite Element Model for the Prediction of Solidification Grain Structures; *Metall. and Materials Trans. A*, vol. 30A, 3153-3165, 1999
 58. Gandin Ch.A., Rappaz M.; A Coupled Finite Element-Cellular Automaton Model for the Prediction of Dendritic Grain Structures in Solidification Process; *Acta Metall. Mater.*, vol. 42 (7), 2233-2246, 1994
 59. Gardner M.; Mathematical Games: The fantastic combinations of John Conway's new solitaire game "Life"; *Scientific American*, vol. 223 (10), 120-123, 1970
 60. Gawąd J.; Modelowanie wieloskalowe metodą automatów komórkowych własności materiałów odkształcanych plastycznie; praca doktorska, AGH, Kraków 2007
 61. Gawąd J., Macioł P., Pietrzyk M.; Multiscale Modelling of Microstructure and Macroscopic Properties in Thixoforming Process Using Cellular Automation Technique; *Arch. of Metallurgy and Materials*, vol. 50 (3), 549-562, 2005
 62. Gawąd J., Madej Ł., Szeliga D. i in.; Cellular automaton technique as a tool for a complex analysis of the microstructure evolution and rheological behaviour; *Acta Metallurgica Slovaca*, vol 11,ss. 45-53, 2005
 63. Gifkins R.C.; A mechanism for the formation of intergranular cracks when boundary sliding occurs; *Acta Metall.*, vol. 4 (1), 98-99, 1956
 64. Gittins A.; The Mechanism of Cavitation in Copper during Creep; *Metal Sci. J.*, vol. 1, 214-216, 1967
 65. Goetz R.L., Seetharaman V.; Modeling dynamic recrystallization using cellular automata; *Scr. Materialia*, vol. 38 (3), 405-413, 1998
 66. Golay M. J. E.; Hexagonal parallel pattern transformations; *IEEE Trans. Comput.*, vol. C-18 (8), 733-740, 1969
 67. Goncalves Filho O. J. A.; Benchmark for finite element analysis of stress redistribution induced by creep damage; *Comp. Mat. Sci.*, vol. 33, 419-428, 2005
 68. Greenwood G.W.; Cavity nucleation in the early stages of creep; *Phil. Mag.*, vol. 19 (158), 423-427, 1969
 69. Greenwood G.W.; Creep life and ductility; Proc. of the 3rd Int. Conf. on Strength of Metals and Alloys, Cambridge, s. 91, 1973
 70. Greenwood J.N.; Intercrystalline cracking of metals; *J. Iron Steel Inst.*, vol. 171, 380, 1952

71. Gurson A.L.; Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I - Yield Criteria and Flow Rules for Porous Ductile Media; *J. Eng. Materials and Technology*, vol. 99, 2-15, 1977
72. Hales R.; The Role of Cavity Growth Mechanisms in Determining Creep-Rupture Under Multiaxial Stresses; *Fatigue Fract. Engng. Mater. Struct.*, vol. 17 (5), 579-591, 1994
73. Hancock J.W.; Creep cavitation without a vacancy flux; *Metal Sci.*, vol. 10 (9), 319-325, 1976
74. Hanson D., Wheeler M.A.; The Deformation of Metals Under Prolonged Loading, Part I, The Flow and Fracture of Aluminum; *J. Inst. Metals*, vol. 45, 229-257, 1931
75. Hardy J., Pomeau Y., de Pazzis O.; Time evolution of a two-dimensional model system. I. Invariant states and time correlation functions; *J. Math Phys.*, vol. 14 (12), 1746-1759, 1973
76. Hayhurst D.R.; Creep rupture under multi-axial states of stress; *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 20, 381-390, 1972
77. Hayhurst D.R.; CDM mechanisms-based modelling of tertiary creep: ability to predict the life of engineering components; *Arch. Mech.*, 57 (2-3), 71-100, 2005
78. Herring C.; Diffusional Viscosity of a Polycrystalline Solid; *J. Appl. Phys.*, vol. 21 (5), 437-445, 1950
79. Hesselbarth H.W., Gobel I.R.; Simulation of Recrystallization by Cellular Automata; *Acta Metall. Mater.*, vol. 39 (9), 2135-2143, 1991
80. Hoff N.J.; The Necking and the Rupture of Rods Subjected to Constant Tensile Loads; *J. Appl. Mech.*, vol. 20, 105-108, 1953
81. Horstemayer M.F., Lathrop J., Gokhale A.M. i in.; Modeling stress state dependent damage evolution in a cast Al-Si-Mg aluminium alloy; *Theor. and Applied Fracture Mechanics*, 33, 31-47, 2000
82. Hull D., Rimmer D.E.; The growth of grain-boundary voids under stress; *Phil. Mag.*, vol. 4 (42), 673-687, 1959
83. Jakowluk A.; Procesy pełzania i zmęczenia w materiałach; WN-T, Warszawa 1993
84. Janson J., Hult J.; Fracture mechanics and damage mechanics, a combined approach.; *J. de Mec. Appliquee*, vol. 1 (1), 69-84, 1977
85. Jeffries Z.; Grain-size measurements in metals, and importance of such information; *Transactions of the Faraday Society*, vol. 12, 40-53, 1917
86. Kacczanow L.M.; О времени разрушения в условиях ползучести; *Izv. Akad. Nauk. SSR OTN*, no. 8, 26-31, 1958
87. Kaczanow L.M.; Некоторые вопросы разрушения в условиях ползучести; w „Ползучесть и длительная прочность”, Izd. Sib. Otd. AN SSSR, Novosybirsk, 1963
88. Kassner M.E., Hayes T.A.; Creep cavitation in metals; *Int. J. of Plasticity*, vol. 19 (10), 1715-1748, 2003

-
89. Kowalewski Z.; Zjawisko pełzania metali. Eksperyment i modelowanie.; IPPT PAN, Warszawa 2005
 90. Kroc J.; Application of Cellular Automata Simulations to Modelling of Dynamic Recrystallization; *Lecture Notes in Computer Science*, vol. 2329, 773-782, 2002
 91. Kroc J.; Diffusion Controlled Cellular Automaton Performing Mesh Partitioning; *Lecture Notes in Computer Science*, vol. 3305, 2004
 92. Kułakowski K.; Automaty komórkowe; OEN AGH, Kraków 2000
 93. Kumar S., Kurtz S. K.; Properties of a two-dimensional Poisson-Voronoi tessellation: A Monte-Carlo study; *Materials Characterization*, vol. 31 (1), 55-68, 1993
 94. Larson F.R., Miller J.; A time-temperature relationship for rupture and creep stresses; *Trans. ASME*, vol. 74, 765-775, 1952
 95. Leblond J.B., Perrin G., Suquet P.; Exact results and approximate models for porous viscoplastic solids; *Int. J. of Plasticity*, vol. 10 (3), 213-235, 1994
 96. Lemaitre J.; A Course on Damage Mechanics; Springer, Berlin Heidelberg 1996
 97. Lemaitre J., Desmorat R.; Engineering Damage Mechanics; Springer, Berlin Heidelberg New York 2005
 98. Lewis A.C., Geltmacher A.B.; Image-based modeling of the response of experimental 3D microstructures to mechanical loading; *Scr. Materialia*, vol. 55, 81-85, 2006
 99. Liu Y., Baudin T., Penelle R.; Simulation of normal grain growth by cellular automata; *Scr. Materialia*, vol. 34 (11), 1679-1683, 1996
 100. Liu Y., Kageyama Y., Murakami S.; Creep Fracture Modeling by Use of Continuum Damage Variable based on Voronoi Simulation of Grain Boundary Cavity; *Int. J. Mech. Sci.*, vol. 40, 147-158, 1998
 101. Ludwik P.; Elemente der technologischen Mechanik; Springer, Berlin 1908
 102. Madej Ł., Hodgson P.D., Pietrzyk M.; Multi scale analysis of material behavior during deformation processes; w *Foundation of Material Design* ed. Kurzydłowski, K.J., Major B., Zięba, 17-47, 2006
 103. Madej Ł., Hodgson P.D., Żmudzki A. i in.; Multiscale Model for Prediction of Material Behavior during Deformation Process; Proc. COMPLAS VIII, Barcelona, 1-4, 2005
 104. Madej Ł., Mrozek A., Kuś W. i in.; Multi scale modelling, multi-physics phenomena and evolving discontinuities in metal forming; *Computer Methods in Materials Science*; vol. 8 (1), 1-15, 2008
 105. Makarov P.V.; Localized deformation and fracture of polycrystals at mesolevel; *Theor. and Applied Fracture Mechanics*, 33, 23-30, 2000
 106. Malarz K.; Automaty komórkowe nie tylko w fizyce; *Software 2.0*, nr 2, 24-31, 2004
 107. Marek M.; Modelowanie krzepnięcia dendrytycznego w obszarach o ustalonym odbiorze ciepła z wykorzystaniem automatów komórkowych; praca doktorska, Politechnika Częstochowska 2006

108. Margolus N.H.; Physics-like models of computation; *Physica D*, vol. 10 (1-2), 1984, 81-95, 1984
109. Marx V., Reher F. R., Gottstein G.; Simulation of primary recrystallization using a modified three-dimensional cellular automaton; *Acta Mater.*, vol. 47 (4), 1219-1230, 1999
110. Matic P., Geltmacher A.B.; A cellular automaton-based technique for modeling mesoscale damage evolution; *Comp. Mat. Sci.*, vol. 20 (1), 120-141, 2001
111. McClintock F.A.; A criterion for ductile fracture by the growth of holes; *J. Appl. Mech.*, vol. 35 (2), 363-371, 1968
112. McVetty P.G.; Working stresses for high temperature service; *Mech. Eng.*, vol. 56 (3), 149-154, 1934
113. McVetty P.G.; Creep of metals at elevated temperatures - the hyperbolic sine relation between stress and creep rate; *Trans. ASME*, vol. 65 (7), 761-769, 1943
114. Michel B.; Formulation of a new intergranular creep damage model for austenitic stainless steels; *Nuclear Engineering and Design*, vol. 227, 161-174, 2004
115. Miller D.A., Langdon T.G.; Density Measurements as an Assessment of Creep Damage and Cavity Growth; *Metall. Trans. A*, vol. 11A, 955-962, 1980
116. Monkman F.C., Grant N.J.; An Empirical Relationship between Rupture Life and Minimum Creep Rate in Creep-Rupture Test; *Proc. ASTM*, vol. 56, 593-620, 1956
117. Moore E.F.; Machine models of self-reproduction; *Proc. Symp. Appl. Math.* 14, 17-33, 1962
118. Mrozek A., Kuś W., Burczyński T.; Application of the coupled boundary element method with atomic model in the static analysis; *Computer Methods in Materials Science*, vol. 7 (2), 284-288, 2007
119. Murakami S., Ohno N.; A Continuum Theory of Creep and Creep Damage; Creep in Structures, Proc. 3rd IUTAM Symposium, Leicester, England, 8-12 Sept. 1980, 422-444, 1981
120. Nabarro F. R. N.; Deformation of Crystals by the Motion of Single Ions; Report of a Conference on Strength of Solids, Physical Society, London, U.K., 1947, 75-90, 1948
121. Nadai A.; The influence of time upon creep, the hyperbolic sine creep law; Stephen Timoshenko 60th Anniversary Volume, The Macmillan Company, New York, 155-170, 1938
122. Needham N.G., Gladman T.; Nucleation and Growth of Creep Cavities in a Type 347 Steel; *Metal Sci.*, vol. 14 (2), 64-72, 1980
123. Needham N.G., Greenwood G.W.; The Creep of Copper under Superimposed Hydrostatic Pressure; *Metal Sci.*, vol. 9, 258-262, 1975
124. Needham N.G., Wheatley J.E., Greenwood G.W.; The Creep Fracture of Copper and Magnesium; *Acta Metall.*, vol. 23, 23-27, 1975
125. Needleman A., Rice J.R.; Plastic creep flow effects in the diffusive cavitation of grain boundaries; *Acta Metall.*, vol. 28 (10), 1315-1332, 1980

-
126. Needleman A., Tvergaard V.; An analysis of Dynamic Ductile Crack Growth in a Double Edge Cracked Specimen; *Int. J. Fract.*, vol. 49 (1), 41-67, 1991
 127. Niu L., Nakamura M., Futamura A. i in.; Effect of Stress States on Creep Fracture Modes of an Austenitic Steel with High Ductility; *ISIJ International*, vol. 40 (5), 511-518, 2000
 128. Norton F.H.; *The Creep of Steel at High Temperatures*; McGraw-Hill, New York 1929
 129. Odqvist F.K.G.; *Mathematical theory of creep and creep rupture*; Clarendon Press, Oxford 1966
 130. Odqvist F.K.G., Hult J.; Some aspects of creep rupture; *Arkiv for Fysik*, vol. 19, 379-382, 1961
 131. Orr R.L., Sherby O.D., Dorn J. E.; Correlations of rupture data for metals at elevated temperatures; *Trans. ASM*, vol. 46, 113-128, 1954
 132. Ossadnik P.; Cellular Automaton for the Fracture of Elastic Media; *Int. J. of Modern Physics C*, vol. 4 (1), 127-136, 1993
 133. Ostoja-Starzewski M.; *Microstructural Randomness and Scaling in Mechanics of Materials*; Chapman & Hall/CRC, 2007
 134. Othman A.M., Hayhurst D.R.; Multi-axial creep rupture of a model structure using a two parameter material model; *Int. J. Mech. Sci.*, vol. 32 (1), 35-48, 1990
 135. Pamin J.; Gradient plasticity and damage models: a short comparison; *Comp. Mat. Sci.*, vol. 32, 472-479, 2005
 136. Penny R.K., Marriott D.L.; *Design for Creep*; McGraw Hill, London 1971
 137. Perzyna P.; Thermodynamics of rheological materials with internal changes; *J. Mec.*, vol. 10 (3), 391-408, 1971
 138. Pezzee C.F., Dunand D.C.; The impingement effect of an inert, immobile second phase on the recrystallization of a matrix; *Acta Metall. Mater.*, vol. 42 (5), 1509-1524, 1994
 139. Phillips R.; *Crystals, Defects and Microstructures. Modeling Across Scales.*; Cambridge University Press, Cambridge 2001
 140. Piatti G., Kellerer H., Geel C.; Nucleation and Growth of Strain-Induced Voids During the High Temperature Creep of Al-Al₂O₃; *J. Inst. Metals*, vol. 99, 283-286, 1971
 141. Prawoto Y., Aizawa T.; Modeling Creep Damage Based on Real Microstructure; *Practical Failure Analysis*, vol. 2 (6), 68-79, 2002
 142. Psakhie S. G., Horie Y., Ostermeyer G. P. i in.; Movable cellular automata for simulating materials with mesostructure; *Theor. and Applied Fracture Mechanics*, vol. 37 (1-3), 311-334, 2001
 143. Raabe D.; Cellular Automata in Materials Science with Particular Reference to Recrystallization Simulation; *Ann. Review of Materials Research*, vol. 32 (1), 53-76, 2002

144. Raabe D., Becker R.; Coupling of a crystal plasticity finite-element model with a probabilistic cellular automaton for simulating primary static recrystallization in aluminium; *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol 8 (4), 445-462, 2000
145. Rabotnow J.N.; О механизме длительного разрушения ; в Вопросы прочности материалов и конструкций, Izd. AN SSSR, 5-7, 1959
146. Rabotnow J.N.; Ползучесть элементов конструкций; Izd. "Nauka", Moskwa 1966
147. Raj R., Ashby M. F.; Intergranular fracture at elevated temperature; *Acta Metall.*, vol. 23, 653-666, 1975
148. Raj S.V.; Tensile Creep Fracture of Polycrystalline Near-Stoichiometric NiAl; NASA Report TM-2004-213051, 1-19, 2004
149. Rice J.R.; Constraints on the diffusive cavitation of isolated grain boundary facets in creeping polycrystals; *Acta Metall.*, vol. 29 (4), 675-681, 1981
150. Riedel H.; Fracture at High Temperatures; Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York London Paris Tokyo 1987
151. Robinson E.L.; Effect of temperature variation on the long-time rupture strength of steels; *Trans. ASME*, vol. 74, 777-780, 1952
152. Rothman D.H., Zaleski S.; Lattice-gas models of phase separation: interfaces, phase transitions, and multiphase flow; *Rev. Mod. Phys.*, vol. 66 (4), 1417-1479, 1994
153. Rothman D.H., Zaleski S.; Lattice-gas cellular automata: Simple models of complex hydrodynamics; Cambridge University Press, Cambridge 1997
154. Rousselier G.; Finite deformation constitutive relations including ductile fracture damage; w *Three Dimensional Constitutive Relations and Ductile Fracture* ed. S. Nemat-Nasser, Amsterdam, North-Holland Publishing Co, 331-355, 1981
155. Roy G. le, Embury J.D., Edward G. i in.; A Model of Ductile Fracture Based on the Nucleation and Growth of Voids; *Acta Metall.*, vol. 29 (8), 1509-1522, 1981
156. Sandström R., Rui Wu; Origin of the extra low creep ductility of copper without phosphorus; SKB Technical Report TR-07-02, 1-32, 2007
157. Sdobyrev V.P.; Длительная прочность сплава ЭИ-437Б при сложном напряженном состоянии; *Izv. Akad. Nauk. SSR OTN*, no. 4, 92-97, 1958
158. Shterenlikht A.; 3D CAFE modelling of transitional ductile-brittle fracture in steels. PhD Thesis; praca doktorska, University of Sheffield 2003
159. Shterenlikht A., Howard I.C.; Cellular Automata Finite Element (CAFE) Modelling of Transitional Ductile-Brittle Fracture in Steel.; Proc. The 15th European Conference of Fracture, Stockholm, Sweden, August 11-13, 2004
160. Shterenlikht A., Howard I.C.; The CAFE model of fracture - application to a TMCR steel; *Fatigue Fract. Engng. Mater. Struct.*, vol. 29 (9-10), Sep 2006, 770-787, 2006
161. Sklenicka V., Saxl I., Cadek J. i in.; Intercrystalline Creep Fracture of Copper and Some Copper Alloys; *Res Mechanica*, vol. 1 (4), 301-317, 1980
162. Skrzypek J.; Podstawy mechaniki uszkodzeń; Wyd. PK, Kraków 2006

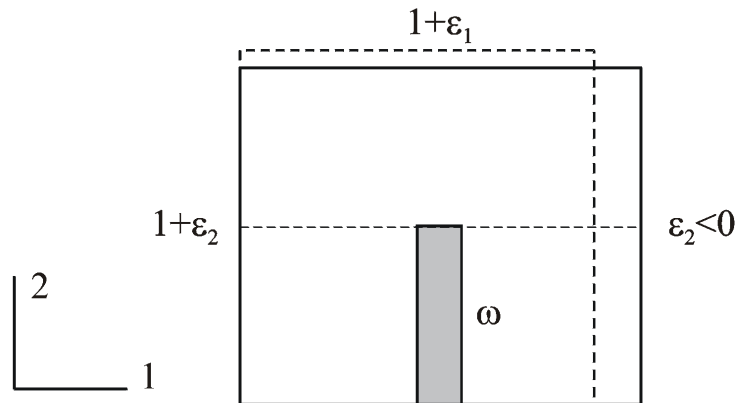
-
163. Skrzypek J., Ganczarski A.; Modeling of Material Damage and Failure of Structures; Springer, Berlin 1999
 164. Speight M.V., Harris J.E.; Kinetics of stress-induced growth of grain-boundary voids; *Metal Sci. J.*, vol. 1, 83-85, 1967
 165. Svyetlichnyy D., Milenin A.; Modelowanie procesów rekrytalizacji za pomocą automatów komórkowych; *Inf. w Technologii Metali*, vol. 5, Proc. XII konf. KomPlasTech, 115-122, Ustroń, 16-19 stycznia 2005, ed. A. Piela, J. Lisok, F. Grosman, 2005
 166. Taplin D.M.R., Whittaker V.N.; The Relationship between grain Size and Intergranular Cavitation in am Aluminium-1 1/4% Manganese Alloy and 70:30 α -Brass; *J. Inst. Metals*, vol. 92, Technical Note, 426-428, 1963-64
 167. Teirlinck D., Ashby M. F., Embury J.D.; Damage accumulation during ductile rupture and development of failure maps; *Advances in fracture research, ICF 6*, vol. 1., 105-125, 1984
 168. Terrier V.; Two-dimensional cellular automata and their neighborhoods; *Theoretical Computer Science*, vol. 312, 203-222, 2004
 169. Tome T.; Spreading of damage in the Domany-Kinzley cellular automaton: a mean-field approach; *Physica A*, vol. 212, 99-109, 1994
 170. Tvergaard V.; Material failure by void coalescence in localized shear bands; DCAMM Report No. 221, 1-26, 1981
 171. Tvergaard V.; On the creep constrained diffusive cavitation of grain boundary facets; *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 32 (5), 373-393, 1984
 172. Varma M.R., Sasikumar R., Pillai S.G.K. i in.; Cellular automaton simulation of microstructure evolution during austenite decomposition under continuous cooling conditions; *Bull. Mater. Sci.*, vol. 24 (3), 305-312, 2001
 173. von Neumann J.; The general and logical theory of automata; w *J. von Neumann, Collected Works*, ed. A. H. Taub, vol. 5, 288-328, 1963
 174. von Neumann J.; Theory of Self-Reproducing Automata; ed. Arthur W. Burks, University of Illinois Press, Urbana, Illinois, 1966
 175. Walczak J., Sieniawski J., Bathe K.J.; On the analysis of creep stability and rupture; *Computers and Structures*, vol. 17 (5-6), 783-792, 1983
 176. Wilson S.A., Henderson J. R., Main I. G.; A cellular automaton fracture model: the influence of heterogeneity in the failure process; *Journal of Structural Geology*, vol. 18 (2-3), 343-348, 1996
 177. Witten T.A., Sander L.M.; Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon; *Phys. Review Letters*, vol. 47 (19), 1400-1403, 1981
 178. Wolfram S.; Statistical mechanics of cellular automata; *Rev. Mod. Phys.*, vol. 55, 601-644, 1983
 179. Wolfram S.; A New Kind of Science; Wolfram Media, Inc, Champaign 2002
 180. Woodford D.A.; A Parametric Approach to Creep Damage; *Metal Sci. J.*, vol. 3, 50-53, 1969

181. Wyrzykowski J. W., Pleszakow E., Sieniawski J.; Odkształcenie i pękanie metali; WN-T, Warszawa 1999
182. Young M.J., Davies C.H.J.; Cellular Automaton Modelling of Precipitate Coarsening; *Scr. Materialia*, vol. 41 (7), 697-701, 1999
183. Zhu S.M., Tjong S.C.; Creep and Rupture Properties of an Austenitic Fe-30Mn-9Al-1C Alloy; *Metall. and Materials Trans. A*, vol. 29A, 1998



Dodatek

D.1 Zmiana objętości w zależności od wartości parametru uszkodzenia



Rys. D1.1. Odkształcenie RVE przez rozciąganie w kierunku 1 z uszkodzeniem ω . Linie przerywane oznaczają element przed deformacją.

Reprezentatywny element objętościowy (RVE) jest rozciągany w kierunku 1. Element zawiera defekt o wymiarze ω redukujący powierzchnię nośną prostopadłą do 1. Odkształcenia po deformacji w kierunkach 1, 2 oznaczono odpowiednio jako ε_1 , ε_2 . Zakładając, że nieuszkodzona część elementu jest nieściśliwa, można zapisać równanie:

$$1 \cdot (1 - \omega) = (1 + \varepsilon_1)(1 + \varepsilon_2 - \omega). \quad (D1.1)$$

Pomijając iloczyn $\varepsilon_1 \varepsilon_2$ jako mały otrzymuje się równanie:

$$\varepsilon_1(1 - \omega) + \varepsilon_2 = 0. \quad (D1.2)$$

Po zróżniczkowaniu

$$\dot{\varepsilon}_1(1 - \omega) - \varepsilon_1 \dot{\omega} + \dot{\varepsilon}_2 = 0, \quad (D1.3)$$

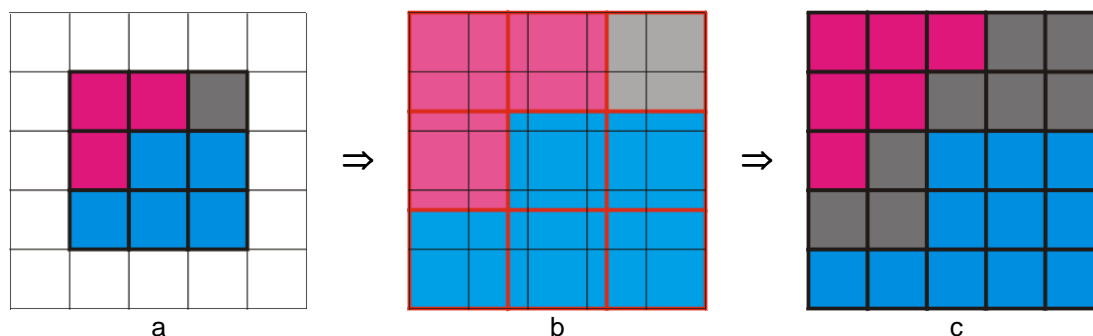
i wykorzystaniu założenia, że prędkość zmiany uszkodzenia jest mała, otrzymuje się następujące równanie:

$$\dot{\varepsilon}_1 + \dot{\varepsilon}_2 = \dot{\varepsilon}_1 \omega. \quad (D1.4)$$

Co można również zapisać jako:

$$\dot{\varepsilon}_1(1 - \omega) + \dot{\varepsilon}_2 = 0. \quad (D1.5)$$

D.2 Przykład działania algorytmu deformacji



Rys. D2.1. Krok odkształcenia dla RVE 3x3 z dwoma ziarnami. Kolorem szarym oznaczono puste komórki, czerwonym - ziarno nr 1, niebieskim - ziarno nr 2.

Założone, że element ma wymiar 3x3 komórki w chwili t_0 . Komórkę środkową oznaczono jako (0,0). Komórka (1,1) jest pusta, komórki (-1,1),(0,1),(-1,0) należą do ziarna numer 1, pozostałe komórki należą do ziarna numer 2 (rys. D2.1a). Następnie RVE jest rozciągnięte o 1 komórkę w obu kierunkach, ponad siatkę 5x5 (rys. D2.1b). Po zrzutowaniu mas należących do poszczególnych ziaren na komórki nowej siatki, liczona jest masa ułamkowa w chwili t_1 . Wyniki dla komórek leżących na granicach ziaren przedstawiono w tabeli D2.1. Pozostałe komórki posiadają masę ułamkową dla g_{\max} równą 1:

Tabela.D2.1. Wyznaczanie wartości progowej. Komórki są uporządkowane według rosnącej wartości $m(x,t,g_{\max})$.

lp.	x	$m(x,t_1,1)$	$m(x,t_1,2)$	$g_{\max}(x,t_1)$	$s^1(x,t_1)$
1	(2,2)	0	0	-	0
2	(1,2)	1/3	0	1	0
2	(2,1)	0	1/3	2	0
2	(1,1)	2/9	1/3	2	0
5	(0,1)	2/3	1/3	1	0
5	(-1,0)	2/3	1/3	1	0
5	(-2,-1)	1/3	2/3	2	0
8	(-1,-1)	2/9	7/9	2	0
9	(-1,1)	8/9	1/9	1	1

W przykładzie $M_0=8$, więc $E(t_1)=25-8=17$. Jeżeli założymy, że $\alpha_{\text{all}}=0.5$ to $E^1(t_1)=\text{int}(0.5 \cdot 17)=8$. Z tabeli D2.1 odczytujemy, że wartość progowa $m_{\text{th}}=7/9$. Wynik działania kroku deformacji został przedstawiony na rys. D2.1c.

D.3 Skala czasowa i przestrzenna automatu

Aby dla dwóch automatów o różnej liczbie komórek wzdłuż początkowego rozmiaru RVE oznaczonych przez N_1 , N_2 , odpowiednio, oraz różnej liczbie zarodków ziaren oznaczonych przez n_1 , n_2 wyznaczyć relację pomiędzy skalami czasowymi i przestrzennymi należy podać stosunek pomiędzy Δt_1 i Δt_2 , Δx_1 i Δx_2 oraz T_1 i T_2 , gdzie Δt_1 , Δt_2 – długość kroku czasowego dla automatu 1 i 2, Δx_1 , Δx_2 – liniowy wymiar komórki automatu 1 i 2, T_1 , T_2 – liczba iteracji pomiędzy krokami odkształcenia automatu 1 i 2.

Zakładając równe prędkości odkształcenia określone przez równanie (3.28) otrzymuje się zależność:

$$\frac{2}{N_1 T_1 \Delta t_1} = \frac{2}{N_2 T_2 \Delta t_2}. \quad (D3.1)$$

Średnia wielkość ziaren jest określone równaniem (3.22), dlatego równość średnic ziaren obu automatów zapisana jest wzorem:

$$\frac{N_1}{\sqrt{n_1}} \Delta x_1 = \frac{N_2}{\sqrt{n_2}} \Delta x_2. \quad (D3.2)$$

Trzecim warunkiem jest równość stałych dyfuzji, określonej równaniem (3.57):

$$\frac{\Delta x_1^2}{\Delta t_1} = \frac{\Delta x_2^2}{\Delta t_2}. \quad (D3.3)$$

Wykorzystując warunki (D3.1), (D3.2), (D3.3) otrzymuje się poszukiwane zależności pomiędzy parametrami automatów:

$$\frac{\Delta x_2}{\Delta x_1} = \frac{N_1}{N_2} \sqrt{\frac{n_2}{n_1}}, \quad (D3.4)$$

$$\frac{\Delta t_2}{\Delta t_1} = \frac{\Delta x_2^2}{\Delta x_1^2} = \frac{N_1^2 n_2}{N_2^2 n_1}, \quad (D3.5)$$

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{N_1}{N_2} \frac{\Delta t_1}{\Delta t_2} = \frac{N_1}{N_2} \frac{n_1}{n_2}. \quad (D3.6)$$



Szczegółowy spis treści

Ważniejsze oznaczenia	4
1 Wstęp. Tematyka i cel pracy.....	9
2 Opis rozwoju uszkodzeń w warunkach pełzania	11
2.1 Poziom makroskopowy.....	11
2.1.1 Obserwacje doświadczalne odkształceń i czasu do zniszczenia.....	11
2.1.1.1 Krzywa pełzania	11
2.1.1.2 Charakterystyka zniszczenia.....	12
2.1.1.3 Stała siła a stałe naprężenie.....	12
2.1.2 Reguły empiryczne	13
2.1.2.1 Równanie Monkmana-Granta.....	13
2.1.2.2 Parametryczne metody szacowania czasu do zniszczenia.....	14
2.1.2.3 Reguła sumacji uszkodzeń.....	15
2.1.3 Opis fenomenologiczny	16
2.1.3.1 Opis deformacji pełzania w jednoosiowym stanie naprężenia	16
2.1.3.2 Opis zniszczenia w jednoosiowym stanie naprężenia	17
2.1.4 Kontynuualna mechanika uszkodzeń.....	21
2.1.4.1 Równania konstytutywne.....	21
2.1.4.2 Homogenizacja uszkodzeń.....	24
2.1.4.3 Zastosowanie metod numerycznych.....	25
2.2 Poziom mikroskopowy	27
2.2.1 Obserwacje i mechanizmy deformacji.....	27
2.2.1.1 Zmiany w czasie	27
2.2.1.2 Zmiany w przestrzeni parametrów naprężenia i temperatury (mapy deformacji).....	27
2.2.2 Obserwacje doświadczalne zniszczenia.....	29
2.2.2.1 Obserwacje przełomów zniszczenia (mapy zniszczenia)	29
2.2.2.2 Zależność od wielkości ziaren	31
2.2.3 Mechanizmy rozwoju uszkodzeń.....	32
2.2.3.1 Zniszczenie transkrystaliczne	32
2.2.3.2 Zniszczenie międzykrystaliczne	33
2.2.3.3 Zniszczenie mieszane	37
2.2.3.4 Formowanie i wzrost makroszczelin	38
2.2.4 Modele mikromechaniczne.....	38
2.2.4.1 Mikromechaniczne miary uszkodzenia.....	38
2.2.4.2 Modele nukleacji pustek	39
2.2.4.3 Modele wzrostu pustek	40
2.2.4.4 Fenomenologiczne modele zmiany objętości pustek.....	44
2.2.4.5 Kryteria zniszczenia.....	46
2.2.4.6 Wpływ mechanizmów na czas do zniszczenia i uszkodzenie przy zniszczeniu.....	47
3 Zastosowanie automatów komórkowych.....	49
3.1 O automatach komórkowych.....	49
3.1.1 Historia.....	49
3.1.2 Podstawowe definicje	50
3.1.2.1 Prawa zachowania.....	51
3.1.2.2 Automaty probabilistyczne	51
3.1.2.3 Gaz sieciowy	52

3.1.3	Zastosowania w materiałoznawstwie i mechanice materiałów	52
3.1.3.1	Rekrytalizacja	53
3.1.3.2	Odkształcenia plastyczne	54
3.1.4	Zastosowania w opisie rozwoju uszkodzeń	55
3.1.4.1	Model Matica-Geltmachera.....	55
3.1.4.2	Model Howarda-Shterenlikhta	59
3.2	Zastosowany w pracy automat komórkowy	61
3.3	Modelowanie struktury materiałów	63
3.3.1	Dyskretna teselacja Voronoi'a	63
3.3.1.1	Wpływ rodzaju otoczenia i rozkładu punktów zarodkowych na generowaną strukturę	64
3.3.1.2	Dobór podstawowych parametrów struktury	66
3.3.2	Uszkodzenie początkowe	66
3.3.3	Wtrącenia	67
3.3.4	Lista parametrów automatu opisujących strukturę.....	68
3.4	Modelowanie procesów rozwoju uszkodzeń	69
3.4.1	Założenia	69
3.4.1.1	Odkształcenie	69
3.4.1.2	Prawo zachowania masy	70
3.4.1.3	Nieściśliwość (zewnątrzna i wewnętrzną)	72
3.4.1.4	Zmiana gęstości.....	73
3.4.2	Rozwój uszkodzeń.....	75
3.4.2.1	Krok odkształcenia	75
3.4.2.2	Krok dyfuzji	76
3.4.2.3	Krok lokalnego rozwoju uszkodzenia.....	78
3.4.3	Miara uszkodzenia i stan zniszczenia RVE.....	79
3.4.4	Lista parametrów opisujących proces	79
3.5	Ograniczenia zastosowanego modelowania CA.....	81
4	Symulacje rozwoju uszkodzeń w materiałach polikrystalicznych.....	85
4.1	Wzrost pustek.....	85
4.1.1	Odkształceniowy wzrost pojedynczej pustki	85
4.1.1.1	Reguła 00xx0x.....	85
4.1.1.2	Reguła 01xx0x.....	86
4.1.1.3	Reguła 02xx0x.....	88
4.1.1.4	Reguła 10xx0x.....	88
4.1.2	Dyfuzyjny wzrost pustek.....	90
4.1.2.1	Pojedyncza pustka wewnątrz ziarna.....	90
4.1.2.2	Rozwój pustek na granicy dwóch ziaren	92
4.1.3	Mieszany dyfuzyjno-odkształceniowy wzrost pustek.....	95
4.2	Zniszczenie międzykrystaliczne.....	98
4.2.1	Element o stałej masie i objętości	98
4.2.2	Element o stałej objętości i malejącej masie	100
4.2.2.1	Reguła 010011.....	100
4.2.2.2	Reguła 010010.....	110
4.2.2.3	Reguła 010001.....	111
4.2.2.4	Reguła 010101.....	112
4.2.2.5	Reguła 020011.....	114
4.2.3	Element o stałej masie i rosnącej objętości	116
4.3	Zniszczenie transkrystaliczne.....	119
4.3.1	Element o stałej masie i objętości	119

4.3.2	Element o stałej objętości i malejącej masie	120
4.3.2.1	Reguła 01111x	120
4.3.2.2	Reguła 02111x	121
4.3.2.3	Reguła 10111x	123
4.4	Zniszczenie mieszane	125
4.4.1	Odkształcenie przy zniszczeniu	125
4.4.2	Prędkość wzrostu uszkodzenia	127
4.5	Podsumowanie użytych algorytmów.....	129
4.5.1	Mechanizm zniszczenia	129
4.5.2	Miara uszkodzenia	130
5	Model wieloskalowy rozwoju uszkodzeń CAFE	131
5.1	Budowa modelu.....	131
5.1.1	Model odkształcenia (FEM)	131
5.1.2	Model uszkodzenia (CA)	132
5.1.3	Wymiana danych między skalami	133
5.1.4	Geometria zadania	133
5.2	Symulacja doświadczenia dla miedzi.....	135
5.2.1	Opis doświadczenia	135
5.2.2	Równania mikromechaniczne.....	137
5.2.3	Wyniki symulacji CA dla temperatury 723 K	138
5.2.4	Wyniki symulacji CA dla temperatury 823 K – model niesprężony ..	140
5.2.5	Wyniki symulacji CA dla temperatury 823 K – model sprężony	142
5.3	Symulacja doświadczenia dla żelaza	147
5.3.1	Opis doświadczenia	147
5.3.2	Równania mikromechaniczne.....	148
5.3.3	Wyniki symulacji CA – model kruchy	148
5.3.4	Wyniki symulacji CA – model mieszany	150
6	Wnioski	153
7	Literatura	157
Dodatek	169	
D.1	Zmiana objętości w zależności od wartości parametru uszkodzenia.....	169
D.2	Przykład działania algorytmu deformacji	170
D.3	Skala czasowa i przestrzenna automatu.....	171
Szczegółowy spis treści		173