

Modelowanie NiAl przy użyciu Metody Deformowalnych Elementów Dyskretnych

Paweł Hołobut, Jerzy Rojek and Szymon Nosewicz

Instytut Podstawowych Problemów Techniki Polskiej Akademii Nauk, ul. Pawińskiego 5B, Warszawa

NiAl jest intermetalem o wielu korzystnych właściwościach fizycznych, czyniących go atrakcyjnym materiałem do zastosowań przemysłowych. Kryształ NiAl ma sieć krystalograficzną regularną centrowaną przestrzennie (BCC) i wynikające z niej właściwości mechaniczne o symetrii kubicznej. Celem niniejszej pracy jest wykorzystanie Metody Elementów Dyskretnych (DEM) do modelowania właściwości sprężystych polikryształów NiAl, otrzymanych w szczególności metodą spiekania proszków, a w dalszej perspektywie także ich uszkodzeń. W porównaniu z Metodą Elementów Skończonych (MES), DEM jest lepiej przystosowany do modelowania procesów nieciągłych, takich jak pękanie, ale może też być bardziej wymagający obliczeniowo i mniej dokładny w innych zastosowaniach.

Model DEM ciała stałego bazuje na gęstym upakowaniu najczęściej sferycznych cząstek tej samej lub różnej wielkości, połączonych ze sobą siłami kohezji. Efektywne właściwości układu są regulowane poprzez przypisanie połączeniom między cząstkami odpowiednich sztywności. Pojedynczy kryształ o sieci regularnej można modelować za pomocą gęstego losowego upakowania cząstek lub upakowania regularnego, stosując w obu przypadkach rozkład sztywności połączeń o symetrii kubicznej. W niniejszej pracy zastosowano drugie podejście, wykorzystując prosty regularny (SC) układ odkształcalnych cząstek DEM (DDEM). Układ ten jest w stanie odwzorować dowolny zestaw parametrów sprężystych kryształów o sieci regularnej, w tym charakteryzującego się dużą anizotropią NiAl.

Przejęcie od monokryształów do polikryształu odbywa się poprzez podział reprezentatywnej objętości na obszary ziaren i wypełnienie ich układami SC cząstek DDEM ustawionymi pod różnymi kątami, odpowiadającymi np. orientacjom kryształów uzyskanym w testach EBSD. Ważnym aspektem modelowania jest tu zapewnienie odpowiednich warunków sąsiedztwa na granicach ziaren, gdzie układy SC spotykają się pod różnymi kątami. W pracy przedstawiono i omówiono wyniki symulacji dla NiAl w zakresie liniowo-sprężystym. Planowane są dalsze ulepszenia modelu, częściowo w związku z zamiarem symulacji większych odkształceń prowadzących do pękania na granicach ziaren.

PODZIĘKOWANIE: Praca została wsparta finansowo przez Narodowe Centrum Nauki w ramach Umowy Grantowej OPUS 2020/37/B/ST8/03907 na projekt "Wieloskalowa analiza deformacji oraz zniszczenia nowych hybrydowych kompozytów na podstawie metalowej. Badania doświadczalne oraz modelowanie numeryczne".

Modeling of NiAl using the Deformable Discrete Element Method

NiAl is an intermetallic with many advantageous physical properties which make it an attractive material for industrial applications. NiAl crystals have the body-centered cubic (BCC) crystal structure and the resulting mechanical properties of cubic symmetry. The aim of the present work is to use the Discrete Element Method (DEM) to model the elastic behavior of NiAl polycrystals, in particular those obtained by sintering, and prospectively also their damage. Compared to the Finite Element Method (FEM), DEM is better suited to handling discontinuous phenomena like fracture, but may be more computationally intensive and less accurate in other applications.

A DEM model of a solid consists of a dense packing of usually spherical particles of the same or different sizes, bound together by cohesion. The effective properties of the assembly are tuned by assigning appropriate stiffness parameters to the inter-particle bonds. A single cubic crystal can be modeled using either a random-dense packing of DEM particles or a cubic packing, both with a cubic-symmetric assignment of stiffness parameters. We follow the second approach, using a simple cubic (SC) arrangement of deformable DEM (DDEM) particles. This pattern can represent any set of elastic parameters of cubic crystals, including those of NiAl with its high anisotropy.

The transition from single crystals to the polycrystal is made by dividing a representative volume into grain regions and filling them with SC patterns of DDEM particles rotated by different angles, corresponding e.g. to crystal orientations obtained in EBSD tests. An important aspect of the modeling procedure is ensuring suitable adjacency conditions at the grain boundaries, where the SC patterns meet at different angles. The results of simulations for NiAl in the linear-elastic regime are presented and discussed. Further improvements to the model are planned, partly in connection with prospective simulations of larger deformations leading to grain-boundary fracture.

ACKNOWLEDGEMENT: This work was financially supported by the National Science Centre, Poland, under Grant Agreement No. OPUS 2020/37/B/ST8/03907 for the project "Multiscale investigation of deformation and damage behavior of novel hybrid metal matrix composites. Experimental studies and numerical modeling".