

Stopy z pamięcią kształtu (shape memory alloys, SMA) wykazują niezwykle właściwości, takie jak odzysk kształtu i pseudosprężystość. Efekty te związane są z martenzytyczną przemianą fazową indukowaną obciążeniem mechanicznym lub zmianami temperatury. Przemiana martenzytyczna zachodzi poprzez tworzenie i ewolucję złożonych mikrostruktur. Modelowanie ewolucji mikrostruktury jest więc niezbędnym elementem opisu zachowania i właściwości SMA.

Dzięki swoim właściwościom stopy z pamięcią kształtu mają znaczny potencjał aplikacyjny w różnych dziedzinach techniki, np. w inżynierii medycznej. Potencjał ten jest już częściowo wykorzystywany w praktyce. Potrzeba opracowania wiarygodnych i efektywnych modeli SMA tak w skali mikro jak i w skali makro jest więc oczywista. Modelowanie w skali mikro pozwala uzyskać wgląd w mechanizmy deformacji w tej skali oraz wspomaga wytwarzanie materiałów o ulepszonych właściwościach, na przykład, o podwyższonej wytrzymałości na zmęczenie materiałowe i funkcjonalne. Wyniki modelowania mikromechanicznego są również pomocne przy konstruowaniu i kalibracji modeli makroskopowych. Modele makroskopowe, jako znacznie bardziej efektywne, są wykorzystywane, na przykład, przy projektowaniu i optymalizacji urządzeń wykorzystujących SMA.

Metoda pola fazowego (phase-field method) stanowi efektywne narzędzie modelowania i opisu przemian fazowych i ewolucji mikrostruktury, w tym przemian i mikrostruktur martenzytycznych. Istotą metody pola fazowego jest przybliżenie ostrych granic fazowych przez granice rozmyte. W tym celu wprowadza się tak zwany parametr porządku, który zmienia się w sposób ciągły pomiędzy wartościami odpowiadającymi poszczególnym fazom, a pośrednie wartości tego parametru odpowiadają rozmytej powierzchni międzyfazowej o odpowiednio interpolowanych właściwościach. Takie podejście prowadzi do efektywnych modeli obliczeniowych, w których powstawanie i ewolucja mikrostruktury modelowane są przy użyciu ustalonej siatki obliczeniowej. Nie ma więc konieczności śledzenia poszczególnych powierzchni międzyfazowych i dopasowywania siatki do zmieniającej się mikrostruktury.

Celem badań planowanych w ramach niniejszego projektu jest opracowanie nowego modelu ewolucji mikrostruktur martenzytycznych bazującego na metodzie pola fazowego. Analiza dotychczasowego stanu wiedzy wskazuje, że istniejące modele mają szereg braków, a celem planowanych badań jest opracowanie ulepszanego modelu nie wykazującego tych wad. Dotyczy to w szczególności jednego z założeń będących podstawą zdecydowanej większości modeli, mianowicie przyjęcia uproszczonej liniowej kinematyki deformacji w ramach tzw. teorii małych odkształceń. Odejście od tego założenia i uwzględnienie ścisłej nieliniowej kinematyki skończonych odkształceń wprowadza istotne efekty jakościowe i ilościowe i stanowi ważny wyróżnik planowanych badań. Innym istotnym nowatorskim elementem badań będzie zastosowanie prawa ewolucji mikrostruktury uwzględniającego efekty nie rozpatrywane dotąd w kontekście metody pola fazowego (dyssypacja niezależna od skali czasu), co wprowadzi do modelowania ewolucji mikrostruktury jakościowo nowe efekty.

Istotnym elementem projektu będzie komputerowa implementacja opracowanych modeli (z wykorzystaniem metody elementów skończonych) i symulacje ewolucji mikrostruktury w stopach z pamięcią kształtu. Uwzględnienie nowatorskich aspektów teoretycznych, tych wspomnianych powyżej i tych pominiętych w niniejszym opisie, pozwoli na zbadanie efektów, które nie mogły być analizowane przy użyciu istniejących sformułowań i metod obliczeniowych zazwyczaj stosowanych w połączeniu z metodą pola fazowego.

Implementacja komputerowa prowadzona będzie z wykorzystaniem systemu AceGen – zaawansowanego systemu do automatycznej generacji kodu numerycznego. System ten łączy możliwości obliczeń symbolicznych dostępne w programie Mathematica z techniką automatycznego różniczkowania (automatic differentiation, AD) oraz dodatkowymi narzędziami do optymalizacji kodu numerycznego. Użycie techniki AD pozwala na automatyzację szeregu czasochłonnych ale czysto technicznych kroków niezbędnych w przypadku tradycyjnej implementacji modeli w metodzie elementów skończonych, np. wyprowadzania i programowania tzw. konsystentnej macierzy stycznej. Dzięki zastosowaniu systemu AceGen implementacja komputerowa przebiega sprawnie, uzyskiwany kod numeryczny jest efektywny obliczeniowo, a dzięki dokładnej linearyzacji uzyskuje się optymalną kwadratową zbieżność iteracyjnej metody Newtona.

Podsumowując, realizacja planowanych zadań badawczych przyczyni się do rozwinięcia teorii przemian fazowych, w tym metody pola fazowego (opracowanie nowych modeli i sformułowań metody pola fazowego), metod obliczeniowych (nowe algorytmy i implementacja w metodzie elementów skończonych) oraz mechaniki i mikromechaniki przemian martenzytycznych w stopach z pamięcią kształtu (symulacje komputerowe i analiza ewolucji mikrostruktur martenzytycznych, w tym analiza efektów skali). Są to więc prace teoretyczne o charakterze badań podstawowych. Warto zauważyć, że martenzytyczne przemiany fazowe i zjawiska pokrewne występują także w innych systemach materiałowych, tak więc uzyskane wyniki znajdą szersze zastosowanie.