

Ogólnym celem projektu jest stworzenie kompletnego i efektywnego modelu numerycznego metody elementów skończonych (MES) pozwalającego na analizę zagadnień kontaktowych materiałów wysoce sztywnych.

Metoda elementów skończonych jest uznawana za przybliżony sposób rozwiązywania układów równań różniczkowych cząstkowych za pomocą podziału obszaru (modelu fizycznego ciała) na podobszary (elementy) z wyznaczonymi punktami nazywanymi węzłami. W obszarze każdego elementu niewiadome są interpolowane za pomocą funkcji interpolacyjnych, których wartości określone są na węzłach elementu. Sama metoda polega na sprowadzeniu układu równań różniczkowych do układu równań algebraicznych, w którym poszukiwanymi niewiadomymi są wartości wielkości (zazwyczaj przemieszczenia) w węzłach. Z powodu swojej uniwersalności metoda elementów skończonych może być wykorzystana do rozwiązywania szerokiej klasy problemów fizycznych, w tym mechaniki ciała stałego będącej przedmiotem projektu badawczego.

Materiałami wysoce sztywnymi lub materiałami gradientowymi nazywamy takie materiały, których zachowanie zależy nie tylko od pochodnych pierwszego rzędu przemieszczenia jak w klasycznych materiałach znanych z mechaniki ośrodków ciągłych, lecz także od niewiadomych będących funkcjami pochodnych wyższych rzędów, co sprawia, że zachowanie materiału przestaje mieć charakter lokalny. To oznacza, że odpowiedź materiału w danym punkcie zależy nie tylko od zmiennych stanu (np. odkształcenie) w tym punkcie, ale również od wartości tych zmiennych w otoczeniu tego punktu. Przykładami takich modeli materiałów są: sprężystość drugiego rzędu, gdzie odpowiedź materiału zależy od pochodnych drugiego rzędu przemieszczenia, oraz gradientowa plastyczność kryształów, w której odpowiedź materiału zależy od powstałych defektów w sieci krystalograficznej (dyslokacji). Efekt nielokalnej odpowiedzi w ciałach o rozmiarach rzędu co najmniej centymetrów nie ma większego znaczenia, jednak wraz ze zmniejszeniem się wymiarów ciała do rzędu mikro- i nanometrów efekt ten zaczyna grać istotną rolę. W klasycznym sformułowaniu MES wymaga to nałożenia dodatkowych wymagań na funkcje interpolujące przemieszczenia, które muszą mieć pierwsze pochodne ciągłe przez granice elementów, inaczej mówiąc pole pochodnych pierwszego rzędu musi być ciągłe w całym obszarze. Istnieją specjalne elementy, które spełniają ten warunek jednak w klasycznym sformułowaniu przemieszczeniowym MES są mało wydajne. Jednym ze sposobów ominięcia tego problemu jest zastosowanie niezależnej interpolacji przemieszczenia i niewiadomych będących funkcjami pochodnych pierwszego rzędu przemieszczenia, a następnie na uzgodnieniu wartości niewiadomych wyższego rzędu interpolowanych z wartościami obliczonymi z przemieszczenia. Dzięki temu mogą zostać użyte dobrze zachowujące się funkcje interpolujące bez ciągłych pochodnych w całym obszarze. Wyroźnią się trzy główne metody łaczenia wymienionych pól ze sobą: metoda funkcji kary, mnożników Lagrange'a oraz zastosowanie równania różniczkowego Helmholtza. W związku z interpolacją niewiadomych będących funkcjami pochodnych przemieszczenia pojawiają się warunki brzegowe, które nie występują w klasycznych modelach materiałów. W ramach projektu planowane jest zaimplementowanie w MES kilku wariantów elementów skończonych dla materiałów wysoce sztywnych, które będą zróbnicowane pod względem zastosowanych kombinacji stopni wielomianów interpolacyjnych dla obu typów niewiadomych oraz pod względem metod łaczenia interpolowanych pól ze sobą. Zostanie przeprowadzona analiza porównawcza w celu wybrania optymalnych elementów z punktu widzenia dokładności rozwiązania, zbieżności i kosztów obliczeniowych. W szczególności przeanalizowana zostanie przydatność poszczególnych sformułowań w zagadnieniach kontaktowych.

Klasyczne zagadnienie kontaktu dwóch odkształcalnych ciał (dla uproszczenia wywodu przyjmijmy, że bez tarcia) polega na znalezieniu przy zadanych warunkach brzegowych (siłach, przemieszczeniach) pola przemieszczenia i wzajemnych oddziaływań (reakcji, ciśnień kontaktowych) spełniających dwa zasadnicze warunki: ciała nie mogą się przenikać oraz ciała nie sklejać się ze sobą, to znaczy, że po kontakcie dwóch ciał może nastąpić separacja. W MES tworzy się specjalne elementy kontaktowe, których głównym zadaniem jest rozwiązanie tego zagadnienia to znaczy spełnienie nierównościowych ograniczeń definiujących problem kontaktu. Dla materiałów klasycznych („pierwszego rzędu”) zagadnienie to zostało bardzo dobrze zbadane przez wielu badaczy. Jednak dla materiałów wysoce sztywnych, zdefiniowanych pokrótce w poprzednim akapicie, nie ma takiego sformułowania w literaturze, które uzależniałoby niewiadome wyższego rzędu od ciśnień kontaktowych.

Głównym celem projektu jest opracowanie sformułowania teoretycznego kontaktu ciał opisywanych modelami wysoce sztywnymi i odpowiadających im elementów kontaktowych dwu- i trójwymiarowych, które oprócz klasycznego sformułowania kontaktowego przemieszczenia i reakcja uzależniają ograniczenie swobody niewiadomych wyższego rzędu od ciśnień kontaktowych w strefie kontaktu.

Opracowany model numeryczny zostanie wykorzystany do symulacji zadań kontaktowych ciał opisywanych modelami wysoce sztywnymi w celu analizy efektów skali, a otrzymane wyniki zostaną porównane z danymi eksperymentalnymi oraz rozwiązaniami analitycznymi dostępnymi w literaturze.

Projekt zostanie zrealizowany przy użyciu zaawansowanych narzędzi do generacji i optymalizacji kodu metody elementów skończonych wbudowanych w pakiecie `\emph{AceGen/AceFEM}`, łączących w sobie zalety obliczeń symbolicznych systemu `\emph{Mathematica}` i technik automatycznego różniczkowania. Narzędzia te pozwalają w sposób efektywny uzyskać dowolnie skomplikowany element skończony zarówno pod względem opisu kinematyki jak i równań fizycznych (konstrytywnych) rządzących zachowaniem elementu skończonego. Stworzony model numeryczny zostanie wykorzystany do symulacji złożonych zagadnień kontaktowych w małych skalach wymiarowych materiałów opisywanych modelami sprężystości drugiego rzędu oraz gradientowej plastyczności kryształów.

Opracowanie proponowanego sformułowania zagadnienia kontaktowego, które umożliwia ograniczenie stopni swobody wyższych rzędów w zależności od ciśnień kontaktowych pomoże w lepszym zrozumieniu mikromechaniki kontaktu ciał opisywanych modelami wysoce sztywnymi. Możliwe będzie wykorzystanie opracowanego modelu teoretycznego i jego implementacji numerycznej w zastosowaniach praktycznych, a także przez innych badaczy w celu analizy zagadnień kontaktowych ciał opisywanych modelami wyższych rzędów, w tym wpływu warunków brzegowych na rozwiązanie.

W szerszej perspektywie opracowany model pozwoli na nowo spojrzeć na efekty skali obserwowanych w próbach mikro- i nanoindentacji. Ponadto może przyczynić się do lepszego zrozumienia mikromechaniki polikryształów na granicach ziaren podczas dynamicznych odkształceń plastycznych.