

Syntaktyczne, wieloskalowe modele obliczeniowe o wysokiej wydajności dla materiałów z ograniczoną zdolnością do odkształceń plastycznych

Przeważająca część gałęzi przemysłu Unii Europejskiej wykorzystuje zaawansowane technologie materiałowe, w tym stale wielofazowe, stopy tytanu czy stopy magnezu, znajdujące zastosowanie w przemyśle motoryzacyjnym, lotniczym i energetycznym. Wymienione materiały należą do **grupy materiałów o ograniczonej zdolności do odkształceń plastycznych, charakteryzujących się złożonym mechanizmem odkształcenia**. Teoretyczny opis zjawisk zachodzących podczas odkształcania materiałów wielofazowych jest dostępny w naukowej literaturze. Niemniej brak w literaturze modeli matematycznych, dla których można opracować algorytmy do bezpośredniej implementacji i włączyć je do istniejącego oprogramowania numerycznego w skali makro z uwzględnieniem identyfikacji parametrów tych modeli na podstawie wyników prób laboratoryjnych i wyników modelowania numerycznego. Stąd cele projektu przedstawione poniżej.

Głównym celem projektu jest opracowanie i implementacja wysokiej wydajności pakietu obliczeniowego do efektywnej identyfikacji syntaktycznych modeli materiałów. Pakiet, obok biblioteki zawierającej modele materiałów, będzie zawierał moduł identyfikacji oraz moduł analizy wrażliwości, pozwalający na redukcję modeli, by możliwe było ich zastosowanie w praktycznych aplikacjach. W szczególności narzędzie będzie dedykowane, i zostanie zastosowane, do identyfikacji i walidacji wieloskalowych modeli materiałów o ograniczonej zdolności do odkształceń plastycznych. Modelowanie numeryczne tych materiałów musi uwzględniać zjawiska zachodzące w mikrostrukturze, dlatego kolejnym celem projektu jest opracowanie modeli matematycznych tych zjawisk i algorytmów do bezpośredniej implementacji. Tak powstała biblioteka numeryczna modeli materiałów w skali mikro będzie mogła zostać włączona do oprogramowania symulującego odkształcanie plastyczne w skali makro, co pozwoli na dokładną i pełną, trójwymiarową analizę rozpatrywanego procesu odkształcania.

W ramach projektu opracowana zostanie również **baza modeli wieloskalowych** o różnym stopniu złożoności obliczeniowej dla badanych materiałów wraz z syntaktyką do tworzenia modeli poprawnych w aspekcie fizyki zjawisk zachodzących podczas odkształcania. Baza będzie umożliwiała dobór modelu w zależności od celu prowadzonych badań: modele o mniejszej złożoności z przeznaczeniem dla modelowania zastosowań przemysłowych, modele wymagające długich czasów obliczeń dla celów poznawczo-naukowych wspomagających zrozumienie mechanizmów i zjawisk zachodzących podczas przetwórstwa stopów metali.

Dla wybranych w projekcie materiałów opracowane i zaimplementowane modele zostaną zidentyfikowane na podstawie zmodyfikowanej metody odwrotnej wykorzystującej wieloskalowy model numeryczny i wyniki prób laboratoryjnych oraz poddane walidacji w oparciu o przeprowadzone obliczenia numeryczne i porównanie wyników z wynikami fizycznych symulacji.

Opracowana i zaimplementowana metoda identyfikacji parametrów modeli pozwoli zarówno na identyfikację parametrów modeli wieloskalowych dla wybranych w projekcie materiałów, jak również będzie mogła być zastosowana dla innych materiałów oraz wykorzystana do identyfikacji parametrów nowych modeli wieloskalowych. Projektowanie nowych modeli możliwe będzie w oparciu o zdefiniowaną syntaktykę. Innowacyjnym aspektem projektu będzie zdefiniowanie syntaktyki oraz włączenie modelu numerycznego opisującego różne mechanizmy odkształcenia do metody odwrotnej (identyfikacji parametrów) opartej na próbach plastometrycznych i połączenie jej ze składem chemicznym materiału oraz obecnością różnego typu składników strukturalnych. Zaproponowane rozwiązanie przyczyni się do lepszego poznania mechanizmów odkształcania, w szczególności tam, gdzie badania laboratoryjne są niemożliwe bądź trudne do realizacji lub koszty ich wykonania są bardzo wysokie. Ograniczenie badań laboratoryjnych do niezbędnego minimum korzystnie wpłynie na środowisko naturalne, a dogłębna analiza zjawisk zachodzących w badanych materiałach przyczyni się do lepszego ich wykorzystania przy planowaniu nowych technologii, korzystnie wpływając na rozwój cywilizacyjny i ekonomiczny społeczeństwa.

Najważniejszym widocznym osiągnięciem projektu będzie znaczne poszerzenie stanu wiedzy na temat zrozumienia mechanizmów odkształcenia w materiałach o ograniczonej zdolności do odkształceń plastycznych wybranych do badań oraz wysoko wydajny pakiet obliczeniowy do symulacji procesów odkształcania tych materiałów. To z kolei będzie milowym krokiem w kierunku wprowadzania nowych, zaawansowanych materiałów, mogących zrewolucjonizować przemysł motoryzacyjny, lotniczy i energetyczny.