

Własności użytkowe materiałów inżynierskich m.in. własności fizyczne, mechaniczne, cieplne, uzależnione są bezpośrednio od mikrostruktury, która jest wynikiem wielu procesów zachodzących w materiale podczas przeróbki plastycznej lub termomechanicznej. Optymalizację procesu ze względu na warunki technologiczne i końcową mikrostrukturę można zrealizować z wykorzystaniem różnych metod modelowania, w tym coraz częściej z zastosowaniem metody automatów komórkowych (CA) i siatek Boltzmanna (LBM). Biorąc pod uwagę coraz większe możliwości sprzętowe i definiowanie w modelach większej liczby parametrów, które przybliżają modelowanie do rzeczywistych warunków, konstruowane są modele trójwymiarowe. Wykorzystanie metody LBM i frontalnych automatów komórkowych (FCA), będących modyfikacją klasycznych automatów komórkowych (CA) umożliwia z kolei zauważalne przyspieszenie obliczeń bez utraty dokładności w opisie zjawisk zachodzących w mikrostrukturze.

Podstawowym celem projektu są kompleksowe badania eksperymentalne i teoretyczne dyfuzyjnych przemian fazowych w stanie stałym, zachodzących przy niewielkich prędkościach chłodzenia (przemiana austenitu w ferryt i perlit) oraz podczas nagrzewania i wygrzewania (przemiana struktury ferrytyczno-perlitycznej w austenit, wyrównanie na drodze dyfuzji zawartości węgla w austenicie i rozrost ziaren austenitu) w stalach węglowych (o szerokim zakresie zawartości węgla). Mając na uwadze dyfuzyjny charakter rozpatrywanych przemian fazowych, uwzględnione zostaną również zagadnienia dotyczące przepływu i wymiany ciepła (wydzielanie lub pochłanianie utajonego ciepła przemiany) oraz przede wszystkim dyfuzji.

Efektom realizacji prac w projekcie będzie opracowanie narzędzia do adekwatnego modelowania i przewidywania rozwoju mikrostruktury w procesach technologicznych obejmujących wspomniane dyfuzyjne przemiany fazowe. Opracowanie takiego modelu wymaga jednak szczegółowych badań doświadczalnych, które pozwoliłyby dokładnie opisać zachodzące w materiale zjawiska i prawidłowo je symulować, wykorzystując do tego celu innowacyjny algorytm trójwymiarowych frontalnych automatów komórkowych (FCA), metodę siatkową Boltzmanna (LBM) i najnowsze rozwiązania programistyczne oparte na wysokowydajnych układach hybrydowych (akceleratory CPU i GPU).

Najważniejsze zadania do zrealizowania w projekcie obejmują zagadnienia:

- wyznaczenia zasad funkcjonowania modelu przemian fazowych na bazie algorytmu FCA i metody LBM,
- badań dylatometrycznych kinetyki przemian fazowych,
- badań mikroskopowych przemian fazowych,
- opracowania modelu przemian fazowych opartego na automatach komórkowych,
- zastosowania metody LBM do modelowania przepływu i wymiany ciepła oraz dyfuzji,
- wyznaczenia parametrów kompleksowego modelu,
- modelowania i weryfikacji modelu przemian fazowych,
- modelowania wybranego procesu technologicznego obejmującego: nagrzewanie, wygrzewanie i chłodzenie z uwzględnieniem przemian fazowych,
- analizy i weryfikacji wyników modelowania.

Większość z opracowywanych modeli rozwoju mikrostruktury jest dwuwymiarowa i bazuje na mniej skomplikowanych algorytmach niż proponowany w projekcie model. Stworzony model będzie uwzględniał wiele z dotychczas pomijanych lub traktowanych w sposób zbyt ogólny czynników, istotnych z punktu widzenia przemian fazowych. Dotyczy to m.in. rozpatrywania zjawiska dyfuzji i kinetyki przemian. Model pozwoli na rozwiązanie tych problemów umożliwiając m.in. szybsze przeprowadzanie obliczeń (CA+LBM), zastosowanie dowolnego kształtu ziarna związanego z krystaliczną strukturą materiału i warunkami rozrostu, właściwe rozpatrywanie procesu dyfuzji (zastosowanie LBM) oraz pozwoli na poprawne modelowanie kinetyki przemian fazowych.

Zaplanowane w projekcie zadania wpisują się w koncepcję rozwoju jednego ze strategicznych kierunków zarówno w nauce jak i gospodarce, związanego z inżynierią materiałową wraz z technologiami i technikami odlewniczymi i hutniczymi. Cyfrowa reprezentacja materiałów (Digital Material Representation) stanowi natomiast jeden z najszybciej rozwijających się kierunków w nauce o materiałach, a w szczególności w ich przeróbce plastycznej i obróbce cieplnej. Model powinien zwrócić uwagę naukowców i inżynierów-technologów, których interesuje kompleksowe rozpatrywanie dyfuzyjnych przemian fazowych w stalach węglowych, pod kątem doboru odpowiednich parametrów technologicznych. Opracowane oprogramowanie może m.in. stanowić element systemu wspomagania projektowania procesu technologicznego z punktu widzenia przemian fazowych. Będzie istniała możliwość zastosowania go zarówno w przemyśle z dopasowaniem do rzeczywistych warunków danego procesu, wpływając na poprawę sterowalności parametrami procesu, jak i w edukacji, jako laboratorium wirtualne.