

## Optymalizacja mikrostruktur w materiałach niejednorodnych - modelowanie mikromechaniczne i numeryczne w zakresie nieliniowym

Analizy wieloskalowe i modelowanie mikromechaniczne podjęte w projekcie są prawdopodobnie najsilniej rozwijającymi się technikami modelowania w badaniach z pogranicza mechaniki materiału i inżynierii materiałowej. Celem badań z zakresu mikromechaniki jest oszacowanie uśrednionych makroskopowych właściwości mechanicznych materiałów niejednorodnych (ich *homogenizacja*) przy założeniu znajomości właściwości mechanicznych poszczególnych faz na poziomie lokalnym oraz cech morfologicznych komponentów i ich przestrzennego rozłożenia w elemencie reprezentatywnym materiału. Wyznaczone właściwości efektywne stosuje się następnie do projektowania konstrukcji wykonywanych z materiałów niejednorodnych. Kluczowym elementem poszczególnych modeli jest tak zwany schemat przejścia mikro-makro, który pozwala na określenie wrażliwości makroskopowej odpowiedzi materiału na zmiany zachodzące w jego mikrostrukturze. Dla przykładu najprostszy taki schemat, często wykorzystywany w inżynierii materiałowej - *reguła mieszanin*, zakłada, że wszystkie komponenty mikrostruktury podlegają takiej samej deformacji. W ramach mikromechaniki wysiłek badawczy skoncentrowany jest na opracowaniu, na drodze analiz teoretycznych i numerycznych, lepszych opisów redystrybucji lokalnych odkształceń i naprężeń w komponentach, a tym samym dokładniejszego opisu zachowania się takiego materiału pod wpływem obciążenia i/lub temperatury. Ze względu na mikrostrukturę materiały niejednorodne możemy podzielić na materiały o mikrostrukturze periodycznej lub losowej. W pierwszym przypadku możemy zdefiniować komórkę jednostkową, która poprzez multiplikację w trzech kierunkach wypełnia objętość materiału. Tego typu materiały to w znakomitej większości materiały syntetyczne takie jak meta-materiały, czyli ośrodki o właściwościach niespotykanych w przyrodzie. W drugim przypadku mikrostruktura może zostać scharakteryzowana jedynie statystycznie poprzez funkcje rozkładu odpowiednich parametrów mikrostrukturalnych: wielkości wtrąceń, ich kształtu czy przestrzennego rozłożenia (upakowania) w elemencie objętości. Wśród tego typu ośrodków można wyróżnić zarówno materiały naturalne (np. polikryształy), jak i materiały syntetyczne (np. kompozyty). Przedmiotem tego projektu są materiały o losowej geometrii mikrostruktury.

Dostęp do efektywnych metod przewidywania makroskopowych właściwości materiałów niejednorodnych jest niezmiernie istotny w procesie projektowania nowoczesnych materiałów. Wraz z rosnącą mocą obliczeniową komputerów i rozwojem technik obrazowania mikrostruktury materiału, np. tomografii komputerowej, obserwowany jest silny rozwój homogenizacji numerycznej. Przy wykorzystaniu skanów otrzymanych w tomografii komputerowej tworzony jest odpowiedni model numeryczny reprezentatywnego elementu objętości. W efekcie w celu określenia lokalnych pól odkształceń i naprężeń symulacjom poddawana jest rzeczywista mikrostruktura materiału. Jednakże ta technika analizy ośrodków ma swoje ograniczenia. Ze względu na wysoki koszt obliczeniowy, szczególnie w przypadku planowanych w projekcie analiz w zakresie nieliniowym (duże odkształcenia, powstanie odkształceń trwałych), rozważana może być tylko ograniczona liczba elementów reprezentatywnych a zatem szerokie studium wpływu poszczególnych parametrów, potrzebne w przypadku optymalnego projektowania jest kłopotliwe lub nawet niemożliwe. W odróżnieniu od analiz numerycznych analityczne oszacowania właściwości makroskopowych stanowią niezwykle efektywne narzędzie projektowania oraz charakteryzacji jakości proponowanych materiałów syntetycznych oraz technik ich wytwarzania.

Wyniki projektu mają znaczenie dla większości nowoczesnych materiałów konstrukcyjnych (zaawansowane metale i stopy o mikrostrukturach kształtowanych w procesie obróbki plastycznej, kompozyty na podstawie metalicznej lub polimerowej pracujące w zakresie dużych odkształceń i wrażliwe na prędkość obciążenia, stopy i polimery z pamięcią kształtu, w których efekt taki jest związany ze zmianą składu i struktury materiału pod wpływem czynników zewnętrznych czy meta-materiały) tworzonych dla przemysłu lotniczego, samochodowego i elektronicznego lub zastosowań biomedycznych. Materiały takie charakteryzują się występowaniem mikrostruktur o skomplikowanej geometrii, które mogą być uzyskane za pomocą różnych metod jego obróbki lub w przypadku tak zwanych meta-materiałów poprzez wykorzystanie techniki druku 3D. Mikrostruktury te pełnią istotną rolę w kształtowaniu pożądaných kombinacji właściwości wytwarzanych materiałów, takich jak wysoka sztywność i wytrzymałość w połączeniu z dobrymi parametrami termicznymi. Opracowane modele będą pomocne w zrozumieniu mechanizmów rządzących wpływem cech morfologicznych mikrostruktury na poziomie lokalnym na właściwości materiału w skali makro. Zrozumienie tej relacji jest bardzo ważne z punktu widzenia inżynierii materiałowej i mechaniki materiału. Przewiduje się, że opracowane w projekcie modele dadzą możliwość projektowania mikrostruktury analizowanych materiałów w taki sposób, aby uzyskać materiał o optymalnych właściwościach pod względem dalszego zastosowania.