

Standardowe modele umocnienia wykorzystywane w symulacji metodą elementów skończonych (MES) dotyczą głównie analizy zachowania się materiału w skali makroskopowej, gdzie wpływ morfologii mikrostruktury jest pomijany. W MES do opisu zachowania się materiału zazwyczaj wykorzystywane są tzw. modele pól uśrednionych (ang. mean field) np. krzywe umocnienia opisujące zależność naprężenia od odkształcenia czy konwencjonalne modele rozwoju mikrostruktury bazujące na tzw. równaniach Avramiego. Wspomniane modele mogą być również funkcją zmiennych zewnętrznych np. temperatury, prędkości odkształcenia, itp. w zależności od warunków symulowanego procesu i własności materiału. Taki opis zakłada jednak, iż w przypadku np. stali, które są materiałami polikrystalicznymi własności poszczególnych krystalitów są statystycznie ujednorodnione i zależą głównie od w/w zmiennych zewnętrznych.

Wadą modeli skali makro jest również fakt, że uzyskane informacje pozwalają w zadawalający sposób określić tylko globalne własności wyrobów poprzez analizę np. rozkładu odkształceń, naprężeń czy temperatur. Wykorzystywane modele numeryczne opisują materiał jako konglomerat wielu milionów ziaren pomijając ich indywidualne zachowania. Dzięki takiemu założeniu możliwe jest niejednokrotnie uproszczenie przestrzennego kształtu analizowanych komponentów do ich dwuwymiarowej reprezentacji np. w procesach osiowosymetrycznych lub realizowanych w płaskim stanie odkształcenia. Taki zabieg (redukcja wymiaru domeny obliczeniowej) znacząco przyspiesza wymagany czas obliczeniowy, co jest kluczowe z punktu widzenia praktycznego wykorzystania modeli w przemyśle. Podejście to jest wystarczające w szerokiej gamie praktycznych przypadków przetwórstwa materiałów. Jednakże, wprowadzenie do produkcji nowych wielofazowych stali czy też nowoczesnych wielofazowych stopów aluminium, magnezu i miedzi, doprowadziło do zmian w tym tradycyjnym podejściu. Wynika to z faktu, że specyficzne własności w/w materiałów są uzyskiwane poprzez odpowiednio zaprojektowaną morfologię ich mikrostruktur uzyskaną na drodze ściśle kontrolowanej przeróbki cieplno-mechanicznej. Lokalne oddziaływania na poziomie mikro w efekcie końcowym wpływają na wysokie makroskopowe własności wyrobu gotowego. **W związku z powyższym, zachowanie poszczególnych elementów mikrostruktury (ziarna, granice ziaren, granice faz, wtrącenia, wydzielenia itp.) musi być również brane pod uwagę w trakcie symulacji numerycznej.**

Zatem opisane standardowe podejście (mean field) do modelowania nie spełnia wymagań współczesnej inżynierii materiałowej, która projektuje i wytwarza innowacyjne materiały bazując na ścisłych relacjach pomiędzy morfologią mikrostruktury a końcowymi własnościami wyrobu gotowego.

Dlatego tak istotne jest opracowanie nowoczesnych modeli numerycznych uwzględniających wpływ elementów struktury w sposób jawny na ewolucję mikrostruktury w materiałach metalicznych czyli tzw. modeli pól pełnych (ang. full field). Jednym z rozwiązań powyższego problemu modelowania z uwzględnieniem aspektów mikrostrukturalnych jest dynamicznie rozwijana koncepcja Wirtualnej/Cyfrowej Reprezentacji Materiału (ang. DMR – Digital Material Representation), którą można połączyć z modelami bazującymi na metodach dyskretnych np. automatach komórkowych (ang. CA – Cellular Automata) czy Monte Carlo (MC). Prace wnioskodawcy nad takimi modelami dowiodły zalet tego podejścia w rozwiązywaniu praktycznych problemów przemysłowych (np. ewolucja mikrostruktury w wysokich temperaturach, inicjalizacja i propagacja pęknięć) na zupełnie nowym poziomie dokładności obliczeń.

Dotychczas realizowane badania i zaproponowane rozwiązania numeryczne dotyczyły jednak przestrzeni dwuwymiarowej ze względu na ograniczenia w dostępnej mocy obliczeniowej. **Jednakże, tak jak wcześniej wspomniano, w przypadku modeli cyfrowej reprezentacji materiałów i złożonych morfologii badanych mikrostruktur uproszczenie rozwiązania do przestrzeni dwuwymiarowej może wpłynąć na jakość uzyskiwanych wyników w znacznie większym, stopniu niż w przypadku prostych modeli opartych o uśrednione dane materiałowe.** Z natury rzeczy nie uwzględniają one zmian, jakie mogą pojawić się w kierunku poprzecznym na różnych elementach mikrostrukturalnych. W literaturze naukowej brak jest jednoznacznych i systematycznych badań nad tym istotnym aspektem redukcji domeny obliczeniowej w modelach numerycznych wykorzystujących koncepcje cyfrowej reprezentacji materiału.

Dlatego celem niniejszego projektu jest opracowanie pełnego trójwymiarowego wieloskalowego modelu numerycznego do symulacji rozwoju zjawisk mikrostrukturalnych podczas odkształcenia plastycznego oraz ocena wpływu pominięcia trzeciego wymiaru podczas symulacji zachowania się nowoczesnych materiałów o silnie niejednorodnych mikrostrukturach na jakość uzyskiwanych wyników.

Uzyskane wyniki ustanowią mapę drogową dotyczącą ograniczeń oraz zalet modelowania w przestrzeniach dwu- oraz trójwymiarowych z wykorzystaniem modeli cyfrowych mikrostruktur.