

Standardowe modele materiału, wykorzystywane w symulacjach numerycznych dotyczą głównie analizy zachowania się materiału w skali makroskopowej, gdzie wpływ morfologii mikrostruktury jest pomijany. W takich modelach do opisu stanu 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 w zależności od warunków symulowanego procesu i własności rozpatrywanego materiału mogą również występować w postaci funkcji zmiennych zewnętrznych np. temperatury, prędkości odkształcenia, itp. 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 makroskopowych jest również fakt, że uzyskane informacje pozwalają w zadawalający sposób określić tylko globalne własności wyrobów poprzez analizę np. rozkładu odkształceń, naprężeń czy temperatur. Takie modele opisują materiał jako konglomerat wielu milionów ziaren pomijając ich indywidualne zachowanie oraz wzajemne oddziaływania. 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 mikroskopowym, w efekcie końcowym, wpływają na wysokie makroskopowe własności wyrobu gotowego. **W związku z powyższym, zachowanie poszczególnych elementów mikrostruktury (ziarna, granice ziaren, granice faz, wtrącenia, wydzielienia itp.) w trakcie symulacji numerycznej musi być również brane pod uwagę. A zatem opisane standardowe podejście do modelowania (ang. mean field) 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 istotne jest opracowanie nowoczesnych modeli numerycznych, uwzględniających wpływ elementów składowych mikrostruktury w sposób jawny na jej ewolucję 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. rozrost ziaren w mikrostrukturze, inicjalizacja i propagacja pęknięć) na zupełnie nowym poziomie dokładności obliczeń.

Jednakże, dotychczas realizowane badania i zaproponowane rozwiązania numeryczne dotyczyły głównie wykorzystania wspomnianej metody automatów komórkowych do symulacji rozwoju mikrostruktury ale po odkształceniu. W takiej sytuacji nie zachodzi konieczność modelowania odkształcenia przestrzeni obliczeniowej. Ze względu na założenia teoretyczne metody automatów komórkowych, odwzorowanie zmian kształtu domeny obliczeniowej podczas symulacji jest bardzo skomplikowanym zagadnieniem. Jedynie kilka prac naukowych porusza ten problem i wszystkie bazują na wielu uproszczeniach. W przypadku modelowania tzw. rekrytalizacji dynamicznej, która jest kluczowym mechanizmem kontrolującym rozwój mikrostruktury podczas wysokotemperaturowego odkształcenia, stosowane uproszczenia są jednak nieakceptowalne.

Dlatego celem niniejszego projektu jest opracowanie nowego podejścia, które bazuje na pełnym współbieżnym sprzężeniu dwóch metod obliczeniowych: wspomnianej metody automatów komórkowych z metodą elementów skończonych (MES). Koncepcja zakłada takie połączenie metody CA i MES aby węzły siatki elementów skończonych stanowiły równocześnie komórki metody automatów komórkowych. Dzięki temu możliwe będzie rozwiązanie podstawowego ograniczenia metody CA jakim jest brak wiarygodnego mechanizmu odkształcenia przestrzeni obliczeniowej. Przy takim założeniu koniecznością jest aby model bazował na koncepcji dyskretnego modelu losowych automatów komórkowych (RCA). **Dzięki takiemu nowatorskiemu podejściu możliwe będzie dokładne określenie zmian geometrycznych i morfologicznych na poziomie mikrostruktury podczas wysokotemperaturowego odkształcenia. Prace wykorzystujące wspomniane podejście w zagadnieniach modelowania rekrytalizacji nie były jeszcze prowadzone w środowisku naukowym.**

Dlatego też, uzyskane wyniki ustanowią mapę drogową dotyczącą ograniczeń oraz zalet proponowanej metody obliczeniowej w zastosowaniu do symulacji rozwoju mikrostruktury, podczas rekrytalizacji dynamicznej.