Koncepcja modelowania numerycznego w oparciu o tzw. cyfrową reprezentację materiału, gdzie w sposób bezpośredni w trakcie obliczeń uwzględnione są elementy mikrostrukturalne (ziarna, granice ziaren, wydzielenia, wtrącenia, granice faz itp.), jest obecnie bardzo dynamicznie rozwijana w wiodących ośrodkach naukowych. Symulacje oparte o takie podejście pozwalają analizować zachowanie materiału w warunkach, które nie były możliwe do monitorowania w przypadku podejść konwencjonalnych, opisujących mikrostrukturę i jej składniki w sposób uśredniony. Koncepcja cyfrowej reprezentacji materiału zapewnia również możliwość prowadzenia symulacji rozwoju mikrostruktury podczas różnych procesów kształtowania plastycznego i obróbki cieplnej z wykorzystaniem metod analizy dyskretnej np. automatów komórkowych.

Symulacje takie są niezwykle istotne, gdyż pozwalają kontrolować ewolucję mikrostruktury w trakcie kształtowania wyrobu z uwzględnieniem wpływu występujących w materiale lokalnych niejednorodności. Warto podkreślić, iż niejednokrotnie niewielkie zmiany warunków procesu wpływają w kolosalnym stopniu na zachowanie mikrostruktury, a co za tym idzie na końcowe właściwości eksploatacyjne danego produktu. Wykorzystując symulacje oparte o podejście cyfrowej reprezentacji materiału i metodę automatów komórkowych możliwe jest bardzo dokładne odwzorowanie mechanizmów kontrolujących ewolucję morfologii mikrostruktury w sposób bezpośredni.

W literaturze można znaleźć coraz więcej prac poświęconych takim rozwiązaniom, jednakże cechują się one bardzo dużą złożonością obliczeniową co ogranicza ich praktyczne zastosowanie do projektowania nowoczesnych technologii odkształcenia materiałów, szczególnie z uwzględnieniem trójwymiarowej reprezentacji materiału.

Eliminacja problemu dużej złożoności obliczeniowej jest możliwa w dwojaki sposób. Pierwszym jest zastosowanie idei automatów frontalnych, w których obliczenia wykonywane są tylko w konkretnych obszarach mikrostruktury, na przykład na granicach przemieszczających się granic ziaren. Drugim rozwiązaniem jest wykorzystanie możliwości nowoczesnych centr obliczeniowych, tzw. superkomputerów. Wyposażone są one tysiące jednostek obliczeniowych, zapewniając olbrzymie moce do analizy numerycznej.

Pierwsze z wymienionych podejść pozwala ograniczyć czas obliczeń, jednakże redukcja ta związana jest ze znacznym ograniczeniem domeny obliczeniowej, co powoduje również spadek dokładności obliczeń. Dlatego też w niniejszym projekcie postanowiono wykorzystać drugie podejście oparte na idei obliczeń równoległych oraz rozproszonych. Przeprowadzenie obliczeń równoległych na ogromnej liczbie jednostek obliczeniowych pozwoli w sposób znaczący zredukować czas symulacji do akceptowalnej wielkości. Podejście takie jest możliwe dzięki gwałtownemu rozwojowi technologii komputerowych, który sprzyja powstawaniu coraz większej liczby centr obliczeniowych wspierających symulacje na superkomputerach. Jednakże mapowanie modeli obliczeniowych na tego typu architekturę obarczone jest problemami związanymi z równomiernym podziałem pracy pomiędzy poszczególne zadania symulacyjne. Wraz ze zwiększaniem wykorzystywanych zasobów problem tzw. nierównomiernego obciążenia podczas symulacji nawarstwia się, co powoduje drastycznie zmniejszenie skalowalności opracowywanych rozwiązań.

W ramach niniejszego projektu planowane jest opracowanie i zaimplementowanie rozproszonej wersji modelu rozwoju mikrostruktury na bazie metody automatów komórkowych, który będzie w stanie automatycznie adaptować się do konkretnych warunków symulacji wynikających m.in. z występowania lokalnych niejednorodności w materiale. Taka adaptacja możliwa będzie dzięki wykorzystaniu teorii grafów, które bezpośrednio pozwolą na śledzenie interakcji pomiędzy poszczególnymi jednostkami obliczeniowymi, a również zapewnią warunki do przeprowadzenia tzw. procedury równoważenia obciążenia. Statyczne oraz dynamiczne dostosowywanie równowagi obciążenia pozwoli uniknąć sytuacji, w których jednostki obliczeniowe są przeciążone lub nieużywane, co w rezultacie przyspieszy proces obliczeń równoległych. Połączenie tych dwóch metod pozwoli efektywnie zarządzać zasobami obliczeniowymi i maksymalnie wykorzystać potencjał równoległego przetwarzania danych. Wydajne modele obliczeniowe zapewnią w przyszłości możliwość wspomagania opracowania technologii wytwarzania różnych komponentów o kontrolowanych własnościach z nowoczesnych stopów metali. Jako przykład zastosowania metody automatów komórkowych zostanie wykorzystany zaawansowany model zjawiska rekrystalizacji statycznej.

Podstawowy algorytm automatów komórkowych dedykowany dla równoległej symulacji rekrystalizacji statycznej został zaimplementowany i zweryfikowany z danymi literaturowymi na etapie badań wstępnych. W ramach niniejszego projektu zebrane doświadczenia zostaną wykorzystane do opracowania samoadaptującego się podejścia do równoważenia obciążenia w środowisku rozproszonym. Prace zostaną zrealizowane za pomocą obiektowo zorientowanego języka c++ w środowisku Visual Studio. Stworzenie bardzo wydajnych obliczeniowo algorytmów wymaga stosowania dodatkowych bibliotek zawierających narzędzia, umożliwiające przeprowadzenie komunikacji w równoległym wykonywaniu aplikacji, zarówno dla jednostek składających się z wielu procesorów (aplikacja wielowątkowa wykorzystująca bibliotekę OpenMP), jak i na platformy złożone z wielu komputerów (aplikacja wielowęzłowa, wykorzystująca interfejs transmisji wiadomości – Message Passing Interface MPI).