

# Digitaalinen materiaalikehitys luo säästöä ja tehokkuutta teollisuuden materiaaliratkaisuihin

Matti Lindroos, Anssi Laukkanen, Tom Andersson ja Kenneth Holmberg

Digitaalisella materiaalikehityksellä pystytään saamaan aikaan kestävämpiä ja halvempia materiaaliratkaisuja tehokkaasti. DIMECCin ohjelmat Breakthrough Steels and Applications (BSA) ja Hybrid Materials (HYBRIDS) ovat hyödyntäneet laajasti modernin digitaalisen materiaalisuunnittelun menetelmää ja useita uusia materiaaliratkaisuja sekä innovaatioita on kehitetty onnistuneesti vastaten teollisuuden kriittisiin haasteisiin. Yhdistämällä sovellusympäristö, usean mittakaavan kattava mallinnus ja täsmällinen kokeellinen tutkimus oikealla tavalla, voidaan tuotekehitysaika puolittaa ja tuotteen tai komponentin luotettavuus nostaa uudelle tasolle.

## Mitä on digitaalinen materiaalikehitys ja ICME?

Viimeaikainen globaali trendi materiaalien tuotekehityksessä pohjautuu niin sanottuun Integrated Computational Materials Science (ICME) -lähestymistapaan eli tietokoneavusteiseen materiaali- ja materiaaliratkaisujen kehitykseen. ICME tyypillisesti sulauttaa yhteen monitasomallinnuksen tekniikat ja materiaalikarakterisoinnin menetelmät. Monitasomallinnuksen etuna on se, että voidaan tarkastella käyttökohteen olosuhteita ja materiaalin käyttäytymistä lähtien makroskooppiselta tasolta aina erittäin yksityiskohtaiselle mikroskooppiselle tasolle asti ja sitäkin hienojakoisimmille aika- ja pituuskaaloille. Tyypillisesti makroskooppisella mallilla esitetään käyttökohteen tärkeimmät ilmiöt, kuten koneen tai laitteen dynaaminen käyttäytymisen ja siitä seuraavat kuormitusolosuhteet materiaalille. Prosessin mallintaminen auttaa selittämään vaikeasti nähtävillä ja mitattavissa olevat tilanteet sekä kvantifioi havainnot ja aikaisemmat kokemukset.

Kuormitusolosuhteet siirretään vaikuttamaan mikrorakennetasolla, jossa materiaalikehityksen kannalta tärkeimmät ilmiöt tapahtuvat. Esimerkiksi materiaalin mikrorakenteen paikallisen lujuuden tai haurauden vaikutus koko rakenteen kestävyysasteeseen ja

vaurioitumiseen pystytään esittämään tietokoneavusteisella mallinnuksella ja siten yhdistää se vallitsevaan kulumistapahtumaan. DIMECC:n BSA-ohjelmassa digitaalista monitasomallinnusta on hyödynnetty teräksen ja prosessin kehitykseen, esimerkiksi murskainnapplikaatioissa. Makrotason malli tuottaa helposti tarkasteltavan analyysin murskauksesta, missä materiaalin kulumiselinkaarta ja laitteen energiatehokkuutta pyritään parantamaan muuttamalla prosessiparametreja mallin sisällä. Mikrorakennetason mallit sisältävät yksityiskohtaista tietoa materiaalin käyttäytymisestä murskauksen aikana. Kulukskestävyyttä voidaan optimoida muuttamalla mikrorakennetta suunnitteluparametrien mukaan, kuten raekokoa varioimalla. Erilaisia kustannustehokkaampia ratkaisuja voidaan kokeilla ilman mittavaa testausta muuttamalla kuluva materiaali toiseen.

## Mitä etua monitasomallinnuksesta on tavanomaisempaan lähestymistapaan nähden?

Karkeamman makrotason mallit eivät pysty esittämään materiaalin sisäistä käyttäytymistä tarpeeksi tarkasti vaan ne esittävät materiaalin käyttäytymisestä homogenisoi-

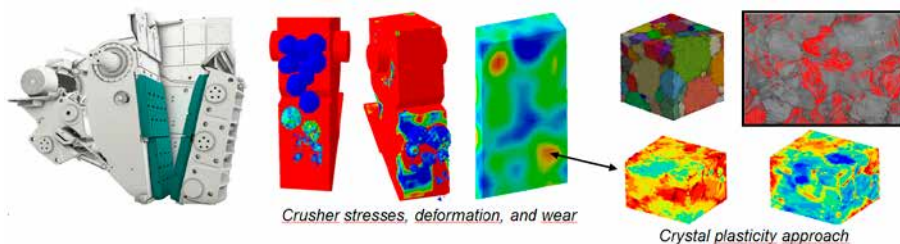
dun keskiarvon, joita yleensä insinööriyössä hyödynnetään. Tästä seuraa se, että muutettaessa hieman materiaalin mikrorakennetta, esimerkiksi vaikuttamalla eri faasien osuuteen, on hyvin vaikea todeta muutoksen vaikutuksista makroskooppiseen käyttäytymiseen ilman mikrorakennetason syventävää tarkastelua. Tulosten luotettavuuden kannalta vastaavasti materiaalikarakterisoinnin merkitys korostuu sekä vallitsevien muodonmuutos- ja vaurioitumisilmiöiden tunnistamisessa että materiaaliominaisuuksien määrittelyssä, sekä tietokonemallien verifiointin osana. Materiaalimallin tarkkuus riippuu sen riittävästä yksityiskohtaisuudesta ja mahdollisuudesta verifioida monimutkaisetkin ilmiöt.

Saavutettava hyöty pohjautuu siihen, että syy-seurausyhteys saadaan kehitettyä yhdistämällä ja analysoimalla karkean ja hienon tason mallien tuottamat tulokset ja uuden materiaaliratkaisun räätälöinti yleiseen tai spesifiseen käyttökohteeseen on mahdollista.

**Entä jos kuormitusolosuhteet tai käyttöympäristö muuttuu radikaalisti?** Uusia käyttökohteita voidaan tutkia ilman kallista testaamista ja jopa mahdottomalta tuntuvia kuormitusskenaarioita voidaan tarkastella. Suoritettavat kokeet voidaan kohdentaa sekä mallien validoinnin että tarkasteltavien ilmiöiden kannalta paremmin. Välitön konkreettinen hyöty saavutetaan myös applikaatio- ja komponenttitasojen mallien avulla, kun prosessia ja materiaalin roolia siinä ymmärretään kokonaisuutena paremmin.

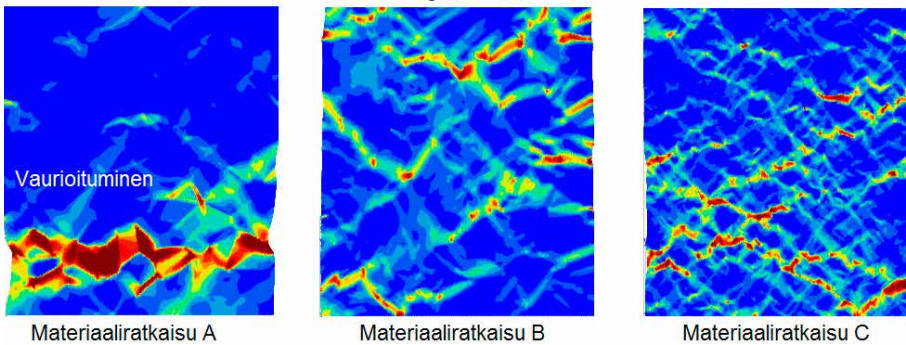
## Tehokkuutta materiaalikehitykseen

Perinteisesti materiaaleja on kehitetty yrityseriehdys -periaatteella. Tilannetta tarkastellaan mekaanisilla testeillä ja erilaisilla la-



Kuva 1. Digitaalisen monitasomallinnuksen hyödyntäminen murskainmateriaalin suunnittelussa (DIMECC BSA-ohjelma).

**Venymätila**



Kuva 2. Materiaalin digitaalinen optimointi: ratkaisussa A venymä lokalisoituu ja vaurioittaa materiaalin, kun taas ratkaisut B ja C jakauttavat venymää koko rakenteeseen lisäten kuormankantokykyä (DIMECC, BSA), lujuuksien ollessa  $A < B < C$ .

boratoriotason käyttöolosuhdetta imitoivilla testausmenetelmillä. Erilaisia kokeita täytyy suorittaa mittava määrä ja tulokset ovat yleensä käyttökelpoisia vain tiettyihin kuormitusolosuhteisiin, joita ei kokeita suoritettaessa usein saada tarkasti lainkaan määritettyä. Usein myös on vaikea todeta vaurioitumisen tarkkaa syytä, koska kokeissa on haastava tarkastella kappaleen jännitys- ja venymätilaa sen kuormitushistorian aikana. Monet materiaalikarakterisointimenetelmät tarjoavat analyysin vain ehjässä alkutilan ja vaurioituneessa lopputilassa. Kun ratkaisu ei ole ilmiselvä, seuraavat kokeilukierrokset eivät takaa yhtään parempaa ratkaisua, ja kustannustehokkuus kärsii. Samoin koesuunnittelua ohjaa usein lähinnä tekijän intuitio ja useiden tekijöiden sekä niiden vaikutusten samanaikainen tarkastelu on vähintäänkin haastavaa. Yhdistämällä digitaalisen materiaalisuunnittelun kokeellisiin menetelmiin, voidaan visualisoida ja analysoida materiaalin käyttäytyminen alkutilasta lopputilaan asti. Prosessitason ongelmia voidaan lähestyä myös helpommin simuloimalla. Digitaalisessa suunnittelu-ympäristössä skaalaus esimerkiksi yksittäisistä kontakteista tai kuormitussykleistä suuriin prosesseihin onnistuu ketterämmin ja kalliilta sekä joskus jopa mahdottomilta kenttätesteiltä voidaan usein välttyä. Laskennallisissa ympäristöissä voidaan tällöin suorittaa suuria määriä virtuaalisia kokeita ongelman ymmärryksen pohjaksi.

Entistä suorituskykyisempien materiaalien kehitys tuottaa erilaisia ja monesti rakenteeltaan erittäin monimutkaisia materiaaleja, joiden käyttöönotto vaatii laajaa ja pitkäaikaista testausta. Pitkän aikavälin simulointiennusteet auttavat turvallisuuden kehittämisessä ja yllättävien hajoamisten välttämiseksi. Digitaalinen materiaalmallinnus eri kuormituskennariioissa tarjoaa työkalut näiden tilanteiden ennalta havaitsemiseen.

Esimerkiksi kuvassa 2. erilaisten mikrorakenteiden venymän lokalisoitumista ja vaurioitumista on tarkasteltu samassa kuormitusolosuhteessa. Ydinvoimaloissa materiaalin pitää säilyttää ominaisuutensa ovat vaativis-

sa erittäin olosuhteissa. Silloissa, isoissa rakenteissa ja vaikkapa koneenosissa materiaali ei saa menettää liiallisesti kuormankantokykyään suunnitellun eliniän sisällä, esimerkiksi silloin, kun uusi materiaaliratkaisu ei käyttäydykään perinteisten suunnitteluolettamien mukaisesti. Vastaavasti jos materiaalin valmistuksessa tai jälkikäsitellessä on tapahtunut virhe, tai elinkaaren aikana kuormitustilanne onkin osoittautunut suunnitellusta poikkeavaksi, mikä on sen vaikutus materiaalin elinikään käyttökohteessa? Nämä ovat kaikki kysymyksiä joihin digitaalisella materiaalmallinnuksella voidaan hakea vastauksia.

**Kohti parempaa materiaalin suorituskykyä**

Materiaalin suorituskykyyn vaikuttaa suoraan sen mikrorakenne sekä vallitsevat mekaaniset ja kemialliset ilmiöt. Käytännössä hyvä materiaaliratkaisu harvoin on suorituskyvyllään paras materiaali, koska tällöin päädytään kautta linjan kalliisiin ratkaisuihin. Digitaalisen materiaalisuunnittelun mukanaan tuoma tarkkuus ja materiaalin käyttäytymisen parempi ymmärtäminen mahdollistaa monitavoitteen optimoinnin ja laajemman suunnitteluavaruuden hyödyntämisen. Tällöin tapauskohtaisesti voidaan tarkastella erilaisia materiaaliratkaisun suorituskyvyn

indikaattoreita (väsyminen, lujuus, hinta, valmistettavuus...) ja keskittyä tuotteen kannalta merkityksellisimpiin. Seurauksena on materiaaliratkaisun suorituskyvyn parantuminen ja mahdollisuus tarkastella sen kustannustehokkuutta.

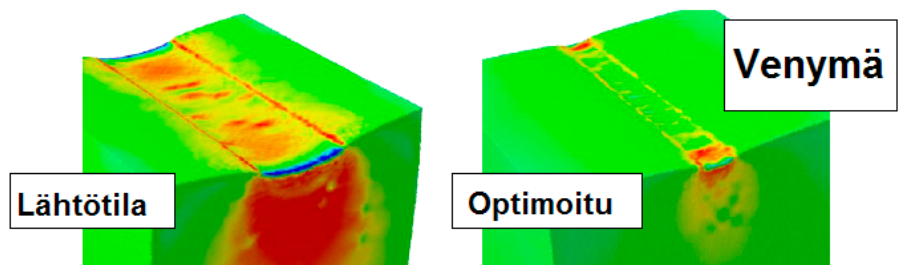
Esimerkkinä on kuvassa 3. alla tapaus, jossa kulumista kestävä materiaaliratkaisun mikrorakenneoptimoinnilla on kulumiskestävyyttä parannettu merkittävästi ja materiaaliratkaisusta on samanaikaisesti keskittymällä ainoastaan tuotteen käyttöolosuhteiden kannalta merkityksellisiin ominaisuuksiin saatu merkittävästi kustannustehokkaampi hinnanmuodostuksen kannalta kriittistä raaka-ainetta vähentämällä.

Digitaalinen materiaalisuunnittelu mahdollistaa tällöin optimoinnin ja systemaattisen suunnittelun ulottamisen materiaaliin, aina materiaalikehitykseen ja tuotekohtaiseen valintaan, asti. Materiaaliratkaisun suunnittelu kytketään tällöin osaksi tuotteen muuta suunnittelua, kuten perinteisesti rakenteen ja valmistuksen suunnittelua. Tällöin tuotteen näkökulmasta materiaali tulee osaksi suunnittelijan ja valmistajan käytettävissä olevia suunnittelumuuttujia, mikä integroituu muuhun suunnitteluketjuun. Materiaalissa olevat "vapausasteet" kyetään linkittämään muihin suunnitteluvaiheisiin ja vaatimuksiin, jolloin kokonaisvaltaisella suunnittelulla saavutetaan parempia tuloksia. Voidaan sanoa, että digitaalisen materiaalisuunnittelun päätavoite on tuottaa tuotekohtaisia ja optimoituja materiaaleja ja materiaaliratkaisuja.

**Lisätietoja**

<http://www.vttresearch.com/propertune>  
Suhonen, T. Laukkanen, A., Andersson, T., Pinomaa, T., Holmberg, K. "ProperTune – Computational Multiscale Materials Modeling Concept", Thermal Spray Bulletin, 68 (2), 2016: 102-106.  
Laukkanen, A., Andersson, T., Pinomaa, T., Holmberg, K. "Effective interface model for design and tailoring of WC-Co microstructures", Journal of Powder Metallurgy, 59, 2016: 20-30.

**Matti Lindroos, Anssi Laukkanen, Tom Andersson ja Kenneth Holmberg VTT Oy**



Kuva 3. Kovametallin monifaasirakenteen optimointi abrasivisessa kulumistilanteessa: kulumiskestävyysparannus on 3-7 kertaluokkaa ja kalliin raaka-aineen tarve on vähentynyt aina 60 % asti. (Laukkanen A., NordTrib 2016).