

Kraków, 6/09/17

Prof. dr hab. inż. Błażej Skoczeń

Instytut Mechaniki Stosowanej

Politechnika Krakowska

31-155 Kraków, ul. Warszawska 24

Recenzja pracy doktorskiej mgr inż. Karola Frydrycha

nt. „Modelowanie ewolucji mikrostruktury metali o wysokiej wytrzymałości właściwej w procesach intensywnej deformacji plastycznej”

Podstawa: decyzja Rady Naukowej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN z dnia 29 czerwca 2017.

1. Syntetyczny opis pracy

Tematem rozprawy doktorskiej jest modelowanie oparte na schemacie wewnętrznie zgodnym, oraz za pomocą MES, rozwoju i transformacji mikrostruktury metali i stopów o wysokiej wytrzymałości właściwej, podlegających procesom tzw. intensywnych deformacji plastycznych. Autor opisuje mechanizmy fizyczne, rozwój tekstury krystalograficznej, oraz rozdrobnienie ziaren podczas obciążeń monotonicznych i niemonotonicznych, połączonych ze zmianą drogi deformacji, oraz podczas procesów intensywnej deformacji plastycznej typu ECAP i KOBO. Do opisu zachowania materiału użyto analitycznych wieloskalowych modeli mikro-mechanicznych (2SCP, 3SCP), oraz modelu zaimplementowanego w metodzie elementów skończonych, opartego na kontynualnym podejściu do plastyczności kryształów. W szczególności, na poziomie lokalnym zbudowano opis mechanizmów poślizgu i bliźniakowania w ramach modelu plastyzacji kryształów, a następnie zastosowano stosowne schematy przejścia mikro-makro. W pracy przeprowadzono szczegółową analizę i obszerną dyskusję możliwości przewidywania rozwoju mikrostruktury w metalach i stopach o sieci krystalograficznej regularnej ściennie centrowanej A1, oraz heksagonalnej zwartej A3 (czysty technicznie tytan CP Ti, oraz stop magnezu AZ31B). W Rozprawie zaprezentowano identyfikację parametrów modeli, oraz porównanie wyników z wynikami doświadczeń własnych i zaczerpniętych z literatury. Wykazano wreszcie, iż zbudowane modele stanowią skuteczne narzędzia predykcji rozwoju mikrostruktury materiałów w złożonych procesach technologicznych.

Praca licząca sumarycznie 144 strony składa się z obszernego Wstępu, który jest równocześnie Rozdziałem 1, oraz kolejnych 5 Rozdziałów (2-6), z których ostatni zawiera podsumowanie i wnioski. W strukturze pracy znalazł się również krótki Dodatek oraz spis literatury, zatytułowany w spisie treści „Literatura”, zaś w głównej części pracy „Bibliografia” (str. 135).

Wstęp jest równocześnie Rozdziałem 1 i zawiera w tytule hasło „Motywacja”. Oprócz ogólnego wprowadzenia do tematyki materiałów o podwyższonej wytrzymałości właściwej oraz procesów intensywnej deformacji plastycznej (SPD), przedstawiono w nim deformację plastyczną w omawianych materiałach CP Ti oraz AZ31b, zjawisko rozdrobnienia ziaren a także stan wiedzy w zakresie modelowania rozwoju mikrostruktury krystalicznej z uwzględnieniem mechanizmów poślizgu, bliźniakowania i rozdrobnienia ziaren. Przedstawiono modele fenomenologiczne, mikro-mechaniczne i kontynualne MES, oraz modele oparte na koncepcji minimalizacji energii przyrostowej. W tej części Rozprawy znalazły się również jasno sprecyzowane: cel, zakres oraz teza pracy doktorskiej. Autor pragnie wykazać, iż „Analityczne i kontynualne modele mikro-mechaniczne, oparte na teorii plastyczności kryształów uwzględniających bliźniakowanie, są skutecznym narzędziem modelowania ewolucji mikrostruktury metali o wysokiej wytrzymałości właściwej w procesach intensywnej deformacji plastycznej”.

Rozdział 2 dotyczy modelu pojedynczego kryształu i zawiera opis kinematyki w zakresie skończonych odkształceń, równania konstytutywne w sformułowaniu przemieszczeniowym niezależnym i zależnym od skali czasu, prawa umocnienia w ujęciu wzrostu wartości krytycznych efektywnych naprężeń stycznych, na skutek działania innych systemów poślizgu lub działania bliźniakowania. Prawa umocnienia zostały sformułowane zarówno w ujęciu teorii plastyczności kryształów stosowanej w modelach wieloskalowych (dwu i trójskalowy), jak i w modelu plastyczności kryształów stosowanym w MES (prawo umocnienia Voce).

Rozdział 3 opisuje dwuskalowy mikromechaniczny model polikryształu. Przedstawiono w nim sformułowanie modelu wewnątrznie zgodnego (VPSC), oraz kilka wariantów przejścia mikro-makro (sieczny, afiniczny, styczny). Przedstawiono również dobór parametrów dwuskalowego modelu plastyczności kryształów dla czystego tytanu, deformowanego w procesie ECAP lub w procesie KOB0. W przypadku drugiego rozważanego materiału, stopu magnezu AZ31b, identyfikację parametrów modelu wykonano za pomocą badań doświadczalnych przeprowadzonych w IPPT PAN. Omówiono szczegółowo rodzaje wykonanych badań, przedstawiono schemat prób doświadczalnych oraz wyniki w postaci figur biegunowych uzyskanych przy użyciu analizy XRD, a także krzywych naprężenie rzeczywiste – rzeczywiste odkształcenie plastyczne. Wyniki podano dla wyciskanego pręta oraz dla próbek wyciętych z walcowanej blachy. W tym rozdziale przedstawiono również symulacje rozwoju tekstury dla czystego tytanu w procesie ECAP oraz w procesie KOB0. Podobne symulacje wykonano w odniesieniu do stopu AZ31b w procesie ECAP. Wyniki przedstawiono w postaci wykresów aktywności systemów poślizgu oraz zestawienia figur biegunowych, uzyskanych w wyniku symulacji za pomocą modelu dwuskalowego i za pomocą pomiarów.

Rozdział 4 zawiera opis trójskalowego mikromechanicznego modelu polikryształu. W rozdziale, obok sformułowania trójskalowego modelu plastyczności kryształów, przedstawiono symulacje ewolucji tekstury i wielkości ziarna w procesie ECAP dla polikryształów o sieci Al. W szczególności, przedstawiono modele Taylora oraz VPSC jako modele przejścia pomiędzy poziomami polikryształu i metaziarna. Na podstawie symulacji zbadano korelację między

aktywnością systemów poślizgu a ewolucją kątów misorientacji podziaren. Ponadto, przeprowadzono symulacje rozwoju mikrostruktury materiału o sieci krystalicznej A3 w procesach walcowania na zimno. Najpierw dobrano parametry modelu 3SCP, a następnie przeprowadzono symulację procesu walcowania na zimno czystego tytanu. Wyniki przedstawiono za pomocą szeregu figur biegunowych dla różnych płaszczyzn sieciowych, jak również za pomocą rozkładów kątów misorientacji dla blachy z czystego tytanu. Warto zauważyć, że jest to pionierska próba przewidzenia rozkładów kąta misorientacji w mikrostrukturze metali o sieci A3. Rozdział zakończono podsumowaniem i sformułowaniem wniosków.

Rozdział 5 poświęcono implementacji modelu kontynualnego MES. Sformułowanie modelu określono skrótem CPFEM (Crystal Plasticity Finite Element Method). Implementację modelu MES dla materiału o sieci A1 wykonano w zakresie sformułowania zależnego i niezależnego od skali czasu. Przedstawiono analizę kątów misorientacji oraz tworzenie nowych ziaren. Do oceny ewolucji mikrostruktury materiału o sieci A1 poddanego deformacji w procesie ECAP wykorzystano współczynniki Taylora. Przeprowadzono również stosowne symulacje rozwoju tekstury i rozdrobnienia ziaren w procesie ECAP dla czterech różnych idealizacji mikrostruktury. Porównano wyniki sformułowania niezależnego i zależnego od skali czasu i wykazano, iż fakt przyjęcia sformułowania niezależnego od skali czasu nie ma wpływu na wyniki. Tę część rozdziału zakończono obszerną dyskusją. Następnie, przetestowano implementację MES z aktywnym mechanizmem bliźniakowania dla stopu AZ31b, a wyniki porównano z wynikami eksperymentów oraz wynikami uzyskanymi przy użyciu modelu dwuskalowego. W pierwszym rzędzie przeprowadzono symulacje dla próbek z walcowanej blachy, a następnie dla próbek z wyciskanego pręta. Wyniki zostały zilustrowane przy pomocy krzywych naprężenia rzeczywistego w funkcji rzeczywistego odkształcenia plastycznego, oraz figur biegunowych. Przeprowadzono również symulację procesu ECAP dla stopu AZ31b i porównano z wynikami eksperymentów. Wyniki przedstawiono między innymi w postaci symulowanych krzywych naprężenie-odkształcenie, krzywych aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania w funkcji odkształcenia oraz figur biegunowych.

Rozdział 6 jest krótki i zawiera jedynie podsumowanie pracy oraz wnioski końcowe.

Dodatek zawiera przyjęte w pracy konwencje, potrzebne do rysowania figur biegunowych dla metali i stopów o sieci A3. Warto zauważyć, iż w Rozprawie znalazł się obszerny spis literatury (**Bibliografia**) zawierający 155 pozycji, w tym 3 z udziałem Autora.

2. Ocena Rozprawy doktorskiej

Mgr inż. Karol Frydrych podjął się ambitnego zadania polegającego na opracowaniu, rozszerzeniu i weryfikacji wielkoskalowych modeli mikromechanicznych w kontekście ich przydatności do analizy i przewidywania ewolucji mikrostruktury materiału w zakresie dużych odkształceń plastycznych. W szczególności, zajął się Autor technicznie ważnymi metalami oraz stopami o wysokiej wytrzymałości właściwej i sieci krystalicznej A1, A3 (CP Ti, AZ31B), które poddano procesom intensywnej deformacji plastycznej (ECAP, KOBO). Zastosowane w pracy modele, poczynając od modelu pojedynczego kryształu, poprzez mikromechaniczne modele dwu i trójskalowe oparte na schemacie wewnętrznie zgodnym (2SCP, 3SCP), a kończąc na kontynualnym modelu MES są niezwykle nowoczesne i nawiązują do modelu plastyczności

kryształów. Warto podkreślić, że w omawianej pracy uwzględniono obydwa mechanizmy plastyczności kryształów, tzn. poślizg i bliźniakowanie, co niewątpliwie pozwala w bardziej precyzyjny i kompletny sposób opisać duże deformacje plastyczne. Warto również zauważyć, że uwzględnienie ewolucji tekstury i rozdrobnienia ziaren materiału oraz uwzględnienie reorientacji sieci krystalicznej, stanowią o dojrzałości zaprezentowanego w pracy modelowania konstytutywnego. To niezwykle interesujące studium porównawcze modeli konstytutywnych w zakresie plastyczności kryształów, uwzględniające pionierskie podejście do przewidywania rozkładów kąta misorientacji w mikrostrukturze metali o sieci A3, tworzy szeroki obraz możliwości skutecznego modelowania zaawansowanych procesów intensywnej deformacji plastycznej w metalach i ich stopach. Tematyka pracy doktorskiej jest więc nowoczesna i adekwatna z punktu widzenia możliwych zastosowań, szczególnie w kontekście stale rosnącego zainteresowania sterowaniem mikrostrukturą w procesach intensywnej deformacji plastycznej. Sformułowane przez Autora cele zostały w dużej mierze osiągnięte, a wyniki pracy przedstawiono w formie klarownej i uporządkowanej. Zwraca uwagę przejrzystość struktury pracy, staranność w przygotowaniu i rozplanowaniu rysunków oraz dobre opanowanie przez Autora Rozprawy języka naukowo-technicznego (bogata sfera pojęciowa). Warto także podkreślić sprawne poruszanie się przez Autora w literaturze światowej, oraz stosunkowo dużą liczbę cytowanych pozycji literaturowych w zakresie problematyki poruszanej w pracy doktorskiej.

Praca ma charakter głównie obliczeniowo-symulacyjny, zawiera jednak liczne odniesienia do eksperymentów, zarówno wewnętrznych jak i zewnętrznych. Za istotny wkład Autora do rozwoju dyscypliny naukowej Mechanika uważam w szczególności sformułowanie i implementację oryginalnego trójskalowego modelu plastyczności kryształów (3SCP), oraz zastosowanie tego modelu do analizy ewolucji tekstury w materiałach o sieci A1 i A3.

Oprócz wielu walorów i mocnych stron Rozprawa zawiera jednak elementy skłaniające do polemiki lub budzące wątpliwości, które zostały podzielone na uwagi krytyczne natury ogólnej i szczegółowej.

2.1 Uwagi krytyczne natury ogólnej

- Teza postawiona w pracy doktorskiej brzmi następująco: „Analityczne i kontynualne modele mikro-mechaniczne, oparte na teorii plastyczności kryształów uwzględniających bliźniakowanie, są skutecznym narzędziem modelowania ewolucji mikrostruktury metali o wysokiej wytrzymałości właściwej w procesach intensywnej deformacji plastycznej”. Trudność weryfikacji postawionej w Rozprawie tezy polega jednak na tym, iż Autor nie sprecyzował co oznacza skuteczność narzędzia i jak tę skuteczność mierzyć. W tym sensie, teza postawiona w Rozprawie jest nieprecyzyjna, ponieważ każdy model, który pozwoli na uzyskanie pozytywnych wyników w odniesieniu do wybranych eksperymentów można będzie uznać za skuteczny, choć nie musi on mieć wcale charakteru uniwersalnego. Tak więc, przy tak nieostrym sformułowaniu tezy, trudno stwierdzić czy teza rzeczywiście została w Rozprawie udowodniona.
- W opisie praw umocnienia na str. 23 znalazło się sformułowanie opisane równaniami 2.30 oraz 2.31, które odnosi się odpowiednio do systemów poślizgu i systemów bliźniakowania. Obydwa prawa są identycznie sformułowane. Czy rzeczywiście

obydwa mechanizmy są charakteryzowane przez ten sam rodzaj umocnienia, a wzrost wartości krytycznych efektywnych naprężeń stycznych następuje wg. tego samego schematu? Pytanie jest również uzasadnione w kontekście Rys. 3.2 i komentarza zawartego na str. 33: „Skok związany z zakończeniem działania bliźniakowania nie był obserwowany w eksperymencie, gdzie charakter przejścia między fazami był raczej płynny. Wydaje się więc, że w celu poprawnego modelowania umocnienia następującego wskutek działania bliźniakowania w czystym tytanie należy zmodyfikować prawo umocnienia dla bliźniakowania”. Jak wygląda ta modyfikacja (mechanizm Halla-Petcha, umocnienie teksturowe)?

- Problem dynamicznego zdrowienia nie został jasno sprecyzowany. Sformułowanie zawarte na str. 23: „Wraz z rosnącym odkształceniem prędkość umocnienia spada. W ten sposób w modelu jest uwzględnione dynamiczne zdrowienie...”, nie wyjaśnia ani mechanizmu zdrowienia ani jego emanacji w postaci stosownego prawa ewolucji.
- Nowy trójskalowy model mikromechaniczny polikryształu nie uwzględnia efektu skali. Na str. 69 znalazł się zapis: „W związku z tym w modelu nie istnieje parametr rozmiaru podziarna, podobnie jak nie ma takiego parametru w klasycznym modelu dwuskalowym (np. modelu VPSC, lub modelu Taylora). Tak więc zależności pomiędzy długościami/ odległościami charakterystycznymi dla poszczególnych poziomów analizy nie zostały uwzględnione.
- Na str. 74 w sekcji 4.2.2 opisano następującą procedurę dwuetapową: pierwszy etap polega na symulacji modelem dwuskalowym w celu uzyskania ewolucji lokalnych gradientów prędkości dla każdego z metaziaren, a następnie przez zaburzenie orientacji tworzy się dwa zestawy podziaren, następnie w drugim kroku przeprowadza się symulację modelem VPSC dla każdego metaziarna zadając gradienty prędkości uzyskane w modelu dwuskalowym. Tak więc po wykonaniu rekonstrukcji mikrostruktury, zadaje się gradienty prędkości uzyskane przed rekonstrukcją za pomocą modelu dwuskalowego. Czy tak zadane gradienty prędkości są aktualne dla zagregowanej mikrostruktury?
- Porównanie Rys. 4.6 i 4.8 wskazuje na olbrzymie różnice w aktywności systemów poślizgu i ewolucji kąta misorientacji dla modeli 3SCP FC-Tg oraz 3SCP Tg-Tg. Powstaje zatem wrażenie, że te modele dają całkowicie odmienne wyniki i nie bardzo wiadomo, który z nich koreluje z eksperymentem. W sekcji 4.2.2 pojawił się pogląd, iż model VPSC-VPSC nie przewiduje rozdrobnienia ziaren. Który model zatem jest „skutecznym narzędziem modelowania ewolucji mikrostruktury metali”?
- Podobnie, w sekcji 4.3.2 pada stwierdzenie, iż „W symulacji nie udało się niestety przewidzieć procentowego udziału granic niskiego kąta”, a liczba granic niskiego kąta uzyskana w symulacji jest zawsze niższa niż w eksperymencie. Czy model 3SCP opisuje zatem prawidłowo rozwój tekstury i rozdrobnienia ziaren dla materiału o sieci A3? Być może budowa modelu czteroskalowego byłaby adekwatna?
- Na str. 92, w sekcji 5.1.1 znalazło się stwierdzenie: „Podobnie jak w innych publikacjach ... dany obszar był traktowany jako nowe ziarno gdy kąt misorientacji między tym obszarem a obszarami sąsiednimi był większy niż 5° ”. W sekcji 5.2.2 uznano, iż „...wartość kąta 5° jest optymalna, ponieważ pozwala na analizę powodów dla których rozdrobnienie ziaren występuje w jednym regionie a nie występuje w innym”. Takie przyjęcie ma jednak charakter arbitralny i nie jest dostatecznie uzasadnione tym bardziej, że niewielkie zmniejszenie kąta do wartości 3° , lub

zwiększenie do wartości 7° skutkuje całkowicie odmiennym rozdrobnieniem mikrostruktury. Warto pomyśleć nad przyjęciem bardziej obiektywnego kryterium doboru granicznego kąta misorientacji. Tym bardziej, że jak pisze Autor na str. 105: „Na wartości współczynników Taylora wyznaczone w modelu CPFEM może mieć wpływ nie tylko orientacja danego ziarna, ale również orientacje ziaren sąsiednich”.

- Na ile wiarygodne jest porównanie aktywności systemów poślizgu w nowych ziarnach złożonych z odpowiednio: 499, 6, 2 lub 1 elementu skończonego (ES). Poziom statystycznego uzasadnienia wyniku jest całkowicie różny, a wynik musi zależeć np. od otoczenia danego ziarna.
- Na str. 115, Rys. 5.23, występują krzywe naprężenia rzeczywistego w funkcji rzeczywistego odkształcenia plastycznego. Wydaje się, że część tych krzywych zawiera zakres liniowy, przypominający odkształcenie sprężyste. Czy na osi odciętych jest na pewno odkształcenie plastyczne, a nie całkowite? Podobne wątpliwości rodzą się w przypadku wykresów 5.24-5.32. Tym bardziej, że w modelu kontynualnym są uwzględniane odkształcenia sprężyste, w przeciwieństwie do modelu VPSC.
- Aby uzyskać lepsze wyniki dla kontynualnego modelu MES polikryształu, warto byłoby przeprowadzić optymalizację parametrów tego modelu w oparciu o krzywe doświadczalne, tak aby uzyskać zbliżony poziom kalibracji do modelu VPSC. Wydaje się ponadto, że wyniki otrzymane za pomocą modelu CPFEM trudno porównać z wynikami uzyskanymi przy użyciu modelu VPSC, ponieważ w czasie deformacji występują zasadnicze różnice w aktywności systemów poślizgu.

2.2 Uwagi krytyczne natury szczegółowej

1. Spis literatury został w spisie treści zatytułowany „Literatura”, natomiast w głównej części pracy nosi on nazwę „Bibliografia” (str. 135). Zabrakło zatem ostatecznej weryfikacji zgodności spisu treści z faktycznym stanem nazewnictwa w Rozprawie.
2. Str. 10, sekcja 1.5: „... modele średniego pola (ang. „mean-field”)”, wydaje się, że lepszym sformułowaniem byłoby „modele uśrednionego pola”.
3. Na str. 27, w opisie do równania 3.2 napisano: „Przy założeniu linearyzacji z wykorzystaniem modułu stycznego równanie 2.29 można zapisać następująco:”. W równaniu 3.2 występuje jednak moduł sieczny a nie styczny.
4. Pod równaniem 3.2 pojawia się zdanie „Postać 3.2-2 jest jedną z możliwych zlinearyzowanych postaci lokalnego równania konstytutywnego...”. Nie jest jasne co oznacza postać 3.2-2, ponieważ numerem 3.2 oznaczono tylko jedno równanie. Nie jest również jasne co oznacza „ n ” oraz „ \bar{n} ”.
5. Na str. 28, w równaniu 3.7, człon \mathbf{D}_0 opisano jako odkształcenie resztkowe ośrodka. Wydaje się jednak, że powyższy symbol oznacza prędkość deformacji, a nie odkształcenie?
6. Na str. 30, w równaniu 3.25 (lewa strona) powinno być zapewne $\mathbf{B}_1^{(k),lg}$.
7. Str. 40, Rys. 3.8: ten rysunek jest zbyt mały, a przez to nieczytelny.
8. Brak stosownego komentarza do nieciągłości krzywych aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania na Rys. 3.9 (prawa kolumna).
9. Str. 69, Rys. 4.2: „Orientacja nominalna metaziarna jest zaznaczona na czerwono” - na tym rysunku nie widać koloru czerwonego.

10. Str. 109, Rys. 5.17, brak przyporządkowania kolorów linii do poszczególnych systemów poślizgu. Takie wykresy trudno się analizuje.

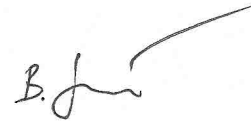
3. Uwagi końcowe

Rozprawa doktorska mgr. inż. Karola Frydrycha jest poświęcona opracowaniu, rozszerzeniu i weryfikacji wieloskalowych modeli mikromechanicznych, w kontekście ich przydatności do analizy i przewidywania ewolucji mikrostruktury materiału w zakresie dużych odkształceń plastycznych. W pracy wykazano między innymi, iż modele oparte na schemacie wewnętrznie zgodnym (2SCP, 3SCP), jak i model kontynuacyjny MES, są w stanie poprawnie przewidywać rozwój tekstury materiału o sieci krystalicznej A1, A3 w zakresie złożonych ścieżek odkształcenia. Oryginalnym elementem pracy, który stanowi o istotnym wkładzie do dyscypliny naukowej Mechanika, jest niewątpliwie sformułowanie i implementacja modelu trójskalowego, oraz zastosowanie tego modelu do analizy ewolucji tekstury oraz rozdrobnienia ziaren materiałów o sieci A1, A3.

Praca ma charakter bardzo nowoczesny, zawiera mocne podłoże doświadczalne i wartościową numeryczną analizę ewolucji mikrostruktury materiału w kontekście zbudowanych wcześniej modeli konstytutywnych. Wymiar użyteczny pracy jest godny podkreślenia. Wyniki pracy mogą zostać wykorzystane do przewidywania ewolucji mikrostruktury materiałów poddanych procesom intensywnych deformacji plastycznych. Wyrażone powyżej uwagi krytyczne nie umniejszają wartości pracy, służą jedynie pogłębieniu jej klarowności i wyjaśnieniu wątpliwości wynikających z nieprecyzyjnych sformułowań lub zbyt skrótowego ujęcia.

Teza postawiona w pracy została wykazana przede wszystkim w sposób jakościowy, ponieważ zasadniczą trudność jej weryfikacji polega na tym, iż Autor nie sprecyzował co oznacza skuteczność narzędzia i jak tę skuteczność mierzyć. Niemniej jednak, Rozprawa prezentuje bardzo dobry poziom naukowy i zawiera oryginalne treści naukowe. Stwierdzam zatem, że stanowi ona wartościowe, oryginalne i godne uwagi studium z zakresu mechaniki materiałów.

Wnoszę o przyjęcie Rozprawy mgr. inż. Karola Frydrycha i dopuszczenie Kandydata do publicznej obrony pracy doktorskiej. Biorąc pod uwagę wartość naukową Rozprawy, oraz jej znaczenie dla dyscypliny Mechanika, wnoszę o wyróżnienie w/w pracy.



Błażej Skoczeń