

Recenzja pracy doktorskiej mgr. inż. Michała Kursy

Modelowanie deformacji plastycznych w kryształach metali metodą przyrostowej minimalizacji energii

Omówienie zakresu pracy

Recenzowana praca składa się ze 170 stron i jest podzielona na 8 rozdziałów. Praca dotyczy modelowania nieliniowych procesów sprężysto-plastycznej deformacji kryształów i polikryształów.

We **Wstępie** został sformułowany cel pracy, opisana pokrótce: przyjęta metodyka, algorytmy numeryczne, zasygnalizowano czego dotyczą wyniki oraz jaki został przyjęty układ pracy.

Rozdział 2 jest poświęcony przedstawieniu „klasycznych” podstaw modelowania rozwijanych w ramach formalizmu matematycznego, na którym budowany jest model konstytutywny wykorzystywany w następnych rozdziałach pracy. W rozdziale tym omówiono własności krystalograficzne i geometryczne 24 wzajemnie równoważnych pod względem krystalograficznym systemów poślizgu występujących w jednej z najprostszych i najbardziej znanych struktur, w strukturze typu A1 (typ miedzi). Systemy przedstawiono na rzucie stereograficznym z wykorzystaniem oznaczeń zaczerpniętych z pracy Taylora (1938). Omówiono również założenia matematycznego opisu kinematyki sprężysto-plastycznej deformacji opartej na multiplikatywnym rozkładzie gradientu deformacji na część sprężystą + sztywny obrót, F^* , i niesymetryczną deformację plastyczną, F^p , wykorzystującą koncepcję lokalnej izoklinicznej konfiguracji odciążonej. Przedstawiono również bardzo ogólny formalizm matematyczny pewnego prędkościowego opisu hipersprężysto-plastycznego materiału opartego na wykorzystaniu tensora naprężenia Greena i pochodnej Zareby-Jaumanna zdefiniowanej względem konfiguracji odciążonej. W ramach tak przyjętego formalizmu założono superpozycję prędkości odkształcenia całkowitego i niesymetrycznej prędkości deformacji plastycznej realizowanej jednocześnie na układzie wielu aktywnych systemów poślizgu. Przyjęto formalizm matematyczny polegający na sformułowaniu wszystkich równań w konfiguracji aktualnej. Prowadzi to do pojawiania się szeregu dodatkowych członów matematycznych wynikających bądź to z termodynamiki poprawnego bilansowania wielkości termodynamicznych zakładanych w ustalonej konfiguracji odniesienia, bądź też z pewnych dodatkowych niefizycznych założeń forsowanych w

celu osiągnięcia zwartego matematycznego zapisu teorii. Człony te w bardzo elegancki sposób zostały zebrane w tabeli 2.3 na str. 26.

Dalsza część omawianego rozdziału poświęcona została omówieniu klasycznych praw wzmocnienia nakładanych na systemy poślizgów w teorii plastyczności kryształów oraz w tym kontekście został omówiony dorobek dotychczasowego „ulepszania” teorii (Havner, Peirce i wsp.) poprzez wprowadzanie pewnych niefizycznych dodatkowych członów matematycznych dotyczących wzmocnienia poprzecznego, głównie zależnych od aktualnego stanu naprężenia. W świetle tych faktów Doktorant stanął zapewne przed dylematem, czy zrezygnować z przyjętych założeń teorii wywodzących się z matematycznego opisu rozwijanego na bazie prac Hilla i współpracowników, czy modyfikować dalej tak otrzymywany układ równań i wprowadzać kolejne dodatkowe założenia, które pozwoliłyby wykorzystywać rozwijany formalizm i jednocześnie zminimalizować wpływ dodatkowych niefizycznych członów na efektywność modelowania z zachowaniem założeń tak rozwijanej teorii. Dodanie takich dodatkowych członów pozwala na symetryzację modułów interakcji systemów poślizgów g^{KL} . Symetryzacja taka, jak wykazał Petryk (2000b), pozwala zastosować metodę minimalizacji przyrostowej energii dostarczanej do materiału, co jest jednym z kluczowych punktów omawianej teorii z punktu widzenia możliwości energetycznego wyboru aktywnych systemów poślizgu.

W rozdziale 3 Doktorant wprowadza własną koncepcję symetryzacji macierzy modułów interakcji, która podobnie do poprzednich uzależnia umocnienie kryształu od aktualnego stanu naprężenia. W rozdziale tym Doktorant dowodzi, że w przypadku procesu jednoosiowego rozciągania, przyjęty przez Niego sposób selektywnej symetryzacji, daje lepsze rozwiązanie dla zaproponowanego parametru $r = 1/2$ niż symetryzacje oparte na koncepcjach poprzednich autorów, w tym Peirce’a i wsp. (1982) oraz Havnera i Shalaby (1977).

Rozdział 4 poświęcony jest zagadnieniom przyrostowej minimalizacji energii rozważanej z punktu widzenia termodynamiki fenomenologicznej ogólnie założonego układu mechanizmów. Analizowana jest całkowita energia układu, energia Helmholtza, entropia, ogólne siły termodynamiczne skoniugowane z wektorem przemieszczeń uogólnionych. Wprowadzany jest również wektor parametrów wewnętrznych oraz siły termodynamiczne wykonujące pracę na zmianie tych parametrów. Prowadzone są ogólne rozważania na temat zależności między pracą, ciepłem, dyssypacją i zmianą energii wewnętrznej z punktu widzenia pierwszego i drugiego prawa termodynamiki. W dalszej części pracy, wprowadzone parametry wewnętrzne zostają uzależnione od pewnych mnożników $\dot{\gamma}^K$, które z uwagi na ogólną złożoność teorii nie mogą być utożsamiane z $\gamma^K = \int_0^T \dot{\gamma}^K dt$, gdyż parametry te mogą ogólnie zależeć od całej historii $\gamma^K(t)$. Dalsza część rozdziału poświęcona jest problemom minimalizacji przyrostu energii układu i warunkom z tego wynikającym dla stacjonarności rozwiązania. W podrozdziale 4.3 uzyskane warunki dyskutowane są w zastosowaniu do procesu deformacji kryształu. Na zakończenie rozdziału analizowane jest zastosowanie przyrostowej minimalizacji energii do modelowania podziału ziarna na podziarna.

W rozdziale 5 omówione zostały zastosowane algorytmy przyrostowej minimalizacji energii. Dyskutowane są zagadnienia iterowania rozwiązania na kolejnym kroku przyrostu naprężenia,

badź deformacji, zarówno z punktu widzenia startowej konfiguracji lagranżowskiej, jak i z punktu widzenia niejawnego całkowania z wykorzystywaniem poszukiwanej konfiguracji eulerowskiej.

W rozdziale 6 zaprezentowano wyniki numeryczne dotyczące obrotów ziaren otrzymywanych podczas symulacji procesów jednoosiowego rozciągania oraz prostego ścinania kryształu. Użyte ścieżki orientacji przedstawiono na rzutach stereograficznych. W przypadku rozciągania, wyniki numeryczne uzyskane dla jednowymiarowych krzywych $\sigma - \varepsilon$ i $\frac{d\sigma}{d\varepsilon} - \varepsilon$ porównano z wynikami eksperymentalnymi, m.in. Szczerby (2001) i Basińskiego (1997). Na zakończenie rozdziału przedyskutowano problem segmentacji ziarna, w tym ilościową analizę udziału objętościowego poszczególnych warstw w próbie ściskania w kanale. Wyniki otrzymano dla różnych typowych orientacji kryształu, m.in. orientacji odpowiadających teksturze mosiądzu i miedzi.

Rozdział 7 przedstawia wyniki uzyskane dla zbioru ziaren wykazujących początkowo jednorodny rozkład w przestrzeni orientacji. Narzucając więzy kinematyczne w postaci jednakowego odkształcenia dla wszystkich ziaren przeanalizowano otrzymywane kształty powierzchni plastyczności oraz ścieżki orientacji, po których poruszają się poszczególne ziarna w trakcie procesu jednoosiowego rozciągania całego agregatu do poziomu odkształcenia Greena $E_{33} = 10$. Podobną analizę przeprowadzono dla czystego ścinania.

Uwagi ogólne

Formalizm matematyczny stosowany w pracy przedkłada zdaniem recenzenta formę matematyczną, jej zewnętrzną elegancję, nad sens fizycznym przyjmowanych równań konstytutywnych i ich zastosowanie do ilościowego modelowania opisywanych procesów deformacji. Dotyczy to zarówno opisu własności sprężystych jak i plastycznych.

W zakresie sprężystym stosowanie równań opartych na liniowej zależności pomiędzy tensorem odkształcenia Greena i drugim tensorem naprężenia Piola-Kirchhoffa daje nieprawidłową charakterystykę sprężystą, która objawia się tym, że wszystkie nieliniowe człony związane ze współbrotowym tensorem sztywności L^* wprowadzają odwrotną co do znaku poprawkę w stosunku do rzeczywistych ilościowych zmian eksperymentalnie otrzymywanych modułów sprężystości. Dla przykładu, ogólnie wiadomo, że w procesie jednoosiowego rozciągania składowa L_{1111}^* maleje w stosunku do początkowej wartości $L_{1111}^* = C_{1111}|_{E=0}$, dot. (2.28-31). W przypadku 2% odkształcenia sprężystego oznacza to np., że z uwagi na małe zmiany konfiguracji zamiast $L_{1111} \approx C_{1111}|_{E=0}$ przyjęty model zakłada $L_{1111} \approx 1.04 * C_{1111} + 2\tau_{11}$. O ile 40 lat temu, kiedy powstawały zręby formalizmu stosowanego przez Doktoranta, wiedza o ilościowych zmianach modułów sprężystości była znana wąskiej grupie badaczy zajmujących się ilościowym wyznaczaniem tzw. stałych sprężystych trzeciego rzędu, o tyle obecnie, związki tego typu trudno uznać za zgodne z jakimkolwiek ilościowym modelowaniem nieliniowych deformacji sprężystych. Jediną przewagą wspomnianego opisu jest jego atrakcyjność z uwagi na elegancką formę matematyczną związaną z sensem geometrycznym miary Greena i stosunkowo prostymi prawami transformacji, jakie daje

liniowa zależność między II tensorem naprężenia Piola-Kirchhoffa i t. odkształcenia Greena. Tak więc, warto mieć świadomość, że te tak skrętnie bilansowane nieliniowe człony korygujące wartości składowych tensora L^* w stosunku do jego początkowych wartości, wymienione w równaniu (2.31), nie mają nic wspólnego z rzeczywistością, a wręcz oddalają nas w przeciwną stronę od rzeczywistych zmian modułów sprężystości. Tak więc jest to przesada formy nad treścią, elegancja zapisu matematycznego przedkładana nad ilościowe modelowanie rzeczywistych nieliniowych efektów sprężystych.

W zakresie plastycznym brakuje w pracy zarówno ilościowej analizy poślizgów na podstawie danych eksperymentalnych dla kryształów, w tym jak systemy aktywne rozkładają się wewnątrz ziaren badanych kryształów, jak też brak poprawnej analizy samych deformacji skończonych wywołanych przez poślizgi. Ogólnie wiadomo z prostej analizy kinematycznej zlokalizowanych poślizgów w ziarnach, że nie jest możliwy jednoczesny poślizg po dwóch systemach poślizgów wzajemnie się przecinających. Stąd też, kolejne systemy poślizgów muszą uruchamiać się sekwencyjnie, a więc uruchomienie drugiego systemu poślizgu natychmiast blokuje dalszy jakikolwiek poślizg w pierwszym systemie. Co więcej, dodawanie skończonych deformacji rozwijających się kolejno na dwóch różnych systemach poślizgu nie jest przemienne, a więc z tensorowego punktu widzenia $(1 + \gamma^2 \mathbf{m}^2 \otimes \mathbf{n}^2)(1 + \gamma^1 \mathbf{m}^1 \otimes \mathbf{n}^1) \neq (1 + \gamma^1 \mathbf{m}^1 \otimes \mathbf{n}^1)(1 + \gamma^2 \mathbf{m}^2 \otimes \mathbf{n}^2)$. Równania plastyczności kryształów rozwijane 40 lat temu były zorientowane głównie na otrzymanie efektywnego modelu konstytutywnego na poziomie punktu materialnego. Nie było wtedy możliwości rozwiązywania nieliniowych układów równań z punktu widzenia zagadnień brzegowych i początkowo-brzegowych dla kryształów. Dzisiaj, sytuacja przedstawia się zupełnie inaczej, można rozwiązywać zadania początkowo-brzegowe dla pojedynczych kryształów i multikryształów. W takim wypadku elegancja matematycznego opisu nie musi „iść na skróty” kosztem drakońskich założeń ignorujących podstawowe fakty z zakresu fizyki i kinematyki rozwoju kolejnych poślizgów w kryształach. Reasumując tą uwagę można stwierdzić, że praca z punktu widzenia aktualności tematu jest nieco z innej epoki. Jeszcze 20-30 lat temu zagadnienia dotyczące deformacji sprężysto-plastycznych kryształu na poziomie punktu materialnego i boomu jaki w owym czasie przeżywały rentgenowskie badania nad rozkładami tekstur polikryształów metali były zagadnieniami kluczowymi z punktu widzenia budżetów wielu państw i koncernów. Oczywiście, w najmniejszym stopniu ostatnie uwagi nie obniżają wartości naukowej recenzowanej rozprawy, niemniej z punktu widzenia technologii, jak i z punktu widzenia obecnie dostępnych metod obliczeniowych, przykładów z literatury modelowania kryształów i multikryształów, oraz dostępnych danych eksperymentalnych z zakresu topologii poślizgów w ziarnach, warto mieć świadomość znaczenia zastosowanej metodyki do rozwiązania postawionego problemu.

Składanie sprężystych i plastycznych deformacji wykonane przez Doktoranta za pomocą zależności (2.35-2.37) redukuje się do następującego równania konstytutywnego na pochodną

Zaremby-Jaumanna naprężenia Kirchhoffa zdefiniowanego względem konfiguracji odciążonej

$$\overset{\nabla}{\tau}^* = \mathbb{L}^* \cdot \left(\mathbf{d} - \sum_{K=1}^{n_S} \mathbf{p}^{*K} \overset{\circ}{\gamma}^K \right), \quad \text{gdzie} \quad \overset{\nabla}{\tau}^* = \dot{\tau} - \omega^* \tau + \omega^* \tau, \quad (1)$$

podczas gdy poprawną zależność na pochodną naprężenia współbrotową z K-tym systemem poślizgu można zapisać w postaci

$$\overset{\circ}{\tau}^K = \mathbb{L}^* \cdot \left(\mathbf{d} - \sum_{L=1}^{n_S} \mathbf{p}^{*L} \overset{\circ}{\gamma}^L \right) - (\omega^K - \omega^*) \tau + \tau (\omega^K - \omega^*), \quad (2)$$

gdzie $\overset{\circ}{\tau}^K = \dot{\tau} - \omega^K \tau + \omega^K \tau$. W omawianym przypadku antysymetryczny tensor ω^K oznacza prędkość obrotu systemu poślizgu (diady wektorów jednostkowych $\frac{\mathbf{m}^{*K}}{|\mathbf{m}^{*K}|} \otimes \frac{\mathbf{n}^{*K}}{|\mathbf{n}^{*K}|}$). Różnica między rzeczywistą prędkością obrotu systemu poślizgu, a tzw. prędkością obrotu materiału ω^* (sztywny obrót sieci) jest istotna, gdyż można podać wiele przykładów, kiedy naprężenie styczne na systemie poślizgu rośnie zgodnie z zależnością

$$\overset{\circ}{\tau}^K \cdot \mathbf{p}^{*K} > 0, \quad (3)$$

podczas gdy zależność przyjęta w pracy, str. 25, przewiduje np. spadek w/w naprężenia

$$\dot{\tau} \cdot \mathbf{p}^{*K} + \tau \cdot \dot{\mathbf{p}}^{*K} < 0. \quad (4)$$

Ma to swoje konsekwencje w przewidywaniu czy dany system będzie aktywny czy też nie, szczególnie w przypadku pominięcia efektów lepkich. Najprostszym przykładem jest tu początkowo czysto sprężysty proces jednoosiowego rozciągania. W procesie tym pochodna Zaremby-Jaumanna obrotu materiału jest równa zeru, natomiast zmiana naprężenia stycznego wynikająca jedynie z samego niezerowego obrotu poszczególnych systemów poślizgów przyjmuje dodatnią bądź ujemną wartość — a tym samym, na jednych systemach („zbliżających się do kąta 45°”), na skutek samej jedynie zmiany orientacji systemu, granica plastyczności może zostać przekroczona, a na innych nastąpi odciążenie. Zdaniem recenzenta jest to błąd w przewidywaniu prędkości zmian naprężenia stycznego. Błąd ten może mieć również wpływ na dodatkowe człony odpowiedzialne za brak symetrii macierzy g^{KL} i h^{KL} . Warto tu zauważyć, że korzystanie w pracy z zależności (4) nieprawidłowo bilansuje po czasie współbrotową zmianę naprężenia stycznego na obracającym się systemie poślizgu.

W używanym formalizmie inną przyczyną braku symetrii członów macierzy odpowiedzialnych za wzmocnienie kryształu jest zastąpienia diady jednostkowych wektorów stycznych do systemu poślizgu bazą wektorów deformujących się wraz z siecią. Z jednej strony uprasza to równania, bo nie wymaga normowania wektorów systemu poślizgu, równania stają się więc bardziej eleganckie i zwarte, ale z drugiej strony te zmiany długości wektorów bazowych przewymiarowują w nonsensowny sposób naprężenia styczne dla poślizgu i są źródłem artefaktów w postaci dodatkowych niesymetrycznych członów pojawiających w równaniach dla wzmocnienia. W celu pozbycia się tych dodatkowych członów wprowadzane są w pracy dalsze нефизyczne założenia po to tylko, aby na drodze czysto matematycznej odzyskać, w ramach stosowanego formalizmu, utraconą symetrię macierzy umocnienia.

Końcowa ocena merytoryczna rozprawy

Doktorant osiągnął w pracy następujące ważne wyniki:

- Przedstawił własne rozwiązania trudnego problemu dotyczącego modelowania hipersprężysto-plastycznych procesów odkształcania i obrotu ziaren kryształów. Pod tym względem praca jest na bardzo dobrym poziomie, zarówno teoretycznym jak i numerycznym. Doktorant bardzo dokładnie bilansuje nieliniowe człony wynikające z zaawansowanego sformułowania teoretycznego. Są to bardzo trudne zagadnienia i nie ulega wątpliwości, że je opanował.
- Zaproponował własną koncepcję symetryzacji macierzy interakcji i wykazał, że w pewnych analizowanych przez siebie przypadkach proponowana symetryzacja daje znacznie lepsze wyniki od poprzednio stosowanych metod. Trochę szkoda, że zarówno poprzednie metody jak i ta nowa, zaproponowana przez Doktoranta, nie mają uzasadnienia fizycznego i są czysto matematycznym zabiegiem. Niemniej należy podkreślić, że w teorii równań konstytutywnych istnieje wiele przykładów równań, które nie znajdują uzasadnienia z punktu widzenia fizyki, a praktyczne zastosowania decydują o ich przydatności i popularności w rozwiązywaniu problemów.
- Przedstawił w pracy wiele przykładów numerycznych testujących i ilustrujących możliwości praktycznego wykorzystania zaproponowanego modelu symetryzacji. W kilku przypadkach zestawiał wyniki własnych badań z wynikami badań eksperymentalnych, co jest szczególnie cenne.

Wniosek końcowy

Recenzowana praca spełnia wymagania stawiane pracom doktorskim przez Ustawę o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki z dnia 14 marca 2003r. Pomimo wielu krytycznych uwag sformułowanych powyżej, praca ta stanowi cenny wkład w rozwój badań nad opisem procesów związanych z modelowaniem sprężysto-plastycznej deformacji kryształów na poziomie punktu materialnego.

Jednoznacznie pozytywna recenzja pracy uzasadnia mój wniosek końcowy o dopuszczenie w/w pracy doktorskiej do publicznej obrony.



Mgr inż. Michał Kursa
Instytut Podstawowych Problemów Techniki
Polskiej Akademii Nauk
ul. Pawińskiego 5B, 02-106 Warszawa
mkursa@ippt.gov.pl

Warszawa, 12 listopada 2010 r.

Odpowiedź na recenzję z dnia 8 listopada 2010 r. ,
opracowaną przez **Prof. dr. hab. inż. Pawła Dłużewskiego**,
mojej rozprawy doktorskiej pt.:
*„Modelowanie deformacji plastycznych w kryształach metali metodą
przyrostowej minimalizacji energii”*

Szanowny Panie Profesorze,
na wstępie pragnę podziękować za sporządzenie recenzji mojej rozprawy doktorskiej.

Uwaga 1. „W zakresie sprężystym”...

W rozprawie zastosowałem związek konstytutywny sprężystości w postaci wzoru (2.24) na stronie 22 oraz wprowadziłem upraszczające założenie, że składowe tensora modułów sprężystości C^* w konfiguracji odciążonej nie zależą od odkształcenia. W rozprawie na str. 22 w Podrozdziale 2.4 („Przyrostowe moduły sprężystości”) podałem następujące uzasadnienie: *„Uzasadnieniem użycia miary E^* oraz założenia niezależności tensora C^* od stanu odkształcenia jest fakt występowania małego zakresu odkształceń sprężystych podczas deformacji kryształów metali przy zwykle stosowanych ciśnieniach. Nie ma tu potrzeby wykorzystywania np. logarytmicznych miar odkształceń sprężystych, które powodują pewne trudności, np. numeryczne.”*

Z testów przeprowadzonych dla różnych schematów deformacji zawartych w Rozdziale 6 („Wyniki modelowania procesów deformacji kryształów”) wynika, że maksymalne wartości odkształcenia sprężystego są w zakresie do 0.3% (do trzech dziesiątych procent). To powoduje, że zmiany modułów sprężystości związane z odkształceniem sprężystym są mniejsze niż 1.5%. W literaturze powszechnie przyjmuje się, że takie zmiany są pomijalnie małe, co uzasadnia przyjęte założenie co do modułów sprężystości C^* oraz miar odkształcenia E^* i naprężenia T^* . Chciałbym dodać, że wykonywałem testowe obliczenia, przyjmując wartości modułów sprężystości różniące się o rzędy wielkości i nie zauważyłem wówczas istotnego wpływu tych różnic na otrzymywane wyniki dotyczące plastycznej odpowiedzi materiału. Dla wyników rozprawy istotne są bowiem właściwości plastyczne, a nie sprężyste.

Obecnie założenie takie jak przyjęte w rozprawie jest wciąż wykorzystywane w modelowaniu deformacji kryształów i polikryształów, można w tym miejscu jako przykłady zastosowania podać prace: (Miehe et al. 1999 CMAME), (Evers et al. 2002 JMPS), (Schurig & Bertram 2003 CMS), (Anand 2004 CMAME), (McGinty & McDowell 2006 IJP) oraz pracę (Kuchnicki et al. 2006 IJP), gdzie można znaleźć sformułowanie: *„For metals, we can assume a linear relation between T^* and the elastic Lagrangian strain on the intermediate configuration, E^* without loss of generality”*. Celem rozprawy nie było więc dokładne nieliniowe modelowanie skończonych odkształceń sprężystych.

Uwaga 2. „W zakresie plastycznym”...

Do opisu kinematyki skończonych deformacji plastycznych kryształu stosowałem w rozprawie powszechnie przyjętą, klasyczną dzisiaj teorię sformułowaną w pracach (Rice 1971 JMPS), (Hill & Rice 1972 JMPS) i (Asaro 1983 JAM). Brak przemienności skończonych deformacji rozwijających się kolejno na dwóch różnych systemach poślizgu, rozumianych w uśrednionym sensie wspomnianym poniżej, występuje w równaniach stosowanych w rozprawie i zaczerpniętych z tej teorii. Nie rozumiem więc, na czym miałyby polegać sugerowana przez Recenzenta niepoprawność „analizy samych deformacji skończonych wywołanych przez poślizgi”. Przyjęty opis deformacji plastycznej można uznać, w ślad za licznymi ekspertami w literaturze światowej, za poprawny. O aktualności stosowanego opisu deformacji kryształu świadczą liczne cytowania w/w prac Hilla-Rice’a oraz Asaro, oraz bazowanie na tej teorii przy wprowadzaniu dodatkowych efektów, np. gradientowych (Menzel & Steinmann 2000 JMPS), (Kuroda & Tvergaard 2008 JMPS).

Teoria ta stosuje się do reprezentatywnego elementu materiału, jak również do reprezentatywnego przyrostu czasu, dając uśredniony opis ruchu dużej liczby dyslokacji w takim elemencie. Pojęcia punktu materialnego i pochodnej po czasie są więc rozumiane w sensie uśrednień po takim przestrzenno-czasowym elemencie. Poślizg plastyczny na systemie jest wyznaczony jako wartość uśredniona zgodnie z uzasadnieniem zamieszczonym w Punkcie 4.1.1 („Reprezentatywny element materiału”) na str. 55: „*Makroskopowo niesprężysta deformacja elementu \mathcal{N} może powstawać na skutek mikrostrukturalnych zmian spowodowanych ruchem dyslokacji. Postać tych mikrostrukturalnych zmian może być wysoce nieregularna z powodu dużej liczby lokalnych niestabilności. Z uwagi na te lokalne niestabilności, pojęcia makroskopowych prędkości odkształcenia lub naprężenia ciał niesprężystych powinny dotyczyć uśredniania po reprezentatywnej objętości materiału jak również po reprezentatywnym przyroście czasu*”. W rozprawie ziarno jest utożsamione z pojedynczym kryształem (monokryształem), a modelowanie jest prowadzone na poziomie reprezentatywnego elementu objętości materiału. W takim podejściu skutek działania wielu dyslokacji jednego systemu na poziomie mikroskopowym jest widziany na poziomie makroskopowym jako ścinanie, umownie określane jako „poślizg”, zachodzące w całej objętości elementu.

Natomiast poruszona przez Recenzenta ważna kwestia, jak systemy aktywne rozkładają się wewnątrz kryształu, oraz w jakiej sekwencji występują, była właśnie jednym z celów analizy przedstawionej w rozprawie. Przykłady nierównomiernych w przestrzeni, rozkładów aktywności systemów poślizgu są wyznaczone teoretycznie i porównane z eksperymentami na Rysunkach 6.37, 6.39, 6.43, a sekwencyjność wynikająca z metody przyrostowej minimalizacji energii występuje w licznych przypadkach analizowanych w rozprawie. Sekwencyjność ta w szczególnie wyraźny sposób widoczna jest dla rozciągania kryształu w kierunku 100 o wysokiej symetrii (Rys. 6.31 na str. 140), gdzie, według posiadanych informacji po raz pierwszy w literaturze, udało się uzyskać jakościową i ilościową zgodność z ciekawymi wynikami eksperymentalnymi uzyskanymi jeszcze w 1977r. Także przewidywania dotyczące rozkładów systemów aktywnych wewnątrz ziarna, pokazane przykładowo na rys. 6.39, 6.43, wykazują niezłą, w mojej ocenie, zgodność z obserwacjami doświadczalnymi. Ilościowe porównanie orientacji aktywnych systemów w kilku wersjach próby kanalikowej zawiera tabela 6.6 na str. 145. Tak więc nie mogę zgodzić się ze stwierdzeniem Recenzenta, że „...brakuje w pracy zarówno ilościowej analizy poślizgów na podstawie danych eksperymentalnych dla kryształów, w tym jak systemy aktywne rozkładają się wewnątrz ziaren...” sugerującym, że takiej analizy w pracy nie ma w ogóle. Przy zastosowaniu metodyki opracowanej w rozprawie, możliwe jest badanie dalszych

przykładów, jednak objętość rozprawy licząca 170 stron musiałaby być wówczas jeszcze większa.

W niedawno opublikowanej, już po skompletowaniu rozprawy, pracy (Szczerba & Pałka 2009 AMM) podano interesujące wyniki potwierdzające prawidłowość obliczanych poślizgów, zamieszczonych w rozprawie np. na Rys. 6.14a.

Uwaga 3. „Składanie sprężystych i plastycznych deformacji”...

Kwestionowany przez Recenzenta wzór (1) (w recenzji) jest poprawny, gdyż wynika w sposób jednoznaczny z fundamentalnych w klasycznej teorii plastyczności Hilla-Rice’a i Asaro założeń. W szczególności, wypadkowe naprężenie ścinające τ^K , działające na K -tym systemie poślizgu definiowanym diadą $\mathbf{m}^{*K} \otimes \mathbf{n}^{*K}$ w konfiguracji odciażonej, definiowane jest w tej teorii wzorami

$$\tau^K = \tau \cdot \mathbf{p}^{*K}, \quad \mathbf{p}^{*K} = \text{sym}(\mathbf{m}^{*K} \otimes \mathbf{n}^{*K}), \quad \mathbf{m}^{*K} = \mathbf{F}^* \mathbf{m}^K, \quad \mathbf{n}^{*K} = (\mathbf{F}^*)^{-T} \mathbf{n}^K. \quad (\text{A})$$

Zastosowanie proponowanego przez Recenzenta związku (2) (w recenzji) do określania pochodnej τ^K według wyrażenia we wzorze (3) (w recenzji) byłoby niepoprawne w ramach tej teorii jako sprzeczne z powyższą definicją. Sprzeczność ta byłaby co prawda tylko formalna, ponieważ wpływ odkształceń sprężystych na wartości \mathbf{p}^{*K} jest pomijalnie mały w metalach, gdy odkształcenia te są wyraźnie mniejsze od 1%, jak to ma miejsce we wszystkich przypadkach analizowanych w rozprawie (por. odpowiedź do Uwagi 1 powyżej). Definiowanie wypadkowego naprężenia ścinającego poprzez rzutowanie tensora naprężenia τ (lub σ) na tak określony tensor \mathbf{p}^{*K} jest powszechnie stosowane, np. w monografiach Havnera (*Finite Plastic Deformation of Crystalline Solids*, Cambridge University Press, 1992) lub Lubarda (*Elastoplasticity Theory*, CRC Press, 2002), jak również w najnowszych pracach, np. (Gurtin 2008 IJP), (Kuroda & Tvergaard 2008 JMPS), (Casals & Forest 2009 CMS), (Prakash, Weygand, Riedel 2009 CMS), (Demir, Roters, Raabe 2010 JMPS), (Clayton 2010 JMPS). Sprawdziłem, że wszystkie wzory przyjęte we wprowadzającym Rozdziale 2 rozprawy opisujące sprężysto-plastyczną deformację kryształu, w tym prędkości zmian wypadkowego naprężenia ścinającego działającego na systemie zgodnie z def. (A), są poprawne jako w pełni zgodne z klasyczną teorią. Nie jest mi znana alternatywna teoria skończonych deformacji plastycznych kryształów metali, która byłaby powszechnie akceptowana.

Pragnę tu podkreślić, że niesymetryczne człony macierzy modułów interakcji zostały zidentyfikowane w rozprawie w postaci (3.12), która jest nową wersją równoważną związkowi wyjściowemu z Rozdziału 2. Niesymetryczna część macierzy zawiera tensor naprężenia Kirchhoffa τ i iloczyny diad \mathbf{s}^{*K} w konfiguracji aktualnej, jednak może zostać przetransformowana do konfiguracji odciażonej, por wzór (3.18), w której pojawiają się iloczyny ustalonych diad systemów oraz niesymetryczny tensor naprężenia Mandela. Wówczas można zauważyć, że niesymetryczne człony macierzy modułów interakcji nie znikają w szczególnym przypadku, gdy $\mathbf{F}^* = \mathbf{R}^*$, mimo że diady $\mathbf{m}^{*K} \otimes \mathbf{n}^{*K}$ podlegają jedynie sztywnym obrotom. Tak więc człony niesymetryczne macierzy nie wynikają z wydłużeń wektorów składowych \mathbf{m}^{*K} , \mathbf{n}^{*K} , które są pomijalnie małe, lecz ze względnego obrotu materiału i sieci. Nie mogę więc zgodzić się ze stwierdzeniem Recenzenta, że „W celu pozbycia się tych dodatkowych członów wprowadzane są w pracy dalsze niefizyczne założenia po to tylko, aby na drodze czysto matematycznej odzyskać, w ramach stosowanego formalizmu, utraconą symetrię macierzy umocnienia”. Chciałbym dodać, że fizyczne

uzasadnienie proponowanej selektywnej symetryzacji macierzy modułów interakcji jest zawarte w przygotowywanej do druku publikacji, nie wchodzącej w zakres rozprawy.

Podsumowanie:

Zastosowana w rozprawie teoria plastycznych deformacji kryształów jest dziś powszechnie przyjęta jako klasyczna i wciąż stanowi uznaną podstawę do badań. Sprawdziłem ponownie poprawność wszystkich wzorów w rozprawie w sensie zgodności z tą teorią i nie znalazłem żadnych błędów. Efekty sprężystych odkształceń sieci krystalograficznej są dla celów niniejszej rozprawy nieistotne z uwagi na małe wartości odkształceń sprężystych, nieprzekraczające 0.3% (do trzech dziesiątych procent).

Natomiast metody rozwiązywania zagadnienia deformacji kryształu pozostają nadal aktualną dziedziną badań i poszukiwań wielu autorów. Można przytoczyć opinię zamieszczoną w abstrakcie pracy (Busso & Cailletaud 2005 IJP): „*Even though the description of crystal plasticity within the context of modern continuum mechanics goes back to the early 1960s, there is no universally accepted solution as to how to identify a unique set of active slip systems*”. We wstępie do Rozdziału 5 rozprawy przytoczyłem prace zawierające różne propozycje metod obliczeniowych m.in. (Miehe & Schröder 2001 IJNME), (Schmidt-Baldassari 2003 CMAME), które dotyczą ciągle aktualnego zagadnienia pokonywania trudności wynikających z niejednoznaczności zagadnienia deformacji kryształów poprzez poślizgi. W mojej ocenie, do chwili obecnej, nie ma jedynej, dobrze ugruntowanej i bezkonkurencyjnej metody. Wybór metody rozwiązywania pozostaje nadal problemem otwartym. Moja praca idzie więc w tym kierunku, dotyczy „*adaptacji metody przyrostowej minimalizacji energii*” w celu rozwiązywania zagadnienia deformacji plastycznych kryształu, które są modelowane przy użyciu klasycznej teorii. Doświadczalne badania zachowania się monokryształów są nadal prowadzone, np. prace (Basiński et al. 1997 PM), (Szczërba 2001 AM) oraz (Szczërba & Pałka 2009 AMM) zawierają ciekawe wyniki eksperymentalne, więc umożliwiają dokładniejszą weryfikację modelowania konstytutywnego i rezultatów metod obliczeniowych dla kryształów metali. Metody te są istotne dla rozwoju mikromechanicznych modeli materiałów polikrystalicznych stanowiącego aktualny trend badawczy.

Michał Kurza