Prof. dr hab. inż. Błażej Skoczeń *Kraków, 24/09/11*

Politechnika Krakowska

Ocena

rozprawy habilitacyjnej nt. „Micromechanical modelling of metals and alloys of high specific strength" oraz dorobku naukowego dr inż. Katarzyny Kowalczyk-Gajewskiej

Podstawa prawna

Uchwała Rady Naukowej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN z dnia 27 maja 2011 oraz zlecenie dyrektora IPPT PAN, prof. dr hab. inż. Andrzeja Nowickiego z dnia 6 lipca 2011.

1 Ocena działalności naukowej Habilitantki

Dorobek naukowy Pani dr inż. Katarzyny Kowalczyk-Gajewskiej należy przypisać do dyscypliny naukowej Mechanika. Tematyka badawcza dotyczy szeroko rozumianej mechaniki materiałów i obejmuje modelowanie materiałów izotropowych i anizotropowych, plastyczność kryształów i polikryształów metali i ich stopów, elementy mikromechaniki oraz opis konstytutywny deformacji plastycznych.

Pani dr inż. Katarzyna Kowalczyk-Gajewska jest współautorką monografii nt. „Plastyczność Metali", wydanej nakładem oficyny wydawniczej Politechniki Warszawskiej w roku 2003. Opublikowała 12 artykułów w czasopismach z listy filadelfijskiej, w tym tak renomowanych jak International Journal of Plasticity czy European Journal of Mechanics A/Solids. Ponadto opublikowała 10 artykułów w innych czasopismach recenzowanych oraz 15 artykułów w materiałach konferencyjnych. Liczba cytowań wg. ICI Web of Knowledge wynosi 79.

Pani dr inż. Katarzyna Kowalczyk-Gajewska wygłosiła 2 referaty kluczowe na konferencjach międzynarodowych: w roku 2006 w czasie „12th International Symposium Plasticity'06" w Halifax w Kanadzie oraz w roku 2010 w czasie „Solid Mechanics Conference SolMech'10" w Warszawie.

Habilitantka uczestniczyła w wykonaniu 9 projektów badawczych, w tym dwóch projektów w ramach 6-go i 7-go Programu Ramowego EU. W dwóch przypadkach pełniła rolę kierownika projektu. Warto podkreślić, że Pani Katarzyna Kowalczyk-Gajewska uczestniczyła aktywnie w pracach międzynarodowej sieci doskonałości KMM NoE nt. „Nowoczesnych materiałów wieloskładnikowych o podwyższonej trwałości i niezawodności". W 2007 roku odbyła w ramach w/w sieci doskonałości staż naukowy w ONERA (Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales) w Chatillon we Francji.

Pani dr inż. Katarzyna Kowalczyk-Gajewska jest laureatką II Nagrody Komitetu Mechaniki PAN (2002) za publikacje przed 35 rokiem życia oraz nagrody Rektora PW II-go stopnia (2004) za monografię współautorską pt. „Plastyczność metali".

Biorąc pod uwagę całokształt działalności badawczej i publikacyjnej, dorobek naukowy i osiągnięcia Habilitantki oceniam bardzo wysoko. Pani dr inż. Katarzyna Kowalczyk-Gajewska należy niewątpliwie do grona niezwykle utalentowanych badaczy o ugruntowanej pozycji naukowej w kraju i za granicą oraz wysokim stopniu samodzielności.

2 Cel i zawartość rozprawy habilitacyjnej

Rozprawa habilitacyjna dr inż. Katarzyny Kowalczyk-Gajewskiej została poświęcona mikromechanicznemu modelowaniu metali i stopów o wysokiej wytrzymałości właściwej, takich jak stopy magnezu i tytanu oraz związki międzymetaliczne Ti-Al. Rozprawa została napisana w języku angielskim i składa się z 7 rozdziałów, 3 aneksów, spisu literatury obejmującego 229 pozycji oraz streszczenia w języku polskim. Całość tekstu rozprawy rozmieszczono na 299 stronach. Rozprawa jest bogato ilustrowana, w znakomitej większości rysunkami czarno-białymi (na 118 rysunków zawartych w monografii 3 są kolorowe).

Autorka postawiła sobie za cel opracowanie i porównanie różnych metod analizy polikryształów metali i stopów o wysokiej wytrzymałości właściwej, w kontekście zachowania się lepko-sprężystego i lepko-plastycznego, z uwzględnieniem podejścia wieloskalowego, mikromechaniki i wykorzystaniem algorytmów uśredniania pola.

W *Rozdziale 1*, który stanowi wstęp do rozprawy, Autorka przedstawiła motywację przeprowadzonych badań, omówiła cel i zakres pracy a także wprowadziła notację i listę używanych w rozprawie skrótów.

Rozdział 2 nosi tytuł „Modelling of crystals of high specific strength” i dotyczy modelowania kryształów deformujących się przez poślizg i bliźniakowanie. Zasadniczym celem tego rozdziału jest włączenie mechanizmu bliźniakowania do modelu konstytutywnego pojedynczego ziarna z wykorzystaniem regularyzowanego prawa Schmida a także do modelu opartego na lepko-plastycznej regularyzacji prawa Schmida przy pomocy prawa potęgowego. Zaprezentowane podejście posłużyło do opisu makroskopowego zachowania się polikryształów oraz do wyznaczenia ewolucji tekstury. W tej części rozprawy Autorka przedstawiła mechanizm bliźniakowania jako jeden z mechanizmów deformacji plastycznej, który przejawia się nie tylko poprzez ewolucję tekstury krystalograficznej ale także za pośrednictwem sprzężeń z mechanizmami poślizgu wpływających na charakter zjawiska umocnienia. Autorka postuluje m.in. wzrost naprężeń krytycznych w systemach poślizgu i bliźniakowania, spowodowany akumulacją odkształceń plastycznych. Proces bliźniakowania jest także źródłem barier dla ruchu dyslokacji w sieci krystalicznej ośrodka. Na kanwie opisu kinematyki pojedynczego ziarna Autorka wprowadziła własną procedurę reorientacji, z uwzględnieniem pojawiających się w rozważanym agregacie orientacji bliźniaczych. Warunek reorientacji oraz prawo umocnienia zostały zaimplementowane w klasycznym modelu Taylora a także w lepko-plastycznym modelu wewnętrznie zgodnym (VSPC). W procesie weryfikacji modelu konstytutywnego uzyskano dobrą zgodność wyników numerycznych z wynikami doświadczalnymi (stal Hadfield, mosiądz, γ-TiAl, stop magnezu).

Rozdział 3 zatytułowany „Estimates of overall properties of linear polycrystals of low symmetry", dotyczy oszacowania liniowych właściwości makroskopowych polikryształów o niskiej symetrii sieci. Rozdział ten dotyczy materiałów polikrystalicznych opisywanych za pomocą liniowych praw konstytutywnych z wykorzystaniem tensora czwartego rzędu, typu Hooke'a. Autorka wzięła pod uwagę dwa typy orientacji agregatu polikrystalicznego: losowy rozkład tekstury (makroskopowe własności izotropowe) oraz tekstury włókniste (makroskopowa izotropia poprzeczna). W tej części rozprawy przeanalizowano oszacowania górne i dolne tensora własności makroskopowych polikryształu z uwzględnieniem modelu Voigta (jednorodne odkształcenia) oraz modelu Reussa (jednorodne naprężenia) a także z wykorzystaniem bardziej precyzyjnego oszacowania Hashina-Shtrikmana. Ponadto, Autorka uwzględniła oszacowanie uzyskane za pomocą algorytmu wewnętrznie zgodnego (self-consistent), który stanowi jedną z technik uśredniania pola wynikających z rozwiązania zagadnienia Eshelby'ego. Autorka wyprowadziła stosowne formuły analityczne pozwalające wyznaczyć makroskopowe moduły sztywności w zagadnieniach liniowo-sprężystych oraz formuły określające naprężenie płynięcia w zagadnieniach pełzania ustalonego a także przedstawiła warunki istnienia i jednoznaczności rozwiązania. Autorka wykazała wreszcie, że w przypadku izotropowego polikryształu opisanego lokalnie liniowym prawem pełzania, makroskopowe naprężenie płynięcia będzie skończone jeżeli liczba niezależnych systemów poślizgu jest nie mniejsza od czterech. W rozdziale wykonano również oszacowanie makroskopowych własności sprężystych dla takich polikryształów jak *Mg, Zn, Ti, Cu, Al* oraz α_2-Ti_3Al, γ-*TiAl*, a także wyznaczono makroskopowe naprężenie płynięcia dla polikryształów γ-*TiAl* oraz *Mg*.

W *Rozdziale 4* zatytułowanym „Analysis of existing averaging schemes for nonlinear constitutive laws", dokonano analizy istniejących współcześnie schematów uśredniania dla nieliniowych praw konstytutywnych. Rozważono sprężysto-plastyczne polikryształy i sformułowano wewnętrznie zgodny przyrostowy schemat Hill'a dla pojedynczego kryształu w kontekście dużych deformacji i regularyzowanego prawa Schmida. Przeprowadzono również porównanie istniejących uogólnień algorytmu wewnętrznie zgodnego, stosowanych do wyznaczenia własności polikryształów lepko-plastycznych opisanych prawem potęgowym. Analizie poddano trzy najczęściej wykorzystywane schematy: sieczny, styczny oraz afiniczny. Wyznaczono makroskopowe własności lepko-plastyczne polikryształów γ-*TiAl* oraz *Mg* o losowej teksturze. Zaobserwowano także, że wyprowadzony dla liniowych praw konstytutywnych warunek istnienia skończonego wewnętrznie zgodnego oszacowania naprężenia płynięcia obowiązuje prawdopodobnie również w klasie rozważanych nieliniowych praw konstytutywnych przy $n \to \infty$ (schematy sieczny i afiniczny). W rozdziale przeanalizowano wpływ jednokierunkowego mechanizmu bliźniakowania na wartość oszacowań typu wewnętrznie zgodnego. Dla polikryształu o teksturze losowej stwierdzono jedynie nieznaczne różnice w naprężeniu płynięcia w warunkach rozciągania i ściskania. Ponadto, stwierdzono, że obecność mechanizmu bliźniakowania obniża znacząco naprężenie płynięcia w stosunku do polikryształu z aktywnymi wyłącznie mechanizmami poślizgu.

Rozdział 5 nosi tytuł „Metals of lamellar substructure" i dotyczy metali o strukturze lamelarnej. W tym rozdziale rozwinięto trójskalowy model mikromechaniczny obejmujący poziomy: mikroskopowy, lamelarnego metaziarna oraz makroskopowy. W tej części pracy sformułowano schemat przejścia od poziomu lameli do poziomu metaziarna. Przyjęto teorię małych odkształceń i założono afiniczne związki konstytutywne odpowiadające liniowym prawom lub zlinearyzowanym wersjom praw nieliniowych. Wykorzystano adaptację klasycznej teorii laminatów dla polikryształów o strukturze lamelarnej i uzyskano własności metaziarna odpowiadające przyjętym związkom konstytutywnym. Zaprezentowano implementację modelu trójskalowego dla przypadku nieliniowych równań konstytutywnych. Przyjęto różne schematy przejścia z poziomu metaziarna do poziomu makroskopowego polikryształu. Rozważono modele Taylora, Sachsa a także wymienione wcześniej warianty algorytmu wewnętrznie zgodnego: sieczny, styczny i afiniczny. Omawiane podejście zastosowano do opisu materiału $\gamma+\alpha_2$-*TiAl* o strukturze lamelarnej. Przeanalizowano własności sprężyste oraz początkową powierzchnię plastyczności dla agregatu polikrystalicznego o losowej orientacji metaziaren i strukturze lamelarnej. Przeanalizowano także właściwości lepko-plastyczne polikryształu charakteryzującego się substrukturą lamelarną. Zaproponowano następnie rozszerzenie formalizmu na duże deformacje sprężysto lepko-plastyczne z uwzględnieniem ewolucji powierzchni (granic) pomiędzy warstwami laminatu. Model zastosowano do opisu $\gamma+\alpha_2$-*TiAl* i przebadano makroskopowe zachowanie się materiału a także ewolucję tekstury krystalograficznej oraz reorientację struktury lamelarnej. Analizując zachowanie się materiału w procesie ściskania zastosowano model Taylora w odniesieniu do agregatu metaziaren uzupełniony o sztywno-plastyczny model lameli z regularyzowanym prawem Schmida. Zbadano wreszcie poziom aktywności poszczególnych modów deformacji a wyniki porównano z osiągnięciami innych autorów, dostępnymi w literaturze światowej.

Rozdział 6 zatytułowano „Averaging schemes for elastic-viscoplastic heterogeneous materials" i poświęcono analizie schematów przejścia mikro-makro dla sprężysto lepko-plastycznych materiałów niejednorodnych. Celem Autorki jest sformułowanie modelu sprężysto lepko-plastycznych materiałów niejednorodnych z uwzględnieniem koncepcji inkluzji typu Eshelby'ego w nieskończonej matrycy. Z uwagi na trudności w linearyzacji silnie nieliniowych równań konstytutywnych matrycy i zastosowaniu przejścia mikro-makro, opracowano nowe podejście w celu dostosowania metody wewnętrznie zgodnej do opisu niejednorodnych materiałów sprężysto lepko-plastycznych. W tym celu zrezygnowano z jednoczesnego uwzględniania sprężystych i lepkich własności matrycy w jednym kroku obliczeniowym na rzecz sekwencyjnego algorytmu wbudowanego w przyrostowy schemat przejścia mikro-makro. Rozwiązuje się zatem sekwencję zagadnień typu Eshelby'ego przy założeniu sprężystych lub lepkich oddziaływań między inkluzją i matrycą. Stosowne złożenie tych rozwiązań stanowi o całkowitej odpowiedzi ośrodka w danym kroku obliczeniowym. W tej części pracy zastosowano teorię małych odkształceń. W celu weryfikacji nowego podejścia rozwiązano zagadnienie sferycznej niejednorodności w nieskończonej matrycy i wybrano najkorzystniejszy wariant sekwencyjnej linearyzacji. Koncepcję sekwencyjnej linearyzacji zastosowano do schematów uśredniania typu Mori-Tanaka oraz wewnętrznie zgodnego (self consistent). W tym ostatnim przypadku wykazano, iż konieczne jest uwzględnienie efektu akomodacji. Wyniki przedstawiono na tle modeli dostępnych w literaturze światowej. Przedstawiono wreszcie próbę rozszerzenia metody na zagadnienia charakteryzujące się silnie nieliniową lepkością. Opracowany model zastosowano do opisu materiału o wysokiej wytrzymałości właściwej *γ-TiAl*.

W *Rozdziale 7* zatytułowanym „Summary and outlook" podsumowano najważniejsze wyniki pracy i wyszczególniono oryginalne rezultaty uzyskane przez Autorkę. Wytyczono również możliwe kierunki dalszych badań w omawianej w rozprawie dziedzinie nauki.

Aneksy A, B i C zawierają obszerne omówienie narzędzi niezbędnych w procesie modelowania, takich jak: rozkład spektralny i harmoniczny tensora 4-go rzędu typu Hooke'a; podstawowe elementy rozwiązania Eshelby'ego niejednorodności elipsoidalnej w nieskończonej matrycy oraz podstawy schematu wewnętrznie zgodnego (self consistent) dla ciał niejednorodnych; zagadnienia dotyczące implementacji numerycznej omawianych modeli.

3 Ocena rozprawy habilitacyjnej

Omawiana rozprawa dotyczy bardzo nowoczesnej dziedziny modelowania konstytutywnego materiałów polikrystalicznych i heterogenicznych w ramach podejścia wieloskalowego obejmującego zarówno mikromechanikę jak i poziom makroskopowy a także stosowne schematy przejścia mikro-makro. Autorka posłużyła się teorią plastyczności w ujęciu „krystalicznym", obejmującą mechanizmy poślizgu oraz bliźniakowania obserwowane w sieci krystalicznej opisywanych materiałów. W rozprawie zastosowano nowoczesne algorytmy uśredniania pola, takie jak algorytm wewnętrznie zgodny (self consistent) czy algorytm Mori-Tanaka. Autorka opisała zachowanie sprężyste, lepko-sprężyste i sprężysto lepko-plastyczne metali i stopów o wysokiej wytrzymałości właściwej, niezwykle istotnych z punktu widzenia zastosowań we współczesnej technice (np. lotnictwo i astronautyka).

Poziom matematyczny rozprawy należy ocenić bardzo wysoko. Autorka swobodnie posługuje się złożonym aparatem matematycznym niezbędnym do rozwiązania zagadnień opisanych liniowymi i nieliniowymi związkami konstytutywnymi w kontekście skomplikowanych algorytmów uśredniania pola opartych na rozwiązaniu zagadnienia Eshelby'ego. Zastosowane algorytmy numeryczne także nie budzą zastrzeżeń. Warto podkreślić, że wszędzie tam gdzie istnieje rozwiązanie ścisłe problemu Autorka stara się wykazać, że uzyskane przez nią szersze rozwiązanie odpowiada w stosownym zakresie rozwiązaniu ścisłemu. Ponadto, przedstawiając oszacowanie wewnętrznie zgodne dla liniowych ośrodków polikrystalicznych o różnych rodzajach tekstury, Autorka omawia warunki istnienia i jednoznaczności rozwiązania.

Za elementy wnoszące oryginalny wkład do dyscypliny naukowej Mechanika uważam:

- Wprowadzenie do modelu konstytutywnego pojedynczego ziarna mechanizmu bliźniakowania i uwzględnienie sprzężeń pomiędzy współistniejącymi mechanizmami poślizgu i bliźniakowania a także opracowanie nowego schematu reorientacji ziarna.

- Zastosowanie rozszerzonego modelu ziarna, uwzględniającego mechanizmy poślizgu i bliźniakowania, do schematów przejścia mikro-makro i zbadanie ewolucji tekstury krystalograficznej materiału.
- Zastosowanie dekompozycji spektralnej i harmonicznej tensora 4-go rzędu w celu opracowania nowych związków odnoszących się do istniejących oszacowań własności makroskopowych polikryształów.
- Sformułowanie warunków istnienia i jednoznaczności rozwiązania w zakresie oszacowania wewnętrznie zgodnego dla liniowych ośrodków polikrystalicznych o różnych rodzajach więzów nałożonych lokalnie na deformację.
- Przeanalizowanie wpływu więzów nałożonych na deformację, jednokierunkowości procesu bliźniakowania oraz struktury lamelarnej ośrodka polikrystalicznego na makroskopowe zachowanie się materiału.
- Wyprowadzenie związków dla trójskalowego modelu polikryształu o strukturze lamelarnej (poziomy: mikroskopowy, lamelarnego metaziarna oraz makroskopowy) dla liniowych i nieliniowych praw konstytutywnych i rozszerzenie modelu na duże deformacje niesprężyste.
- Opracowanie sekwencyjnego algorytmu dla niejednorodnych ośrodków sprężysto lepko-plastycznych, opartego na kolejnym rozwiązywaniu zagadnień typu Eshelby'ego przy założeniu sprężystych oraz lepkich oddziaływań między inkluzją i matrycą, wbudowanego w przyrostowy schemat przejścia mikro-makro.

Powyższe elementy stanowią niezwykle istotny i całkowicie oryginalny wkład Autorki do rozwoju współczesnej mechaniki materiałów. W szczególności, pozwalają na uzyskanie stosunkowo precyzyjnego opisu zachowania się szerokiej klasy nowoczesnych, nieliniowych materiałów polikrystalicznych, wykazujących wysoki stopień niejednorodności i anizotropii.

Zaproponowaną przez Autorkę metodologię badań oceniam wysoko. W zakresie opisu konstytutywnego oraz algorytmów uśredniania zostały przytoczone i wykorzystane najnowsze osiągnięcia dostępne w literaturze światowej, które Autorka traktuje jako punkt wyjścia do swoich badań. Rozwiązania uzyskane przez Autorkę są – tam gdzie to możliwe – sprowadzone do istniejącego rozwiązania ścisłego lub opatrzone dowodem na istnienie i jednoznaczność rozwiązania. W znakomitej większości przypadków Autorka porównuje swoje rozwiązania z „konkurencyjnymi" rozwiązaniami innych autorów oraz odnosi wyniki numeryczne do wyników doświadczalnych uzyskanych przez innych autorów.

Rozprawa habilitacyjna Pani dr inż. Katarzyny Kowalczyk-Gajewskiej została zredagowana w sposób logiczny i strukturalny a wyprowadzenia poszczególnych rozwiązań są spójne, kompletne i w sposób jednoznaczny odwołują się do wcześniej przygotowanych równań. Układ rozprawy zawierający trzy aneksy potrzebne do zrozumienia i interpretacji toku rozumowania w poszczególnych rozdziałach uważam za niezwykle celowy.

Rozprawa habilitacyjna została napisana w języku angielskim w sposób nie budzący zastrzeżeń. Tekst napisano w sposób przejrzysty, stylistyka jest poprawna a jakość języka angielskiego budzi najwyższe uznanie.

4 Uwagi krytyczne

Pomimo generalnie bardzo wysokiego poziomu rozprawy habilitacyjnej w trakcie czytania pojawiają się pytania i wątpliwości, które zostały poniżej podzielone na dwie kategorie: uwagi ogólne oraz uwagi szczegółowe.

<u>Uwagi ogólne</u>

1. Cechą charakterystyczną rozprawy jest fakt, iż każdy rozdział tworzy do pewnego stopnia odrębną i zamkniętą całość. Ma formę odrębnego artykułu, który zaczyna się wstępem i kończy wnioskami. W tym sensie rozprawa ma w mniejszym stopniu monograficzny charakter a bardziej przypomina zbiór wysokiej klasy artykułów zbudowanych wokół wspólnej osi tematycznej w postaci modelowania materiałów polikrystalicznych z udziałem efektu wielofazowości, w oparciu o nowoczesną teorię plastyczności polikrystalicznej oraz teorię konstytutywną obejmującą nowoczesne metody uśredniania pola w kontekście podejścia wieloskalowego, niezbędnego do budowy opisu makroskopowego z uwzględnieniem mikromechaniki.
2. Istotną wadą rozprawy jest brak spisu oznaczeń, który utrudnia poruszanie się w tekście i identyfikację bardzo dużej liczby użytych symboli. W szczególności, porównywanie rozwiązań prezentowanych w poszczególnych rozdziałach i zawarte w tekście odwołania do wcześniejszych fragmentów pracy wymagają ponownej analizy zawartego w danym rozdziale toku rozumowania aby dotrzeć do znaczenia poszczególnych symboli. Brak spisu oznaczeń w dużym stopniu utrudnia i opóźnia czytanie rozprawy.
3. Wiele uwagi poświęcono algorytmowi homogenizacji typu wewnętrznie zgodnego (self consistent) w powiązaniu z rozwiązaniem Eshelby'ego opisującym elipsoidalną inkluzję w nieskończonej matrycy. Taki opis jest niewątpliwie adekwatny w przypadku inkluzji o charakterze soczewkowym (np. lenticular martensite) a nawet w przypadku pojedynczego ziarna w agregacie polikrystalicznym. Jednak zastosowanie tego opisu do mikro-struktur lamelarnych (pasmowych) może budzić wątpliwości z uwagi na dość złożoną morfologię, którą trudno opisać elipsoidą. Rozwiązania dla lokalnych stanów naprężeń i odkształceń będą zapewne różne w obydwu przypadkach.
4. Klasyczne płynięcie plastyczne polega na ruchu dyslokacji wzdłuż płaszczyzn poślizgu, przy ciągłej produkcji nowych dyslokacji przez źródła (np. Franka-Reada). Natomiast proces bliźniakowania i rekonfiguracji sieci (ziarna) ma charakter dynamiczny i odbywa się w bardzo krótkim czasie (μs). Stała czasowa każdego z tych procesów jest diametralnie różna. Występuje zatem efekt skali w sensie czasowym. Ponadto, bliźniakowanie prowadzi do przebudowy/reorientacji sieci krystalicznej natomiast mechanizm poślizgu nie narusza orientacji sąsiadujących ze sobą fragmentów sieci krystalicznej. Czy można zatem oba mechanizmy ująć za pomocą tego samego opisu w sensie powierzchni plastyczności oraz stowarzyszonego prawa płynięcia (potencjału plastyczności)? Postawienie znaku równości pomiędzy systemem klasycznego poślizgu i pseudo-poślizgiem w systemie bliźniakowania

wydaje się wątpliwe i wymaga uzasadnienia. W rozprawie brakuje niewątpliwie pogłębionej analizy fizyki rozważanych zjawisk.

5. W rozprawie generalnie pominięto aspekt termodynamiczny opisywanych procesów. Nie wykonano analizy akumulacji ciepła i fluktuacji temperatury w czasie plastycznego płynięcia polikryształów, nawet w tej części pracy gdzie rozważane są różne prędkości odkształcenia. Nie wzięto pod uwagę wpływu temperatury na zachowanie się lepko-sprężyste czy lepko-plastyczne opisywanych materiałów. Wydaje się, że niektóre rozważane w rozprawie efekty (np. akomodacja) mogą mieć drugorzędne znaczenie w porównaniu z wpływem temperatury.
6. Odnosi się wrażenie, że w rozprawie jest rozważana niemal wyłącznie jedna klasa funkcji konstytutywnych (np. kinetyka poślizgu lub bliźniakowania 2.25, modele wzmocnienia 2.41 czy prawo pełzania 4.24), w postaci prawa potęgowego. Ten fakt stanowi o pewnym zawężeniu ogólności rozważań.
7. W rozprawie przeważają rysunki czarno-białe (znakomita większość), jednak występują również 3 rysunki kolorowe (5.18, 5.19, 5.22). Poszerzenie gamy rysunków kolorowych, np. w odniesieniu do ewolucji tekstury (tzw. „pole figures"), niewątpliwie podniosłoby czytelność rozprawy.

Uwagi szczegółowe

1. Str. 16, str. 23 oraz str. 175: użyto pojęcia „main-free path of dislocation", podczas gdy powinno być zapewne „mean-free path of dislocation".
2. Str. 20, stwierdzenie „RVE must be orders of magnitude larger than typical grain size" kłóci się z wcześniejszym stwierdzeniem, iż „representative element … should be small enough to be treated as a material point at the macro-scale". Jeśli bowiem wielkość ziarna będzie rzedu 0.1 mm (a nie nanometryczna) to RVE np. 3 rzędy wielkości większy będzie miał rozmiar 10 cm.
3. Str. 34, zdanie „Accumulation of dislocations makes its further movement more and more difficult" powinno brzmieć „… makes their further movement …".
4. Str. 37, równanie (2.5), nieco mylący jest zapis:
   $\underline{\underline{\dot{a}}} = \underline{\underline{\dot{R}}}^{e}\left(\underline{\underline{R}}^{e}\right)^{T}\underline{\underline{a}} \cong \underline{\underline{\dot{a}}} = \underline{\underline{w}}^{e}\underline{\underline{a}}$, ponieważ sugeruje, iż $\underline{\underline{\dot{a}}} \cong \underline{\underline{\dot{a}}}$ co jest logicznie sprzeczne.
5. Str. 37, rys. 2.3: kąt odkształcenia postaciowego powinien zapewne nosić oznaczenie γ^{TW} (jak w tekście) a nie γ^{T} (jak na rysunku).
6. Str. 38: „Twinning is described as a unidirectional slip mode". O ile płaszczyzna poślizgu jest reprezentowana przez obiekt geometryczny o nieskończenie małej grubości o tyle bliźniak charakteryzuje się skończoną grubością i wywołuje lokalną reorientację sieci krystalicznej. Czy zatem utożsamienie mechanizmu bliźniakowania z mechanizmem jednokierunkowego poślizgu jest uzasadnione?
7. Str. 40, równanie 2.12: przyjęto arbitralny warunek, iż prawdopodobieństwo reorientacji po czasie t jest równe zawartości objętościowej bliźniaków po czasie t, czyli f_t^{TW}. Jakie jest fizyczne uzasadnienie tego warunku? Czy chodzi jedynie o prostotę modelu?

8. Str. 39/40, zbudowany przez autorkę model nie uwzględnia dwóch istotnych mechanizmów: wzrostu bliźniaków wewnątrz ziarna oraz poślizgów zachodzących wewnątrz bliźniaków (patrz G. Cailletaud, ICMM'2, Paryż, 2011).
9. Str. 43, równanie (2.24) przedstawia stowarzyszone prawo płynięcia w klasycznej formie: $\underline{\underline{d}}^{p} = \dot{\lambda} \frac{\partial F(\underline{\underline{\sigma}})}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}$. Czy stowarzyszone prawo płynięcia wyrażone w takiej formie jest słuszne również dla mechanizmu bliźniakowania? Czy obydwa mechanizmy odkształcenia plastycznego: poślizg i bliźniakowanie powinny być objęte tym samym potencjałem plastyczności?
10. Str. 43, równanie (2.25): prędkość odkształcenia została wyrażona tą samą formułą (2.25) zarówno dla mechanizmu poślizgu jak i mechanizmu bliźniakowania, niezależnie od różnej dynamiki (stałej czasowej) tych procesów. Czy takie podejście jest słuszne?
11. Str. 45, 46: brak uwzględnienia efektu Bauschingera w modelu wzmocnienia. Może to mieć istotne znaczenie w przypadku procesów obciążania, odciążania i obciążania przeciwzwrotnego a także obciążeń cyklicznych. W modelu wzmocnienia występuje wyłącznie część izotropowa. Brakuje wzmocnienia typu kinematycznego.
12. Str. 46: wydaje się, że prawa wzmocnienia uwzględniające sprzężenie pomiędzy poślizgiem i bliźniakowaniem nie zostały oparte na mikromechanice. Formę tych praw dobrano arbitralnie bez uwzględnienia fizyki kryjącej się za sprzężeniem (np. oddziaływania dyslokacji z bliźniakami, poślizgów wewnątrz bliźniaków etc.). Warto byłoby wykazać, że tak przyjęte prawa wzmocnienia są słuszne i fizycznie uzasadnione (physically based).
13. Str. 47: w modelu konstytutywnym nie występują ani długości (odległości) charakterystyczne dla efektu skali ani czasy charakterystyczne dla rozwoju opisywanych zjawisk. Tak więc wymiary i czasy charakterystyczne zostały tutaj pominięte.
14. Str. 56 na dole: zamiast „Lebehsohn and Tome…" powinno być „Lebensohn and Tome…".
15. Str. 60: nie jest jasne z jaką dokładnością bada się eksperymentalnie zawartość objętościową bliźniaków. Z jaką precyzją i jakimi metodami można śledzić proces nukleacji, namnażania, rozrostu i aktywacji bliźniaków a także reorientacji ziaren.
16. Str. 61: warto byłoby umieścić skrót VPSC w wykazie na str. 23.
17. Str. 61, zdanie nad tabelą 2.4: „The aggregate composed of grain with 1500 different orientations, …" można zrozumieć w taki sposób, że chodzi o ziarno zawierające 1500 orientacji. Intencją autorki było zapewne przypisanie tych orientacji całemu agregatowi?
18. Str. 75, rys. 2.31b: nie jest jasne dlaczego aktywność superdyslokacji w czasie rozciągania w kierunku poprzecznym w stosunku do kierunku walcowania wynosi 1 natomiast aktywność bliźniakowania w tym procesie jest równa 0. Czy ten wynik symulacji jest uzasadniony eksperymentalnie?

19. Str. 88, rys. 2.41: na rysunku występują jedynie części „a” i „b”, natomiast w podpisie rysunku wymienione są części „a”, „b”, „c”, „d”. Nie bardzo wiadomo jak należy ten rysunek interpretować.
20. Str. 89, rys. 2.42: sytuacja jak wyżej. Tutaj także nie wiadomo jak interpretować rysunek.
21. Str. 98: powinno być „…, cf. Burzyński [26], since their response…”.
22. Str. 110: przyjęto założenie, że ziarna mają taki sam sferyczny kształt i te same własności. Takie założenie jest niezwykle mocne i wymaga stosownego komentarza, ponieważ wprowadza radykalne uproszczenie do modelu polikryształu.
23. Str. 117, nierówność (3.116) powinna zapewne wyglądać następująco: $\eta_K^P \neq 0 \quad and \quad \eta_K^D \neq 0$
24. Str. 125, rys. 3.6, w podpisie rysunku wskazano następujące oznaczenia: „thick black line”, „thick gray line” oraz „dashed black line”. Natomiast na rysunkach występują 2 linie przerywane i 1 linia ciągła. Ponadto, trudno odróżnić odcienie linii – w tym sensie rysunek jest nieczytelny. Podobny problem występuje na rys. 3.9.
25. Str. 133, rys 3.12b: w podpisie rysunku znalazły się oszacowania typu Voigt, Reuss, Hashin-Shtrikman (upper, lower), oraz self-consistent. Na rysunku zamiast 5 krzywych (2+2+1) znalazło się 7 krzywych. Nie jest jasne jak należy interpretować te dodatkowe krzywe.
26. Str. 137, rys. 3.17: pomyłka w podpisie rysunku. Powinno być: a) <001], b) <111>, c) <110]. Brak zgodności z trzema częściami rysunku.
27. Str. 138, zdanie powyżej równania (3.142): zapewne powinno być „… two limit situations: $\rho_3 \to \infty \quad or \quad \rho_1 = \rho_2 \to \infty$ „.
28. Str. 143, wykres 3.24: interesujące byłoby uzupełnienie tego rysunku o wykres: $\frac{\bar{h}_{sc}^D}{h_I^D} = f\left(c_{II}\right)$.
29. Str. 160, równanie (4.65): nie wszystkie symbole zastosowane w tym równaniu zostały objaśnione.
30. Interesujące jest pytanie, czy w przypadku gdy istnieją 3 systemy łatwego poślizgu (γ-*TiAl*, $\rho \to \infty$) dodanie bliźniakowania w postaci kolejnego systemu quasi-poślizgu pozwala uzyskać skończoną wartość oszacowania sztywności typu SC?
31. Str. 167, przedostatnie zdanie na dole: nie jest jasne co oznacza stwierdzenie „… with ρ_3 satisfying relation (4.70)”. Nierówność (4.70) odnosi się przecież do naprężenia płynięcia w procesie rozciągania.
32. Str. 184: zdanie „The hydrostatic part of stress is found using the boundary condition for the problem under consideration” jest bardzo ogólne i nie wyjaśnia w jaki sposób część hydrostatyczna została uwzględniona. Nie jest również jasne o jaki warunek brzegowy chodzi.
33. Str. 186, równanie (5.52): co oznacza k=1,3,5?
34. Str. 188, rys. 5.4: nie bardzo widać rozkład wartości tzw. „elastic stiffness distributor” ξ na wykresie, pomimo iż w podpisie rysunku oraz w opisie na str. 187 taki wykres jest zapowiadany.

35. Str. 190, rys. 5.6: brakuje legendy (opisu) dla pozostałych krzywych na tym rysunku. Opis obejmuje wyłącznie 4 krzywe: 2-scale (SC), RVE1, RVEV, RVER.
36. Str. 194, rys. 5.10: ten rysunek może być traktowany jako potwierdzenie faktu, iż dla materiałów dwu-fazowych (jak α_2+γ-*TiAl*) obowiązuje klasyczna powierzchnia plastyczności (Tresci), symetryczna po stronie rozciągania i ściskania. Interesujący byłby obraz powierzchni plastyczności w funkcji udziału objętościowego v_α fazy α.
37. Str. 195, rys. 5.11(b), niezrozumiałe objaśnienie pod rysunkiem: „b) Initial yield stress in shear (α_T=…, v_α=0.1, …) as a function of v_α". Nie jest zatem jasne czy v_α jest ustalone czy jest to zmienna?
38. Str. 199, rys. 5.16: niewyraźna legenda, trudno przypisać poszczególnym estymacjom określony rodzaj linii. Ponadto, na rysunku występują 4 krzywe a w opisie (legenda) jest ich 5. A zatem 2 krzywe się pokrywają, które?
39. Str. 206, rys. 5.19: gdyby wykonać ekstrapolację rozwiązania numerycznego w sensie $\sigma = f\left(\varepsilon^p\right)$ powyżej odkształcenia równego 0.3, to nastąpiłaby istotna rozbieżność w stosunku do eksperymentu. Czym jest to spowodowane?
40. Str. 208, rys. 5.22 prezentuje aktywność różnych form deformacji polikryształu o strukturze lamelarnej, nie potwierdzoną doświadczalnie. Zastanawia wysoka aktywność modu poprzecznego.
41. Str. 240: w rozdziale 5 wyprowadzono równania modelu trójskalowego uwzględniającego płytki, meta-ziarna oraz poziom makroskopowy, z uwzględnieniem drugiej fazy oraz deformacji typu poślizgowego i bliźniakowania. Wzięto pod uwagę także duże deformacje. Niestety rozwiązane przykłady eliminują niemal zupełnie obecność drugiej fazy i zostały przeprowadzone wyłącznie dla γTiAl (z pominięciem fazy α_2, sekcja 5.32). Tak więc model o dużych możliwościach został mocno zawężony w zastosowaniach.
42. Str. 214, poniżej równania 6.3 użyto pojęcia: „elastic matrix moduli tensor $\underline{\underline{\underline{\underline{L}}}} = \underline{\underline{\underline{\underline{L}}}}_0^e$".

    Wydaje się, że jest tu wewnętrzna sprzeczność. Powinno być albo „elastic stiffness tensor" albo „elastic moduli matrix".
43. Str. 217, równania 6.21, 6.22 napisano dla każdej fazy „*i*" z osobna (*i=0,N*) pomijając ewentualne oddziaływania między fazami. Warto byłoby ten fakt skomentować.
44. Str. 218, równanie 6.2.3, jeśli dla każdej fazy napiszemy z osobna $\dot{\varepsilon}_0^{V_i} + \dot{\varepsilon}_0^{E_i} = \dot{\varepsilon}_0$ to oznacza, iż każdy rodzaj fazy „i" reprezentowany przez elipsoidalne inkluzje zachowuje się zgodnie z modelem Maxwella. Ponieważ $\dot{\varepsilon}_0$ jest wspólne dla całej matrycy i wszystkich inkluzji to cały ośrodek jest reprezentowany przez połączenie równoległe modeli Maxwella, a zatem swego rodzaju uogólniony model Maxwella. To z kolei prowadzi do następujących wniosków: (1) naprężenia w takim modelu relaksują do 0 (brak naprężeń resztkowych); (2) model nie opisuje poprawnie zjawiska pełzania. Jaka jest zatem wartość praktyczna takiego modelu w odniesieniu do opisywanych materiałów?
45. Str. 219, równanie 6.35: nie jest jasne co oznaczają w tym równaniu symbole $\underline{\underline{\underline{\underline{M}}}}_o^e * \ldots$,

    zarówno w odniesieniu do indeksu dolnego „o" zamiast „0", jak i do „*".

46. Str. 223, równanie 6.60: nie wiadomo co oznacza w tym równaniu symbol $\hat{\varepsilon}^{P/D}(s)$? Wydaje się, że nie został on wcześniej zdefiniowany.
47. Str. 226: równanie pomiędzy 6.70 i 6.71 nie jest numerowane. Podobnie ostatnie równanie na str. 218.
48. Str. 226, poniżej równania 6.69: co oznacza odkształcenie pustki zależne od własności lepko-sprężystych matrycy? Jaka jest interpretacja fizyczna tego odkształcenia? Czy pustka jest traktowana wyłącznie jako nieciągłość matrycy czy też brana jest pod uwagę energia powierzchniowa ścianek pustki?
49. Str. 234, tablica 6.2: bardzo dobre, zwarte podsumowanie algorytmu w postaci „okna" w tekście rozprawy. Szkoda, że ten pomysł nie został zastosowany również w innych rozdziałach.
50. Str. 238, wniosek 1 (pierwszy znak wypunktowania): trudno się zgodzić z taką interpretacją wyniku przedstawionego na rys. 6.4a. Wariant 3 jest bowiem najbliższy rozwiązania ścisłego przedstawionego za pomocą ciemnych punktów (oznaczenie R). Na podstawie tego rysunku można by przyjąć, że to raczej wariant 3 daje najlepsze wyniki w porównaniu z wariantami 1 i 2. Ponadto, biorąc pod uwagę rysunki 6.4 i 6.6 wariant 3 daje poprawne wyniki w 5 przypadkach na 6. Natomiast we wnioskach sekcji 6.3.2 został on właściwie pominięty na rzecz wariantu 2, który daje również dobre wyniki w 5 przypadkach na 6. Warto byłoby poszerzyć bazę porównawczą aby bardziej szczegółowo wykazać przewagę jednego wariantu nad drugim.
51. Str. 240-246, sekcje 6.3.3, 6.3.4 mają charakter czysto teoretyczny (numeryczny) ponieważ nie ma tutaj żadnego odniesienia do eksperymentu. Jest to tym bardziej kłopotliwe, że rozbieżność pomiędzy poszczególnymi schematami uśrednienia jest olbrzymia (np. rys. 6.12, str. 245).
52. Str. 246, zdanie „… corresponding to the tangent, affine and secant subvariants departure from the Kröner-Weng solution…" powinno zapewne brzmieć "…subvariants depart from the…".

5 Podsumowanie opinii oraz wniosek końcowy

Podsumowując stwierdzam, iż powyższe uwagi krytyczne nie umniejszają w żaden sposób wartości naukowej rozprawy habilitacyjnej przedłożonej przez Panią dr inż. Katarzynę Kowalczyk-Gajewską. Zarówno dorobek naukowy Habilitantki jak i rozprawę habilitacyjną oceniam bardzo wysoko. Uważam ponadto, że osiągnięcia Habilitantki są świadectwem jej dużej samodzielności naukowej i konsekwencji w realizacji postawionych celów. Stwierdzam wreszcie, że dorobek naukowy jak i sama rozprawa spełniają odnośne wymogi ustawowe i wnoszę o dopuszczenie Pani dr inż. Katarzyny Kowalczyk-Gajewskiej do kolokwium habilitacyjnego.

Błażej Skoczeń