



AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Wydział Inżynierii Metali i Informatyki Przemysłowej

Al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków
Tel: +48 (12) 617 51 54
Fax: +48 (12) 617 29 21

dr hab. inż. Łukasz Madej, prof. AGH

e-mail: lmadej@agh.edu.pl

Kraków 04.09.2017

Recenzja rozprawy doktorskiej:

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

Autor rozprawy: mgr inż. Karol Frydrych

1. Przedmiot oceny

Przedmiotem recenzji jest rozprawa doktorska składająca się ze wstępu, czterech rozdziałów i podsumowania. Autor kończy rozprawę wykazem literatury zawierającym 155 prac, z których 28 opublikowano w okresie ostatnich pięciu lat. Taka proporcja świadczy o aktualności poruszanej tematyki badawczej, a równocześnie o odpowiednim odniesieniu się do prac o charakterze fundamentalnym. Problematyka rozprawy doktorskiej dotyczy zastosowania wieloskalowych modeli mikromechanicznych do oceny ewolucji mikrostruktury materiałów metalicznych w procesach intensywnej deformacji plastycznej tzw. SPD (ang. Severe Plastic Deformation). Badania laboratoryjne nad technikami przeróbki plastycznej umożliwiającymi rozdrobnienie mikrostruktury są intensywnie prowadzone w wielu ośrodkach naukowych na świecie. W tym aspekcie podejmowane są również próby wsparcia realizowanych prac badaniami modelowymi z wykorzystaniem zalet symulacji numerycznej. Ze względu jednak na złożony stan naprężenia panujący w takich procesach konieczne jest opracowanie zaawansowanych modeli opisu ewolucji mikrostruktury. Takie prace prowadzone są w kraju i za granicą a uzyskiwane wyniki publikowane w renomowanych czasopismach naukowych. Recenzowana praca wnosi wkład w ten obszar badań materiałów.

Autor wykorzystał zaawansowane podejścia mikromechaniczne bazujące na teorii plastyczności kryształów do implementacji dwuskalowego modelu ewolucji mikrostruktury oraz opracowania i implementacji trójskalowego modelu ewolucji mikrostruktury. Wprowadził również model plastyczności kryształów w struktury programu metody elementów skończonych uzyskując tzw. złożone podejście CPFEM (ang. Crystal Plasticity Finite Element). Nacisk w pracy położono również na identyfikację parametrów opracowanych modeli tak aby opisywały zachowanie badanych materiałów tj. komercyjnie czystego tytanu oraz stopu magnezu z cynkiem AZ31b. Zatem główny akcent został położony na opis modelowy zachowania się metali o strukturze sieci krystalicznej A3. Jednakże w części badań poruszane są również zagadnienia materiałów o sieci A1 na przykładzie aluminium. Opracowane i zidentyfikowane modele stanowiły punkt wyjścia do obszernej analizy zalet i ograniczeń wykorzystywanych podejść, jak również do analizy wpływu warunków odkształcenia na rozwój mikrostruktury w aspektach krystalograficznych. Dyskusję

proawdzono na wynikach uzyskanych z symulacji bardzo złożonych procesów SPD, przeciskania przez kanał kątowy (ECAP, ang. Equal Channel Angular Pressing) oraz wyciskania w matrycy o ruchu oscylacyjnym skrętnym (proces KoBo). Badano również zachowanie materiału podczas bardziej jednoznacznego procesu odkształcenia jakim jest walcowanie. Uzyskiwane wyniki były weryfikowane z wynikami badań laboratoryjnych dostępnych w jednostce macierzystej doktoranta oraz w literaturze.

Pomimo wskazanych w pracy ograniczeń podejścia CPFEM, właśnie te elementy uważam za bardzo istotne osiągnięcie Autora, ponieważ zbliżają one opis badanych morfologii mikrostruktur do ich faktycznych, złożonych kształtów. Tak jak wspomniano tego typu prace są obecnie bardzo dynamicznie rozwijane przy wsparciu zaawansowanych technik badawczych bazujących na obrazowaniu przestrzennym z wykorzystaniem akceleratorów cząstek liniowych lub kołowych.

2. Ocena pracy doktorskiej

W pierwszej części pracy Autor przybliży koncepcję procesów przeróbki plastycznej charakteryzujących się intensywną deformacją. Skupia się jednak głównie na dwóch analizowanych w pracy procesach czyli ECAP oraz KoBo. Ta część przeglądu literatury powinna być bardziej rozbudowana o przytoczenie innych ważnych metod SPD, tak aby wyraźnie przedstawić ogrom prac prowadzonych w tym zakresie. Następnie przedstawione są podstawowe informacje na temat mechanizmów odkształcenia plastycznego w stopach o strukturze A3, na przykładzie wykorzystywanych w pracy materiałów czyli wspomnianych: komercyjnie czystego tytanu oraz stopu magnezu AZ31b. W tej części przedstawione są również mechanizmy wpływające na rozdrobnienie ziaren w trakcie odkształcania plastycznego jak również aktualny stan zagadnienia związanego z modelowaniem tych mechanizmów. Autor ograniczył się w tym przypadku do przeglądu literatury obejmującego modele fenomenologiczne, mikromechaniczne, MES oraz bazujące na minimalizacji energii przyrostowej. Interesująca grupa modeli wykorzystujących metody automatów komórkowych, Monte Carlo czy podejścia pola fazowego są potraktowane bardzo skrótowo lub pominięte. Może to jednak wynikać z faktu ograniczenia przeglądu literatury głównie do prac nad materiałami o sieci A3.

Na bazie informacji przedstawionych w pierwszej części pracy Autor formułuje tezę oraz cel pracy. Teza zakłada, że: *analityczne i kontynualne modele mikromechaniczne oparte na teorii plastyczności kryształów uwzględniające bliźniakowanie, są skutecznym narzędziem modelowania ewolucji mikrostruktury metali o wysokiej wytrzymałości właściwej w procesach intensywnej deformacji plastycznej.*

Aby udowodnić postawioną tezę zdefiniowano trzy główne obszary pracy:

- Implementację oraz identyfikację dwuskalowego analitycznego mikromechanicznego modelu plastyczności kryształów.
- Sformułowanie, implementację oraz identyfikację trójskalowego analitycznego mikromechanicznego modelu plastyczności kryształów.
- Implementację modelu kontynualnego w sformułowaniu CPFEM.

Rozdział drugi obejmuje opis teoretyczny modelu pojedynczego kryształu stanowiącego podstawę wszystkich opracowywanych w pracy podejść numerycznych. Ta część zawiera wszystkie klasyczne równania teorii plastyczności kryształów i jest napisana w przejrzysty sposób. Autor wyjaśnia również powody pominięcia w równaniach części związanej ze sprężystymi odkształceniami sieci. W pracy wykorzystano sformułowania przemieszczeniowe niezależne oraz zależne od skali czasu jak również sformułowanie prędkościowe zależne od skali czasu. Opisano również wykorzystywane prawa umocnienia systemów poślizgu i bliźniakowania oraz pewne uproszczenia wprowadzone w tym zakresie do modelu

kontynualnego. Na koniec zdefiniowano miarę chwilowej aktywności systemów poślizgu i bliźniakowania wykorzystywaną w kolejnych rozdziałach pracy. Jedyne zauważone niedociągnięcia w tej części wiążą się z notacją wektora sieci kryształu w konfiguracji odniesienia.

Rozdział trzeci przedstawia koncepcję modelu dwuskalowego wraz z opisem różnych mechanizmów wykorzystywanych do sprzęgnięcia rozwiązań z różnych skal wymiarowych. W tym obszarze wykorzystano model Taylora oraz bardziej złożony tzw. wewnętrznie zgodny z rozróżnieniem na warianty sieczny, styczny oraz afiniczny. W opisie przedstawiono modyfikacje podstawowych równań stosowanych w każdym z wariantów. Zaimplementowany model poddano następnie procedurze identyfikacji parametrów tak aby poprawnie opisywał rozwój mikrostruktury w badanych materiałach. W pierwszym etapie, identyfikacji parametrów dla Ti, wykorzystano literaturowe wyniki badań laboratoryjnych spęczania na gorąco. Nie podano jednak informacji odnośnie parametrów procesu takich jak kształt, wymiary czy prędkość odkształcenia stosowanych podczas testu. Identyfikację przeprowadzono dla dwóch wariantów modelu z uwzględnieniem bliźniakowania oraz bez uwzględnienia bliźniakowania. Pierwszy z wariantów zastosowano w pracy do opisu materiału w procesie ECAP, natomiast drugi w procesie KoBo, gdzie ze względu na wysoką temperaturę oraz bardzo duże deformacje wpływ bliźniakowania może być pominięty. Zidentyfikowane parametry dla dwóch wariantów modelu dwuskalowego zebrano w odpowiednich tablicach. Porównanie uzyskanych wyników z pomiarami laboratoryjnymi wskazuje na pewne rozbieżności, wynikające z dostępu do ograniczonej liczby wyników badań dla tego materiału. Dane eksperymentalne w przypadku identyfikacji modelu dla stopu AZ31b, są znacznie obszerniejsze i umożliwiają wykorzystanie bardziej precyzyjnej procedury identyfikacji. W tym przypadku wykorzystano wyniki pomiarów z testów: spęcznia w trzech kierunkach, spęczenia ze zmianą ścieżki odkształcenia dla próbek wyciętych z materiału po wyciskaniu oraz testów: rozciągania i spęczania z rozciąganiem dla próbek wyciętych z walcowanej blachy. Próbkę przed testami były wygrzewane przez 2 godziny w temp. 350°C dla ujednorodnienia mikrostruktury. Pewne zamieszanie na tym etapie wprowadza stwierdzenie Autora o przygotowaniu próbek z walcowanego pręta. Nie jest również jasne dlaczego akurat wybrano zakres odkształcenia wstępnego próbek z pręta z obszaru 2% i 4%. Pojawia się pytanie: czy wybrany zakres odkształcenia podczas identyfikacji odpowiada temu panującemu podczas testu ECAP lub KoBo? Podczas realizacji procedury identyfikacji Autor zaimplementował z wykorzystaniem języka skryptowego Python algorytm optymalizacji wykorzystujący koncepcję algorytmów genetycznych. Wspomniał, iż wadą algorytmu jest brak informacji czy uzyskany zestaw parametrów jest optymalny. To stwierdzenie jest dość ogólne i dotyczy praktycznie wszystkich metod optymalizacji z uwzględnieniem wspomnianej przez Autora metody „interaktywnej”. W pracy nie wyjaśniono również dlaczego akurat wybrano taki algorytm inspirowany naturą a nie inny np. algorytm roju cząstek PSO (ang. Particle Swarm Optimisation) czy bardziej klasyczne algorytmy np. bezgradientowe. Wykorzystane kryterium stopu bazujące na założonej z góry liczbie pokoleń, również jest pewnym uproszczeniem. Ta część pracy poza porównaniem graficznym mogła być również wzbogacona o podanie wartości wyliczonej funkcji celu co zapewniłoby nie tylko jakościową a również ilościową informację o jakości uzyskanych wyników. Zidentyfikowane parametry modelu dwuskalowego zebrano w odpowiednich tablicach. Pytanie, które nasuwa się w tej części pracy to: czy gdyby materiał po wyciskaniu i walcowaniu był odpowiednio ujednorodniony uzyskane byłyby te same zestawy parametrów modelu?

W kolejnej części rozdziału 3 przeprowadzono symulacje numeryczne procesu odkształcenia ECAP z wykorzystaniem zidentyfikowanego modelu dwuskalowego analizując szczegółowo uzyskiwane wyniki po kolejnych przejściach próbki z Ti przez kanał kątowy. Analogiczne badania powtórzono dla symulacji zachowania się materiału w warunkach

realizacji procesu KoBo. W tym przypadku dla uproszczenia modelowanego zagadnienia wykorzystano ścieżki deformacji kilku punktów charakterystycznych określonych w pracach prof. Petryka i prof. Stupkiewicza. Wyniki badań laboratoryjnych wykorzystanych do weryfikacji przewidywań modelu zaczerpnięto z literatury. Rozdział ten rozbudowano również o wyniki obliczeń z modelu zastosowanego do opisu zachowania się próbek ze stopu magnezu w procesie ECAP podczas jednego przejścia przez kanał. Uzyskane wyniki ponownie porównano z wynikami badań laboratoryjnych oraz odniesiono do innych wyników obliczeń uzyskiwanych w literaturze. Ten rozdział jest niezmiernie obszerny jednak cenny z punktu widzenia koncepcji pracy. Potwierdza duże możliwości modelu dwuskalowego w symulacji rozwoju mikrostruktury w złożonych procesach SPD.

Rozdział 4 przedstawia autorskie podejście do opracowania modelu mikromechanicznego o trójskalowym charakterze. Bazą podejścia jest model dwuskalowy jednak wzbogacony o kolejną warstwę modelową uwzględniającą podziarną w strukturze ziaren pierwotnych. Podczas pracy Autor ponownie wykorzystał różne podejścia do przekazywania informacji pomiędzy modelami wykorzystując model Taylora, VPSC lub ich kombinacje. W przypadku podejścia VPSC nie wyjaśniono w pracy z jakich względów nie zdecydowano się na modyfikację kodu VPSC w celu prowadzenia symulacji równocześnie w trzech skalach. W zamian zastosowano podejście dwuetapowe. Tak opracowany model zastosowano do symulacji zachowania się materiału podczas procesu ECAP i oceny wpływu warunków odkształcenia na rozwój podstruktury. Na tym etapie, do symulacji wybrano materiał o sieci A1, ze względu na dostępny znacznie pełniejszy opis mechanizmów rozdrobnienia ziaren w tych strukturach. Uznano zatem, że jest to dobry materiał do przeprowadzenia weryfikacji modelu. W tej części pracy nie jest jednak jasne, jak pozyskano dane materiałowe dla badanego A1 oraz co było kryterium doboru wartości wykładników w prawie potęgowym (stosowano różne wartości w różnych przypadkach). Zweryfikowany model zastosowano następnie do oceny zachowania się materiałów o sieci A3 tym razem podczas względnie prostego procesu, walcowania na zimno. Dla tych warunków realizacji obliczeń ponownie konieczne było dokonanie identyfikacji parametrów modeli materiałów dla Ti. Etap identyfikacji niestety opisany jest niejasno, a w tekście Autor odnosi się do identyfikacji modelu dwu a nie trójskalowego. Nie jest również precyzyjnie wyjaśnione dlaczego do badań wybrano przypadek walcowania na zimno. Na tym etapie pojawia się pytanie: czy w opracowanych modelach możliwe jest wzięcie pod uwagę wpływu początkowego rozmiaru ziarna na rozwój mikrostruktury?.

Zaletą wykorzystania modelowania trójskalowego jest niewątpliwie możliwość przewidywania kątów misorientacji, co jest znaczącym osiągnięciem niniejszej pracy. Wartościowym elementem niniejszego rozdziału jest również dyskusja ograniczeń zaproponowanego rozwiązania oraz możliwych kolejnych modyfikacji.

Piąty rozdział pracy poświęcony jest opracowaniu modelu CPFEM z wykorzystaniem modelu plastyczności kryształów z rozdziału 2 wprowadzonego w struktury programu MES. Ten rozdział jest niezmiernie cenny ponieważ jest krokiem w stronę uwzględnienia aspektów budowy poszczególnych elementów mikrostruktury w sposób bezpośredni w trakcie symulacji. W pierwszej części Autor ponownie przedstawił założenia teoretyczne modelu. Wyjaśnienia wymaga tutaj założenie sztucznego zerowania udziałów objętościowych zakumulowanego bliźniakowania. Symulacje modelem CPFEM zostały wykonane z wykorzystaniem programu AceFEM. W opracowanym modelu tworzenie się substruktury na drodze rotacji sieci krystalograficznej jest przewidywane w sposób naturalny. Autor zaproponował interesujący algorytm do określania wartości misorientacji na podstawie orientacji poszczególnych ziaren. Wykorzystany model cyfrowej mikrostruktury różni się stopniem skomplikowania, w którym ziarna traktowane są jako regularne bloki elementów lub jako struktury powstałe na drodze tesselacji. Podczas obliczeń zastosowano regularne sześciokątne elementy skończone, co jak

słusznie zauważa Autor jest pewnym uproszczeniem. Wykorzystanie siatek nieregularnych np. tetragonalnych znacząco poprawiłoby przewidywania modelu, jednak to otwiera kolejny etap badań i wyzwań. Przed rozpoczęciem analizy numerycznej z wykorzystaniem opracowanego modelu, dokonano określenia parametrów reprezentacyjnego elementu objętości. W tym celu zrealizowano obliczenia dla zwiększającej się liczby elementów skończonych co jest równoznaczne ze zwiększającą się liczbą ziaren w mikrostrukturze. Zatem ponownie pojawia się pytanie, odnośnie uwzględnienia fizycznego rozmiaru ziaren, dyskretyzowanych różną liczbą elementów skończonych. W omawianym rozdziale opisano również wpływ na uzyskiwane wyniki różnych definicji warunków brzegowych: prostych, mikro-periodycznych i quasi-kinematycznie jednorodnych.

W trakcie symulacji numerycznych wykonanych w tym rozdziale ponownie skupiono się na przypadku metalu o strukturze A1 a następnie A3. Uzyskane wyniki pokazały, iż początkowa orientacja ziaren wyraźnie wpływa na uzyskiwane wartości współczynników Taylora. Obliczenia przeprowadzono jednak dla założenia stałej początkowej orientacji w obszarze pojedynczych ziaren. Interesująca byłaby taka dyskusja przy założeniu niejednorodnego rozkładu orientacji w ziarnie przed odkształceniem. Uzyskiwane wyniki obliczeń są w każdym przypadku weryfikowane z dostępnymi danymi eksperymentalnymi, wskazując na zalety ale również wady pewnych stosowanych rozwiązań. Rozdział 5 stanowi bardzo obszerny zbiór ogromnej liczby symulacji zrealizowanych dla różnych warunków początkowych. W tej części brakuje podsumowania wykonanych prac, takiego jak było w przypadku wcześniejszych rozdziałów.

Podsumowanie całości pracy znajduje się natomiast w ostatnim rozdziale 6, gdzie Autor również wyraźnie podkreśla swoje osiągnięcia.

3. Uwagi szczegółowe

Praca napisana jest bardzo starannie z zachowaniem standardów tekstu naukowo-technicznego, cechuje się dokładnością wykonanych rysunków i ilustracji.

W pracy występują nieliczne drobne błędy edytorskie takie jak - niespójny zapis nazw czasopism w rozdziale z literaturą np. Acta Mater., oraz Acta Materialia czy - pojedyncze przypadki błędnie wstawionych znaków interpunkcyjnych np. podpis Rys. 3.10.

4. Uwagi dyskusyjne

Proszę przedstawić wyjaśnienia następujących kwestii w formie pisemnej:

- dlaczego wybrano zakres odkształcenia wstępnego próbek z pręta z obszaru 2% i 4%?
- czy wybrany zakres odkształcenia podczas identyfikacji odpowiada temu panującemu podczas testu ECAP lub KoBo?
- dlaczego do optymalizacji wybrano algorytm genetyczny?
- dlaczego zastosowano kryterium stopu w formie liczby pokoleń?
- czy identyfikacja modelu mikromechanicznego na danych pochodzących z odkształcenia pojedynczych ziaren mikrostruktury (np. spęczanie monokryształów o charakterystycznych orientacjach krystalograficznych) wpłynie na poprawę uzyskiwanych wyników?
- czy podczas procesów SPD brane jest pod uwagę ciepło generowane w trakcie odkształcenia oraz jak przyrost temperatury wpływa na wartości zidentyfikowanych parametrów modeli? Ten mechanizm jest niezmiernie istotny w przypadku procesu KoBo.

- czy podczas zmiany drogi odkształcenia w badanych procesach SPD występuje mechanizm rozwoju mikro- oraz pasm ścinania?
- z jakich względów nie zdecydowano się na modyfikację kodu VPSC w celu prowadzenia symulacji równocześnie w trzech skalach?
- w jaki sposób dokonano identyfikacji parametrów modelu trójskalowego?
- dlaczego podczas symulacji modelem trójskalowym wybrano proces walcowania na zimno?
- czy w opracowywanych modelach możliwe jest uwzględnienie wpływu początkowego rozmiaru ziarna na zachowanie się materiału?
- czy możliwe jest uwzględnienie niejednorodnego rozkładu orientacji w obszarze pojedynczych ziaren w modelu CPFEM?

5. Podsumowanie

Autor na bazie zaproponowanych założeń właściwie przeprowadził prace w swoim doktoracie wykazując się bardzo dużą dojrzałością naukową oraz bogatym aparatem matematycznym. Zaprezentował umiejętności i wiedzę niezbędną do samodzielnego sformułowania i rozwiązywania zagadnienia naukowego.

Podsumowując ocenę pracy, za podstawowe osiągnięcia naukowe Autora uważam:

- implementację modeli dwu- oraz trójskalowych wraz z ich weryfikacją,
- implementację modelu CPFEM wraz z weryfikacją,
- przeprowadzenie wnikliwej dyskusji ewolucji mikrostruktury w warunkach silnego odkształcenia plastycznego na zimno oraz w podwyższonych temperaturach dla materiałów o sieciach A3 oraz A1.

Przedstawione powyżej uwagi krytyczne są w dużej mierze dyskusyjne i wynikają z zainteresowania recenzenta przedstawioną pracą, szczególnie w zakresie wykorzystania modeli cyfrowych mikrostruktur. Nie obniżają one jednak bardzo pozytywnej oceny przedstawionej rozprawy doktorskiej, która jest wartościową pozycją naukową. Uważam, że opiniowana rozprawa doktorska, spełnia warunki określone obowiązującą ustawą o Stopniach Naukowych i Tytule Naukowym z 16 kwietnia 2003 r. z późn. zm. Wnioskuje o dopuszczenie mgr inż. Karola Frydrycha do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Biorąc pod uwagę wysoki poziom merytoryczny oraz edycyjny rozprawy a także oryginalność zaproponowanych rozwiązań numerycznych, szczególnie w aspekcie opracowania modelu trójskalowego, wnioskuję o wyróżnienie pracy doktorskiej mgr inż. Karola Frydrycha.

Lukasz Madej