

Tomasz Łodygowski
Instytut Konstrukcji Budowlanych
Politechniki Poznańskiej
ul. Piotrowo 5, 60-965 Poznań

Poznań, 28 stycznia 2006

Opinia na temat rozprawy doktorskiej pana **mgr inż. Grzegorza JURCZAKA**,
pt.: **Anizotropia sprężysta kryształów. Analiza i modelowanie numeryczne
metodą elementów skończonych**

1. Uwagi ogólne i treść pracy

Recenzowana rozprawa liczy 130 stron. Składa się z sześciu rozdziałów oraz zawiera zestawienie bibliografii i trzy aneksy. Autor podejmuje ważny i intelektualnie fascynujący problem występujący w heterostrukturach krystalicznych (HK). W sformułowaniach Autor posługuje się modelem nieliniowej anizotropii hipersprężystej, zaś w swych modelach numerycznych znaną od lat i powszechnie stosowaną techniką opierającą się na aproksymacjach Metody Elementów Skończonych (MES). Opracowany algorytm numeryczny pozwala na wyznaczenie konfiguracji równowagi i naprężeń residualnych w HK oraz po uwzględnieniu dodatkowych założeń w heterostrukturach z defektami.

Rozdz.1 stanowi wprowadzenie do tematyki rozprawy. Definiuje cel i zakres pracy.

W Rozdz.2 Autor dokonał przeglądu podstawowych pojęć sprężystości. Uporządkował sformułowania klasycznej teorii sprężystości, zestawiając je z zagadnieniami anizotropii, symetrii materiału i skończonych deformacji. Omówił szczegółowo zagadnienia hipersprężystości i podał przykłady klasycznych modeli materiałów hipersprężystych (St. Venanta-Kirchhoffa, Murnaghana i Odegna) wraz z dyskusją ich przydatności i zastosowań.

W Rozdz.3, podstawowym dla rozprawy, Autor zwrócił uwagę na sposoby tworzenia związków konstytutywnych dla poziomego kontinuum materialnego poprzez przejścia międzyskalowe (ze skali mikro do makro), metody homogenizacji czy stosując podejście termodynamiki statystycznej. Sposoby te mogą być skuteczne w określonych sytuacjach opisów różnych materiałów. Współczesne metody obliczeniowe dyskretnych struktur kryształu pozwalają analitycznie przewidywać makroskopowe zachowanie się ciała krystalicznego nie tracąc jednocześnie informacji o pojedynczym atomie. W dalszej części Autor przedstawił swoją koncepcję nieliniowej anizotropii hipersprężystej popartą szczegółową dyskusją stosowanych miar deformacji i naprężeń oraz sposobu ustalania stałych sztywności dla kryształów o różnej symetrii oraz ich transformacji przy zmianie skoniugowanych par naprężeń i odkształceń.

Kolejny, Rozdz.4 jest dyskusją sposobu algebraizacji postawionego problemu dającego szansę na rozwiązanie kolejnych zadań brzegowych w postaci przyjęcia jako narzędzia MES. Szczególną uwagę skierował Autor na obliczenia dwóch pochodnych cząstkowych, które wpływają na część geometryczną oraz konstytutywną macierzy sztywności. Okazało się, że dla obliczeń wpływu części konstytutywnej na zmianę sztywności układu, oszacowując pochodną naprężeń względem gradientu deformacji, wygodniej jest posługiwać się metodą różnicową niż korzystać ze skomplikowanych formuł analitycznych.

Rozdz.5 prezentuje przykłady numeryczne dobitnie podkreślające siłę proponowanego sformułowania, obliczone w środowisku programu FEAP. Przedstawiono i przedyskutowano wyniki czterech zadań nawiązujących do efektów dyslokacji i określenie koncentracji indu w studniach kwantowych. Prezentacja przykładów jest poprzedzona systematyką defektów punktowych i dyslokacji oraz krótką dyskusją przyczyn ich powstawania.

W Rozdz.6 Autor dokonuje krótkiego podsumowania rozprawy ukazując osiągnięte cele naukowe oraz starając się uwypuklić oryginalne elementy pracy. Głównym osiągnięciem naukowym rozprawy jest opracowanie i wdrożenie nowego algorytmu numerycznego opierającego się na omawianym sformułowaniu nieliniowej anizotropowej hipersprężystości i technologii MES.

Prezentowana rozprawa zawiera ponadto obszerny i reprezentatywny dla podjętego tematu spis literatury oraz trzy dodatki. Dodatki te zawierają szczegóły stosowanego sformułowania np. sposobu przeliczenia stałych sztywności przy zmianie przyjętego opisu miary odkształcenia czy też konsekwencji samego wyboru parametru miary odkształcenia. Prezentowane w dodatkach wyniki są nowe i ubogacają rozumienie konsekwencji przyjmowanych założeń.

Rozprawa nie zawiera wydzielonego rozdziału dotyczącego przeglądu literatury, ale muszę podkreślić, z należytą uwagą podchodzi do właściwego osadzenia swoich dociekań na tle aktualnej literatury światowej. Wszystkie rozdziały zawierają wprowadzenie do rozważań poprzedzone opisem kierunków badań i stanu wiedzy w poszczególnych dyskutowanych kwestiach. Osiągnięte wyniki Autor zawsze konfrontował ze znanymi, cytowanymi osiągnięciami innych badaczy. Zaproponowany sposób prezentacji dał szansę na uwypuklenie erudycji Autora i łatwości posługiwania się literaturą naukową.

2. Ocena rozprawy i uwagi krytyczne

- Praca pana mgr Grzegorza Jurczaka podejmuje temat trudny zarówno jako zagadnienia teoretycznego jak i nie łatwego z punktu widzenia skutecznej implementacji numerycznej. Choć w znacznej mierze prezentowane w rozprawie treści dotyczące modelowania konstytutywnego materiałów są znane, to należy uznać, że logiczna forma ich prezentacji i na tym tle zaproponowanie modelu nieliniowego anizotropowego materiału hipersprężystego o szerokim spektrum zastosowań, dowodzi dobremu przygotowaniu Kandydata do pracy naukowej.
- Za istotną wartość pracy uznaję opracowanie narzędzi obliczeniowych, których podstawa opiera się na zaproponowanych modelach kontinuum, a pozwalających na ocenę stanu naprężenia i odkształcenia w zdefektowanych heterostrukturach. Ten sposób opisu materiału, w którym nie zaniedbuje się efektów fizycznych występujących w nanoskali, a pozwalający na wykorzystanie potencjału obliczeniowego doskonale rozpoznanego na poziomie mechaniki kontinuum, dziś wydaje się jedynym możliwym sformułowaniem prowadzącym skutecznie do aplikacji przemysłowych.
- Sądzę, że można by wzmocnić zaufanie do osiągniętych wyników zadań numerycznych poprzez choćby dwa elementy: Ukazanie zależności osiąganych rozkładów poszukiwanych pól od stopnia złożoności przyjmowanych elementów skończonych (myślę tu o aproksymacjach funkcji próbnych za pomocą wielomianów innych stopni) oraz wprowadzenie różnych gęstości siatek elementów skończonych. Wobec stopnia złożoności problemów i formalnej trudności przedstawienia dowodów matematycznych zbieżności te proponowane powyżej proste zabiegi, niejako

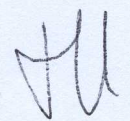
eksperymentalnie, dowodzą trafności stosowanych aproksymacji i jakości dyskretyzacji. Pamiętajmy wszakże, że wymiary siatek znacznie różnią się od wymiarów siatki krystalicznej i efektów opisywanych przez zaproponowane związki konstytutywne. Efekty te na poziomie mikro czy nano skali mają również charakter silnie zlokalizowanych.

- Autor podkreśla siłę proponowanego sformułowania również poprzez porównanie efektów energetycznych. Sądzę, że łatwo by było porównać ich niezmiennosc dla różnych dyskretyzacji w proponowanych zadaniach brzegowych.
- Dysertacja napisana jest językiem zwięzłym i sformułowana w logiczny sposób. Jest przygotowana na bardzo dobrym poziomie edytorskim, a tylko nieliczne drobne uchybienia językowe i „literówki” podkreślają rzetelność wykonanej pracy.

3. Ogólna ocena rozprawy i wniosek końcowy

Rozprawa doktorska mgr inż. Grzegorza Jurczaka jest zwięzłym, inteligentnym, celowym i ważnym opracowaniem łączącym zaawansowane strategie obliczeniowe z nowoczesnym wieloskalowym sformułowaniem konstytutywnym. Opracowując i formułując niniejszą rozprawę, Autor wykazał dobre przygotowanie do pracy naukowej, umiejętność samodzielnego rozwiązywania problemów naukowych, zarówno teoretycznych jak i numerycznych oraz znajomość i umiejętność posługiwania się literaturą naukową. Uzyskane przez Autora, poprzez to opracowanie doświadczenie i warsztat naukowy pozwalają na kontynuację badań naukowych oraz dają nadzieję na dalszy prawidłowy rozwój naukowy Doktoranta. Praca otwiera możliwości na podjęcie szerokiego spektrum nowych problemów, które mogą być rozwiązywane z wykorzystaniem zbudowanego środowiska obliczeniowego.

Wobec powyższego uważam, że recenzowana praca spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim i wnoszę o jej dopuszczenie do publicznej obrony.



Tomasz Łodygowski