



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

**AGH**

prof. dr hab. inż. Łukasz Madej

e-mail: lmadej@agh.edu.pl

Kraków 22.05.2025

## Recenzja rozprawy doktorskiej:

*„Micromechanical modelling of voided FCC and HCP polycrystals in inelastic regime”*

Autor rozprawy: mgr inż. Saketh Virupakshi

### 1. Przedmiot oceny

Przedmiotem recenzji jest rozprawa doktorska składająca się ze streszczenia, wstępu, siedmiu rozdziałów, podsumowania oraz bibliografii. Wykaz literatury zawiera 241 prac, przedstawiających wiele publikacji o charakterze fundamentalnym dla poruszanej tematyki, a także nowych wydanych w okresie ostatnich pięciu lat tj. w latach 2020-2025. Problematyka rozprawy doktorskiej dotyczy modelowania rozwoju pustek z uwzględnieniem wpływu lokalnych niejednorodności mikrostruktury w szczególności w formie anizotropii krystalitów. Analizie poddano wpływ orientacji krystalitów czy początkowego udziału objętości pustek na ich ewolucję, a w rezultacie rozwój niejednorodność odkształcenia podczas obciążania w zakresie odkształceń plastycznych. Tego typu prace są niezmiernie istotne w obszarze modelowania szerokiego spektrum procesów przeróbki plastycznej, w których możliwość przewidywania rozwoju pęknięć jest kluczowym zagadnieniem, szczególnie dla materiałów o strukturze heksagonalnej gęstego upakowania (HCP). Niska plastyczność tych materiałów stanowi istotne ograniczenie ich praktycznego zastosowania. Zmniejszenie tych ograniczeń wymaga natomiast pełniejszego zrozumienia mechanizmu degradacji związanego właśnie ze wzrostem pustek w skali mikrostruktury prowadzącym do pęknięcia w skali makroskopowej. Tematyka jest zatem aktualna, nieustannie rozwijana i znajduje uznanie renomowanych czasopism naukowych.

Recenzowana praca skupia się na opracowaniu i wykorzystaniu dedykowanych podejść numerycznych o różnym stopniu złożoności począwszy od metody elementów skończonych wspomaganą modelem plastyczności kryształów, modelu mikromechanicznego o hybrydowym, wieloskalowym charakterze, a skończywszy na modelu fenomenologicznym do zastosowań w obliczeniach inżynierskich. Równocześnie uzyskiwane wyniki były weryfikowane z wynikami badań laboratoryjnych oraz obliczeń numerycznych dostępnych w literaturze.

Recenzowana praca niewątpliwie wnosi wkład w obszar badań nad uszkodzeniem materiałów zapewniając nową wiedzę na temat ich lokalnego zachowania z uwzględnieniem

występujących niejednorodności, a także dostarczając uproszczony model do zastosowań przemysłowych.

## 2. Ocena pracy doktorskiej

W pierwszej części pracy Autor przybliży koncepcję mechanizmów pękania w materiałach metalicznych w szczególności pękania o ciągliwym charakterze. Przedstawiony rys historyczny przez sięga prac naukowych z 1949 roku. Omówione tym samym zostały kwestie związane z wpływem lokalnych niejednorodności na inicjalizację pękania a także mechanizmy ich dalszego rozwoju w formie koalescencji pustek, w tym przewężenie, ścinanie oraz ich łączenie. Wskazano również m.in. na istotną rolę dyslokacji, granic ziaren czy granic bliźniaków w mechanizmie inicjalizacji pękania. Ta część przeglądu literatury jest jednak dość fragmentaryczna, bez bardziej wnikliwej klasyfikacji i obejmuje szerokie spektrum materiałów metalicznych. Interesującym rozszerzeniem byłaby w tym aspekcie analiza pracy np. „Damage in metal forming” autorstwa prof. Ermana Tekkaya. Kolejna część przeglądu literatury obejmuje opis dostępnych modeli pękania ciągliwego o charakterze fenomenologicznym, wykorzystujących metodę elementów skończonych i zaawansowane modele plastyczności kryształów. Ta część jest rozbudowana i usystematyzowana jednoznacznie wskazując na kierunku rozwoju omawianych podejść. Autor ograniczył się jednak głównie do przeglądu literatury obejmującego modele fenomenologiczne, mikromechaniczne czy bazujące na metodzie elementów skończonych (MES) pomijając inne podejścia do modelowania tego zagadnienia bazujące np. na metodzie pola fazowego.

Na bazie informacji przedstawionych w pierwszej części dysertacji Pan Virupakshi sformułował cel pracy jakim jest zrozumienie oraz wyjaśnienie wpływu anizotropii kryształów na procesy inicjalizacji, wzrostu i koalescencji pustek prowadzące do pękania plastycznego w materiałach polikrystalicznych, z wykorzystaniem analiz numerycznych i mikromechanicznych modeli konstytutywnych. Do badań wybrano materiały o strukturze krystalograficznej ściennie centrowanej (FCC) i heksagonalnej gęsto upakowanej odkształcające się poprzez poślizg krystalograficzny oraz bliźniakowanie. Teza pracy nie jest jednoznacznie sformułowana jednak z opisu tego rozdziału jasno wynika jakie Autor przyjął założenia.

Aby osiągnąć zamierzenia swoich badań zdefiniowano trzy główne obszary pracy:

- Implementację modelu plastyczności kryształów w metodzie elementów skończonych z uwzględnieniem wpływu mechanizmu poślizgu krystalograficznego oraz bliźniakowania.
- Analizę rozwoju pustek i ich wpływu na niejednorodności odkształcenia plastycznego w materiałach FCC i HCP w szerokim zakresie zdefiniowanych stanów obciążenia.
- Sformułowanie oraz implementację mikromechanicznego modelu pola średniego z wykorzystaniem dwu-etapowej procedury homogenizacji Mori-Tanaki i schematu samo uzgodnionego.
- Implementację i identyfikację modelu fenomenologicznego stanowiącego rozbudowanie klasycznego podejścia Gursona, Tvergaard i Needlemana.

Rozdział 2 szczegółowo omawia koncepcję modelu plastyczności kryształów, z uwzględnieniem stosowanych notacji matematycznych, a także charakterystykę

występujących w materiałach FCC i HCP systemów poślizgów. W pracy wykorzystano uprzednio opracowany w zespole Pani Promotor, Pani prof. Katarzyny Kowalczyk-Gajewskiej model plastyczności kryształów wrażliwy na prędkość odkształcenia oraz uwzględniający wpływ bliźniakowania. Omówiono także modele umocnienia oraz sposoby uwzględniania reorientacji sieci związanej z bliźniakowaniem. Dodatkowo w opisie wskazano na pewne założenia związane z bliźniakowaniem wprowadzone do wykorzystywanego modelu na bazie doniesień literaturowych.

Rozdział 3 poświęcono badaniom nad konfiguracją obliczeniowych komórek elementarnych (tzw. unit cells), które stanowią podstawę analiz związanych z poznaniem i zrozumieniem mechanizmów ewolucji pustek jak również dostarczają danych niezbędnych dla modeli opracowanych w rozdziałach 4 i 5. Całość implementacji modeli oraz obliczeń numerycznych została zrealizowana w pakiecie AceGen oraz AceFEM. Jedynie zagadnienie dyskretyzacji domeny obliczeniowej w przestrzeni 2D oraz 3D zrealizowano przy wykorzystaniu dodatkowego pakietu Abaqus. Nie wskazano jednak z czego wynikał wybór akurat takiego pakietu do generacji stosunkowo prostych siatek elementów skończonych. Analizy numeryczne zachowania się modelu osnowy z pustką prowadzono z wykorzystaniem dwóch typów warunków brzegowych: przemieszczeniowych i naprężeniowych. W opisie nie do końca jasno wyjaśniono konieczność zmian w implementacji elementów sprężynowych podczas obliczeń w rozdziałach 4 i 5. Brakuje również przedstawienia wyników wpływu stopnia zagęszczenia siatki elementów skończonych na jakość uzyskiwanych wyników. Tego typu analiza jednoznacznie podkreślałaby poprawność wyników obliczeń modelami unit cells. W opisie brak jest również wyszczególnienia, które fragmenty kodu były implementowane przez Autora, a które zostały zaczerpnięte z wcześniejszych prac zespołu.

W rozdziale 4 przedstawiono wyniki badań nad ewolucją pustek w aspekcie niejednorodności odkształcenia i rozwoju mikrostruktury w monokryształach FCC odkształcających się tylko przez poślizg. Wykorzystano dwuwymiarowy model unit cell z założeniem płaskiego stanu odkształcenia z pojedynczą pustką. Przedstawiono również wstępną weryfikację przewidywań modelu z dostępnymi danymi eksperymentalnymi. Wyjaśnienie rozbieżności pomiędzy wynikami obliczeń numerycznych i badań eksperymentalnych zaczerpniętych z literatury jest jednak dość ogólne. Następnie zbadano wpływ orientacji krystalograficznej i różnych warunków brzegowych na rozwój pustek oraz zmiany w lokalnej rotacji sieci. Przeprowadzono symulacje jednoosiowego i dwuosiowego spęczania i rozciągania celem zrozumienia wpływu anizotropii materiału na wzrost pustek. W pracy nie sformułowano jednak w sposób bezpośredni kryterium koalescencji pustek. Bez komentarza pozostawiono także możliwy wpływ takiego mechanizmu na uzyskiwane wyniki oraz jakie możliwe trudności należy pokonać aby taki efekt uwzględnić. Ewolucja pustek była obserwowana przez śledzenie zmian średnicy pustek w różnych kierunkach. Przedstawione omówienie uzyskanych wyników jest zrozumiałe, obszerne i odnosi się do obserwacji o charakterze fundamentalnym dla zrozumienia analizowanych zjawisk. Przedstawienie stopnia degeneracji siatki elementów skończonych w analizowanych przypadkach testowych dodatkowo podniosło by wartość tego rozdziału. Docenić natomiast należy końcowe, bardzo jasne podsumowanie głównych obserwacji poczynionych w ramach niniejszego rozdziału.

Rozdział 5 przedstawia kolejne wyniki analiz numerycznych opracowanym modelem

jednak tym razem skupiając się na monokryształach o strukturze HCP. Jako przykład wybrano stop Az31B, który był uprzednio analizowanych w ramach prac zespołu. Parametry modelu ponownie zostały zaczerpnięte z literatury. Wartościowym uzupełnieniem tej części prac byłaby natomiast dyskusja nad procedurą identyfikacji tych parametrów wraz z omówieniem koniecznych do wykorzystania technik badań laboratoryjnych. W trakcie przedstawionych analiz w przestrzeni 2D ocenie poddano związek ewolucji pustek z początkową orientacją krystalograficzną monokryształów oraz z założonym schematem obciążenia. Część uzyskiwanych wyników była weryfikowana ze zbliżonymi wynikami badań literaturowych potwierdzając wysokie zdolności predykcyjne opracowanego modelu. W części przedstawionych wyników w formie map rozkładów widoczna jest silna degeneracja niektórych elementów skończonych. Brak jest wyjaśnienia jak te efekty wpływają na jakość uzyskiwanych wyników. Natomiast ponownie bardzo wartościowym elementem jest jednoznaczne podsumowanie uzyskanej nowej wiedzy w zakresie roli mechanizmów odkształcenia na ewolucję pustek. Prace z tego zakresu były następnie kontynuowane z wykorzystaniem modelu 3D, który jeszcze pełniej odzwierciedla fizyczne zachowanie się materiałów. Ponownie wykazano wyraźną anizotropową odpowiedź w ewolucji pustek i powiązано ją z okresami aktywności mechanizmów bliźniakowania.

Następnie rozdział 6 przedstawia teoretyczne sformułowanie mikromechanicznego modelu pola średniego dla polikryształów z pustkami. W ramach pracy zaproponowano dwuetapową procedurę homogenizacji bazującą na podejściu Mori-Tanaki, a następnie na modelu samo uzgodnionym. Takie podejście stanowi znaczące osiągnięcie niniejszej pracy szczególnie w odniesieniu do sformułowania odpowiedzi całego materiału na obciążenie wyrażone równaniem 6.32. W rozdziale tym brakuje jednak dyskusji odnośnie faktycznej reprezentatywności wybranego do analizy modelu RVE.

Tak zaproponowany model został następnie poddany serii analiz numerycznych z wykorzystaniem modeli porowatych monokryształów oraz polikryształów poddanych obciążeniu. Analizy ograniczono do materiału o strukturze FCC. W trakcie pracy do implementacji niektórych funkcji skorzystano z języka Fortran bez wyjaśnienia przyczyn dokonania akurat takiej decyzji. Założono również stabilność rozwiązania numerycznego przy małych krokach czasowych, jednak nie wykazano jaki krok czasowy jest satysfakcjonujący. Nie opisano również jak dokonano identyfikacji parametrów modelu z tabeli 7.1 czy 7.2. Należy natomiast podkreślić bardzo wartościowy opis schematu prowadzenia obliczeń, który stanowi jednoznaczną instrukcję dla osób korzystających z takiego rozwiązania i planujących dalej je rozwijać. Wprowadzenie podsumowania w formie schematu blokowego byłoby idealnym uzupełnieniem tej części opisu. Uzyskiwane wyniki obliczeń zaproponowanym podejściem były porównywane do przewidywań modelem CPFEM, wykazując czasem dość znaczne rozbieżności. Autor w tekście wskazuje na możliwe źródła tych rozbieżności, jednak w ramach pracy nie pokusił się o sprawdzenie swoich hipotez. Należy natomiast podkreślić wagę wyników przedstawionych na rysunku 7.4, które jednoznacznie pokazują istotność uwzględnienia występujących niejednorodności w materiałach polikrystalicznych podczas prowadzonych analiz numerycznych. Omawiany wynik stanowi kwintesencję zrealizowanych przez doktoranta badań.

Następnie, na bazie zebranych informacji i nowej wiedzy Autor sformułował w rozdziale 8

fenomenologiczne kryterium uplastycznienia dla materiałów porowatych. Rozszerzył informację z rozdziału 1 odnośnie istniejących kryteriów, typu GTN opracowanych przez Hana oraz Pauxa wskazując na ich możliwości i ograniczenia. Stały się one motywacją do opracowania własnego podejścia i rozszerzenia modelu Pauxa o efekty bliźniakowania. W trakcie prac dokonano również identyfikacji parametrów zaproponowanych kryteriów na podstawie opracowanych wcześniej modeli komórek elementarnych. Uzyskiwane wyniki porównano z wynikami wskazanych modeli literaturowych Hana i Pauxa wykazując dobrą zgodność pomimo pewnych różnic wynikających z zastosowania odmiennych modeli konstytutywnych. Nie jest jednak jasne dlaczego tą część badań ograniczono jedynie do materiałów o strukturze FCC.

Podsumowanie całości pracy znajduje się natomiast w ostatnim rozdziale 9, gdzie Autor wyraźnie przedstawił wnioski szczegółowe odnośnie wpływu struktury krystalograficznej, mechanizmów odkształcenia oraz stanu obciążenia na charakter ewolucji pustek. Szczególnie wartościowe jest wykazanie roli bliźniakowania w aspekcie wzrostu pustek w materiałach HCP. W ostatniej części pracy przedstawiono natomiast możliwe kierunki dalszej pracy, co świadczy o pełnej świadomości Autora odnośnie zalet i ograniczeń zaproponowanych podejść numerycznych. Jest to nie wątpliwie wyraz dojrzałości naukowej wymaganej od kandydata do stopnia doktora.

### 3. Uwagi szczegółowe

Praca napisana jest bardzo starannie z zachowaniem standardów tekstu naukowo-technicznego, cechuje się dokładnością wykonanych rysunków i ilustracji. Jedynie opisy osi wykresów prezentowanych w pracy często są zbyt małą czcionką do zapewnienia w pełni komfortowego czytania. Język angielski w opinii recenzenta jest nienaganny. W pracy zidentyfikowano tylko jeden drobny błąd edytorski w ostatnim zdaniu na stronie 69, gdzie wydaje się brakować „in” przed „Fig. 4.9”.

### 4. Uwagi dyskusyjne

Proszę przedstawić wyjaśnienia następujących kwestii w formie pisemnej:

1. Czym są zastosowane w pracy specjalne elementy kontaktowe „contact elements”?
2. Jakie zmiany w zakresie koncepcji modelu są wymagane pod kątem analizy wpływu obciążeń cyklicznych na rozwój pustek?
3. Jakie są inne znane Autorowi podejścia stosowane w literaturze do modelowania rozwoju pustek w materiałach metalicznych?
4. Z czego wynika konieczność zmian w implementacji elementów sprężynowych stosowanych w pracy?
5. W jaki sposób analizowano wpływ gęstości siatki na uzyskiwane wyniki celem dobrania właściwego poziomu dyskretyzacji.
6. W jakim stopniu, brak stosowania mechanizmów adaptacji lub przebudowy siatki wpływa na jakość uzyskiwanych wyników?
7. Które fragmenty kodu były w pracy implementowane bezpośrednio przez Autora, a które zostały zaczerpnięte z wcześniejszych prac zespołu?

8. Jakie są źródła znaczących rozbieżności pomiędzy wynikami obliczeń numerycznych i badań eksperymentalnych zaczerpniętych z pracy Gan i in.?
9. Czy uwzględnienie mechanizmów koalescencji czy ponownej separacji pustek w siatce elementów skończonych jest możliwe czy wymaga istotnych zmian w stosowanym podejściu?
10. Jakie techniki badań laboratoryjnych powinny być wykorzystane do pozyskania danych niezbędnych w procedurze identyfikacji parametrów opracowanych modeli?
11. Czy była podjęta próba wprowadzenia opracowanego zmodyfikowanego modelu GTN do jednego z komercyjnych pakietów obliczeniowych stosowanych w przemyśle?

## 5. Podsumowanie

Autor na bazie zaproponowanych założeń właściwie przeprowadził prace w swoim doktoracie wykazując się bardzo dużą kompetencją, dojrzałością naukową oraz bogatym aparatem matematycznym i numerycznym. Zaprezentował umiejętności i wiedzę niezbędną do samodzielnego sformułowania i rozwiązania zagadnienia naukowego, a także krytycznego spojrzenia na uzyskiwane wyniki.

Podsumowując ocenę pracy, za podstawowe osiągnięcia naukowe Autora uważam:

- implementację modelu plastyczności kryształów w metodzie elementów skończonych z uwzględnieniem wpływu mechanizmu poślizgu krystalograficznego oraz bliźniakowania,
- implementację mikromechanicznego modelu pola średniego z wykorzystaniem dwu-etapowej procedury homogenizacji,
- implementację modelu fenomenologicznego stanowiącego rozbudowanie klasycznego podejścia GTN,
- przeprowadzenie wnikliwej dyskusji ewolucji pustek z uwzględnieniem wpływ struktury krystalograficznej, orientacji kryształitów, mechanizmów odkształcenia plastycznego czy stanu obciążenia.

**Przedstawione powyżej uwagi krytyczne są w dużej mierze dyskusyjne i wynikają z zainteresowania recenzenta przedstawioną pracą, szczególnie w zakresie uwzględnienia niejednorodności strukturalnych w formie jawnej podczas obliczeń. Należy jednoznacznie podkreślić, że nie obniżają one mojej bardzo pozytywnej oceny przedstawionej rozprawy doktorskiej, która jest wartościową pozycją naukową.**

**Uważam, że opiniowana rozprawa doktorska, jest dziełem dysertabilnym i spełnia warunki określone Ustawą z dnia 20 lipca 2018r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce. Wnioskuje o dopuszczenie mgr inż. Saketh Virupakshi do dalszych etapów przewodu doktorskiego.**

Po zapoznaniu się z całością pracy uważam, że jej wysoki poziom merytoryczny oraz edycyjny, a w szczególności oryginalność zaproponowanych rozwiązań z zakresu mechaniki materiałów i nowa wiedza z obszaru inżynierii materiałowej, zasługuje na wyróżnienie o co również wnioskuje.

