

Prof. Ryszard Staroszczyk  
Instytut Budownictwa Wodnego PAN  
ul. Kościarska 7  
80-328 Gdańsk

Gdańsk, 20 czerwca 2025 r.

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr inż. Saketha Virupakshi**  
**pt. “*Micromechanical modelling of voided FCC and HCP polycrystals in inelastic regime*”**

Niniejsza recenzja została wykonana na wniosek Rady Naukowej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki (IPPT) PAN w Warszawie, w odpowiedzi na pismo z sygnaturą RN-D-0002.1.2025 z dnia 31 marca 2025 r. podpisane przez prof. dra hab. inż. Zbigniewa Ranachowskiego, Sekretarza Rady Naukowej IPPT PAN.

## **1. Opis rozprawy**

Przedmiotem przedstawionej do oceny rozprawy doktorskiej mgr inż. Saketha Virupakshi jest modelowanie i analiza zachowania mechanicznego metali i stopów o porowatych strukturach krystalicznych: regularnej ściennie centrowanej (A1, ang. FCC – face centred cubic) i heksagonalnie zwartej (A3, HCP – hexagonal close packed). Głównym celem badań opisanych w rozprawie było skonstruowanie modeli mikromechanicznych do opisu odpowiedzi mechanicznej porowatych kryształów i polikryształów odkształcających się w sposób sprężysto–lepkoplastyczny, a następnie zastosowanie tych modeli do analizy wpływu anizotropii pojedynczego kryształu i orientacji jego osi krystalograficznych względem kierunków głównych naprężenia na ewolucję pustek (ich objętości i kształtów) oraz na zmiany niejednorodnego stanu naprężenia w polikrysztalach, z uwzględnieniem procesów poślizgu i bliźniakowania w kryształach.

Praca została napisana w języku angielskim. Składa się z dziewięciu rozdziałów, spisów literatury, rysunków i tabel, łącznie liczy xxii + 191 ponumerowanych stron. Do pracy dołączono streszczenia w językach angielskim i polskim. Rozdział pierwszy zaczyna się od wprowadzenia do tematyki będącej przedmiotem pracy, po którym następuje szczegółowe omówienie wyników badań eksperymentalnych opisanych w literaturze. W drugiej części tego rozdziału dokonano przeglądu literatury dotyczącej modeli zarówno fenomenologicznych jak i mikromechanicznych opisujących zachowanie plastyczne i lepkoplastyczne kryształów oraz polikryształów z pustkami, by na tej podstawie sformułować cele i zakres rozprawy. W rozdziale drugim pracy przedstawiono model mikromechaniczny opisujący plastyczne zachowanie kryształu, uwzględniający mechanizmy poślizgu i bliźniakowania.

Model ten jest następnie zastosowany w modelach numerycznych (dwu i trójwymiarowym) opartych na metodzie elementów skończonych (MES) opisanych w rozdziale trzecim rozprawy. Kolejne dwa rozdziały są poświęcone zastosowaniom modeli MES do analizy zachowania porowatego kryształu FCC z pustką cylindryczną w zagadnieniu płaskiego stanu odkształcenia (rozdział czwarty) oraz do analizy zagadnień dwu i trójwymiarowych dla kryształów HCP z pustkami (rozdział piąty). W rozdziale szóstym pracy, w oparciu o metodę pola średniego, sformułowano model teoretyczny opisujący makroskopowe zachowanie polikryształów, w którym do opisu pojedynczego kryształu zastosowano addytywny schemat Mori-Tanaki, a do homogenizacji (oszacowania zachowania makroskopowego polikryształu) zastosowano addytywny schemat wewnętrznie zgodny. Przewidywania modelu teoretycznego zostały porównane z wynikami z modelu MES w rozdziale siódmym. W następnym, ósmym rozdziale, stosując podejście fenomenologiczne, sformułowano nowy warunek plastyczności typu Gursona-Tvergaarda-Needlemana (GTN) dla kryształów porowatych, którego parametry wyznaczono poprzez kalibrację z wynikami obliczeń MES. Ostatni, dziewiąty rozdział rozprawy zawiera podsumowanie wykonanych badań i najważniejszych wyników wynikających z przeprowadzonych symulacji numerycznych i rozważań teoretycznych. Na koniec naszkicowano możliwe kierunki dalszych badań nad mechaniką kryształów FCC i HCP z pustkami. Zamieszczony bezpośrednio po tym rozdziale wykaz cytowanej literatury jest bardzo obszerny, gdyż na 15 stronach zawiera blisko 200 pozycji, w zdecydowanej większości opublikowanych po roku 2000.

## 2. Uwagi ogólne

Rozprawa napisana jest w bardzo dobrym języku angielskim – w całym tekście znalazłem jedynie kilkanaście drobnych błędów lub literówek. Układ pracy jest przejrzysty, a całość tekstu jest podzielona na logicznie spójne rozdziały o mniej więcej zbliżonej długości. Strona graficzna pracy również nie budzi zastrzeżeń – wszystkie ilustracje wykonane przez Autora są kolorowe, a podpisy pod nimi zawierają na ogół adekwatne informacje niezbędne do ich zrozumienia. W niektórych jednak przypadkach (jak np. na rys. 4.6–4.9) można mieć pewne uwagi co do zbyt małych rozmiarów zastosowanych czcionek.

Wprowadzający rozdział 1, liczący 28 stron, zawiera bardzo obszerny przegląd aktualnej literatury, obejmujący (1) szczegółowe omówienie wyników badań eksperymentalnych dotyczących mechanizmu ciągłego zniszczenia próbek metali i stopów z pustkami wewnątrz kryształów, (2) omówienie klasycznych modeli fenomenologicznych opisujących zachowanie makroskopowe porowatych materiałów ciągłych, (3) przegląd modeli obliczeniowych MES stosowanych do symulacji zachowania komórek jednostkowych kryształów oraz (4) dyskusję modeli numerycznych (MES) i fenomenologicznych używanych do opisu zachowania plastycznego porowatych kryształów i polikryształów. Na tej bazie Doktorant sformułował cele naukowe, które postawił przed sobą i przedstawił zakres badań opisanych w przedłożonej rozprawie doktorskiej. Oceniam ten rozdział bardzo wysoko –

bardzo rzadko zdarza się znaleźć w pracach doktorskich tak dogłębną i obszerną analizę literatury przedmiotu jak ta w recenzowanej rozprawie.

W rozdziale 2 przedstawiono podstawy mikromechaniki kryształów o sieciach krystalicznych A1 (FCC) i A3 (HCP). Na rysunkach pojedynczych kryształów zilustrowano systemy możliwych poślizgów oraz naszkicowano mechanizm bliźniakowania. W dalszej części rozdziału zaprezentowano podstawowe równania opisujące kinematykę kryształu i mechanizm reorientacji jego osi krystalograficznych wskutek aktywizacji zjawiska bliźniakowania, a następnie przedstawiono równanie konstytutywne opisujące odkształcenia plastyczne w postaci potęgowego prawa płynięcia lepkoplastycznego. W końcowej części tego rozdziału przedstawiono równania opisujące zjawisko wzmocnienia plastycznego materiału. Bez wątpienia ten stosunkowo krótki (liczący 14 stron) rozdział, mimo że zawiera standardową wiedzę, jest bardzo użyteczny, a w zasadzie jest niezbędny, dla zrozumienia dalszej części rozprawy.

W kolejnym rozdziale 3 pracy Doktorant opisał pokrótce (na 13 stronach) model obliczeniowy oparty na metodzie elementów skończonych i przy wykorzystaniu oprogramowania AceGen, w którym zaimplementowano równania sprężysto-plastyczności stosując formalizm Lagrange'a dla dużych odkształceń materiału. Przedyskutowane zostały różne aspekty numeryczne, takie jak schemat całkowania równań w czasie, metoda uśredniania zastosowana do obliczania makroskopowych odkształceń i naprężeń w polikryształach, jak również sposoby implementacji okresowych warunków brzegowych na ścianach jednostkowych komórek kryształów, zawierających pustki cylindryczne (w modelach dwuwymiarowych) lub kulistych (w modelach trójwymiarowych). Podobnie jak poprzedni, rozdział ten ma charakter niezbędnego wprowadzenia do dalszej części pracy, w której dyskutowane są modele obliczeniowe i analizowane są wyniki uzyskane w trakcie przeprowadzonych symulacji.

Rozdziały 4 i 5 są poświęcone prezentacji i analizie wyników uzyskanych z symulacji MES. W pierwszym z tych rozdziałów dyskutowane są wyniki dotyczące zachowania plastycznego kryształów FCC z pustkami w płaskim stanie odkształcenia, a w następnym analizowane są wyniki dla kryształów HCP z pustkami, zarówno w płaskim jak i trójwymiarowym stanie odkształcenia. W rozdziale 4 zaprezentowano wyniki ilustrujące ewolucję mikrostruktury kryształu metalu i wielkości pustki cylindrycznej dla kilku konfiguracji obciążenia (obejmujących m.in. jednoosiowe ściskanie/rozciąganie i czyste ścinanie). Na bazie licznych wykresów Autor szczegółowo omówił uzyskane wyniki, a następnie dokonał bardzo wnikliwej analizy wpływu początkowej orientacji osi kryształu względem kierunków głównych naprężenia na zmianę tekstury kryształu wskutek poślizgów, oraz na ewolucję kształtu pustki aż do momentu koalescencji pustek w sąsiadujących kryształach, co prowadzi do zniszczenia ciągłego próbki. Dla lepszego zobrazowania wpływu porów na ewolucję mikrostruktury, w kilku przypadkach dokonano porównań wyników otrzymanych dla kryształów z pustką i bez pustki. Zilustrowano także ewolucję osi krystalograficznych kryształu wraz z rozwojem pustki w zależności od reżimu obciążenia.

W rozdziale 5 zaprezentowane zostały wyniki analizy numerycznej metodą MES przeprowadzonej dla kryształów o sieci HCP (na przykładzie stopu magnezu AZ31B). W pierwszej części rozdziału 5 zilustrowano zachowanie plastyczne kryształów w płaskim stanie deformacji. Uzyskane wyniki umożliwiły analizę wpływu początkowej orientacji osi kryształu na ewolucję wielkości i kształtu pustki w zależności od rodzaju obciążenia kryształu. Pozwoliły również na identyfikację najbardziej aktywnych systemów poślizgu w kryształach oraz na określenie obszarów w ziarnie w których doszło do aktywacji mechanizmu bliźniakowania. W drugiej części rozdziału przedstawiono wyniki symulacji dla trójwymiarowych komórek jednostkowych kryształów HCP z pustkami kulistymi. Doktorant przeanalizował proces ewolucji pustki dla pięciu wybranych wariantów obciążenia osiowego, oraz zbadał jaki jest efekt kierunku działania obciążenia na odkształcenie anizotropowe kryształu oraz na prędkość zmiany objętości pustki.

Wyniki przedstawione w rozdziałach 4 i 5 uważam za najbardziej interesującą część rozprawy. Ilustrują one mikromechanizmy zachodzące w kryształach porowatych, które są praktycznie nie do zbadania w inny sposób niż za pomocą metod dyskretnych, w tym MES zastosowanej w pracy. Analiza przeprowadzona przez Autora pokazała, dla jakich warunków obciążenia anizotropowych kryształów porowatych mamy do czynienia ze wzmocnieniem plastycznym materiału, a dla jakich z jego osłabieniem. Podobnie, pokazano w jakich konfiguracjach obciążenia następuje najszybszy wzrost pustek, i finalnie ich łączenie, a w jakich ich zanik. Ciekawe poznawczo są rysunki i wykresy ilustrujące reorientację sieci krystalograficznej w sąsiedztwie pustek, czy też analiza efektu pustek na powstawanie w ziarnach pasm lokalizacji odkształceń plastycznych oraz na rozwój obszarów z wysoką aktywnością mechanizmu bliźniakowania.

W rozdziale 6 pracy, stosując metodę pola średniego, Doktorant przedstawił model mikromechaniczny dla sprężysto-lepkoplastycznych polikryształów porowatych dla zakresu małych odkształceń. W pierwszym etapie skonstruowany został model opisujący deformację pojedynczego kryształu i w tym celu zastosowano addytywny schemat Mori-Tanaki. W drugim etapie, aby wyznaczyć odpowiedź makroskopową polikryształu, dokonano homogenizacji pól naprężeń i odkształceń stosując schemat wewnętrznie zgodny. Na koniec sformułowano równania opisujące ewolucję objętości pustek w polikryształach.

W następnym rozdziale 7 Autor skonstruował model numeryczny, w którym zaimplementował model mikromechaniczny pola średniego zaproponowany w rozdziale 6, opisując szczegółowo algorytm obliczeń, najpierw prowadzonych na poziome pojedynczego kryształu, a potem dla agregatu polikrystalicznego. W celu weryfikacji tego trójskalowego modelu, jego predykcje dla porowatego kryształu FCC, a następnie polikryształu FCC, zostały porównane z wynikami modelu MES opisanego w rozdziale 3 pracy. Uzyskano zadowalającą zgodność wyników obu modeli numerycznych, choć zaobserwowano również pewne istotne różnice, jak np. te dotyczące obliczonych udziałów objętościowych pustek w polikryształach, czy też przewidywanych rozkładów naprężeń w obszarach pomiędzy pustkami.

W rozdziale 8, stosując podejście fenomenologiczne, Doktorant zaproponował nowy warunek plastyczności dla porowatego pojedynczego kryształu, wyrażony równaniem (8.15) na str. 157, w postaci analogicznej do klasycznego warunku Gursona-Tvergaard-Needlemana (GTN). Warunek ten uwzględnia mechanizmy poślizgu i bliźniakowania, i można go stosować dla kryształów porowatych o dowolnej symetrii sieci krystalograficznej. Dwa wolne parametry modelu ( $q_1$  i  $\kappa$ ) wyznaczono poprzez kalibrację z wynikami uzyskanymi z symulacji MES, stosując model opisany w rozdziale 3. Uzyskano zadowalającą zgodność pomiędzy przewidywaniami zaproponowanego modelu fenomenologicznego typu GTN i wynikami obliczonymi MES, zarówno dla kryształów HCP jak i FCC. Zadowalająca jest również zgodność predykcji zaproponowanego modelu z wynikami dwóch alternatywnych modeli znanych z literatury.

Końcowy, pięciostronicowy rozdział 9 zawiera podsumowanie całości rozprawy. Po krótkim streszczeniu (bardzo obszernego) zakresu pracy wykonanej przez Doktoranta, sformułowane zostały najważniejsze wnioski i osiągnięcia Autora rozprawy – wszystkie one znajdują potwierdzenie w wynikach prezentowanych na wcześniejszych stronach pracy. Interesująca, i ambitna, jest również lista planów naukowych Autora na przyszłość.

### **Propozycje zagadnień do dyskusji w trakcie obrony rozprawy**

1. W podrozdziale 7.3, na rysunkach 7.1 i 7.2 na stronach 136 i 137, porównane są wyniki dla pojedynczego kryształu FCC przedstawiające naprężenia  $\Sigma_{11}$  i udziały objętościowe pustki  $f$  obliczone przy zastosowaniu modelu MES i modelu mikromechanicznego Autora opartego na schemacie Mori-Tanaki. W tym ostatnim, macierz chwilowej podatności lepkiej (viscous compliance) pojedynczego kryształu jest przybliżana metodą stycznych – równanie (6.4), albo metodą siecznych – równanie (6.5). W przypadku naprężeń, rys. 7.1a i 7.2a, wybór sposobu przybliżenia podatności lepkiej nie ma praktycznie znaczenia. Ale w przypadku obliczonych objętości pustek, rys. 7.1b i 7.2b, obserwowane są znaczne różnice w predykcjach modelu mikromechanicznego dla obu sposobów. Dlaczego wybór metody linearyzacji macierzy podatności lepkiej ma mały wpływ na dokładność obliczania naprężeń w kryształach, a duży na dokładność obliczania objętości pustki?
2. W podrozdziale 7.4, porównując wartości makroskopowych naprężeń równoważnych Hubera-Misesa obliczone z wykorzystaniem modeli MES oraz pola średniego MFM (Mean Field Model), rys. 7.7 i 7.8 na str. 145 i 146, Doktorant stwierdza, że bardzo dobra zgodność wyników zachodzi w przypadku, kiedy w modelu MES naprężenie równoważne jest obliczane przy użyciu równania (7.28)<sub>2</sub>, a w modelu MFM – przy użyciu równania (7.28)<sub>1</sub>. Jest to dość zagadkowe, gdyż jednoczesne zastosowanie tych samych formuł w obu modelach prowadzi do rozbieżnych wyników. Czy jest to w pewnym sensie przypadek wynikający z właściwości numerycznych obu modeli, czy jednak można tę kwestię wyjaśnić racjonalnie na gruncie mechaniki?

3. W całej pracy zakłada się milcząco, że naprężenia wewnątrz pustki są zerowe. Czy założenie, że pustka jest np. zamkniętym pęcherzykiem gazu/cieczy (z niezerowym ciśnieniem wewnątrz) znacząco skomplikuje model numeryczny MES i obliczenia? I jaki ewentualnie mógłby być efekt tego typu pęcherzyka wypełnionego cieczą na deformację plastyczną kryształu i mikromechanizmy badane w pracy?

### 3. Uwagi szczegółowe

Poniżej przedstawiam uwagi o charakterze bardziej szczegółowym niż w poprzednim punkcie recenzji, w zasadzie mają one charakter redakcyjny i z pewnością nie wpływają na moją ocenę merytoryczną całości pracy.

- a) Na stronach 29 i 30 w podrozdziale 2.1 opisano pokrótce system oznaczeń matematycznych stosowanych w pracy. Jest to z pewnością przydatna informacja, jednak z uwagi na dużą liczbę symboli używanych w tekście zdecydowanie bardziej użyteczna byłaby lista wszystkich symboli matematycznych pojawiających się w tekście, umieszczona na początku lub końcu głównej części pracy.
- b) Autor umieścił w pracy, na stronach 30 i 31 w podrozdziale 2.2, spis akronimów stosowanych w tekście pracy. Jest on jednak niekompletny (brakuje np. takich skrótów i ich objaśnień jak BCC, CRL, PTR, RSS, EBSD) i przede wszystkim nie występują one (a powinny) w porządku alfabetycznym. Jak w punkcie powyżej, lepszym miejscem (niż rozdział 2) na listę akronimów byłby początek lub koniec zasadniczego tekstu pracy.
- c) Następną uwagą redakcyjną: Autor często odwołuje się w tekście pracy do rysunków i tabel, które znajdują się w innych rozdziałach rozprawy. W takich przypadkach podanie, obok numeru np. tabeli także i numeru strony, na której się ona znajduje, znacznie przyspieszyłoby jej odnalezienie w tekście.
- d) Jak już wyżej wspomniałem, zdecydowana większość rysunków i wykresów w tekście nie budzi żadnych zastrzeżeń. Wyjątkiem jest jednak rys. 2.5 na str. 40, który według Autora ma ilustrować równanie (2.14) na str. 42. Niestety, na rysunku nie opisano co oznaczają cztery przedstawione krzywe, przez co tekst poniżej równania (2.14) i na górze str. 43 jest niezrozumiały.
- e) W tabeli 4.1 (str. 58) zamieszczono wartości stałych materiałowych przyjętych do obliczeń MES, ale nie wskazano, jakiego metalu one dotyczą (brak tej informacji również w towarzyszącym tekście). Ta sama uwaga dotyczy tabeli 7.1 (str. 135).
- f) Drobne błędy: na str. 15 w tekście po równaniu (1.3) zamiast  $\Sigma_m$  powinno być  $\sigma_m$ ; w podpisie do tabeli 4.1 (str. 58) zamiast  $v_0$  powinno być  $\dot{\gamma}_0$ ; na str. 133, linia 8, zamiast  $\mathbf{P}^r$  powinno być  $\mathbf{p}^r$ ; str. 169, linia 11, zamiast Cosh powinno być cosh.

## 4. Ocena rozprawy

Bez wątpienia, przedłożona praca doktorska dokumentuje bardzo szeroki zakres pracy włożonej przez Doktoranta w jej przygotowanie. W mojej ocenie recenzowana praca prezentuje bardzo wysoki poziom naukowy oraz stanowi istotny i oryginalny wkład mgra inż. Saketha Virupakshi w dziedzinę modelowania mikromechanicznego metali i stopów zawierających w swojej strukturze pustki. Autor osiągnął cele postawione na początku rozprawy, umiejętnie wykorzystując nowoczesne metody i techniki obliczeniowe, w szczególności metodę elementów skończonych, do modelowania zachowania mechanicznego kryształów i polikryształów z pustkami, z uwzględnieniem złożonych (i trudnych do opisu) mechanizmów poślizgu, bliźniakowania i reorientacji sieci krystalicznej. W oparciu o wyniki symulacji wykonanych dzięki skonstruowanym przez Doktoranta modelom mikromechanicznym do analizy zachowania materiałów krystalicznych w zakresie sprężysto-lepkoplastycznym możliwe było sformułowanie przez Niego szeregu wniosków szczegółowych o dużym znaczeniu poznawczym. Istotnym wkładem Doktoranta jest również nowy model teoretyczny do opisu mikromechaniki porowatego kryształu w oparciu o schemat Mori-Tanaki, a także sformułowanie nowego fenomenologicznego kryterium uplastycznienia typu Gursona-Tvergaard-Needlemana dla porowatego ziarna o dowolnym rodzaju symetrii sieci krystalicznej. Niewątpliwie Doktorant wykazał się nieprzeciętną znajomością aktualnej literatury przedmiotu, wnikliwością oraz umiejętnością analizy i dyskusji uzyskanych rezultatów badań. Wszystkie wnioski przedstawione w podsumowaniu rozprawy zostały sformułowane w jasny i zrozumiały sposób i znajdują swoje uzasadnienia w wynikach zaprezentowanych w kolejnych rozdziałach pracy.

## 5. Wniosek końcowy

Po zapoznaniu się z przedłożoną pracą dokorską i w nawiązaniu do jej oceny przedstawionej powyżej uważam, że spełnia ona wszystkie wymagania stawiane przez obowiązującą ustawę *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* z dnia 20 lipca 2018 r. (*Dziennik Ustaw* z r. 2018, poz. 1668). Stwierdzam, że recenzowana rozprawa stanowi oryginalne rozwiązanie postawionego problemu naukowego i dowodzi, iż Doktorant posiada niezbędną wiedzę teoretyczną w dyscyplinie inżynieria mechaniczna oraz wykazał się umiejętnością samodzielnego prowadzenia pracy naukowej. Dlatego wnioskuję o dopuszczenie mgra inż. Saketha Virupakshi do publicznej obrony przedłożonej rozprawy doktorskiej.

Ryszard Staroszczyk