

Zdzisław Nowak

**METODA IDENTYFIKACJI
W MECHANICE MATERIAŁÓW CIĄGLIWYCH
Z USZKODZENIAMI**



INSTYTUT PODSTAWOWYCH PROBLEMÓW TECHNIKI
POLSKIEJ AKADEMII NAUK
WARSZAWA 2006

Redaktor Naczelny:

doc. dr hab. Zbigniew Kotulski

Recenzent:

doc. dr hab. inż. Ryszard B. Pęcherski –
profesor Politechniki Krakowskiej

Praca wpłynęła do Redakcji 10 kwietnia 2006 r.

Praca habilitacyjna

Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN

Nakład: 100 egz. Ark. druk.: 13,4

Oddano do druku w kwietniu 2006 roku

Druk i oprawa: Drukarnia Braci Grodzickich, Piaseczno, ul. Geodetów 47a

Streszczenie

Mechanika materiałów niejednorodnych służy przewidywaniu ich właściwości makroskopowych na podstawie badania ich mikrostruktury i mechanizmów deformacji. Nowe metody badawcze dostarczają informacji o zachowaniu się materiałów w skali mikroskopowej i nanometrycznej. Opis złożonego zachowania się materiałów przy różnych obciążeniach wymaga wprowadzenia do modeli konstytutywnych funkcji i parametrów materiałowych, które trzeba określić eksperymentalnie. Jednak nie dla wszystkich wielkości dysponujemy bezpośrednimi danymi doświadczalnymi. Wszechstronne badania materiałów przy różnych obciążeniach są zbyt kosztowne, a w wielu przypadkach niemożliwe do przeprowadzenia. Konieczne staje się, zatem dokonanie wyboru najistotniejszych efektów danego zjawiska, cech badanego materiału i określenie w miarę prostego, ale wszechstronnego modelu konstytutywnego.

Podstawowym celem pracy jest opracowanie metody identyfikacji wykorzystującej funkcję strat odporną na błędy pomiarów oraz określeniu metod porównywania i wyboru najlepszego modelu z kilku nieliniowych modeli konstytutywnych. Wykorzystanie miary odległości informacyjnej Kullbacka-Leiblera między modelami lub między odpowiedzią modelu a danymi doświadczalnymi, pozwala określić, który z modeli lepiej dopasowuje się do danych rzeczywistych. Opracowaną metodę użyto w analizie zaawansowanych deformacji plastycznych osiowosymetrycznego rozciągania próbek cylindrycznych i jest treścią rozdziału 9.

W pierwszej części rozprawy, w rozdziałach 2-7 przedstawiono różne sposoby opisu złożonego zachowania się metali przy quasi-statycznych i dynamicznych obciążeniach. Przedstawiono zagadnienie modelowania rozwoju mikrouszkodzeń i mikropustek podczas deformacji ciała stałego. Przedyskutowano sposoby doboru modelu konstytutywnego i wpływ metody identyfikacji na postać użytych funkcji materiałowych. Zbadano zjawisko zaawansowanych odkształceń plastycznych i wpływ rozwoju mikrouszkodzeń na zachowanie materiału jako agregatu (osnowa i cząstki drugiej fazy). Przedstawiono opis płynięcia plastycznego materiału z mikrouszkodzeniami. Zachowanie materiału w procesach quasistatycznych opisano z wykorzystaniem modelu plastyczności, w którym uwzględniono izotropowe wzmocnienie plastyczne, a osłabienie opisano przez ewolucję mikrouszkodzeń. Przeprowadzono systematyczną analizę numeryczną quasistatycznego rozciągania próbek stalowych. Zbadano problem lokalizacji odkształceń plastycznych w problemie dynamicznego skręcania rurki jako zadanie adiabatyczne w ramach teorii lepkoplastyczności. Zastosowano opis pły-

nięcia plastycznego z pasmami ścinania w numerycznej analizie procesu kucia matrycowego.

Modyfikację klasycznej metody najmniejszych kwadratów do oszacowania parametrów materiałowych w celu uniezależnienia się od błędów pomiarowych przedstawiono w rozdziale 8. Użyto różnych odpornych funkcji celu do porównania ich wpływu na oszacowanie stałych materiałowych dla różnych modeli materiału z mikropustkami. Następnie przedstawiono zmodyfikowaną metodę optymalizacji globalnej i opisano algorytmy obliczeniowe użyte do identyfikacji funkcji materiałowych.

Zagadnienia opisane w pracy dotyczą dwóch dziedzin: mechaniki materiałów ciągłych z ewolucją mikrouszkodzeń oraz metod identyfikacji funkcji materiałowych w modelach nieliniowych, z koniecznością porównywania i wyboru najlepszego modelu. Wspólne ujęcie obu dziedzin w niniejszej rozprawie pozwoliło na opracowanie narzędzi do prawidłowego modelowania konstytutywnego i poszerzyło zakres analizowanych opisów materiałów z mikropustkami. Wspólną cechą wszystkich analizowanych przypadków jest problem identyfikacji stałych materiałowych w oparciu o dane doświadczalne.

W pracy zbadano naturę powstawania mikrouszkodzeń i wykazano, że ewolucja mikrouszkodzeń oraz interakcje między pustkami mają decydujący wpływ na przebieg deformacji oraz na lokalizację odkształceń plastycznych i sposób zniszczenia. Wykorzystano przy tym modele obliczeniowe: jednowymiarowe, dwuwymiarowe (osiowosymetryczne) i trójwymiarowe. Stwierdzono, że ewolucja mikropustek jest przyczyną niejednorodnego stanu odkształcenia i naprężenia, która bez jakichkolwiek imperfekcji geometrycznych i termicznych prowadzi do lokalizacji odkształceń plastycznych i przyczynia się w końcowej fazie do całkowitego zniszczenia. Zbadano wpływ parametrów konstytutywnych, lokalnych zmian własności mechanicznych materiału osnowy na przebieg deformacji, rozkład stanu odkształcenia i naprężenia oraz rozwój strefy lokalizacji odkształceń plastycznych w postaci 'szyjki'. Przedstawiono podstawowe cechy zjawiska powstawania i wzrostu mikrouszkodzeń, przyczyny ich kierunkowego rozwoju i przeprowadzono analizę wzajemnego oddziaływania mikrouszkodzeń. Wykazano decydującą rolę struktury materiału osnowy i wynikającego z niej losowego charakteru zjawiska zniszczenia.

Otrzymane wyniki w pełni potwierdzają konieczność użycia odpornych funkcji celu do identyfikacji stałych materiałowych w oparciu o doświadczenie oraz potrzebę stosowania testów statystycznych do wyboru najlepszego modelu.

Spis treści

1. Wstęp	11
1.1 Przedmiot pracy	11
1.2 Cel i zakres pracy	12
1.3 Omówienie stanu badań	15
2. Mechaniczne własności metali ciągliwych z mikrouszkodzeniami. Przegląd literatury	19
2.1 Doświadczalne obserwacje powstawania pustek	19
2.2 Rola pustek w aktualnych teoriach zniszczenia	23
2.3 Deformacje lokalne w cząsteczkach drugiej fazy	23
2.4 Kryteria powstawania pustek	26
2.5 Modele analityczne nukleacji pustek	26
2.6 Modele analityczne wzrostu pustki/pustek	27
2.7 Modele łączenia się pustek	31
2.8 Efekt kształtu cząsteczek drugiej fazy i wzajemnego ich oddziaływania na powstawanie pustek	33
2.9 Deformacja przy osiowo-symetrycznym rozciąganiu	36
2.10 Badania eksperymentalne Fishera dla stali węglowej z mikrouszkodzeniami	42
2.11 Opis ewolucji porowatości w metalach–procesy quasi-statyczne	51
2.12 Opis ewolucji porowatości w procesach dynamicznych	57
2.13 Podsumowanie	60
3. Warunek plastyczności oraz prawo plastycznego płynięcia materiału z mikrouszkodzeniami	63
4. Stan naprężenia w próbkach rozciąganych jednoosiowo z uwzględnieniem porowatości	69
4.1 Rozwiązanie Bridgmana	69
4.2 Rozwiązanie Bridgmana dla modelu Gursona ciała porowatego	69
5. Równanie ewolucji parametru porowatości dla procesów quasi-statycznych	71
5.1 Ewolucja objętościowego udziału pustek	71
5.2 Zarodkowanie pustek w stali sferoidalnej	80

6. Lokalizacja odkształceń plastycznych w metalach	89
6.1 Dynamiczne własności metali	89
6.2 Lokalizacja jako niestabilności procesu deformacji	92
6.3 Zregulowane sformułowanie zadania deformacji niesprężystych	93
6.4 Numeryczna symulacja adiabatycznych procesów lokalizacji odkształcenia wzdłuż pasm ścinania	93
6.5 Podsumowanie	109
7. Numeryczna identyfikacja i weryfikacja prawa płynięcia plastycznego z udziałem mikropasm ścinania	111
7.1 Omówienie dostępnych wyników obserwacji doświadczalnych oraz obliczeń numerycznych dla próby kanalikowej	112
7.2 Identyfikacja prawa płynięcia z zastosowaniem numerycznej analizy próby kanalikowej	114
7.3 Weryfikacja modelu na przykładzie procesu kucia matrycowego	117
7.4 Wnioski	120
8. Zagadnienie identyfikacji parametrów w modelach materiału z mikrouszkodzeniami	121
8.1 Problem identyfikacji w mechanice	121
8.2 Problem identyfikacji wykorzystującej odporne funkcje strat	124
8.3 Dane eksperymentalne Fishera użyte do oszacowania parametrów	133
8.4 Model materiału z mikrouszkodzeniami	134
8.5 Stan naprężenia w 'szyjce'	136
8.6 Sformułowanie problemu identyfikacji w zależności od miary mikrouszkodzeń	137
8.7 Funkcje materiałowe	139
8.8 Metoda optymalizacji	141
8.9 Metoda Rosenbrocka całkowania numerycznego	156
8.10 Podsumowanie rozdziału 8	156
9. Metody porównywania oraz wyboru najlepszego modelu w zagadnieniach identyfikacji	157
9.1 Uwagi wstępne	159

9.2	Miara odległości między modelami	161
9.3	Kryteria wyboru modeli	161
9.4	Definicje modeli zagnieżdżonych i niezagnieżdżonych	164
9.5	Kryteria wyboru dla modeli zagnieżdżonych	166
9.6	Test Vuonga dla rozróżniania pomiędzy rywalizującymi modelami niezagnieżdżonymi	168
9.7	Zasady selekcji modeli stosowane dla każdej funkcji strat $F_1, F_2,$ F_3 i F_4	173
9.8	Analiza uzyskanych oszacowań parametrów materiałowych . . .	173
9.9	Analiza rezultatów identyfikacji parametrów	179
9.10	Podsumowanie rozdziału 9	183
10.	Wnioski	187
	Literatura	193

Ważniejsze oznaczenia i skróty

W mechanice

E	–	moduł sprężystości materiału
\mathbf{F}	–	tensor gradientu deformacji
\mathbf{I}	–	macierz jednostkowa
f	–	potencjał plastyczny
\mathbf{P}	–	wektor kierunku plastycznego płynięcia
\mathcal{P}	–	operator sprężysto-plastyczny
$\boldsymbol{\sigma}$	–	tensor naprężenia Cauchy'ego
$\boldsymbol{\tau}$	–	tensor naprężenia Kirchoffa
\mathbf{d}	–	tensor prędkości deformacji
\mathbf{E}	–	tensor odkształcenia Lagrange'a
\mathbf{e}	–	tensor odkształcenia Eulera
\mathcal{E}	–	przestrzeń Banacha
V	–	przestrzeń skończona
x, y, z	–	położenie punktu w układzie materialnym
\mathbf{g}	–	tensor metryczny w konfiguracji aktualnej
r	–	promień próbki o przekroju kołowym
t	–	czas procesu deformacji
\mathbf{u}	–	wektor przemieszczenia punktu materialnego
\mathbf{v}	–	wektor prędkości punktu materialnego
\mathbf{x}	–	położenie punktu w układzie przestrzennym
Δ	–	przyrost zmiennej
Ξ	–	macierz stałych materiałowych wzrostu mikrouszkodzeń
ϑ	–	temperatura
κ	–	parametr wzmocnienia–osłabienia materiału osnowy
ν	–	współczynnik odkształcenia postaciowego
T_m	–	czas relaksacji
ρ	–	gęstość materiału
ξ	–	mikroporowatość

W statystyce

\sim	– ma rozkład
F, f	– funkcja rozkładu prawdopodobieństwa i gęstości prawdopodobieństwa
$f(z; \boldsymbol{\theta})$	– gęstość prawdopodobieństwa rozkładu o niewiadomym wektorze parametrów $\boldsymbol{\theta}$
$Pr(A)$	– prawdopodobieństwo zdarzenia A o odpowiednim rozkładzie
$\vartheta(\mathbf{r}_M)$	– funkcja strat
EZ, μ_Z	– średnia (wartość oczekiwana) zmiennej losowej Z dla gęstości $f(Z)$
$V(Z)$	– wartość przeciętna funkcji $(Z - \mu_Z)^2$
$var Z, \sigma_Z^2$	– wariancja zmiennej losowej Z
$corr(X, Y), \rho_{XY}$	– korelacja między X i Y
$cov(X, Y)$	– kowariancja
\bar{X}	– średnia z próby
$\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}$	– wektor parametrów
$\hat{\boldsymbol{\theta}}$	– wartości oszacowane lub estymator wektora parametrów $\boldsymbol{\theta}$
$L(\boldsymbol{\theta})$	– funkcja wiarygodności próby
$\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$	– rozkład Gaussa (normalny) ze średnią μ i wariancją σ^2
$P(\omega)$	– rozkład Poissona z parametrem ω
\mathbf{r}_M	– losowy błąd M pomiarów
\mathbf{m}_M	– wielkości mierzone w M obserwacjach
$f(\mathbf{y} \boldsymbol{\theta})$	– warunkowa funkcja gęstości prawdopodobieństwa dla wektora pomiaru \mathbf{y} względem wektora parametrów $\boldsymbol{\theta}$
\mathbf{y}_M	– wielkości obserwowane w M obserwacjach będące sumą wielkości mierzonych \mathbf{m}_M i losowego błędu pomiaru \mathbf{r}_M
$\ \mathbf{r}_M\ _{l_2}$	– norma wektora błędów (różnic) w przestrzeni l_2
\xrightarrow{d}	– zbieżność z rozkładem
AIC	– kryterium informacyjne Akaike'a
BIC	– kryterium informacyjne Schwarca
MNK	– metoda najmniejszych kwadratów
ML	– maksymalna (największa) wiarygodność

1. Wstęp

1.1 Przedmiot pracy

W nowoczesnych rozwiązaniach technicznych wytrzymałość wielu metali konstrukcyjnych poprawia się przez wprowadzanie kontrolowanej ilości twardych wtrąceń lub specjalną obróbkę termiczną bądź chemiczną materiału. W zależności od metody, wtrącenia wprowadza się równomiernie lub wymusza się ich skupianie w niewrażliwych miejscach. Uzyskiwany rozkład wtrąceń w materiale może być bardziej lub mniej jednorodny. Modelowanie konstytutywne materiałów z uwzględnieniem różnego udziału objętościowego wtrąceń stwarza duże możliwości projektowania nowych materiałów o pożądanych cechach wytrzymałościowych. Jednak właśnie te wtrącenia jako źródła niejednorodności są przyczyną powstawania mikrouszkodzeń, mikropustek, podczas zaawansowanych odkształceń plastycznych. Do zrozumienia procesu pękania materiałów, jego zapobiegania i w miarę możliwości do jego kontrolowania, konieczny jest właściwy opis procesu powstawania pustek i powiązania go z podstawowymi parametrami opisu deformacji ciągliwych materiałów metalicznych. Opis zjawiska powstawania pustek podczas prostych prób deformacji (rozciąganie, ściskanie, skręcanie i ścinanie) oraz scharakteryzowanie tego zjawiska w terminach mechanicznych jest pożądane z praktycznego punktu widzenia. W zjawisku powstawania pustek istotny jest proces formowania się pustek, ich umiejscowienie (np: wewnątrz ziaren lub na granicy ziaren), ich geometria (kształt, wielkość) i deformacja materiału otaczającego wtrącenia. Obecnie jest wiele obserwacji związanych z powstawaniem pustek w różnych materiałach dla różnych stanów obciążenia. Przegląd badań doświadczalnych można znaleźć w pracach np. Pardoen i inni (2003) [166], Ragab (2004) [202]. Analityczne modele powstawania i wzrostu mikropustek oraz porównanie rezultatów eksperymentów z przewidywaniami teoretycznymi przedyskutowano w rozdziałach 2.5 i 2.6. W pracy analizuje się powstawanie i rozwój mikropustek dla jednego rodzaju materiału, tzn. stali, rozważania jednak obejmują wspólne cechy tych zjawisk i dotyczą również innych materiałów metalicznych.

Zjawisko mikroporowatości jako źródło mikrouszkodzeń występuje w wielu metalach. W wielu przypadkach nie stanowi ono pierwszoplanowego przedmiotu badań, jednakże ma znaczenie dla poznania procesów mechanicznych zachodzących w materiałach i elementach konstrukcji.

Niniejsza praca dotyczy zagadnienia mikrouszkodzeń i zlokalizowanych odkształceń plastycznych w ciałach stałych poddanych obciążeniom quasistatycznym. Nieodwracalne odkształcenie w ciągliwym metalu, któremu towarzyszy

trwale uwalnianie energii, zachodzi w końcowym etapie przenoszenia oddziaływań mechanicznych. Zanim pojawi się pęknięcie, występuje faza osłabienia materiału, w której zmniejszają się wartości parametrów wytrzymałościowych. Od momentu osiągnięcia maksymalnej zdolności przenoszenia obciążeń do chwili zniszczenia występuje zjawisko zlokalizowanych odkształceń plastycznych. Umiejscowienie, kształt i szerokość strefy zlokalizowanych deformacji są specyficzne dla danego procesu. W pracy opisano zjawisko zlokalizowanych odkształceń plastycznych w próbie rozciągania, ściskania i skręcania. Wskazano, jakie czynniki wpływają na wymienione cechy zjawiska zniszczenia i ustalono, jaka jest ich wrażliwość na dobór parametrów materiałowych, warunki brzegowe, początkowe i parametry fizyczne.

Zagadnienia identyfikacji parametrów materiałowych stanowiły przedmiot badań przeprowadzonych w ramach projektów badawczych: KBN 3 P 404 031 07 *Opis zjawiska lokalizacji i zniszczenia w procesach plastycznego płynięcia* (1995-1997), KBN 7 T 07A 00616 *Numeryczna symulacja procesów plastycznego płynięcia z uwzględnieniem lokalizacji i zniszczenia przy obciążeniach dynamicznych* (1999-2001) kierowanych przez profesora Piotra Perzynę. Rezultaty zamieszczone w rozdziale 6 zostały uzyskane w ramach tych projektów. Rezultaty przedstawione w rozdziale 7 zostały uzyskane w ramach projektu: PBZ KBN-102/T08/2003: „Opracowanie podstaw nowej technologii kształtowania wyrobów z funkcjonalnych materiałów trudno odkształcalnych”, koordynowanego przez doc. dr hab. Ryszarda B. Pęcherskiego oraz w czasie realizacji zadania kierowanego w IPPT PAN przez profesora Wojciecha K. Nowackiego projektu PBZ KBN-096/T08/2003: „Technologie wytwarzania wyrobów z metali i stopów o strukturze nanometrycznej” koordynowanego przez profesora Krzysztofa Kurzydłowskiego.

1.2 Cel i zakres pracy

Celem badań prezentowanych w rozprawie jest ustalenie wpływu powstawania i rozwoju mikropustek na makroskopową deformację materiałów metalicznych oraz określenie metod identyfikacji parametrów materiałowych występujących w opisie plastycznego płynięcia materiałów ciągliwych.

W pracy wykazano, że uwzględnienie wzajemnego oddziaływania mikropustek, zwłaszcza w procesach quasi-statycznych, odgrywa decydującą rolę w powstaniu i rozwoju obszaru zlokalizowanych odkształceń plastycznych prowadzących do zniszczenia.

Sformułowano teoretyczny opis płynięcia plastycznego materiałów z mikrouszkodzeniami oraz rozważono przydatność powszechnie stosowanego mo-

delu Gursona do analizy zlokalizowanych odkształceń plastycznych materiałów wrażliwych na ciśnienie hydrostatyczne.

Przyjęcie losowej natury zjawiska mikrouszkodzeń uzasadniono przez wykazanie rozkładu cząstek drugiej fazy i rozkładu wielkości tych cząstek w ośrodku. Omówiono źródła losowości rozkładu mikropustek, przedstawiono ich znaczenie i rolę wyboru funkcji strat (jakości dopasowania) w przebiegu procesu identyfikacji.

Obliczono parametry materiałowe i ustalono zmienne charakteryzujące zjawisko płynięcia plastycznego i zlokalizowanego odkształcenia plastycznego. Wyniki przedstawiają powstawanie i rozwój mikrouszkodzeń. Potwierdzają ważność traktowania zadania opisu mikrouszkodzeń jako zagadnienia probabilistycznego. Odzwierciedlają fizyczne proporcje procesu nukleacji i wzrostu mikrouszkodzeń. W poszczególnych przykładach numerycznych badano wpływ parametrów materiałowych występujących w opisie płynięcia plastycznego i ich zmiany na wynik końcowy danego problemu początkowo-brzegowego. Wykazano wpływ własności materiału osnowy na charakter rozwoju mikropustek. Rezultaty numeryczne uzyskano z wykorzystaniem jedno-, dwu- i trójwymiarowych modeli obliczeniowych. Zweryfikowano rozwiązania przez porównanie z dostępnymi rezultatami doświadczalnymi i rozwiązaniami numerycznymi porowatości podczas odkształceń plastycznych.

W rozdziale 2 omówiono własności mechaniczne metali ciągliwych z mikrouszkodzeniami na podstawie literatury. W rozdziale tym odwołano się do wyników testów mechanicznych oraz obserwacji metalograficznych. W omawianych eksperymentach skupiono uwagę na znaczeniu podstawowych procesów deformowania ciał z mikrouszkodzeniami i zlokalizowanych odkształceń plastycznych. Omówiono pojęcie porowatości oraz ewolucję mikrouszkodzeń w metalach. Podano kryteria powstawania i wzrostu mikrouszkodzeń dla procesu quasi-statycznego jak i dynamicznego. Rozważono aspekty matematyczne i fizyczne wyróżniające losową naturę zjawiska. Omówiono efekty nukleacji i wzrostu mikropustek, charakterystyczne dla deformacji w obszarze 'szyjki' w zadaniu początkowo-brzegowym osiowego rozciągania. Przedstawione w tym rozdziale zagadnienia stanowią motywację wyboru modelu konstytutywnego.

W rozdziale 3 podano matematyczne sformułowanie warunku uplastycznienia materiału z mikropustkami. Przyjęto sprężysto-plastyczny model osnowy. Osłabienie materiału zostało zdefiniowane jako zmniejszenie wytrzymałości na skutek istnienia lub zarodkowania mikroporowatości w wyniku powstawania i wzrostu mikropustek.

W rozdziale 4, przedstawiono sposób określania stanu naprężenia w obsza-

rze zlokalizowanych odkształceń w postaci 'szyjki'. Opis zmiany porowatości w procesie plastycznego płynięcia zapisano w postaci równań ewolucji i przedstawiono je w rozdziale 5. Podano warunki gwarantujące poprawne postawienie problemu ewolucji.

W rozdziale 6 przedstawiono sposób rozwiązania zadania lokalizacji odkształceń niesprężystych dla próby skręcania cienkościennej rurki stalowej. Do rozwiązania zadania zastosowano metodę elementów skończonych.

W rozdziale 7 przedstawiono równania plastyczności z udziałem pasm ścinania i wyniki identyfikacji tych równań w zadaniu nieswobodnego ściskania w płaskim stanie odkształcenia. Przedstawiono w nim sposób weryfikacji opisu konstytutywnego z zastosowaniem wyników badań doświadczalnych procesu kucia matrycowego.

W rozdziale 8 przedstawiono ogólne sposoby definiowania i formułowania problemu identyfikacji parametrów konstytutywnych dla różnych funkcji strat odpornych na błędy pomiarów. Omówiono metody oszacowania parametrów danego modelu przyjętego do identyfikacji. Problem identyfikacji sformułowano w zależności od miary mikrouszkodzeń i omówiono metodę optymalizacji oraz sposób całkowania numerycznego.

Analizowane zjawisko dużych odkształceń niesprężystych ujawnia właściwości wyboru funkcji i stałych modelu konstytutywnego. Zagadnienie wyboru modelu stanowi treść rozdziału 9. Podano tam sposób przeprowadzenia analizy wyboru i porównywania modeli. Wprowadzono pojęcia modeli zagnieżdżonych i niezagnieżdżonych. Na przykładzie zagadnienia osiowego rozciągania cylindrycznych próbek stalowych pokazano wpływ i konieczność stosowania właściwych testów statystycznych. Na wstępie podano wspólne dla prezentowanych zadań informacje o parametrach materiałowych. Przyjmowano zróżnicowane funkcje materiałowe. Poszczególne przypadki obliczono z różną liczbą parametrów definiujących rozwój porowatości materiału. Osobnej analizie poddano równanie ewolucji parametru porowatości w trakcie procesu osiowego rozciągania, zwłaszcza podczas formowania i rozwoju strefy zlokalizowanych odkształceń plastycznych w obszarze 'szyjki'. Omówiono zalety łączenia analizy wyników i testów statystycznych. Rozważono numeryczne aspekty procesu identyfikacji parametrów dla materiału z mikrouszkodzeniami.

W kolejnym rozdziale podsumowano prezentowane wcześniej wyniki obliczeń numerycznych. Podkreślono konieczność stosowania odpowiednich metod doboru parametrów. W zakończeniu przedstawiono wnioski wynikające z prezentowanych rozważań wraz z uwagami dotyczącymi dalszych badań. Podsumowano też oryginalne wyniki zamieszczone w rozprawie.

1.3 Omówienie stanu badań

Zagadnienia rozważane w rozprawie mają charakter interdyscyplinarny. Całość cytowanej tu bibliografii można podzielić na trzy zasadnicze działy dotyczące: podstaw fizykalnych powstawania mikrouszkodzeń, zagadnień modelowania powstawania mikropustek i problemów lokalizacji odkształceń w ciałach stałych oraz problemów identyfikacji parametrów i wyboru najlepszego modelu. Zagadnienia powstawania pustek i rozwój odkształceń plastycznych wokół wtrąceń są przedmiotem rozważań teoretycznych stanowiących podstawę stosownych modeli matematycznych.

1.3.1 Podstawy fizykalne—omówienie testów laboratoryjnych

Okres intensywnych badań doświadczalnych dotyczących przyczyn powstawania całkowitego zniszczenia lub pęknięcia w metalach przypada na drugą połowę XX wieku. Należy podkreślić znaczący wkład w tę dziedzinę uczonych rosyjskich zwłaszcza w początkowym okresie badań. Z pośród wielu pionierskich prac należy wymienić pracę L.M. Kachanov'a (1958) [102] (wersja ang. [103]), który pierwszy podał opis pęknięcia w materiałach w procesie pełzania. Następnie Puttick (1959) [201] opisuje pęknięcie polikrystalicznych materiałów ciągliwych. Praca McClintocka (1968) [134] podała kryterium pęknięcia materiałów z otworami (pustkami). Rice i Tracy (1969) [203] opisali wzrost pustki/pustek w metalach w trójosiowym stanie naprężenia. Badania eksperymentalne Gurlanda (1972) [85] dotyczą deformacji materiałów zawierających wtopione twarde cząstki drugiej fazy, i pokazują powstawanie mikropęknięć w powiązaniu z tymi cząsteczkami. Zjawisko to pojawia się w materiałach poddanych różnym typom deformacji. Pustki te pojawiają się jako pęknięcia (szczeliny) w cząstkach drugiej fazy lub dekohezji połączenia cząstka-osnowa. Typ pustek (kształt i wielkość) zależy od wzajemnego oddziaływania różnych parametrów mikrostruktury oraz od lokalnego stanu deformacji. W bardzo czystych materiałach (srebro, nierdzewna stal) bez źródeł mikropustek, pustki powstają w wyniku gromadzenia się defektów punktowych. W wysokich temperaturach zaobserwowano pustki na granicy ziaren. Podczas pełzania powstawanie pustki zaobserwowano w tak zwanych „punktach potrójnych” łączenia się ziaren (ang. *triple points*) oraz w powiązaniu z cząsteczkami drugiej fazy mieszczących się blisko granicy lub na granicy ziaren jako rezultat wysokich naprężeń. Pustki mogą również tworzyć się w wyniku procesów dyfuzyjnych na granicy ziaren, polegających na dyfuzji kierunkowej jako rezultat lokalnych naprężeń. Nie wszystkie cząsteczki drugiej fazy są źródłem pustek. Cytowane

powyżej przykłady powstawania pustek pozwalają stwierdzić, że w materiałach powszechnego zastosowania, deformowanych w temperaturze pokojowej, powstawanie pustek wiąże się z niejednorodnościami wynikającymi z istnienia wtrąceń lub cząstek drugiej fazy. Większość badań eksperymentalnych podaje jedynie rezultaty jakościowe, potwierdzające wpływ wtrąceń na tworzenie się pustek. Brak jest miar ilościowych tworzenia się pustek i ich ewolucji aż do powstania zniszczenia (rozerwania próbek i powstania powierzchni zniszczenia). Większość prac poświęcona jest badaniu wpływu pustek na ciągliwość metali (wartość odkształcenia do zniszczenia) bez ustalania czynników inicjujących i kontrolujących powstawanie pustek. W wielu pracach eksperymentalnych poświęconych badaniom powstawania pustek ustalono, że decydujący wpływ mają wielkość i kształt cząstek drugiej fazy, stan lokalnego naprężenia i odkształcenia plastycznego. Istotne też są temperatura badania oraz stopień umacniania się materiału w otoczeniu pustek (osnowy). Pękanie wtrąceń ma wpływ na rodzaj zniszczenia, może to być zniszczenie kruche lub ciągliwe. Mikropęknięcia typu Griffith'ca są źródłem rozwoju makroskopowej kruchej szczeliny natomiast wzrost plastyczny szczelin skutkuje w ich łączeniu i tworzeniu się zniszczenia ciągliwego. Dekohezja w warstwie między fazami, tak jak i pękanie cząstek, również występuje częściej w powiązaniu z dużymi cząsteczkami drugiej fazy. Argon, Im i Safoglu (1975) [7] zależność tę tłumaczą, dla stali 1045, wpływem oddziaływań pomiędzy cząsteczkami większymi niż wymiar średni będącymi na mniejszej odległości niż średni odstęp między nimi.

1.3.2 Problemy stacjonarności i jednoznaczności rozwiązania zadania z mikrouszkodzeniami

Problemy stacjonarności i jednoznaczności rozwiązania zadania niesprężystych deformacji z osłabieniem (materiałowym lub geometrycznym) w literaturze sformułowano w zależności od użytego opisu konstytutywnego zachowania się materiału. Zadania wykorzystujące modele konstytutywne niezależne od prędkości odkształceń posiadają tę cechę, że ich rozwiązania są wrażliwe na wielkość przyjętej siatki podziału na elementy skończone w obliczeniach numerycznych. Wyeliminowanie lub osłabienie takiego wpływu na rozwiązanie wymaga regularyzacji. W pracach Sluysa (1992) [222, 223], Wanga (1997) [246] oraz Wang i inni (1996) [247], Łodygowski (1995) [125], (1994) [124] zostały porównane zregularyzowane rozwiązania plastyczne.

Zadania wykorzystujące sprężysto-lepkoplastyczny model materiału okazały się nie posiadać takiej wrażliwości. Sformułowanie sprężysto-lepkoplastyczne, wykorzystywano w wielu pracach np.: Loret i Prevost (1990) [120], Prevost i

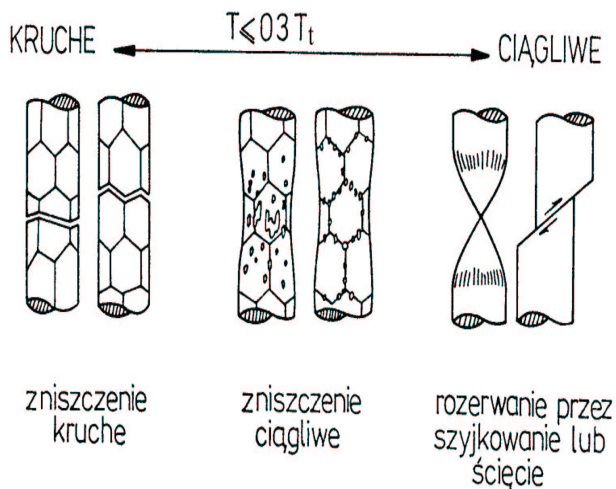
Loret (1990) [200], Nemes i Efits (1990) [149], (1993) [148], Duszek-Perzyna i Perzyna (1994) [60], Needleman (1988) [140], (1989) [141], Perzyna (1994) [177], (1998) [179], Łodygowski i Perzyna (1997) [127], [126], Malek-Madani i Raouf (1999) [129]. Model sprężysto-lepkoplastyczny użyto także do opisu powstawania pęknięć pod wpływem obciążeń cyklicznie zmiennych (Dornowski (1999) [53], Dornowski i Perzyna (2002) [58], [57]).

2. Mechaniczne własności metali ciągliwych z mikrouszkodzeniami. Przegląd literatury

2.1 Doświadczalne obserwacje powstawania pustek

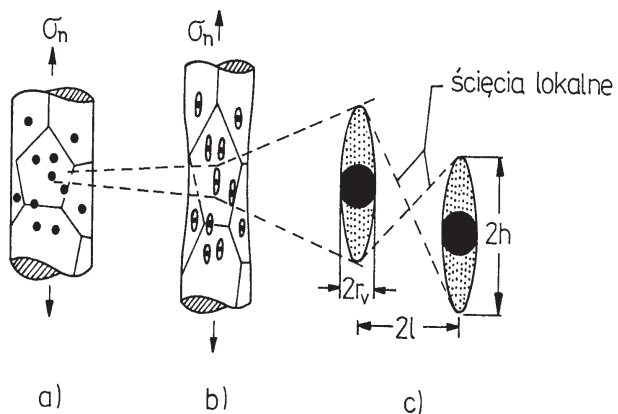
Doświadczalne badania dotyczące deformacji materiału zawierającego wtrącenia cząstek drugiej fazy pokazują, że wtrącenia i cząstki drugiej fazy są źródłem powstawania mikropęknięć lub mikropustek, gdy materiał podlega różnym typom deformacji. Mikropustki pojawiają się jako pęknięcia w cząsteczkach lub jako zerwanie połączenia międzyfazowego cząsteczka-osnowa. Aktualna morfologia pustek w materiale zależy od związków różnych parametrów mikrostruktury jak również od lokalnego stanu deformacji. W wysoce czystych strukturach metalicznych, gdy brak jest cząstek drugiej fazy stwierdzono inne mechanizmy powstawania mikropustek. Bauer i Wilsdorf (1973) [16] badali pasma srebra i stali nierdzewnej na rozciąganie. Duże pustki obserwowano przed rozwijającymi się szczelinami, przy braku materiałowych nieciągłości. W obszarach tych jednak obserwowano wysoką gęstość dyslokacji. Ashby, Ghandhi i Taplin w pracy (1979) [11] sklasyfikowali i omówili obserwowane formy zniszczenia materiałów ciągliwych w zależności od związanego z danym zniszczeniem naprężeniem lub odkształceniem i temperaturą, tworząc wykresy mechanizmów zniszczenia danego materiału. Na rys. 2.1 pochodzącym z pracy Ashby i inni (1979) [11] przedstawiono możliwe mechanizmy zniszczenia w materiałach ciągliwych. W klasie materiałów ciągliwych, do których ograniczono się w rozprawie, Ashby, Ghandhi i Taplin (1979) [11] wyodrębniają mechanizm zniszczenia ciągliwego, który przedstawiono na rys. 2.2. Zniszczenie ciągliwe według Ashby'ego, Ghandhi'ego i Taplina (1979) [11] jest wynikiem powstawania mikropustek w czasie procesu odkształcania, wzrostu mikropustek i wzajemnego ich łączenia.

Gardner i inni (1977) [75] badając beryl i pojedyncze kryształy żelaza ustalili, że pęknięcia inicjują się w strukturze dyslokacji rozwijającej się na brzegach granicy ziaren. Podczas pełzania w wysokich temperaturach obserwowano tworzenie się pustek na granicach ziaren jako rezultat wysokich naprężeń wynikających z niezgodności związanych z poślizgiem na granicy ziaren. Kolejną przyczyną powstania pustek są procesy dyfuzyjne na granicach ziaren, które są źródłem powstawania i zanikania wakansji z dyfuzją kierunkową jako rezultat naprężeń lokalnych. W materiałach wytwarzanych przemysłowo tworzenie się pustek podczas deformacji w temperaturach pokojowych, jest przypisywane istnieniu niejednorodności w postaci rozproszonych wtrąceń lub cząstek drugiej fazy. Wczesne prace Putticka (1959) [201], Rogersa (1960) [207], Crussarda



Rys. 2.1. Klasyfikacja mechanizmów zniszczenia dla materiałów ciągliwych w próbach quasi-statycznego płynięcia w temperaturze $T \leq 0.3 T_t$ (T_t jest temperaturą topnienia) z pracy Ashby, Gandhi i Taplin (1979) [11].

ZNISZCZENIE CIĄGLIWE



Rys. 2.2. Mechanizm zniszczenia ciągliwego z powstawaniem, wzrostem i łączeniem się pustek z pracy Ashby, Gandhi i Taplin (1979) [11].

i inni (1959) [49] były pierwszymi badaniami pokazującymi rolę wtrąceń jako źródeł dla powstawania pustek. Po tym okresie wielu badaczy badało materiały zawierające cząstki innej fazy. Brak jest jednak w dalszym ciągu wszechstronnych rezultatów ilościowych związanych z powstawaniem pustek. W przeszłości efekt cząstek drugiej fazy na zniszczenie ciągliwe był spostrzegany albo tylko jakościowo, albo jako proces zniszczenia ale w uproszczony sposób. Mówiąc o procesie zniszczenia rozważano jedynie wzrost mikropustek i ich łączenie się w momencie zerwania próbek. W badaniach tych dyskutuje się efekt cząstek na ogólną ciągliwość (odkształcenie do zniszczenia), a bardzo mało mówi się o czynnikach, które kontrolują powstawanie pustek.

W badaniach przyczyn tworzenia się mikropustek wyróżnia się takie wielkości (zmiennie) jak: 1) wielkość i kształt cząstek drugiej fazy; 2) efekt stanu naprężenia; 3) efekt odkształcenia plastycznego. Innymi zmiennymi branymi pod uwagę są: 4) temperatura badania, 5) temperatura topnienia materiału osnowy w związku ze zmianami energii powierzchniowej na granicy faz i 6) umacnianie się materiału osnowy. Pewne rezultaty z tych badań zostaną podane poniżej.

Pękanie cząstek wiąże się z rozpoczęciem kruchego lub ciągliwego pęknięcia w skali makroskopowej. W pracy Gaugulee i Gurland (1967) [74] zauważono, że duże cząstki drugiej fazy mają tendencję do pęknięcia lub oddzielania się od osnowy we wczesnych etapach deformacji przed małymi cząsteczkami. Argon i Im (1975) [5] ustalili jednak małą korelację między wielkością cząstek i lokalnym odkształceniem. Gurland ze współpracownikami (Gurland i Plateau (1963) [84], Gaugulee i Gurland (1967) [74]) badali pękanie cząsteczek krzemu osadzonych w osnowie z aluminium i ustalili, że prawdopodobieństwo pęknięcia danej cząstki drugiej fazy przy danym poziomie naprężenia jest proporcjonalne do pierwiastka kwadratowego ze średnicy tej cząstki. Broek (1974) [30] ustalił, że w aluminium duże wtrącenia pękają a małe są źródłem pustek jako wynik dekohezji, nawet przy bardzo dużych odkształceniach plastycznych. Wiele prac eksperymentalnych poświęcone jest pękaniu cząstek węgla wapnia (karbidu) w stalach. Ustalono, że pękanie wtrąceń jest kontrolowane stanem naprężenia lub jest rezultatem lokalnego odkształcenia plastycznego lub kombinacją obydwu. Są jednak prace wskazujące na fakt, że liczba popękanych cząstek jest funkcją odkształcenia, a nie naprężenia (Ashby i inni (1979) [11], Ashby (1970) [10]). W pracach Fishera i Gurlanda (1981) [69, 70] dla stali sferoidalnej określono, że rozkład popękanych cząstek na powierzchni zniszczenia w minimalnym przekroju rozciąganych próbek jest rozkładem jednolitym i jednostajnym, co wskazuje na zależność powstawania pęknięć cząstek

od naprężeń ścinających, a nie od naprężeń rozciągających, które maleją na przekroju próbki od środka do brzegu. Barnby (1967) [12] wykazał, że wydłużone (cylindryczne) cząsteczki węglików wapnia i chromu w stali nierdzewnej pękały jako rezultat skoncentrowanych lokalnych naprężeń w cząsteczkach wywołanych krzyżowaniem się linii poślizgu w osnowie. Autor ten wnioskuje, że odkształcenie w osnowie, jest odpowiedzialne za utworzenie się krytycznego skoncentrowanego naprężenia w cząsteczce prowadzącego do jej pęknięcia. Lindley i inni (1970) [118] stwierdzili, że współczynnik kształtu cząstek był czynnikiem geometrycznym, który wpływał na pęknięcie cząstek karbidu usytuowanych na granicy ziaren.

Podczas gdy, pęknięcie cząstek jest powszechnie obserwowane w płaskich i wydłużonych wtrąceniach (mających współczynnik kształtu większy niż 1) oraz także w cząsteczkach o złożonych kształtach (np. skupiska sferoidalne w stali) to dekohezja połączenia cząsteczka-osnowa, jest często związana z cząsteczkami mającymi bardziej równomierną geometrię lub słabe połączenia międzyfazowe. Dekohezja międzyfazowa często zachodzi podczas ostatnich etapów deformacji przy rozciąganiu, po wystąpieniu niestabilności w formie 'szyjki' a w pewnych materiałach zjawisko to występuje tuż przed zniszczeniem (patrz Broek (1974)[30]). Tak jak w przypadku pęknięcia cząstek dekohezja połączenia międzyfazowego następuje częściej dla dużych cząstek. Praca potrzebna na utworzenie powierzchni swobodnej (pustki) na granicy międzyfazowej wtrącenie-osnowa ma wpływ na nukleację pustki (pustek). Zmiany własności mechanicznych w pewnych systemach stopów znacząco zmieniają pracę adhezji (energii potrzebnej na pokonanie sił międzycząsteczkowego przylegania i utworzenie powierzchni swobodnej). Przez dodanie kobaltu do niklu zawierającego 2,5% tlenków glinu, Hancock i Mackenzie (1976) [89] stwierdził, że energia wiązania międzyfazowego znacząco maleje co powoduje mniejsze generowanie się pustek i wzrost ciągliwości w porównaniu do tego samego stopu bez kobaltu. Cialone i Asaro (1979) [44] mierzyli zmianę nukleacji pustek w cząsteczkach węgla w stali 1045 poprzez nasycanie wodorem co powodowało wzrost energii adhezji międzyfazowej cząsteczka-osnowa. Podejmowano również próby określenia związku między przyłożonym naprężeniem lub odkształceniem plastycznym a nukleacją wewnętrznych pustek. Argon i Im (1975) [5] stwierdzili, że pustki tworzą się na granicy międzyfazowej cząsteczka-osnowa w stalach sferoidalnych, stopach miedź-chrom i nierdzewnych stalach typu 'maraging', gdy kombinacja naprężeń na granicy międzyfazowej cząstka i plastycznie deformująca się osnowa, osiągnie krytyczną wielkość przy lokalnym rozciąganiu hydrostatycznym.

LeRoy i inni w pracy z 1981 [117] badali pustki w stali sferoidalnej i ustalili, że wymagane jest osiągnięcie krytycznej wartości odkształcenia plastycznego dla utworzenia się pustki na granicy faz.

Fisher w pracy z 1980 [68] i w pracy wspólnej z Gurlandem z 1981 [69] opublikowali ilościowe wyniki eksperymentalnych badań wiążące pomiary odkształceń plastycznych z modelem powstawania (nukleacji) i wzrostu mikropustek. Rezultaty te wykorzystano w rozdziale 5 i w rozdziale 8.

Podsumowując, ustalono że przyczynami powstawania pustek są: dyslokacje, pękanie cząstek drugiej fazy i dekohezja między cząsteczką a osnową. Efekty te są brane pod uwagę w różnych modelach powstawania pustek. Charakterystyczne własności tych modeli są omówione i dyskutowane w rozdziale 2.5.

2.2 Rola pustek w aktualnych teoriach zniszczenia

Zrozumienie mechanizmów zniszczenia ciągłego wymaga badań mikromechanizmów działających we wczesnych stadiach powstawania pustek. Aktualne modele zniszczenia próbują powiązać mikrostrukturę z warunkami krytycznymi tworzenia się pustek i mikroszczelin oraz ich wzrostu. Ponieważ cząstki i wtrącenia są źródłem w procesach powstawania pustek, warto więc wymienić pewne teorie, które wiążą obecność niejednorodności w materiałach polikrystalicznych z różnym kryteriami zniszczenia. Ritchie, Knott i Rice (model RKR z 1973) [206] zaproponowali model zniszczenia kruchego, w którym podali zależność między krytycznym naprężeniem rozciągającym σ_c i współczynnikiem odporności na pękanie K_{Ic} . W stalach kruche pękanie (ang. *cleavage*) zachodzi poprzez pękanie cząstek cementytu na granicy między ziarnami. Wiele prac wskazuje na fakt, że cechy mikrostruktury należy uwzględniać jako część kryterium zniszczenia. Rozwijanie modeli powstawania pustek zawierających szczegóły opisu mikrostruktury i warunki lokalne deformacji stanowią ważny krok w ulepszaniu teorii zniszczenia.

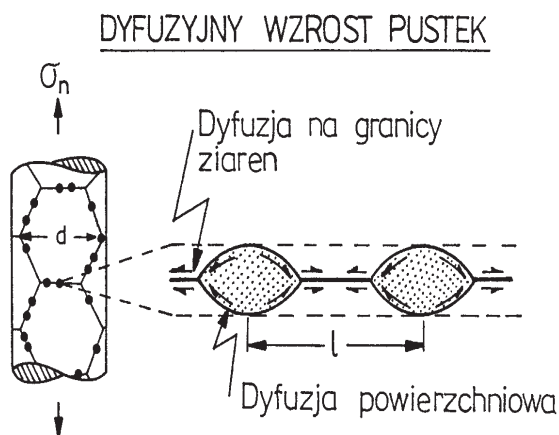
2.3 Deformacje lokalne w cząsteczkach drugiej fazy

Cząsteczki pękają lub oddzielają się od osnowy jako rezultat lokalnego stanu deformacji, który istnieje w otoczeniu niejednorodności przyczyniającej się do powstania mikropustki. Wartość naprężenia i odkształcenia w samych cząstkach o różnej geometrii i w otoczeniu cząstek były określane w literaturze dla specyficznych warunków obciążenia i charakterystyk materiałowych. Do tego celu postulowano zarówno modele kontynualne, jak i mikromechaniczne.

Problem sprężystych wtrąceń w sprężysto-plastycznej osnowie był wszechstronnie badany dla dwuwymiarowych cząstek kulistych np.: Toya (1974) [239] oraz także dla trójwymiarowych cząstek o elipsoidalnej geometrii np. Yoffe (1974) [248]. Jednak takich rozwiązań nie można wykorzystać do określania naprężenia i odkształcenia odpowiadających nukleacji pustki generowanej sprężystą inkluzją osadzoną w plastycznie deformującej się osnowie. Konieczne jest uwzględnienie efektu niejednorodności wynikającej z faktu niekompatybilności składników. Problem dwuwymiarowego sprężystego kulistego wtrącenia w sprężysto-plastycznej osnowie poddanej czystemu poprzecznemu ścinaniu został rozwiązany przez Huanga (1972) [96] z zastosowaniem metody różnic skończonych. Argon w pracy (1976) [8] określił, że maksimum naprężenia na granicy faz występuje odpowiednio pod kątami 17 i 12° do kierunku głównych naprężeń. Argon, Im i Safoglu w pracy (1975) [7] zastosowali metodę elementów skończonych dla przypadku sprężysto-idealnie-plastycznego kontinuum poddanego ścinaniu ze sztywnym kołowym wtrąceniem i ustalili, że maksymalne naprężenia międzyfazowe są półtora razy większe od odległych od wtrącenia naprężeń ścinających w kierunku określonym przez główną oś rozciągania. Autorzy pracy [7], podsumowując stwierdzili, że naprężenie hydrostatyczne, może być dodane bezpośrednio do takiego rozwiązania aby otrzymać rezultaty dla ogólnego stanu obciążenia. Takie dwuwymiarowe modele mogą być użyte do przybliżonego określenia stanu naprężenia wokół rzeczywistej sferoidalnej cząsteczki podczas plastycznych deformacji.

Ashby w 1966 [9] zaproponował model dyslokacyjny do określania naprężeń międzyfazowych, generowanych w sferycznych cząsteczkach osadzonych w plastycznej osnowie spowodowanych naprężeniami resztkowymi (ang. *back stresses*) z pryzmatycznej pętli dyslokacyjnej, które są generowane na granicy faz w celu dostosowania niedopasowania pomiędzy cząsteczką a osnową. Brown i Stobbs (1971) [32] zaproponowali model mikromechaniczny dla określenia naprężeń resztkowych, przyjmując, że najpierw następuje pierwotny system poślizgu a następnie relaksacja w cząsteczkach drugiej fazy (krzemionka) w miedzi. Chang i Asaro (1981) [39] rozwinął ten model na przypadek wielokrotnych poślizgów. Obydwa modele wykorzystują metodę Eshelby'ego (1957) [66], aby obliczyć odkształcenia sprężyste wewnątrz i wokół cząsteczek wynikających z maksymalnych wartości naprężeń międzyfazowych wzdłuż głównego kierunku naprężenia rozciągającego i jednolitego naprężenia wewnątrz cząsteczek. Shibata i Ono (1978) [219] rozszerzył to rozwiązanie na przypadek wtrąceń elipsoidalnych (jako przeciwstawienie sferoidalnym). Koncentracja naprężenia wewnątrz i w otoczeniu wydłużonych lub nieregularnych kształtem wtrąceń, może

być znacznie większa niż dla niejednorodności sferycznych co określano analitycznie i potwierdzono eksperymentalnie np.: Edmonds i Beevers (1968) [62]. Rozwiązania mikromechaniczne dla tych wydłużonych lub nieregularnych cząstek nie jest łatwe gdyż brakuje wiedzy o lokalnych procesach deformacji, które zachodzą w takich cząsteczkach. W pracy Ashby, Gandhi i Taplin (1979) [11] zaobserwowano również wpływ dyfuzji (transportu) materiału z powierzchni cząstek w kierunku granicy międzyfazowej. Mechanizm transportu masy jest złożony, ale decydującym wydaje się być, narastanie gęstości dyslokacji na granicy ziaren lub w samych cząsteczkach drugiej fazy. W miejscach takich powstają i powiększają się mikropustki w wyniku przemieszczania się materiału do miejsc sąsiednich, co pokazano na rys. 2.3 z pracy Ashby, Gandhi i Taplin (1979) [11].



Rys. 2.3. Mechanizm dyfuzyjnego wzrostu pustek z pracy Ashby, Gandhi i Taplin (1979) [11].

Najpowszechniej jest stosowany model Changa i Asaro (1981) [39] jako najbardziej realistyczny i praktyczny dla określania deformacji w sferycznych cząsteczkach cementytu (węglík żelaza) w stalach. Model nukleacji pustek w rozdziale 5 jest oparty na ich rezultatach.

2.4 Kryteria powstawania pustek

Istniejące modele nukleacji pustek, można pogrupować, ze względu na użyte kryterium powstawania pustek, na trzy kategorie. Modele wykorzystujące kryterium energetyczne, kryterium krytycznego lokalnego naprężenia lub kryterium krytycznego lokalnego odkształcenia. W literaturze spotyka się również modele zawierające elementy z więcej niż jednego kryterium, i przez to tworzące kryterium bardzo złożone. Modele wykorzystujące kryterium energetyczne określają powstanie pęknięcia lub pustki, gdy zgromadzona energia sprężysta w otoczeniu cząstek drugiej fazy lub wtrącenia, jest równa lub większa niż energia wymagana do utworzenia powierzchni pustki. To kryterium jest traktowane jako warunek konieczny (nie jest to warunek wystarczający) powstania pęknięcia, pustki (otworu).

Kryterium krytycznego lokalnego naprężenia mówi, że pustki utworzą się gdy naprężenia normalne wewnątrz cząsteczek lub na granicy faz cząsteczka-osnowa osiągnie pewną krytyczną wartość, która przewyższa wytrzymałość na pękanie cząsteczki lub wytrzymałość połączenia międzyfazowego.

Model nukleacji pustek bazujący na kryterium krytycznego lokalnego odkształcenia, dotyczy koncentracji dużego odkształcenia, które mogą się tworzyć w niedeformujących się cząsteczkach drugiej fazy w płynącej plastycznie osnowie. Takim obszarom skoncentrowanego lokalnie odkształcenia może towarzyszyć narastanie dyslokacji mniej lub bardziej jednolicie rozłożone nieciągłości przemieszczeń na granicy faz cząsteczka-osnowa.

W każdym przypadku mamy do czynienia z dużymi naprężeniami lokalnymi, które prowadzą do uformowania się pustki.

2.5 Modele analityczne nukleacji pustek

Trzy kryteria nukleacji pustek odnoszą się do takich wielkości fizycznych jak : naprężenie, odkształcenie, energia sprężysta, które wpływają na warunki sprzyjające powstawaniu pustek.

Wśród modeli analitycznych nukleacji pustek w literaturze najczęściej spotyka się modele:

A. Pęknięcia twardych, kruchych cząstek drugiej fazy podczas plastycznie deformującej się osnowy (modele mikromechaniczne). Modele opracowane w pracach McClintocka np.: (1971) [135] lub Argona (1976) [8].

B. Dekohezja połączenia cząsteczka-osnowa. Model ten zainicjował swoimi pracami Ashby (1970) [10] a następnie Brown i Embury w pracy (1973) [33] oraz Argon ze współpracownikami w pracach (1975) [5, 7] (na bazie prac

Ashby'ego).

C. Pęknięcia cząstek sferycznych znajdujących się w pobliżu lub na granicy ziaren. Modele takie rozważał Fisher w pracy (1980) [68] jako model a) dla sferoidalnej pustki w jednorodnej izotropowej osnowie oraz model b) dla sferoidalnej pustki na granicy ziaren.

2.6 Modele analityczne wzrostu pustki/pustek

2.6.1 Opis Rice'a i Traceya wzrostu pustek

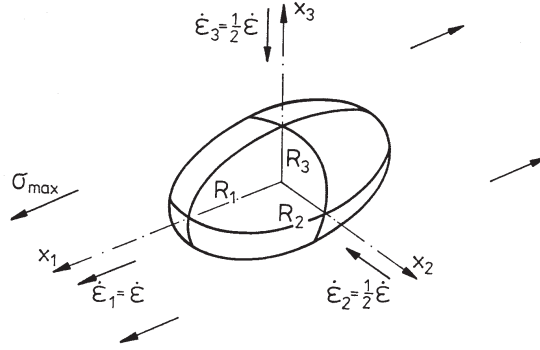
Wzrost wyizolowanej pustki z uwzględnieniem zmian jej kształtu, był przedmiotem analiz w wielu pracach np: Rice i Tracey (1969) [203], Budiansky i inni (1982) [36] oraz McClintock (1968) [134].

W pracy Rice'a i Traceya [203] z 1969 roku szczegółowo analizowano wzrost pustki sferycznej lub cylindrycznej w próbie rozciągania. W pracy [203] rozważa się pojedynczą wyizolowaną sferoidalną lub cylindryczną pustkę (istniejącą lub reprezentującą sumę pustek o tej samej łącznej objętości) o powierzchni S_V i promieniach R_1 , R_2 i R_3 w kierunkach głównych. Pustka znajduje się w ciele o dużych rozmiarach (pustka bardzo mała w porównaniu z wymiarami ciała) z nieściśliwego sztywno-plastycznego materiału (bez wzmocnienia i ze wzmocnieniem). W aktualnej chwili na materiał działa jednolite, oddalone od pustki, pole prędkości odkształcenia $\dot{\epsilon}_{ij}^\infty$. Rozważa się jedynie stan naprężenia i odkształcenia oraz kształt pustki posiadający osiową symetrię (pustki sferyczne i cylindryczne). Zagadnienie formuluje się w sposób wariacyjny a na poszukiwane aktualne pole prędkości w takim materiale, nakłada się warunek nieściśliwości i zgodności z polem prędkości odkształcenia $\dot{\epsilon}_{ij}^\infty$ oddalonym od pustki wyrażonymi warunkami:

$$\frac{1}{2}(\dot{u}_{i,j} + \dot{u}_{j,i}) = \dot{\epsilon}_{ij} \longrightarrow \dot{\epsilon}_{ij}^\infty \quad \text{gdym} \quad x_i x_i \longrightarrow \infty$$

$$\dot{\epsilon}_{ii} = 0.$$

Poszukuje się zależności zmiany wymiarów pustki dla założonego pola $\dot{\epsilon}_{ij}^\infty$. Rozwiązanie szczególne otrzymuje się stosując metodę Rayleigha-Ritza i ograniczając się do materiału sztywno-idealnie plastycznego przyjmując, że odległe od pustki pole prędkości odkształcenia $\dot{\epsilon}_{ij}^\infty$, nałożone na ciało z pustką, powoduje jego rozciągnięcie z prędkością $\dot{\epsilon}_{11}^\infty = \dot{\epsilon}$ w kierunku x_1 i kurczenie się z prędkościami $\dot{\epsilon}_{22}^\infty = \dot{\epsilon}_{33}^\infty = -\frac{1}{2}\dot{\epsilon}$ w kierunku x_2 i x_3 , (tak jak to pokazano na rysunku 2.4)



Rys. 2.4. Pustka osiowosymetryczna w polu oddalonego naprężenia rozciągającego powodującego jej wzrost z prędkością $\dot{\epsilon}_1 = \dot{\epsilon}$ wzdłuż osi x_1 oraz z prędkościami $\dot{\epsilon}_2 = \dot{\epsilon}_3 = -\frac{1}{2}\dot{\epsilon}$ w pozostałych dwóch kierunkach głównych x_2 i x_3

Aproksymacja wariacyjna przyjętego nieściśliwego pola prędkości pozwala rozłożyć dowolne pole prędkości na trzy części :

$$\dot{u}_i = \dot{\epsilon}_{ij}^{\infty} x_j + D\dot{u}_i^V + E\dot{u}_i^S,$$

gdzie D i E pełnią rolę stałych. Pierwszy wyraz powyższej zależności reprezentuje pole prędkości będące rezultatem jednolitego pola prędkości odkształcenia $\dot{\epsilon}_{ij}^{\infty}$, które spełnia warunki brzegowe na zewnętrznej powierzchni ciała. Wyraz drugi to pole prędkości odpowiadające zmianie objętości pustki bez zmiany kształtu. Wyraz ostatni reprezentuje pole prędkości, które zmienia kształt pustki bez zmiany jej objętości i zanika z odległością od pustki. Często wykorzystywanym wnioskiem z tego rozkładu, jest to że pole prędkości w otoczeniu pustki można rozłożyć na część zmieniającą kształt pustki i część zmieniającą jego objętość. W pracy Rice'a i Traceya (1969) [203] stwierdzono, że dla średnich i dużych naprężeń hydrostatycznych σ_{kk}^{∞} ($\sigma_{kk}^{\infty} > \frac{1}{2}\sigma_y$), gdzie σ_y jest naprężeniem uplastycznienia materiału otaczającego pustkę, decydujący jest człon objętościowego wzrostu pustki. W przypadku ogólnym, względna prędkość wzrostu pustki sferycznej o promieniu R w jednym z kierunków głównych daje się wyrazić w postaci

$$\frac{\dot{R}_l}{R_l} = C\dot{\epsilon}_l^{\infty} + D\dot{\epsilon}^{\infty},$$

gdzie $l = I, II, III$, $\dot{\varepsilon}^\infty = \sqrt{\frac{2}{3}\dot{\varepsilon}_{ij}^\infty\dot{\varepsilon}_{ij}^\infty}$, C jest współczynnikiem uwzględniającym zwiększoną prędkość powiększania się pustki w kierunku przyłożonego pola prędkości odkształcenia $\dot{\varepsilon}_{11}^\infty$ (zależy od stosunku R_{33}/R_{11}) i własności umacniania się otaczającego pustkę materiału. C jest liczbą z przedziału $\langle \frac{5}{3}, 2 \rangle$ ($\frac{5}{3}$ dla dużego wzmocnienia, 2 przy wysokim ciśnieniu trójosiowym i dużym wzmocnieniu) a D jest funkcją naprężenia hydrostatycznego σ_{kk}^∞ i dla prostego rozciągania wynosi

$$D = 0.283 \exp\left(\frac{\sqrt{3}\sigma_{kk}^\infty}{2\tau_0}\right).$$

Natomiast dla materiału bez wzmocnienia i przypadku osiowego rozciągania w pracy Rice'a i Traceya (1969) [203] otrzymano

$$D = 0.558 \sinh\left(\frac{\sqrt{3}\sigma_{kk}^\infty}{2\tau_0}\right) + 0.008 \cosh\left(\frac{\sqrt{3}\sigma_{kk}^\infty}{2\tau_0}\right),$$

gdzie τ_0 jest naprężeniem płynięcia przy ścinaniu. Tak więc z postaci równania na $\frac{\dot{R}_l}{R_l}$ otrzymanego przez Rice'a i Traceya (1969) [203] widać, że względna prędkość wzrostu pustki \dot{R}/R wynika z nałożenia się efektu hydrostatycznego rozciągania na odległe jednolite pole prędkości deformacji plastycznych $\dot{\varepsilon}_{ij}^\infty$. Z określonej przez Rice'a i Traceya (1969) [203] zmiany wymiarów pustki, w czasie deformowania się ciała, możemy określić zmianę jej objętości

$$\frac{\dot{V}}{V} = \frac{\dot{R}_I}{R_I} + 2\frac{\dot{R}_{II}}{R_{II}}.$$

W zagadnieniu wzrostu pustek ważny jest również efekt wzajemnego ich oddziaływania. Jakościowo efekt ten był określany w pracach: Needleman (1972) [138], Tracey (1971) [240], Nemat-Nasser i Taya (1977) [147], Andersson (1977) [4] oraz wielu innych. W pracy Needlemana (1972) [138] badano numerycznie efekt wzrostu wzajemnie oddziaływujących dwukierunkowo rozłożonych cylindrycznych pustek. Przyjęte przez Needlemana (1972) [138] dwukierunkowa okresowość występowania pustek i symetria kształtu pustek, pozwalają powyższy problem dla całego układu pustek, zredukować do problemu jednej komórki z pustką, która ma dwie osie symetrii. Autor pracy [138] dopuszcza takie deformacje, które nie deformują linii bocznych komórki oraz zachowują symetrię całego systemu. Dla każdego przyrostu obciążenia poszukiwano pola prędkości minimalizującego funkcjonal opisujący postawiony problem (kryterium jednoznaczności Hilla) dla dużych deformacji i fizycznej nieliniowości. Rozwiązania poszukiwano przy pomocy metody elementów skończonych. Wyniki pracy

Needlemana (1972) [138] oraz prac: Tracey (1971) [240], Nemat-Nasser i Taya (1977) [147], Andersson (1977) [4] wskazują na to, że:

- a) pustki przyspieszają moment osiągnięcia przez obciążenie maksymalnej granicznej wartości oraz redukują znacznie całkowite odkształcenie;
- b) analiza stanu odkształcenia i naprężenia wokół pustki pozwala wyznaczyć obszary uplastycznienia materiału wokół niej oraz stwierdzić obszary odciążania;
- c) wzajemne oddziaływanie pustek przyspiesza ich wzrost;
- d) stosowane metody opisują prawidłowo sam początek zmiany odległości między pustkami wraz z odkształceniem i nie są w stanie określić momentu łączenia się pustek.

Model komórki z pustką Rice'a i Traceya z 1969 można wykorzystać w modelu komórkowym materiału porowatego Gursona. W przypadku prostego rozciągania wzrost pustki/pustek w objętości materiału, w funkcji promienia pustki sferycznej według Rice'a Traceya ma postać:

$$\frac{dR}{R} = 0.283 \exp\left(\frac{3\Sigma_H}{2\Sigma_e}\right) dE_e^p,$$

gdzie R jest aktualnym promieniem pustki, Σ_H , Σ_e i E_e^p są odpowiednio odległym od pustki naprężeniem hydrostatycznym, naprężeniem efektywnym i efektywnym odkształceniem plastycznym w oznaczeniach Gursona (globalnych dla agregatu).

Powyższe równanie Rice'a Traceya na $\frac{dR}{R}$ można scałkować i przyjmując, że objętość pustki $V = \frac{4}{3}\pi R^3$ przedstawić je w postaci

$$\ln\left(\frac{V}{V_0}\right) = 3 \cdot 0.283 \int_{E_{e0}^p}^{E_e^p} \exp\left(\frac{3\Sigma_H}{2\Sigma_e}\right) dE_e^p,$$

gdzie V jest objętością pustki przy odkształceniu E_e^p a V_0 jest początkową objętością pustki dla E_{e0}^p .

Dla komórki z pustką parametr porowatości jest określony z definicji jako $\xi = \frac{V_{pustki}}{V_{komórki}}$ a jego przyrost ($\dot{\xi} = \frac{\dot{V}_{pustki}}{V_{komórki}}(1 - \xi)$) jest określony w przybliżeniu jako

$$d\xi \approx \frac{dV_{pustki}}{V_{komórki}} = 3\xi \frac{dR}{R}.$$

Podstawiając $\frac{dR}{R}$ otrzymane z modelu Rice'a i Traceya do powyższego otrzymujemy

$$d\xi = 0.849 \xi \exp\left(\frac{3\Sigma_H}{2\Sigma_e}\right) dE_e^p.$$

Opracowano różne modyfikacje modelu Rice'a i Traceya wzrostu pustek, dla różnych przedziałów ciśnienia hydrostatycznego, które określają różne związki na $\frac{dR}{R}$. Model Rice'a i Traceya zmodyfikowany przez np. Huanga (1991) [97] pozwala określić przyrost objętości pustki według zależności

$$d\xi = 1.281 \xi \left(\frac{\Sigma_H}{\Sigma_e}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(\frac{3\Sigma_H}{2\Sigma_e}\right) dE_e^p \quad \text{dla } \frac{\Sigma_H}{\Sigma_e} \leq 1;$$

$$d\xi = 1.281 \xi \exp\left(\frac{3\Sigma_H}{2\Sigma_e}\right) dE_e^p \quad \text{dla } \frac{\Sigma_H}{\Sigma_e} > 1.$$

Porównując opis stabilnego wzrostu pustek zaproponowany przez Rice'a i Traceya z innymi modelami np. modelem Gursona lub zmodyfikowanym modelem Gursona-Tvergaarda-Needlemana można stwierdzić pewną zgodność rezultatów. Model Rice'a i Traceya jednak nie jest tak dokładny jak modele oparte na modelu Gursona. Prawdopodobnie jest to wynik pomijania efektu skończonej objętości komórki w modelu Rice'a i Traceya. Efekt ten ma znaczenie gdy wielkość pustek jest wystarczająco duża w porównaniu z komórką. Przypadki takie odbiegają od sytuacji założonej w modelu, że pustki rosną w o wiele większym ciele niż pustka.

2.7 Modele łączenia się pustek

Końcowym etapem wzrostu sąsiadujących ze sobą pustek jest ich łączenie. Brak jest do tej pory pełnego wyjaśnienia tego zjawiska. Jako kryterium łączenia sąsiadujących pustek przyjmuje się kryterium krytycznej odległości do której zbliżają się wzrastające pustki (patrz np. prace: Ashby i inni (1979) [11] oraz Brown i Embury (1973) [33]). Wtedy odkształcenie rzeczywiste potrzebne do wytworzenia łączenia się pustek w przybliżeniu wynosi:

$$\varepsilon_c \simeq \frac{1}{C^*} \ln \left(\alpha \left(\frac{1}{\sqrt{\xi_0}} \right) - 1 \right),$$

gdzie C^* jest liczbą określającą o ile prędkość wydłużania się pustki osadzonej w osnowie jest większa od prędkości wydłużania próbki, $C^* \in \langle 1, 2 \rangle$, α jest liczbą bliską jedności a ξ_0^c stanowi względną objętość cząstek drugiej fazy (wtrąceń). Kryterium to wyprowadzono z analizy zachowania się sąsiadujących pustek w polu deformacji jednorodnych bez uwzględnienia wpływu niestabilności makroskopowych w formie szyjki lub pasma ścinania, które znacząco wpływają na tworzenie się pustek i ich wzrost, a zlokalizowane pasmo ścinania może samo powodować łączenie się nawet małych pustek. Tak więc, zjawisko łączenia pustek wskazuje na silne sprzężenie efektów makro oraz efektów skali mikro. Wzór powyższy dla ε_c stanowi jednak dobre przybliżenie rezultatów dla stopów ciągliwych, co stwierdzono w pracy Brown i Embury (1973) [33], dla których w obszarze szyjki tworzą się liczne i duże pustki. W pracach Brown i Embury (1973) [33], Goods i Brown (1979) [82] oraz Andersson (1977) [4] stwierdzono, że łączenie pustek w materiałach ciągliwych następuje gdy względna miara objętościowa pustek ξ osiąga wartość $\xi = \xi_{\text{łącz}}$ z przedziału (0.15 - 0.25). Te wartości graniczne dla ξ uwzględniono przy modyfikacji modelu Gursona dla materiału z pustkami w pracach np.: Tvergaarda (1982) [241, 242] i Tvergaarda z Needlemanem (1984) [243]. W tych pracach Tvergaard i Needleman wprowadzają do modelu funkcję porowatości $\xi^* = f(\xi)$ (w pracach Tvergaard (1982) [242], Tvergaarda z Needlemanem (1984) [243] oznaczoną jako f^*):

$$\xi^*(\xi) = \xi \quad \text{gdy} \quad \xi \leq \xi_c \quad \text{i} \quad \xi^*(\xi) = \xi_c + \frac{\xi_u^* - \xi}{\xi_F - \xi_c} \quad \text{gdy} \quad \xi > \xi_c,$$

gdzie ξ_c jest krytyczną wartością parametru dla której następuje łączenie pustek co powoduje nagłe zmniejszenie zdolności przenoszenia naprężeń przez osnowę natomiast przez ξ_F oznaczono wartość ξ przy całkowitej utracie i braku zdolności przenoszenia naprężenia przez materiał osnowy. Całkowita utrata zdolności przenoszenia naprężenia przez ciało osiągnana jest gdy

$$\xi^* = \xi_u^* = \frac{2}{3}.$$

W pracach Tvergaarda i Needlemana (1984) [243], Needleman i Tvergaard (1984) [145] wzrost porowatości w wyniku łączenia się pustek modelowany jest nie jako wydzielona część w ewolucji porowatości lecz przez funkcję liniową nadwyżki ponad porowatość ξ_c (opis łączenia pustek rozpoczyna się, gdy $\xi = \xi_c$). Jest to wartość progowa dla ξ , w której następuje znaczny wzrost prędkości przyrostu porowatości a przez to, w punkcie tym następuje załamanie krzywej: $\xi - \bar{\varepsilon}^p$, porowatość-ekwiwalentne odkształcenie plastyczne, co nie

jest uzasadnione teoretycznie ani eksperymentalnie. Zmiana wartości porowatości spowodowana łączeniem się pustek powinna wynikać w sposób gładki z prawa ewolucji pustek.

Zlokalizowanie się płynięcia plastycznego do obszaru między pustkami oznacza początek łączenia się pustek, gdzie efekty lokalnych oddziaływań decydują o reakcji globalnej. W celu opisu tych efektów, w wielu pracach, wybrano wielkość krytycznej porowatości, która ma zapewniać zgodność przewidywań modelu ciągłego z przewidywaniami modeli komórkowych. Analiza tych prac pozwala stwierdzić, że wielkość ξ_c zależy od porowatości początkowej ξ_0 , historii naprężenia, własności umacniania się materiału osnowy i rozkładu pustek w materiale. Obliczenia przeprowadzone w pracach: Becker i inni (1988) [18], Koplík i Needleman (1988) [107], pokazały, że krytyczna ξ_c jest funkcją porowatości początkowej ξ_0 , nie zależy jednak w sposób istotny od trójosiowości stanu naprężenia lub własności mechanicznych osnowy. Należy jednak podkreślić, że rezultaty Koplíka i Needlemana (1988) [107] wskazały na fakt, że wartość ξ_c silnie zależy od rozkładu przestrzennego pustek, który jest określany w tej pracy przez współczynnik kształtu komórki. Podobne rezultaty otrzymano w pracy Becker i inni (1988) [18], gdzie stosowano komórki sześciennie, które należy traktować jako reprezentujące jednolity (równomierny) rozkład.

2.8 Efekt kształtu cząsteczek drugiej fazy i wzajemnego ich oddziaływania na powstawanie pustek

2.8.1 Wpływ kształtu cząstek drugiej fazy

Pękające cząsteczki drugiej fazy (wtrącenia) są dominującą formą tworzenia pustek w stali o dużej zawartości węgla 1.05%*C*. W stalach o zawartości węgla 0.17%*C* (stal B w eksperymencie Fishera (1980) [68] i Fishera i Gurlanda (1981) [69]) częściej jednak zachodzi zjawisko dekohezji. Popękane cząsteczki charakteryzują się tym, że są to cząsteczki długie o nieregularnej geometrii. Płaszczyzna przelomu jest zwykle prostopadła do przyłożonego kierunku rozciągania. Dla cząstek niesferycznych, model nukleacji oparty na jednolitym krytycznym naprężeniu relaksacyjnym na granicy faz, nie zawsze jest właściwy. Odzwierciedla to skrajny przypadek długich cząstek. Dla takich cząstek w modelach przyjmuje się jawnie, że całkowita relaksacja naprężenia następuje na końcach cząstek, gdy nie ma relaksacji naprężenia wzdłuż cząstki, który rośnie liniowo z odległością od końców. W rzeczywistości pewna relaksacja musi zachodzić wzdłuż granicy faz, lecz nie musi ona być jednolicie równomierna na długości. Podobnie jest dla cząstek elipsoidalnych, relaksacja nie musi być

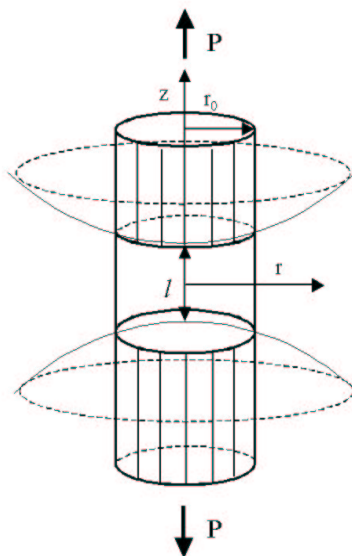
równomierna a pola sprężyste w cząsteczce i wokół takich cząstek, mogą być określane na bazie rozwiązań Eshelby'ego dla którego zakłada się jednolitą transformację stanu odkształcenia od końców cząsteczki do jej środka (pola sprężyste wewnątrz cząsteczki nie będą dalej jednolite) a naprężenia będą zależały od szczegółów relaksacji na połączeniu cząsteczka-osnowa. Przybliżone kryterium pęknięcia cząstek, bazujące na modelu stabilności energetycznej, zaproponowane dla dekohezji połączenia międzyfazowego zakłada, że całkowite maksymalne naprężenie osiowe na przekroju poprzecznym cząsteczki wynika z następujących naprężeń: przyłożonego naprężenia σ_{zz}^A na brzegach i wewnętrznego naprężenia σ_{zz}^S , które powstają jako rezultat naprężeń resztkowych i przekazywania obciążeń. Jeżeli przyjmiemy, że płaszczyzna pęknięcia w cząsteczce jest kolistą o promieniu a_0 , wtedy energia wyzwolona przez pęknięcie może być określona z postaci współczynnika intensywności K_I dla pustki (szczeliny) typu dyskowego 'ang. *penny shaped*'. Zjawisko pęknięcia cząstek w porównaniu z dekohezją jest bardzo czułe na wielkość energii potrzebnej do utworzenia nowej powierzchni wewnątrz układu. Dla małych wartości energii połączenia cząsteczka-osnowa, preferowana jest dekohezja, podczas gdy dla dużych wartości przewidywane jest pęknięcie cząstek. Dla wydłużonych i regularnych cząstek, możliwość wystąpienia dużych naprężeń wewnętrznych wynikających z przeniesienia obciążeń towarzyszących niejednorodnej relaksacji może podwyższyć σ_{zz}^S do wartości, które sprzyjają pęknięciu cząstek. Pęknięcie wzdłuż sąsiednich blisko i podobnie zorientowanych granic faz pomiędzy cząsteczkami, może również być uprzywilejowane dzięki temu, że tym płaszczyznom odpowiadają mniejsze wartości powierzchniowej energii swobodnej cząstek, osnowy i połączenia.

2.8.2 Oddziaływanie wzajemne cząstek

Obserwacje opisane w pracy Cialone i Asaro (1979) [44] oraz w innych pracach wskazują na fakt, że wiele pustek jest związanych z więcej niż z jedną cząsteczką drugiej fazy. Należy brać pod uwagę fakt, że pewne pustki tworzą się, wzrastając gwałtownie, co jest wynikiem oddziaływań wzajemnych sąsiadujących cząstek. Argon, Im i Safoglu w pracy (1975) [7] badają wzrost intensywności naprężenia na granicy międzyfazowej cząstka-osnowa spowodowanej nakładaniem się obszarów plastycznych blisko położonych cząstek. Podobne rozważania można zastosować do modeli nukleacji pustek w otoczeniu blisko sąsiadujących cząstek. Jednak mechanizm relaksacji i samo pole deformacji musi uwzględniać fakt, że odstęp między cząsteczkami będzie się zmieniał w zgodzie z przyłożonymi odległymi odkształceniami na brzegach ciała. Można wykazać, że dla cząstek blisko położonych wzdłuż osi rozciągania próbki, odstęp między czą-

steczkami będą wzrastać z większą prędkością niż powiększanie się obszarów plastycznych sąsiadujących cząstek. Naprężenie płynięcia w obszarze osnowy pomiędzy sąsiadującymi cząsteczkami można określić na dwa sposoby.

Tak jak w książce Hilla (1950) [92] (na stronie 277 przyjmując rozciąganie zamiast ściskania) dla rozciągania cylindra o promieniu r_0 i wysokości l (materiał osnowy między kulistymi cząsteczkami) poprzez dwa sztywne cylindry (reprezentujące cząsteczki) o założonym połączeniu tych cylindrów z osnową (cylinder środkowy) poprzez tarcie z współczynnikiem tarcia μ , przedstawionych na rys.2.5.



Rys. 2.5. Materiał osnowy (cylinder środkowy) poddany rozciąganiu przez dwie kuliste cząsteczki (zastąpione sztywnymi cylindrami o promieniu r_0) o założonym połączeniu cząsteczek z osnową poprzez tarcie; r —odległość od osi rozciągania, l wysokość obszaru połączenia.

Rozwiązanie dla naprężeń normalnych σ_l ma postać:

$$\sigma_l = \sigma_y^0 \exp\left(\frac{2\mu(r_0 - r)}{l}\right),$$

gdzie σ_y^0 reprezentuje naprężenie płynięcia materiału osnowy dla danego odkształcenia a l , r i r_0 są odpowiednio: wysokością obszaru oddziaływania, aktualnym promieniem w obszarze i maksymalną wartością promienia. W przypadku idealnego połączenia cząstek z osnową przyjmuje się $\mu = 0.5$.

Ogólniejsze rozwiązanie podał Fisher i Gurland (1981) [70] modyfikując model dwóch sąsiadujących sferycznych cząstek. Równowaga sił w układzie o współrzędnych $(z - r)$ dla przypadku idealnego połączenia cząstek z osnową, i dla warunku uplastycznienia Hubera-Misesa, $\sigma_y^0 = \text{const}$ (idealna plastyczność) daje rozwiązanie dla naprężenia płynięcia w obszarze między oddziaływującymi cząsteczkami

$$\ln \sigma_{zz} = -\frac{1}{2} \int \frac{\cos \Theta}{\left(\frac{l}{2r_0} + 1\right) - \cos \Theta} d\Theta.$$

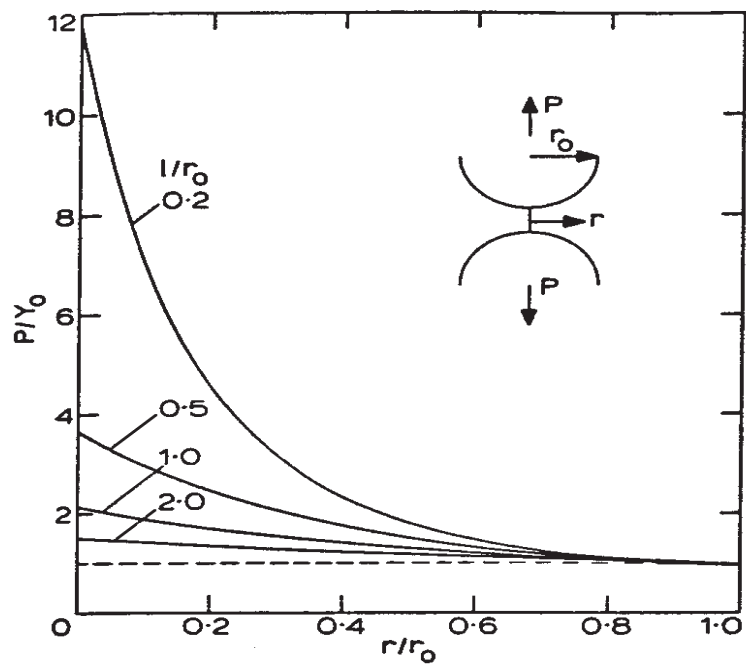
Warunek, że $\sigma_l = \sigma_y^0$ dla $\Theta = 90^\circ$ pozwala ostatecznie ustalić naprężenie płynięcia między cząsteczkami, co przedstawiono na rys.2.6 pochodzącym z pracy Fisher i Gurland (1981) [70] (w pracy [70] Rys.15 str. 201).

Rezultaty Fishera i Gurlanda (1981) [70] pokazują, że płynięcie plastyczne w obszarze blisko sąsiadujących cząstek może być silnie ograniczone do tego obszaru. Samo oddziaływanie cząstek może być oszacowane przybliżonymi rozwiązaniami dla pojedynczego wydłużonego obszaru sprężystego (cząsteczka) w otoczeniu plastycznie deformującej się osnowy. Mechanizm przekazywania obciążeń powoduje duże naprężenia w obszarze połączenia i na granicy osnowa-cząstka. Trójosiowy stan naprężenia przy takich ograniczeniach sąsiadujących cząstek, może być wystarczająco duży by spełnić kryterium energetyczne dla stabilnego utworzenia pustki na połączeniu cząsteczka-osnowa przy deformacjach znacznie poniżej tych dla których nukleacja pustek w wyizolowanej cząsteczce będzie zachodzić.

2.9 Deformacja przy osiowo-symetrycznym rozciąganiu

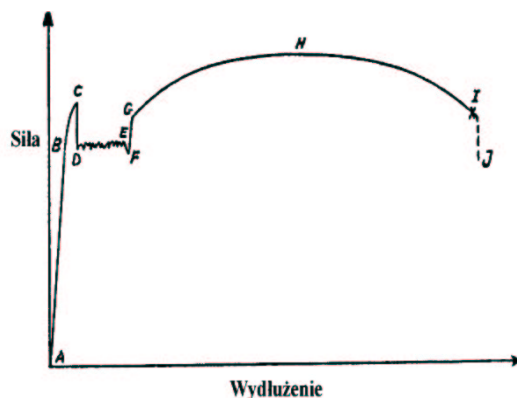
2.9.1 Deformacja w stalach z mikrouszkodzeniami

Porównania danych eksperymentalnych związanych z powstawaniem i wzrostem pustek z danym modelem wymaga określenia lokalnego stanu deformacji



Rys. 2.6. Zależność naprężenia płynięcia od zmiennej r -odległości od osi połączenia cząstek dla różnych unormowanych wartości wysokości obszaru połączenia, l/r_0 . Rysunek z pracy Fishera i Gurlanda (1981) [70].

w badanym obszarze w funkcji wielkości, które są stosowane w modelach. W rzeczywistych pomiarach nie jest możliwe określenie warunków, które istnieją w każdym punkcie materialnym, z powodu lokalnych zmian w mikrostrukturze. Jednakże, można określić statystycznie uzasadnione wielkości uśrednione jak dla kontinuum, o ile rozwiązanie dla deformacji wolno zmienia wartości na odległościach charakterystycznych dla danej mikrostruktury. Warunki istniejące w obszarze szyjki rozciąganych próbek, są dogodne do pomiarów i ustalenia wpływu efektów deformacji na powstawanie pustek. W obszarze szyjki panuje szeroki zakres zmian stanu deformacji, ale zmiany te są małe i zachodzą one na odległościach które są duże w porównaniu z istotnymi odległościami mikrostruktury. Opis deformacji w rozciąganej stalowej próbce cylindrycznej od początkowego stanu sprężystego do końcowego zerwania próbki dla stali sferoidalnej typu B podał Fisher (1980) [68].



Rys. 2.7. Typowy wykres zależności siła-wydłużenie dla stali w eksperymencie Fishera (1980) [68].

Na krzywej siła-wydłużenie z pracy Fishera (1980) [68], rys. 2.7, widać, że próbka deformuje się sprężysto z punktu A do B. Początkowo deformacje plastyczne zachodzą w sposób jednorodny w całej próbce. W punkcie C, górnej granicy uplastycznienia pojawiają się mikroplastyczne niejednorodności (front Lüdersa). Po tych quasi-jednorodnych deformacjach, cała próbka podlega deformacji z przyłożoną prędkością odkształcenia, która powoduje wzrost naprężenia (od F do G). Dalej zachodzi proces quasi-jednorodnych deformacji plastycznych a materiał osnowy umacnia się. W punkcie H pojawia się inna forma lokalizacji w wyniku niestabilności geometrycznych, której rezultatem jest tworzenie się szyjki. Postępujący proces odkształcenia (za punktem H) przebiega już w sposób niejednorodny i to zarówno wzdłuż osi próbki po dłu-

gości jak i na dowolnym przekroju prostopadłym do osi. Rozwijająca się deformacja generuje zlokalizowane odkształcenia w obszarze szyjki i towarzyszący temu spadek siły z deformacją (od H do I) spowodowany, stałym zmniejszaniem się pola przekroju próbki w obszarze szyjki. W wielu materiałach w tym ostatnim etapie deformacji powstają i rozwijają się mikropustki. Na pewnym poziomie deformacji (punkt I), warunki są takie, że pustki łączą się będąc źródłem powstania promieniowego makropęknięcia (szczeliny), powiększanie której doprowadza do końcowego zniszczenia próbki. W zwykłych próbach, energia sprężysta uwolniona przez próbkę i maszynę wytrzymałościową na utworzenie szczeliny powoduje jej niestabilny wzrost i zwykle zachodzi szybkie zniszczenie próbki. Bluhm i Morrissey (1966) [22] zaproponowali urządzenie do badania próbek przy spadku siły (od I do J) co odpowiada szybkiej redukcji pola przekroju przenoszącego obciążenia, gdy następuje wzrost szczeliny. W badaniach Fisher wykorzystał podobną maszynę.

2.9.2 Naprężenie i odkształcenie w obszarze 'szyjki' dla próby rozciągania osiowego

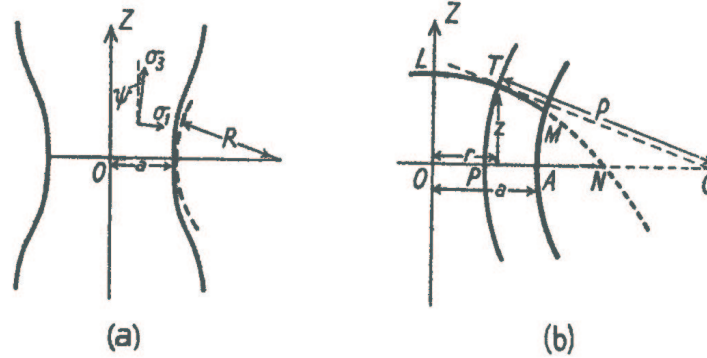
Szyjka reprezentuje krytyczny etap deformacji próbek rozciąganych, ponieważ w tym etapie generuje się trójosiowy stan naprężenia, który powiększa się z rozwojem szyjki. Bridgman dokonał analizy naprężeń w przekroju minimalnym próbki cylindrycznej z szyjką. Rozwiązując równania równowagi naprężeń i przyjmując, że odkształcenia są jednorodne na przekroju (naprężenie uplastycznienia pozostaje stałe), można określić składowe naprężenia, σ_{zz} , σ_{xx} i σ_{yy} w funkcji naprężenia płynięcia σ_y , minimalnego promienia szyjki a oraz promienia obrysu szyjki ρ_R , rys. 2.8.

W eksperymencie Fishera potwierdzono etap jednorodnego odkształcenia, aż do redukcji pola przekroju 92%. Rezultaty rozwiązania analitycznego Bridgmana można przedstawić w postaci:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_y \ln \left(\frac{a^2 + 2a\rho_R - r^2}{2a\rho_R} \right),$$

$$\sigma_{zz} = \sigma_y \left(1 + \ln \left(\frac{a^2 + 2a\rho_R - r^2}{2a\rho_R} \right) \right),$$

gdzie r jest położeniem punktów wzdłuż promienia. Taki stan naprężenia otrzymano przez superpozycję jednolitego pola naprężenia uplastycznienia i pola trójosiowego, które maleje w przekroju z oddalaniem się od środka (osi próbki)



Rys. 2.8. Obrys szyjki, a) i konstrukcja do określenia rozwiązania w analizie Bridgmana, b) przedstawiona np. w pracy Hilla (1950) [92].

do powierzchni próbki. W pracy Argon i inni (1975) [6] rozszerzono tę analizę dla określenia naprężeń i odkształceń wzdłuż osi próbki rozciąganej (dla $r=0$) w funkcji odległości z , od przekroju minimalnego szyjki. Składowe naprężenia wzdłuż osi są wyrażone następująco:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_y \left[\ln \left(\frac{1}{2} \frac{a}{\rho R} + 1 \right) - 2 \ln \left(\frac{z^2}{a(a + 2\rho R)} + 1 \right) \right],$$

$$\sigma_{zz} = \sigma_y \left[1 + \ln \left(\frac{1}{2} \frac{a}{\rho R} + 1 \right) - 2 \ln \left(\frac{z^2}{a(a + 2\rho R)} + 1 \right) \right].$$

Ponieważ ekwiwalentne odkształcenie plastyczne $\bar{\epsilon}_p$ dla danego przekroju jest funkcją zmiennej z należy uwzględnić zmianę naprężenia uplastycznienia $\sigma_y = \sigma_y(\bar{\epsilon}_p)$. A co więcej, ze zmianą z naprężenia σ_{zz} mogą być rozciągające, ściskające i ponownie rozciągające. Dla bardzo dużych z w porównaniu z promieniem szyjki a , w obszarze deformacji jednorodnych poza szyjką, σ_{zz} musi osiągać wartość $\sigma_y(\bar{\epsilon}_p)$. Wzory na stan naprężenia z pracy Argona i inni (1975) [6] nie spełniają tych warunków brzegowych. Inne uogólnienia dokonano w pracach Eisenberg i Yen (1983) [64] oraz Eisenberg (1985) [65]. W pracach tych przeprowadzono analizę w podobny sposób jak Bridgman (dla materiału izotropowego z szyjką zachowującą osiową symetrię) ale dla materiału anizotropowego, dla których początkowo kołowe próbki cylindryczne miały po deformacji przekroje

eliptyczne. Analizę Bridgmana zastosowano również do ustalenia stanu naprężenia osiowo-symetrycznych próbek osłabionych karbem, którą przedstawiono np. w pracy Valiente (2001) [244].

Dokonano licznych analiz numerycznych dla określenia stanu naprężenia i odkształcenia w próbkach rozciąganych osiowo. Należy wymienić prace: Needleman (1972) [139], Chen (1971) [41], Saje (1979) [213] czy Norris i inni (1978) [152]. W pierwszych trzech pracach zastosowano metodę elementów skończonych do obliczenia kształtu obrysu szyjki i stanu naprężenia i odkształcenia na bazie teorii płynięcia plastycznego J_2 , dla różnych funkcji wzmocnienia materiału. Norris i inni [152] wykorzystali ekperymentalną krzywą naprężenia płynięcia z próby osiowego rozciągania i ustalili empiryczne prawo z sześcioma współczynnikami dla stali A533, natomiast rozwiązanie dla stanu naprężenia otrzymano z zastosowaniem metody różnic skończonych. Wszystkie analizy numeryczne dają porównywalne rezultaty i określają większe naprężenia trójosiowe niż rozwiązania analityczne. Analiza w pracy Norris i inni (1978) [152], określa również niejednorodne odkształcenia na płaszczyźnie przekroju szyjki, co jest odmienne od założeń modeli analitycznych. Rozwiązania numeryczne uwzględniają istnienie obszaru naprężeń ściskających w osi próbki, z dala od szyjki, wskazując na fakt, że powierzchnia próbki musi przenosić obciążenia rozciągające dla tych przekrojów poprzecznych. Osiowe naprężenia ponownie osiągają naprężenie uplastycznienia w dużej odległości od szyjki. Na ocenę rezultatów numerycznych ma wpływ wiele dodatkowych efektów. W pracy Brünig (1998) [35] analizuje się wpływ warunków początkowych i warunków brzegowych na rezultaty obliczeń numerycznych z wystąpieniem szyjki przy rozciąganiu. Bardzo istotny wpływ na wynik końcowy, pomijając sam algorytm rozwiązania, okazuje się mieć to czy zakłada się imperfekcję geometryczną wywołującą szyjkę czy nie. Przyjęcie imperfekcji geometrycznej może prowadzić tylko do pewnych oszacowań (dolnych lub górnych) procesu deformacji i zachowania w obszarze szyjki. Dlatego należy podkreślić, że rozwiązanie analityczne Bridgmana przedstawione w książce Hilla (1950) [92] (pierwsze prace Bridgmana na ten temat są z 1943 [26] i 1945 [27] a później w książce Bridgmana [29] z 1964) jest bardzo proste i dobrze zweryfikowane eksperymentalnie dla różnych materiałów, a w szczególności dla stali. Rozwiązanie analityczne Bridgmana wykorzystano w rozdziale 8.

2.9.3 Próby dynamicznego rozciągania próbek cylindrycznych

W literaturze jest wiele prac eksperymentalnych, teoretycznych i numerycznych poświęconych próbom rozciągania dynamicznego. W próbach tych obserwowano pojawianie się szyjek, tak jak w próbie quasistatycznej, ale ich umiejscowienie oraz liczba była zależna od prędkości początkowej rozciągania oraz od materiału. W pracy Nemes i Eftis [148] z 1993 r. rozważono zagadnienie deformacji sprężysto-lepko-plastycznych w smukłym pręcie rozciągany dynamicznie. Analizę numeryczną metodą elementów skończonych przeprowadzono dla próbek z miedzi typu OFHC z nieliniowym wzmocnieniem izotropowym.

Proces wewnętrznego mikrouszkodzenia obejmujący powstawanie i wzrost mikropustek lub mikroszczelin przy dynamicznych obciążeniach, o bardzo krótkich czasach trwania, zależą od mechanizmów termicznej aktywacji. Ewolucję mikroszczelin opisuje się równaniem z progowymi wartościami w naprężeniach a powstawanie mikropustek zależy od: porowatości ξ , temperatury i ekwiwalentnego odkształcenia plastycznego. Równania opisujące ten proces zostaną omówione w podrozdziale 2.12.

Pełen opis modelu konstytutywnego i dobór parametrów materiałowych zaprezentowano w pracy Nemes i inni (1990) [149]. Próbki rozciągano z jednego końca z różną prędkością początkową w zakresie $v = 10 - 100$ m/s. W pracach Nemes i inni (1990) [149] i Nemes i Eftis (1993) [148] wykazano, że przyczyną powstawania szyjki/szyjek (lokalizacji deformacji niesprężystych) w różnych miejscach przekroju podłużnego próbki jest proces falowy wzbudzany dynamicznym obciążeniem zewnętrznym. Nakładanie się frontów fal wzbudzonych i odbitych od końców próbki, powodują bardzo złożony niejednorodny stan naprężenia i odkształcenia. Tę samą analizę dla miedzi przeprowadził dla podobnego opisu konstytutywnego metodą różnicową Dornowski (1999) [53], wskazując na różnice w otrzytywanej liczbie szyjek choć rezultaty obydwu prac były zbieżne. Równie ciekawe z tej dziedziny są prace: Nilsson (2004) [150], Nilsson (2001) [151] oraz Shenoy i Freund (1999) [218], omawiające między innymi efekt inercyjny przy dynamicznych obciążeniach.

2.10 Badania eksperymentalne Fishera dla stali węglowej z mikrouszkodzeniami

2.10.1 Cechy materiału użytego do badań

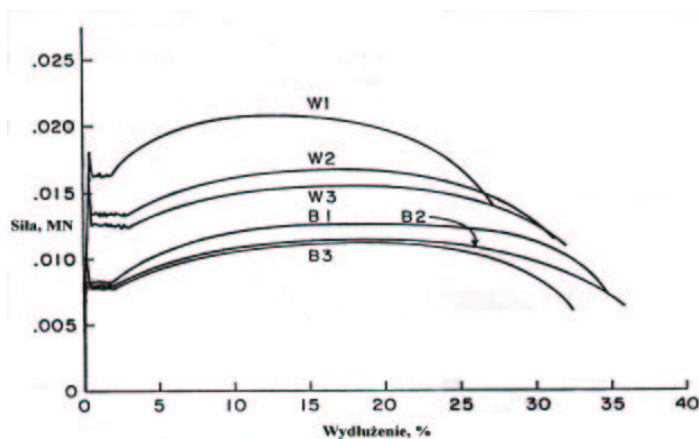
Do badań eksperymentalnych Fisher i Gurland (1981) [69] przyjęli trzy typy stali węglowej: stal węglową o 0.17%*C* wag. (typ B_1 , B_2 i B_3), stal węglową o 0.44 %*C* wag. (typ W_1 , W_2 i W_3) oraz stal węglową o 1.05%*C* wag. (typ H).

W analizach przeprowadzonych w tej rozprawie wykorzystano dane dla stali węglowej o 0.17 %C wag. (typ B_1). Dane o składzie chemicznym oraz średni wymiar cząstek cementytu oraz wymiar ziarna (ferryt) dla stali typu B_1 jest przedstawiony w tabeli 1.

Tabela 1. Skład stali węglowej typu B_1 w pracy Fisher i Gurland (1981) [69].

Stal	Skład, % wag.					średni wymiar cząstek cementytu, μm	średni wymiar ziarna (ferrytu), μm
	C	Mn	Si	P	S		
B_1	0.17	0.52	0.006	0.007	0.024	0.42	4.0

Stal dostarczona przez producenta została poddana obróbce termicznej, tak aby uzyskać jednolity rozkład sferoidalnych węglików żelaza (cementytu, Fe_3C) w osnowie żelaza α (ferryt). Materiał trzymano w temperaturze o 50 $^{\circ}C$ powyżej temperatury A_3 przez 1.5 godziny. Następnie materiał był gwałtownie hartowany w wodzie z lodem w celu uzyskania drobnych pasm bainitu lub struktury martenzytycznej. Zahartowane pręty były następnie odpuszczane w temperaturze 700 $^{\circ}C$ w kilku partiach: odpowiednio przez 1 godzinę, lub przez 24 godziny oraz przez 120 godzin w celu uzyskania różnych rozkładów wielkości cząstek cementytu. Z prętów po obróbce termicznej przygotowywano standardowe próbki na rozciąganie o bazie pomiarowej 0.0254 m długość i średnicy 0.0064 m. Wszystkie badania na rozciąganie były przeprowadzane w temperaturze pokojowej a typowe wykresy zależności siła–wydłużenie przedstawiono na rysunku 2.9. Badania przeprowadzano w kilku seriach. Pierwsza seria badań dotyczyła ustalenia krzywych siła – przemieszczenie, które uzyskano na maszynie Instron, gdy prędkość deformacji odpowiadała prędkości trawersy 2.12×10^{-5} m/s. Drugą serię badań przeprowadzono aż do zerwania próbek i w tej serii określano redukcję pola przekroju w przekroju minimalnym. Badania powtarzano do określonej redukcji pola przekroju przed zerwaniem próbek. Dla próbek ze stali typu B najmniejszy uzyskany przekrój miał średnicę 0.0033 m, co odpowiadało redukcji pola przekroju 73%. Przeprowadzono również serię badań w celu prześledzenia, w sposób kontrolowany, wzrostu wewnętrznego makroskopowego zniszczenia (szczeliny promieniowej) w rozciąganych próbkach osiowosymetrycznych. Do tego celu wykorzystano specjalnie zaprojektowaną „sztywną maszynę”, podobnie jak w badaniach Blühma i Morrissey (1966) [22].

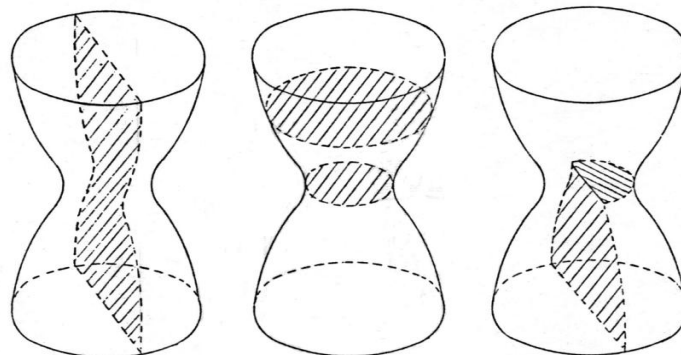


Rys. 2.9. Wykresy siła-wydłużenie w % dla stali węglowych w eksperymencie Fishera i Gurlanda (1981) [69].

2.10.2 Obserwacje metalograficzne

Próbki badano przed i po próbach rozciągania z wykorzystaniem mikroskopów optycznych i elektronowych. Próbki niezdeformowane badano tylko w przekrojach poprzecznych, natomiast próbki zdeformowane w przekrojach poprzecznych i podłużnych tak jak to pokazano na rys. 2.10.

Przekroje podłużne wykonano wzdłuż osi głównej próbki uwzględniając zmianę wymiarów próbki w czasie operacji szlifowania i polerowania powierzchni przekroju. Przekroje poprzeczne były przygotowane z wykorzystaniem specjalnego uchwytu, aby kontrolować pozycję poszczególnych powierzchni poprzecznych i utrzymać próbki w odpowiedniej orientacji względem osi próbki, podczas polerowania. Z każdej próbki wycinano serię poprzecznych przekrojów odpowiadających małym przyrostom odległości wzdłuż osi poczynając od przekroju minimalnego. Każda powierzchnia przekroju była polerowana, wytrawiana i czyszczona chemicznie i ultradźwiękowo. Proces ten powtarzano zawsze czterokrotnie. Parametry mikrostruktury określano dla próbek zdeformowanych i niezdeformowanych. Dla próbek zdeformowanych na przekrojach poprzecznych określano gęstość powierzchniową pustek η_A oraz określano ułamek objętości pustek ξ , stosując standardowe techniki metalograficzne (patrz np. Russ (1991) [211], Russ i Dehoff (2000) [212]) z użyciem mikroskopu elektronowego



Rys. 2.10. Przekroje próbek w badaniach eksperymentalnych Fisher i Gurland (1981) [69].

i powiększeniem obrazu 2000 razy. Dla każdego przekroju poprzecznego wielkości η_A i ξ były określone w trzech miejscach (wzdłuż promienia dla $r=0, 0.5, 1.0$).

2.10.3 Ogólne cechy mikrostruktury badanej stali przed i po deformacji

Próbki przed deformacją.

Obróbka termiczna była przyczyną jednolitego rozkładu cząstek cementytu w osnowie ferrytowej. Cząsteczki cementytu były otoczone granicami ziaren. Większym wymiarom średnim cząstek odpowiadały większe średnie wymiary przekrojów ziaren. W przybliżeniu 70 % cząstek było związane z widocznymi granicami ziaren, chociaż zmiany lokalne tej miary były duże. Cząsteczki umiejscowione poza granicami ziaren były mniejsze i bardziej sferyczne niż cała populacja, podczas gdy cząsteczki na granicach były i mniej regularne i ukierunkowane z maksymalnym wymiarem wzdłuż granicy ziarna. W przestrzeni są to sferoidy, których oś główna jest równoległa do płaszczyzny powierzchni ziarna.

Próbki po deformacji.

A. Przekroje podłużne.

W obszarze szyjki gdzie deformacje są maksymalne, mikrostruktura charakteryzuje się wydłużonymi ziarnami w kierunku rozciągania. Z powodu dużych de-

formacji plastycznych, którym towarzyszą wysokie gęstości dyslokacji w osnowie ferrytowej, wytrawianie i określenie granicy ziaren było tylko częściowo skuteczne. Obrazy mikroskopowe pokazują jednak, że granice ziaren odgrywają istotną rolę w nukleacji pustek. Ponieważ wysokiemu poziomowi deformacji towarzyszy powstawanie pustek i wydłużenie ziaren, elipsoidalne brzegi cząstek mają tendencję do wydłużania się w kierunku rozciągania i pustki, które się tworzą w powiązaniu z tymi cząsteczkami są związane z powierzchniami zewnętrznymi cząstek. Uwidacznia się wpływ rozmiaru cząstek na tworzące się pustki. Obserwowano dekohezję na powierzchni międzyfazowej (powierzchni przylegania) dla cząstek większych niż wymiar średni cząstek. Były też bardzo nieliczne przypadki pustek powiązane z cząsteczkami mniejszymi niż wymiar średni.

B. Przekroje poprzeczne.

Obrazy mikroskopowe przekrojów poprzecznych próbek po deformacji wykazują dwie istotne cechy. Pierwsza to taka, że przekroje te posiadały pustki. Druga cecha to taka, że choć średnie deformacje w kierunku promieniowym są izotropowe to deformacje poszczególnych granic ziaren nie były jednorodne (obserwowano zakrzywioną lub wirową deformację wokół pewnych granic ziaren). Zaobserwowano, że pustki mają eliptyczne przekroje poprzeczne podobnie jak cząsteczki.

C. Trzeci typ przekrojów do badań (typu poprzeczno-podłużnego, patrz rys. 2.10.2) pokazał, że generalnie pustki są sferoidalne i posiadają eliptyczne przekroje poprzeczne prostopadłe do kierunku rozciągania. Bardzo wydłużone w kierunku rozciągania kształty pustek umiejscowionych na granicach ziaren sugeruje ich wzmożony wzrost przez rozdzielanie się granic ziaren. Jednak nie dawało by to elipsoidalnych pustek które się obserwuje nie tylko na osi rozciągania ale również przy powierzchni próbek. Wynika z tego, że decydującymi czynnikami o wielkości i kształcie pustek są: mechanizm i kształt powstających pustek a następnie plastyczny ich wzrost.

2.10.4 Parametry mikrostruktury

Analizy ilościowe przeprowadzono dla przekrojów poprzecznych próbek przed i po deformacji. Dla każdej próbki ustalono następujące wielkości: $(N_A)_p$ oznaczająca liczbę przecięć cząsteczek cementytu na jednostkę powierzchni badanego przekroju; $(N_L)_p$ oznaczająca liczbę przecięć cząsteczek cementytu na jednostkę długości wybranej losowo linii na powierzchni badanego przekroju; $(N_L)_g$ oznaczająca liczbę przecięć granicy ziaren na jednostkę długości wybra-

nej losowo linii na powierzchni badanego przekroju. Przy pomocy tych wielkości ustalono następujące parametry:

- f_p ułamek udziału objętościowego cząsteczek;
- r_0 średni promień cząsteczek zakładając ich sferoidalny kształt;
- $(N_V)_p$ liczba cząsteczek na jednostkę objętości ($(N_V)_p = (N_A)_p/2r_0$);
- λ_p średnia odległość między cząsteczkami ($\lambda_p = (1 - f_p)/(N_L)_p$);
- D średnia długość przekroju ziarna ($D = \frac{1}{(N_L)_g}$).

Wymienione parametry określano dla wszystkich próbek przed deformacją. Parametry dla próbek po deformacji określano na przekroju minimalnym szyjki, a parametru D nie określano ze względu na trudności z określeniem granicy ziaren. W pomiarach zaobserwowano różnice dla wielkości r_0 i λ_p ustalonych z przekrojów przed i po deformacji. Różnice te nie są jednak znaczące. Występujące różnice wynikają z obrotów cząsteczek o wydłużonych kształtach i ich ustawianiu się wzdłuż osi rozciągania.

2.10.5 Losowy rozkład przestrzenny cząstek drugiej fazy

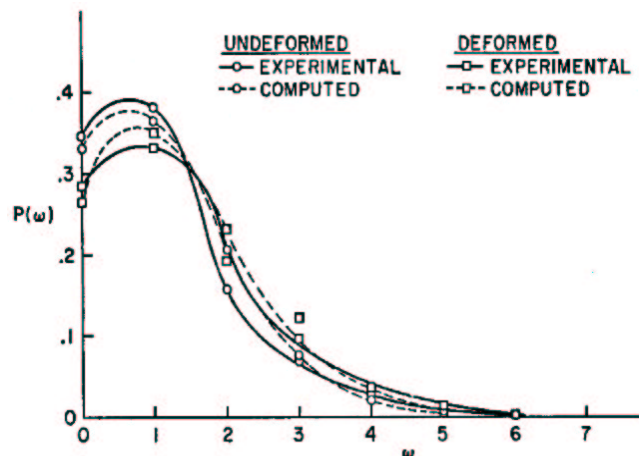
W pracy Fishera [68] ustalono również losowy przestrzenny rozkład cząsteczek w próbkach przed i po deformacji. Określono eksperymentalnie prawdopodobieństwo z jakim, każda kwadratowa komórka lub płaski przekrój będzie zawierał liczbę ω cząsteczek. Prawdopodobieństwo to ustala się z zależności

$$\text{Pr}(\omega) = \frac{\text{Liczba komórek zawierających } \omega \text{ cząsteczek}}{\text{Całkowita liczba sprawdzanych komórek}}.$$

Zastosowana przez Fishera [68] funkcja gęstości prawdopodobieństwa Poissona dla rozkładu losowego ma postać (patrz również np. Ohser i Mücklich (2000) [162])

$$P(\omega) = \frac{\mu^\omega}{\omega!} \exp(-\omega),$$

gdzie μ jest średnią wielkością liczby ω ze wszystkich zliczonych komórek. Wielkość komórki wybrano tak aby $\mu \sim 1$. Przykładowy wykres zależności $P(\omega)$ w funkcji ω dla wielkości pomierzonych i obliczonych zaczerpnięto z pracy Fishera dla stali typu B i pokazano na rysunku 2.11.



Rys. 2.11. Prawdopodobieństwo, że płaski przekrój będzie zawierał określoną liczbę ω cząsteczek (rezultaty teoretyczne i eksperymentalne Fishera i Gurlanda [69]).

Rozkład przedstawiony na rys. 2.11 jest reprezentatywny również dla innych materiałów ciągłych oraz jest właściwy, gdy analizujemy procesy z deformacją i uwzględniamy efekt powstawania pustek. Istotne jest, co podkreślał Fisher, że rozkład cząstek pozostaje mniej lub bardziej losowy nawet przy dużych odkształceniach. Oznacza to, że sam rozkład cząstek, mniej lub bardziej niejednorodny (wynikający z ich zbierania się w grupy lub pasma), nie jest odpowiedzialny za lawinowy proces powstawania pustek dla bardzo zaawansowanych deformacji. Fisher także zaobserwował, że liczba cząstek na jednostkę objętości $(N_V)_p$ jest stała, a w związku z tym, powstawanie i wzrost liczby pustek w procesie deformacji nie jest powiązany z rozkładem cząstek.

2.10.6 Losowy rozkład wielkości cząstek drugiej fazy

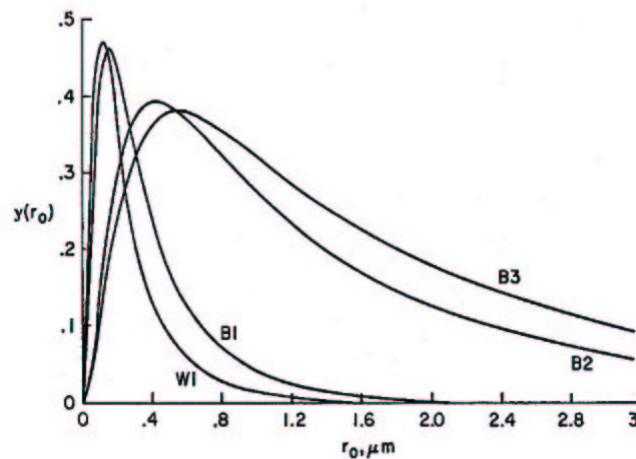
W modelowaniu powstawania pustek istotnym czynnikiem jest efekt losowego rozkładu wielkości cząstek na powstawanie pustek. Krzywe rozkładu wielkości cząstek uzyskano dla wszystkich stali w eksperymencie Fishera i Gurlanda [69]. W pracy Fishera i Gurlanda [69] przyjęto dla materiałów z wtrąceniami drugiej fazy, następującą funkcję rozkładu logarytmiczno-normalnego

$$y(d) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \ln \sigma_g} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\ln d - \ln d_g}{\ln \sigma_g} \right)^2 \right],$$

gdzie $d = 2r_0$, d_g jest związane ze średnim wymiarem cząsteczki a σ_g jest powiązane z szerokością rozkładu. Zakładając sferyczny kształt cząsteczek i przy określonej funkcji rozkładu można otrzymać zależność na logarytm średniego wymiaru cząsteczek, gdy znamy ustalone parametry $(N_A)_p$, $(N_V)_p$ i $(N_L)_p$

$$\ln d_g = 2 \ln \frac{(N_A)_p}{(N_V)_p} - \frac{1}{2} \ln \frac{2(N_L)_p}{\pi(N_V)_p}.$$

Rezultaty Fishera i Gurlanda [69] dla stali typu B i W_1 są przedstawione na rysunku 2.12.



Rys. 2.12. Rozkład wielkości promienia cząstek r_0 dla stali B i W_1 w badaniach eksperymentalnych Fishera i Gurlanda [69].

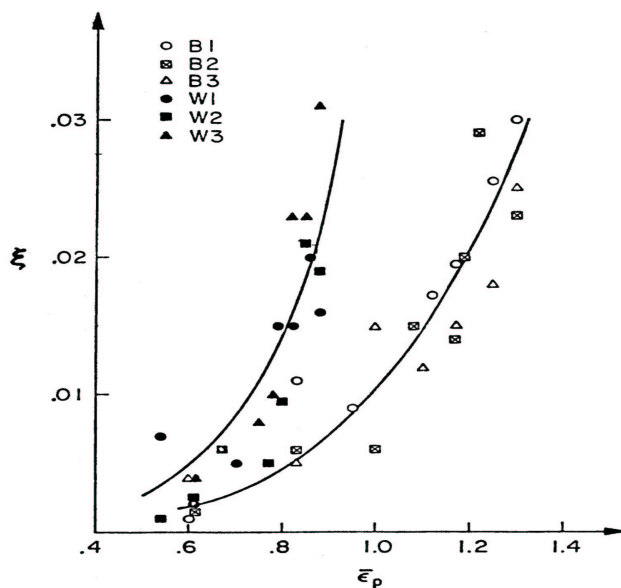
2.10.7 Związek geometrii szyjki z lokalnym stanem deformacji

Dla powiązania danych eksperymentalnych dotyczących powstawania i wzrostu mikropustek z danym modelem analitycznym, konieczne jest szczegółowe określenie lokalnego stanu deformacji, w badanym obszarze. W literaturze znane są rozwiązania analityczne i numeryczne stanu naprężenia i odkształcenia w obszarze szyjki. Z rozwiązań tych można określić stan naprężenia i odkształcenia w wybranych punktach próbki zdeformowanej dla warunków odpowiadających wartościom zmierzonym wzdłuż promienia przekroju minimalnego szyjki i promienia konturu szyjki. Wartości numeryczne i analityczne dla naprężeń można określić dla dowolnych punktów wzdłuż osi próbki. Co do dokładności tych

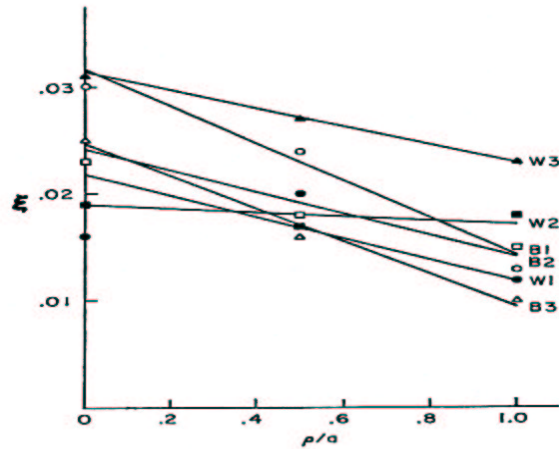
obliczeń można stwierdzić, że rozwiązania numeryczne dają lepsze rozwiązania dla dużych wartości zmiennej z , narastającej od środka szyjki wzdłuż osi próbki, podczas gdy rozwiązania analityczne są bardziej dokładne dla $z = 0$. Wartości analityczne dla naprężeń σ_{zz} i σ_{xx} odpowiadające płaszczyźnie minimalnego przekroju można określić ze wzorów Bridgmana. W rozwiązaniu tym przyjęto, że w przekroju minimalnym szyjki naprężenie uplastycznienia $\sigma_y(\bar{\epsilon}_p)$ jest stałe dla całego przekroju.

2.10.8 Ilościowe pomiary parametru porowatości

Rezultaty badań Fishera [68] i Fishera i Gurlanda [69] przedstawiono w postaci wykresów dla zależności całkowitej miary powierzchniowej pustek η_A , części nukleacyjnej miary powierzchniowej pustek η_A^n oraz miary objętościowej pustek ξ w funkcji ekwiwalentnego odkształcenia plastycznego. Dla minimalnego przekroju poprzecznego w obszarze szyjki wielkości η_A i ξ były określane również wzdłuż odległości ρ znormalizowanej promieniem szyjki $r = a$. Rezultaty te przedstawiono na rys. 2.13 i 2.14.



Rys. 2.13. Objętościowy udział pustek ξ w funkcji ekwiwalentnego odkształcenia plastycznego. Wyniki dla stali B i W w badaniach eksperymentalnych Fishera i Gurlanda [69].



Rys. 2.14. Objętościowy udział pustek ξ dla minimalnego przekroju poprzecznego w obszarze szyjki o szerokości $r = a$ w funkcji znormalizowanej odległości $\frac{\rho}{a}$. Wyniki dla stali B i W w badaniach eksperymentalnych Fishera i Gurlanda [69].

2.11 Opis ewolucji porowatości w metalach—procesy quasi-statyczne

W literaturze pierwsze propozycje równania ewolucji objętościowego udziału pustek ξ można znaleźć w pracach Gursona (1975) [86] i (1977) [87].

Gurson w pracy (1975) [86] i w pracy wspólnej z Gurlandem (1977) [87] podaje postać równania ewolucji objętościowego udziału pustek ξ , które obejmuje dwa udziały: część wynikająca z zarodkowania (powstawania, ang. *nucleation*) mikropustek i części związaną ze wzrostem (ang. *growth*) mikrouszkodzeń, co można przedstawić w postaci

$$\dot{\xi} = (\dot{\xi})_n + (\dot{\xi})_g .$$

2.11.1 Opis zarodkowania pustek

Ilościowo część związaną z zarodkowaniem $(\dot{\xi})_n$ określa się w oparciu o kryterium zarodkowania ustalane w oparciu o eksperyment. Gurland w pracy (1972) [85] stwierdził, że zmiana procentowa cząstek popękanych jest funkcją odkształcenia ekwiwalentnego a zależność ta jest bardzo bliska zależności liniowej i jest funkcją jednorodną. Rezultaty takie otrzymano zarówno dla rozciągania, ściskania oraz skręcania (poziom trójosiowości naprężeń był zbyt

mały i nie obserwowano istotnego wpływu pierwszego niezmiennika naprężeń). Gurson (1975) [86] w oparciu o rezultaty Gurlanda (1972) [85] zaproponował, zależność

$$(\dot{\xi})_n \cong C_1 \dot{\varepsilon}_e ,$$

gdzie C_1 jest stałą dla danego objętościowego udziału cząstek drugiej fazy \bar{f}_p (dla stali $\bar{f}_p=0.15$). W eksperymencie Gurland przyjął, że przyrost odkształcenia ekwiwalentnego w osnowie jest w przybliżeniu równe przyrostowi odkształcenia ekwiwalentnego w reprezentatywnej objętości ($d\varepsilon_e \simeq dE_e$, w skali mikro i skali makro). Wynikało to z faktu, że w próbkach użytych do badań wzrost pustek był mało znaczący i można było go zaniedbać oraz porowatość początkowa ξ_0 była zero. Gurson wprowadzając oznaczenie P_f dla procentowego udziału cząstek, które popękały ($P_f=0.06$, stal z 1.05%C) dla danego ε_e ($\varepsilon_e=0.30$), ustalił zależność

$$C_1 = \bar{f}_p \frac{dP_f}{d\varepsilon_e} = 0.03$$

W badaniach Gurlanda (1972) [85] ustalono, że duże cząstki pękają jako pierwsze i konieczne jest wprowadzenie współczynnika korekcyjnego. Gurson rozważał również zmienność C_1 w zależności od objętościowego udziału cząstek niepopękanych \bar{f}_{up} . Można założyć, że w przybliżeniu ta zależność jest liniowa dla małych udziałów \bar{f}_{up} . Dlatego można przyjąć, za Gursonem, że bardziej uniwersalną jest zależność

$$\dot{f}_{up} \simeq C_1^* \bar{f}_{up} d\varepsilon_e ,$$

gdzie C_1^* jest mało zmienne z \bar{f}_{up} .

Agron ze współpracownikami (1975) [5, 7] badał przypadki oddzielania się twardych cząstek od osnowy. Ustalili oni, że o dekohezji cząstek od osnowy decyduje krytyczna wartość naprężenia normalnego do powierzchni styku cząsteczka-osnowa. Naprężenie międzygraniczne σ_i ma postać

$$\sigma_i = A\sigma_0 + \frac{\Sigma_m}{1 - \xi} ,$$

gdzie A jest współczynnikiem zależnym od wzmocnienia materiału osnowy a Σ_m jest makroskopowym naprężeniem średnim. Naprężenie σ_i jest monotonicznie rosnącą funkcją lokalnej koncentracji cząstek c . Przyjmując, że nukleacja pustki następuje gdy $\sigma_i = \sigma_i^{kryt}$ osiąga wartość krytyczną oraz oznaczając

przez c^* najmniejszą wartość lokalnej koncentracji cząstek c , Argon, Im i Safoglu (1975) [7] wykazali, że ułamek cząstek, które stały się źródłem pustek (oddzieliły się od osnowy) da się określić według wzoru

$$(1 - P) = 0.4412 \int_{\frac{c^*}{\bar{c}}}^{\infty} \frac{1}{\Gamma(x + 1)} dx ,$$

gdzie P jest ułamkiem cząstek, które się nie oddzieliły, a \bar{c} jest średnim udziałem cząstek w rozpatrywanej jednostce materiału, natomiast $\Gamma(x + 1)$ jest funkcją gamma Eulera. Mimo to, że model ten korzysta z modelu statystycznego dla losowego rozkładu cząstek o takim samym kształcie (cząstek kulistych), zaobserwowano wyraźny wpływ względnego współczynnika wielkości cząstek. Oznacza to, że c jest większe w otoczeniu dużych cząstek niż c w otoczeniu małych cząstek i dlatego jest bardziej prawdopodobne, że c może osiągać c^* . Tak więc zjawisko nukleacji zachodzi szybciej w powiązaniu z dużymi cząsteczkami, co wykazują eksperymenty Gurlanda (1972) [85] i Gangulee i Gurland (1967) [74]. Różniczkując powyższe równanie na $(1 - P)$ ze względu na c^* otrzymujemy

$$\frac{\partial(1 - P)}{\partial c^*} = - \frac{0.4412}{\Gamma\left(\frac{c^*}{\bar{c}} + 1\right)} \frac{1}{\bar{c}} .$$

Zakładając następnie, że cząsteczki oddzielone od osnowy zachowują się jak pustki o tej samej objętości otrzymujemy za Gursonem

$$d\xi_n = - \frac{0.4412}{\Gamma\left(\frac{c^*}{\bar{c}} + 1\right)} dc^* .$$

Teraz pozostaje znalezienie dc^* , które można określić dla danego $\sigma_i = \sigma_i^{kryt} = A(c^*)\sigma_0 + \frac{\Sigma_m}{1-\xi}$. Wyrażenie $d\xi_n$ zależy więc od : c^* , \bar{c} , $A(c^*)$, σ_i oraz od Σ_m ustalonego dla danego materiału osnowy, który może ulegać jeszcze wzmocnieniu z odkształceniem. Określenie dc^* można przeprowadzić, gdy są znane stosunki $\frac{\sigma_i}{\sigma_0}$, gdzie σ_0 jest naprężeniem uplastycznienia materiału osnowy, co pozwala określić $A(c^*)$ a następnie $\frac{dA}{dc^*}$ i c^* . Dla miedzi i żelaza, Argon i Im (1975) [5] ustalili, że $1 < \frac{\sigma_i^{kryt}}{\sigma_0} < 6$.

Tak jak podano wcześniej, są też prace w których nukleacja pustek oparta jest na kryterium progowego odkształcenia. Taki opis nukleacji pustek jest znacznie prostszy w użyciu niż w oparciu o kryterium progowego naprężenia. Teoria ta została opracowana na bazie rezultatów Gurlanda, które dotyczą prędkości pękania cząstek z odkształceniem, raczej niż, z predkością oddzielania się cząstek od osnowy. Dane otrzymane przez Gurlanda uzyskano dla

testu rozciągania osiowosymetrycznego, czyli tego samego co w eksperymencie Fishera [68] wykorzystywany w obecnej pracy. Krzywa umocnienia materiału w pracy Gurlanda jest opisana jako $\frac{\sigma_y}{\sigma_0} = \left(\frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{\varepsilon}_y}\right)^{0.25}$, $\sigma_0 = 275.79$ MPa, $\bar{\varepsilon}_y = 0.005$, gdzie wykładnik 0.25 obliczono dla poziomu naprężeń odpowiadających $\bar{\varepsilon} = 0.05$ i jest to wykładnik umocnienia osnowy. C_1^* określone tak jak powyżej, jest funkcją ustalonej geometrii cząstek i parametrów materiałowych, dlatego wydaje się rozsądne przyjmować w obliczeniach zmienne tylko \bar{c} . Kryterium odkształceniowe zarodkowania pustek w przeciwieństwie do naprężeniowego ma naturę stopniowego narastania i nie obserwuje się nagłego spadku odkształcenia do zniszczenia (ciągłości). Ciągłość wzrasta jak koncentracja cząstek drugiej fazy maleje, z możliwością osiągnięcia w granicy wielkości nieskończonej, gdy porowatość początkowa ξ_0 i \bar{c} osiąga zero. Gdy \bar{c} jest zero ciągłość stopniowo maleje ze wzrostem wykładnika umocnienia osnowy. Omawiany model zarodkowania dobrze przewiduje zachowanie się agregatu gdy występują w nim kruche cząsteczki i może być interpretowany w zadawalający sposób. Dla bardzo małych ξ_0 , obliczenia numeryczne są w zadawalającym stopniu w zgodzie z rezultatami badań doświadczalnych. Rozbieżności narastają, ze wzrostem ξ_0 i model wymaga ulepszenia lub poprawy.

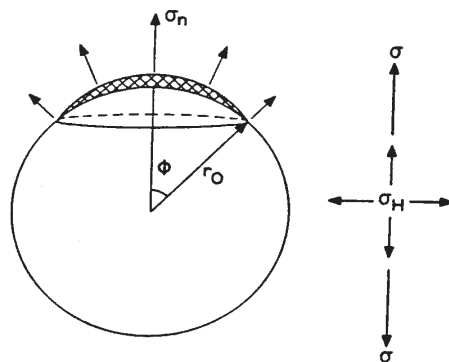
Należy również rozważyć założenie związane z izotropią. Przy dużych odkształceniach dewiatorowych założenie stałość kształtu pustek nie jest właściwe. Wynika to z porównania warunku uplastycznienia dla pustek sferycznych i cylindrycznych. Kształt pustek ma również wpływ na funkcję uplastycznienia.

2.11.2 Opis wzrostu pustek w procesach quasi-statycznych

Model Rice'a i Traceya opisany w rozdziale 2.6.1, to znany i powszechnie stosowany model w literaturze, patrz prace (Budiansky i inni (1982) [36], Needleman i Rice (1978) [144]). Wynikająca z tego modelu zależność $\dot{\xi}_g = (1 - \xi)tr(\mathbf{D}^p)$ została wyprowadzona przy pominięciu wpływu wielu istotnych efektów na prędkość wzrostu pustek. Pominięto więc wpływ tworzenia się nowych pustek na prędkość wzrostu pustek już istniejących, a także wpływ dyfuzji materiału wewnątrz ciała oraz efekt łączenia się pustek. Istotny też wpływ na prędkość wzrostu pustek wydaje się mieć ewolucja kształtu pustek i ich wzajemnego oddziaływania w wyniku skończonych odległości między nimi. Tak więc zależność $\dot{\xi}_g = (1 - \xi)tr(\mathbf{D}^p)$ należy traktować jako pewne oszacowanie wzrostu pustek, a sam opis wzrostu wymaga dalszych modyfikacji lub nowych propozycji. Jedną z nich jest propozycja Perzyny (1984) [172], która zostanie przedstawiona w rozdziale 5.1.3 i którą, wykorzystuje się w rozdziale 8.7.

2.11.3 Parametr osłabienia materiału

Uwzględnienie w związkach konstytutywnych objętościowego udziału pustek ξ , zdefiniowanego jako $\xi = \frac{V_p}{V}$ (według prac Gursona (1975) [86], (1977) [87]), znalazło uznanie wielu autorów. Używanie takiej skalarnej miary uszkodzenia w wielu przypadkach budzi pytanie czy jest to odpowiednia miara osłabienia materiału. Jeżeli nawet ze względu na prostotę i wygodę przyjmiemy, że w pewnych procesach miara taka jest dopuszczalna, to i tak w opisie rozwoju osłabienia materiału napotykamy wiele innych problemów. Jednym z nich jest ustalenie kiedy można traktować rzeczywistą pustkę tak samo, jak i jej potencjalny odpowiednik w postaci wtrącenia lub cząstki doznającej pęknięcia lub dekohezji. Jak dotąd, w opisie powstawania pustek, zakłada się taką równowagę. Jednak wyniki obserwacji mikroskopowych i niektórych rozważań teoretycznych wskazują na fakt, że nie we wszystkich przypadkach podejście takie jest słuszne. Jeżeli np. zarodkowanie pustki związane jest z pęknięciem cząstki, nie oznacza to, że cząstka taka nie może nadal przenosić części obciążenia, zwłaszcza, że nie nastąpiła dekohezja na granicy z plastyczną osnową. Jeżeli zarodkowanie polega na takiej właśnie dekohezji, to najczęściej nie dotyczy ona całej powierzchni granicznej, a tylko jej fragmentu. Kikuchi i inni (1981) [105] stwierdzili doświadczalnie i wykazali teoretycznie, że pustki powstają na końcach eliptycznych cząstek. W przypadku cząstki kulistej również nie zachodzi całkowita dekohezja. Świadczą o tym teoretyczne rozważania Fishera (1981) [70], poświęcone problemowi zarodkowania tego typu pustki w powiązaniu z cząsteczkami sferycznymi. Fisher analizował pustki powstające na pewnej części powierzchni cząstki, w warunkach jednoosiowego rozciągania, patrz rysunek 2.15. Jeżeli w wyniku postępującego odkształcenia plastycznego nastąpi jednak całkowita dekohezja, to również nie oznacza ona, że cząstka nie może już przenosić żadnych obciążeń. Jak zauważają np. Perra i Finnie (1977) [167], może ona być ściskana, ponieważ, stanowi przeszkodę dla swobodnej zmiany kształtu pustki. Dopiero w obecności dużego naprężenia średniego σ_m , co ma miejsce np. w szyjce dla zaawansowanego procesu rozciągania, następuje wzrost pustki w kierunku poprzecznym i cząstka taka nie przenosi już obciążenia. Tak więc założenie o równoważności kształtu nowo powstałej pustki i cząstki będącej jej źródłem, jest przynajmniej w fazie zarodkowania dużym uproszczeniem. Istotny jest jednak sam sposób modelowania oddziaływań między pustkami. Gurson rozważał pustki w osnowie o geometrii wzajemnie podobnej. Dla ciał z dużą pustką (duże ξ) użycie geometrycznie podobnych do kształtu pustki, zewnętrznych brzegów dla osnowy, ma wpływ na oszacowanie zachowania całości jako agregatu i na stan płynięcia plastycznego



Rys. 2.15. Tworzenie się pustki na fragmencie powierzchni granicznej przy rozciąganiu z pracy Fisher i Gurland[70].

między sąsiadującymi pustkami. Jest to widoczne w pracach, w których rozważa się dwuwymiarowy agregat z periodycznym szeregiem pustek. Thomason (1985) [238] poszukiwał warunków sprzyjających szybkowaniu (skoncentrowane płynięcie plastyczne) pomiędzy pustkami. Needleman (1972) [138] pokazał, że obszar plastyczny nigdy nie zajmuje całej osnowy. Inny aspekt oddziaływania pustek wyłania się, gdy rozważymy pustki jako pustki losowo rozlokowane w osnowie. Lokalna wartość ξ może wtedy różnić się od wartości średniej i lokalne obszary mogą mieć różne zachowanie plastyczne. Przewidywane zachowanie agregatu może wtedy różnić się od zachowania przewidywanego modelem z jedną pustką. Wpływ opisu wzmocnienia materiału osnowy jest istotny. Przede wszystkim należy rozważyć jednak mikrostrukturę materiału osnowy. Jest to istotne, gdyż mikrostruktura osnowy sama w sobie, może być źródłem powstawania pustek, gdy inne przyczyny są nieobecne (decydują mechanizmy dyslokacyjne). Ważny jest także sam sposób pomiaru udziału pustek. Jeżeli nie możemy określić objętościowego udziału pustek ξ za pomocą makroskopowych pomiarów (np. zmian gęstości względnej), to jesteśmy zdani na pomiary mikroskopowe. Pomimo, zautomatyzowania procedur zliczania pustek, w dalszym ciągu wiąże się to z wieloma problemami technicznymi. Russ (1991) [211] i Russ i Dehoff (2000) [212] wskazali na różnice w otrzymanych wynikach, których przyczyną są różne techniki przygotowania powierzchni do obserwacji. Należy przy tym pamiętać, że obserwacje takie dopiero po odpowiednim przeliczeniu dają poszukiwaną miarę objętościową pustek, co może być źródłem dodatkowych błędów. Fisher (1980) [68] wskazał na trudności związane z wyodrębnieniem gęstości powierzchniowej pustek, wynikającej oddzielnie z

zarodkowania i wzrostu.

2.12 Opis ewolucji porowatości w procesach dynamicznych

W literaturze przyjmuje się, że przy obciążeniach dynamicznych w materiale powstają mikrouszkodzenia, które wynikają z mechanizmów powstawania i wzrostu pustek¹.

Istotne jest, że mechanizmy powstawania i wzrostu mikrouszkodzeń przy obciążeniach dynamicznych są inne niż w procesach quasi–statycznych. Rozważania fizyczne przedstawione w pracach (np. Curran i inni (1987) [51], Perzyna (1986) [173] lub Dornowski i Perzyna (2000) [55]) wskazują na fakt, że powstawanie mikropustek przy dynamicznych obciążeniach, które są krótkotrwałe, zależą od mechanizmów termicznej aktywacji. Na bazie tych spostrzeżeń i uwzględniając wpływ temperatury i trójosiowości stanu naprężenia na powstawanie mikropustek (kryterium naprężeniowe) Perzyna (1986) [173] zaproponował następujący opis prędkości zmian porowatości wynikający z powstawania nowych mikropustek w postaci:

$$\left(\xi\right)_n = \frac{1}{T_m} h^*(\xi, \vartheta) \left[\exp \frac{m^*(\vartheta) |\tilde{I}_n - \sigma_n(\xi, \vartheta, \varepsilon_e^p)|}{k\vartheta} - 1 \right], \quad (2.1)$$

gdzie k oznacza stałą Boltzmanna, $h^*(\xi, \vartheta)$ reprezentuje funkcję materiałową powstawania pustek, wprowadzoną w celu uwzględnienia oddziaływań między pustkami, $m^*(\vartheta)$ jest zależnym od temperatury ϑ współczynnikiem, $\sigma_n(\xi, \vartheta, \varepsilon_e^p)$ jest naprężeniem progowym powstawania pustek zależnym od: porowatości ξ , temperatury i ekwiwalentnego odkształcenia plastycznego, natomiast

$$\tilde{I}_n = a_1 \tilde{J}_1 + a_2 \sqrt{\tilde{J}_2} + a_3 \left(\tilde{J}_3\right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.2)$$

określa niezmiennik intensywności naprężenia dla powstania pustek. We wzorze (2.2) występują stałe materiałowe a_i ($i = 1, 2, 3$), \tilde{J}_1 oznacza pierwszy niezmiennik tensora naprężenia, $\tilde{\sigma} = \sigma - \alpha$, \tilde{J}_2 i \tilde{J}_3 są drugim i trzecim niezmiennikiem dewiatora naprężenia $\tilde{\sigma}' = (\sigma - \alpha)'$ gdzie α oznacza naprężenie resztkowe tak jak w opisie ze wzmocnieniem kinematycznym.

¹Obserwacje eksperymentalne (np. Shockey i inni (1985)) pokazały, że mechanizm łączenia może być traktowany jako proces powstawania i wzrostu pustek w mniejszej skali, co znacznie upraszcza opis procesu wewnętrznego uszkodzenia biorąc tylko w opisach mechanizmy powstawania i wzrostu uszkodzeń. Korzystało z tego wielu autorów np.: Eftis (1996) [63], Perzyna (1986) [173].

Dla wzrostu mikropustek zamiast rozwiązania Gursona przyjmuje się (tak jak np. w pracach: Carroll i Holt (1972) [37], Johnson (1981) [101]; Perzyna (1986) [174]; Perzyna (1990) [175]; Perzyna i Drabik (1989, 2006) [180], [181], Perzyna i Nowak (1991) [184], Dornowski i Perzyna (2000) [55])

$$\left(\dot{\xi}\right)_g = \frac{1}{T_m} \frac{g^*(\xi, \vartheta)}{\sqrt{\kappa_0}} \left[\tilde{I}_g - \sigma_{eq}(\xi, \vartheta, \varepsilon_e^p) \right], \quad (2.3)$$

gdzie $T_m\sqrt{\kappa_0}$ oznacza lepkość dynamiczną materiału, $g^*(\xi, \vartheta)$ reprezentuje funkcję materiałową wzrostu pustek z uwzględnieniem oddziaływania między pustkami, $\sigma_{eq}(\xi, \vartheta, \varepsilon_e^p)$ jest naprężeniem progowym wzrostu pustki zależnym od: porowatości, temperatury i ekwiwalentnego odkształcenia plastycznego oraz

$$\tilde{I}_g = b_1 \tilde{J}_1 + b_2 \sqrt{\tilde{J}_2} + b_3 \left(\tilde{J}_3 \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (2.4)$$

określa niezmiennik intensywności naprężeń potrzebnych dla wzrostu pustek a b_i ($i = 1, 2, 3$) są stałymi materiałowymi.

Równanie ewolucji dla porowatości ξ w procesach dynamicznych ma postać

$$\begin{aligned} \dot{\xi} = & \frac{h^*(\xi, \vartheta)}{T_m} \left[\exp \frac{m^*(\vartheta) \left| \tilde{I}_n - \sigma_n(\xi, \vartheta, \varepsilon_e^p) \right|}{k\vartheta} - 1 \right] + \\ & + \frac{g^*(\xi, \vartheta)}{T_m\sqrt{\kappa_0}} \left[\tilde{I}_g - \sigma_{eq}(\xi, \vartheta, \varepsilon_e^p) \right]. \end{aligned} \quad (2.5)$$

W teorii lepkoplastyczności Perzyny wykorzystującej funkcję nadwyżki zwykle zastępuje się funkcję wykładniczą w członie opisującym powstawanie pustek i funkcję liniową w opisie wzrostu pustek odpowiednią funkcją nadwyżki Φ określaną doświadczalnie a równanie ewolucji dla parametru porowatości przyjmuje postać

$$\begin{aligned} \dot{\xi} = & \frac{1}{T_m} h^*(\xi, \vartheta) \langle \Phi \left[\frac{\tilde{I}_n}{\sigma_n(\xi, \vartheta, \varepsilon_e^p)} - 1 \right] \rangle + \\ & + \frac{1}{T_m} g^*(\xi, \vartheta) \langle \Phi \left[\frac{\tilde{I}_g}{\sigma_{eq}(\xi, \vartheta, \varepsilon_e^p)} - 1 \right] \rangle. \end{aligned} \quad (2.6)$$

2.12.1 Założenia co do funkcji materiałowych w procesach adiabatycznych

Pewne uproszczenia co do funkcji materiałowych w dynamicznych procesach adiabatycznych wprowadzono w pracy np. Dornowski i Perzyna (2000) [55].

Dla funkcji potencjału plastycznego f w postaci tak jak w pracy Perzyna (1984) [171] lub Shima i Oyane (1976) [220]

$$f = \left\{ J_2' + [n_1(\vartheta) + n_2(\vartheta)\xi] J_1^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (2.7)$$

gdzie

$$n_1(\vartheta) = 0, \quad n_2(\vartheta) = n = \text{const.} \quad (2.8)$$

Funkcja izotropowego wzmocnienia – osłabienia κ jest założona w postaci (np. Perzyna (1986) [173] lub Nemes i Eftis (1993)[148])

$$\kappa = \hat{\kappa}(\varepsilon^p, \vartheta, \xi) = \{ \kappa_s(\vartheta) - [\kappa_s(\vartheta) - \kappa_0(\vartheta)] \exp[-\delta(\vartheta)\varepsilon^p] \} \left[1 - \left(\frac{\xi}{\xi_F} \right)^{\beta(\vartheta)} \right], \quad (2.9)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \kappa_s(\vartheta) &= \kappa_s^* - \kappa_s^{**}\bar{\vartheta}, & \kappa_0(\vartheta) &= \kappa_0^* - \kappa_0^{**}\bar{\vartheta}, & (2.10) \\ \delta(\vartheta) &= \delta^* - \delta^{**}\bar{\vartheta}, & \beta(\vartheta) &= \beta^* - \beta^{**}\bar{\vartheta}, & \bar{\vartheta} &= \frac{\vartheta - \vartheta_0}{\vartheta_0}. \end{aligned}$$

ξ_F jest wartością porowatości przy zniszczeniu a ϑ_0 i wszystkie pozostałe stałe z $(\cdot)^*$ i $(\cdot)^{**}$ są opisane w pracy Perzyna (1986) [173].

Funkcję nadwyżki $\Phi \left(\frac{f}{\kappa} - 1 \right)$ w pracy Perzyna (1986) [173] przyjęto w postaci

$$\Phi \left(\frac{f}{\kappa} - 1 \right) = \left(\frac{f}{\kappa} - 1 \right). \quad (2.11)$$

Wykorzystując równania (2.7, 2.9) równanie ewolucji dla parametru porowatości ξ ma teraz postać

$$\dot{\xi} = \dot{\xi}_{wzrost} = \frac{g^*(\xi, \vartheta)}{T_m \kappa_0(\vartheta)} [I_g - \sigma_{eq}(\xi, \vartheta, \varepsilon_e^p)] \quad (2.12)$$

gdzie (patrz Dornowski (1999) [54])

$$\begin{aligned} g^*(\xi, \vartheta) &= c_1(\vartheta) \frac{\xi}{1 - \xi}, \\ I_g &= b_1 J_1 + b_2 \sqrt{J_2}, \\ \sigma_{eq}(\xi, \vartheta, \varepsilon_e^p) &= c_2(\vartheta)(1 - \xi) \ln \frac{1}{\xi} \{ 2\kappa_s(\vartheta) - [\kappa_s(\vartheta) - \kappa_0(\vartheta)] F(\xi_0, \xi, \vartheta) \}, \\ c_1(\vartheta) &= \text{const}, \quad c_2(\vartheta) = \text{const}, & (2.13) \\ F(\xi_0, \xi, \vartheta) &= \left(\frac{\xi_0}{1 - \xi_0} \frac{1 - \xi}{\xi} \right)^{\frac{2}{3}\delta} + \left(\frac{1 - \xi}{1 - \xi_0} \right)^{\frac{2}{3}\delta}. \end{aligned}$$

2.12.2 Funkcje materiałowe w procesach izotermicznych

Kolejne uproszczenia uzyskano w pracach Perzyna i Dornowski (2002) [58, 56] ograniczając opis rozwoju mikropustek do procesów izotermicznych, przyjmując, że funkcja potencjału plastycznego ma postać

$$f = \left(J_2' + n\xi J_1^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.14)$$

a funkcje izotropowego wzmocnienia-osłabienia jest w postaci

$$\kappa = [\kappa_s - (\kappa_s - \kappa_0) \exp(-\delta\varepsilon^p)] \left[1 - \left(\frac{\xi}{\xi_F} \right)^\beta \right], \quad (2.15)$$

co pozwala zapisać równanie ewolucji parametru porowatości jak w równaniu (2.7) dla którego mamy

$$\begin{aligned} g^* &= c_1 \frac{\xi}{1-\xi}, & I_g &= b_1 J_1 + b_2 \sqrt{J_2'}, \\ \sigma_{eq}(\xi, \varepsilon_e^p) &= c_2 (1-\xi) \ln \frac{1}{\xi} [2\kappa_s - (\kappa_s - \kappa_0) F(\xi_0, \xi)], & (2.16) \\ F(\xi_0, \xi) &= \left(\frac{\xi_0}{1-\xi_0} \frac{1-\xi}{\xi} \right)^{\frac{2}{3}\delta} + \left(\frac{1-\xi}{1-\xi_0} \right)^{\frac{2}{3}\delta}. \end{aligned}$$

W tym przypadku również postać funkcji nadwyżki przyjęto według równania (2.11).

2.13 Podsumowanie

2.13.1 Powstawanie mikropustek w metalach

Realistyczny opis teoretyczny powstawania pustek powinien korzystać z różnych szczegółów morfologii pustek otrzymywanych z badań eksperymentalnych. Dużo modeli zakłada w procesach quasi-statycznych deformacji, że następuje całkowita dekohezja połączenia międzyfazowego cząsteczka-osnowa, podczas gdy obserwacje pokazują, że w wielu przypadkach zachodzi dekohezja na części połączenia. Nie dotyczy to jednak procesów dynamicznych i nie odnosi się do równania (2.7). W procesach dynamicznych powstawaniu mikropustek odpowiada złożony stan naprężenia i powstają one w wyniku przekroczenia wartości progowych. Dokonane obserwacje i proponowane wnioski związane z naturą pustek w metalach ciągliwych, w szczególności w stalach węglowych, stanowią podstawę analizy i wyboru modelu powstawania i wzrostu pustek w

tej pracy. Obserwacje Fishera (1980) [68], Fishera i Gurlanda (1981) [69] oraz innych (np. prace: Kwon i Asaro (1990) [114], Argon i Im (1975) [5]) można podsumować w kilku następujących punktach:

- pustki powstają najszybciej w izolowanych cząsteczkach sferoidalnego cementytu przez częściową dekohezję połączenia na granicy faz w otoczeniu jednego z biegunów cząsteczki określanych przez oś rozciągania;
- pustki są, w większości przypadków, związane z cząsteczkami o wymiarach większych niż wymiar średni ustalony dla wszystkich cząsteczek. Bardzo rzadko się zdarza, żeby tworzyły się one w bardzo małych odizolowanych cząsteczkach, nawet dla bardzo zaawansowanych stanów deformacji, które istnieją w szyjce w końcowej fazie rozciągania próbek;
- cząsteczki usytuowane na granicy ziaren, są sprzyjającym miejscem dla nukleacji pustek;
- pustki tworzą się przez dekohezję połączenia cząstka–osnowa dla blisko sąsiadujących cząstek leżących wzdłuż osi rozciągania;
- znaczna dekohezja połączenia cząstka–osnowa rozpoczyna się, przy zaawansowanych deformacjach (w eksperymencie Fishera i Gurlanda odpowiadających ekwiwalentnemu odkształceniu plastycznemu $\bar{\epsilon}_p = 0.75$, dla stali typu B);
- w przekroju minimalnym szyjki w stalach węglowych źródłem pustek było 10 – 40% cząstek drugiej fazy;
- pustki wydłużają się w kierunku rozciągania, lecz zachowują eliptyczne przekroje poprzeczne;
- cząsteczki cementytu o nieregularnych kształtach, ulegają często wewnętrznym pęknięciom. Pęknięcia mają tendencję do układania się w kierunku prostopadłym do kierunku rozciągania;
- pustki są łatwo rozróżnialne w przekrojach poprzecznych a gorzej w przekrojach podłużnych rozciąganych próbek.

2.13.2 Kryteria nukleacji i modele analityczne

Zaproponowane w literaturze modele nukleacji pustek prowadzą do stwierdzenia, że czynnikami sprzyjającymi powstawaniu pustek są:

- cząsteczki o dużych wymiarach;
- mała praca adhezji;
- wysokie naprężenie płynięcia;
- wysoka trójosiowość stanu naprężenia;
- duże odkształcenia plastyczne;
- mały wymiar ziarna;
- cząsteczki ułożone na granicy ziaren.

Należy podkreślić, że zachowanie materiału osnowy pomiędzy blisko sąsiadującymi cząsteczkami jest szczególnie złożone. Pomiedzy cząsteczkami, płynięcie plastyczne w osnowie prowadzi do wzrostu stanu trójosiowego naprężeń lokalnych. Odpowiedni wzrost zmagazynowanej energii sprężystej sprzyja nukleacji pustek dla niskich poziomów deformacji.

2.13.3 Rekomendacje dla dalszych badań

A. Eksperyment:

1. Określenie efektu rodzaju wtrącenia na chemię powierzchniowych połączeń cząsteczka– osnowa. Z badań spektroskopowych powierzchni zniszczenia.
2. Określenie efektu wymiaru ziarna na nukleację pustek w próbkach mających ekwiwalentny rozkład wielkości cząstek.
3. Określenie efektu trójosiowości naprężeń na nukleację w próbach rozciągania przy różnych poziomach ciśnienia hydrostatycznego.
4. Badania zmiany porowatości dla różnych geometrii próbek w celu określenia nukleacji dla dowolnych stanów naprężenia i gradientów deformacji.

B. Badania analityczne:

1. Analizy ilościowe efektu współdziałania cząstek na zarodkowanie pustek.
2. Uwzględnienie efektów mikrostruktury w modelach, dla określenia deformacji lokalnych w cząsteczkach usytuowanych na granicy ziaren.

3. Warunek plastyczności oraz prawo plastycznego płynięcia materiału z mikrouszkodzeniami

W przedstawionym poniżej opisie materiału z mikrouszkodzeniami zakłada się, że osłabienie przez tworzenie się pustek jest bezpośrednio związane z uszkodzeniem mikrostruktury materiału i ma charakter izotropowy. Pustki mają kształt zbliżony do kulistego i podczas deformacji zmieniają swoje wymiary izotropowo. Skalarną miarą mikrouszkodzeń jest objętościowy udział pustek, który odgrywa rolę parametru osłabienia. Uplastycznienie ściśliwego ośrodka jest możliwe przy dowolnym stanie naprężenia. Wynika z tego, że powierzchnia plastyczności $f(\sigma_{ij}) = 0$ w przestrzeni naprężeń powinna być gładka, wypukła i zamknięta. Ponadto jej wymiary winny zależeć od aktualnej porowatości ξ , a w przypadku uwzględnienia wzmocnienia - również od odkształceń, $f = f(\sigma_{ij}, \xi, \varepsilon_e)$.

Punkty leżące wewnątrz powierzchni plastyczności, $f \leq 0$, odpowiadają stanom sprężystym, punkty leżące na powierzchni mogą przedstawiać stany plastyczne lub sprężyste w zależności od tego, czy proces jest obciążeniem, $\dot{\varepsilon}_{ij} \neq 0$ i $\dot{f} = 0$ lub odciążeniem $\dot{\varepsilon}_{ij} = 0$ i $\dot{f} \leq 0$ lub stanem neutralnym ($\dot{\varepsilon}_{ij} = 0$ i $\dot{f} = 0$). Równania ewolucji parametru ξ i ε_e muszą być niezmiennicze ze względu na zmianę skali czas.

W literaturze warunek plastyczności, $f - \kappa = 0$, materiału ciągłego z mikrouszkodzeniami formułuje się w następujących alternatywnych postaciach

- (i) patrz Shima i Oyane (1976) [220] lub Perzyna (1984) [172], (1986) [173]

$$f = \frac{J_2}{\kappa_0^2} + n\xi \left(\frac{J_1}{\kappa_0} \right)^2; \quad (3.1)$$

- (ii) patrz Gurson (1975) [86] lub Tvergaard i Needleman (1984) [243]

$$f = 3 \frac{J_2}{\sigma_M^2} + 2q_1 \xi \cosh \left(q_2 \frac{J_1}{\sigma_M} \right); \quad (3.2)$$

gdzie κ_0 oznacza naprężenie uplastycznienia materiału osnowy, $n = n(\vartheta)$ jest funkcją materiałową często zależną od temperatury ϑ , σ_M oznacza efektywne naprężenie uplastycznienia materiału osnowy przy rozciąganiu, q_1 i q_2 są stałymi. Naprężenie σ_M jest funkcją $\sigma_M(\varepsilon_M^p, \vartheta)$, to znaczy σ_M zależy od ekwiwalentnego odkształcenia plastycznego materiału osnowy ε_M^p i temperatury ϑ i opisuje krzywą umocnienia materiału osnowy.

Dla izotropowego wzmocnienia–osłabienia materiału funkcję κ przyjmuje się w następujących alternatywnych postaciach

- (i) patrz Perzyna (1984) [172], (1986) [173] lub Nemes, Eftis i Randles (1990) [149]

$$\kappa = \kappa_0^2 \left\{ \frac{\kappa_1}{\kappa_0} + \left(1 - \frac{\kappa_1}{\kappa_0}\right) \exp[-h^*(\vartheta)\varepsilon_e^p] \right\}^2 \left[1 - \left(\frac{\xi}{\xi^F}\right)^{\frac{1}{2}} \right]; \quad (3.3)$$

- (ii) patrz Gurson (1975) [86] lub Tvergaard i Needleman (1984) [243]

$$\kappa = 1 + q_3 \xi^2; \quad (3.4)$$

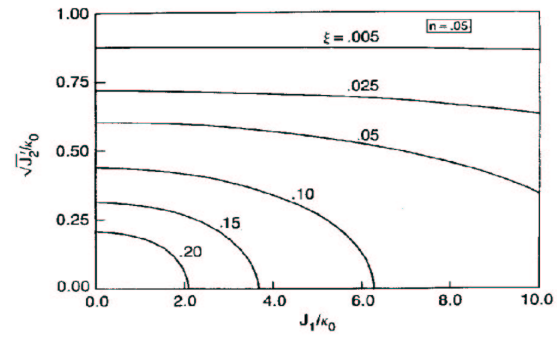
gdzie κ_0 i κ_1 oznaczają naprężenie uplastycznienia i naprężenie nasycenia materiału osnowy (obydwa mogą być zależne od temperatury), $h^* = h^*(\vartheta)$ jest funkcją wzmocnienia zależną od temperatury dla materiału osnowy, natomiast $\varepsilon_e^p = \int_0^t (\frac{2}{3} \mathbf{D}^p : \mathbf{D}^p)^{\frac{1}{2}} dt$ jest odkształceniem ekwiwalentnym, ξ^F oznacza wartość parametru porowatości dla którego rozpoczyna się zniszczenie a q_3 jest stałym parametrem.

Równanie (3.1) przedstawia we współrzędnych $\sqrt{J_2}$ i J_1 elipsę o półosiach $\sqrt{J_2}/\kappa_0$ i J_1/κ_0 ze środkiem w początku układu. Graficzny obraz warunku plastyczności tego typu przedstawia poszczególne elipsy (od najmniejszej do największej) odpowiadające kolejnym wartościom porowatości (od największej do najmniejszej) np.: $\xi = \xi_1, \xi_2, \xi_3 \dots = 0.20, 0.15, 0.10 \dots$, dla danych funkcji $n(\vartheta)$. Dla temperatury pokojowej obraz jednej czwartej omawianego warunku plastyczności dla różnych ξ i dla wybranych dwóch wartości np. $n = 0.05$ i $n = 0.97$ przedstawiono na rys. 3.1 i rys. 3.2. Warunek Hubera - Misesa ($\xi = 0$) na rys. 3.1 i rys. 3.2 przedstawia prostą poziomą dla $\sqrt{J_2}/\kappa_0 = 1$. Przyjmijmy, że obowiązuje następująca postać warunku plastyczności:

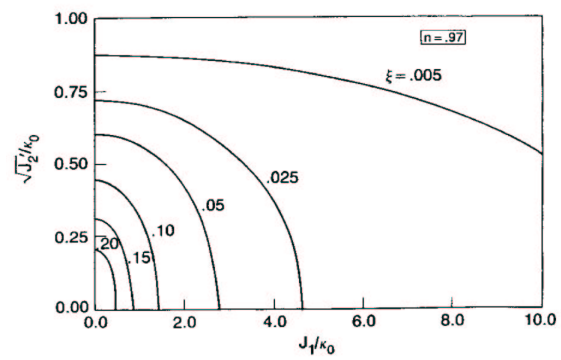
$$f = f(J_2, J_1, \xi, \varepsilon_e^p) = 3J_2 + a(\xi)J_1^2 - b(\xi)\kappa_0^2(\varepsilon_e^p) = 0, \quad (3.5)$$

gdzie: $J_2' = \frac{1}{2} S_{ij} S_{ij}$ jest drugim niezmiennikiem dewiatora naprężenia S_{ij} , $J_1 = \sigma_{ij} \delta_{ij} = \sigma_{kk}$ jest pierwszym niezmiennikiem tensora naprężenia, $a(\xi)$ i $b(\xi)$ są funkcjami porowatości ξ .

Równanie (3.5) przedstawia w przestrzeni naprężeń głównych ($\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$) obrotową elipsoide, dla której oś symetrii jest równo nachyloną do osi $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$. Warunek plastyczności (3.5) można także przedstawić w postaci:



Rys. 3.1. Obraz warunku plastyczności opisanej równaniem (3.1) dla różnych porowatości ξ i $n=0.05$.



Rys. 3.2. Obraz warunku plastyczności opisanej równaniem (3.1) dla różnych porowatości ξ i $n=0.97$.

$$\frac{J_2}{B^2} + \frac{J_1^2}{A^2} = 1,$$

gdzie:

$$B = \sqrt{\frac{b(\xi)}{3}} \kappa_0(\varepsilon_e^p) \quad A = \sqrt{\frac{b(\xi)}{a(\xi)}} \kappa_0(\varepsilon_e^p).$$

Jak widać z warunku plastyczności (3.5) lub warunku jak powyżej, zmiany powierzchni plastyczności wywołane zmianami porowatości nie mają charakteru izotropowego. Gdy zachodzi symetria względem osi pionowej oznacza to, że znak J_1 jest nieistotny, czyli materiał ma te same własności przy rozciąganiu jak i ściskaniu. Założenie to można uznać za poprawne dla materiałów, które nie posiadają defektów takich jak szczeliny płaskie. Dla materiałów z takimi defektami można wprowadzić do warunku uplastycznienia ograniczenie $J_1 < 0$. Można także dla ośrodków porowatych stosować inne warunki plastyczności, znane z mechaniki proszków lub gruntów.

Ogólnie można przyjąć, że ośrodek porowaty składa się z osnowy i trójwymiarowych pustek, które nie zawierają żadnego materiału. Osnowę stanowi materiał nieściśliwy, więc odkształcenia objętościowe wynikają wyłącznie ze zmiany objętości pustek. Podczas odkształceń tworzą się nowe pustki.

Przyjmując, że powierzchnia plastyczności $f(\sigma_{ij}) = 0$ stanowi potencjał dla prędkości odkształceń, otrzymujemy prawo płynięcia stowarzyszone z warunkiem plastyczności:

$$D_{ij} = \lambda \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} = \lambda(3S_{ij} + 2a(\xi)J_1\delta_{ij}), \quad (3.6)$$

gdzie: λ jest dodatnio określonym mnożnikiem plastycznym.

Ze względu na ściśliwość tensor D_{ij} i dewiator tego tensora $D'_{ij} = D_{ij} - \frac{1}{3}D_{kk}\delta_{ij}$ nie są tożsame, $D_{kk} = 6 \cdot \lambda \cdot a(\xi)J_1 \neq 0$. Odkształcenie zastępcze osnowy określimy z warunku równości mocy odkształceń plastycznych na poziomie mikroskopowym i makroskopowym:

$$(1 - \xi)\bar{\sigma}\dot{\varepsilon}_p = \sigma_{ij}D'_{ij}.$$

Z równości tej wynika, że w przybliżeniu (uwzględniając lub nie wtrącenia wewnątrz pustek) nie ma strat energii na tworzenie powierzchni swobodnych (nowych pustek).

Należy podkreślić, że powyższe propozycje (3.1) - (3.4) dla funkcji uplastycznienia uwzględniają wpływ naprężenia hydrostatycznego na uplastycznienie, a także spełniają warunek symetrii i warunek wypukłości wymagane w makroskopowej teorii plastyczności izotropowego materiału z pustkami. Porównując poszczególne warunki plastyczności można stwierdzić, że warunki te różnią się między sobą tylko ilościowo. Powyższe warunki plastyczności dla metali z mikrouszkodzeniami nie są jedynymi. Najczęściej stosowanym dla metali jest warunek Gursona, który staje się równoważny warunkowi Hubera-Misesa, gdy zaniedbujemy obecność pustek w metalach. Poszukuje się nowych sposobów ustalania zależności $J_2 = f(J_1, \xi, \varepsilon_e)$, gdyż nie zawsze jest możliwe dokonanie tego na drodze eksperymentalnej (pomiarów makroskopowych). Powstawanie pustek, pęknięć, tworzenie się szczelin, zachodzi intensywnie dopiero pod koniec odkształceń i ma charakter lokalny. Pozostaje więc droga analitycznego lub numerycznego sprawdzania stosowalności proponowanych warunków, szczególnie w przypadkach złożonych, gdy np. uwzględniamy anizotropię.

Pewne modyfikacje warunku uplastycznienia Gursona budzą kolejne wątpliwości. Warunek Gursona zmodyfikowany przez Tvergaarda (1982) [241, 242] oraz Tvergaarda z Needlemanem (1984) [243] przez wprowadzenie funkcji porowatości ξ^* nie daje gładkiej krzywej $\xi(\varepsilon_e)$ aż do zniszczenia, gdyż krzywa ta ulega załamaniu dla $\xi = \xi_c = 0.15$. W innych pracach dotyczących metali z mikrouszkodzeniami osłabienie zdefiniowane jest przez wielkość skalarna $D = D(\xi, \frac{\sigma_m}{\sigma_e})$. Tak zdefiniowane osłabienie zależy nie tylko od objętościowego udziału pustek ξ ale także od trójosiowości stanu naprężenia, wyrażony wskaźnikiem $(\frac{\sigma_m}{\sigma_e})$ (ze wzrostem tego wskaźnika dla ściskania maleje D).

W ogólnie sformułowanym warunku plastyczności występują parametry skalarne ξ i ε_e odpowiedzialne za osłabienie i wzmocnienie materiału. Przyjęcie danej reprezentacji warunku uplastycznienia pozwala na identyfikację tych parametrów, co będzie tematem rozdziału 8.

4. Stan naprężenia w próbkach rozciąganych jednoosiowo z uwzględnieniem porowatości

4.1 Rozwiązanie Bridgmana

Dla nieściśliwego materiału plastycznego, stan naprężenia w punkcie centralnym najmniejszego pola przekroju poprzecznego rozciąganej próbki cylindrycznej, wyraża się wzorami Bridgmana

$$\begin{aligned}\sigma_{11} &= \sigma_{33|_{r=a}} \cdot \ln\left(\frac{a}{2\rho_R} + 1\right); \\ \sigma_{22} &= \sigma_{11}; \\ \sigma_{33} &= \sigma_{33|_{r=a}} + \sigma_{11}; \\ \sigma_{33|_{r=a}} &= \sigma_y;\end{aligned}\tag{4.1}$$

gdzie σ_{33} , σ_{11} i σ_{22} określają składowe naprężenia w punkcie centralnym najmniejszego pola przekroju próbki, σ_y jest naprężeniem płynięcia materiału osnowy a a oznacza minimalny promień pola przekroju szyjki oraz ρ_R oznacza promienia obrysu szyjki tak jak to pokazano na rys. 2.8 w rozdziale 2.9.2.

4.2 Rozwiązanie Bridgmana dla modelu Gursona ciała porowatego

W celu wykorzystania rozwiązania Bridgmana dla materiałów z pustkami musimy przyjąć proste przybliżenie, że makroskopowe naprężenie płynięcia materiału z pustkami Σ_{33} można ustalić w oparciu o mikroskopowe naprężenie płynięcia materiału osnowy z zależności $\Sigma_{33|_{r=a}} = \sigma_y \cdot (1 - \xi)$, gdzie ξ jest parametrem porowatości. Użycie wyrażenia $(1 - \xi)$ ma na celu, w sposób przybliżony, uwzględnić fakt, że naprężenia w ciele porowatym są przenoszone tylko przez materiał osnowy. Tak więc stan makroskopowego naprężenia ciała złożonego z osnowy i pustek będzie

$$\begin{aligned}\Sigma_{11} &= \sigma_y(1 - \xi) \cdot \ln\left(\frac{a}{2\rho_R} + 1\right); \\ \Sigma_{22} &= \Sigma_{11}.\end{aligned}\tag{4.2}$$

Natomiast, Σ_{33} będzie wyliczane tak by spełnić warunek uplastycznienia dla ciała złożonego z osnowy i pustek.

Z warunku plastyczności Gursona mamy

$$\left(\frac{\Sigma_{33}}{\sigma_y} - \frac{\Sigma_{11}}{\sigma_y}\right)^2 + 2 \cdot \xi \cdot \cosh\left(\frac{\Sigma_{11}}{\sigma_y} + \frac{\Sigma_{33}}{2 \cdot \sigma_y}\right) - 1 - \xi^2 = 0.\tag{4.3}$$

Rozwiązanie tego równania ze względu na Σ_{33} jest możliwe jedynie iteracyjnie. Wykorzystując jednak rozwinięcie funkcji $\cosh(x)$ w szereg potęgowy, zachowując dwa pierwsze człony $\cosh(x) \approx 1 + \frac{x^2}{2}$, warunek plastyczności Gursona ma postać

$$\left(\frac{\Sigma_{33}}{\sigma_y} - \frac{\Sigma_{11}}{\sigma_y}\right)^2 + 2 \cdot \xi \cdot \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\Sigma_{11}}{\sigma_y} + \frac{\Sigma_{33}}{2 \cdot \sigma_y}\right)^2\right] - 1 - \xi^2 = 0. \quad (4.4)$$

Równanie (4.4) ma pierwiastki postaci

$$\frac{\Sigma_{33}}{\sigma_y} = \frac{\Sigma_{11}}{\sigma_y} \frac{2 - \xi}{2(1 + \frac{1}{4}\xi)} \pm \frac{\sqrt{\Delta}}{2(1 + \frac{1}{4}\xi)}, \quad (4.5)$$

gdzie $\Delta = \left(\frac{\Sigma_{11}}{\sigma_y}\right)^2 (2 - \xi)^2 - 4 \left(1 - \frac{1}{4}\xi\right) \left[\left(\frac{\Sigma_{11}}{\sigma_y}\right)^2 + 2\xi + \xi \left(\frac{\Sigma_{11}}{\sigma_y}\right)^2 - 1 - \xi^2\right]$ i $\Delta \geq 0$.

Należy teraz dokonać sprawdzenia, który z pierwiastków równania (4.5) spełnia z większą dokładnością równanie (4.3).

5. Równanie ewolucji parametru porowatości dla procesów quasi-statycznych

W wielu pracach eksperymentalnych i teoretycznych (Fisher (1980) [68], Gurland (1972) [85], Rice i Tracey (1969) [203], Needleman i Rice (1978) [144]) wykazano, że gdy obecne są mikropustki w materiałach ciągliwych, składowa hydrostatyczna naprężenia może powodować makroskopową dylatację poprzez mechanizm rozwoju mikropustek. W powyżej wymienionych pracach ([68], [85], [203], [144]) przyjmuje się, że hydrostatyczna składowa naprężenia sprzyja powstawaniu pustek wokół wtrąceń poprzez ich udział w wartości naprężenia międzyfazowego na styku wtrącenie-osnowa. Gurson badał własności materiału porowatego (zawierającego mikropustki). Model fizyczny takiego materiału to jednostkowa komórka będąca agregatem sferycznych lub cylindrycznych pustek i materiału osnowy. Taka komórka jest z definicji wystarczająco duża by statystycznie reprezentować własności makroskopowe materiału jako całości. Gurson bazuje na podejściu Berga (1969) [20], który traktuje konglomerat osnowa+pustki tak samo jak Bishop i Hill (1951) [21] konglomerat polikrystaliczny. To pozwala udowodnić spełnienie zasady maksimum pracy plastycznej na poziomie makroskopowym o ile zasada ta jest spełniona na poziomie mikroskopowym. Pojęcie **makro** odnosi się do wartości średnich takich fizycznych wielkości jak naprężenie, dysypacja, prędkość itp., które reprezentują zachowanie materiału w całości. Pojęcie **mikro** odnosi się do własności w punkcie, takich jak naprężenie lub pole prędkości w otoczeniu pustki. W rozdziale 3 został omówiony opis materiału z mikropustkami (osłabieniem) wyrażony odpowiednim warunkiem plastyczności i prawem płynięcia. Poniżej założono, że wielkością makroskopową bezpośrednio związana z uszkodzeniem mikrostruktury materiału jest porowatość ξ i ma ona charakter izotropowy. W podsumowaniu podkreśla się jedynie konieczność uogólnienia takiego opisu w celu uwzględnienia efektów anizotropowego rozwoju pustek. Przyjęta skalarna miara porowatości jest zdefiniowana, jako objętościowy udział pustek w stosunku do całej rozpatrywanej objętości ciała, który odgrywa rolę parametru osłabienia.

5.1 Ewolucja objętościowego udziału pustek

W przedstawionym w tym rozdziale opisie materiału z mikrouszkodzeniami model materiału to agregat materiału osnowy i pustek. Materiał osnowy jest nieściśliwy a zmiana objętości agregatu podczas deformacji wynika, ze zmiany ob-

jętości pustek. Pierwsze propozycje równania ewolucji objętościowego udziału pustek ξ można znaleźć w pracach Gursona (1975) [86], (1977) [87]. Propozycja Gursona z 1975 [86] równania na $\dot{\xi}$ obejmuje dwa udziały: część wynikająca z zarodkowania (powstawania, ang. *nucleation*) mikropustek i części związanej ze wzrostem (ang. *growth*) mikrouszkodzeń. Równanie ewolucji na ξ ma postać

$$\dot{\xi} = (\dot{\xi})_n + (\dot{\xi})_g .$$

Proces zarodkowania (tworzenia się) pustek związany jest z obecnością wtrąceń i cząstek innej fazy w materiale rodzimym. Mikropustki mogą powstawać albo przez dekohezję na styku osnowa-cząsteczka drugiej fazy lub poprzez pęknięcie cząsteczek drugiej fazy. W procesie deformacji obserwuje się również mikropustki w 'czystym' materiale bez udziału wtrąceń, gdy odkształcenia są wystarczająco duże, dla działania mechanizmu dyslokacji z tworzeniem się wakansów (patrz Bauer i Wisdorf (1973) [16]), ten mechanizm jednak zostanie pominięty w dalszej części rozprawy, ponieważ badania ograniczono do klasy materiałów ciągliwych w których występują cząsteczki drugiej fazy.

Utworzone lub istniejące pustki podlegają wzrostowi, który dokonuje się przez sprężyste i plastyczne deformacje w materiale osnowy.

Trzecia faza rozwoju pustek czyli łączenie się pustek prowadzi do lawinowego rozdzielenia się (zniszczenia) materiału i może być uwzględniona przez dodanie trzeciego członu $(\dot{\xi})_c$ jak w pracach Tvergaarda (1982) [242] lub Tvergaarda i Needlemana (1984) [243]. Nieco inną modyfikację zaproponował Perzyna (1984) [172], która polegała na założeniu zbiegania $(\dot{\xi}) \rightarrow \infty$ gdy ekwiwalentne odkształcenie plastyczne w materiale osnowy dąży do pewnej krytycznej wartości.

5.1.1 Prawo zachowania masy

Pojęcie porowatości jest definiowane na podstawie analizy matematycznej rozważanego materiału przed i po deformacji w pracach Gursona [86, 87]. Zmiana objętości w ośrodku niesprężystym jest w tym rozdziale analizowana wyłącznie w odniesieniu do zagadnienia deformacji ciągliwych stopów i metali, które podlegają małym deformacjom sprężystym i dużym deformacjom niesprężystym.

Oznaczając przez ρ gęstość materiału całkowitego i przez ρ_M gęstość nieściśliwego materiału osnowy, a przez ξ parametr porowatości otrzymujemy

$$\rho = (1 - \xi)\rho_M \implies \dot{\rho} = -\dot{\xi} \cdot \rho_M - \xi \cdot \dot{\rho}_M . \quad (5.1)$$

Z założenia o nieściśliwości materiału osnowy, $\dot{\rho}_M = 0$, otrzymujemy

$$\frac{\dot{\rho}}{\rho_M} = -\dot{\xi}$$

a po podstawieniu do powyższego związku zależności (5.1)₁ na ρ_M

$$-\frac{\dot{\rho}}{\rho} = \frac{\dot{\xi}}{(1 - \xi)} .$$

Masa materiału o pewnej objętości Ω jest dana jako $m(\Omega) = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{X}, t) d\Omega$.

Z prawa równości mass przed i po deformacji (przy braku wypływu masy i braku zamiany masy na energię) mamy

$$dm = \rho dv = \rho J dV \implies \dot{m} = (\dot{\rho} \cdot J + \rho \cdot \dot{J}) dV = 0 , \quad (5.2)$$

gdzie dv i dV są nieskończenie małymi elementami objętości w konfiguracji aktualnej i konfiguracji odniesienia odpowiednio, a $J = \det(\mathbf{F})$, gdzie \mathbf{F} jest gradientem deformacji.

Z równania (5.2) otrzymujemy zależność w ogólnej postaci

$$\frac{\dot{\rho}}{\rho} = -\frac{\dot{J}}{J} = -tr(\mathit{grad}\mathbf{v}) = -tr(\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1}). \quad (5.3)$$

Wykorzystajmy multiplikatywny rozkład gradientu deformacji, który jest wyjściowym założeniem opisu sprężysto-plastycznych deformacji ciała stałego $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p$ (Lee (1969) [115], Perzyna (1978) [170]). Gradient przestrzenny pola prędkości można powiązać z \mathbf{L} gdzie

$$\mathbf{L} = (\mathbf{F}^e)^{-1}(\mathit{grad}\mathbf{v})(\mathbf{F}^e), \quad (5.4)$$

tak więc

$$tr(\mathit{grad}\mathbf{v}) = tr(\mathbf{L}) = tr(\mathbf{L}^e) + tr(\mathbf{L}^p) \approx tr(\mathbf{L}^p) = tr(\mathbf{D}^p) = D_{kk}^p \quad (5.5)$$

Podstawiając (5.5) i (5.2) do (5.1) otrzymujemy następujące równanie prędkościowe dla parametru porowatości opisujące całkowitą zmianę objętości pustek

$$\frac{\dot{\xi}}{(1 - \xi)} = D_{kk}^p . \quad (5.6)$$

Przyjmując tak jak Gurson [86], że $\dot{\xi} = \dot{\xi}_g + \dot{\xi}_n$ i wykorzystując to w równaniu (5.6) otrzymujemy

$$\frac{\dot{\xi}_g}{(1-\xi)} + \frac{\dot{\xi}_n}{(1-\xi)} = D_{kk}^p . \quad (5.7)$$

Na podstawie równania (5.7) jest zatem jasne, że całkowita prędkość dylatacyjna deformacji niesprężystych jest wynikiem dwóch udziałów. Zakładając, że $\dot{\xi}_g = g(1-\xi)D_{kk}^p$, gdzie g jest pewną stałą lub funkcją materiałową oraz dla części nukleacyjnej zgodnie z propozycją Gurlanda (1972) [85] $\dot{\xi}_n = \tilde{h}\dot{\epsilon}_p$, gdzie \tilde{h} jest także pewną stałą lub funkcją materiałową, otrzymujemy

$$\frac{\dot{\xi}}{(1-\xi)} = gD_{kk}^p + \frac{\tilde{h}\dot{\epsilon}_p}{(1-\xi)} = D_{kk}^p .$$

Korzystając z zasady równości mocy plastycznej na poziomie mikro i makro

$$(1-\xi)\bar{\sigma}\dot{\epsilon}_p = \sigma_{ij}D_{ij}^p ,$$

możemy dokonać zamiany zmiennych i otrzymujemy

$$\frac{\dot{\xi}}{(1-\xi)} = gD_{kk}^p + \frac{\tilde{h}\sigma_{ij}D_{ij}^p}{(1-\xi)^2\bar{\sigma}} = D_{kk}^p ,$$

lub to samo ale w innej postaci

$$\dot{\xi} = (1-\xi)gD_{kk}^p + \frac{\tilde{h}\sigma_{ij}D_{ij}^p}{(1-\xi)\bar{\sigma}} = (1-\xi)D_{kk}^p .$$

Postać prawa zachowania masy (5.6)(równania ciągłości) jest zależna od postaci równania ewolucji na parametr porowatości ξ . Istotne jest samo zdefiniowanie parametru porowatości ξ . Czy jest to stosunek objętości pustek jako pustek 'o objętości bez wtrąceń' czy też pustek o objętości wypełnionej materiałem cząstek drugiej fazy do całkowitej objętości rozpatrywanego elementu. Rzutuje to na użycie miar do pomiaru porowatości; miara lokalna mikro (określana przez udział powierzchniowy pustek) lub miara makro (uśredniona w pewnej rozpatrywanej objętości) określana przez gęstość materiału. Przez zdefiniowanie parametru porowatości dokonujemy wyboru zmiennej do pomiaru i opisu konstytutywnego oraz wyboru zmiennych jako zmienne wewnętrzne lub zewnętrzne.

5.1.2 Zarodkowanie pustek

Plościowo część $(\dot{\xi})_n$ określa się w zależności od kryterium zarodkowania. Jedno to kryterium odkształceniowe a drugie to kryterium naprężeniowe. Wyniki eksperymentalne Gurlanda (1972) [85]) poświęcone zjawisku pęknięcia cząstek cementytu w sferoidalnej stali węglowej o zawartości 1.05%C świadczą o tym że liczba pękniętych cząstek jest proporcjonalna do odkształcenia ekwiwalentnego oraz, że wcześniej pękają cząstki duże (o średnicy większej niż wymiar średni). W oparciu o te wyniki eksperymentalne Gurson (1975) [86]) zaproponował następujący związek

$$(\dot{\xi})_n = c\xi_{un}\dot{\varepsilon}_e, \quad (5.8)$$

gdzie c jest stałą materiałową, ξ_{un} jest objętościowym udziałem cząstek drugiej fazy bez pęknięć a ε_e jest odkształceniem ekwiwalentnym w materiale osnowy.

Formułując zależność (5.8) Gurson założył, że pęknięte cząstki stają się pustkami o podobnych wymiarach. Gurson podaje również alternatywne określenie $(\dot{\xi})_n$ wykorzystując koncepcję krytycznego naprężenia normalnego $\sigma_N = \sigma_{kk} + \sigma_y$, potrzebnego do oddzielenia plastycznej osnowy od sztywnej cząstki drugiej fazy. W swoich rozważaniach Gurson uwzględnił, dyskutowany wcześniej przez Argona z współpracownikami ((1975) [5], [7]), statystyczny rozkład cząstek i krytyczną ich koncentrację. Wyprowadzona przez Gursona postać odpowiedniego wyrażenia na $(\dot{\xi})_n$ w oparciu o kryterium krytycznego naprężenia jest bardzo złożona i nie znalazła w późniejszych pracach zastosowania. Bez jej przytaczania, należy jednak podkreślić, że Gurson (1977) ([87]) jako pierwszy zwrócił uwagę na szereg problemów związanych z przyjęciem koncepcji powstawania pustek zależnej od naprężenia. Okazało się między innymi, że jeżeli $(\dot{\xi})_n$ zależy od $\dot{\sigma}_{ij}$, to prawo plastycznego płynięcia jest niestowarzyszone. Innym utrudnieniem, jest konieczność śledzenia przyrostów składowych naprężenia σ_{ij} i porównywania aktualnego naprężenia z wartością naprężenia krytycznego zarodkowania pustek i stwierdzenia, czy zarodkowanie jest kontynuowane, czy też nie. Needleman i Rice (1978) [144] przedstawili proste uogólnienie obydwu koncepcji powstawania pustek (odkształceniowe i naprężeniowe) i zaproponowali

$$(\dot{\xi})_n = A\dot{\sigma}_y + B\dot{\sigma}_m. \quad (5.9)$$

Również Perzyna (1986) [173] korzystał z tego typu równości, przekształcając

ją do postaci

$$(\dot{\xi})_n = \frac{Ah}{(1-\xi)\sigma_y} \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} + B\dot{\sigma}_m . \quad (5.10)$$

W równaniu (5.10) uwidacznia się zależność zarodkowania od jednostkowej mocy plastycznej a wyrażenie Ah traktowane jest jako nowa funkcja charakteryzująca materiał. Jeśli w równaniach (5.9) i (5.10) przyjmiemy, że $B=0$ to otrzymamy, podejście oparte na zarodkowaniu zależnym od odkształcenia. Przyjęcie z kolei $A = B$ prowadzi do zgodności z koncepcją naprężenia normalnego. Chu i Needleman (1980) [43] podobnie jak w pracy Needleman i Rice (1978) [144] rozpatrzyli oddzielnie zarodkowanie kontrolowane przez odkształcenie

$$(\dot{\xi})_n = A\dot{\varepsilon}_e \quad (5.11)$$

oraz zależne od naprężenia normalnego

$$(\dot{\xi})_n = B(\dot{\sigma}_y + \dot{\sigma}_m) . \quad (5.12)$$

Jednak ich oryginalnym wkładem do opisu nukleacji pustek było stwierdzenie, że istnieje pewna średnia wartość odkształcenia ekwiwalentnego ε_e^N (lub średnia wartość naprężenia krytycznego), wokół której zarodkowanie pustek przebiega zgodnie z rozkładem normalnym (Gaussa). Wielkość A utożsamia się z objętościowym udziałem wtrąceń i cząstek, które w wyniku odkształcenia jednostkowego staje się źródłem pustek, i określa się jako

$$A = \frac{\xi_N}{s_N \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_e - \varepsilon_e^N}{s_N} \right)^2 \right] , \quad (5.13)$$

gdzie: ξ_N jest największym możliwym objętościowym udziałem pustek powstających w wyniku zarodkowania, zgodny z objętościowym udziałem wtrąceń i cząstek będących ich źródłem, s_N jest odchyleniem standardowym rozkładu normalnego a ε_e^N jest odkształceniem ekwiwalentnym zarodkowania pustek.

Podobnie można zdefiniować B . W ogólności zarówno A , jak i B mogą zależeć od historii odkształcenia i obciążenia. Ich zależność od statystycznych rozkładów wtrąceń i cząstek jest zapewne bardziej skomplikowana, niż to wynika z przyjętej idealizacji o której mówiono w rozdziale 2.11.1. Saje, Pan i Needleman (1982) [214] przyjęli ξ_N równe objętościowemu udziałowi wszystkich wtrąceń i cząstek zmniejszonemu proporcjonalnie, zgodnie z maksymalnym ilościowym

udziałem wtrąceń i cząstek będących źródłem pustek. Badania Fishera (1980, 1981) [68, 69] oraz LeRoy i inni (1981) [117] pokazały, że udział takich cząstek w przypadku sferoidalnych stali węglowych, poddanych jednoosiowemu rozciąganiu, nie jest większy niż 40% ich ogólnej liczby. Saje, Pan i Needleman [214] również zwrócili uwagę na fakt, że odkształceniu ekwiwalentnemu nukleacji^N odpowiada w tej koncepcji największa prędkość zarodkowania pustek.

5.1.3 Wzrost pustek

W celu określenia części $(\dot{\xi})_g$, związanej ze zjawiskiem wzrostu pustek, rozpatrzmy w pewnym punkcie ciała porowatego elementarną, ale reprezentatywną objętość V . Objętość tę można wyrazić jako sumę objętości pustek i udziałów objętościowych składników stopowych osnowy:

$$V = V_m + V_{wc} + V_{cp} + V_p ,$$

gdzie: V_m jest objętością materiału litego osnowy otaczającego wtrącenia, cząstki innej fazy i pustki ($V_m = \text{const}$, ze względu na nieściśliwość). V_{wc} jest objętością wtrąceń i cząstek, które nie stały się jeszcze źródłem pustek. V_{cp} jest objętością wtrąceń i cząstek związanych z pustkami ($V_{wc} + V_{cp} = V_{\text{cząstek}} = V_{wc}^0$). V_p jest objętością istniejących pustek oraz $V_{cp} = V_{wc}^0 - V_{wc}$. Zgodnie z prezentowanym podejściem, podobnie jak w pracach Rosochowski [208], Rosochowski i Olejnik (1988) [209], Perzyna i Drabik [180] oraz Perzyna i Nowak (1985) [182] objętościowy udział pustek ξ może być rozumiany jako $\xi = \frac{V_{cp} + V_p}{V}$ lub $\xi = \frac{V_p}{V}$. Przy oznaczeniach jak poprzednio, odnośnie masy i gęstości, powyższe określenia prowadzą do następujących zależności:

$$\rho = (1 - \xi) \frac{m}{V_m + V_{wc}} = (1 - \xi) \rho_M \quad \text{lub} \quad \rho = (1 - \xi) \frac{m}{V_m} . \quad (5.14)$$

Jeżeli ciało porowate traktujemy jak ośrodek ciągły, to zmiana gęstości wynika z zasady zachowania masy (równania ciągłości) (patrz rozdział 5.1.1, wzory (5.3) i (5.5))

$$\dot{\rho} + \rho D_{kk}^p = 0 . \quad (5.15)$$

Podstawiając ρ z (5.14) i prędkość $\dot{\rho}$ wynikającą z (5.14) do równania (5.15), otrzymamy

$$\dot{\xi} = (1 - \xi) D_{kk}^p - \frac{V_{wc}}{V} . \quad (5.16)$$

Pierwszy składnik wyraża zmianę ξ spowodowaną ich plastycznym wzrostem, natomiast drugi związany jest z zarodkowaniem pustek, których źródłem jest pękanie lub dekohezja cząstek drugiej fazy. Porównując postać równania (5.7) i (5.16) i zakładając, że powstawanie nowych pustek nie wpływa na wzrost, możemy napisać

$$\dot{\xi} = \dot{\xi}_g = (1 - \xi) D_{kk}^p . \quad (5.17)$$

Związek ten jest powszechnie wykorzystywany w pracach uwzględniających w opisie konstytutywnym objętościowy udział pustek ξ (np. prace: Becker i inni (1988) [18], Tvergaard i Needleman (1984) [243]).

Perzyna w pracach z 1986 r. [173], [174] zaproponował bardziej ogólne określenie $\dot{\xi}_g$, zgodnie z którym

$$\dot{\xi}_g = (1 - \xi) \Xi_{ij} D_{ij} , \quad (5.18)$$

gdzie Ξ_{ij} jest stałą macierzą charakteryzującą materiał. Jeżeli $\Xi_{ij} = \delta_{ij}$, to (5.18) staje się równe (5.17).

5.1.4 Związek porowatości ze względną zmianą gęstości

Uwzględnienie w związkach konstytutywnych objętościowego udziału pustek ξ , zdefiniowanego jako $\xi = \frac{V_p}{V}$ jest stosowane przez wielu autorów. Są jednak wątpliwości, czy jest to odpowiednia miara osłabienia materiału. Często krytykowane jest założenie o skalarnym charakterze parametru osłabienia. Zakładając, że w pewnych procesach koncepcja taka jest dopuszczalna, można rzeczywistą pustkę traktować jak jej potencjalny odpowiednik w postaci cząstki drugiej fazy, doznającej wewnętrznego pęknięcia lub dekohezji połączenia cząstka-osnowa. Jednak wyniki obserwacji mikroskopowych (już w pracach Gurlanda (1972) [85] czy Fishera i Gurlanda (1981) [69]) i niektóre rozważania teoretyczne (Fisher (1980) [68], Gurson (1975) [86]) wskazują na fakt, że powstawanie pustek jest bardziej złożone. W różnych materiałach obserwuje się różne sposoby tworzenia pustek w zależności od zawartości cząstek drugiej fazy. Dla przykładu jeżeli powstawanie pustki związane jest z pęknięciem cząstki drugiej fazy, nie oznacza to, że cząstka taka nie może nadal przenosić części obciążenia, zwłaszcza, że nie nastąpiła dekohezja na granicy z plastyczną osnową. Jeżeli nawet zarodkowanie pustki polega na takiej właśnie dekohezji, to najczęściej nie dotyczy ona całej powierzchni granicznej, a tylko jej fragmentu. Potwierdzają to np. obserwacje mikroskopowe w pracy Fisher z Gurlandem (1981) [69]. Stwierdzili oni doświadczalnie i wykazali teoretycznie,

że pustki powstają na końcach eliptycznych cząstek na ich przecięciu z granicą ziaren. Nawet w przypadku cząstki kulistej również nie zachodzi całkowita dekohezja. W pracy Fishera i Gurlanda (1981) [69], rozważa się powstanie pustki (typu ang. *hat*, patrz rozdział 2.11.3) na kolistej cząsteczce drugiej fazy i określa dla tego typu pustki współczynniki intensywności naprężeń, w warunkach osiowego rozciągania.

Nawet gdy nastąpi przypadek całkowitej dekohezji, to nie oznacza to, że cząstka wewnątrz pustki nie może już przenosić żadnych obciążeń. Dużym problemem jest pomiar objętości tworzących się pustek, których źródłem są cząstki drugiej fazy lub wtrącenia. Powstające 'puste' pustki bez wtrąceń mają bezpośredni wpływ na zmianę gęstości. W pracach Palmer i Mellor (1980) [164], Rosochowski (1985) [208] i Rosochowski i Olejnik (1988) [209] użyto objętościowego udziału pustek ξ ($\xi = V_p/V$). Zmiana w stosunku do $\xi = (V_p + V_{cp})/V$ polega na pominięciu objętości V_{cp} , czyli objętości wtrąceń i cząstek będących źródłem pustek, tak więc pustki są pustą przestrzenią bez wtrąceń. Oczywiście, nie można wykluczyć, że na etapie łączenia się pustek istnieje wpływ objętości V_{cp} cząsteczek na ewolucję pustek i na osłabienie materiału.

W oparciu o definicję ξ można uzyskać związek pomiędzy ρ i ξ

$$\rho = (1 - \xi) \frac{m}{(V_m + V_{wc} + V_{cp})} . \quad (5.19)$$

Dla danego elementu objętości materiału $m = \text{const}$, $V_m = \text{const}$, $V_{wc} + V_{cp} = \text{const}$ są wielkościami stałymi i można ρ powiązać z ξ . W praktyce korzysta się ze związku względnej miary gęstości z ξ (patrz np. Rosochowski i Olejnik (1988) [209])

$$\xi = 1 - (1 - \xi_0) \left(1 + \frac{\Delta\rho}{\rho_0}\right) , \quad (5.20)$$

gdzie: ξ_0 jest porowatością początkową a ρ_0 jest gęstością początkową określoną analogicznie do równania (5.19).

Jak podkreślają Rosochowski i Olejnik (1988) [209] jeżeli znamy porowatość początkową ξ_0 to mierząc względną zmianę gęstości ($-\frac{\Delta\rho}{\rho_0}$) możemy znaleźć aktualną wartość parametru osłabienia ξ . Jeżeli $\xi_0 = 0$, to ξ równa się bezpośrednio ($-\frac{\Delta\rho}{\rho_0}$). Tak więc, za pomocą pomiarów makroskopowych względnej zmiany gęstości, można określić wielkość uznawaną za parametr wewnętrzny materiału. Z punktu widzenia weryfikacji opisu konstytutywnego, jest to bardzo wygodne. Jednak tak określony parametr ξ nie można nazywać parametrem

wewnętrznym, przyjmując definicję parametrów wewnętrznych zaproponowaną w pracach: Rice (1971) [204] lub Perzyny i Wojno (1976) [186]. Podstawową jednak wadą tej metody jest jej nieskuteczność w pomiarach lokalnych co podkreślają Rosochowski i Olejnik (1988) [209]. Wyniki są średnią z całej badanej objętości, dlatego też wymagane są próbki, które doznały tylko jednorodnego odkształcenia. Dodatkowy problem stanowi także określenie porowatości początkowej ξ_0 . Bez względu jednak na trudności wydaje się, że zalety związane z przyjęciem porowatości ξ jako parametru osłabienia są widoczne i praktycznie uzasadnione. Jednak jak wynika z powyższych rozważań, przyrost objętości pustek spowodowany ich zarodkowaniem jest niemożliwy do wykrycia za pomocą pomiarów względnej zmiany gęstości materiału. Przyczyną jest utożsamianie nowo powstających pustek z cząsteczkami drugiej fazy lub wtrąceniami będącymi ich źródłem. Dopiero w wyniku dalszego plastycznego odkształcania się otoczenia pustki, czyli materiału osnowy wokół pustki, pustki te doznają wzrostu, co objawia się już zmianą gęstości materiału. Cenne i wartościowe są wszelkie rezultaty eksperymentalne i te dla względnej zmiany gęstości, które można znaleźć w pracach: Palmer i Mellor (1980) [164], Rosochowski i Olejnik (1988) [209] oraz w wielu innych.

5.2 Zarodkowanie pustek w stali sferoidalnej

Fizyczna interpretacja poszczególnych składników równania ewolucji (5.7) wynika z dotychczasowych rozważań. Sam człon wzrostu ξ_g , powinien uwzględniać wrażliwość na ciśnienie hydrostatyczne, tak jak w opisie Rice i Tracey (1969) [203] i decyduje on o zmianie porowatości polegającej na rozwoju już istniejących pustek i zachodzącej w warunkach, gdy wskaźnik trójosiowości naprężenia $\frac{\sigma_m}{\sigma_e} \neq 0$. Dla określenia tego wyrażenia potrzebna jest tylko znajomość warunku plastyczności i prawa płynięcia. Drugi człon w równaniu ewolucji (5.7) decyduje o zmianie porowatości ξ_n zachodzącej niezależnie od wskaźnika trójosiowości naprężenia i jest wywołany samym odkształceniem plastycznym (kryterium odkształceniowe powstawania pustek). Badania mikroskopowe Gurlanda (1972) [85] oraz pomiary Olejnika (1986) [163] pokazują, że obserwuje się przyrost objętości pustek nawet przy próbach skręcania materiału. Ponieważ tradycyjnie rozumiany rozwój pustek jest w tych warunkach niemożliwy, Gurland (1972) [85], Rosochowski i Olejnik (1988) [209] założyli, że jest on związany z zarodkowaniem pustek. Zarodkowaniu pustek przy skręcaniu towarzyszy poślizg po granicach ziaren co powoduje pęknięcie i następnie przemieszczanie się cząstek drugiej fazy usytuowanych na tych granicach. Prawdopodobnie jest to przyczyna postępującego wzrostu porowatości.

Różniczkując zależność na porowatość ξ zdefiniowaną za pomocą $\xi = \frac{V_p}{V}$, otrzymamy dla danego elementu materiału (zakładając $\dot{V}_p = \dot{V}$)

$$\dot{\xi} = (1 - \xi) \frac{\dot{V}}{V} . \quad (5.21)$$

W rozdziale 5.1.1 określono równanie ewolucji (5.6) dla porowatości ξ i wynikało ono z równania ciągłości (5.2). Równanie ewolucji dla ξ ma postać (patrz wzór (5.6))

$$\dot{\xi} = (1 - \xi) D_{kk}^p .$$

Prędkość dylatacji D_{kk}^p wynika z prawa plastycznego płynięcia. Jeżeli przyjmujemy tak jak np. Rudnicki i Rice (1975) [210], Rosochowski i Olejnik (1988) [209], Saje, Pan i Needleman (1982) [214], że prawo to jest niestowarzyszone, to powyższe równanie można zapisać jako

$$\dot{\xi} = (1 - \xi)(\hat{g} + \hat{h})\dot{E}_e , \quad (5.22)$$

gdzie \hat{g} jest wielkością odpowiadającą za wzrost pustek, \hat{h} odpowiada powstawaniu nowych pustek a E_e jest makroskopowym odkształceniem ekwiwalentnym agregatu (osnowa+pustki) oznaczonym tak jak w pracy Gursona (1975) [86] dużą literą.

Porównując wzory (5.21) z (5.22) oraz zakładając $\hat{g} = 0$, możemy napisać

$$\hat{h} = \frac{1}{V} \frac{dV|_{\hat{g}=0}}{dE_e} , \quad (5.23)$$

gdzie $dE_e = dt\dot{E}_e$ a \dot{E}_e jest makroskopową ekwiwalentną prędkością odkształcenia. W celu określenia \hat{h} w (5.23) należy skorzystać z upraszczającego założenia o proporcjonalności pomiędzy przyrostem objętości $dV|_{\hat{g}=0}$ i przyrostem ilości pustek dn_p w rozpatrywanym elemencie materiału

$$dV|_{\hat{g}=0} = \psi_1 dn_p , \quad (5.24)$$

gdzie w danym elemencie: $\psi_1 \geq 0$ jest współczynnikiem proporcjonalności (tak jak w pracach: Gursona (1975)[86], Kwon i Asaro (1990) [114] lub Rosochowski i Olejnik (1988) [209], zakłada się, że jest on stały dla danego materiału). W równaniu (5.24) założono, że $n_p = n_p(E_e)$ i jest to ilość pustek (ilość wtrąceń i cząstek będących źródłem pustek), która z założenia jest wynikiem zarodkowania zależnego tylko od odkształcenia osnowy bez efektu wzrostu pustek

wówczas mamy $E_e = \varepsilon_e$. Przekształcając (5.23) i biorąc pod uwagę definicję ξ , można określić \hat{h} jako

$$\hat{h} = (1 - \xi)\psi_1 \frac{n_c}{V - V_p} \frac{d\left[\frac{n_p}{n_c}(E_e)\right]}{dE_e}, \quad (5.25)$$

gdzie w danym elemencie objętości V : $n_c = \text{const}$ to ilość wszystkich wtrąceń i cząstek o określonej masie, $\frac{n_c}{V - V_p} = \text{const}$ - gęstość wszystkich wtrąceń i cząstek w litym materiale, $\frac{n_p}{n_c}(E_e)$ - udział pustek (udział wtrąceń i cząstek będących źródłem pustek).

Wielkość $\psi_1 n_c / (V - V_p)$ zwykle tak jak w pracy Rosochowski (1985) [208] można traktować jako nową stałą materiałową. Oznaczając ją jako ψ otrzymamy

$$\hat{h} = (1 - \xi)\psi \frac{d\left[\frac{n_p}{n_c}(E_e)\right]}{dE_e}. \quad (5.26)$$

W tej propozycji uwzględnia się w rozważaniach udział pustek wynikający z cząstek popękanych lub oddzielonych od osnowy $\frac{n_p}{n_c}(E_e)$. Tak jak w kilku pracach: Argon i Im (1975) [5], Fisher (1980) [68], Kwon i Asaro (1990) [114] można znaleźć doświadczalne i teoretyczne wykresy $\frac{n_p}{n_c}(E_e)$, dające wyobrażenie o przebiegu zjawiska. Wobec niezmienności w czasie deformacji liczby wszystkich cząstek lub wtrąceń n_c , cenne są również wykresy $n_p(E_e)$ np. w pracy Kwon i Asaro (1990) [114]. Podobnie jak w pracach cytowanych powyżej trzeba podkreślić, że za pomocą samych obserwacji mikroskopowych otrzymujemy tylko wielkości odniesione do jednostki powierzchni, a nie do jednostki objętości. Rezultaty w wymienionych pracach dotyczą różnych materiałów, ale są to rezultaty dla jednoosiowego rozciągania. Ustalono zależności $\frac{n_p}{n_c}$ w funkcji makroskopowego odkształcenia ekwiwalentnego E_e lub mikroskopowego ε_e są liniowe, quasi-liniowe lub znacząco nieliniowe (często w kształcie łagodnej funkcji logistycznej lub w kształcie funkcji przypominającej literę S). W różnych pracach ustalono różne największe wartości $\frac{n_p}{n_c}$ i wynoszą one dla różnych materiałów od kilkunastu do około 50% (dla stali).

W powyższych rozważaniach wykorzystano opis powstawania pustek w oparciu o kryterium krytycznego odkształcenia plastycznego. Jak pokazano w rozdziale 5.1.2 i w oparciu o prace Chu i Needleman (1980) [43] lub Needleman i Rice (1978) [144], można wykazać, że istnieje równoważność pomiędzy naprężeniowym i odkształceniowym kryterium powstawania pustek. Kryterium odkształceniowe jest prostsze od naprężeniowego i nie zachodzi po-

trzeba sprawdzania, czy zarodkowanie pustek nastąpiło czy też nie, gdyż bez względu na przyrost naprężenia decydującym jest, zawsze dodatni przyrost odkształcenia ekwiwalentnego E_e . Propozycja Rosochowski i Olejnik (1988) [209] ma wiele wspólnych cech z koncepcją opisu zarodkowania według Chu i Needlemana (1980) [43]. Natomiast jedna z ważniejszych różnic polega na tym, że określa się w niej objętościowy udział pustek, a nie objętościowy udział wtrąceń i cząstek będących ich źródłem. Obydwa podejścia różnią się argumentem, którym w pracy Chu i Needlemana (1980) [43] jest wielkością mikroskopową ε_e , a w propozycji Rosochowski i Olejnik (1988) [209] wielkością makroskopową E_e . Związek pomiędzy prędkościami tych wielkości wynika z równoważności mocy. Jak uzasadniają Rosochowski i Olejnik (1988) [209] z praktycznego punktu widzenia wygodniejszą miarą jest odkształcenie E_e , gdyż może być ono, określone za pomocą pomiarów makroskopowych.

5.2.1 Równanie ewolucji porowatości stali niskowęglowej opartej na względnej zmianie gęstości

Najważniejszą cechą równań ewolucji (5.7) i (5.22) jest uwzględnienie zarodkowania pustek. Istotne jest pytanie czy można określić zarodkowanie pustek z pomiarów względnej zmiany gęstości. W pracy Rosochowski i Olejnik (1988) [209] przyjęto założenie, że w swojej 'czystej' postaci zarodkowanie objawia się zmianą gęstości podczas skręcania, ale zachodzi, oczywiście, także w każdym innym procesie, mając wpływ na ostateczną zmianę gęstości wynikającą ze wzrostu pustek. Taka prosta koncepcja opisu zarodkowania jak w pracy Rosochowski i Olejnik (1988) [209] za pomocą współczynnika \hat{h} jest niewątpliwie tylko przybliżeniem. W pracy Rosochowski i Olejnik (1988) [209] tak rozumiane zarodkowanie pustek zależy od wielu szczegółowych cech mikrostruktury materiału oraz od historii obciążenia (szczególnie od naprężenia hydrostatycznego). O przydatności propozycji opisu ewolucji porowatości przez Rosochowskiego i Olejnika (1988) [209], tak jak w każdym innym przypadku może zaświadczyć jedynie porównanie opisu teoretycznego z pomiarem doświadczalnym. Dzięki bezpośredniej zależności wyrażonej równaniem (5.20) pomiędzy porowatością ξ a względną zmianą gęstości ($-\Delta\rho/\rho_0$), Rosochowski i Olejnik (1988) [209] badali czy istnieje taka zgodność, wykorzystując własne wyniki pomiarów ($-\Delta\rho/\rho_0$) dla stali perlitycznej 0.1%C, jakie uzyskano w próbie skręcania i rozciągania z walcowaniem (w celu wyeliminowania szyjkowania).

Końcowe rezultaty prac [208, 209] pokazują, że względna zmiana gęstości wraz ze wzrostem odkształcenia charakteryzuje się coraz większym rozrzutem.

Autorzy tłumaczą to tym, że nawet małe różnice w porowatości początkowej ξ_0 powodują wielokrotnie intensywniejszy wzrost pustek. Określenie porowatości początkowej, występującej w materiale wyjściowym na skutek procesów metalurgicznych i wcześniejszej obróbki plastycznej na gorąco lub na zimno, jest trudne. W obliczeniach numerycznych do rozwiązania równania ewolucji $-\frac{\Delta\rho}{\rho_0}$ dla skrećania Rosochowski i Olejnik przyjęli $\xi_0 = 0.0012$. Dodatkowo poczyniono pewne założenia co do charakteru i największej wartości osiągniętej przez udział pustek $n_p/n_c \approx 0.33$. Tak więc, opis ewolucji pustek przy wykorzystaniu względnej zmiany gęstości daje zadawalające wyniki o ile znamy przede wszystkim wielkość porowatości początkowej ξ_0 oraz wskaźnik trójosiowości naprężeń (dla badań w pracy Rosochowski i Olejnik (1988) [209] $\frac{\sigma_m}{\sigma_e} \geq 0.27$).

Podsumowanie

W rozdziale 5 dokonano przeglądu istniejących opisów ewolucji porowatości materiału z mikrouszkodzeniami i analizowano rolę cząstek drugiej fazy lub wtrąceń na plastyczne zachowanie się materiałów ciągliwych. Sztywne wtrącenia, które są źródłem (miejscem) zarodkowania pustek wpływają na sformułowanie modelu materiału i należy je uwzględnić w opisie. Mechanizm powstawania pustek wpływa na postać funkcji uplastycznienia (kryterium odkształceniowe lub naprężeniowe). Materiał osnowy oraz zachowanie agregatu jako całości idealizuje się jako izotropowe. W opisie konstytutywnym zaproponowanym przez Gursona (1975) [86] korzysta się z wielu zmiennych niezależnych takich jak: parametr wzmocnienia, porowatość początkowa, udział wtrąceń i cząstek będących źródłem pustek ($\frac{n_p}{n_c}$) oraz makroskopowe pole prędkości deformacji $\dot{\mathbf{E}}$. Proces płynięcia plastycznego materiału z pustkami zależy od porowatości. Postać potencjału plastycznego posiada człony, które są funkcją pierwszego niezmiennika naprężenia, co dla agregatu oznacza jego plastyczną zmianę objętości. Osnowa pozostaje nieściśliwa, a zmiana objętości wynika w całości, ze zmiany objętości pustek. Deformacja agregatu związana jest ze zjawiskiem wzmocnienia osnowy, osłabienia wynikającego ze wzrostu pustek i osłabienia związanego z zarodkowaniem nowych pustek. Nawet wtedy gdy osnowa umacnia się agregat (osnowa+pustki) może się osłabiać.

Przewidywania teoretyczne i symulacje numeryczne według modelu Gursona porównuje się z wynikami eksperymentalnymi a rozbieżności tłumaczy się niedoskonałością opisu oddziaływania pustek, założeniem izotropowości co przy dużych odkształceniach plastycznych wiąże się z pomijaniem ważnych efektów anizotropowych. Pomija się także mikrostrukturę materiału osnowy

na tworzenie się pustek. Pustki mogą powstawać na granicy ziaren lub w miejscach narastania dyslokacji. Oddziaływanie między pustkami i uwzględnienie bardziej ogólnego ich kształtu (oryginalna pustka sferyczna może być modelowana jako wydłużona elipsoida) może poprawić tę zgodność. Pustki mogą powstawać przez dekohezję materiału osnowy od cząstek lub pękanie cząstek. Siły przenoszone wcześniej przez cząstki (wtrącenie) po ich pęknięciu lub oddzieleniu od osnowy są uwalniane i wpływają na funkcję uplastycznienia. Ten spadek wytrzymałości zwykle jest symulowany przez odpowiedni przyrost parametru porowatości. W pracy Becker i inni (1988) ([18]) założono, że wzrost tych nowo utworzonych pustek można zaniedbać a przyrost porowatości spowodowany zarodkowaniem (nukleacją) pustek nie jest sprzężony ze wzrostem pustek opisanym w rozdziale 5. Wzrost nowo powstałych pustek jest uwzględniany w algorytmie numerycznym w następnym kroku obliczeniowym. Zarodkowanie pustek można uwzględnić na kilka sposobów i jest to szczególnie proste przy powyższych założeniach. W pracy Becker i inni (1988) [18] w celu uniknięcia błędów związanych z potencjalnymi dużymi zmianami w odształceniach w przedziale kroku całkowania, prędkość nukleacji nie jest całkowana numerycznie, lecz wykorzystuje się jej analityczną formę całkowania z użyciem funkcji błędów, a przyrost funkcji nukleacji określa się, jako różnica między funkcjami błędów:

$$\Delta\xi_n = \frac{1}{2}\xi_N \left[\operatorname{erf} \left(\frac{\varepsilon_e + \dot{\varepsilon}_e \Delta t - \varepsilon_N}{\varepsilon_S \sqrt{2}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{\varepsilon_e - \varepsilon_N}{\varepsilon_S \sqrt{2}} \right) \right]$$

Modele zarodkowania pustek oparte o kryterium krytycznego odkształcenia i krytycznego naprężenia zaproponowane przez Chu i Needlemana (1981)([43]) mają podobną postać. Kryterium odkształceniowe powstawania pustek odnosi się do sytuacji gdy nukleacja powstaje w wyniku niezgodności odkształcenia (ich niedopasowania) pomiędzy cząsteczką drugiej fazy i osnową. Kryterium to dotyczy również nukleacji pustek wynikających z pęknięcia cząstek. Kryterium naprężeniowe bazuje na naprężeniu hydrostatycznym i uwzględnia dekohezję lub pękanie cząstek w wyniku wysokich naprężeń rozciągających na powierzchni przylegania (międzyfazami) lub wewnątrz cząstki. W wielu pracach przyjmuje się, że prędkość nukleacji przebiega zgodnie z rozkładem normalnym, symetrycznym względem pewnego przedziału odkształcenia. Dla małych odkształceń nie obserwuje się nukleacji. Dla dużych wartości odkształceń prędkość nukleacji rośnie. Prędkość nukleacji spada, gdy odkształcenie przekracza pewną wartość i gdy większość cząstek, które mogą stać się źródłem pustek już nimi się stała. Parametrami w tak określonym modelu nukleacji są:

- ułamek pustek które mają powstać, ξ_N ;
- wartość średnia odkształcenia względem której nukleacja następuje, ε_N ;
- odchylenie standardowe, ε_S ;
- zmienna określająca stan procesu nukleacji, ε_e .

Równanie ewolucji wzrostu pustek już istniejących jest funkcją zmiany plastycznej dylatacji (plastycznej zmiany objętości) i jest dane wzorem (5.17) lub (5.18) (patrz Gurson (1975) [86], Perzyna (1986) [173]). Ułamek pustek powiększa się również dzięki powstawaniu nowych pustek w wyniku pęknięcia cząstek drugiej fazy lub oddzielania się cząstek od materiału osnowy. Powstałe pustki rosną lecz nie ma plastycznych zmian objętości związanych ze zjawiskiem nukleacji. Dla prostoty zwykle przyjmuje się że wzrost nowo powstałych pustek jest pomijalny w kroku obliczeniowym. Nowo powstałe pustki wpływają jednak na funkcję uplastycznienia ale nie wpływają na zależność opisującą wzrost pustek. Ponieważ zarodkowanie nowo powstałych pustek nie wpływa na wzrost pustek w tej samej chwili obliczeń (przyroście) model nukleacji wówczas może być rozdzielony od modelu wzrostu pustek.

Zarodkowanie pustek oparte na kryterium progowego odkształcenia jest znacznie prostsze niż w oparciu o kryterium naprężeniowe. Opis zarodkowania pustek opracowany na bazie rezultatów Gurlanda, dotyczy prędkości pęknięcia cząstek drugiej fazy z odkształceniem oraz/lub dekohezji cząstek od osnowy. W przeciwieństwie do opisu wykorzystującego kryterium naprężeniowe, opis oparty na kryterium progowego odkształcenia posiada cechę stopniowego narastania i nie obserwuje się nagłego spadku odkształcenia końcowego. Całkowite odkształcenie do zniszczenia wzrasta jak koncentracja cząstek drugiej fazy maleje, z możliwością osiągnięcia dużej wartości gdy porowatość początkowa i koncentracja cząstek drugiej fazy maleje do zera. Zachowanie agregatu może być interpretowane w zadawalający sposób. Dla małych zakresów porowatości obliczenia numeryczne są w zgodzie z rezultatami eksperymentalnymi. Rozbieżności narastają, ze wzrostem ξ i opis wymaga ulepszenia lub poprawy. Należy rozważyć poczynione założenie związane z izotropią własności agregatu. Dodatkowo dla dużych odkształceń dewiatorowych stałość kształtu pustek staje się mało odpowiednie. Co wynika z porównania warunku uplastycznienia dla pustek sferycznych i cylindrycznych. Kształt pustek ma silny wpływ na proces ich wzrostu. Istotny jest również sposób modelowania oddziaływań wzajemnych między pustkami. Gurson rozważał pustki w geometrycznie podobnej

osnowie. Dla dużych ξ użycie geometrycznie podobnych zewnętrznych brzegów dla osnowy może mieć wpływ na stan płynięcia plastycznego pomiędzy sąsiadującymi pustkami. Jest to widoczne w pracach dotyczących dwuwymiarowych rozwiązań dla agregatów z periodycznym układem pustek. Thomason (1985) [238] poszukiwał warunków występowania skoncentrowanego płynięcia plastycznego 'szyjkowania' pomiędzy pustkami. Needleman (1972) [139] pokazał, że obszary plastyczne nigdy nie obejmują całej osnowy. Inny jeszcze aspekt oddziaływania pustek ujawnia się gdy rozważymy losowość rozkładu pustek w osnowie. Lokalna wartość ξ może wtedy różnić się od wartości średniej a lokalne obszary mogą być w różnie zaawansowanych stanach plastycznego płynięcia. Zachowanie agregatu może być odmienne od zachowania modelu z jedną pustką. Opis umacnianie się materiału jest dodatkową trudnością. W opisie nukleacji pustek należy również uwzględnić strukturę 'czystego' materiału osnowy bez wtrąceń i cząstek drugiej fazy. Gdy inne źródła powstawania pustek są nieobecne (brak cząstek drugiej fazy) pustki mimo to powstają w ziarnach i na granicy ziaren. Odpowiedzialny za to jest mechanizm dyslokacyjny.

6. Lokalizacja odkształceń plastycznych w metalach

Wstęp

Potrzeba zrozumienia i konieczność opisu zjawiska lokalizacji wynika z faktu, że lokalizacja zazwyczaj poprzedza proces ciągłego zniszczenia materiałów. W tym rozdziale zostanie sformułowany problem lokalizacji odkształceń plastycznych z zastosowaniem sprężysto-lepkoplastycznego modelu materiału. Rozważono też efekt osłabienia temperaturowego i wrażliwości materiału na prędkość odkształcenia. Motywacja fizykalna zastosowania takiego modelu została podana przez Perzynę (1971) [169]. Celem naszej analizy jest identyfikacja stałych materiałowych w opisie powstawania zlokalizowanych pasm ścinania.

6.1 Dynamiczne własności metali

Od początku lat 50-tych w literaturze pojawiło się wiele prac wskazujących na fakt, że zachowanie się plastyczne materiału zależy od prędkości odkształcenia. Wszechstronny przegląd tych badań przeprowadzono w książce Perzyny (1987) [170]. Podczas obciążeń dynamicznych ulega podwyższeniu granica plastyczności materiału, która może osiągnąć wartość kilka razy większą niż wartość przy obciążeniach quasi-statycznych. Istotnym efektem podczas deformacji niesprężystych (plastycznych, lepkoplastycznych) jest zmiana temperatury. Wzrost temperatury (obserwowany i mierzony w eksperymentach) wynika z wydzielania się ciepła podczas takich deformacji. W procesach dynamicznych przebiegających bardzo szybko odpływ ciepła jest bardzo mały a samo ogrzewanie występuje lokalnie w miejscach największych odkształceń. Uzasadnione jest w wielu przypadkach przyjąć, że proces termiczny w warunkach dynamicznych jest adiabatyczny. Podczas lokalizacji odkształceń niesprężystych następuje jeszcze szybszy wzrost temperatury z powodu wzrostu prędkości odkształcenia oraz dodatkowo w wyniku koncentracji naprężeń związanych z niejednorodnościami w materiale spowodowanymi mikrouszkodzeniami materiału. Zmiany temperatury różnych materiałów w różny sposób odzwierciedlają wewnętrzne zjawiska na poziomie mikrostruktury. W procesach adiabatycznych lokalizacji odkształceń niesprężystych ważnym czynnikiem zachowania materiału jest przemiana części pracy odkształcenia niesprężystego na ciepło. Przemiana ta następuje dla każdego materiału w różnych proporcjach i ustala się ją w oparciu o eksperyment. Współczynnik przemiany części pracy odkształcenia na ciepło jest przyjmowany jako uśredniona wartość. Dla metali średnio 80-90% pracy odkształcenia zamienia się na ciepło.

6.1.1 Zachowanie się polikryształów

Badania doświadczalne wykonane na materiałach polikrysztalicznych wykazały, że dominującym mechanizmem deformacji niesprężystych jest mechanizm termicznej aktywacji. W zakresie temperatur od 20 do 570 °C i dla prędkości odkształcenia w zakresie od 10^{-3} do 10^4 s⁻¹, wiele eksperymentów potwierdziło lepki charakter mechanizmu niesprężystego płynięcia i konieczność użycia w opisie konstytutywnym parametru (czasu relaksacji) określającego lepkość materiału. Obserwowane doświadczalnie powstawanie pasma zlokalizowanego ścinania zwykle ma skończony wymiar. Szerokość tego pasma ścinania w przypadku próbek stalowych jest rzędu od kilkuset do kilkudziesięciu mikrometrów. Przy czym porównanie przebiegu procesu deformacji w samym obszarze pasma i poza nim wykazało ogromne różnicowanie. Odkształcenia w pasmie mogą przekraczać nawet 600% (stal 1018, Marchand i inni (1988) [131]), a prędkość deformacji w tym obszarze osiąga wielkości rzędu od 10^3 do 10^5 s⁻¹. Również sama temperatura i jej pomiar lokalny pokazały jej szybki wzrost w końcowym etapie odkształcenia. Obserwacje mikrostruktury za pomocą mikroskopów pozwoliły stwierdzić, iż termomechanicznemu powstawaniu pasm ścinania towarzyszą mechanizmy mikrozniszczeń. W materiałach ciągliwych wzdłuż pasm ścinania obserwuje się mikropęknięcia i szybki wzrost sąsiadujących mikropustek aż do ich łączenia się w makropęknięcie co uznawano za przyczynę postępującego zniszczenia próbek.

6.1.2 Charakterystyki materiałowe

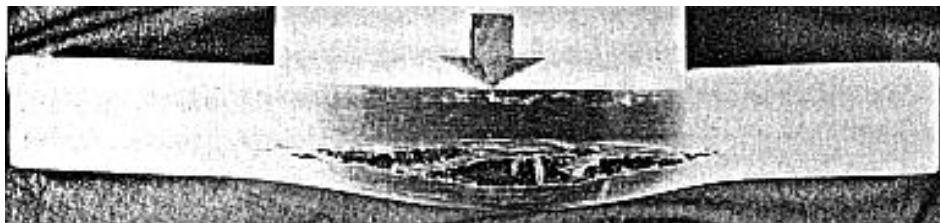
Próba dynamicznego rozciągania metali służy do wyznaczania podstawowych właściwości mechanicznych w różnym zakresie prędkości odkształcenia. Ustalenie odkształcenia do zniszczenia (ciągliwości) dla danego materiału i miejsce zerwania się próbki jest podstawowym rezultatem oceny danego materiału. Dla próbek cylindrycznych obserwuje się powstawanie szyjki. W próbach dynamicznych istotnym efektem jest efekt bezwładnościowy. Ma on wpływ na miejsce formowania się szyjki i wystąpienie zerwania (szyjka występuje nawet przy braku wewnętrznych wad w materiale). Dla małych i średnich prędkości odkształcenia, lokalizacja odkształcenia w formie szyjki powstaje głównie z powodu nawet minimalnych imperfekcji geometrycznych lub materiałowych. Przy dużych prędkościach odkształcenia przekraczających 10^3 s⁻¹ istotne znaczenie mają efekty bezwładnościowe. Wynika to z dynamicznej natury zjawiska, któremu towarzyszy propagacja fal naprężenia i powstająca niejednorodność stanu naprężenia i deformacji (patrz Nowacki (1974) [154, 153], Nilsson (2001) [151]).

Wnioski te potwierdzają badania przeprowadzone i opisane w pracach: Nilssona (2001) [151], (2004) [150], Nemesa i Eftisa (1993) [148]. Badania te pokazały, że biorąc pod uwagę wymiary próbek i ich proporcje (długość, średnicę) wystąpienie szyjki zależało przede wszystkim od zjawisk falowych.

Inną prostą próbą do badania zjawiska lokalizacji odkształcenia jest próba skręcania dynamicznego. Najczęściej cytowane prace dotyczące tej próby to prace eksperymentalne Duffy'ego z jego współpracownikami (1971) [59], (1987) [91], (1988) [130]. Badania te przeprowadzano dla różnych metali poddawanych dynamicznemu skręcaniu z użyciem zmodyfikowanego pręta Hopkinsona. W testach tych prawie zawsze powstawała strefa pasm ścinania. Pasma rejestrowano kilkoma kamerami w całym procesie skręcania co pozwala na ustalenie chwili zniszczenia próbek. Ustalono również szerokość pasma ścinania i pasmo to miało wymiar na tyle duży, że wewnętrzne ścięcie wynikało z propagacji makroszczeliny. Pomierzona szerokość pasma ścinania, w zależności od rodzaju stali wynosiła 30–1000 μm . Przebieg procesu trwał zwykle 450–500 μs . W samym paśmie ścinania wielkość odkształcenia narastała od 15 %, zwykle do 150–600%, a dla dużych prędkości skręcania odkształcenia osiągały nawet wartości 900 % w centrum pasma (stal HY100, Marchand i Duffy [130]). Dodatkowo mierzono w czasie eksperymentu zmianę temperatury w pasmach ścinania. Narastanie temperatury rozpoczynało się wraz z deformacjami niesprężystymi a jej wyraźny lokalny wzrost obserwowano z chwilą ukształtowania się pasma ścinania. Zaobserwowano wzrost temperatura od początkowej wartości 20 °C do wartości z zakresu pomiędzy 200 a 575 °C. Dla pewnych stali przy bardzo szybkich procesach skręcania mierzona temperatura, wynosiła 748 °C (stal HY100, Marchand i Duffy [130]).

Badanie zjawiska zniszczenia łatwo jest również przeprowadzić w próbach zderzenia dwóch metalowych płytek (ang. *plate impact*). Dla ciągliwego aluminium badania takie przeprowadzono w pracach Curran i inni np. (1977) [50], (1987) [51]. W eksperymentach tych badano zniszczenie przez rozłupanie (rozdzielenie) (ang. *spalling*), uderzona płytka ulegała rozdzieleniu na dwie części. Odbijanie i nakładanie się fal w uderzonej płytce tarczy przez płytkę uderzającą, wytwarzało bardzo silny impuls powodujący wewnętrzne nakładanie się fal i powstanie naprężeń rozciągających. Całkowite zniszczenie przez rozdzielenie dla stali (AISI 1008) zaprezentował w pracy przeglądowej Meyers i Aimone (1983) [136]. Przykład zniszczenia w w takim teście przedstawiono na rysunku 6.1 pochodzącym z pracy Meyers i Aimone (1983) [136].

Tego typu eksperyment dla zderzenia płytek służył do wyznaczania parametrów materiałowych w równaniach konstytutywnych przy dużych deforma-



Rys. 6.1. Przykład zniszczenia w teście płyta–płyta z pracy Meyers i Aimone (1983) [136].

cyjach i prędkościach odkształceń w pracy Cliftona (2000) [47].

Oprócz badań doświadczalnych przeprowadzono wiele symulacji numerycznych prób rozciągania, skręcania i zderzania dwóch płytek. Analizy numeryczne dla takich prób opublikowano w pracach: Batra (1998, 1994) [15, 14], Glema i inni (1997) [79], Łodygowski i Perzyna (1997) [127], a także Zbib i Jurban (1992) [249].

6.2 Lokalizacja jako niestabilności procesu deformacji

W teorii plastyczności lokalizacja odkształceń jest traktowana jako zagadnienie niestabilności procesu deformacji. Przyczyną takiej niestabilności są niejednorodności w materiale. Przejście z obszaru jednorodnych odkształceń do obszaru odkształceń niejednorodnych wykorzystuje się w kryteriach matematycznych wystąpienia lokalizacji jako niestateczności materiałowej. Pojawienie się obszaru niejednorodnych deformacji w opisie problemu brzegowego sprawia, że układ równań różniczkowych opisujący zagadnienie lokalizacji odkształceń plastycznych traci swój eliptyczny charakter dla zagadnień statycznych. Natomiast wystąpienie obszarów zlokalizowanego odkształcenia w zagadnieniach dynamicznych skutkuje tym, że problem początkowo-brzegowy przestaje być hiperboliczny.

Lokalizację odkształceń plastycznych określa się przez ustalenie, kiedy następuje zmiana typu układu równań różniczkowych opisujących sprężysto-plastyczne ciało stałe tak jak w pracy Rice'a (1976) [205], Needlemana i Rice'a (1987) [144] czy Rudnickiego i Rice'a (1975) [210]. Za kryterium lokalizacji przyjmuje się chwilę w której zostanie osiągnięty punkt bifurkacji zdefiniowany w następujących pracach (Hill (1958) [93], Rice (1976) [205], Loret i Prevost (1990) [120], Petryk (2000) [187]). Istotą metody bifurkacji jest rozwiązanie problemu własnego i określenie stanu układu w punkcie niestateczności. Następnie wylicza się wartości i kierunki własne w tym punkcie co pozwala

wyznaczyć miejsce i kierunki lokalizacji. Samo kryterium jest matematyczne i przyjmuje, że szerokość pasma może zbiegać do zera co nie odzwierciedla fizycznie faktu, że obszar lokalizacji jest w rzeczywistości pasmem o skończonej szerokości. Dzięki tej metodzie można określić sam początek wystąpienia zjawiska i wpływ różnych parametrów na jego wystąpienie. Taki opis lokalizacji nie pozwala jednak śledzić procesu aż do zniszczenia.

6.3 Zregularyzowane sformułowanie zadania deformacji niesprężystych

Istnieje wiele sposobów matematycznej regularyzacji zagadnienia plastyczności. W tej pracy wykorzystano regularyzację przez uwzględnienie lepkich właściwości materiału. Przyjęcie modelu materiału zależnego od prędkości deformacji sprawia, że operator układu równań opisujący zachowanie ciała sprężysto-lepkoplastycznego nie zmienia typu i problem jest poprawnie postawiony. Parametr lepkości jest bezpośrednim parametrem regularyzującym (patrz prace Perzyny (1994, 1995) [176, 178], Simo i Hughes [221]). Takie sformułowanie deformacji niesprężystych (plastyczność zależna od prędkości odkształcenia) daje poprawne sformułowanie matematyczne i poprawne rozwiązania numeryczne. W problemach lokalizacji poprawność wynika z faktu, że lepkość stanowi wewnętrzny parametr skali zjawiska lokalizacji odkształceń plastycznych. Takie ujęcie zjawiska pozwala na analizę zaawansowanych deformacji, a rozwiązanie zadania jest jednoznaczne.

W rozprawie przyjmuje się, że zjawisko lokalizacji odkształceń niesprężystych powstaje i rozwija się w lokalnej strefie o deformacjach, kilkakrotnie przewyższających deformacje w obszarach sąsiadujących. Proces jest zregularyzowany przez wprowadzenie związku konstytutywnego zależnego od prędkości odkształcenia.

6.4 Numeryczna symulacja adiabatycznych procesów lokalizacji odkształcenia wzdłuż pasm ścinania

6.4.1 Wstęp

Rozdział ten jest poświęcony numerycznej symulacji adiabatycznych procesów lokalizacji odkształcenia wzdłuż pasm ścinania. Problem opisuje się stosując teorię termolepkoplastyczności w ramach struktury materiałów typu prędkościowego, z parametrami wewnętrznymi (patrz: Duszek-Perzyna i Perzyna (1994)[60]). Jako parametru regularyzacji użyto czasu relaksacji T_m . Zakła-

dając szczególny przypadek, że czas relaksacji zmierza do zera, rozpatrzono przypadek deformacji niezależnych od prędkości odkształceń. Taka procedura regularyzacji przez parametr lepkości, zapewnia stabilność algorytmu całkowania, przy korzystaniu z metody elementów skończonych co pokazano w pracy Łodygowski i Perzyna (1997)[127].

W wielu procesach technologicznego dynamicznego kształtowania metali proces zniszczenia jest wynikiem powstania i rozwoju zlokalizowanych adiabaticznych pasm ścinania. Pasma te są wynikiem plastycznej niestabilności procesu deformacji na skutek termicznego osłabienia materiału oraz generowaniu się wewnętrznego mechanizmu mikrouszkodzenia w czasie deformacji plastycznych. Hartley, Duffy i Hawley (1987)[91], Marchand i Duffy (1988)[130], Marchand, Cho i Duffy (1988)[131] oraz Cho, Chi i Duffy (1988)[42] opublikowali wyniki obserwacji mikroskopowego powstawania i rozwoju pasm ścinania w czasie skręcania cienkościennych rurek stalowych przy pomocy skrętnego pręta Hopkinsona z prędkościami odkształceń około 10^3 s^{-1} i odkształceniami ścinającymi wystarczającymi do wytworzenia pasm ścinania. W pracach tych badania przeprowadzono dla trzech różnych stali.

W obecnej pracy w sposób szczególny analizowano problem dobrego sformułowania problemu ewolucji oraz znalezienia jego rozwiązania numerycznego. Obliczenia numeryczne przeprowadzono przy pomocy metody elementów skończonych z wykorzystaniem systemu ABAQUS. Zregularyzowany model sprężysto-plastyczny rozwiązano numerycznie dla trójwymiarowych, adiabaticznych, deformacji cienkościennych rurek stalowych z nominalnymi prędkościami odkształcenia w zakresie od 10^3 do 10^4 s^{-1} . Przez porównanie otrzymanych rezultatów, ze znanymi wynikami eksperymentalnymi dla takich samych prób, określono materiałowe funkcje konstytutywne i stałe materiałowe. Do tego celu wykorzystano własne procedury identyfikacyjne pozwalające w najlepszy sposób opisać próby skręcania i przybliżyć się do badań eksperymentalnych. W czasie obliczeń obszar lokalizacji w postaci wąskiego pasma ścinania w cienkich skręcanych rurkach podlega silnym odkształceniom oraz znacznemu ogrzewaniu. Przebieg tego procesu symuluje się numerycznie. Lokalne odkształcenia i lokalne temperatury dla nominalnych prędkości odkształcenia od 1000 s^{-1} do 1600 s^{-1} porównano z wynikami eksperymentalnymi opublikowanymi przez Marchanda, Cho i Duffy'ego (1988)[131] oraz Marchanda i Duffy'ego (1988)[130]. Ustalono, że przy pomocy modelu lepkoplastyczności prawidłowo określa się zasadnicze cechy procesu formowania się pasm ścinania dla miękkiej stali (AISI 1018 Cold Rolled Steel). Stwierdzono również, że gdy czas relaksacji T_m maleje szerokość obszaru lokalizacji także maleje. Obliczono, że maksy-

malny wzrost temperatury w pasmie lokalizacji dla miękkiej stali, w procesie dla nominalnych prędkości odkształcenia 1500 s^{-1} , jest w zakresie $250\text{--}380^\circ\text{C}$, a średnia szerokość pasma wynosi około 0.3 mm .

Celem tego rozdziału jest zastosowanie teorii plastyczności wrażliwej na prędkość odkształcenia, do opisu procesu plastycznego płynięcia z powstawaniem pasm zlokalizowanego dynamicznego ścinania w cienkich próbkach rurkowych, w których generowane są prędkości odkształcenia o zakresie od 10^{-1} do 10^4 s^{-1} (patrz Perzyna (1994, 1995) [177, 178], Łodygowski i Perzyna (1996)[121] oraz Łodygowski [123]).

W następnych rozdziałach opisano i sformułowano i zcharakteryzowano proces adiabatycznego płynięcia plastycznego, rozdziały 6.4.2 – 6.4.4. Rozwiązanie numeryczne problemu początkowo-brzegowego (problem ewolucji) przedstawiono w rozdziale 6.4.5. Rozdział 6.4.6 poświęcony jest analizie wyników numerycznej symulacji powstawania zlokalizowanego pasma ścinania. Próbkę z uchwytami do maszyny i jej wymiary przedstawiono w dalszej części pracy na rysunku 6.2. Analizowana próbka ma długość 2.5 mm i średnicę wewnętrzną 9.5 mm . Grubość ścianki rurki jest równa 0.38 mm .

Sformułowany problem początkowo-brzegowy rozwiązano numerycznie przy pomocy systemu ABAQUS metody elementów skończonych. W analizie numerycznej skupiono się w szczególności na obszarze pasma ścinania, w którym obserwuje się największe deformacje i największy wzrost temperatury. W dalszej części przedstawiono dyskusję rezultatów i porównanie z dostępnymi badaniami eksperymentalnymi.

Podsumowanie i wnioski końcowe przedstawiono w rozdziale 6.5.

6.4.2 Proces adiabatycznego dynamicznego płynięcia plastycznego dla cienkich rurek stalowych

Marchand, Cho i Duffy (1988) badali na skręcanie próbki w kształcie cienkościennych rurek wraz z uchwytami w celu ich zamocowania. Skręcanie w zakresie wysokich prędkości odkształcenia generowano stosując skrętny pręt Kolsky'ego (ang. *split-Hopkinson bar*). Do analizy przyjęto wyidealizowany problem początkowo-brzegowy zakładając, że próbka to część centralna cienkościennej rurki oraz rurka jest w spoczynku; rurka jest w jednolitym polu temperatury i że rurka jest wolna od naprężeń w każdym jej punkcie w chwili początkowej.

W obliczeniach numerycznych różne stałe materiałowe przyjęto za pracą

Costin i inni (1979) dla miękkiej stali (AISI 1018 CRS). Rurkę skręcano z różnymi prędkościami generując nominale prędkości odkształceń ścinających w zakresie $10^3 - 10^4 s^{-1}$.

6.4.3 Sformułowanie problemu adiabaticznego płynięcia plastycznego

Zdefiniujmy proces adiabaticznego płynięcia niesprężystego w sposób następujący (patrz Perzyna (1994, 1995) [177, 178]). Wprowadzamy następujące oznaczenia: \mathbf{u} będzie wektorem przemieszczenia, \mathbf{v} wektorem prędkości, ρ gęstością materiału w konfiguracji aktualnej, $\boldsymbol{\tau}$ będzie tensorem naprężenia Kirchoffa, \mathcal{L}^e będzie macierzą modułów sprężystych i przez ϑ oznaczymy temperaturę. Należy znaleźć \mathbf{u} , \mathbf{v} , ρ , $\boldsymbol{\tau}$ oraz ϑ jako funkcje czasu t i \mathbf{x} tak, aby

(i) układ równań

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{u}} &= \mathbf{v}, \\ \dot{\mathbf{v}} &= \frac{1}{\rho_M} \left(\frac{\boldsymbol{\tau}}{\rho} \text{grad} \rho + \text{div} \boldsymbol{\tau} \right), \\ \dot{\rho} &= -\rho \text{div} \mathbf{v},\end{aligned}\tag{6.1}$$

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{\tau}} &= [\mathcal{L}^e] : \text{symgrad} \mathbf{v} + 2 \text{sym} \left(\boldsymbol{\tau} : \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} \right) - [(\mathcal{L}^e + \mathbf{g} \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \mathbf{g}) : \mathbf{P}] \\ &\quad \cdot \frac{1}{T_m} \langle (f - \kappa_s)^m \rangle, \\ \dot{\vartheta} &= \frac{\chi}{\rho c_p} \boldsymbol{\tau} : \mathbf{P} \frac{1}{T_m} \langle (f - \kappa_s)^m \rangle;\end{aligned}$$

(ii) warunki brzegowe

- (a) przemieszczenie \mathbf{u} jest wymuszone na części brzegu ∂_u obszaru $\partial_u(\mathcal{B})$ a wektory naprężeń $(\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n})$ są wymuszone na części $\partial_{\boldsymbol{\tau}}$ obszaru $\partial_u(\mathcal{B})$, gdzie $\partial_u \cap \partial_{\boldsymbol{\tau}} = 0$ i $\partial_u \cup \partial_{\boldsymbol{\tau}} = \partial_u(\mathcal{B})$;
- (b) strumień ciepła $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$ jest założony na powierzchni $\partial_u(\mathcal{B})$;

(iii) warunki początkowe

\mathbf{u} , \mathbf{v} , ρ , ϑ i $\boldsymbol{\tau}$ są dane w każdej cząsteczce $X \in \mathcal{B}$ dla $t = 0$;

były spełnione.

W układzie równań (6.1) ρ i ρ_M oznaczają gęstość aktualną i gęstość w konfiguracji odniesienia materiału osnowy, odpowiednio, $grad\mathbf{v}$ oznacza przestrzenny gradient prędkości, κ_s jest naprężeniem płynięcia materiału z izotropowym wzmocnieniem, f jest funkcją potencjału plastycznego dla materiału w postaci $f = J_2 = \frac{1}{2}\boldsymbol{\tau}'^{ab}\boldsymbol{\tau}'^{cd}g_{ac}g_{bd}$, gdzie \mathbf{g} oznacza tensor metryczny w konfiguracji aktualnej, $\mathbf{P} = \frac{1}{2\sqrt{J_2}}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\tau}}$, \mathbf{q} oznacza wektor ciepła, oraz $\boldsymbol{\tau}$ jest powiązany z tensorem naprężenia Cauchy'ego $\boldsymbol{\sigma}$ ($\boldsymbol{\tau} = J\boldsymbol{\sigma}$, J jest jacobianem). Dla procesów adiabatycznych ($\mathbf{q} = 0$) równanie (6.1e) ma postać

$$\rho c_p \dot{\vartheta} = \boldsymbol{\chi} \cdot \boldsymbol{\tau} : \mathbf{P} \frac{1}{T_m} \langle (f - \kappa_s)^m \rangle = \boldsymbol{\chi} \cdot \boldsymbol{\tau} : \mathbf{d}^p, \quad (6.2)$$

gdzie $\boldsymbol{\chi}$ jest współczynnikiem odwracalności, c_p jest ciepłem właściwym ciała, T_m jest czasem relaksacji a m jest wykładnikiem funkcji nadwyżki. Prawa strona równania (6.2) reprezentuje prędkość wewnętrznej dysypacji w wyniku procesu plastycznego płynięcia.

Z równania (6.2) możemy policzyć współczynnik odwracalności $\boldsymbol{\chi}$. Otrzymujemy

$$\boldsymbol{\chi} = \frac{\rho c_p \dot{\vartheta}}{\boldsymbol{\tau} : \mathbf{d}^p}. \quad (6.3)$$

W przypadku modelowania termomechanicznego zachowania się materiałów $\boldsymbol{\chi}$ jest zwykle przyjmowane jako stałe o wartości z przedziału 0.85–0.95 (praktyka stosowana za pracą Taylor i Quinney z roku 1934 [237]).

Ostatnio jednak badania eksperymentalne przeprowadzone przez Masona, Rosakisa i Ravichandrana (1994)[132] z użyciem pręta Kolsky'ego oraz szybkich detektorów podczerwieni pokazały, że te założenia nie są słuszne dla wszystkich metali. Powód takiej rozbieżności jest przedstawiony w pracy Łodygowski i Perzyna (1997)[122]. Autorzy ustalili, że przyczyną rozbieżności dla $\boldsymbol{\chi}$ może być mechanizm wewnętrzznego mikrouszkodzenia w materiale.

Mason, Rosakis i Ravichandran (1994)[132] zaobserwowali, że współczynnik odwracalności $\boldsymbol{\chi}$ zależy od odkształcenia i prędkości odkształcenia występujących w metalach. Ich obserwacje eksperymentalne mają poważne implikacje w badaniu warunków poprzedzających i rządzących procesem formowania pasm ścinania i ich ewolucji oraz na ustalenie kryteriów rządzących wyborem postaci dynamicznego zniszczenia w materiałach wrażliwych na prędkość odkształcenia.

6.4.4 Podstawowe własności mechaniczne modelu plastycznego z wrażliwością na prędkość odkształcenia

Zjawisko lokalizacji odkształceń plastycznych w ciałach sprężysto–lepkoplastycznych jest wynikiem odbicia i nakładania się fal naprężenia i ma zupełnie inny charakter dla materiałów sprężysto–plastycznych niewrażliwych na prędkość odkształcenia (patrz Perzyna (1994, 1995) [177, 178]). Wrażliwość na prędkość ma swoje odbicie w przestrzennym operatorze różniczkowym równań opisujących problem. W przypadku dynamicznych problemów początkowo – brzegowych naprężenia i deformacje będące wynikiem odbijania się fal i ich nakładania się nie są jednorodnie rozłożone i taki rodzaj niejednorodności może prowadzić do lokalizacji odkształceń, przy braku jakichkolwiek imperfekcji geometrycznych czy materiałowych niedoskonałości. Taki rodzaj zjawisk lokalizacji był badany w pracach Nemes i Eftis (1993) [148] i Sluys i inni (1992) [222].

Ponieważ plastyczną reakcję materiału otrzymuje się jako przypadek graniczny, gdy czas relaksacji T_m zmierza do zera (porównaj Perzyna (1994, 1995)[177, 178]), teoria lepkoplastyczności oferuje właśnie procedurę regularyzacji dla rozwiązania dynamicznych problemów początkowo–brzegowych z lokalizacją plastycznych deformacji.

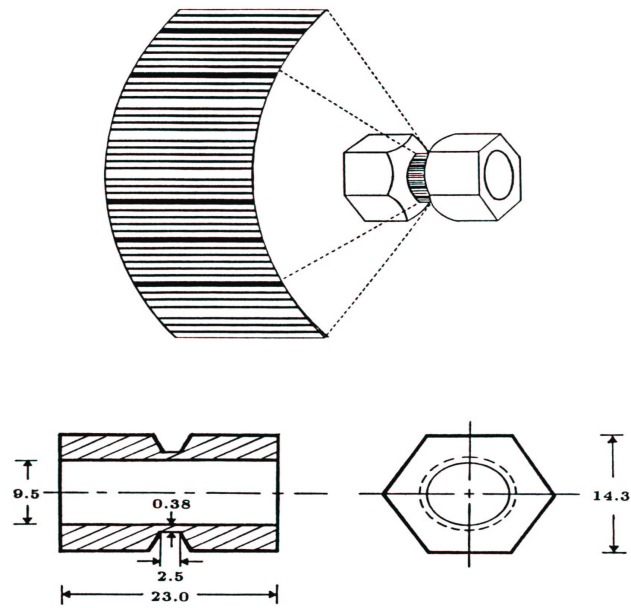
6.4.5 Dynamiczne skręcania cienkiej rurki stalowej

6.4.5.1. Adiabatyczne skręcanie

Cho, Chi i Duffy (1988) [42] badali na skręcanie próbki rurkowe z wykorzystaniem skrętnego pręta Kolsky’ego. W naszej pracy podobnie jak w pracy Batra i Zhang (1993) [14] upraszczamy problem początkowo brzegowy i do obliczeń przyjmujemy centralną część próbki w kształcie rurki cienkościennej, patrz rysunek 6.2.

Warunki początkowe przyjmujemy w postaci

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{0}, \quad \rho(\mathbf{x}, 0) = \rho_M = \rho_M^0, \\ \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{0}, \quad \vartheta(\mathbf{x}, 0) = \vartheta_0 = \text{stałe w } \mathcal{B}. \end{aligned} \quad (6.4)$$



Rys. 6.2. Rodzaj próbki i jej wymiary w milimetrach w eksperymencie Marchanda i Duffiego (1988) [131].

To oznacza, że ciało jest początkowo w spoczynku, jest wolne od naprężeń i ma jednolitą temperaturę ϑ_0 .

Jako warunki brzegowe, przyjęto

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n} &= 0 && \text{na wewnętrznej i zewnętrznej powierzchni rurki} \\ \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} &= 0 \implies \text{grad}\vartheta \cdot \mathbf{n} = 0 && \text{na powierzchniach zewnętrznych,} \\ \mathbf{v}(x_1, x_2, 0, t) &= 0, \quad \mathbf{v}(x_1, x_2, L, t) = \omega^*(t) (x_1^2 + x_2^2)^{\frac{1}{2}} \mathbf{n}^*, && (6.5) \end{aligned}$$

gdzie \mathbf{n} jest jednostkową normalną do rozpatrywanej powierzchni, $\omega^*(t)$ jest prędkością kątową na skrajnej powierzchni $x_3 = L$ dla rurki i \mathbf{n}^* jest jednostkowym wektorem stycznym do powierzchni $x_3 = L$.

Przyjęto również, że

$$\omega^*(t) = \begin{cases} \omega_0^* \cdot t/40, & 0 \leq t \leq 40\mu\text{s}, \\ \omega_0^*, & 40 < t \leq 400\mu\text{s}, \\ \omega_0^*(5 - \frac{t}{100}), & 400 < t \leq 500\mu\text{s}, \\ 0, & t > 500\mu\text{s}. \end{cases} \quad (6.6)$$

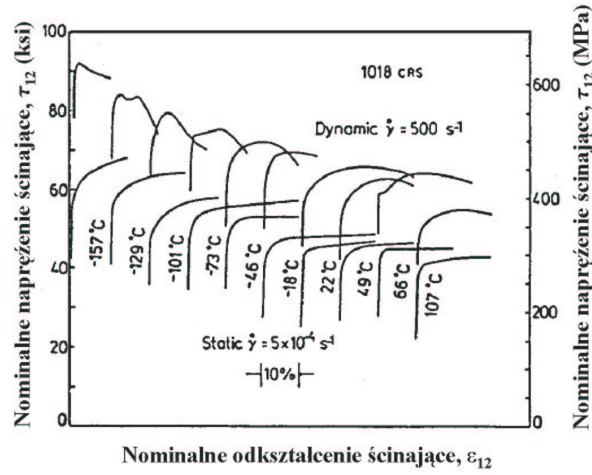
Czas narastania impulsu jest $40 \mu\text{s}$ i jest typowy w próbach skręcania (patrz np.: Batra i Zhang (1993) [14], Marchand, Cho i Duffy (1988) [131]).

Własności mechaniczne miękkiej stali (1018 cold rolled steel) określono dla prób skręcania w pracy Costin i inni (1979) [48]. Krzywe eksperymentalne dla quasi-statycznych i dynamicznych prób, pokazujące zależność naprężeń i odkształceń ścinających dla różnych temperatur, przedstawiono na rysunku 6.3.

Wykorzystując rezultaty pracy Costin i inni (1979) [48] przyjęto do obliczeń następujące wartości parametrów materiałowych (AISI 1018 cold rolled steel)

$$\begin{aligned} \rho_M &= 7860 \text{ kg/m}^3, \quad c_p = 450 \text{ J/kg}^0\text{K}, \quad G = 80 \text{ GPa}, \\ E &= 207.47 \text{ GPa}, \quad \kappa_s^0 = 305 \text{ MPa}, \quad \chi = 0.90, 0.80, 0.70, \\ m &= 5, \quad T_m = 2.802 \cdot 10^{-2} - 2.802 \cdot 10^{-8} \text{ s (dla } \vartheta = 20^0\text{C)}, \\ m &= 4.7, \quad T_m = 4.643 \cdot 10^{-2} - 4.643 \cdot 10^{-8} \text{ s (dla } \vartheta = 107^0\text{C)}, \\ m &= 4.7, \quad T_m = 6.622 \cdot 10^{-2} - 6.622 \cdot 10^{-8} \text{ s (dla } \vartheta = 200^0\text{C)}. \end{aligned}$$

Wartości początkowe m i T_m określono, bazując na wynikach eksperymentalnych Marchanda, Cho i Duffy'ego (1988) [131]. Rezultaty Marchanda,



Rys. 6.3. Krzywe eksperymentalne dla naprężeń i odkształceń ścinających dla różnych temperatur w teście skręcania dla stali 1018 CRS z pracy Costin i inni (1979) [48].

Cho i Duffy'ego (1988) [131] przedstawiały krzywe średnich naprężeń ścinających τ_{12}^{avg} , w funkcji średnich odkształceń ścinających ϵ_{12}^{avg} , i czasu t , dla średnich prędkości odkształcenia $\dot{\epsilon}_{12}^{avg} = 1500$ i $1600s^{-1}$. W celu opisanie zachowania się materiału wrażliwego na prędkość odkształcenia w procesie ścinania, naprężenie płynięcia dla danej prędkości odkształcenia i temperatury określano z następującego wzoru

$$\tau_{12}^{avg} = \kappa_s(\epsilon_{12}^{avg}) \left[1.0 + (T_m \cdot \dot{\epsilon}_{12}^{avg})^{\frac{1}{m}} \right], \quad (6.7)$$

gdzie $\kappa_s(\epsilon_{12}^{avg})$ jest naprężeniem ścinającym w próbie quasi–statycznej ($\dot{\epsilon}_{12}^{avg} \approx 10^{-4}s^{-1}$), $\dot{\epsilon}_{12}^{avg}$ jest średnią prędkością odkształcenia ścinającego w próbce a T_m i m są nieznanymi stałymi.

Przyjmujemy, że równanie (6.7) najlepiej opisuje rezultaty eksperymentalne Marchanda, Cho i Duffy'ego (1988) [131] dla odkształceń ścinających, ϵ_{12}^{avg} w zakresie od 0.04 aż do odkształceń ścinających w chwili zniszczenia, $(\tau_{12}^{avg})_z = 0.52$, gdzie T_m and m mają średnią, stałą wartość w próbce, które powinny być określone dla danego materiału. Z równania (6.7) otrzymujemy

$$\log \left(\frac{\tau_{12}^{avg}}{\kappa_s(\epsilon_{12}^{avg})} - 1 \right) = \frac{1}{m} (\log(T_m) + \log(\epsilon_{12}^{avg})) . \quad (6.8)$$

Stosując tę zależność, wykorzystano metodę najlepszego dopasowania do krzywych eksperymentalnych dla średnich naprężeń ścinających i ustalonej wartości średniego odkształcenia ścinającego z różnym doбором T_m i m . Poszukiwano wartości T_m i m w przyjętych zakresach T_m od $2.802 \cdot 10^{-2}$ do $6.622 \cdot 10^{-8}$ s oraz m od 0 do 20, które dają najlepsze dopasowanie. Mając z eksperymentu zbiór wartości naprężenia ścinającego τ_{12}^{avg} w funkcji średnich odkształceń ścinających ϵ_{12}^{avg} , dla średniej prędkości odkształcenia ϵ_{12}^{avg} , w którym dwie wielkości (cechy) T_m i m mają pewien dwuwymiarowy rozkład normalny. Jeśli pewna prosta o równaniu $y = \mathbf{a} + \mathbf{b}$ jest prostą regresji drugiego rodzaju cechy m względem cechy T_m , wówczas

$$\mathbf{a} = \text{corr}(m, T_m) \frac{\sigma_m}{\sigma_{T_m}} , \quad \mathbf{b} = E(m) - \text{corr}(m, T_m) \frac{\sigma_m}{\sigma_{T_m}} E(T_m) ,$$

gdzie \mathbf{a} jest współczynnikiem regresji liniowej cechy m względem T_m , \mathbf{b} jest współczynnikiem przesunięcia, $\sigma_m^2 = E[(m - E(m))^2]$ i $\sigma_{T_m}^2 = E[(T_m - E(T_m))^2]$ a $\text{corr}(m, T_m) = \text{cov}(m, T_m) / \sigma_m \sigma_{T_m}$. Prosta $y = \mathbf{a} + \mathbf{b}$ jest oszacowaniem metodą najmniejszych kwadratów prostej regresji cechy m względem cechy T_m na podstawie pomiarów. Oznacza to, że funkcja

$$\sum_{i=1}^n [m^i - (\tilde{\alpha} T_m^i + \tilde{\beta})]^2 = \sum_{i=1}^n \tilde{d}^i{}^2$$

osiąga minimum, gdy $\tilde{\alpha} = A = R \frac{s_m}{s_{T_m}}$ i $\tilde{\beta} = B = \bar{m} - A \bar{T}_m$, gdzie R jest współczynnikiem korelacji liniowej z próby, s_m i s_{T_m} są estymatorami dla σ_m i σ_{T_m} z próby a \bar{m} i \bar{T}_m to wartości średnie dla m i T_m .

Estymatorem zgodnym współczynnika $\text{corr}(m, T_m)$ jest współczynnik korelacji liniowej R z próby, którego wartość r określa się z wzoru

$$r = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n m^i T_m^i - \bar{m} \bar{T}_m}{\sqrt{\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n m^i{}^2 - \bar{m}^2 \right) \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n T_m^i{}^2 - \bar{T}_m^2 \right)}} .$$

Proces ten jest powtarzany dla kolejnych wybranych wartości średniego odkształcenia ścinającego $\epsilon_{12}^{avg} = 0.05, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25, 0.40$ and 0.50 . Jednakże, T_m i m tak określone są nieco różne dla każdej wartości ϵ_{12}^{avg} . Końcowe wartości dla $\frac{1}{m}$ i $\log T_m$ ustalono jako średnie wartości związane z czterema typowymi odkształceniami ścinającymi $\epsilon_{12}^{avg} = 0.05, 0.10, 0.15, 0.50$. Równanie (6.7) najlepiej opisuje wyniki eksperymentalne Marchanda, Cho i Duffy'ego gdy

$$T_m = 3.872 \cdot 10^{-4} s \text{ i } m = 4.8 \text{ .}$$

W ten sposób, rezultaty dla średnich naprężeń ścinających, τ_{12}^{avg} , w funkcji średniego odkształcenia ścinającego, ϵ_{12}^{avg} , ustalone dla parametrów materiałowych jak wyżej, najlepiej przybliżają krzywe naprężenie–odkształcenie dla miękkiej stali (1018 CRS) opublikowane przez Marchanda, Cho i Duffy'ego (1988) [131] dla średniej prędkości odkształceń $1600s^{-1}$. Średnie naprężenie ścinające τ_{12}^{avg} jest zdefiniowane jako $\tau_{12}^{avg} = \int_{z=0}^{z=L} \tau_{12}^{local}(z, t) dz$.

W przypadku trójwymiarowego stanu odkształcenia w szerokim zakresie prędkości odkształceń należy uwzględnić zależność parametrów materiałowych od temperatury i prędkości odkształcenia. Wpływ tych efektów i sposoby modyfikacji opisu lepkoplastycznego ze względu na te efekty przedstawiono w wielu pracach dla różnych materiałów np.: Batra i Kim (1990) [13], Giovanola (1988) [77], [78], Clifton i inni (1984) [46], Clifton (2000) [47], Litoński (1977) [119]. W obecnej pracy skupiono się na zbadaniu wpływu zmian temperatury na czas relaksacji $T_m = T_m(\vartheta)$ i parametr $m = m(\vartheta)$ w równaniu (6.7) dla danej prędkości odkształcenia. W oparciu o prace Perzyna i Wierzbicki (1964) [185] i Perzyna (1978) [170] przyjęto

$$\tau_{12}^{avg} = \kappa_s(\epsilon_{12}^{avg}) \left[1.0 + (T_m(\vartheta) \cdot \dot{\epsilon}_{12}^{avg})^{\frac{1}{m(\vartheta)}} \right] . \quad (6.9)$$

Do obliczeń, przyjęto następujące wartości parametrów T_m i m w temperaturze pokojowej ($\vartheta_0 = 20^{\circ}C$):

$$m(\vartheta_0) = 5, \quad T_m(\vartheta_0) = 2.8 \cdot 10^{-2} s, \quad 2.8 \cdot 10^{-4} s, \quad 2.8 \cdot 10^{-6} s, \quad 2.8 \cdot 10^{-8} s.$$

Zależność T_m i m od temperatury w tej pracy jest modelowane następującymi

związkami (patrz Perzyna i Wierzbicki (1964) [185])

$$T_m(\vartheta) = \begin{cases} 2.39 \cdot T_m(\vartheta_0) \cdot \left[\left(1 + 2.6 \cdot \left(\frac{220-\vartheta}{273} \right)^2 \right) \right]^{-1} & \text{dla } \vartheta \leq 220^\circ\text{C}, \\ 2.39 \cdot T_m(\vartheta_0) & \text{dla } \vartheta > 220^\circ\text{C}, \end{cases} \quad (6.10)$$

$$m(\vartheta) = \begin{cases} m(\vartheta_0)(1.064 - 0.003 \cdot \vartheta) & \text{dla } \vartheta \leq 107^\circ\text{C}, \\ m(\vartheta_0) & \text{dla } \vartheta > 107^\circ\text{C}. \end{cases}$$

Rurkę poddano skręcaniu z nominalną prędkością odkształceń, $\dot{\epsilon}_{12}^{avg}$ zmieniających się w zakresie $10^3 - 10^4 \text{ s}^{-1}$. Do prezentacji przyjęto przypadek rurki skręcanej z prędkością kątową o zmiennej amplitudzie opisanej wzorem (6.6), gdy $\omega_0^* = 800 \text{ rad} \cdot \text{s}^{-1}$, $t_n = 40 \mu\text{s}$, $t_s = 400 \mu\text{s}$ i $t_k = 500 \mu\text{s}$.

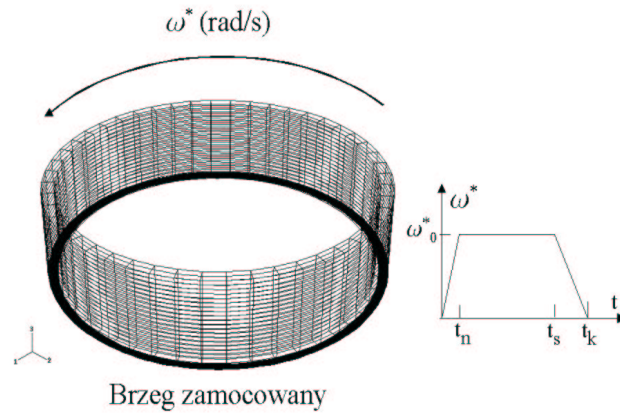
6.4.5.2 Metoda rozwiązania i obliczenia numerycznych dla rurki stalowej

Sformułowany powyżej problem początkowo-brzegowy rozwiązano stosując system metody elementów skończonych ABAQUS (podobnie jak w pracach Łodygowski i Perzyna (1996)[121] oraz Łodygowski i Perzyna (1997)[122]).

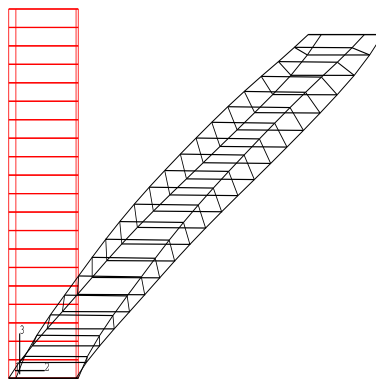
Próbka w postaci cienkościennej rurki cylindrycznej jest modelowana przy pomocy trójwymiarowych elementów (C3D8R) w jedną warstwą w kierunku promieniowym.

Na obwodzie model zawiera 24 segmenty, każdy z nich ma 20 elementów po wysokości. W celu uniknięcia odbijania się fal w miejscu przyłożenia impulsu i aby modelować wpływ pozostałych części próbki (sześciokątne elementy do zamocowania) założono dodatkowe sprężyny a na nich elementy masowe. Podział na elementy badanego obszaru próbki przedstawiono na rysunku 6.4. Siatkę przed i po deformacji wybranego segmentu przedstawiono na rysunku 6.5.

Otrzymane rezultaty przedstawiono na rysunkach 6.6-6.11. Na rysunku 6.6 pokazano ewolucję temperatury w środku pasma ścinania. Obliczone wartości lokalnych odkształceń ścinających dla wybranych chwil procesu jako funkcja położenia na osi próbki pokazano na rysunku 6.7. Otrzymany rozkład odkształceń ścinających pozwala określić szerokość obszaru lokalizacji, która wynosi 0.2–0.3 mm. Na rysunkach (rys. 6.8, 6.9, 6.10, 6.11) przedstawiono: rozkłady ekwiwalentnego naprężenia Hubera-Misesa, lokalnego odkształcenia ścinania i

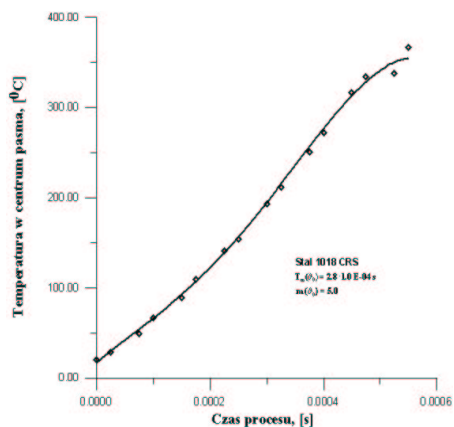


Rys. 6.4. Podział na elementy badanego obszaru próbki i przebieg zmiany prędkości skręcania w symulacji numerycznej eksperymentu Marchanda i Duffiego (1988) [131].

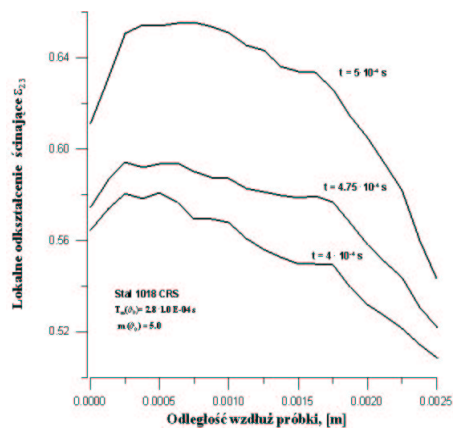


Rys. 6.5. Siatka przed i po deformacji wybranego segmentu.

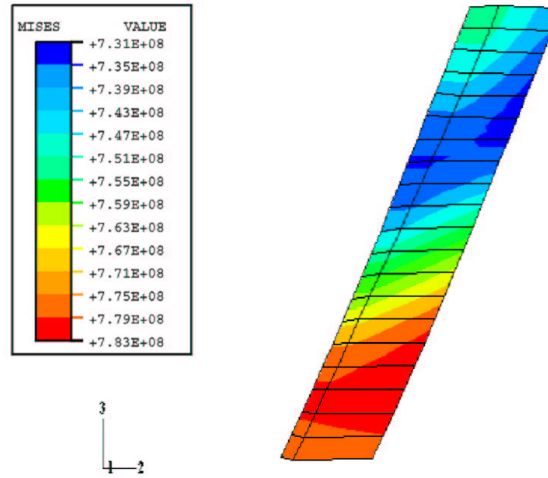
lokalnego naprężenia ścinania oraz lokalnej temperatury, na powierzchni jednego segmentu dla końcowej chwili procesu $t = 5 \cdot 10^{-4} s$ z czasem relaksacji $T_m(\vartheta_0) = 2.8 \cdot 10^{-4} s$ i $m(\vartheta_0) = 5$.



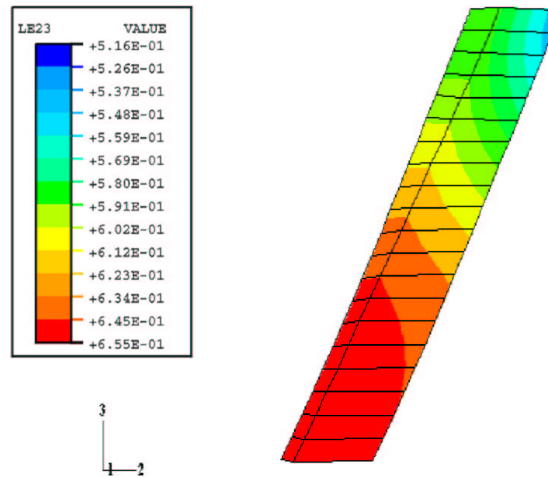
Rys. 6.6. Wykres zmiany temperatury w środku pasma ścinania w funkcji czasu procesu.



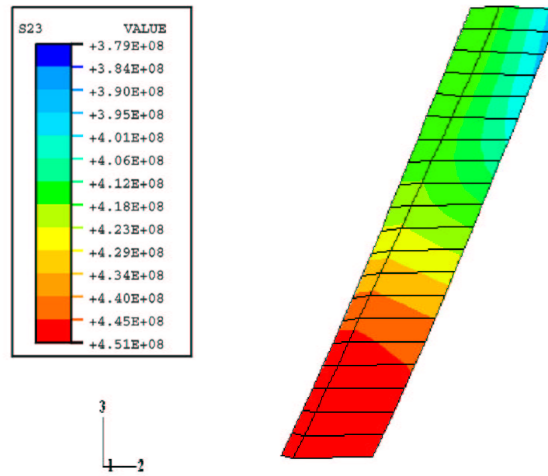
Rys. 6.7. Rozkłady odkształceń ścinających dla wybranych chwil procesu jako funkcja położenia na osi próbki.



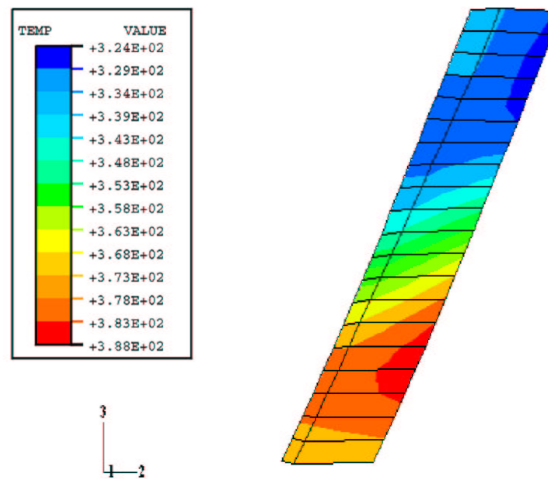
Rys. 6.8. Rozkład ekwiwalentnego naprężenia Hubera-Misesa na powierzchni jednego segmentu próbki w końcowej chwili procesu $t = 5.0 \cdot 10^{-4}s$ z czasem relaksacji $T_m(\vartheta_0) = 2.8 \cdot 10^{-4}s$ i $m(\vartheta_0)=5$.



Rys. 6.9. Rozkład odkształcenia ścinającego na powierzchni jednego segmentu próbki w końcowej chwili procesu $t = 5.0 \cdot 10^{-4}s$ z czasem relaksacji $T_m(\vartheta_0) = 2.8 \cdot 10^{-4}s$ i $m(\vartheta_0)=5$.



Rys. 6.10. Rozkład naprężenia ścinającego na powierzchni jednego segmentu próbki w końcowej chwili procesu $t = 5.0 \cdot 10^{-4}s$ z czasem relaksacji $T_m(\vartheta_0) = 2.8 \cdot 10^{-4}s$ i $m(\vartheta_0)=5$.



Rys. 6.11. Rozkład temperatury na powierzchni jednego segmentu próbki w końcowej chwili procesu $t = 5.0 \cdot 10^{-4}s$ z czasem relaksacji $T_m(\vartheta_0) = 2.8 \cdot 10^{-4}s$ i $m(\vartheta_0)=5$.

6.4.6 Analiza wyników i porównanie z rezultatami eksperymentalnymi

Głównym celem obliczeń numerycznych było określenie wąskiego obszaru pasma lokalizacji odkształceń, które podlega znacznym deformacjom i wzmożonemu ogrzewaniu. W przypadku dynamicznego adiabaticznego procesu dla cienkich próbek stalowych, obszar wąskiego pasma ścinania propaguje się wzdłuż obwodu rurki. Ustalona szerokość pasma lokalizacji w procesie skręcania z prędkością kątową $\omega_0^* = 800$ rad/s dla stali 1018 CRS wynosi około 0.2 - 0.3 mm. Rozkłady ekwiwalentnego odkształcenia plastycznego dla różnych czasów relaksacji pokazują silny wpływ czasu relaksacji T_m na szerokość pasma, na charakterystyczne cechy procesu lokalizacji oraz na cały proces propagacji fal. Dla czasu relaksacji $T_m(\vartheta_0) = 2.8 \cdot 10^{-4}$ s i $m(\vartheta_0) = 5$, przy prędkości $\omega_0^* = 800$ rad/s, maksymalne lokalne odkształcenie ścinające jest rzędu 70%, a wzrost temperatury jest rzędu 380°C. Ten czas relaksacji reprezentuje rzeczywisty parametr struktury dla tego materiału (miękka stal). Określona szerokość pasma lokalizacji, zmiany temperatury i deformacji w pasmie są w dobrej zgodności i wynikami eksperymentalnymi opublikowanymi przez Marchanda i Duffy'ego (1988) [130] oraz Marchanda, Cho i Duffy'ego (1988) [131]. W czasie obliczeń ustalono, że szerokość pasma lokalizacji oraz wartość temperatury w paśmie zależy od przyjętej średniej prędkości odkształcenia oraz założonego czasu relaksacji (lub parametru lepkości). Szerokość pasma lokalizacji maleje gdy czas relaksacji T_m maleje. Podczas obliczeń czas relaksacji miał dominujący wpływ na stabilność obliczeń (podobnie jak w pracy Łodygowski i Perzyna (1997) [122], a także nawet dla bardzo gęstych siatek elementów jak w pracy Batra i Zhang (1993) [14]), a warunki stabilności spełniano w każdej chwili w całym procesie.

6.5 Podsumowanie

Porównanie otrzymanych rezultatów z obserwacjami eksperymentalnymi wyraźnie pokazują, że użyta teoria lepkoplastyczności w sposób właściwy opisuje proces lokalizacji odkształcenia. W warunkach dynamicznych obciążeń rozpatrywana propagacja deformacji w próbce, wykazuje niejednorodny rozkład naprężenia i odkształcenia powodując umiejscowienie się niestabilności i tworzenie pasma ścinania. Te obszary zmieniają się w zależności od założonej prędkości odkształcenia i zależą od przyjętej wartości czasu relaksacji (lub parametru lepkości). Uzyskane rezultaty pokazują przebieg deformacji i zachodzącą w końcowym etapie lokalizację odkształceń plastycznych. Obliczone wartości od-

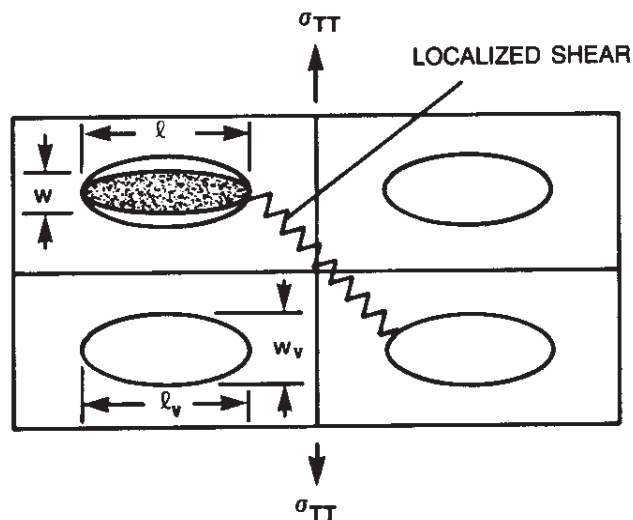
kształcenia ekwiwalentnego i wzrost temperatury w porównaniu z rezultatami eksperymentalnymi Marchanda i Duffy'ego (1988) [130] wykazały jakościową i ilościową zgodność. Uzyskany w obliczeniach wzrost temperatury, a zwłaszcza porównanie go z danymi doświadczalnymi w miejscu lokalizacji odkształceń plastycznych (pasma przewężenia), potwierdził słuszność przyjętego założenia o adiabatycznym charakterze dynamicznego procesu deformacji niesprężystych. Wyniki wykazują dużą wrażliwość wystąpienia lokalizacji odkształceń plastycznych na prędkość deformacji. Miejsce lokalizacji zależy od prędkości deformacji. Dla procesów quasi-statycznych (średnia prędkość odkształceń plastycznych $\dot{\epsilon}_p \leq 10^{-3} s^{-1}$) procesy kończą się lokalizacją odkształceń plastycznych w tym samym miejscu. Dla procesów z większymi prędkościami następuje zmiana miejsca lokalizacji. Jednak po przekroczeniu wartości krytycznej następuje lokalne, intensywne zniszczenie w bezpośredniej okolicy przyłożenia oddziaływań zewnętrznych. Sama wartość krytyczna prędkości skręcania zależy od charakterystyki materiału i warunków początkowo-brzegowych i wymaga określenia dla każdego materiału i danego zadania brzegowego.

W rozdziale tym parametry ustalano z dostępnej wiedzy i znajomości pewnych stałych (np. stałe sprężystości) dla danego materiału. Pozostałe parametry określano wykonując szereg obliczeń z różnym zestawem parametrów i określeniu najlepszych dopasowań. Taki sposób identyfikacji parametrów w modelu sprężysto-lepkoplastyczności jest uproszczoną metodą identyfikacji. Jednak sposób ten jest wykorzystywany w wielu przypadkach i jest dopuszczalny jako wstępny proces identyfikacji. Takie podejście ma jednak wiele wad. Wady te wynikają z braku kryteriów doboru stałych materiałowych i silnej zależności takiego sposobu identyfikacji parametrów od nagromadzonej wiedzy osoby wykonującej taką identyfikację.

7. Numeryczna identyfikacja i weryfikacja prawa płynięcia plastycznego z udziałem mikropasm ścinania

Wstęp

Proces powstawania, wzrostu i łączenia pustek jest silnie powiązany z lokalnym stanem naprężenia i odkształcenia mikrostruktury w obszarze między pustkami. Obserwowano w tych obszarach powstawanie zlokalizowanych stref ścinania. Schematycznie zostało to przedstawione na rysunku 7.1 z pracy Speicha i Spitziga (1982) [227].



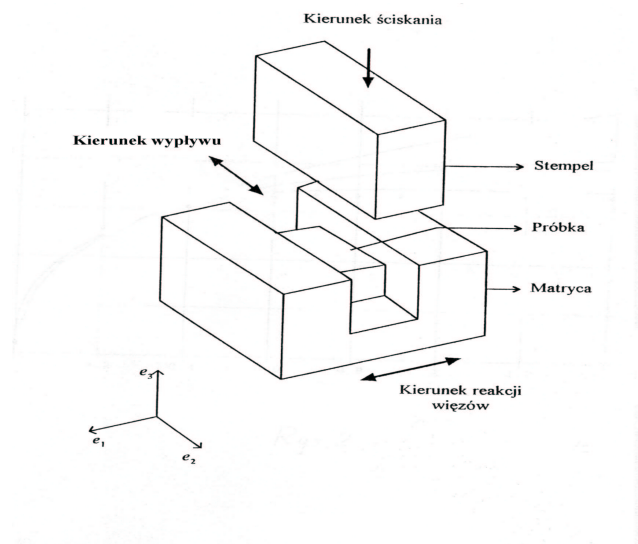
Rys. 7.1. Schemat zlokalizowanych stref ścinania między pustkami lub wtrąceniami z pracy Speicha i Spitziga (1982) [227].

W rozdziale tym przedstawiono równania plastyczności z udziałem pasm ścinania, które zaproponowano w pracach Pęcherskiego ((1992) [188], [189], (1996) [190], (1998) [193], [192], (2002) [194]). W przeprowadzonej w tym rozdziale analizie posłużono się zadaniem nieswobodnego ściskania w płaskim stanie odkształcenia. Problem ten opisuje w przybliżony sposób znany z literatury test laboratoryjny zwany próbą kanalikową (opisany w pracach Bronkhorst i inni (1992) [31] i Anand i Kalidindi (1994) [3]). Dla tego zadania dokonano identyfikacji parametrów użytych w opisie. Do obliczeń numerycznych zastosowano

program metody elementów skończonych ABAQUS/Standard (2001) [1]. Wyniki wspomnianej identyfikacji przedstawiono w pracach Pęcherski i Nowak (1998) [196], (2000) [198], Pęcherski (1998) [193]. W pracy Pęcherski i Nowak (2002) [194] zastosowano nowe algorytmy zaproponowane w pracach Nowak i Stachurski (2001) [157] i (2002) [158], które posłużyły do rozwiązania problemu nieliniowej regresji metodą globalnej optymalizacji. Wykorzystano je do opracowania automatycznej procedury identyfikacji poszukiwanej funkcji udziału pasm ścinania. Podjęto także próbę weryfikacji proponowanego opisu konstytutywnego z zastosowaniem wyników badań doświadczalnych procesu kucia matrycowego Pęcherski i Nowak (2002) [194], które były prezentowane w pracy Kalidindi i inni (1992) [104].

7.1 Omówienie dostępnych wyników obserwacji doświadczalnych oraz obliczeń numerycznych dla próby kanalikowej

We wspomnianych pracach Bronkhorst i inni (1992) [31] i Anand i Kalidindi (1994) [3] przedstawiono wyniki doświadczalne nieswobodnego ściskania w próbie kanalikowej przeprowadzone dla polikrystalicznej miedzi. Badano ewolucję tekstury oraz rozwój pasm ścinania. Kształt matrycy oraz schemat ilustrujący próbę kanalikową przedstawiono na rys. 7.2.



Rys. 7.2. Schemat ilustrujący nieswobodne ściskanie w próbie kanalikowej.

Wymiary przyjętej do doświadczenia próbki są następujące:

- wysokość odpowiadająca kierunkowi ściskania e_3 —6.35 mm,
- szerokość odpowiadająca kierunkowi swobodnego wypływu materiału e_2 —9.53 mm,
- długość odpowiadająca kierunkowi reakcji ścianek matrycy e_1 —14.73 mm.

Zarówno próbka, jak i matryca były pokryte teflonem w celu zminimalizowania efektu tarcia. W związku z tym w symulacji numerycznej badanego procesu przyjęto upraszczające założenie, że wpływ tarcia można pominąć. W badaniach prezentowanych w pracach Bronkhorst i inni (1992) [31] oraz Anand i Kalidindi (1994) [3], wykonano cztery serie doświadczeń nieswobodnego ściskania w matrycy, w których kolejne próbki zostały ściśnięte do poziomu: -0,21; -0,52; -1,0 oraz -1,54 logarytmicznej miary odkształcenia ε_3 z prędkością $0,001 \text{ s}^{-1}$. Powierzchnie odkształconych próbek poddano obserwacjom metalograficznym. Rezultaty podsumowano w pracy Anand i Kalidindi (1994) [3], str. 234, w następujący sposób: „...na rysunku 10a przedstawiającym mikrostrukturę widać, że dla odkształcenia rzeczywistego- 0.52 ziarna są spłaszczone i w poszczególnych ziarnach widać zlokalizowane pasma, które mają grubość $0.1 \div 0.5 \mu\text{m}$ i są odchylone o około $\sim \pm 30 \div 40^\circ$ w stosunku do powierzchni horyzontalnej. Pasma te powstają, gdy odkształcenia rzeczywiste są w przedziale od -0.21 do -0.52 . Intensywność tych mikropasm ścinania narasta z rozwojem deformacji i dla odkształceń rzędu -1.00 powstają makropasma ścinania, które przecinają granice ziaren”, (tłumaczenie własne).

Obserwacje doświadczalne, omówione szerzej w pracy habilitacyjnej Pęcherskiego (1998) [193], wykazują, że deformacji plastycznej polikrystalicznych metali może towarzyszyć silna koncentracja odkształcenia postaciowego w formie cienkich transkrystalicznych warstewek o grubości rzędu $0.1 \mu\text{m}$, które nazywa się mikropasmami ścinania. Obserwuje się także, że mikropasma ścinania działają w małym przedziale czasu, propagując się z dużą prędkością w obszarach obejmujących wiele ziaren, a potem nie wnoszą już aktywnego udziału do odkształcenia plastycznego, stając się biernym elementem struktury. Udział aktywnych mikropasm ścinania w całkowitym odkształceniu plastycznym rośnie na ogół ze wzrostem odkształcenia plastycznego, zmieniając się jednak w czasie procesu dość nieregularnie. Istniejące w literaturze informacje na temat odkształcenia, przy którym obserwuje się pierwsze mikropasma ścinania są fragmentaryczne i niepełne. Sytuację komplikuje fakt, że inicjacja oraz udział aktywnych mikropasm ścinania zależą bardzo silnie od drogi od-

kształcenia oraz przyjętego schematu obciążenia. Dla obciążeń monotonicznych obserwuje się, że pierwsze mikropasma ścinania występują przy stosunkowo dużej wartości odkształcenia. Badania Bochniaka i Korbla, prezentowane np. w pracach (1995) [108], (2003) [23], wykazują jednak, że mikropasma ścinania można generować praktycznie przy dowolnym odkształceniu przez odpowiednio sterowaną zmianę drogi odkształcenia, co legło u podstaw nowych technologii kształtowania plastycznego metali opracowanych przez tych autorów.

7.2 Identyfikacja prawa płynięcia z zastosowaniem numerycznej analizy próby kanalikowej

Konstrytuwny opis płynięcia plastycznego z udziałem pasm ścinania zaproponowano w pracy Pęcherski (1992) [188] oraz (1997) [191]. W pracach Pęcherski i Nowak (1998) [196], Nowak i Pęcherski (2002) [156] przedstawiono identyfikację modelu oraz jego weryfikację. Istota modelu proponowanego przez Pęcherskiego (1998) [193], (2002) ([194], [156]) polega na addytywnym rozkładzie tensora prędkości deformacji plastycznej, który został wyprowadzony dla makroskopowej miary prędkości deformacji z udziałem wielopoziomowej hierarchii pasm ścinania w pracy Pęcherski (1997) [191], na część generowaną przez krystalograficzne poślizgi \mathbf{D}_s^p i część generowaną przez pasma ścinania \mathbf{D}_{SB}^p ,

$$\mathbf{D}^p = \mathbf{D}_s^p + \mathbf{D}_{SB}^p, \quad (7.1)$$

oraz na wprowadzeniu skalarnej miary udziału pasm ścinania w prędkości odkształcenia plastycznego, Kowalczyk–Gajewska i inni (2005) [110]:

$$f_{SB} = \frac{\|\mathbf{D}_{SB}^p\|}{\|\mathbf{D}^p\|}. \quad (7.2)$$

Identyfikację modelu, która polega na wyznaczeniu nieznanego udziału pasm ścinania f_{SB} w funkcji ekwiwalentnego odkształcenia plastycznego ε_e^p , przeprowadzono dla zadania nieswobodnego ściskania w płaskim stanie odkształcenia. Stosując program elementów skończonych ABAQUS/ Standard (2001) [1], wykonano numeryczne obliczenia procesu jednorodnego ściskania w płaskim stanie odkształcenia, który modeluje próbę kanalikową. Przyjęto płaski element ośmiowęzłowy typu CPE8.

Do obliczeń zastosowano uproszczone równanie prawa płynięcia z udziałem symetrycznego układu mikropasm ścinania, które wykorzystano do sformułowania następującej postaci prędkościowych równań sprężysto-plastyczności

przy założeniu małych odkształceń sprężystych:

$$\overset{\circ}{\sigma}_{ij} = C_{ijkl} D_{kl}, \quad C_{ijkl} = 2G \left(\delta_{ik} \delta_{jl} + \frac{\nu}{1+\nu} \delta_{ij} \delta_{kl} - \frac{1}{\alpha \sigma_Y^2} \sigma'_{ij} \sigma'_{kl} \right), \quad (7.3)$$

gdzie $\alpha = \frac{2}{3} \left[1 + \frac{\bar{h}(1-f_{SB})}{3G} \right]$, σ_{ij} , σ'_{ij} oznaczają odpowiednio składowe tensora naprężenia i dewiatora tensora naprężenia Cauchy'ego w układzie kartezjańskim, natomiast \bar{h} jest modulem plastycznym w aktualnym stanie umocnienia, który wyznacza się z zadanej charakterystyki materiału. Zauważmy, że udział mikropasm ścinania $f_{SB} \in [0, 1)$ uwzględniony jest w parametrze α , poprzez który wpływa na tensor modułów sprężysto-plastycznych, a zatem może wpływać na zmianę macierzy sztywności analizowanego schematu obliczeniowego. Symbol $\overset{\circ}{\sigma}_{ij}$ oznacza składowe pochodnej obiektywnej tensora naprężenia Cauchy'ego, która w tym wypadku ma postać pochodnej Zaremby-Jaumana.

W obliczeniach wykorzystano przewidzianą w programie ABAQUS/Standard (2001) [1] możliwość modyfikacji procedury materiałowej UMAT. W procedurze UMAT stosuje się prostą wersję znanego algorytmu odwzorowania powrotnego, tzw. algorytmu (ang. *radial return*) (powrotu po promieniu), który jest typowy dla całkowania równań konstytutywnych sprężysto-plastyczności z warunkiem Hubera-Misesa (por. np. Simo i Hughes (1998) [221], Kleiber (1995) [106], cz. II rozdz. 6). Obliczenia wykonano dla potęgowej aproksymacji charakterystyki materiału otrzymanej doświadczalnie w próbie swobodnego ściskania wykonanej przez Bronkhorsta i inni (1992) [31] (przedstawionej w tej pracy na str. 450, Rys. 2). Przyjęto następującą formułę

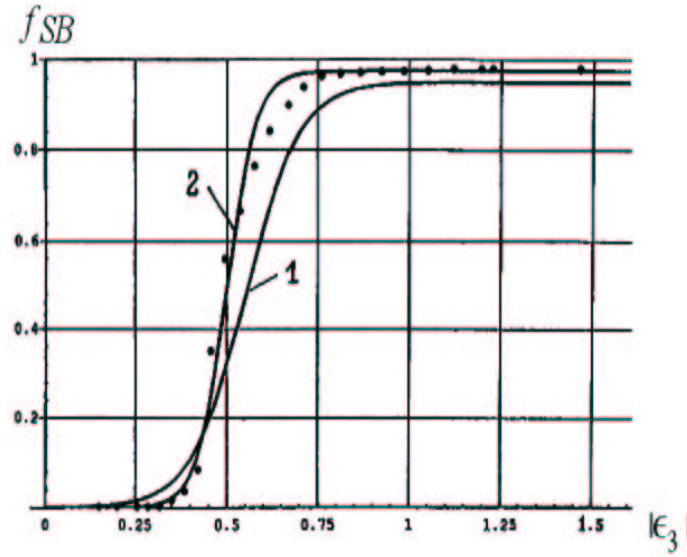
$$\sigma = \sigma_Y \left(\frac{E}{\sigma_Y} \varepsilon^p \right)^{\frac{1}{m}}, \quad (7.4)$$

gdzie granica plastyczności $\sigma_Y = 0.02$ GPa, moduł Younga $E = 126$ GPa, $m = 2.93$.

Postać poszukiwanej funkcji udziału pasm ścinania f_{SB} , która daje dopasowanie z dokładnością około 5% do punktów doświadczalnych krzywej naprężenie ściskające odkształcenie logarytmiczne otrzymanej w próbie kanalikowej. Funkcja ta jest wyrażona równaniem

$$f_{SB}(\varepsilon^p) = \frac{f_{SB_0}}{1 + \exp(a - b|\varepsilon_3|)}, \quad (7.5)$$

gdzie $f_{SB_0} = 0.95$, $a = 7.5$, $b = 13.6$.



Rys. 7.3. Porównanie wyników prostej identyfikacji z zadaną funkcją (7.5) z wyznaczonymi stałymi $f_{SB_0} = 0.95, a = 7.5, b = 13.6$ – krzywa 1, z rezultatami automatycznej metody identyfikacji iteracyjnej – punkty odpowiadają wynikom obliczeń, a aproksymująca je krzywa 2 odpowiada funkcji (7.5) ze stałymi $f_{SB_0} = 0.975, a = 12.5, b = 25$.

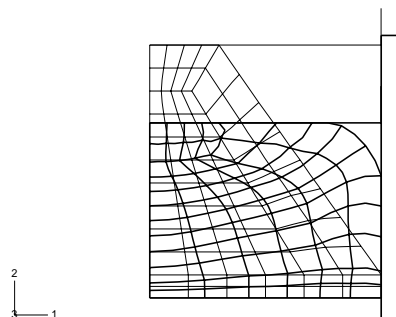
Taka metoda identyfikacji polegała się na intuicyjnym doborze postaci funkcji i dopasowaniu występujących w niej stałych przez wielokrotne obliczenia procesu jednorodnego ściskania w płaskim stanie odkształcenia. Procedurę tę można zautomatyzować, stosując metodę iteracyjną. Na początku zakłada się pewną startową wartość udziału pasm ścinania np. f_{SB}^{start} , a następnie wykonuje się serię obliczeń omawianego problemu ściskania w płaskim stanie odkształcenia. Na każdym kroku wyznaczonym przez zadany przyrost odkształcenia $\Delta\varepsilon$ sprawdza się czy wartości naprężenia σ_{33} , obliczone dla różnych wielkości $f_{SB} \in [0, 1)$, leżą odpowiednio blisko wartości wziętych z krzywej doświadczalnej. Iteracyjnie sprawdza się, czy ich różnica jest mniejsza od zadanej wielkości. Przyjęto, że zakres błędu wynosi 5%. Zmniejszenie tej wielkości powoduje silny wzrost liczby iteracji i wydłużenie czasu obliczeń. Do opracowania automatycznej procedury identyfikacji zastosowano algorytmy zaproponowane w pracach Nowak i Stachurski (2001) [157] i (2002) [158], które posłużyły do rozwiązania problemu nieliniowej regresji metodą globalnej optymalizacji. Tak zdefiniowane zadanie identyfikacji polega na poszukiwaniu wartości nieznanymi parametrów dla zadanej postaci funkcji f_{SB} oraz znanych danych wejściowych i wyjściowych. Zadanie takie jest nazywane problemem odwrotnym. Podejście takie w modelowaniu procesów kształtowania plastycznego metali stosowano w pracach: Kusiak i inni (1996) [113], Szyndler i inni (2000) [233], Szeliga i inni (2002) [232], Kowalski i inni (2006) [111]. Przegląd osiągnięć w rozwiązywaniu problemów odwrotnych związanych z plastyczną przeróbką metali można znaleźć np. w pracy Szyndler (2001) [234].

Na rys. 7.3 przedstawiono zbiór punktów odpowiadających obliczonym wartościom f_{SB} , które spełniają zadany warunek zgodności z wynikami doświadczalnymi. Pokazano także krzywą aproksymującą te punkty. Można zauważyć, że proponowana do identyfikacji funkcja $f_{SB}(\varepsilon^p)$ niewiele odbiega od punktów uzyskanych w automatycznej metodzie identyfikacji.

7.3 Weryfikacja modelu na przykładzie procesu kucia matrycowego

Wyznaczenie funkcji udziału pasm ścinania pozwala stosować prawo płynięcia plastycznego do rozwiązywania problemów brzegowych opisujących procesy kształtowania metali. Otwartym problemem pozostaje jednak określenie wpływu zmiany drogi obciążenia lub odkształcenia na postać zidentyfikowanej funkcji $f_{SB}(\varepsilon)$. Weryfikację proponowanego modelu opisanego równaniami (7.1-7.5) przeprowadzono w zastosowaniu do numerycznej symulacji płaskiego procesu kucia matrycowego w pracy Pęcherski i inni (2000) [197] oraz Nowak

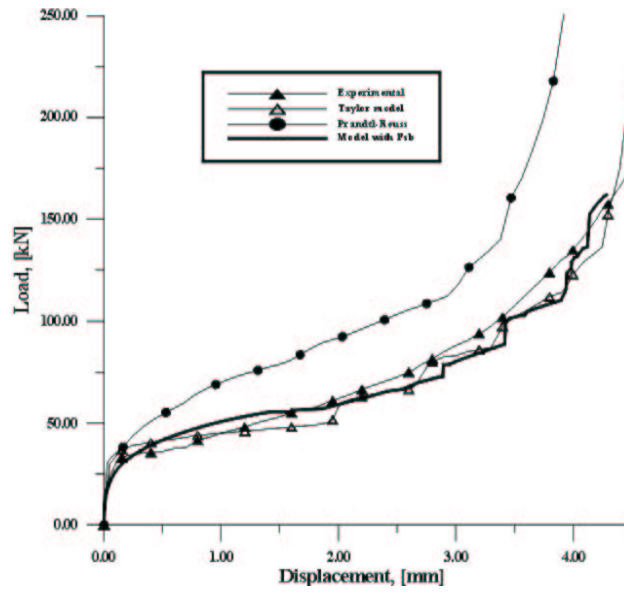
i Pęcherski (2002) [156]. Przyjęto podobną geometrię, warunki brzegowe oraz typ elementu jak w pracy Kalidindi i inni (1992) [104]. Na rys. 7.4 przedstawiono założony podział na elementy skończone i siatkę zdeformowaną.



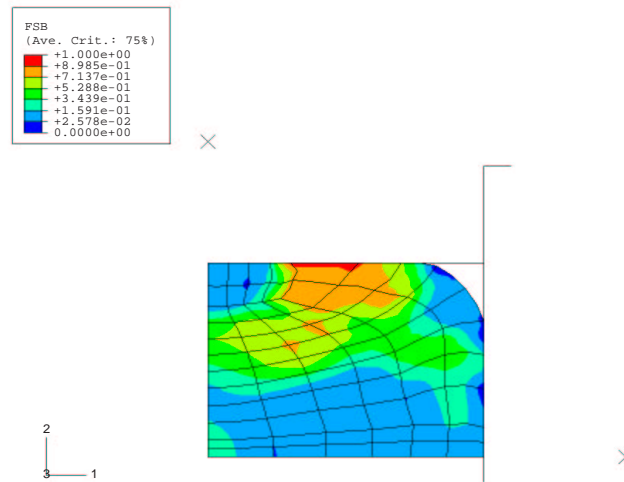
Rys. 7.4. Założony podział na elementy skończone, przed i po deformacji próbki.

Obliczenia numeryczne wykonano, stosując program ABAQUS/Standard (2001) [1], dla klasycznego modelu Prandtla-Reussa z izotropowym wzmocnieniem oraz dla modelu płynięcia plastycznego z udziałem pasm ścinania. Do prezentacji wyników wybrano wykres zmian siły przyłożonej do stempla w funkcji przemieszczenia stempla z górną powierzchnią deformowanej próbki pokazany na rys. 7.5. Wykres z zaczerpniętymi trójkątami odpowiada punktom doświadczalnym, natomiast wykres z trójkątami niewypełnionymi reprezentuje wyniki obliczeń numerycznych przytoczone z pracy Kalidindi i inni (1992) [104].

Można zauważyć, porównując zebrane na rys. 7.5 wyniki, że model plastyczności z identyfikowanym udziałem pasm ścinania zapewnia dobrą zgodność z danymi doświadczalnymi oraz rezultatami symulacji numerycznej Kalidindi i inni (1992) [104] otrzymanymi dla znacznie bardziej skomplikowanego modelu, który wymaga dużo większego czasu obliczeń. Widać także, że powszechnie stosowany model Prandtla-Reussa prowadzi do dużych rozbieżności wyników obliczeń i danych doświadczalnych. Na rys. 7.6 przedstawiono rozkład wartości udziału pasm ścinania f_{SB} w końcowym etapie deformacji. Pełną analizę rezultatów podano w pracy Nowak i Pęcherski (2002) [156].



Rys. 7.5. Wykresy siły przyłożonej do stempla w funkcji przemieszczenia stempla z górną powierzchnią deformowanej próbki.



Rys. 7.6. Rozkład wartości udziału pasm ścinania f_{SB} w końcowym etapie deformacji próbki.

7.4 Wnioski

Analiza wyników obliczeń numerycznych i doświadczalnych, które zostały zebrane na rys. 7.5, prowadzi do spostrzeżenia, że zastosowanie prostego modelu zadanego przez równania (7.3–7.5), który oparty jest na prawie płynięcia dla symetrycznego układu pasm ścinania daje dobrą zgodność z doświadczeniem. Dobra zgodność z eksperymentem obliczonej zależności siły nacisku na stemplu w funkcji przemieszczenia, pozwala stwierdzić, że lokalne obroty osi głównych tensora naprężenia i tensora prędkości naprężenia mieszczą się w zakresie dopuszczającym stosowanie prostej postaci prawa płynięcia. Konieczne są dalsze studia polegające na numerycznej symulacji badanych doświadczalnie procesów kształtowania plastycznego, które pozwolą określić klasę procesów do których można stosować proponowany opis konstytutywny.

8. Zagadnienie identyfikacji parametrów w modelach materiału z mikrouszkodzeniami

Wstęp

Rozdział ten poświęcony jest:

- Określeniu problemu identyfikacji odpornej (mało wrażliwej) na błędy pomiarowe.
- Sformułowaniu problemu identyfikacji dla różnych miar porowatości z różnymi funkcjami materiałowymi.
- Określeniu metody i algorytmu optymalizacji oraz sposobu całkowania równań różniczkowych w celu rozwiązania problemów identyfikacji.

8.1 Problem identyfikacji w mechanice

Przez pojęcie identyfikacja rozumie się utożsamianie pewnego modelu z rzeczywistym obiektem. W mechanice ciała stałego przez identyfikację rozumie się proces ustalania zależności między układem rzeczywistym a modelem. Rzeczywistym układem jest badane ciało, które podlega pewnym obciążeniom i z którego otrzymujemy dane o jego zachowaniu. Model natomiast służy do wygenerowania podobnej zbieżnej z rzeczywistością reakcji. Identyfikacja jest relacją zgodności między danymi z układu rzeczywistego a danymi wygenerowanymi przez model. W mechanice modele powinny mieć własność powtarzalności tzn. dane generowane z modelu odpowiadają danym z układu rzeczywistego. Idealny model generuje taką samą reakcję jak badany obiekt i odzwierciedla sposób, w jaki system rzeczywisty działa. Z praktycznego punktu widzenia akceptujemy modele, które posiadają tę własność, że pary wejście-wyjście modelu są zgodne w sensie przyjętego kryterium z parami wejście-wyjście obiektu rzeczywistego dla danego typu eksperymentu. Dla innego eksperymentu dany model może okazać się nieodpowiedni. Tak więc rodzaj i przebieg eksperymentu określa nam warunki, w których dokonywana jest identyfikacja. Model musi być na tyle ogólny, aby zapewniał uzyskanie wszystkich badanych reakcji obiektu rzeczywistego. W praktyce nie korzysta się z modelu, który zawiera nieskończoną ilość informacji. Natomiast korzysta się z uproszczonego zbioru informacji odpowiadających określonymu eksperymentowi. Wybór elementów

dają model opisujący tylko najważniejsze, z punktu widzenia badań, wejścia i wyjścia. Sam proces upraszczania modeli wynika z teorii modelowania i opiera się na założeniu, że nie wszystkie efekty są jednakowo ważne w określaniu rezultatów. Wśród modeli mechanicznych wyróżnia się modele deterministyczne i probabilistyczne. W modelach deterministycznych zasady opisujące wzajemnie relacje między elementami układu są określane zmiennymi opisowymi. Modele probabilistyczne to takie, w których relacje między elementami są określone regułami probabilistycznymi i są nazywane zmiennymi losowymi. Sam proces identyfikacji uzależniony jest od stopnia wiedzy o badanym obiekcie jeszcze na etapie wstępnym, przed rozwiązaniem problemu. Rozwiązaniu i analizie różnych problemów identyfikacji poświęcono wiele prac, np.: Söderström i Stoica (1989) [226], Nelles (2001) [146], Sobczyk (1986) [224], Mahnken i Stein (1996) [128], Springmann i Kuna (2003) [228].

Określeniem struktury modelu konstytutywnego zajęto się w poprzednich rozdziałach. Określenie parametrów modelu jest przedmiotem tego rozdziału. Proces identyfikacji w mechanice ciała stałego składa się z następujących etapów:

- zaplanowania eksperymentu: wybór wielkości do pomiaru, wybór częstotliwości próbkowania, ustalenie dokładności i rozkładu błędów;
- skorzystania z dobrego oprogramowania w procesie zbierania danych: interaktywnego, z możliwością robienia wykresów, filtrowania, identyfikacji nieparametrycznej z analizą korelacji, z wstępną weryfikacją, z możliwością transformowania prostych modeli do różnych reprezentacji;
- określenia struktury modelu: test F dla sprawdzenia czy model opisuje nasze zjawisko, modele przeparametryzowane (zbędne komplikacje), modele niedoparametryzowane (mała dokładność);
- ustalenia początkowych wartości parametrów modelu (znanych i nieznanych);
- ustalenia celu identyfikacji: identyfikacja wstępna, dokładna (do weryfikacji modeli teoretycznych);
- minimalizacji funkcji strat (jakości): estymacja parametrów określona jako minimum globalne;
- zastosowania estymacji parametrów odpornej na błędy pomiarowe;

- sprawdzenia, porównania i wyboru najlepszego modelu: testy statystyczne FPE (ang. *final prediction error*), AIC (ang. *Akaike information criterion*), Vuonga (1989) [245] (testy AIC i FPE opisane są np. w książce Söderström i Stoica (1989) [226]).

Modelem matematycznym ciała stałego jest układ równań różniczkowych lub algebraicznych, które można wyprowadzić. Modele takie można podzielić na ciągłe i dyskretne. Modele ciągłe to modele o parametrach rozłożonych w sposób ciągły. Oznacza to, że własności układu zależą od współrzędnych danego punktu. Modele ciągłe lub dyskretne, dzieli się z kolei na liniowe i nieliniowe. Przyczyną nieliniowości jest nieliniowość geometryczna i fizyczna. Układy nieliniowe można podzielić na układy liniowe lub nieliniowe ze względu na parametry (parametry zależą lub nie zależą od stanu układu). W zależności od stanu obiektu modele mogą być statyczne (stan układu nie zmienia się w czasie) lub dynamiczne. W przypadku modeli losowych, losowość parametrów układu mechanicznego wynika z losowości własności materiałów. W praktyce modelowania, przyjmuje się jednak, że własności materiału są zdeterminowane, a za wartości stałych materiałowych przyjmuje się wartości średnie. W samym procesie modelowania popełnia się pewne błędy wynikające z nieznaności wszystkich zjawisk fizycznych zachodzących w obiekcie (błędy modelowania), błędy przybliżenia rzeczywistego układu modelem liniowym lub słabo nieliniowym (błędy linearyzacji), błędy związane z pominięciem niektórych, mniej znaczących zjawisk fizycznych (błędy redukcji), błędy dyskretyzacji tzn. zastąpienia przebiegu ciągłego dyskretnym ciągiem wartości. Trzeba podkreślić, że w procesie modelowania istotny jest wybór struktury modelu. Przez strukturę modelu rozumie się postać równań różniczkowych opisujących zachowanie się modelu z dokładnością do parametrów. Wyboru struktury dokonuje się wewnątrz pewnej klasy struktur dopuszczalnych w rozpatrywanym problemie. Wyboru tego dokonuje się przy określonym celu badań i ograniczeń na podstawie wiedzy a priori, jak również na podstawie dostępnych wyników eksperymentów. Każdy model opisujący dany materiał podlegający identyfikacji musi być: możliwy do obserwowania, sterowania i identyfikowania (obserwowalny, sterowalny i identyfikowalny). Proces jest sterowalny (ang. *controllability*) jeżeli można znaleźć taki zbiór zmiennych sterujących, które sprowadzają układ z dowolnego stanu początkowego do pewnego, określonego z góry stanu końcowego w skończonym czasie. Natomiast proces określa się obserwowalnym (ang. *observability*), jeśli na podstawie pomiarów sygnału wyjściowego można określić stan wcześniejszy lub aktualny procesu. Szersze określenie tych pojęć można znaleźć w książce Nellesa (2001) [146]. Identyfikowalność układu jest związana

z możliwością określenia optymalnej struktury i estymacji parametrów modelu przy wykorzystaniu wiedzy a priori o obiekcie i danych z eksperymentu na tym obiekcie. Można to pojęcie określić również w ten sposób, że system jest możliwy do zidentyfikowania dla danej grupy modeli jeżeli odpowiednie oszacowane parametry są zgodne. Należy podkreślić, że własność identyfikowalności zależy od struktury modelu, metody identyfikacji i warunków przeprowadzenia eksperymentów. W literaturze różnie rozumie się pojęcie identyfikowalności parametrów modelu o znanej strukturze, patrz np. Söderström i Stoica [226], Holnicki i inni (2000) [94] lub Nelles (2001) [146]. Dużą grupę stanowią prace w których pojęcie identyfikowalności związane jest z asymptotycznym zachowaniem się estymatorów (oszacowań) parametrów. Oznacza to, że ciąg estymatorów jest zbieżny do wartości dokładnych parametrów. W pracach z tej grupy stosuje się zbieżność prawdopodobieństwa, zbieżność z pewnością¹, zbieżność ze średnim kwadratem. Tak się postępuje gdy struktura badanego układu i wybranego modelu są jednakowe co spotyka się rzadko. Inna grupa prac dotyczących identyfikowalności parametrów oparta jest na przewidywaniu (przepowiadaniu, ang. *prediction*) własności modelu. Tak rozumianą identyfikowalność można zdefiniować, dysponując dowolną miarą różnic pomiędzy sygnałami wyjścia modelu i obiektu oraz niepustym zbiorem wartości parametrów modelu takim, że w granicy, gdy liczba pomiarów rośnie do nieskończoności, miara różnic jest równa zero. Dokładniej pojęcie to jest zdefiniowane w książce Söderström i Stoica (1989) [226] w rozdziale 6.4. Stwierdzenie, że dany układ jest nieidentyfikowalny oznacza, że nie ma możliwości, na podstawie posiadanych informacji, dokonać identyfikacji modelu rozważanego układu.

Proces identyfikacji wymaga: określenia funkcji jakości dopasowania, co jest treścią rozdziału 8.2, określenia danych eksperymentalnych wykorzystywanych do oszacowania parametrów występujących w modelu, co jest treścią rozdziałów 8.3–8.7, ustalenia metody określania minimum funkcji dopasowania (metoda optymalizacji) przedstawionej w rozdziale 8.8 oraz sposobu rozwiązywania równań różniczkowych rozważanego problemu, co jest tematem rozdziału 8.9.

8.2 Problem identyfikacji wykorzystującej odporne funkcje strat

W konwencjonalnej metodzie identyfikacji głównym celem jest:

- znalezienie wartości parametrów modelu zapewniających minimalną wartość funkcjonału średniokwadratowego obliczoną jako wartość stosownej funkcji strat (jakości) f zależnej od nieznanymi parametrów \mathbf{x} , co można

zapisać w postaci

$$\min_{\mathbf{x} \in V} f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M \{Y_i - \mathcal{F}(\bar{\epsilon}_{p_i}, \mathbf{x})\}^2 = \sum_{i=1}^M \{r_i(\mathbf{x})\}^2, \quad (8.1)$$

gdzie $V \subset \mathbb{R}^n$ oznacza zbiór wartości dopuszczalnych parametrów (n jest liczbą nieznanymi parametrów do zidentyfikowania), Y_i są wielkościami obserwowanymi, $\mathcal{F}(\bar{\epsilon}_{p_i}, \mathbf{x})$ są wielkościami obliczonymi. \mathcal{F} reprezentuje przyjęty model i wiąże wartości wejściowe niezależnej zmiennej, $\bar{\epsilon}_{p_i}$, z wartościami wyjściowymi, Y_i , \mathbf{x} oznacza wektor nieznanymi parametrów a $r_i(\mathbf{x}) = Y_i - \mathcal{F}(\bar{\epsilon}_{p_i}, \mathbf{x})$, gdzie $i = 1, 2, \dots, M$ a M jest liczbą obserwacji. Przez $r_i(\mathbf{x})$ rozumiemy wartości residuów.

Oznacza to, że poszukiwane parametry uzyskuje się w wyniku minimalizacji funkcji celu, która odzwierciedla rozkład błędów wynikających z procesu modelowania przy z góry określonych założeniach. Najczęściej przyjmuje się, że błędy mają rozkład normalny a estymację przeprowadzana jest metodą najmniejszych kwadratów różnic. Optymalność metody najmniejszych kwadratów jest warunkowa i zależy od własności błędów. Jeżeli błędy są niezależne, identyczne i mają rozkład normalny otrzymujemy nieobciążoną i efektywną estymację parametrów dla naszego systemu w sensie estymacji największej wiarygodności (ang. *maximum likelihood estimation*). Powstaje jednak trudność w sytuacjach, gdy błędy nie spełniają powyższych założeń a priori.

Zwykle w danych doświadczalnych występują pewne pomiary obarczone błędami lub zupełnie błędne wielkości spowodowane na przykład przez zakłócenia przy przetwarzaniu pomiarów. Punkty pomiarowe znacznie odbiegające od pozostałych (pomiary oddalone, ang. *outliers*) uwidaczniają się jako 'piki' na wykresach residuów $r_i(\mathbf{x})$, i mają wpływ w sposób istotny na identyfikowany model poprzez funkcję strat (jakości).

W literaturze jest wiele prac poświęconych sposobom modyfikowania, uzupełniania lub usuwania znacznie odbiegających punktów pomiarowych ze zbiorów z danymi doświadczalnymi. Pewne wskazówki takich działań podano również w książkach: Söderström i Stoica (1989) [226] i Eadie i inni (1989) [61] oraz w wielu publikacjach np. w pracy Mugglestone i inni (2000) [137]. Najczęściej działanie takie polega na:

- użyciu testów na wyszukiwanie pomiarów oddalonych i następnie ich usunięcie;
- zastąpieniu pomiarów oddalonych nowymi wartościami uśrednionymi lub

przewidywanymi;

- osłabienie wpływu pomiarów oddalonych poprzez użyciu specjalnych funkcji strat.

Nawet dla jakościowo dobrych danych doświadczalnych rozkład błędów niekoniecznie jest rozkładem normalnym. Można nawet stwierdzić ogólnie, że pomiary rzeczywiste w swej naturze mają rozkłady inne niż rozkłady normalne. Nieuniknione błędy pomiarowe zwykle dzieli się na: błędy przypadkowe, systematyczne (stałe w danych warunkach pomiarowych) i nadmierne (wynikające z fałszywych odczytów), patrz np.: Bąk (1989) [17], Taylor (1999) [236]. Podstawowym źródłem wymienionych błędów w procesie pomiarowym są:

- nieścisłości w definicji wielkości mierzonej i jej zależność od innych wielkości lub warunków np. otoczenia;
- błędy samego sprzętu pomiarowego, jego wskazań i czułości;
- błędy odczytów wskazań przyrządów (błędy ludzkie);
- błędy metody (niewłaściwe narzędzia dla badanego obiektu, oddziaływanie narzędzi na obiekt);
- błędy środowiskowe (warunki otoczenia: temperatura, ciśnienie, drgania, uderzenia, zapylenie);
- błędy obliczeniowe (zaokrąglenia i uproszczenia).

Różnice lokalne własności materiału użytego do badań oraz błędy pomiarowe są przyczyną nieraz znacznych rozrzutów w danych doświadczalnych. Charakter błędów pomiarowych w istotny sposób zależy od metody przeprowadzenia pomiaru. Wyróżnia się metody bezpośrednie i pośrednie. Różnym rodzajom pomiarów odpowiadają różne metody analizy błędów, patrz np. Taylor (1999) [236]–metody standardowe, lub Kotulski i Szczepiński (2004) [109]– metody zaawansowane prezentujące wektorowe funkcje zmiennych losowych.

Do chwili obecnej tylko niewiele prac poświęconych jest badaniu wpływu rozrzutów danych na identyfikację parametrów w modelach nieliniowych. W pracach Seibert i inni (2000) [216] oraz Harth i inni (2004) [90] bada się wpływ rozrzutów w danych doświadczalnych na proces identyfikacji parametrów w nieliniowym modelu materiału Bodnera i Partoma w wersji rozrzeszonej zaprezentowanej w pracy Chan i inni (1988) [38]. W pracach tych problem estymacji

parametrów traktowano jako problem stochastyczny wymagający dużej liczby danych doświadczalnych. Pomierzone zbiory danych doświadczalnych powiększono generując komputerowo dużą liczbę nowych danych. W obecnej pracy zakłada się, że zbiór danych doświadczalnych jest dany, zamknięty i zawiera tylko wielkości pomierzone. Takie dane obserwowane wykazują efekt losowości i posiadają rozrzuty. Gdy rozkład błędów danych doświadczalnych nie jest normalny (gaussowski) oszacowane parametry nie są wówczas nieobciążone (stają się zależne od rozkładu błędów) na co wskazał Huber (1977) [98]. W takich przypadkach konieczne jest użycie metod identyfikacji parametrów odpornych na rodzaje błędów (ang. *robust identification methods*). Celem identyfikacji odpornej (niewrażliwej) jest opracowanie takiej metody identyfikacji parametrów, która będzie określać parametry nieobciążone zarówno w przypadku gdy błędy w pomiarach są liczne i znaczące i mają znany rozkład (niekoniecznie rozkład normalny) lub, gdy błędy te są niewielkie, ale ich rozkład odbiega od doskonałości (np. nie wykazuje symetrii). Do zaprezentowania istoty tej metody, posłużymy się sformułowaniem problemu identyfikacji opisanym wzorem (8.1).

Metoda najmniejszych kwadratów pozwala nam określić wektor parametrów \mathbf{x} w wyniku minimalizacji sumy kwadratów różnic. W wielu pracach parametry otrzymuje się po prostu, jako warunek konieczny, rozwiązania układu k równań, które otrzymujemy w wyniku różniczkowania wyrażenia $\sum_{i=1}^M \{Y_i - \mathcal{F}(\bar{\epsilon}_{p_i}, \mathbf{x})\}^2$ (patrz wzór (8.1)) ze względu na wektor parametrów \mathbf{x} i przyrównaniu tych pochodnych do zera:

$$\sum_{i=1}^M \frac{\partial}{\partial x_j} \{Y_i - \mathcal{F}(\bar{\epsilon}_{p_i}, \mathbf{x})\}^2 = 0, \quad j = 1, 2, \dots, n,$$

gdzie wektor \mathbf{x} oznacza zbiór parametrów od 1 do n a M jak poprzednio jest liczbą obserwacji.

Jeśli błędy mają rozkład normalny, estymacje metodą najmniejszych kwadratów są estymacjami największej wiarygodności, a estymacje mają najmniejsze wariancje (rozbieżności) w sensie statystycznym.

W przypadku, gdy w zbiorze danych doświadczalnych są liczne błędne pomiary lub nawet pojedyncze lecz znacznie odbiegające od innych obserwacji wielkości, parametry określone metodą najmniejszych kwadratów są niewłaściwe, a konwencjonalna metoda identyfikacji minimalizująca sumę kwadratów odchyleń okazuje się nieskuteczna. Do opracowania metody, która będzie odporna na rodzaj i rozkład błędów, zwykle wykorzystuje się podejście znane w

statystyce jako podejście M-estymatorów. W takim podejściu jawną funkcję kwadratową w wyrażeniu (8.1) należy zastąpić ogólniejszą funkcją $\vartheta(r_i(\mathbf{x}))$. Jak podano w książce Seber i Wild (1989) [215] przez analogię z odporną regresją liniową, M-estymatorem $\tilde{\mathbf{x}}$ parametrów \mathbf{x} jest rozwiązanie równania (patrz Huber (1977) [98])

$$\sum_{i=1}^M \frac{\partial \mathcal{F}(\bar{\epsilon}_{p_i}, \tilde{\mathbf{x}})}{\partial \mathbf{x}_j} \vartheta \left(\frac{Y_i - \mathcal{F}(\bar{\epsilon}_{p_i}, \mathbf{x})}{\tilde{\sigma}} \right) = 0 ,$$

gdzie ϑ jest odpowiednią funkcją, która została zdefiniowana poniżej, a $\tilde{\sigma}$ jest oszacowaniem dyspersji (rozrzutu). Więcej szczegółów o podejściu zaproponowanym przez Hubera jako szczególny podzbiór rodziny M-estymatorów i o własnościach różnych funkcji ϑ podano również w książce Lehmana (1991) [116] (rozdział 5.6 str. 353). Głównym powodem wprowadzenia M-estymatorów była potrzeba skonstruowania oszacowań parametrów odpornych na odstępstwa rozkładu błędów od rozkładu normalnego, szczególnie wtedy, gdy faktyczne rozkłady są rozkładami o szerokich (tłustych) zakończeniach. W podejściu tym definiuje się odporność, krzywą wpływu oraz punkty załamania, pojęcia wprowadzone przez Humpela 1968, 1971, 1974 (patrz np. Lehmann (1991) [116], rozdział 5.6). Istotny wkład do rozwoju teorii estymacji odpornej miały prace Tuckeya, np. praca z (1960) a następnie prace Hubera z (1964), a systematyczny wykład teorii estymacji odpornej znajduje się w książce Hubera (1981) [99].

Inne odstępstwa od klasycznych założeń, np. odstępstwa od założenia o niezależności pomiarów (niezależnych, ale nie jednakowo rozłożonych obserwacji) uwzględnił w swoich pracach Beran (1982) oraz Carroll i Ruppert (1982). Jeszcze inne odstępstwa, np. wzajemną zależność pomiarów, którą badał Portnoy (1977), omówiono i podano referencje wymienionych prac w książce Lehmana (1991) [116] (rozdział 5.6). Podstawowym założeniem w pracach poświęconych odporności jest założenie o symetryczności rozkładu (bez tego w takim podejściu trudno jest nawet zdefiniować, co się estymuje). Alternatywne podejście bez założenia o typie rozkładu podał Huber (1981) [99].

Dla standardowej funkcji strat $V(\mathbf{x}) = \sum_i^M r_i^2(\mathbf{x})$, jak już wspomniano, estymator największej wiarygodności jest asymptotycznie statystycznie efektywny i maksymalizuje logarytmiczną funkcję wiarygodności (zdefiniowaną w rozdziale 9)

$$\ln L(\mathbf{x}) = \ln p(\bar{\epsilon}_{p_1}, \bar{\epsilon}_{p_2}, \dots, \bar{\epsilon}_{p_M} \mid \mathbf{x}) ,$$

gdzie $p(\bar{\epsilon}_{p_1}, \bar{\epsilon}_{p_2}, \dots, \bar{\epsilon}_{p_M} \mid \mathbf{x})$ jest warunkową funkcją rozkładu prawdopodobieństwa zmiennej $\bar{\epsilon}_{p_i}, i = 1, \dots, M$.

Stosując założenie, że $r_i(\mathbf{x})$ jest białym szumem o gęstości rozkładu normalnego $\mathcal{N}(r_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda}} \exp(-\frac{1}{2} \frac{r_i^2}{\lambda^2})$, możemy policzyć logarytm takiej funkcji

$$-\ln \mathcal{N}(r_i) = r^2(\mathbf{x}) + \text{składowa niezależna od } \mathbf{x} .$$

Oznacza to, że w przypadku rozkładu normalnego błędów (gaussowskiego) optymalna funkcja strat sprowadza się do standardowej funkcji sumy kwadratów odchyleń. W przypadku danych doświadczalnych z obserwacjami nietypowymi, funkcja gęstości rozkładu reszt (odchyleń) zwykle maleje wolniej wraz z $|r_i|$ niż funkcja rozkładu normalnego. Tak więc w standardowej funkcji strat duże wartości reszt są w niej uwzględniane w większym stopniu i błędy w pomiarach mają znaczący wpływ na funkcję strat.

Jest wiele sposobów jakościowej modyfikacji standardowej funkcji strat i otrzymania różnych funkcji $\vartheta(r_i(\mathbf{x}))$ patrz np. Söderström i Stoica (1989) [226] str. 498. Funkcja $\vartheta(r_i(\mathbf{x}))$ jest to zwykle funkcja wypukła, rzędu, który zapewnia jednoznaczne rozwiązanie i posiada ciągłą pochodną $\psi = \vartheta'(r_i(\mathbf{x}))$. Różne, nawet proste propozycje na funkcję ϑ dają funkcje $\psi = \vartheta'$, które powodują, że rozwiązanie procesu minimalizacji (estymacji parametrów) musi być przeprowadzone numerycznie w ogólności z zastosowaniem zwykle procesu iteracyjnego. Użycie funkcji ψ wynika z koncepcji Hampela funkcji wpływu (patrz np. Hampel i inni (1986) [88]), który badał wpływ pojedynczych residuów na oszacowania parametrów. I tak, gdy funkcja ψ przybiera nieograniczone wartości, to oznacza, że błędy $r_i(\mathbf{x})$ mają nieskończenie duży wpływ na estymację parametrów. Dlatego, najważniejszym wymogiem dla uzyskania odporności na błędy pomiarowe jest, aby ψ była ograniczona. Funkcja ψ powinna mieć małe wartości tam, gdzie residua są duże. W rzeczywistości wartościom funkcji ψ odpowiada wrażliwość na błędy. Funkcja ta aproksymuje wpływ błędnych pomiarów lub pomiarów znacząco odbiegających od innych, o ustalonej wielkości odchyleń, na wartość estymowanych parametrów (w sposób przybliżony). Podejście Hubera było i jest inspiracją dla wielu opracowań identyfikacji odpornej na błędy pomiarowe, a własności funkcji wpływu Hampela są heurystyką pozwalającą określić funkcje ψ . W celu otrzymania odpornych estymatorów, ich funkcje wpływu, charakteryzowane przez ψ , muszą być ograniczone, gdy obserwowane residua $r_i(\mathbf{x})$ są duże lub zbiegają do ∞ , i to bez znaczenia dla jakich to jest rozkładów błędów r_i . Dla estymacji metodą najmniejszych kwadratów, gdy

jako funkcji ϑ używamy funkcji kwadratu błędów, $\vartheta = r_i^2$, funkcja wpływu jest wówczas $\psi = 2 \cdot r_i$. Mając dużo obserwacji odległych $r_i \rightarrow \infty$, ψ będzie rosło do ∞ , co oznacza, że pomiary oddalone mają duży wpływ na estymację parametrów. Z tego punktu widzenia, estymacja parametrów metodą najmniejszych kwadratów jest wrażliwa na błędy w pomiarach, gdyż każda wielkość pomierzona jest traktowana równoważnie i ma tę samą wagę. W metodzie identyfikacji odpornej nie możemy traktować wszystkich pomiarów doświadczalnych z tą samą wiarygodnością, jak w metodzie najmniejszych kwadratów. Należy, wprowadzić ograniczone (zwykle małe) wagi dla błędnych lub bardzo oddalonych obserwacji lub wręcz zerowe wagi, aby pomijać ich wpływ na estymację parametrów.

8.2.1 Różne funkcje strat (jakości dopasowania)

Parametry materiałowe są ustalone w wyniku minimalizacji różnic między danymi doświadczalnymi a odpowiedzią modelu. W tym celu wykorzystuje się funkcje odległości, które są funkcjami skalarnymi parametrów dla których system równań określony przez nasz model i historię obciążenia ma jednoznaczne rozwiązanie. W optymalizacji funkcje takie nazywane są funkcjami celu.

W przeprowadzonej analizie wykorzystamy następujące funkcje strat:

1. Standardowa funkcja kwadratu różnic.

Kwadratowa funkcja strat (jakości)

$$\min_{\mathbf{x} \in V} f(\mathbf{x}) = F_1(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M r_i^2(\mathbf{x}), \quad (8.2)$$

gdzie

$$r_i(\mathbf{x}) = Y_i - \mathcal{F}(\bar{\epsilon}_i^p, \mathbf{x}), \quad (8.3)$$

$V \subset \mathbb{R}^n$ jest zbiorem dopuszczalnych wartości parametrów do identyfikacji, n jest liczbą nieznanych parametrów do identyfikacji i M jest liczbą obserwacji (pomierzonych wartości przyczyn (wejść) i odpowiednich reakcji (wyjść)). W równaniu (8.3) $\mathcal{F}(\bar{\epsilon}_i^p, \mathbf{x})$ oznacza wyliczoną reakcję modelu podczas, gdy Y_i jest pomierzoną wartością zmiennej badanej (porowatość) w danym punkcie dla danego ekwiwalentnego edkkształcenia plastycznego $\bar{\epsilon}_i^p$.

W tym przypadku funkcja celu jest funkcją $\vartheta_1(r_i) = (r_i)^2$. W takiej metodzie identyfikacji (metoda najmniejszych kwadratów) wszystkie obserwacje są traktowane jednakowo, mają tę samą wagę.

Następne trzy funkcje strat (jakości) pozwalają osłabić wpływ dużych odchyłeń albo ich odrzucenie. Mają one różne postacie funkcji strat i funkcji wpływu.

2. Odporne funkcje strat.

Funkcja strat P.J. Huber'a

$$F_2(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M \vartheta_2 \left(\frac{r_i(\mathbf{x})}{\chi} \right), \quad (8.4)$$

gdzie

$$\vartheta_2(t) = \begin{cases} t^2, & |t| \leq A, \\ 2A|t| - A^2, & |t| \geq A. \end{cases} \quad (8.5)$$

$$\dot{\vartheta}_2(t) = \begin{cases} 2t, & |t| \leq A, \\ 2A, & |t| \geq A. \end{cases} \quad (8.6)$$

$$\ddot{\vartheta}_2(t) = \begin{cases} 2, & |t| \leq A, \\ 0, & |t| \geq A \end{cases} \quad (8.7)$$

i χ jest pewną miarą dyspersji określoną przez

$$\chi^a \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M |r_i(\Theta^a)|, \quad (8.8)$$

gdzie Θ^a jest przybliżeniem do estymowanego \mathbf{x} .

Funkcja P.J. Hubera (1977, 1981) [98, 99] pozwala na redukcję lub pominięcie wpływu odległych (ekstremalnych) pomiarów powodujących wzrost odchyłeń (residuów) ponad założone wartości progowe.

Funkcja strat Beatona i Tuckeya $F_3(\mathbf{x})$

$F_3(\mathbf{x})$ jest taka sama jak funkcja P.J. Hubera $F_2(\mathbf{x})$, lecz $\vartheta(t)$ jest zdefiniowane odmiennie

$$\vartheta_3(t) = \begin{cases} \frac{1}{3}A^2 \left[1 - \left[1 - (t/A)^2 \right]^3 \right], & |t| \leq A, \\ \frac{1}{3}A^2, & |t| \geq A. \end{cases} \quad (8.9)$$

$$\dot{\vartheta}_3(t) = \begin{cases} 2t \left[1 - (t/A)^2 \right]^2, & |t| \leq A, \\ 0, & |t| \geq A. \end{cases} \quad (8.10)$$

$$\ddot{\vartheta}_3(t) = \begin{cases} 2 \left[1 - (t/A)^2 \right] \left[1 - 5(t/A)^2 \right], & |t| \leq A, \\ 0, & |t| \geq A. \end{cases} \quad (8.11)$$

Funkcja strat normy l_1

$$F_4(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M |r_i(\mathbf{x})|. \quad (8.12)$$

W tym przypadku funkcja celu ϑ ma następującą postać

$$\vartheta_4(t) = |t|. \quad (8.13)$$

Minimalizacja funkcji strat normy l_1 zdefiniowanej wzorem (8.12) osłabia, podobnie jak wcześniejsze funkcje strat, wpływ dużych odchyłeń w porównaniu do podejścia najmniejszych kwadratów. Funkcja wpływu ($\psi = \vartheta_4'$) ma wartości -1 gdy t jest ujemne a $+1$ gdy t jest dodatnie i jest nieokreślone gdy $t = 0$. Tak więc spełnia wymagania odpornej funkcji wpływu, która musi być ograniczona, gdy liczba obserwacji t zbiega do nieskończoności.

8.2.2 Problem identyfikacji dla odpornych funkcji strat

Problem identyfikacji parametrów materiałowych jest problemem znalezienia takich parametrów, które zapewniają minimalne wartości jednej z funkcji strat opisanych w rozdziale powyżej. Problem matematycznie daje się zapisać jako

$$\min_{\mathbf{x} \in V} F_i(\mathbf{x}) = \sum_{j=0}^M \vartheta_i(r_j(\mathbf{x})), \quad i = 1, \dots, 4, \quad (8.14)$$

gdzie $V \subset \mathbb{R}^n$ oznacza zbiór dopuszczalnych parametrów (n jest liczbą poszukiwanych parametrów). Wektor \mathbf{x} oznacza nieznanne parametry. Natomiast $r_j(\mathbf{x}) = Y_j - \tilde{Y}_j$ jest różnicą pomiędzy wartościami obserwowanymi Y_j , a odpowiednimi wyliczonymi wartościami \tilde{Y}_j ($\tilde{Y}_j = \mathcal{F}(\bar{\epsilon}_j^p, \mathbf{x})$). Wielkość $\mathcal{F}(\bar{\epsilon}_j^p, \mathbf{x})$ reprezentuje przyjęty model i wiąże ze sobą wprowadzane wartości zmiennej niezależnej $\bar{\epsilon}_j^p$ z wartościami wyprowadzonymi ξ . Podstawiając związek $\tilde{Y}_j = \mathcal{F}(\bar{\epsilon}_j^p, \mathbf{x})$ do równania (8.14), otrzymujemy

$$\min_{\mathbf{x} \in V} \sum_{j=1}^M \vartheta_i \left(Y_j - \mathcal{F}(\bar{\epsilon}_{p_j}, \mathbf{x}) \right), \quad i = 1, \dots, 4. \quad (8.15)$$

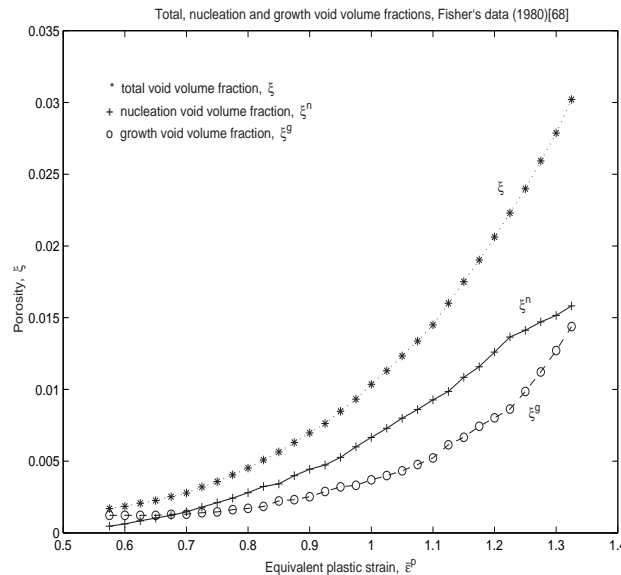
Drugi człon w równaniu (8.15) reprezentuje obliczone wartości \tilde{Y}_j , a M jest liczbą obserwacji. W rzeczywistości rozwiązujemy cztery różne problemy identyfikacji. Każdy problem odpowiada innej funkcji strat $\vartheta_i(t)$, $i=1, 2, 3, 4$.

8.3 Dane eksperymentalne Fishera użyte do oszacowania parametrów

Dane eksperymentalne użyte do oszacowania parametrów zostały dokładnie opisane w rozdziale 2. Należy podkreślić, że

- dane uzyskano dla próbek cylindrycznych, a pomiary dokonano w temperaturze pokojowej.

Do dalszej analizy przyjęto wyniki uzyskane w pracy Fishera (1980) [68] i Fishera i Gurlanda (1981) [69] dla objętościowej miary porowatości całkowitej ξ , nukleacyjnej ξ_n i wzrostu ξ_g przedstawionej na rys. 8.1.



Rys. 8.1. Porowatość całkowita ξ oraz część nukleacyjna ξ_n i wzrostu ξ_g w funkcji ekwiwalentnego odkształcenia plastycznego $\bar{\epsilon}_p$ (dane z pracy Fishera (1980) [68] dla stali typu B1).

W opisie ewolucji pustek wykorzystano następujące rezultaty eksperymentu Fishera:

- Pustki powstają generalnie w powiązaniu z cząsteczkami drugiej fazy o rozmiarach większych niż średni wymiar cząsteczki z całej populacji. Rzadko formują się pustki w bardzo małych, odizolowanych cząsteczkach, nawet dla zaawansowanego stanu deformacji, który istnieje w obszarze 'szyjki' w próbkach rozciąganych.

- Pustki tworzą się przez dekohezję połączenia cząstka-osnowa dla blisko sąsiadujących cząstek leżących wzdłuż osi rozciągania.
- Znaczna dekohezja połączenia cząstka-osnowa rozpoczyna się przy zaawansowanych deformacjach (w eksperymencie Fishera z Gurlandem odpowiadających ekwiwalentnemu odkształceniu plastycznemu $\bar{\epsilon}_p = 0.75$, dla stali typu B).
- Na przekroju minimalnym w obszarze szyjki w stalach węglowych źródłem pustek było 10 – 40% cząstek drugiej fazy.
- Cząsteczki cementytu o nieregularnych kształtach ulegają często wewnętrznym pęknięciom. Pęknięcia mają tendencję do układania się w kierunku prostopadłym do kierunku rozciągania.

8.4 Model materiału z mikrouszkodzeniami

8.4.1 Związek konstytutywny dla materiału sprężysto-plastycznego z mikrouszkodzeniami

Zachowanie się materiału z mikrouszkodzeniami opisano z wykorzystaniem teorii plastyczności i modelu konstytutywnego zaproponowanego przez Rudnickiego i Rice'a w pracy z 1975 [210] właściwego dla materiałów dylatacyjnych, wykorzystanego również przez Gursona (1975) [85] dla materiałów ciągliwych z pustkami. Postać tego związku jest następująca

$$D_{ij}^p = \frac{1}{H} P_{ij} Q_{kl} \bar{\sigma}^{kl} \quad , \quad P_{ij} = \frac{\partial \phi}{\partial \sigma_{ij}} \quad , \quad Q_{kl} = \frac{\partial \phi}{\partial \sigma_{kl}} \quad , \quad (8.16)$$

gdzie $\bar{\sigma}$ jest pochodnej Zaremby-Jaumann'a tensora naprężenia Cauchy'go, D^p oznacza tensor prędkości deformacji plastycznej, H jest modułem plastycznym ciała z pustkami i ϕ jest potencjałem plastycznym. Dla plastycznych ciał z mikrouszkodzeniami i z warunkiem uplastycznienia typu Gurson'a (np. Gurson-Tvergaard-Needleman z parametrami q_1 i $q_2 = q_1^2$) i potencjałem ϕ o postaci

$$\phi(\sigma, \xi, \bar{\sigma}) = \frac{3}{2} \frac{S_{ij} S_{ij}}{\bar{\sigma}^2} + 2q_1 \xi \cosh\left(\frac{\sigma_{kk}}{2\bar{\sigma}}\right) - 1 - (q_1^2 \xi)^2 = 0 \quad (8.17)$$

związek konstytutywny (8.16) da się przedstawić jako

$$D_{ij}^p = \frac{1}{H} \left(\frac{3S_{ij}}{\bar{\sigma}^2} + \frac{\alpha}{\bar{\sigma}} \delta_{ij} \right) Q_{kl} \bar{\sigma}^{kl} \quad , \quad (8.18)$$

gdzie $S_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3} \sigma_{kk} \delta_{ij}$ i $\alpha = q_1 \xi \sinh\left(\frac{\sigma_{kk}}{2\bar{\sigma}}\right)$.

8.4.2 Równanie ewolucji miary objętościowej mikrouszkodzeń

Porowatość definiujemy tak jak w rozdziale 5. przez parametr mikrouszkodzeń $\xi = \frac{V_v}{V} = 1 - \frac{\rho}{\rho_M}$, gdzie V_v to objętość pustek w rozważanej objętości V o gęstości ρ . Symbol V oznacza objętość osnowy o gęstości ρ_M a symbol V_v objętość pustek.

Równanie ewolucji dla parametru mikrouszkodzeń przyjęto w postaci (Needleman i Rice (1978)[144], Perzyna (1984)[172] oraz patrz rozdział 5):

$$\begin{aligned} \dot{\xi} &= \dot{\xi}^n + \dot{\xi}^g \\ &= h(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{x}) \frac{1}{1-\xi} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{D}^p) + g(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{x})(1-\xi) \text{tr}(\mathbf{D}^p), \end{aligned} \quad (8.19)$$

gdzie $h(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{x})$ i $g(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{x})$ są funkcjami materiałowymi, $\bar{\epsilon}_p$ jest ekwiwalentnym odkształceniem plastycznym. Przyjęto, że funkcje materiałowe $h(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{x})$ i $g(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{x})$ zależą tylko od ekwiwalentnego odkształcenia plastycznego $\bar{\epsilon}_p$ i nieznanymi parametrów \mathbf{x} .

8.4.3 Prawo zachowania masy

Rozwój mikrouszkodzeń jest zgodny z równaniem ewolucji i zachodzi w zgodzie z prawem zachowania masy. Tak jak w rozdziale 5.1.1 przyjęto, prawo zachowania masy w postaci

$$h(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{x}) \frac{1}{(1-\xi)^2} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{D}^p) + (g(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{x}) - 1) \text{tr}(\mathbf{D}^p) = \frac{\dot{\rho}_M}{\rho_M} = 0. \quad (8.20)$$

8.4.4 Równanie ewolucji dla porowatości w obszarze 'szyjki'

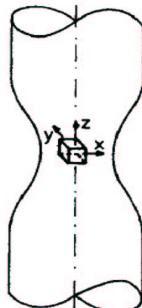
Przyjęto, że w punkcie centralnym szyjki o współrzędnych jak na rysunku 8.2 słuszne jest następujące równanie ewolucji dla parametru porowatości

$$\frac{\dot{\xi}}{\bar{\epsilon}_p} = \left[\mathbf{h} \frac{1}{1-\xi} \left(\lambda_1 \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{zz}} + \lambda_2 \frac{\sigma_{yy}}{\sigma_{zz}} + 1 \right) + \mathbf{g}(1-\xi)(\lambda_1 + \lambda_2 + 1) \right] \frac{1}{\sqrt{\lambda^*}}, \quad (8.21)$$

gdzie $\bar{\epsilon}_p$ jest ekwiwalentnym odkształceniem plastycznym, $\mathbf{h} = h(\bar{\epsilon}^p, a_1, b_1, c_1)$ i $\mathbf{g} = g(\bar{\epsilon}^p, a_2, b_2, c_2)$ są funkcjami materiałowymi do identyfikacji.

Wprowadzamy oznaczenia

$$\lambda_1 = \frac{D_{xx}^p}{D_{zz}^p}, \quad \lambda_2 = \frac{D_{yy}^p}{D_{zz}^p} \quad \text{i} \quad \lambda^* = \frac{2}{3} [(\lambda_1)^2 + (\lambda_2)^2 + 1].$$



Rys. 8.2. Współrzędne punktu centralnego w obszarze szyjki.

Wykorzystując związek konstytutywny (8.18) możemy λ_1 , λ_2 wyrazić jako

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{3S_{xx} + \bar{\sigma}\alpha}{3S_{zz} + \bar{\sigma}\alpha}, \quad (8.22)$$

$$S_{xx} = \sigma_{xx} - \frac{1}{3}\sigma_{kk}, \quad S_{zz} = \sigma_{zz} - \frac{1}{3}\sigma_{kk}, \quad \sigma_{kk} = \sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}.$$

8.5 Stan naprężenia w 'szyjce'

Wykorzystajmy rozwiązanie Bridgmana (1952) [28] dla stanu naprężenia w punkcie centralnym minimalnego przekroju próbki cylindrycznej omówione w rozdziale 2.9.2. Wzory na stan naprężenia σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} dla punktu centralnego szyjki (x , y , $z = 0$) podano w rozdziale 4.

Wyrażenia analityczne dla naprężenia w obszarze 'szyjki' zależą od $\bar{\sigma}$, naprężenia płynięcia materiału osnowy i od wielkości definiujących geometrię 'szyjki', to znaczy R/ρ_R , gdzie R oznacza promień najmniejszego pola przekroju w obszarze 'szyjki', a ρ_R jest promieniem konturu (krzywizny zewnętrznej) szyjki. Własności mechaniczne materiału szyjki opisuje się zależnością potęgową w postaci $\bar{\sigma} = \sigma_y \cdot (\bar{\epsilon}_p/\epsilon_y)^N$. W zależności tej σ_y jest granicą plastyczności materiału osnowy przy osiowym rozciąganiu, ϵ_y jest odkształceniem odpowiadającym początkowej granicy uplastycznienia materiału osnowy i N jest wykładnikiem w prawie umocnienia materiału osnowy. Dla rozpatrywanego

materiału, czyli stali węglowej, przyjęto $\sigma_y=175.0$ MPa, $\epsilon_y=0.001$ i $N=0.18$. Podobnie jak w pracy Saje, Pan i Needleman (1982) [214] zakłada się, że

$$\begin{aligned} \frac{R}{\rho_R} &= 0.0, & \text{for } \bar{\epsilon}_p < 0.18 \\ \frac{R}{\rho_R} &= 0.833(\bar{\epsilon}_p - 0.18), & \text{for } \bar{\epsilon}_p \geq 0.18 . \end{aligned} \quad (8.23)$$

Uwzględniając zależność (8.23) w rozwiązaniu Bridgmana dla rozciągania osiowosymetrycznego otrzymujemy

$$\frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{zz}} = \frac{\sigma_{yy}}{\sigma_{zz}} = \lambda , \quad (8.24)$$

gdzie

$$\lambda = \ln \left(\frac{1}{2} \frac{R}{\rho_R} + 1 \right) / \left(1 + \ln \left(\frac{1}{2} \frac{R}{\rho_R} + 1 \right) \right) . \quad (8.25)$$

Ponadto, przyjęto związek konstytutywny materiału z mikropustkami w postaci (8.16) proponowanej przez Gurson (1977) [87]. Wykorzystując ten związek można określić λ_1 i λ_2

$$\lambda_1 = \lambda_2 = (3S_{xx} + \bar{\sigma}\alpha)/(3S_{zz} + \bar{\sigma}\alpha) . \quad (8.26)$$

W sposób analogiczny postępujemy wykorzystując rozwiązanie stanu naprężenia przedstawione w rozdziale 4.2.

8.6 Sformułowanie problemu identyfikacji w zależności od miary mikrouszkodzeń

W pracy Fishera przedstawiono rezultaty pomiarów dla całkowitej i rozdzielonej miary mikrouszkodzeń. Poniżej zaproponowano dwa sformułowania problemu identyfikacji dla miary całkowitej mikropustek i dla miary z rozdzielonym udziałem wzrostu i zarodkowania mikropustek.

8.6.1 Sformułowanie problemu identyfikacji dla modelu z całkowitą miarą nukleacji i wzrostu mikrouszkodzeń

Naszym celem jest znalezienie parametrów materiałowych w równaniu ewolucji (8.19) dla porowatości ξ jako miary całkowitej wzrostu i zarodkowania pustek

dla określonej funkcji strat. W modelu z całkowitą miarą mikrourazkodzeń wyliczamy odpowiedź modelu jako rezultat całkowania równania różniczkowego, gdy po lewej stronie mamy pochodną ze względu na zmienną wprowadzaną $\bar{\epsilon}_p$. Prawa strona równania różniczkowego zależy natomiast od wprowadzanych i otrzymywanych zmiennych i od nieznanymi parametrów. Parametry te wchodzi przez proponowane funkcje materiałowe $h(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1, \mathbf{c}_1)$ i $g(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{a}_2, \mathbf{b}_2, \mathbf{c}_2)$. Mamy zatem:

$$\dot{\xi} = h(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1, \mathbf{c}_1) \frac{1}{1-\xi} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{D}^p) + g(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{a}_2, \mathbf{b}_2, \mathbf{c}_2) (1-\xi) \text{tr}(\mathbf{D}^p), \quad (8.27)$$

gdzie $h(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1, \mathbf{c}_1)$ i $g(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{a}_2, \mathbf{b}_2, \mathbf{c}_2)$ są funkcjami materiałowymi z poszukiwanymi parametrami. Pozostałe oznaczenia są opisane przy omawianiu równania (8.19). Sumujemy wartości funkcji strat (jakości) obliczone łącznie dla zarodkowania i dla wzrostu

$$\min_{\mathbf{x} \in V} \left[\sum_{j=1}^M \vartheta_i (\bar{\xi}_j - \xi(\bar{\epsilon}_{p_j}, \mathbf{x})) \right], \quad i = 1, \dots, 4, \quad (8.28)$$

gdzie $\bar{\xi}$ i $\xi(\bar{\epsilon}_{p_j}, \mathbf{x})$ oznaczają wartości eksperymentalne i obliczeniowe porowatości, dla danych parametrów \mathbf{x} .

8.6.2 Sformułowanie problemu identyfikacji dla modelu z rozdzielonymi miarami nukleacji i wzrostu mikrourazkodzeń

Zakładając, że dysponujemy rezultatami dla porowatości z rozdzielonymi udziałami (tak jak np. w eksperymencie Fishera), konieczne jest inne sformułowanie problemu identyfikacji. Model identyfikacji ma teraz postać dwóch rozdzielonych równań ewolucji. Jedno opisuje zarodkowanie nowych pustek a drugie opisuje wzrost już istniejących pustek. Obydwa te równania są ze sobą powiązane przez wprowadzenie całkowitej miary porowatości do ich prawych stron:

$$\begin{aligned} \dot{\xi}^n &= h(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{x}) \frac{1}{1-\xi^n-\xi^g} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{D}^p), \\ \dot{\xi}^g &= g(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{x}) (1-\xi^n-\xi^g) \text{tr}(\mathbf{D}^p). \end{aligned} \quad (8.29)$$

Występowanie miary całkowitej po prawych stronach oznacza, że zachowujemy założenie addytywności, $\xi = \xi^n + \xi^g$. Model reprezentowany przez równania (8.29₁ i 8.29₂) nie jest matematycznie równoważny modelowi reprezentowanemu przez równanie (8.27). Przez takie sformułowanie modelu mamy

też inne sformułowanie funkcji strat. Sumujemy teraz wartości funkcji strat obliczone oddzielnie dla zarodkowania i oddzielnie dla wzrostu, a mianowicie

$$\min_{\mathbf{x} \in V} \left[\sum_{j=1}^M \vartheta_i \left(\bar{\xi}_j^n - \xi^n(\bar{\epsilon}_{p_j}, \mathbf{x}) \right) + \sum_{j=1}^M \vartheta_i \left(\bar{\xi}_j^g - \xi^g(\bar{\epsilon}_{p_j}, \mathbf{x}) \right) \right], \quad i = 1, \dots, 4, \quad (8.30)$$

gdzie $\bar{\xi}^n$ i $\xi^n(\bar{\epsilon}_{p_j}, \mathbf{x})$ oznaczają wartości eksperymentalne i obliczeniowe porowatości (dla danych parametrów \mathbf{x}) wynikające z zarodkowania nowych pustek, a $\bar{\xi}^g$ i $\xi^g(\bar{\epsilon}_{p_j}, \mathbf{x})$ oznaczają wartości eksperymentalne i obliczeniowe porowatości wynikające ze wzrostu istniejących pustek, odpowiednio. Obliczone wartości $\xi^n(\bar{\epsilon}_{p_j}, \mathbf{x})$ i $\xi^g(\bar{\epsilon}_{p_j}, \mathbf{x})$ uzyskano w wyniku całkowania numerycznego różniczkowych równań ewolucji (8.29₁ i 8.29₂). W obliczeniach użyto tych samych zestawów funkcji materiałowych, jak w przypadku modelu z całkowitą miarą mikrouszkodzeń.

Prawo zachowania masy dla tego modelu ma postać

$$h(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{x}) \frac{1}{(1 - \xi^n - \xi^g)^2} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{D}^p) + (g(\bar{\epsilon}_p, \mathbf{x}) - 1) \text{tr}(\mathbf{D}^p) = \frac{\dot{\rho}_M}{\rho_M} = 0. \quad (8.31)$$

W powyższym modelu zachowano jednak dodatkowe założenie, że $\xi = \xi^n + \xi^g$.

8.7 Funkcje materiałowe

W literaturze znana i stosowana jest funkcja rozkładu normalnego dla nukleacyjnej funkcji mikrouszkodzeń \mathbf{h} (Chu i Needleman (1980) [43]).

Przy wyborze funkcji materiałowych $\mathbf{h} = h(\bar{\epsilon}^p, a_1, b_1, c_1)$ i $\mathbf{g} = g(\bar{\epsilon}^p, a_1, b_1, c_1)$ uznano, że należy się kierować następującymi zasadami:

- Należy preferować funkcje o znanej interpretacji mechanicznej.
- Wybierać funkcje najprostsze.

Do analizy wybrano:

$$h_1(\bar{\epsilon}_p, a_1, b_1, c_1) = \frac{a_1}{b_1 \sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{1}{2} \left[\frac{\bar{\epsilon}_p - c_1}{b_1} \right]^2 \right), \quad (8.32)$$

gdzie a_1, b_1, c_1 są nieznanymi parametrami. a_1 oznacza maksimum parametru

mikrouszkodzeń, b_1 jest szerokością rozkładu mikrouszkodzeń (odchylenie standardowe), c_1 reprezentuje wartość ekwiwalentnego odkształcenia plastycznego $\bar{\epsilon}_p$ w momencie gdy nukleacja mikrouszkodzeń osiąga swoją maksymalną wielkość (wartość oczekiwana).

Badano również następujące funkcje materiałowe h :

$$h_2 = a_1(\bar{\epsilon}_p)^{b_1} \exp(c_1 \bar{\epsilon}_p), \quad (8.33)$$

$$h_3 = a_1[1 + \tanh(b_1 \bar{\epsilon}_p + c_1)]. \quad (8.34)$$

Po wstępnych badaniach pominięto h_2 ponieważ dawała gorsze wyniki niż h_1 i h_3 .

Funkcja wzrostu g opisująca wzrost mikrouszkodzeń musi być równa 1 gdy nie ma nukleacji nowych i łączenia mikrouszkodzeń. Efekty te są powiązane i do analizy przyjęto, że funkcja g nie musi być stała.

Jako pierwszą postać przyjęto do analizy (Perzyna i Nowak (1987 [183]))

$$g_1(\bar{\epsilon}_p, a_2, b_2, c_2) = a_2 \exp[b_2 (\bar{\epsilon}_p)^{c_2}]. \quad (8.35)$$

Przyjęto do analizy także:

$$g_2 = a_2 \sqrt{(\bar{\epsilon}_p)^2 + b_2(\bar{\epsilon}_p) + c_2}, \quad (8.36)$$

$$g_3 = \frac{a_2}{b_2 - \bar{\epsilon}_p}, \quad (8.37)$$

$$g_4 = 1, \quad (8.38)$$

$$g_5 = a_2, \quad (8.39)$$

$$g_6 = a_2 + b_2 \cdot \bar{\epsilon}_p. \quad (8.40)$$

Modele z różnymi funkcjami materiałowymi g i h w przypadku całkowitej miary porowatości oznaczono jak w Tab.1a, natomiast modele z rozdzielonymi miarami jak w Tab.1b. Litera (A lub C) w oznaczeniach w Tab.1a określa model dla funkcji materiałowej h a liczba określa funkcję materiałową g . Podobnie w Tab.1b litery (DA, DC) określają model dla funkcji materiałowej h a liczba określa odpowiednią funkcję materiałową g .

Tabela 1a. Oznaczenia dla modelu z całkowitą miarą porowatości.

	funkcja g					
	g_1	g_2	g_3	g_4	g_5	g_6
h_1	A1	A2	A3	A4	A5	A6
h_3	C1	C2	C3	C4	C5	C6

Tabela 1b. Oznaczenia dla modelu z rozdzielonymi miarami porowatości.

	funkcja g					
	g_1	g_2	g_3	g_4	g_5	g_6
h_1	DA1	DA2	DA3	DA4	DA5	DA6
h_3	DC1	DC2	DC3	DC4	DC5	DC6

8.8 Metoda optymalizacji

Do rozwiązania problemu identyfikacji przedstawionego w rozdziałach 8.2.2 i 8.6 użyto metody optymalizacji globalnej. Wybrana metoda optymalizacji globalnej (Boender i inni (1982) [24]) w tej analizie identyfikacji zostanie przedstawiona przy założeniu, że rozważamy następujące zadanie optymalizacji

$$\min_{\mathbf{x} \in V \subset \mathbb{R}^n} \sum_{j=1}^M \vartheta_j (Y_j - \mathcal{F}(\bar{\epsilon}_{p_j}, \mathbf{x})), \quad i = 1, \dots, 4, \quad (8.41)$$

gdzie: ϑ_i oznacza funkcje celu zdefiniowane w rozdziale (8.2.1), wektor $\mathbf{x}^T = (a_1, b_1, c_1, a_2, b_2, c_2)$ (\mathbf{x}^T oznacza transpozycję wektora kolumnowego \mathbf{x}), V oznacza zbiór możliwych (realnych, prawdopodobnych) wartości parametrów a $n = 6$ (czasami 3 albo 5). Minimalizujemy odpowiednie funkcje strat określone jako różnice między wartościami obliczonymi i obserwowanymi parametru porowatości (patrz wzory (8.28), (8.30)). Minimalizujemy odpowiednie funkcje strat $f(\mathbf{x}) = F_{i=1\dots 4}(\mathbf{x})$, co daje się przedstawić w tradycyjnej postaci jako

$$\min_{\mathbf{x} \in V \subset \mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}). \quad (8.42)$$

Wiele problemów identyfikacji nieliniowej oraz własne doświadczenia z modelem porowatości (prace Nowak i Stachurski (2001) [157], (2003) [159]) pokazały,

że w nieliniowym zadaniu identyfikacji istnieje wiele minimów lokalnych. Dlatego do obliczeń zastosowano implementację (w standardowym języku ANSI C) globalnej metody minimalizacji Boender, Rinnoy Kan, Timmer i Strougie w formie przedstawionej w pracy Törn i Žilinskas (1989) [235] opracowanej przez A. Stachurskiego. Pewne szczegóły tej metody są przedstawione w pracy Nowak i Stachurski (2001) [157], a ogólny przegląd metod optymalizacji można znaleźć np. w pracy Findisen i inni (1980) [67] lub Stachurski i Wierzbicki (2001) [229].

Ogólnie metody optymalizacji lokalnej można podzielić na dwie grupy:

- metody bezgradientowe;
- metody gradientowe.

Metody bezgradientowe są to metody, w których w każdej iteracji wykorzystywane są informacje tylko o wartościach funkcji strat modelu, obliczanej na każdym kroku. Metody bezgradientowe dzieli się na dwa rodzaje:

- metody poszukiwań prostych (do tych metod należą metody Rosenbrocka, Hooke'a-Jeevesa, Nelder-Mead, metoda poszukiwań losowych (Monte Carlo));
- metody z minimalizacją w kierunku (do nich zalicza się metody np.: Gauss-Seidela, Powella).

Do metod gradientowych zalicza się metodę największego spadku, metodę gradientu sprzężonego i zmiennej metryki, patrz np. Findesen i inni (1980) [67]. Algorytm tych metod składa się najczęściej z dwóch etapów:

- etapu wyszukiwania kierunku, w którym prowadzona będzie optymalizacja,
- minimalizacja kierunkowa, najczęściej jeden krok obliczeń.

Etap wyszukiwania kierunku wykonuje się w każdym kroku iteracji. W literaturze opisano szereg metod minimalizacji w kierunku. Do najważniejszych należą :

- metody geometryczne (złotego podziału);
- metody gradientowe (metoda średnich, stycznych, reguła fałsi);
- metody aproksymacyjne (aproksymacji kwadratowej, bisekcji, aproksymacji sześcienniej).

Wykorzystywane w tej rozprawie metody aproksymacyjne w obliczeniach zostaną przedstawione w dalszej części.

W rozprawie zastosowano metodę optymalizacji globalnej (Boender i inni (1982) [24]), która jest kombinacją :

- losowego próbkowania,
- grupowania,
- lokalnego przeszukiwania wykorzystując minimalizację kierunkową.

Lokalnie użyto metodę BFGS (metoda quasi-newtonowska z numerycznym oszacowaniem gradientów). Metoda BFGS (Broyden (1970) [34], Fletcher (1970) [72], Goldfarb (1970) [81], Shanno (1970) [217]) jest metodą optymalizacji bez ograniczeń, jednakże w naszym problemie wprowadzamy ograniczenia proste (kostkowe) na parametry, co oznacza, że $\mathbf{x}_{min} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{x}_{max}$. Dla znalezienia lokalnych minimizerów wykorzystuje się metodę minimalizacji kierunkowej łączącej trzy różne podejścia: z wykorzystaniem kwadratowej aproksymacji wzdłuż kierunku przeszukiwań, sześciennych aproksymacji i bisekcję przeszukiwanego przedziału. Opublikowane wcześniej prace Nowak i Stachurski (2001) [157], Nowak i Stachurski (2003) [159] przedstawiają metodę minimalizacji kierunkowej, dlatego metoda ta jest skrótowo przedstawiona w rozdziale 8.8.5. Wymogi co do zapewnienia specyficznych własności niewypukłości jednokierunkowej funkcji aproksymujących wymusza użycie nowego warunku wyboru między trzema wyżej wymienionymi podejściami.

8.8.1 Metoda gradientowa poszukiwania kierunków poprawy

W algorytmach optymalizacji bez ograniczeń, szczególnie w algorytmach gradientowych, wykorzystuje się ideę *poszukiwania wzdłuż kierunku* (po współrzędnych lub wzdłuż bardziej ogólnego kierunku, 'line search algorithm'), patrz np. Stachurski i Wierzbicki (2001) [229].

Punktem wyjścia w tych metodach jest określenie punktu początkowego poszukiwań \mathbf{x}^0 . Następnie w każdej iteracji wyznacza się kolejny kierunek poszukiwań (w różny sposób dla różnych metod) i przeszukuje kierunek w celu znalezienia punktu minimum wzdłuż kierunku, tzn. punktu o możliwie najlepszej wartości funkcji celu, położonego na prostej wyznaczonej przez aktualne przybliżenie rozwiązania optymalnego \mathbf{x}^k i kierunek poszukiwań \mathbf{d}^k . Jeśli funkcja celu jest minimalizowana, to jest to punkt, w którym jej wartość jest

najmniejsza, lub jego przybliżenie. Tym, co różni poszczególne metody, jest sposób wyznaczania nowego kierunku poszukiwań i zastosowana metoda minimalizacji kierunkowej.

Przebieg typowej k -tej iteracji metody realizującej ideę poszukiwania wzdłuż kierunku, użytej w obliczeniach jest następujący:

1. Określ kierunek poszukiwań \mathbf{d}^k .
2. Znajdź α^k minimalizujące $\bar{f}(\alpha) = f(\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{d}^k)$ ze względu na α .
3. Podstaw $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha^k\mathbf{d}^k$.

Jeśli w etapie 2 wyznaczamy minimum w kierunku dokładnie, to mówimy o dokładnej *minimalizacji w kierunku*; najczęściej jednak korzystamy z niedokładnej minimalizacji w kierunku. Jeśli funkcja celu jest różniczkowalna, to dokładna minimalizacja wzdłuż kierunku oznacza znalezienie punktu, w którym pochodna kierunkowa przyjmuje wartość zero

$$\frac{d\bar{f}}{d\alpha}(\alpha^k) = 0, \Rightarrow \nabla f(\mathbf{x}^{k+1})^T \mathbf{d}^k = 0 .$$

Metody realizacji minimalizacji w kierunku i generowania kolejnych kierunków zostaną dokładnie omówione w kolejnych podrozdziałach.

W tzw. *gradientowych metodach spadku* poszukiwanie minimum w kierunku można ograniczyć do $\alpha \geq 0$, ponieważ $\frac{d\bar{f}}{d\alpha}(\alpha = 0) < 0$, jeśli \mathbf{x}^k nie jest punktem stacjonarnym, a kierunek jest tzw. *kierunkiem poprawy*.

Najczęściej do określania kierunku stosuje się następujące dwa sposoby gdy przyjmuje się, że:

- $\mathbf{d}^k = -\mathbf{p}^k$ i jest to metoda najszybszego spadku (MNS); metoda ta jest wolna i zawodna oraz oparta na liniowym modelu funkcji,
- $\mathbf{d}^k = -(\mathbf{G}^k)^{-1}\mathbf{p}^k$ i jest to metoda Newtona; metoda ta charakteryzuje się kwadratowym rzędem zbieżności i jest oparta na kwadratowym modelu funkcji,

gdzie $\mathbf{p}(\mathbf{x})$ oznacza wektor gradientu, natomiast przez \mathbf{p}^k oznaczono gradient minimalizowanej funkcji $f(\mathbf{x})$ w punkcie \mathbf{x}^k a $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ jest macierzą hesjanu funkcji $f(\mathbf{x})$ w punkcie \mathbf{x} .

8.8.2 Ogólny algorytm kierunków poprawy z poszukiwaniem w kierunku

Algorytmy kierunków poprawy powinny się realizować tak, aby spełnić następującą własność (własność spadku)

$$(\mathbf{p}^k)^T \mathbf{d}^k < 0, \quad \forall k$$

gdzie \mathbf{d}^k oznacza kierunek poszukiwań w k -tej iteracji. Zwykle w obliczeniach stosuje się częściową minimalizację w kierunku, tak by zapewnić spadek wartości funkcji

$$f^{k+1} < f^k .$$

Konieczne jest wówczas zapewnienie dostatecznie dużej redukcji wartości, aby punkty skupienia ciągu wartości funkcji celu $\{f^k\}_{k=0}^{\infty}$ były wartościami w punktach minimów lokalnych. W związku z tym należy unikać przesunięć α zbyt bliskich skrajów przedziału, w którym

$$(0, \alpha_m) = \left\{ \alpha \in \mathbb{R}^n : f(\mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d}^k) < f^k \right\} . \quad (8.43)$$

Jako kryterium STOP-u w niedokładnej minimalizacji kierunkowej, zapewniającym zbieżność metod jednostajnych kierunków poprawy, w użytym w obliczeniach algorytmie wykorzystano tzw. test Armijo

$$|(\mathbf{p}^{k+1})^T \mathbf{d}^k| \leq -\sigma (\mathbf{p}^k)^T \mathbf{d}^k , \quad (8.44)$$

gdzie parametr σ musi należeć do przedziału $(0, 1)$. W takim sformułowaniu tego testu, można zauważyć, że reguła Armijo (8.44) w przypadku granicznym $\sigma = 0$ wymaga dokładnej minimalizacji w kierunku. Pociąga to wyliczenia następnego gradientu w każdym punkcie podczas optymalizacji w kierunku.

W literaturze np. książce Findisen i inni (1980) [67] lub Stachurski i Wierzbicki (2001) [229], najczęściej wykorzystuje się następujące dwie podstawowe metody spadku:

Metoda Newtona

Metodę Newtona w wersji podstawowej wyprowadza się przy wykorzystaniu modelu kwadratowego minimalizowanej funkcji. Model taki otrzymujemy z rozwinięcia w szereg Taylora drugiego rzędu w punkcie aktualnego przybliżenia rozwiązania \mathbf{x}^k

$$f(\mathbf{x}^k + \boldsymbol{\delta}) \approx f^k + (\mathbf{p}^k)^T \boldsymbol{\delta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\delta}^T \mathbf{G}^k \boldsymbol{\delta} = q^k(\boldsymbol{\delta}) . \quad (8.45)$$

Symbol $q^k(\boldsymbol{\delta})$ oznacza aproksymację kwadratową funkcji f w punkcie \mathbf{x}^k , natomiast symbol $\boldsymbol{\delta} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^k$ przyrost argumentu funkcji.

W podstawowej wersji metody Newtona

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \mathbf{d}^k,$$

gdzie \mathbf{d}^k minimalizuje aproksymację kwadratową $q^k(\boldsymbol{\delta})$.

Aproksymacja $q^k(\boldsymbol{\delta})$ ma jednoznacznie określone minimum, gdy hesjan \mathbf{G}^k jest ściśle dodatnio określony. Wówczas \mathbf{d}^k znajdujemy z warunku zerowania się pierwszej pochodnej

$$\nabla q^k(\mathbf{d}^k) = 0.$$

Jeżeli minimalizowana funkcja jest dwukrotnie ciągle różniczkowalna, elementy hesjanu spełniają warunek Lipschitza, patrz np. Stchurcki i Wierzbicki (2001) [229], dla wszystkich \mathbf{x}, \mathbf{y} w pewnym otoczeniu punktu optymalnego $\hat{\mathbf{x}}$, wówczas macierz $\hat{\mathbf{G}} = \mathbf{G}(\hat{\mathbf{x}})$ jest ściśle dodatnio określona i punkt początkowy \mathbf{x}^0 jest dostatecznie blisko punktu $\hat{\mathbf{x}}$, to metoda Newtona jest dobrze określona dla wszystkich k i zbiega do punktu optymalnego z szybkością drugiego rzędu. W wersji podstawowej metody Newtona nie przewiduje się minimalizacji w kierunku i w rezultacie metoda ta jest zbieżna tylko lokalnie, gdy punkt początkowy jest dostatecznie blisko optymalnego $\hat{\mathbf{x}}$.

Zmodyfikowana metoda Newtona

Do rozwiązywania ogólnych nieliniowych zadań optymalizacyjnych nie należy stosować metody Newtona z następujących z następujących dwóch powodów, (patrz np. Stachurski i Wierzbicki (2001) [229])

- \mathbf{G}^k może nie być dodatnio określona, gdy \mathbf{x}^k jest daleko od rozwiązania,
- bądź jeśli \mathbf{G}^k jest ściśle dodatnio określona, to zbieżność również może nie wystąpić, a ciąg wartości funkcji $\{f^k\}_{k=0}^{\infty}$ może nawet nie być ciągiem malejącym.

W celu uniknięcia tego ostatniego problemu w użytych do obliczeń algorytmie wprowadzono minimalizację w kierunku. Uzyskano w ten sposób zwiększenie obszaru zbieżności. W wersji metody Newtona przedstawionej w książce Stachurski i Wierzbicki (2001) [229] z poszukiwaniem w kierunku, poprawka Newtona jest stosowana do generacji kierunku poszukiwań. Wówczas

$$\mathbf{d}^k = -(\mathbf{G}^k)^{-1} \mathbf{p}^k$$

natomiast

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha^k \mathbf{d}^k ,$$

gdzie α^k znajduje się jako punkt minimalizujący (w przybliżeniu) funkcję $\bar{f}(\alpha) = f(\mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d}^k)$ ze względu na $\alpha \geq 0$.

Najbardziej wygodną metodą rozwiązania równania $\mathbf{G}^k \mathbf{d}^k = -\mathbf{p}^k$, w celu znalezienia kierunku poszukiwań \mathbf{d}^k , jest faktoryzacja hesjanu $\mathbf{G}^k = \mathbf{LDL}^T$ (patrz np. Stachurski i Wierzbicki [229]) i rozwiązanie trzech pomocniczych układów równań (odpowiednio z macierzą trójkątną górną, macierzą diagonalną i macierzą trójkątną dolną).

Algorytmy opracowane na bazie tej metody mają istotne problemy ujawniające się gdy hesjan \mathbf{G}^k nie jest ściśle dodatnio określony. Wówczas punkt stacjonarny funkcji aproksymującej nie jest punktem minimalizującym dla tej aproksymacji.

Proste wyjście z takiej sytuacji jest omówione np. w książce Stachurski i Wierzbicki (2001) [229] na str. 108. Możliwe są inne podejścia do rozwiązania tego problemu a szczegóły można znaleźć również w książce Findisen i inni (1980) [67].

8.8.3 Metody quasi-newtonowskie

W metodach quasi-newtonowskich wykorzystuje się informacje o pochodnych drugiego rzędu. Ich zaletą w porównaniu z metodą Newtona jest to, że nie występuje w nich konieczność wyliczania dodatkowych pochodnych. Wykorzystywana jest wyłącznie informacja o pochodnych pierwszego rzędu w aktualnym punkcie \mathbf{x}^k oraz kolejnym po nim następującym \mathbf{x}^{k+1} . W metodach quasi-newtonowskich wykorzystuje się możliwość aproksymacji funkcji nieliniowej bez jawnego wyliczania macierzy hesjanu. Szczegóły takiego podejścia można znaleźć w książce Stachurski i Wierzbicki (2001) [229].

W metodach tych aproksymujemy bądź to \mathbf{G}^k (przez macierz, którą oznaczymy symbolem \mathbf{B}^k), bądź też jej odwrotność $(\mathbf{G}^k)^{-1}$ (którą oznaczymy symbolem \mathbf{H}^k). Na początku k -tej iteracji dysponujemy macierzami \mathbf{B}^k i \mathbf{H}^k . W pierwszym przypadku kolejny kierunek poszukiwań wyznaczamy rozwiązując równanie

$$\mathbf{B}^k \mathbf{d}^k = -\mathbf{p}^k ,$$

a w drugim przypadku w następujący sposób

$$\mathbf{d}^k = -\mathbf{H}^k \mathbf{p}^k .$$

Jeśli nie ma żadnej dodatkowej informacji, to zwykle przyjmujemy $\mathbf{H}^0 = \mathbf{I}$ ($\mathbf{B}^0 = \mathbf{I}$), gdzie \mathbf{I} oznacza macierz identycznościową.

Po znalezieniu kolejnego przybliżenia rozwiązania, czyli punktu \mathbf{x}^{k+1} (np. przez minimalizację kierunkową), modyfikuje się odpowiednio macierz \mathbf{H}^k albo \mathbf{B}^k . Dla aproksymacji na przypadek macierzy \mathbf{H}^k postępuje się następująco.

Przyjmuje się, że

$$\mathbf{H}^{k+1} = \mathbf{H}^k + \mathbf{U}^k ,$$

gdzie \mathbf{U}^k jest poprawką wyznaczaną na podstawie przyrostów zmiennych niezależnych

$$\mathbf{s}^k = \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k = \alpha^k \mathbf{d}^k$$

i przyrostów gradientu

$$\mathbf{r}^k = \mathbf{p}^{k+1} - \mathbf{p}^k .$$

Następnie konstruuje się poprawkę w ten sposób, by kolejna macierz spełniała tzw. *warunek quasi-newtonowski*

$$\mathbf{H}^{k+1} \mathbf{r}^k = \mathbf{s}^k . \quad (8.46)$$

Warunek (8.46) wynika i zachodzi w sposób naturalny w metodzie Newtona.

W metodach quasi-newtonowskich znanych w literaturze rozważa się w zasadzie wyłącznie poprawki \mathbf{U}^k pierwszego i drugiego rzędu, uzyskując odpowiednio metodę WBD (metoda Wolfe'a, Broydena, Davidona, patrz np. Findeisen i inni (1980) [67]) lub metodę DFP (Davidon (1968) [52], Fletcher i Powell (1963) [71]), patrz np. Stachurski i Wierzbicki (2001) [229]. Najczęściej stosowaną metodą quasi-newtonowską jest metoda BFGS, którą przedstawiono w następnym podrozdziale 8.8.4.

8.8.4 Lokalna metoda minimalizacji

Do poszukiwania lokalnych minimów użyto zmodyfikowanego wariantu metody BFGS optymalizacji bez ograniczeń (dokładnie metoda BFGS jest opisana np. w: Fletcher (1987) [73], Findeisen i inni (1980) [67] lub Stachurski i Wierzbicki (2001) [229]).

Użyty w tej pracy, tak jak i w pracach np. Nowak i Stachurski (2001, 2003) [157, 159], algorytm przebiega w sposób następujący:

Krok 0. Określ ograniczenia \mathbf{x}^L i \mathbf{x}^U na zmienne. Wybierz możliwy punkt początkowy \mathbf{x}^0 spełniający ograniczenia. Określ parametry dokładności

– $\epsilon_{\text{BFGS}} > 0$, $\omega \in (0, 1)$. Oblicz wartości gradientów \mathbf{p}^0 i wartość funkcji f^0 w punkcie początkowym \mathbf{x}^0 . Przyjmij $\mathbf{H}^0 = \mathbf{I}$ gdzie \mathbf{I} jest macierzą jednostkową, $k := 0$.

Krok 1. Oblicz bieżący kierunek poszukiwań według wzoru:

$$\mathbf{d}^k = -\mathbf{H}^k \mathbf{p}^k.$$

Krok 2. Znajdź $\tau \leq 0$ takie, że reguła Armijo wielkość kroku jest spełniona, to znaczy

$$\frac{|(\nabla f(\mathbf{x}^k + \tau^k \mathbf{d}^k))^{\text{T}} \mathbf{d}^k|}{-(\nabla f(\mathbf{x}^k))^{\text{T}} \mathbf{d}^k} \leq \omega.$$

Krok 3. Oblicz następny punkt

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \tau^k \mathbf{d}^k,$$

i gradient \mathbf{p}^{k+1} w następnym nowym punkcie.

Krok 4. Sprawdź kryterium stopu (warunki Kuhn'a-Tucker'a). Jeśli kryterium stopu jest spełnione, wtedy STOP.

Krok 5. Oblicz gradient $\mathbf{r}^k = \mathbf{p}^{k+1} - \mathbf{p}^k$ i różnice zmiennych niezależnych $\mathbf{s}^k = \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k$. Uaktualnij przybliżoną wartość odwrotności Hessianu stosując wzór (8.48).

Krok 6. Przyjmij $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k$, $\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{p}^k$. Zwiększ indeks iteracji k o jeden. Oblicz $f(\mathbf{x}^k)$. Wróć do Kroku 1.

Metoda BFGS w oryginalnej postaci startuje z punktu \mathbf{x}^0 i realizuje typowe dla optymalizacji bez ograniczeń na gradienty następujące kroki

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \tau^k \cdot \mathbf{d}^k, \quad (8.47)$$

gdzie $\mathbf{d}^k = -\mathbf{H}^k \nabla f(\mathbf{x}^k)$ jest kierunkiem przeszukiwanym a τ^k jest współczynnikiem zależnym od wielkości kroku wybranym w minimalizacji kierunkowej funkcji. Metoda ta wykorzystuje gradienty i różnice zmiennych niezależnych, w celu uaktualnienia przybliżonych wartości \mathbf{H}^k odwrotności drugich pochodnych $(\nabla^2 f(\mathbf{x}^k))^{-1}$ minimalizowanej funkcji zgodnie z następującym wzorem:

$$\mathbf{H}^{k+1} = \mathbf{H}^k + \left(1 + \frac{(\mathbf{r}^k)^\top \mathbf{H}^k \mathbf{r}^k}{(\mathbf{r}^k)^\top \mathbf{s}^k} \right) \frac{\mathbf{s}^k (\mathbf{s}^k)^\top}{(\mathbf{r}^k)^\top \mathbf{s}^k} - \frac{\mathbf{s}^k (\mathbf{r}^k)^\top \mathbf{H}^k + \mathbf{H}^k \mathbf{r}^k (\mathbf{s}^k)^\top}{(\mathbf{r}^k)^\top \mathbf{s}^k} \quad (8.48)$$

gdzie $\mathbf{r}^k = \mathbf{p}^{k+1} - \mathbf{p}^k$, $\mathbf{s}^k = \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k$ i $\mathbf{p}^k = \nabla f(\mathbf{x}^k)$.

Iteracje lokalnego minimizera są zatrzymywane, kiedy norma gradientu (pochodnej) funkcji f jest mniejsza niż dana dokładność $\epsilon_{\text{BFGS}} > 0$. W minimalizacji kierunkowej użyto kolejno kwadratowych przybliżeń funkcji $\bar{f}(\tau) = f(\mathbf{x}^k + \tau \cdot \mathbf{d}^k)$. Przeszukiwanie wzdłuż kierunku jest zakończone, kiedy spełniona jest tak zwana reguła Armijo wielkości kroku, ang. *Armijo step-size rule*, to znaczy (kryterium Armijo)

$$\frac{|d\bar{f}(\tau^k)|}{-d\bar{f}(0)} = \frac{|(\nabla f(\mathbf{x}^k + \tau^k \mathbf{d}^k))^\top \mathbf{d}^k|}{-(\nabla f(\mathbf{x}^k))^\top \mathbf{d}^k} \leq \omega, \quad \text{dla pewnych } \omega \in (0, 1). \quad (8.49)$$

Parametry ϵ_{BFGS} i ω są określone przez użytkownika.

Ten ogólny schemat minimalizacji został zmodyfikowany, przez uwzględnienie ograniczeń kostkowych na zmienne. Oznacza to, że w naszych zadaniach minimalizujemy funkcje z ograniczeniami kostkowymi czyli rozwiązujemy następujący problem

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) \\ & \text{przy ograniczeniach } \mathbf{x}_i^L \leq \mathbf{x}_i^U, \quad \text{dla } i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (8.50)$$

Obecna implementacja charakteryzuje się następującymi cechami:

- Zachowujemy istnienie odwrotności aproksymacji Hessianu w całym obszarze;
- Generujemy kierunki spadku w całym obszarze;
- Przeprowadzamy minimalizację kierunkową w określony sposób.

To odróżnia zasadniczo to podejście od typowej metody aktywnych zbiorów dla zadań z liniowymi ograniczeniami.

Koniecznym okazało się też, zmodyfikowanie kryterium stopu. Warunki konieczne optymalności Kuhn'a - Tucker'a w przypadku ograniczeń kostkowych przyjmują postać:

(i) Następujące nierówności powinny zostać spełnione na brzegach

$$\begin{aligned} \text{jeśli } x_i^{k+1} = x_i^L & \text{ wtedy } p_i^{k+1} \geq 0, \\ \text{jeśli } x_i^{k+1} = x_i^U & \text{ wtedy } p_i^{k+1} \leq 0, \\ \text{dla } i = 1, \dots, n. & \end{aligned}$$

(ii) Norma gradientu w podprzestrzeni zmiennych, które nie są na ich brzegach w nowym punkcie \mathbf{x}^{k+1} powinna być równa $\mathbf{0}$. Oczywiście, w praktyce sprawdzamy jedynie, czy są one wystarczająco małe.

8.8.5 Minimalizacja w kierunku

Zadanie minimalizacji funkcji celu f w kierunku \mathbf{d} polega na znalezieniu wartości przesunięcia $\hat{\alpha}$ takiego, że funkcja $\bar{f}(\alpha) = f(\mathbf{x}^k + \alpha \mathbf{d})$ osiąga wartość minimalną w punkcie $\alpha = \hat{\alpha}$. Często wystarczające jest znalezienie minimum lokalnego funkcji $\bar{f}(\alpha)$.

Poszukując minimum w kierunku tak jak wskazano to również w książce Stachurski i Wierzbicki (2001) [229] i np. w pracy Nowak i Stachurski (2001) [157], wykonujemy zwykle jedną lub kilka następujących operacji:

- 1) znalezienie przedziału (α_1, α_2) akceptowalnych wartości długości kroku α ,
- 2) redukcja przedziału (α_1, α_2) ,
- 3) wykonanie pewnej interpolacji w celu znalezienia α bliskiego optimum.

Postępowanie jest przy tym różne w zależności od dostępności informacji o pochodnych minimalizowanej funkcji. W zadaniach, w których dostępna jest pochodna, staramy się ją zwykle wykorzystać.

Struktura typowego gradientowego algorytmu poszukiwania minimum w kierunku

W metodach gradientowych optymalizacji bez ograniczeń zakłada się zwykle, że generowany kierunek poszukiwań \mathbf{d} jest kierunkiem spadku, tzn. że tworzy z kierunkiem minus gradientu w punkcie \mathbf{x}^k ($\alpha = 0$ odpowiednio) kąt mniejszy od $\frac{\pi}{2}$. Wówczas można przyjąć jako lewy kraniec przedziału poszukiwań w minimalizacji kierunkowej $\alpha_1 = 0$.

Typowy gradientowy algorytm minimalizacji kierunkowej jest opisany w książce Stachurski i Wierzbicki (2001) [229]. Jego struktura oparta jest na

pojęciach kwadratowej interpolacji oraz ekstrapolacji minimalizowanej funkcji wzdłuż kierunku \mathbf{d} . Pojęcia te są wytłumaczone w książce Findeisen i inni (1980) [67] i zostaną pominięte.

Konieczność minimalizacji funkcji f wzdłuż kierunku \mathbf{d}^k w każdej iteracji polega na rozwiązaniu następującego problemu (patrz np. Nowak i Stachurski (2001) [229]):

$$\min_{\tau \geq 0} \bar{f}(\tau) = f(P(x^k + \tau d^k)) , \quad (8.51)$$

gdzie P reprezentuje operator rzutowania na realny zbiór punktów określonych przez przejęte ograniczenia kostkowe. Funkcja $\bar{f}(\tau)$ nie musi być koniecznie wypukłą. Typowy algorytm gradientowej minimalizacji kierunkowej wykorzystuje kwadratową albo sześcienną (trzeciego stopnia) aproksymację funkcji \bar{f} . Zwykle aproksymacje te bazują na

- w przypadku aproksymacji kwadratowej – na wartościach funkcji w dwóch punktach i wartości gradientu tej funkcji w jednym z tych punktów
- w przypadku aproksymacji sześcienną (na wartościach funkcji i wartościach gradientu w dwóch punktach)

Aproksymacje te są dokładne o ile nie są one zbyt blisko aproksymacji liniowej. Jeśli drugi punkt τ jest bardzo blisko linii stycznej do wykresu funkcji \bar{f} w pierwszym punkcie τ_L , wtedy najlepszą aproksymacją kwadratową lub sześcienną jest aproksymacja liniowa. Natomiast, gdy \bar{f} jest funkcją wypukłą to dla $\tau \geq \tau_L$ bliskiego τ_L najlepszą aproksymacją jest aproksymacja kwadratowa w przypadku przeciwnym najlepszą jest aproksymacja sześcienna. Dlatego w użytym algorytmie sprawdza się położenie punktu τ i $\bar{f}(\tau)$ względem wspomnianej linii stycznej do \bar{f} . W przypadku, gdy punkt τ , $\bar{f}(\tau)$ leży znacznie powyżej linii stycznej stosujemy aproksymację kwadratową, natomiast w przypadku przeciwnym (punkt leży znacznie poniżej linii stycznej) stosujemy aproksymację sześcienną, a w przypadkach nie należących do wymienionych stosujemy bisekcję (podział przedziału na dwie części). Dlatego wybór aproksymacji zależy od wzajemnej relacji między wartościami funkcji w nowym punkcie próbnym τ i wartości funkcji zlinearyzowanej na lewym skraju przeszukiwanego przedziału w punkcie τ_L i obliczonej w tym samym punkcie τ ($\tau > \tau_L$), czyli stosujemy

- aproksymację sześcienną jeśli

$$\bar{f}(\tau_L) + (1 + \rho)\tau \bar{f}'(\tau_L) > \bar{f}(\tau) ; \quad (8.52)$$

- bisekcję (podział na dwie części) jeśli

$$\bar{f}(\tau_L) + (1 + \rho)\tau\bar{f}'(\tau_L) \leq \bar{f}(\tau) \leq \bar{f}(\tau_L) + (1 - \rho)\tau\bar{f}'(\tau_L); \quad (8.53)$$

- aproksymację kwadratową jeśli

$$\bar{f}(\tau) > \bar{f}(\tau_L) + (1 - \rho)\tau\bar{f}'(\tau_L). \quad (8.54)$$

Skalar $\rho \in (0, 1/2)$ jest ustalonym parametrem. W praktyce przyjmuje się $\rho = 1/10$ lub mniej. Opisany sposób doboru aproksymacji jest bardzo podobny w jego geometrycznej interpretacji do znanych warunków Goldsteina stosowanych jako kryterium stopu w wielu algorytmach przeszukiwania kierunków. Jednak w testach Goldsteina dwa liniowe przecięcia są powyżej linii stycznej i służą zupełnie innemu celowi, a mianowicie ograniczeniu jako kryterium stopu minimalizacji kierunkowej. Jako kryterium stopu w omawianym i zastosowanym w tych obliczeniach algorytmie minimalizacji kierunkowej wykorzystano tzw. regułę wielkości kroku Armijo określoną wzorem (8.49) i omówioną w rozdziale 8.8.4.

Bezgradientowe metody minimalizacji w kierunku

Jeżeli minimalizowana funkcja nie jest różniczkowalna ani ciągła w sensie Lipschitza, to pozostają do dyspozycji tzw. metody poszukiwań prostych, inaczej metody bezgradientowe. W przypadku tych metod przeszukuje się kolejno pewne dane kierunki, np. przy wykorzystaniu kierunków wersorów osi współrzędnych tak jak w metodach Rosenbrocka lub Hooke'a-Jeevesa (patrz np. Hooke-Jeeves (1961) [95], Kuester i Mize (1973) [112]). Brak jest ogólnej teorii dotyczącej bezgradientowej metody minimalizacji w kierunku. Jak podaje Stachurski i Wierzbicki (2001) [229] typowe dla większości stosowanych algorytmów jest przyjęcie założenia o unimodalności funkcji $\bar{f}(\alpha) = f(\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{d}^k)$. Ze sformułowania unimodalności funkcji wynika, że w przedziale $[a, b]$ musi istnieć jedyne ścisłe minimum, a ponadto na lewo od tego punktu funkcja musi być malejąca, a na prawo rosnąca. Założenie unimodalności pozwala zawęzić przedział, w którym powinien znajdować się punkt minimum. Podstawą postępowania w takim przypadku jest twierdzenie 3.4 w książce Stachurski i Wierzbicki (2001) [229]. Istnieje wiele metod opartych na podziale przedziału $[a, b]$ na części i odrzucaniu jednej z nich. Jest to możliwe dzięki założeniu unimodalności. Jak podaje Stachurski i Wierzbicki (2001) [229] ta sama własność występuje również, jeśli zamiast unimodalności założymy tzw. ścisłą quasi-wypukłość funkcji \bar{f} (tzn. dla dowolnych x_1, x_2 należących do

dziedziny funkcji \bar{f} i dowolnego punktu $z \in (x_1, x_2)$ zachodzi nierówność $\bar{f}(z) < \max(\bar{f}(x_1), \bar{f}(x_2))$. Różne są sposoby określania punktów α^1 i α^2 spełniających warunek $a < \alpha^1 < \alpha^2 < b$, co określa szereg metod. Szczegółowo metody takie są przedstawione w książce Stachurski i Wierzbicki (2001) [229].

8.8.6 Metoda optymalizacji globalnej Boendera i inni

Metoda optymalizacji globalnej Boender i inni (1982) [24] charakteryzuje się zbieżnością z prawdopodobieństwem jeden. Jest to typowa własność wszystkich metod wykorzystujących elementy stochastyki. Ogólnie, wykorzystanie stochastycznych elementów zapewnia nam *absolutną gwarancję* uzyskania sukcesu. Możemy otrzymać rezultat tylko wtedy, gdy prawdopodobieństwo wyboru punktu w sąsiedztwie globalnego optimum \mathbf{x}^* zbiega do 1, jeśli liczba punktów próbki na etapie minimalizacji globalnej jest rosnąca. Pod pojęciem 'sąsiedztwo' rozumiemy tutaj następujący zbiór punktów:

$$A^\epsilon(\mathbf{x}^*) = \{\mathbf{x} \in V; \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| \leq \epsilon\} \quad \text{dla pewnego } \epsilon > 0. \quad (8.55)$$

Rezultat ten jest słuszny, co jest udowodnione przy słabych założeniach co do minimalizowanej funkcji i co do rozkładu losowego badanych punktów. Jeśli rozkład tych punktów (próbek) jest jednolity w V i funkcja f jest ciągła, wtedy rezultat jest nawet mocniejszy. Mianowicie, sprawdzany punkt z najniższą wartością funkcji zbiega do punktu z minimalną wartością funkcji z prawdopodobieństwem 1. Wynika z tego, że minimalizacja globalna może asymptotycznie zagwarantować sukces. Jednakże, każda metoda ograniczona tylko do pobierania próbek może być bardzo czasochłonna i może być nieefektywna. Właśnie zwiększenie efektywności przy zachowaniu asymptotycznie zagwarantowanego sukcesu, jest jednym z wyzwań w optymalizacji globalnej. W metodach skupień (klasteringu) próbuje się zwiększyć efektywność przez uwzględnianie etapu lokalnego przeszukiwania.

Dla wygenerowania grupy (klastra), może zostać użyty pewien rodzaj metody najbliższego sąsiada. Wybierane losowo punkty, nie będące w grupie są dodane do klastra, inicjowane przez punkt zarodek albo w X^+ albo w $X^{(1)}$, jeśli odległość tego punktu do jakiegoś punktu w klastrze jest mniejsza niż 'a priori' dana odległość ϵ_{Cl} . Stąd, odpowiednio, stwierdzenie $\mathbf{x} \in X^+$ i \mathbf{x} w $X^{(1)}$ powinno być rozumiane w ten sposób. W wyniku tego, gromadzimy lokalne minimizery (X^+) i punkty prowadzące do punktów minimalizujących w $X^{(1)}$.

Jako kryterium stopu wymagamy spełnienie jednego z następujących warunków:

- wszystkie punkty przekształconej próbki mogą zostać sklasyfikowane;
- albo liczba znalezionych lokalnych minimów, albo liczba punktów prowadzących do minimum jest większa, niż ich maksymalna dozwolona liczba;
- albo liczba znalezionych minimów globalnych, albo liczba globalnych punktów zarodków (to jest punktów próbki prowadzących do globalnego minimum) jest większa niż zdefiniowana przez użytkownika – maksymalna wartość.

Szczegółowa struktura algorytmu jest następująca:

Krok 0. Wybierz N -liczbę sprawdzanych wygenerowanych punktów w pierwszym etapie i część γ liczby punktów sprawdzanych o najmniejszych wartościach funkcji. Oznacz przez X^+ – komplet wszystkich lokalnych minimów znalezionych dotychczas; przez $X^{(1)}$ – oznaczmy komplet punktów prowadzących do minimum $x \in X^+$. Wybierz parametr $\epsilon_{CI} > 0$ stosowany w klasteryzacji.

Krok 1. Wybierz N losowo generowanych punktów $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \dots, \mathbf{x}^N \in V$. Zakładamy, że $f^i = f(\mathbf{x}^i)$ dla $i = 1, \dots, N$.

Krok 2. Dokonaj przekształcenia próbki biorąc część γ najmniejszych punktów bieżącej próbki (ich numery są równe N^+), przeprowadzając jeden krok metody najszybszego spadku (ang. *steepest descent method*) i zastępując te punkty przez punkty otrzymane. Resztę punktów pomijamy.

Krok 3. Zastosuj procedurę grupowania (klasteryzacji) do przekształconej próbki. Elementy X^+ (zbiór globalnych punktów – lokalne minima znalezione do tej pory) są wybierane najpierw jako punkty zarodki (ang. *seed points*) po znalezieniu elementów $X^{(1)}$ (zbiór punktów próbki, które prowadzą do minimum $x \in X^+$).
Jeśli wszystkie punkty $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \dots, \mathbf{x}^{N^+}$ są zakwalifikowane wtedy STOP, w przeciwnym razie przejście do następnego kroku.

Krok 4. Dla $i = 1, \dots, N^+$ wykonaj, jeśli \mathbf{x}^i nie jest zaklasyfikowany ani do X^+ ani do $X^{(1)}$ wtedy

- a) należy użyć procedury lokalnego przeszukiwania (ang. *local search*), zaczynając od \mathbf{x}^i w celu otrzymania \mathbf{x}^{i+} ,
- b) jeśli $\mathbf{x}^{i+} \in X^+$ wtedy dodawać \mathbf{x}^i do $X^{(1)}$ (nowy punkt zarodek prowadzący do istniejącego minimum),
- c) jeśli $\mathbf{x}^{i+} \notin X^+$ (\mathbf{x}^{i+} jest nowym lokalnym minimum) wtedy dodać \mathbf{x}^{i+} do X^+ i \mathbf{x}^i do $X^{(1)}$.

Krok 5. Powrót do Kroku 1.

8.9 Metoda Rosenbrocka całkowania numerycznego

Kolejnym istotnym aspektem obliczeń było zastosowanie niezawodnej metody rozwiązywania otrzymanych równań różniczkowych zwyczajnych. Równania te zawierają osobliwości, które utrudniają lub uniemożliwiają w sposób klasyczny ich numeryczne całkowanie. Metody Runge-Kutta ze zmiennym wyborem kroku ulegały zatrzymaniu bez wyniku lub zapętleniu (pracowały w nieskończonym cyklu). Dlatego wybrano metodę Rosenbrocka właściwą do rozwiązywania źle uwarunkowanych równań różniczkowych. Algorytm i opis metody można znaleźć np. w książce: Numerical Recipes in C (1993) [199]: *The Art of Scientific Computing*.

8.10 Podsumowanie rozdziału 8

Sformułowany problem identyfikacji z odpornymi funkcjami strat dla przedstawionych modeli materiału ciągłego z mikouszkodzeniami daje liczny zbiór oszacowanych parametrów dla modeli o podobnym błędzie dopasowania rzędu 10^{-7} dla modelu z całkowitą miarą mikouszkodzeń i z błędem dopasowania rzędu 10^{-6} dla modeli z rozdzielonymi miarami mikouszkodzeń. W obliczeniach każdy przypadek odpowiada różnym kombinacją funkcji materiałowych \mathbf{g} i \mathbf{h} i był liczony z czterema funkcjami strat ϑ_i , $i = 1, \dots, 4$ (patrz rozdział 8.2.1). Rezultaty te przedstawiono w opublikowanych pracach Nowak i Stachurski (2001-2003) [157], [158], [159]. Konieczne jest dokonanie selekcji i wyboru modelu najlepszego. Do tego celu posłużono się testami statystycznymi, które omówiono w rozdziale 9.

9. Metody porównywania oraz wyboru najlepszego modelu w zagadnieniach identyfikacji

Rozdział ten poświęcony jest :

- Określeniu kryteriów selekcji najlepszego modelu wśród modeli z różną liczbą parametrów.
- Dokonaniu selekcji i znalezieniu najlepszego modelu wśród modeli opisujących dane zjawisko (na przykładzie modeli powstawania i wzrostu mikrouszkodzeń w ciałach plastycznych).

Podstawowe określenia i oznaczenia

W rozdziale tym wykorzystuje się następujące określenia i oznaczenia:

\mathbf{x} oznacza wektor nieznanymi parametrów modelu a jego elementami są liczby rzeczywiste. Pomiaru są obarczone błędami a określone wartości parametrów na podstawie tych pomiarów nazywa się *oszacowaniami*.

$\hat{\mathbf{x}}$ oznacza oszacowane wartości parametrów \mathbf{x} . Oszacowany wektor parametrów $\hat{\mathbf{x}}$ jest pewną funkcją pomiarów i nazywa się go również *estymatorem* parametrów. Oszacowanie jest tym samym co wartość estymatora dla ustalonych wartości pomiarów.

\mathbf{x}^* oznacza prawdziwe wartości parametrów.

Wartość oczekiwana parametru lub wektora parametrów \mathbf{x} oznaczamy następująco $E(\hat{\mathbf{x}})$ i jeśli spełniona jest równość

$$E(\hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{x}^* ,$$

gdzie E jest operatorem wartości oczekiwanej, to estymator o tej własności nazywa się estymatorem *nieobciążonym*.

Przez wariancję estymatora rozumiemy wyrażenie

$$var(\hat{\mathbf{x}}) = E[\hat{\mathbf{x}} - E(\hat{\mathbf{x}})]^2$$

Macierz kowariancji natomiast to

$$cov(\hat{\mathbf{x}}) = E[\hat{\mathbf{x}} - E(\hat{\mathbf{x}})][\hat{\mathbf{x}} - E(\hat{\mathbf{x}})]^T$$

Rozrzut oszacowań wokół wartości prawdziwych można scharakteryzować zależnością

$$E(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*)^2 = [E(\hat{\mathbf{x}})]^2 + \text{var}(\hat{\mathbf{x}})$$

Dla skończonej liczby pomiarów M , nie są znane metody prowadzące do estymatorów nieobciążonych. Jednak można przyjąć, że właściwości asymptotyczne będą w przybliżeniu prawdziwe dla skończonej, choć dużej liczby pomiarów. Estymatory będą asymptotycznie nieobciążone, gdy

$$\lim_{M \rightarrow \infty} E(\hat{\mathbf{x}}_M) = \mathbf{x}^*.$$

Przez **estymator największej wiarygodności** rozumiemy

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \max_{\mathbf{x}} \ln L(\mathbf{y}, \mathbf{x})$$

gdzie $L(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ jest *funkcją wiarygodności* a $f(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ jest *warunkową funkcją gęstości prawdopodobieństwa* dla wektora pomiaru \mathbf{y} względem wektora parametrów \mathbf{x} .

Wielkości obserwowane \mathbf{y}_M są sumą wielkości mierzonych \mathbf{m}_M w M obserwacjach i losowego błędu pomiaru \mathbf{r}_M

$$\mathbf{y}_M = \mathbf{m}_M + \mathbf{r}_M$$

Zwykle zakłada się, że r_1, r_2, \dots, r_M są zmiennymi niezależnymi o rozkładzie normalnym $f(\mathbf{r}_M) = \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ z zerową wartością średnią i jednakową wariancją σ^2 .

Dla takiego rozkładu normalnego wektora pomiarów \mathbf{y}_M mamy

$$f(\mathbf{y}_M) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{M}{2}}} \prod_{n=1}^M e^{-\frac{(y_n - m_n)^2}{2\sigma^2}},$$

a zastępując σ^2 przez estymator s otrzymujemy logarytmiczną funkcję wiarygodności w postaci

$$\ln L(\mathbf{y}_M, \mathbf{x}, s) = -\frac{M}{2} \ln(2\pi) - M \ln s - \frac{1}{2s^2} \sum_{n=1}^M (y_n - m_n)^2.$$

Po zróżniczkowaniu $\ln L(\mathbf{y}_M, \mathbf{x}, s)$ po nieznanach parametrach \mathbf{x} i s oraz po wyznaczeniu estymatora największej wiarygodności wariancji błędów \hat{s}^2 (z równania $\frac{\partial \ln L(\mathbf{y}_M, \mathbf{x}, s)}{\partial s} = 0$) i po podstawieniu do $\ln L(\mathbf{y}_M, \mathbf{x}, s)$ zamiast s , logarytmiczna funkcja wiarygodności przyjmuje postać

$$\ln L(\mathbf{y}_M, \mathbf{x}, s) = -\frac{M}{2} \ln(2\pi) + M \ln M - M \ln \left[\sum_{n=1}^M (y_n - m_n)^2 \right] - \frac{M}{2}.$$

Logarytmiczna funkcja wiarygodności $\ln L(\mathbf{y}_M, \mathbf{x}, s)$ przyjmuje maksimum, gdy

$$\sum_{n=1}^M (y_n - m_n)^2 = \vartheta_2 \quad \text{funkcja strat osiąga minimum.}$$

Funkcja ϑ_2 jest kwadratem normy wektora błędów (różnic) \mathbf{r}_n w przestrzeni l_2 .

Dla normy l_1 , czyli oszacowanie parametrów metodą *sumy wartości bezwzględnych* mamy

$$\vartheta_1 = \sum_{n=1}^M |\mathbf{r}_n| \quad .$$

9.1 Uwagi wstępne

W statystyce matematycznej odmiennie niż w rachunku prawdopodobieństwa, nie zakłada się pełnej znajomości rozkładu zmiennej losowej, interpretowanej w praktyce jako cecha statystyczna elementów badanego zjawiska. Punktem wyjścia badania statystycznego jest przeprowadzenie doświadczeń i ustalenie (wylosowanie) z całej populacji badanego zjawiska pewnej skończonej liczby M elementów i zbadanie ich ze względu na zmienną losową (cechę) Y . Uzyskane w ten sposób wartości m_1, \dots, m_M badanej cechy Y są zaobserwowanymi wartościami M -elementowej próbki. W statystyce matematycznej na podstawie wyniku badania próbnego, staramy się wyciągnąć wnioski dotyczące badanej cechy. Celem wnioskowania statystycznego jest oszacowanie nieznanych parametrów bądź ich funkcji, które charakteryzują (rozkład) badanej cechy badanego zjawiska (danej populacji) oraz weryfikacja (badanie prawdziwości) przyjętych hipotez statystycznych (co do modeli matematycznych opisujących dane zjawisko). Wnioskowanie statystyczne, jako oparte na częściowej informacji dostarcza jedynie wniosków wiarygodnych - a nie absolutnie prawdziwych. Dowolne dwie M -elementowe próbki z tej samej populacji są na ogół różne. Ciąg liczbowy m_1, \dots, m_M należy traktować jako realizację ciągu Y_1, \dots, Y_M , gdzie $Y_i, i = 1, \dots, M$ jest zmienną losową, której zbiorem możliwych wartości są wartości i -tego spośród M pomierzonych elementów. Ciąg tych zmiennych losowych m_1, \dots, m_M będziemy nazywać M -elementową próbką losową.

Funkcję $f(Y_1, \dots, Y_M)$ będącą funkcją próby losowej m_1, \dots, m_M nazywamy *statystyką testową*. Każdą statystykę $\hat{\Theta}_M(Y_1, \dots, Y_M)$, której wartości przyjmujemy jako oszacowanie nieznanego parametru θ nazywamy *estymatorem* parametru θ . Otrzymaną na podstawie jednej konkretnej realizacji próby wartość estymatora nazywamy *oszacowaniem* (ocena) tego parametru. Dla danego parametru θ można utworzyć wiele estymatorów $\hat{\Theta}_M(Y_1, \dots, Y_M)$, ale dla uzyskania estymatora o możliwie „optymalnych” własnościach jest pożądane, żeby miał on z góry narzucone pewne własności (estymator zgodny i nieobciążony). Jeśli istnieje wartość oczekiwana $E(\hat{\Theta}_M)$, lecz $E(\hat{\Theta}_M) \neq \theta$, to $\hat{\Theta}_M$ nazywamy *estymatorem obciążonym* parametru θ , a różnicę $E(\hat{\Theta}_M) - \theta = B_M(\theta)$ *obciążeniem estymatora*. W przypadku gdy $\lim_{M \rightarrow \infty} B_M(\theta) = 0$ estymator $\hat{\Theta}_M$ nazywamy *estymatorem asymptotycznie nieobciążonym* parametru θ . Estymator $\hat{\Theta}_M$ nieobciążony parametru θ , który ma najmniejszą wariancję spośród wszystkich nieobciążonych estymatorów danego parametru θ wyznaczonych z prób M -elementowych, nazywamy *estymatorem efektywnym*.

Klasyczna estymacja parametrów zakłada, że funkcja gęstości prawdopodobieństwa ma znaną postać. Jeśli nie znamy ściśle funkcji gęstości rozkładu, lub znamy postać funkcji gęstości rozkładu, którą określono w oparciu o obserwacje zawierające również pomiary wadliwe (odległe), to estymatory parametrów ustalone dla takich rozkładów nazywa się w literaturze *estymatorami odpornymi*. Określenie odporność oznacza małą wrażliwość na niewielkie odchylenia rozkładu od rozkładu ścisłego. Estymacja odporna ma duże znaczenie praktyczne przy problemach identyfikacji. Jeśli prawdziwy rozkład badanej cechy oraz typ estymatorów jakie rozważamy, mogą być ograniczone do pewnych ogólnych klas, to będzie można wyznaczyć estymatory „optymalnie odporne”. Istnieje ścisły związek między metodami estymacji odpornej i niezależnymi od rozkładu testami hipotez opisanymi w następujących podrozdziałach rozdziału 9. W szczególności mimo, że odporne estymatory parametrów jak i testy hipotez można opisać w sposób niezależny od rozkładów, to wariancja takich estymatorów i moc takich testów zależą od rozkładów. Estymatory metody najmniejszych kwadratów są optymalne dla wartości średniej o ile rozkład błędów pomiarowych jest rozkładem normalnym o skończonej wariancji.

Warunkiem koniecznym dla testów statystycznych jest, aby rozkład statystyki testu (poziom istotności obszaru odrzucenia) był znany lub możliwy do wyznaczenia bez jawnego odwoływania się do jakiegokolwiek rozkładu występującego w konkretnych testowanych hipotezach. Testy te nazywa się testami niezależnymi od rozkładu, co oznacza, że rozkład statystyki testu zależy tylko od tego, czy hipoteza jest prawdziwa, oraz zwykle od liczby dostępnych danych, ale

nie zależy od samych hipotez. Testem takim jest np. test χ^2 Pearsona. Przyjmuje się, że obserwacje \mathbf{Y} mają rozkład o funkcji gęstości $f(\mathbf{Y}|\boldsymbol{\theta})$ zależnej od wektora parametrów $\boldsymbol{\theta}$, które należą do przestrzeni V . Wykorzystując funkcję największej wiarygodności można zdefiniować iloraz największej wiarygodności (patrz np. Brandt (1998) [25] lub Eadie i inni (1989) [61])

$$\lambda = \frac{\max_{\boldsymbol{\theta} \in \nu} L(\mathbf{Y}|\boldsymbol{\theta})}{\max_{\boldsymbol{\theta} \in (V - \nu)} L(\mathbf{Y}|\boldsymbol{\theta})},$$

a wartość λ jest z przedziału $0 \leq \lambda \leq 1$.

9.2 Miara odległości między modelami

Aby zweryfikować poprawność przewidywań danego modelu, musimy porównać wskazania tego modelu z odpowiednimi wskazaniami (charakterystykami) otrzymanymi z doświadczenia. Interesuje nas także porównanie kilku modeli danego zjawiska. W takich sytuacjach konieczne jest określenie właściwej miary rozbieżności między wskazaniami modelu a obserwacjami lub między wskazaniami dwóch różnych modeli. Miara rozbieżności (odległości) jest dobrze określona w statystyce matematycznej. Są różne propozycje tych miar w zależności od podejścia. W tej pracy wykorzystano podejście oparte na teorii informacji (patrz np. Sobczyk i Spencer (1996) [225], rozdział 7). Podstawowe własności takich miar omówiono w podrozdziałach 7.2 i 7.3 tej książki [225]. Załóżmy, że mamy dwa ciągle rozkłady prawdopodobieństwa \tilde{F}_1 i \tilde{F}_2 , o gęstościach $f_1(Y)$ i $f_2(Y)$, odpowiadające odpowiednio modelom \mathcal{M}_1 i \mathcal{M}_2 . Rozbieżność między dwoma modelami \mathcal{M}_1 i \mathcal{M}_2 będziemy określać zgodnie z definicją odległości Kullbacka-Leiblera:

$$d(\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2) = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(Y) \ln \left\{ \frac{f_1(Y)}{f_2(Y)} \right\} dY,$$

gdzie $f_1(Y)$ i $f_2(Y)$ są funkcjami gęstości prawdopodobieństwa zmiennej Y a wielkość $\frac{f_1(Y)}{f_2(Y)}$ nazywana jest ilorazem wiarygodności (patrz Brandt (1998) [25]).

Miarę tę można również wykorzystać jako kryterium informacyjne jakości modeli. Jakość modelu można scharakteryzować przez pewien funkcjonal (patrz np. Sobczyk i Spencer (1996) [225] podrozdział 7.4).

9.3 Kryteria wyboru modeli

Jedną z metod oceny modelu matematycznego danego zjawiska fizycznego jest porównanie jego przewidywań z eksperymentem. Model, który daje najlepsze

dopasowanie (np. najmniejsze odchylenie standardowe) jest preferowany. Zwykle model z wieloma swobodnymi parametrami daje lepsze dopasowanie do danego zbioru danych, niż model z kilkoma parametrami.

Celem tego podrozdziału jest przedstawienie kryteriów wyboru jednego modelu, z grupy modeli opisujących nasze zjawisko, który mimo prostej struktury, dobrze dopasowuje badane zjawisko do danych eksperymentalnych spośród modeli o różnej strukturze (podobnej lub zupełnie odmiennej) z różną liczbą parametrów. Należy znaleźć model zapewniający kompromis pomiędzy prostotą i najlepszym dopasowaniem. Konieczne jest jednak dokonanie wyboru w grupie modeli zagnieżdżonych i niezagnieżdżonych. Pierwsza grupa modeli jest omawiana w rozdziale 9.5 a druga grupa modeli w rozdziale 9.6.

Modele matematyczne zjawisk fizycznych są często porównywane między sobą przez ocenę jak dobrze każdy z nich dopasowuje dane wygenerowane z danymi z eksperymentu. Dokonanie wyboru modelu oznacza określenie modelu najlepiej dopasowującego się do danej próbki danych doświadczalnych dla danego procesu. Takie porównanie ma sens, gdy zakłada się, że modele te odtwarzają dane doświadczalne. Do oceny takiego dopasowania zwykle wykorzystuje się miarę dobroci dopasowania (ang. *goodness of fit*). Jest to precyzja z jaką model dopasowuje przykładowe dane doświadczalne. Przewidywania modelu porównuje się z danymi obserwowanymi. Różnice (brak dopasowania) pomiędzy obserwowanymi i wygenerowanymi rezultatami są mierzone w różny sposób, na przykład obliczając pierwiastek z średniego błędu kwadratu różnic między nimi. Istotą takiego wyboru jest założenie, że najlepszy model to taki, który zapewnia najlepsze dopasowanie dla wszystkich danych i musi być najlepszym przybliżeniem rozpatrywanego procesu spośród rozważanych modeli. Taki wybór najlepszego modelu jest rozsądny o ile pomiary zostały wykonane w układzie wolnym od błędów. Pomiary jednak nie są bezbłędne (o źródłach błędów pomiarowych mówiono w rozdz. 8.2). Dane z błędami czynią metodę dobroci dopasowania metodą mało zadawalającą (ubogą) dla celów porównywania modeli. Metoda ta może prowadzić do wyboru modelu, który może nie być modelem najlepiej aproksymującym badany proces. Ponieważ nie jest możliwe wyeliminowanie błędów w pomiarach doświadczalnych, należy ulepszyć sposób wyboru modelu. Jednym z nich jest uogólnienie metody dobroci dopasowania modelu do danych obserwowanych przez uwzględnienie złożoności modelu (ang. *generalizability*). Takimi uogólnionymi miarami uwzględniającymi liczbę wolnych parametrów w modelu są kryteria informacyjne Akaike'a (AIC) i Bayesa (BIC).

Procedury porównywania modeli oparte na kryteriach wyboru modelu

(AIC, FPE, BIC) pozwalają porównywać wiele modeli jednocześnie, tak że jeśli mamy K możliwych modeli, wtedy mamy K możliwych decyzji: wybrać model 1, ..., wybrać model K . Takie procedury wyboru są traktowane jako procedury dobroci dopasowania. W praktyce są sytuacje, kiedy nie ma wystarczających przesłanek na wybór któregośkolwiek spośród wielu modeli.

Testy statystyczne wyboru najlepszego modelu są to takie testy specjalnie przygotowane by zbadać hipotezę zerową która mówi, że wszystkie możliwe modele dopasowują dane doświadczalne równie dobrze. Omawiane w obecnej rozprawie procedury testów statystycznych do wyboru modelu ograniczają się do porównywania tylko dwóch modeli równocześnie, podczas gdy procedury oparte na kryteriach (AIC, FPE, BIC) nie są w ten sposób ograniczone. Oczywiście można opracować test do porównania równoczesnego wielu modeli wykorzystując szereg testów dla poszczególnych par modeli, lecz wtedy szybko narastają błędy dopasowań. W takich przypadkach mamy doczynienia z dużą liczbą kombinacji par modeli do sprawdzenia i metodologia procedur opartych na kryteriach wyboru (AIC, FPE, BIC) jest o wiele prostsza. Testy statystyczne Cox'a i Vuonga (omówione w dalszej części tego rozdziału) różnią się w zasadniczy sposób od testów dobroci dopasowania. Test dobroci dopasowania jest związany z testowaniem idealistycznej hipotezy zerowej, która stwierdza że dany model dopasowuje dostępne dane obserwowane. W testach Cox'a i Vuonga mamy sytuację przeciwną, gdyż testy te są związane z bardziej pragmatyczną hipotezą zerową mówiącą, że dane dwa modele umożliwiają równie efektywnie opis tych danych doświadczalnych nawet w sytuacjach, gdy żaden z modeli w rzeczywistości nie jest w pełni odpowiedni.

W literaturze pierwsze poważne próby porównywania oraz wyboru najlepszego modelu i określenia testu statystycznego do takich celów można znaleźć w pracy Wilksa z 1938 roku (Wilks S.S., The large sample distribution of the likelihood ratio for testing composite hypotheses, *Annals of Mathematical Statistics*, **9**, 60-62, 1938), który zaproponował uogólniony test ilorazu wiarygodności. Wilks testował hipotezę zerową stwierdzającą, że dwa w pełni zagnieżdżone modele są równoważne. Bardziej współcześnie Vuong (1989) [245] zaproponował test do porównywania modeli niezagnieżdżonych. Podejście Vuonga było modyfikacją propozycji White'a (1982) i Linharta (1988) w pracach cytowanych przez Goldeną (1995) [80]. Istotą teorii Vuonga jest połączenie metody uogólnionego ilorazu wiarygodności i metody Linharta dla modeli niezagnieżdżonych. Metodę Vuonga stosował i dokonał pewnego jej uogólnienia w szeregu swoich prac Golden. Test Vuonga zostanie przedstawiony w rozdziale 9.6

Po analizie i wyborze najlepszego modelu należy dokonać jeszcze *końcowej oceny* modelu i przeprowadzić analizę dostępnych wykresów oraz przeprowadzić testy niezależności reszt. Ocena jakościowa modelu wymaga:

- Porównania zachowania się modelu i modelowanego procesu oraz zgodności modelu z wiedzą o procesie.
- Wyjaśnienia niezgodności wynikających z:
 - niepoprawnej struktury modelu,
 - zatrzymania się algorytmu estymacji w lokalnym optimum,
 - błędów numerycznych,
 - błędów pomiarowych,
 - przeoczenia zjawisk, które wpłynęły na proces w trakcie pomiarów.
- Przeprowadzenie analiza wykresów prezentujących graficznie jakość dopasowania i sprawdzenie niezależności reszt:
 - reszty powinny być nieskorelowane ze sobą a także z sygnałem wejściowym,
 - przyjmuje się, że reszty są uporządkowane względem pewnej zmiennej (pomocne jest przeprowadzenie testu korelacji własnej reszt, test *Durbina-Watsona*, patrz np. Brandt (1998) [25]).

9.4 Definicje modeli zagnieżdżonych i niezagnieżdżonych

W tym rozdziale zdefiniujemy pojęcia modeli zagnieżdżonych i niezagnieżdżonych, najpierw w potocznym rozumieniu tych słów, a następnie w sposób matematyczny. Dwa modele określamy jako zagnieżdżone lub niezagnieżdżone, gdy jeden model jest przypadkiem szczególnym modelu drugiego. Tak więc dwa modele są zagnieżdżone jeśli jeden model może być zredukowany do drugiego przez nałożenie pewnych ograniczeń na wektor parametrów.

W przypadku modeli zagnieżdżonych zwykle porównujemy dwa modele \mathcal{M}_1 i \mathcal{M}_2 , które charakteryzują się tą samą postacią funkcyjną i tą samą strukturą błędów. Modele te różnią się zwykle liczbą parametrów oraz dokładnością dopasowania do danych doświadczalnych. Jeśli, dla przykładu, określimy nasze modele jako:

$$\mathcal{M}_1: \mathbf{Y} = \beta_1 + \beta_2 \varepsilon_1 + r_0 \quad ,$$

$$\mathcal{M}_2: \mathbf{Y} = \beta_1 + \beta_2 \varepsilon_1 + \beta_3 \varepsilon_1^2 + r_1 \quad ,$$

gdzie $\beta_1, \dots, \beta_n, n = 1, \dots, 3$ są parametrami, ε_1 jest zmienną w naszym modelu a r_0 i r_1 są błędami pomiarów modelu \mathcal{M}_1 i \mathcal{M}_2 , to modele te są zagnieżdżone ponieważ przez nałożenie ograniczenia, że $\beta_3=0$ model \mathcal{M}_2 staje się modelem \mathcal{M}_1 . Innymi słowami, \mathcal{M}_2 zawiera \mathcal{M}_1 . Rozróżnienie między tymi modelami wymaga zbadania ograniczeń ze względu na β_3 .

Dwa modele są niezagnieżdżone, w pełni albo tylko częściowo, jeśli jeden model nie może być zredukowany do drugiego modelu przez nałożenie pewnych ograniczeń na wektor parametrów. I tak, gdy modele są określone jako:

$$\mathcal{M}_1: \mathbf{Y} = \beta_1 + \beta_2\varepsilon_1 + \beta_3\varepsilon_1^2 + r_0 \quad ,$$

$$\mathcal{M}_2: \mathbf{Y} = \beta_3\varepsilon_1^2 + \beta_4\varepsilon_1^3 + \beta_5\varepsilon_1^4 + r_1 \quad ,$$

to modele te są niezagnieżdżone ponieważ nawet jeśli nałożymy ograniczenie, że $\beta_4=0$ i $\beta_5=0$, to model \mathcal{M}_2 nie staje się modelem \mathcal{M}_1 . Powyższe modele są częściowo zagnieżdżone, ponieważ mają człon z β_3 wspólny. Jeśli \mathcal{M}_1 i \mathcal{M}_2 nie zawierają tego członu, to modele:

$$\mathcal{M}_1: \mathbf{Y} = \beta_1 + \beta_2\varepsilon_1 + r_0 \quad ,$$

$$\mathcal{M}_2: \mathbf{Y} = \beta_4\varepsilon_1^3 + \beta_5\varepsilon_1^4 + r_1$$

są ściśle (dokładnie) niezagnieżdżone.

Pojęcie modeli zagnieżdżonych i niezagnieżdżonych w terminach statystycznych wymaga użycia kryterium informacyjnego Kullbacka-Leiblera (patrz podrozdział 9.2). Użycie kryterium Kullbacka-Leiblera ma tę zaletę, że posiada analityczną prostotę i ważne własności. Kryterium to jest niezmiennicze na zmianę wektora parametrów i jest nieujemne, ma własność addytywności dla niezależnych zjawisk losowych i jest równe zero, gdy $f_1(Y)$ i $f_2(Y)$ (funkcje gęstości prawdopodobieństwa modelu \mathcal{M}_1 i \mathcal{M}_2) są identyczne. Stosując kryterium Kullbacka-Leiblera można zdefiniować kiedy dwa modele są zagnieżdżone, częściowo niezagnieżdżone lub ściśle niezagnieżdżone. Przyjmując, że θ_1^0 jest wartością rzeczywistą parametru θ_1 dla modelu \mathcal{M}_1 oraz, że θ_2^0 jest rzeczywistą wartością parametru θ_2 dla modelu \mathcal{M}_2 , kryterium Kullbacka-Leiblera dla rozróżnienia rozkładów $f_1(Y)$ i $f_2(Y)$ jest postaci

$$I_{f_1 f_2}(\theta_1, \theta_2) = E_0[\ln f_1(Y, \theta_1) - \ln f_2(Y, \theta_2)] \quad ,$$

które ma minimum dla $\theta_2^*(\theta_1^0)$, gdzie θ_2^* jest pseudo-rzeczywistą wartością, która oznacza, że jest to wartość którą przyjmie θ_2 gdy f_1 jest rzeczywistym modelem dla naszych danych. Bliskość modelu \mathcal{M}_1 w stosunku do \mathcal{M}_2 jest wtedy wyrażona

$$C_{f_1 f_2}(\theta_1^0) = I_{f_1 f_2} \{ \theta_1^0, \theta_2^*(\theta_1^0) \} .$$

Wykorzystując pojęcie bliskości informacyjnej, można zdefiniować następujące pojęcia.

- Model \mathcal{M}_1 jest zagnieżdżony wewnątrz modelu \mathcal{M}_2 wtedy i tylko wtedy, gdy $C_{f_1 f_2}(\theta_1^0) = 0$ dla wszystkich dopuszczalnych wartości parametru θ_1^0 . Podobnie, model \mathcal{M}_2 jest zagnieżdżony wewnątrz modelu \mathcal{M}_1 wtedy i tylko wtedy, gdy $C_{f_2 f_1}(\theta_2^0) = 0$ dla wszystkich dopuszczalnych wartości parametru θ_2^0 .
- Model \mathcal{M}_1 i \mathcal{M}_2 są ściśle niezagnieżdżone jeśli $C_{f_1 f_2}(\theta_1^0)$ i $C_{f_2 f_1}(\theta_2^0)$ są obydwie różne od zera dla wszystkich dopuszczalnych wartości θ_1^0 i θ_2^0 .
- Model \mathcal{M}_1 i \mathcal{M}_2 są częściowo niezagnieżdżone jeśli $C_{f_1 f_2}(\theta_1^0)$ i $C_{f_2 f_1}(\theta_2^0)$ są obydwie różne od zera dla pewnych lecz nie dla wszystkich dopuszczalnych wartości θ_1^0 i θ_2^0 .

Związki pomiędzy modelami opisanymi powyżej równaniami i ich kategoriami określonymi w oparciu o pojęcie bliskości informacyjnej $C_{f_1 f_2}(\theta_1^0)$ wynikają bezpośrednio z warunku czy $C_{f_1 f_2}(\theta_1^0) = 0$, lub czy $C_{f_1 f_2}(\theta_1^0) \neq 0$ oraz czy $C_{f_2 f_1}(\theta_2^0) \neq 0$.

9.5 Kryteria wyboru dla modeli zagnieżdżonych

Teoria testowania hipotez statystycznych to problem określenia czy dana hipoteza statystyczna (dotycząca modelu) jest zgodna lub nie z rozkładem prawdopodobieństwa charakteryzującym zbiór danych obserwowanych \mathbf{Y} . Badaną hipotezę nazywamy hipotezą zerową i jest ona oznaczana przez H_0 . W uzupełnieniu do hipotezy H_0 , zwykle jesteśmy zainteresowani zbadaniem jednej lub kilku hipotez, odmiennych do hipotezy H_0 , które nazywa się hipotezami alternatywnymi i oznaczanych H_1, H_2 itd. Zwykle hipoteza zerowa i hipotezy alternatywne nie mają tych samych założeń. H_0 jest hipotezą dobrze określoną, podczas, gdy hipotezy alternatywne np. H_1, H_2 mają na celu tylko wskazanie w jaki sposób odchodzimy od H_0 . Kluczowym problemem w klasycznym testowaniu hipotez jest fakt, że testowanie nie dostarcza kryterium wyboru poziomu testu. Takiego problemu nie ma jeśli testowanie hipotez formułujemy jako problem, który nie ma na celu określenie parametrów lub zbioru ograniczeń parametrów rozkładu, lecz który ma odpowiedzieć na pytanie jak wybrać

wśród dostępnych modeli jeden, który jest najlepszy przy określonych celach naszej analizy. Rozważając różne powiązane modele, które dotyczą tych samych danych i mają ustaloną strukturę (niestochastyczną) możemy zastosować do ich porównywania kryteria informacyjne. Nasze modele \mathcal{M}_1 i \mathcal{M}_2 różniące się wektorem parametrów należą do pewnej rodziny parametrycznej. Dla danego rozkładu parametrycznego $\Upsilon_\theta = \{f(\mathbf{Y}; \theta), \theta \in \Theta\}$, rozkładu złożonego dla danych obserwowanych \mathbf{Y} , miarą dokładności przewidywań uzyskanych z modelu \mathcal{M}_1 dla \mathbf{Y} jest index różnicy (odmienności)

$$\mathcal{K}(\theta, f_0) = E_0[\ln f_0(\mathbf{Y})] - E_0[\ln f(\mathbf{Y}; \theta)],$$

gdzie pierwsza wartość oczekiwana jest względem rzeczywistych gęstości prawdopodobieństwa f_0 dla danych \mathbf{Y} . Akaike (1974) [2] zaproponował jako miarę różnicy wielkość $2\mathcal{K}(\theta, f_0)$, gdyż f_0 jest aproksymacją elementu rodziny rozkładów parametrycznych Υ_θ . W szczególności, jeśli $f_0(\mathbf{Y})$ jest aproksymowane przez $f(\mathbf{Y}; \hat{\theta})$, gdzie $\hat{\theta} = \hat{\theta}(\mathbf{Y})$ jest estymatorem największej wiarygodności parametru θ , wtedy różnica takiego porównania jest

$$r(\hat{\theta}, f_0) = 2 \cdot \mathcal{K}(\hat{\theta}, f_0) = 2E_0[\ln f_0(\mathbf{Y})] - 2E_0[\ln f(\mathbf{Y}; \hat{\theta})],$$

gdzie wartość oczekiwana jest względem rozkładu dla zbioru \mathbf{Y} . Najlepszy model to ten, dla którego $r(\hat{\theta}, f_0)$ jest najmniejszy. Ponieważ pierwszy człon $E_0[\ln f_0(\mathbf{Y})]$ nie zależy od parametru, jest więc taki sam dla wszystkich porównywanych modeli, wówczas procedura ta sprowadza się do porównywania

$$\tilde{r}(\hat{\theta}, f_0) = -2E_0[\ln f(\mathbf{Y}; \hat{\theta}(\mathbf{Y}))],$$

dla różnych modeli. Jako przybliżenie estymatora nieobciążonego dla \tilde{r} , Akaike zaproponował kryterium informacyjne

$$\text{AIC}(\hat{\theta}) = -2\hat{L} + 2n ,$$

gdzie $\hat{L} = L(\hat{\theta})$ oznacza maksymalną wartość logarytmicznej funkcji wiarygodności z próby, a n oznacza liczbę parametrów modelu. Procedura najlepszego dopasowania przy wykorzystaniu AIC wybiera model, dla którego AIC jest najmniejsze.

Rozważmy dwa modele z liczbami parametrów n_1 i n_2 , : model \mathcal{M}_1 z n_1 i model \mathcal{M}_2 z n_2 , $n_2 > n_1$.

Niech

$$V_M^*(\hat{\mathbf{x}}) = \sum_{i=1}^M (Y_i - \tilde{Y}_i)^2 , \quad (9.1)$$

będzie wartością wskaźnika estymacji w optimum dla modelu \mathcal{M}_1 i analogicznie V_2^* dla modelu \mathcal{M}_2 , obliczonych dla tych samych obserwacji o długości M . Wartość V_M^* maleje gdy liczba stopni swobody rośnie (zbiór punktów minimalizujących). Porównanie modeli to badanie czy następuje zmniejszanie się wartości V_M^* gdy liczba elementów wektora parametrów $\hat{\mathbf{x}}$ rośnie.

Wskaźnik $V_M^*(\hat{\mathbf{x}})$ ulega zmniejszeniu, gdy następuje rozbudowa modelu o nowe człony i zmiany te są istotnie duże (wybór modelu przez minimalizację wskaźnika $V^*(\hat{\mathbf{x}})$).

W wielu pracach zmodyfikowano ten wskaźnik $V_M^*(\hat{\mathbf{x}})$ przez wzbogacenie go o człon wzrastający, gdy zwiększa się liczba estymowanych parametrów modelu. Wskaźnik $V_M^*(\hat{\mathbf{x}})$ wykorzystują znane kryteria informacyjne: Akaike'a (AIC) lub kryterium informacyjne BIC Akaike'a oraz kryterium końcowego błędu przewidywania (FPE). Poniżej przedstawiono wzory do wyliczania wartości tych kryteriów.

- Kryterium końcowego błędu przewidywania (ang. *final prediction error*) (FPE) (Söderström i Stoica (1989) [226], str. 444)

$$\text{FPE} = V_M^*(\hat{\mathbf{x}}) \cdot \frac{1 + n/M}{1 - n/M}, \quad (9.2)$$

gdzie: M jest liczbą obserwacji, $\hat{\mathbf{x}}$ jest wektorem parametrów modelu, n oznacza ich liczbę i $V_M^*(\hat{\mathbf{x}})$ jest kwadratowa funkcją strat.

- Kryterium informacyjne AIC Akaike'a (Peracchi (2001) [168], Söderström i Stoica (1989) [226], str. 442)

$$\text{AIC} = M \cdot \ln V_M^*(\hat{\mathbf{x}}) + 2 \cdot n. \quad (9.3)$$

Dla poprawy właściwości asymptotycznych zaproponowano:

- Kryterium informacyjne BIC Akaike'a (kryterium SC Schwartza)

$$\text{BIC} = M \cdot \ln V_M^*(\hat{\mathbf{x}}) + n \cdot \ln M. \quad (9.4)$$

9.6 Test Vuonga dla rozróżniania pomiędzy rywalizującymi modelami niezagnieżdżonymi

W klasycznym testowaniu hipotez, hipoteza zerowa H_0 jest zawarta wewnątrz hipotezy alternatywnej H_1 , to znaczy hipoteza H_0 może być uzyskana przez nałożenie zbioru ograniczeń na parametry hipotezy H_1 . Dwie hipotezy H_1 i H_2 są

niezagnieżdżone, o ile, ani H_1 nie zawiera się w H_2 , ani H_2 nie jest zagnieżdżone wewnątrz H_1 . Hipotezy niezagnieżdżone mogą wynikać z faktu uwzględnienia nowych nie zależnych cech w modelu, lub kiedy sama postać funkcjonalna modelu może być odmienna, np. według pewnej teorii jeden model można przyjąć jako liniowy względem Y , inny ma natomiast zależność wykładniczą. Testy hipotez modeli niezagnieżdżonych różnią się od tych rozpatrywanych w rozdziale 9.5 z dwóch powodów. Po pierwsze mamy pełną symetrię w traktowaniu dwóch badanych hipotez. Po drugie, w przeciwieństwie do testów z rozdziału 9.5, które dają dwie możliwe odpowiedzi, a mianowicie „odrzuć H_0 ” i „nie odrzuć H_0 ”, w przypadku testów dla hipotez niezagnieżdżonych możliwe są cztery następujące odpowiedzi:

- odrzucić H_1 lecz nie H_2 ,
- odrzucić H_2 lecz nie H_1 ,
- odrzucić zarówno H_1 oraz H_2 ,
- nie odrzucać ani H_1 ani H_2 .

Są dwa alternatywne podejścia do sposobu testowania hipotez niezagnieżdżonych. Możemy testować hipotezę H_1 względem H_2 lub odwrotnie. Podejście pierwsze jest wystarczające, gdyż testowanie H_2 względem H_1 jest symetrycznie zdefiniowane.

Istnieją następujące testy statystyczne do rozróżniania modeli niezagnieżdżonych \mathcal{M}_1^* i \mathcal{M}_2^* :
(patrz Granger i inni (1995) [83], Clarke (2000) [45], McAleer (1995) [133], Vuong (1989 [245])

- test Cox'a,
- test Vuonga ,
- czynników Bayesa,
- test F ,
- test J ,
- test JA .

W obecnej rozprawie rozważono użycie testów Cox'a i Vuonga. Bogata literatura w zakresie testów statystycznych do porównywania i wyboru lepszego z dwóch modeli niezagnieżdżonych wynika z prac Davida Cox'a z roku 1962 i 1963 (patrz np. Granger i inni (1995) [83]).

Istotą testu Cox'a jest fakt, że prawdziwy model powinien być w stanie przewidywać zachowanie innych szczególnych alternatywnych modeli (zawierać je w sobie). Celem testu Cox'a jest porównanie przewidywań modelu alternatywnego H_1 ze spodziewanym przewidywaniem modelu alternatywnego H_2 jako hipoteza zerowa. Z matematycznego punktu widzenia innowacja Cox'a polega na uogólnieniu znanej statystyki testu ilorazu wiarygodności (definicja testu patrz np. Eadie i inni (1989) [61]). Zmodyfikowana statystyka Cox'a jest różnicą między ilorazem logarytmicznej funkcji wiarygodności a wartością oczekiwaną ilorazu logarytmicznej funkcji wiarygodności jako hipoteza zerowa. Obydwa modele muszą spełniać hipotezę zerową. To znaczy, jeśli $L_{f_1}^M(\hat{\theta}_1)$ jest wartością maksymalną funkcji wiarygodności z próby o liczebności M dla przyjętego modelu \mathcal{M}^*_1 , a $L_{f_2}^M(\hat{\theta}_2)$ jest wartością maksymalną funkcji wiarygodności próby o liczebności M dla przyjętego modelu \mathcal{M}^*_2 , wtedy iloraz logarytmicznych funkcji wiarygodności jest

$$\hat{l}_{f_1 f_2} = \ln L_{f_1}^M(\hat{\theta}_1) - \ln L_{f_2}^M(\hat{\theta}_2) .$$

Licznik statystyki testowej Cox'a jest różnicą między $\hat{l}_{f_1 f_2}$, a wartością oczekiwaną ilorazu logarytmicznych funkcji wiarygodności jako hipoteza zerowa

$$T_f = \hat{l}_{f_1 f_2} - E(\hat{l}_{f_1 f_2}) .$$

Statystyka Cox'a jest tak określoną różnicą, jak w równaniu powyżej, dodatkowo normalizowaną. Statystyka ta jest oceniana jako statystyka ześrodkowanego ilorazu wiarygodności dla którego

$$\frac{T_f}{\sqrt{V(T_f)}} \sim \mathcal{N}(0, 1) ,$$

ma standardowy rozkład normalny, a V jest variancją. Największa trudność jaka powstaje przy zastosowaniu statystyki Cox'a do modeli nieliniowych jest związana z obliczeniem wartości oczekiwanej ilorazu logarytmicznej funkcji wiarygodności. Tę wartość oczekiwaną możemy określić w sposób przybliżony stosując kryterium informacyjne Kullbacka-Leiblera, miarą bliskości. Gdy kryterium Kullbacka-Leiblera nie może być określone analitycznie, konieczne

jest podejście symulacyjne w celu określenia oszacowania pseudo-maksymalnej funkcji wiarygodności. Wykonanie symulacji nie jest trudne, jednak jest czasochłonne. Rezultaty testu Cox'a często nie są jednak jednoznaczne. Istnieje możliwość odrzucenia obydwu modeli bez wskazania co zrobić dalej (krytyka testu Cox'a jest przedstawiona w pracy Granger i inii (1995) [83]). Testem który sprawdza się i w takich sytuacjach okazał się test Vuonga.

Test Vuonga wymaga jedynie policzenia różnicy logarytmicznych funkcji wiarygodności dla naszych modeli i pewnej normalizacji (patrz Clarke (2001) [45]). Nie wymaga on jednak ani symulacji ani żadnych wstępnych informacji. Test Vuonga zawsze daje rozstrzygnięcie, który model jest lepszy. Pozwala wybrać najlepszy model nawet wśród słabych modeli.

Zerowa hipoteza H_0 w teście Vuonga oznacza, że modele \mathcal{M}_1^* i \mathcal{M}_2^* są równoważne. Można to przedstawić, podobnie jak w pracy Clarke'a (2001) [45], w następujący sposób

$$H_0 : E^0 \left[\ln \frac{f_1(Y_i|X_i; \hat{x}_M^1)}{f_2(Y_i|X_i; \hat{x}_M^2)} \right] = 0.$$

Alternatywnymi hipotezami są:

$$H_1 : E^0 \left[\ln \frac{f_1(Y_i|X_i; \hat{x}_M^1)}{f_2(Y_i|X_i; \hat{x}_M^2)} \right] > 0 ,$$

$$H_2 : E^0 \left[\ln \frac{f_1(Y_i|X_i; \hat{x}_M^1)}{f_2(Y_i|X_i; \hat{x}_M^2)} \right] < 0.$$

Hipoteza H_1 oznacza, że model \mathcal{M}_1^* jest lepszy od modelu \mathcal{M}_2^* .

Hipoteza H_2 oznacza, że model \mathcal{M}_1^* jest gorszy od modelu \mathcal{M}_2^* .

Wartość oczekiwana dla powyższych hipotez nie jest znana. Jednak tak, jak w pracy Vuonga (1989) [245] i innych pracach np. Clarke (2001) [45], dla całkowicie ogólnych warunków, wartość oczekiwana może być odpowiednio oszacowana poprzez wykorzystanie statystyki ilorazu wiarygodności, gdy policzymy $LR_M(\hat{x}_M^1, \hat{x}_M^2)$ (patrz objaśnienia poniżej wzoru (9.7)) i pomnożymy to wyrażenie przez $\frac{1}{M}$, co można zapisać w postaci

$$\frac{1}{M} LR_M(\hat{x}_M^1, \hat{x}_M^2) \longrightarrow E^0 \left[\ln \frac{f_1(Y_i|X_i; \hat{x}_M^1)}{f_2(Y_i|X_i; \hat{x}_M^2)} \right].$$

Test Vuonga można zapisać teraz w postaci:

$$H_0 : \frac{LR_M(\hat{x}_M^1, \hat{x}_M^2)}{(\sqrt{M}) \cdot \hat{\omega}_M} \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, 1) , \quad (9.5)$$

$$H_1 : \frac{LR_M(\hat{x}_M^1, \hat{x}_M^2)}{(\sqrt{M}) \cdot \hat{\omega}_M} \xrightarrow{d} +\infty , \quad (9.6)$$

$$H_2 : \frac{LR_M(\hat{x}_M^1, \hat{x}_M^2)}{(\sqrt{M}) \cdot \hat{\omega}_M} \xrightarrow{d} -\infty , \quad (9.7)$$

gdzie

$$LR_M(\hat{x}_M^1, \hat{x}_M^2) \equiv L_{f_1}^M(\hat{x}_M^1) - L_{f_2}^M(\hat{x}_M^2) , \quad (9.8)$$

$$\hat{\omega}_M^2 \equiv \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \left[\ln \frac{f_1(Y_i|X_i; \hat{x}_M^1)}{f_2(Y_i|X_i; \hat{x}_M^2)} \right]^2 - \left[\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \ln \frac{f_1(Y_i|X_i; \hat{x}_M^1)}{f_2(Y_i|X_i; \hat{x}_M^2)} \right]^2 . \quad (9.9)$$

$L_{f_1}^M(\hat{x}_M^1)$ ($L_{f_2}^M(\hat{x}_M^2)$) są maksymalnymi wartościami logarytmicznych funkcji wiarygodności, gdy postulowana jest hipoteza H_1 (H_2), $f_1(Y_i|X_i; \hat{x}_M^1)$ ($f_2(Y_i|X_i; \hat{x}_M^2)$), gdzie $i = 1, \dots, M$ oznaczają funkcje gęstości prawdopodobieństwa warunkowego Y_i gdy X_i dla pierwszego (drugiego) modelu z parametrami równymi \hat{x}_M^1 (\hat{x}_M^2) – wartości estymowane parametrów x^1 (x^2).

Rozważane modele mają różne liczby parametrów dlatego zgodnie z pracą Clarke (2001) [45] przyjęto skorygowaną statystykę ilorazu logarytmicznej funkcji wiarygodności.

$$\widehat{LR}_M(\hat{x}_M^1, \hat{x}_M^2) = LR_M(\hat{x}_M^1, \hat{x}_M^2) - \left[\left(\frac{n_1}{2} \right) \ln(M) - \left(\frac{n_2}{2} \right) \ln(M) \right] , \quad (9.10)$$

gdzie n_1 i n_2 to liczby parametrów w modelu \mathcal{M}_1^* i \mathcal{M}_2^* . Ostatecznie, wzór na wyliczanie wartości w teście Vuonga ma postać

$$\varpi = \frac{\widehat{LR}_M(\hat{x}_M^1, \hat{x}_M^2)}{(\sqrt{M}) \cdot \hat{\omega}_M} . \quad (9.11)$$

9.7 Zasady selekcji modeli stosowane dla każdej funkcji strat F_1 , F_2 , F_3 i F_4

Wykorzystajmy omawiane testy statystyczne do selekcji i znalezienia najlepszego modelu dla problemów identyfikacji przedstawionych w rozdziale 8. Proces selekcji przeprowadzono tak samo jak w pracy Nowak i Stachurski (2006) [160] postępując w następujący sposób:

- dla wybranej funkcji h , na bazie kryteriów Akaike'a i FPE znajdowano najlepsze modele z grupy modeli zagnieżdżonych ($g \equiv 1$, g estymowane i g liniowe, dla przykładu A4, A5 i A6),
- na bazie kryterium Vuonga znajdowano najlepszego reprezentanta z danej grupy modeli niezagnieżdżonych (różne funkcje h i różne funkcje g , dla przykładu A1, A2, A3 i A6),
- wybrane modele w powyższych krokach, niezależnie (w danej klasie modeli z całkowitą miarą mikrouszkodzeń lub miarą rozdzieloną) są następnie porównywane parami przy pomocy testu Vuonga.

W przypadkach odpowiadających modelom z rozdzielonymi miarami nukleacji i wzrostu pustek (oznaczonych pierwszą literą „D”) wszystkie wielkości statystyczne, łącznie z kryterium Akaike'a i FPE są obliczane dla przypadków rozdzielonych. W celu porównania tych modeli z modelami z całkowitą miarą porowatości traktujemy je jako model całkowity (to znaczy po zsumowaniu danych wyjściowych). Kryteria te są zastosowane do rozróżniania modeli zagnieżdżonych konkurujących ze sobą. Należy podkreślić, że tylko kilka modeli tworzy taką grupę modeli zagnieżdżonych. Dlatego tylko część wchodzi do analizy.

9.8 Analiza uzyskanych oszacowań parametrów materiałowych

W tym rozdziale przedstawiono rezultaty oszacowanych parametrów materiałowych i wskaźników statystycznych dopasowania poszczególnych modeli do danych eksperymentalnych. Prezentację wyników ograniczono tylko do jednego minimum odpowiadającego aktualnej wartości funkcji strat. Inne znalezione lokalne minima pominięto. Szersza analiza wyników jest przedstawiona w pracy Nowak i Stachurski (2006) [160]. Celem analizy różnych postaci funkcji materiałowych było uzyskanie „optymalnego” modelu, który pasuje do danych eksperymentalnych, zapewniając najmniejsze wartości funkcji strat, równania

(8.28) lub (8.30). We wszystkich przypadkach nakładamy ograniczenia na parametry, aby zapewnić ich właściwą mechaniczną interpretację i aby pominąć nadmiar w obliczeniach (w szczególności dla funkcji g). W obliczeniach przyjęto następującą strategię:

- w każdym przypadku dla danej funkcji strat rozpoczynano obliczenia, zakładając na początku szeroki zakres prawdopodobnych parametrów. Na przykład, dla przypadków A1, A2 i A3 i funkcji strat F_1 parametry podano poniżej,
- w następnym kroku przyjmowano małe przedziały parametrów zawierające poprzednio znalezione wielkości,

A1:	$0.01 \leq a_1 \leq 0.05,$	$0.1 \leq b_1 \leq 0.6,$	$0.9 \leq c_1 \leq 1.3$
	$1.0 \leq a_2 \leq 1.5,$	$0.01 \leq b_2 \leq 0.3,$	$0.01 \leq c_2 \leq 0.6$
A2:	$0.01 \leq a_1 \leq 0.1,$	$0.1 \leq b_1 \leq 0.5,$	$1.0 \leq c_1 \leq 1.3$
	$0.1 \leq a_2 \leq 0.6,$	$0.5 \leq b_2 \leq 1.2,$	$0.8 \leq c_2 \leq 1.8$
A3:	$0.01 \leq a_1 \leq 0.1,$	$0.1 \leq b_1 \leq 1.0,$	$1.0 \leq c_1 \leq 1.3$
	$1.5 \leq a_2 \leq 3.0,$	$2.5 \leq b_2 \leq 5.0$	

We wszystkich przypadkach identyfikacji znajdowano wiele optimum lokalnych. Wśród nich były i takie które zawierały parametry będące ich granicznymi wielkościami. Dlatego do obliczeń użyto minimalizacji z ograniczonym zakresem zmienności parametrów. Pozwala to na dogłębne zbadanie zakresu parametrów, którym jesteśmy szczególnie zainteresowani. Drugim i szczególnie istotnym powodem takiej strategii obliczeń było ograniczenie dużego nakładu obliczeń i dużej pamięci w celu zachowania wielu minimów lokalnych i zachowania punktów prowadzących do tych minimów co nie jest możliwe dla nadmiernie szerokiego zakresu parametrów. Kolejny powód, nie mniej istotny to kłopoty z numerycznym całkowaniem równań różniczkowych. Ich prawa strona zawiera osobliwość i jest bardzo wrażliwa nawet na względnie małe zmiany pewnych parametrów. Czasami nie było możliwe spełnienie wymaganej dokładności nawet przy obliczeniach w arytmetyce o podwójnej precyzji na komputerze typu stacja robocza. W obliczeniach każdy przypadek odpowiada różnej kombinacji funkcji materiałowych h i g . Każdy przypadek był obliczany z czterema różnymi funkcjami strat ϑ_i (patrz rozdział (8.2.1)). W obliczeniach funkcji strat F_2 (Hubera) i F_3 (Beaton i Tuckey) użyto wartości progowej $A = 10^{-8}$.

Określone wskaźniki informacyjne zostały przedstawione w następnych rozdziałach. Wskaźniki te pozwalają na wybór najlepszego modelu ze znalezionych za pomocą każdej z poszczególnych funkcji strat ϑ_i . Wybór modelu przeprowadzono według reguł opisanych w rozdziale (9.7). Wyniki zaprezentowano w

następnych rozdziałach. Ze względu na brak miejsca pominięto pewne tabele dla modeli z rozdzieloną miarą mikrouszkodzeń. Ogólnie rzecz biorąc rezultaty dla modeli z rozdzieloną miarą są gorsze niż te odpowiadające przypadkom modeli z całkowitą miarą w tym sensie że błąd dopasowania f jest gorszy.

9.8.1 Rezultaty testów AIC i FPE dla modeli z całkowitą miarą mikrouszkodzeń

Rezultaty testów są przedstawione w następujących tabelach. Tabela 2a prezentuje wyniki identyfikacji dla modelu z całkowitą miarą porowatości z funkcjami materiałowymi wzrostu pustek.

Tabela 2a. Zidentyfikowane parametry i błędy dopasowania dla przypadków A1–A3, A6, C1–C3, C6. h - funkcja materiałowa nukleacji z parametrami a_1 , b_1 i c_1 ; g - funkcja materiałowa wzrostu z parametrami a_2 , b_2 i c_2 .

Miara	Model	a_1	b_1	c_1	a_2	b_2	c_2	f
F_1	A1	0.0172	0.2974	1.0958	1.1350	0.1382	0.4934	1.6571e-7
F_2		0.0187	0.3007	1.1140	1.1180	0.1225	0.4090	2.3707e-7
F_3		0.0154	0.2850	1.0695	1.1576	0.1526	0.4818	1.6567e-7
F_4		0.0143	0.2758	1.0471	1.0413	0.2750	0.4417	1.6660e-3
F_1	A2	0.0211	0.3049	1.1176	0.5775	1.0912	1.6879	1.6524e-7
F_2		0.0244	0.3478	1.1626	0.5883	1.1231	1.3453	3.6439e-7
F_3		0.0304	0.3422	1.2110	0.5214	1.0554	1.2481	1.7068e-7
F_4		0.0180	0.2846	1.0753	0.6526	0.8496	1.4448	1.6643e-3
F_1	A3	0.0244	0.3170	1.1514	2.4568	3.3547		1.6599e-7
F_2		0.0260	0.3294	1.1585	1.5513	2.5871		2.5069e-7
F_3		0.0238	0.3112	1.1415	2.2490	3.1683		1.6715e-7
F_4		0.0220	0.2995	1.1140	1.7755	2.7043		1.6637e-3
F_1	A6	0.0226	0.3178	1.1438	0.7770	0.3454		1.6647e-7
F_2		0.0284	0.3951	1.2581	0.9505	0.2235		7.3475e-7
F_3		0.0214	0.3116	1.1295	0.8143	0.3332		1.6738e-7
F_4		0.0159	0.2741	1.0558	0.9093	0.3628		1.6740e-3
F_1	C1	0.0207	2.9505	-2.5947	0.9867	0.0371	0.1728	1.7786e-7
F_2		0.0153	2.8486	-2.3422	0.9969	0.1980	0.2487	5.0016e-7
F_3		0.0180	3.1582	-2.6648	1.0511	0.0376	0.2425	1.6992e-7
F_4		0.0215	3.0560	-2.6839	0.9334	0.0386	0.1997	1.7693e-3
F_1	C2	0.0261	2.8124	-2.5663	0.4395	0.7644	1.5244	1.8223e-7
F_2		0.0290	2.5598	-2.4443	0.4249	0.7486	1.6472	2.3876e-7
F_3		0.0247	2.8514	-2.5650	0.4520	0.7332	1.6671	1.8154e-7
F_4		0.0331	2.7081	-2.6111	0.3348	0.8829	1.6361	1.8791e-3
F_1	C3	0.0375	2.5392	-2.5653	1.8899	4.1247		2.1265e-7
F_2		0.0284	2.3832	-2.2774	1.3934	2.7816		5.0255e-7
F_3		0.0379	2.5518	-2.5799	1.8705	4.1585		2.1427e-7
F_4		0.0199	3.5184	-2.9051	1.7428	2.9687		1.7325e-3
F_1	C6	0.0262	2.8163	-2.5648	0.4191	0.3686		1.8121e-7
F_2		0.0288	2.5698	-2.4557	0.5190	0.2792		2.2995e-7
F_3		0.0262	2.7437	-2.5387	0.6325	0.2074		1.8790e-7
F_4		0.0251	2.8978	-2.6144	0.5976	0.2328		1.8116e-3

Dla każdego przypadku (odpowiadającym wybranym funkcjom materiałowym h i g) określone są cztery linie odpowiadające czterem różnym postaciom funkcji jakości. Każda linia zawiera określone parametry materiałowe funkcji materiałowych i odpowiadające wartości funkcji jakości.

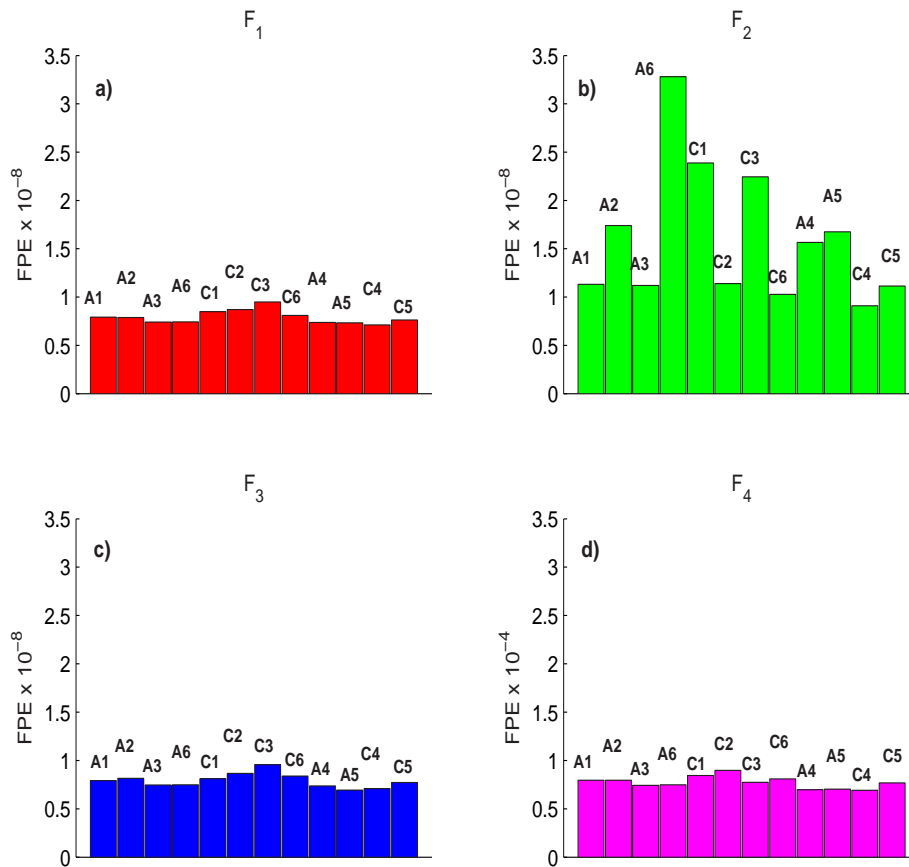
Tabela 2b. Zidentyfikowane parametry i błędy dopasowania dla przypadków A4, A5, C4, C5. h - funkcja materiałowa nukleacji z parametrami a_1 , b_1 i c_1 ; g - stała funkcja materiałowa wzrostu z parametrem $a_2 = 1$ oraz a_2 estymowanym

Miara	Model	a_1	b_1	c_1	a_2	f
F_1	A4	0.0361	0.3729	1.2950	1.0	1.8809e-7
F_2		0.0329	0.3474	1.2536	1.0	3.9949e-7
F_3		0.0361	0.3729	1.2948	1.0	1.8810e-7
F_4		0.0327	0.3523	1.2540	1.0	1.7803e-3
F_1	A5	0.0238	0.3373	1.1866	1.1919	1.7539e-7
F_2		0.0156	0.2918	1.0896	1.3856	4.0086e-7
F_3		0.0149	0.2862	1.0686	1.3841	1.6597e-7
F_4		0.0131	0.2717	1.0394	1.4377	1.6808e-3
F_1	C4	0.0219	2.8618	-2.5637	1.0	1.8181e-7
F_2		0.0233	2.6711	-2.4721	1.0	2.3204e-7
F_3		0.0218	2.8755	-2.5710	1.0	1.8127e-7
F_4		0.0205	3.1207	-2.7077	1.0	1.7671e-3
F_1	C5	0.0222	2.8517	-2.5641	0.9921	1.8257e-7
F_2		0.0187	2.7608	-2.4088	1.1217	2.6622e-7
F_3		0.0221	2.8230	-2.5420	1.0	1.8479e-7
F_4		0.0268	2.8219	-2.6292	0.8458	1.8377e-3

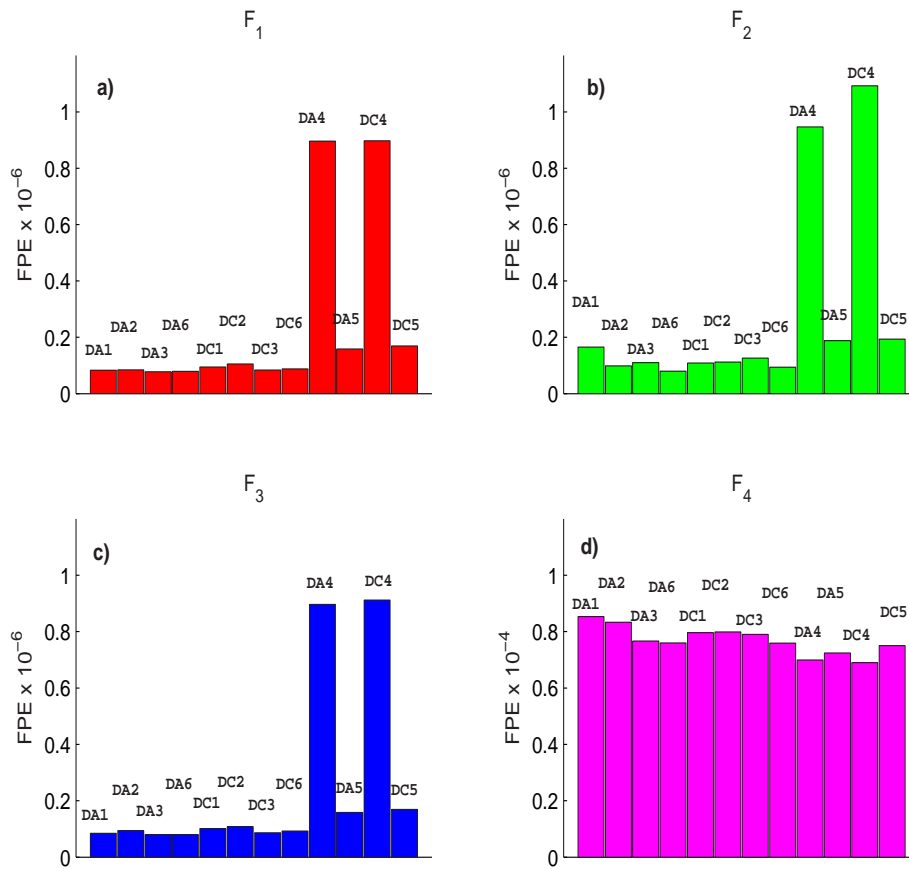
Użyte statystyczne kryteria informacyjne tzn. Akaike'a i FPE wskazują zgodnie te same modele. Dlatego poniżej do prezentacji wyników wybrano jedynie wartości kryterium FPE. Wartości z kryterium FPE przedstawiono w postaci słupków na rys.9.1.

9.8.2 Rezultaty testów AIC i FPE dla modeli z rozdzieloną miarą mikrouszkodzeń

Dla modeli z rozdzieloną miarą mikrouszkodzeń błąd dopasowania, czyli suma odchyleń dla modelu nukleacji i modelu wzrostu pustek. W tym przypadku błąd ten jest wielkości 10^{-6} . Wskaźniki statystyczne są także względnie dobre. Wskaźniki Akaike'a i FPE pokazały, że liniowe zależności dla g (tzn. DA6 i DC6) są najlepsze we wszystkich grupach. Pominięto prezentowanie tabel wartości z rezultatami dla modeli z rozdzieloną miarą mikrouszkodzeń, a wyniki przedstawiono jedynie na wykresie słupkowym rys.9.2.



Rys. 9.1. Wartości kryterium informacyjnego FPE (dla różnych przypadków odpowiadających poszczególnym funkcjom jakości) dla modeli z ogólną miarą porowatości.



Rys. 9.2. Wartości kryterium informacyjnego FPE (dla różnych przypadków odpowiadających poszczególnym funkcjom jakości) dla modeli z rozdzieloną miarą porowatości.

9.8.3 Rezultaty dla testu Vuonga dla modeli z całkowitą miarą mikrouszkodzeń

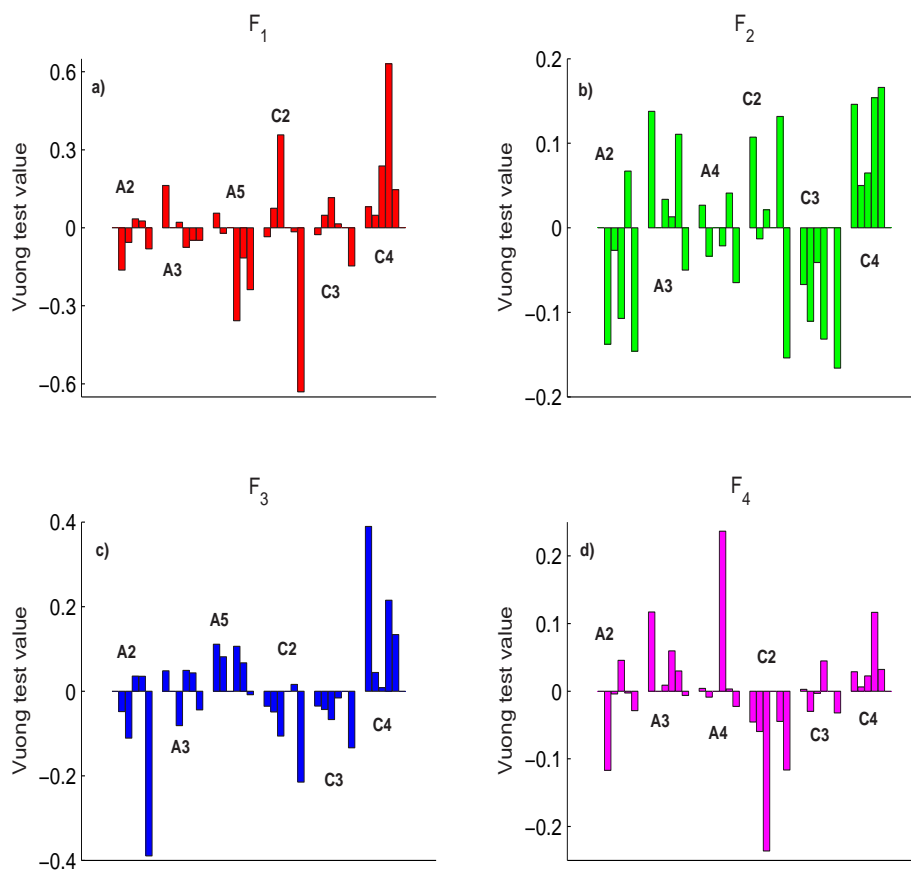
Analiza danych na rys.9.2 pozwala stwierdzić, że model A5 (funkcja h – posiada rozkład normalny a g – jest stałą wyestymowaną) jest najlepszy w grupie modeli powiązanych (zagnieżdżonych) A4, A5 i A6 (stwierdzenie słuszne dla funkcji strat F_1 i F_3). Dla funkcji strat F_2 i F_4 najlepszy jest model A4 (z funkcją h która ma rozkład normalny i $g \equiv 1$). Podobnie jest na rys.9.3 gdzie C4 (z funkcją h – jako funkcją tangens i $g \equiv 1$) jest najlepsze wśród C4, C5 i C6. Stwierdzenie to jest prawdziwe dla wszystkich funkcji strat. Najlepsze modele określone przy pomocy testów Akaike’a i FPE dla danej grupy były następnie porównywane z wykorzystaniem testu Vuonga z modelami niezagnieżdżonymi (rozdzielonymi). Rezultaty testu Vuonga są przedstawione graficznie na rys.9.4. Rys.9.4 zawiera wartości testu Vuonga z wzajemnego porównania modeli A2, A3, A5, C2, C3, C4 uzyskanych dla funkcji strat F_1 . Na rysunkach tych przedstawiono sześć grup słupków odpowiadających sześciu modelom, które są porównywane. Każda grupa przedstawia wartości testu Vuonga, jako wynik badania hipotezy, która mówi, że aktualny model jest lepszy, w porównaniu z innymi. Na przykład pierwsza grupa na rys.9.3 przedstawia rezultaty z porównania modelu A2 z modelami A3, A5, C2, C3, C4. Słupki powyżej poziomu zerowego wskazują na fakt, że aktualny model jest lepszy niż model z nim porównywany (np. pierwsza grupa pokazuje, że A2 jest lepsze niż C2 i C3 jest gorsze niż inne modele A3, A5 i C4).

9.8.4 Rezultaty dla testu Vuonga dla modeli z rozdzieloną miarą mikrouszkodzeń

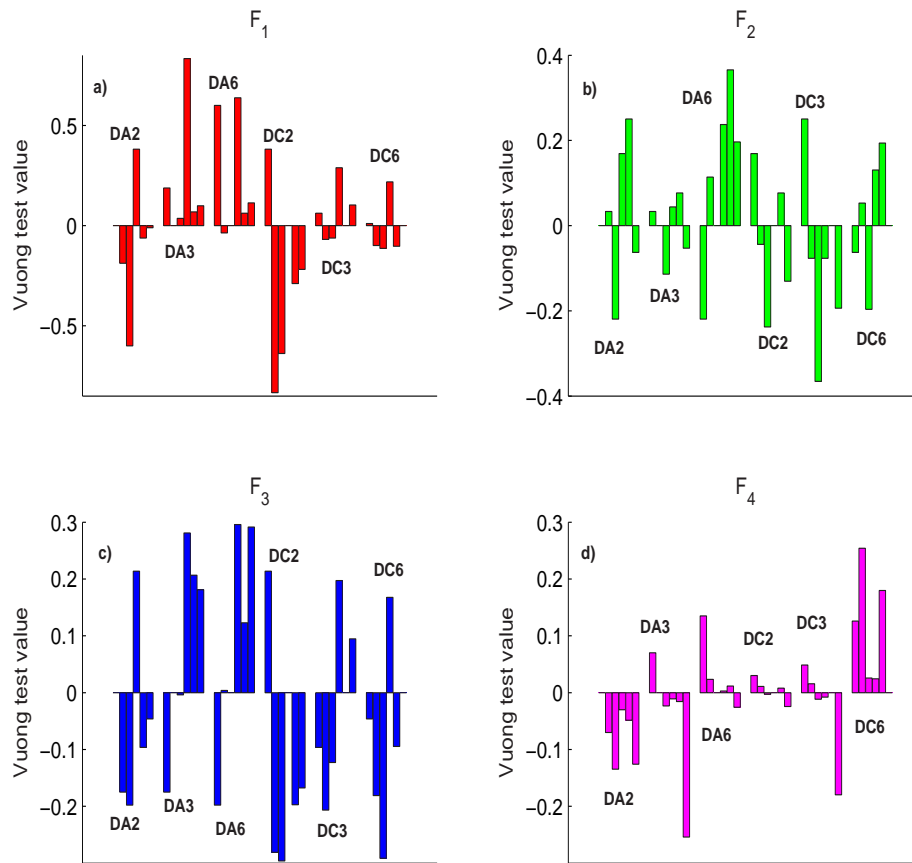
Podobnie jak w poprzednim podrozdziale rezultaty testu Vuonga dla modeli z rozdzieloną miarą mikrouszkodzeń przedstawiono graficznie na rys.9.4. Kryterium FPE określa model DA6 jako najlepszy z grupy modeli DA4, DA5, DA6 natomiast model DC6 jako najlepszy z DC4, DC5, DC6. Wniosek ten jest słuszny dla wszystkich funkcji strat ($F_1 - F_4$) i dlatego model DA6 porównywano z DA2 i DA3 (natomiast DC6 z DC2 i DC3). Rys.9.4 zawiera rezultaty wzajemnego porównania modeli DA2, DA3, DA6 i DC2, DC3, DC6.

9.9 Analiza rezultatów identyfikacji parametrów

Rozdział ten zawiera analizę rezultatów przedstawionych w rozdziale 9.8 dla modeli z całkowitą i rozdzieloną miarą mikrouszkodzeń. Ponieważ przeprowa-



Rys. 9.3. Wartości wskaźnika ϖ w testach Vuonga dla najlepszych modeli w poszczególnych grupach (cztery różne przypadki odpowiadające poszczególnym funkcjom jakości) dla modeli z całkowitą miarą porowatości.



Rys. 9.4. Wartości wskaźnika ϖ w testach Vuonga dla najlepszych modeli w poszczególnych grupach (cztery różne przypadki odpowiadające poszczególnym funkcjom jakości) dla modeli z rozdzieloną miarą porowatości.

dzono dwa niezależne warianty obliczeń numerycznych dla modeli z całkowitą miarą mikrouszkodzeń, wyniki zamieszczono w tabeli 2a i 2b. Pierwszy wariant dotyczy przypadków gdy funkcje materiałowe g i h mają zmienny kształt i wyniki są zamieszczone w tabeli 2a (funkcja g ma postać g_1, g_2, g_3 i g_6 , wzory 8.35-8.37 i 8.40). Drugi wariant dotyczy stałych funkcji materiałowych g (badano dwa typy – pierwszy z $g \equiv 1$ i drugi z g stałe o wartości oszacowanej), a rezultaty są w tabeli 2b. Każdą wybraną postać funkcji g liczone z funkcjami h_1 i h_3 . Dlatego te dwa warianty zawierają wiele podklas. W obliczeniach otrzymano wiele lokalnych minimów w czasie każdego przebiegu programu identyfikacji. W tabelach 2a i 2b przedstawiono jednak jedynie najlepsze wyniki. Każdy wybór funkcji h i g jest reprezentowany przez cztery linie odpowiadające różnym funkcjom strat $F_1 - F_4$. W tabelach 2a i 2b są też zamieszczone wartości wskaźników informacyjnych FPE dla tych modeli. Wskaźniki te użyto do wyboru najlepszego modelu w grupie modeli zagnieżdżonych. Funkcje materiałowe h_1 (funkcja rozkładu normalnego wzór 8.32) i h_3 (funkcja przesunięty tangens hiperboliczny, wzór 8.34) dają równie dobre wyniki. Jednak jedynie parametry funkcji materiałowej h_1 posiadają prostą interpretację mechaniczną. Duża liczba lokalnych minimów we wszystkich przypadkach z tej grupy nieliniowych modeli, prowadzi do wniosku, że konieczne jest zbadanie prostszych funkcji np. dla funkcji materiałowej wzrostu pustek $g \equiv 1$ (to jest g rozważane przez Gursona) i g będącą stałą wyznaczaną (oszacowaną). Rezultaty dla $g = const$ przedstawione w tabeli 2b pokazały, że błąd dopasowania jest tego samego rzędu jak w odpowiednich przypadkach gdy g było funkcją zmienną. Wyniki w tabeli 2b pozwalają stwierdzić, że najlepszym wyborem jest stała funkcja $g \equiv 1$ użyta łącznie z funkcją nukleacji h_3 . Ten wniosek jest słuszny dla wszystkich funkcji strat F_1, F_2, F_4 poza F_3 dla której przypadek A5 jest lepszy. Test Vuonga dla miar F_1 i F_3 wybiera model A5 z funkcją rozkładu Gaussa jako funkcja materiałowa nukleacji oraz oszacowana stała funkcja wzrostu g (spośród A2, A3 i A5) ale za najlepszą ze wszystkich wybrał model C4. Taki wniosek wynika również z rys. 4. Jednakże, co jest interesujące, błąd dopasowania (wartość f w tabeli 2b) uzyskany dla przypadku A_5 z h_1 i g_5 dla miar F_1, F_3 i F_4 jest lepszy niż dla modelu C4. Dla miar F_2, F_3 i F_4 ponownie jako najlepszy okazał się model C4. Jest to zgodne z rezultatami opublikowanymi w pracy Nowak i Stachurski (2003) [159] dla identyfikacji przeprowadzonej w oparciu o metodę najmniejszych kwadratów. Oznacza to, że odrzucenie „rozrzutów” osłabia wpływ obserwacji większych niż dana wartość progowa.

Tabela 3. Najlepsze modele.

Model z całkowitą miarą mikrouszkodzeń					
Miara	Model	Wybrane funkcje materiałowe		f	kryterium Akaike'a
		funkcja g	funkcja h		
F_1	C4	g_4	h_3	1.81809e-7	-581.5833
F_2	C4	g_4	h_3	2.32036e-7	-574.0211
F_3	C4	g_4	h_3	1.81270e-7	-581.6753
F_4	C4	g_4	h_3	1.76710e-3	-296.9444

Model z rozdzielonymi miarami mikrouszkodzeń					
Miara	Model	Wybrane funkcje materiałowe		f	kryterium Akaike'a
		funkcja g	funkcja h		
F_1	DA3	g_3	h_1	1.74197e-6	-507.5290
F_2	DA6	g_6	h_1	1.79088e-6	-506.6705
F_3	DA6	g_6	h_1	1.78623e-6	-506.7511
F_4	DC4	g_4	h_3	1.76082e-3	-297.0548

Obliczenia i analiza modeli z rozdzieloną miarą mikrouszkodzeń przeprowadzono niezależnie. Najlepsze modele z obydwu wariantów, jak poprzednio, porównano przy pomocy testu Vuonga. Porównanie wyników, pokazało przewagę modeli z całkowitą miarą mikrouszkodzeń.

9.10 Podsumowanie rozdziału 9

Otrzymane rezultaty pozwalają stwierdzić, że:

- Dla modelu z całkowitą miarą mikrouszkodzeń każda funkcja strat określa inny 'najlepszy model'. Dla modelu z rozdzieloną miarą mikrouszkodzeń postać najlepszego modelu jest taka sama dla prawie wszystkich funkcji strat. Zmienia się tylko zbiór parametrów. Oznacza to, że użycie odpornych funkcji strat ma wpływ na wybór modelu a nie tylko na oszacowanie parametrów materiałowych, w zależności od wyeliminowania wpływu obserwacji z dużymi rozrzutami (ang. *outliers*).
- Najlepszą funkcją strat okazała się funkcja strat Beaton Tuckey'a.
- Najlepszą funkcją wzrostu g jest wyestymowana funkcja stała. Wszystkie funkcje strat wskazują, że funkcje nukleacji h_1 i h_3 są równie dobre.

Prostą interpretację mechaniczną ma jednak tylko funkcja rozkładu normalnego h_1 .

- Model z całkowitą miarą mikrouszkodzeń lepiej dopasowuje się do danych eksperymentalnych.
- Funkcje materiałowe zostały określone przy założeniu, że materiał osnowy jest plastycznie nieściśliwy ($\dot{\rho}_M = 0$ gdzie ρ_M jest gęstością materiału osnowy) oraz $D_{ij} = D_{ij}^p$.
- Wszystkie wnioski dotyczą tylko jednego materiału (stal B(0.17%C)).
- Przy wyborze i weryfikacji nieliniowych modeli konieczne jest użycie kryteriów informacyjnych i innych testów statystyki matematycznej.
- Dla wyznaczenia właściwej struktury modelu należy łączyć analizę wykresów z pomiarów i oszacowań modelu z wynikami testów (porównując wartości funkcji strat odpowiadające różnym modelom).
- Weryfikacja modeli jest tym lepsza im większa jest liczba dostępnych rezultatów. Uniezależnienie się od liczebności próby jest możliwe i zostało omawiane np. w pracy Chapelle i inni (2002) [40].
- Metody wyznaczania 'poprawnego' modelu opierają się na założeniu statystycznym, że pomiary pochodzą z rzeczywistego systemu mieszczącego się w rozważanej klasie modeli.

Należy podkreślić, że nie należy przeceniać znaczenia testów statystycznych i nie należy całkowicie zastępować badania wykresów wielkości mierzonych i wyjść modelu opartego na zdrowym rozsądku samymi testami statystycznymi. W większości praktycznych przypadków testy statystyczne są dobrymi wskaźnikami poprawności modelu. Spośród dwóch modeli które opisują dobrze dostępne dane doświadczalne, wybieramy ten, w którym występuje mniej parametrów. Należy kierować się *zasadą oszczędności* która pozostaje ze zdrowym rozsądkiem: „Nie wprowadzamy dodatkowych parametrów do opisu jeśli nie są one niezbędne”. Teoretyczne uzasadnienie tej zasady omówione zostało w książce Söderström i Stoica (1989) [226] w dodatku C 11.1.

Wyznaczenie struktury i sprawdzenie modelu są ważnymi etapami procedury identyfikacji. Przy wyznaczaniu właściwej struktury modelu konieczne

jest użycie testów statystycznych i zbadanie wykresów sygnałów wyjściowych otrzymanych z badań doświadczalnych i z modelu. W rozdziale tym opisano testy porównujące wartości funkcji strat odpowiadającym różnym strukturom modelu. Testy te wymagają stosowania metody błędu dopasowania. Przykładem takiego testu jest test AIC. Można go stosować do sprawdzenia, czy malejące funkcje strat spowodowane powiększeniem struktury modelu jest znaczące. Inne, omówione w rozdziale 9 testy tego rodzaju, wykorzystują informację o strukturze modelu w celu nałożenia kary na zmniejszanie się funkcji strat spowodowane powiększaniem się struktury. Testy te są ściśle związane z testem χ^2 . Testy AIC, FPE dostarczają reguł selekcji modeli zagnieżdżonych. Pewne uogólnienia tych testów podano w pracy Stoica i inni (2004) [231]. W metodzie błędu dopasowania dokonuje się estymacji parametrów wyznaczając minimum globalne funkcji strat. Z algorytmów minimalizacji musimy zastosować taki, który nie zatrzyma się na minimum lokalnym gdyż tak otrzymanego modelu (określonego przez znalezione parametry) dopasowanie będzie niewłaściwe. Założono również, że struktura modelu zawiera system rzeczywisty a wszystkie minima dla naszego procesu są minimami globalnymi. Jeśli rząd modelu został wybrany prawidłowo, to minimum jest jednoznacznie wyznaczone. W przypadku, gdy otrzymany model słabo, lub źle pasuje do danych doświadczalnych to próbujemy kolejnej minimalizacji funkcji strat zaczynając poszukiwanie numeryczne od innego punktu. Tak, jak podaje Söderström i Stoica (1989) [226] w rozdziale 12.8 standardowe metody optymalizacji (np. metoda Gaussa-Newtona), są na ogół zbieżne do minimum globalnego.

W niniejszej rozprawie do wyboru najlepszego modelu wykorzystuje się reguły statystyki klasycznej, a nie reguły teorii podejmowania decyzji. Okazuje się wtedy, że dowolna optymalna reguła statystyki klasycznej jest jakąś regułą bayesowską. Tak więc w metodzie klasycznej musimy dokonać wyboru spośród różnych możliwych reguł decyzyjnych (pewna nieokreśloność), z których każda jest optymalna dla pewnych nieznanymi wartości parametrów. Tę nieokreśloność w metodzie klasycznej pozostawia się na poczet postępowania obiektywnego i opisanie danych eksperymentalnych w taki sposób, aby wydobyc z nich jak najwięcej informacji o nieznanymi parametrach, a nie decydować o wartości samych parametrów i ich rozkładzie statystycznym. Dlatego do estymacji parametrów wykorzystano sposób oparty na teorii informacji zamiast metody bazującej na teorii podejmowania decyzji.

10. Wnioski

W pracy przedstawiono zagadnienie identyfikacji stałych materiałowych w modelach płynięcia plastycznego i lokalizacji odkształceń plastycznych w ciele stałym. Badano zachowanie metali ciągliwych zarówno poddanych quasi-statycznym jak i dynamicznym procesom obciążania w zaawansowanych stanach plastycznych. Pierwszorzędne znaczenie dla powstawania i rozwoju lokalizacji odkształceń plastycznych mają wszelkie źródła osłabienia materiałowego, które są związane z wewnętrzną strukturą ciała. W ramach kontynualnego opisu porowatego materiału sprężysto-plastycznego dokonano najpierw ogólnej charakterystyki tego materiału, zwracając uwagę na takie elementy opisu jak: osłabienie przez rozwój porowatości, wrażliwość na ciśnienie hydrostatyczne, dylatację plastyczną czy też prawo plastycznego płynięcia.

Przedstawiona propozycja modelu konstytutywnego uwzględnia w opisie materiału ewolucję mikrouszkodzeń zdefiniowanych jako objętościowy udział pustek w analizowanej objętości materiału. Jako parametr osłabienia przyjęto porowatość, którą można określić z badań mikrostruktury za pomocą obserwacji mikroskopowych. Porowatość określić można też z pomiarów względnej zmiany gęstości materiału. Przy pomiarach gęstości niemożliwe jest rozróżnienie objętości pękniętych i oddzielonych od osnowy wtrąceń lub cząstek. Pomiarzy takie jednak są bardzo przydatne, gdyż z punktu widzenia osłabienia materiału nie ma różnicy pomiędzy pustką a wtrąceniem (cząstką), które mogą jeszcze w dalszym procesie odkształcania przenosić pewne obciążenia. Za parametr wzmocnienia przyjęto odkształcenie ekwiwalentne materiału osnowy. Przybliżone równanie ewolucji tego parametru określono na podstawie znajomości krzywej umocnienia materiału, wyznaczonej w procesie nie sprzyjającym rozwojowi pustek, np. w próbie jednoosiowego ściskania. Mikrouszkodzenia jako rezultat deformacji plastycznych metali ciągliwych są spowodowane tworzeniem się mikropustek, które powstają jako wynik pęknięcia lub oddzielania się kruchych wtrąceń (inkluzji, cząstek drugiej fazy) od ciągliwego rodzimego materiału osnowy. Postępujący wzrost istniejących mikropustek i tworzenie się nowych pustek z narastaniem odkształceń, pomniejsza zdolność materiału do przenoszenia obciążeń, a w konsekwencji do jego całkowitego zniszczenia. Podstawą przewidywania kiedy i przy jakich odkształceniach materiał osiąga końcowe zniszczenie (efekt w skali makroskopowej) wynika z prawidłowego modelowania mikromechanizmów.

Problem lokalizacji odkształceń plastycznych sformułowano jako zadanie adiabatyczne w ramach teorii lepkoplastyczności. Zastosowano model mate-

riału w postaci związków konstytutywnych Perzyny. Model ten stanowił pewien element sformułowania zadania identyfikacji stałych w opisie deformacji niesprężystych, które rozwiązano numerycznie metodą elementów skończonych. Rozwiązanie jest stabilne i jednoznaczne, a jego poprawność zapewniają przyjęte założenia, w tym lepkość materiału. Model sprężysto-lepkoplastyczny materiału wiąże aspekty mechaniczne i falowe lokalizacji odkształceń plastycznych. Lepkość zapewnia poprawność analizy dla szerokiego zakresu odkształceń dla materiałów ciągliwych, regularyzuje proces, eliminuje numeryczny problem zależności wyników od siatki podziału. Zadanie lokalizacji odkształceń przy skręcaniu rurek rozwiązano metodami analizy dynamicznej z wykorzystaniem pakietu elementów skończonych ABAQUS. Określono wszystkie poszukiwane wielkości jako funkcje zmiennych przestrzennych i czasu. Uzyskano całą historię zmian takich wielkości jak: przemieszczenia, prędkości, odkształcenia, naprężenia i temperatury. Prezentowane w postaci rysunków wyniki odkształceń, temperatury odnoszą się do wybranych chwil i wybranego miejsca w próbce. Funkcje zależne od zmiennych przestrzennych przedstawiono w postaci rysunków. Zmienność zjawiska lokalizacji odkształceń w czasie, pokazana na wykresach, uzupełnia obraz stanu końcowego skręcania z prędkością kątową $\omega_0^* = 800$ rad/s. Wyniki wskazują na losowy charakter badanego zjawiska. Rozprzestrzenianie, odbicia i interakcje fali deformacji w obszarze próbki oddaje obraz rozprzestrzeniania się zaburzeń i lokalizacji odkształceń. Obraz stanu odkształcenia i stanu prędkości punktów materialnych wykazuje współzależność ich rozkładu przy wystąpieniu lokalizacji odkształceń plastycznych. Propagacja frontu fali w próbce wywołuje niejednorodny stan zmiennych od samego początku procesu. W każdym przypadku obliczeniowym (dla różnych prędkości skręcania) występuje zróżnicowanie stanu już w sprężystym zakresie zachowania materiału, zanim front fali przebiegnie długość próbki i nastąpi jej odbicie od zamocowanego końca próbki. Poszczególne chwile procesu pokazują, że skutki przyłożenia oddziaływań zewnętrznych nie powstają natychmiast. Końcowy stan deformacji jest wrażliwy na przebieg procesu falowego. Rozprzestrzenianie, odbicia i interakcje fali decydują o miejscu lokalizacji odkształceń plastycznych. Wynik tej interakcji istotnie zależy od warunków początkowo-brzegowych zadania. W każdym z analizowanych przypadków obliczeniowych z różną prędkością skręcania, dla danych warunków początkowo-brzegowych, rozwój deformacji przebiega w przypadkowo (losowo) umiejscowionych strefach lokalizacji. Szerokość tej strefy ma skończony wymiar, a przemiany zachodzą w niej w sposób ewolucyjny, stosownie do aktualnego stanu odkształcenia i naprężenia. Ustalono, że ze wzrostem lepkości materiału maleje szerokość strefy lokalizacji. W prezento-

wanym przykładzie geometria rurki, zamocowanie i obciążenie próbki są bardzo uproszczone. Mimo to, zmienność parametrów materiałowych wpływa na rozwój niejednorodności. Dodatkowo geometria próbki, warunki brzegowe próbki i prędkość procesu skręcania powodują łącznie powstanie i szybki rozwój niejednorodnych deformacji, a więc również lokalizacji odkształceń plastycznych. Analiza przebiegu procesu potwierdza, iż lokalizacja odkształceń plastycznych zachodzi bez jakichkolwiek materiałowych, temperaturowych, geometrycznych i numerycznych imperfekcji. Tak więc lokalizacja odkształceń plastycznych zachodzi przede wszystkim w wyniku propagacji i interakcji fali naprężenia.

Uzyskane rezultaty dla procesu skręcania pokazują przebieg deformacji i zachodzącą w końcowym etapie lokalizację odkształceń plastycznych. Obliczone wartości odkształcenia ekwiwalentnego i wzrost temperatury w porównaniu z rezultatami eksperymentalnymi Marchanda i Duffy'ego (1988) [130] wykazały jakościową i ilościową zgodność. Uzyskany w obliczeniach wzrost temperatury, a zwłaszcza porównanie go z danymi doświadczalnymi w miejscu lokalizacji odkształceń plastycznych (pasma przewężenia), potwierdził słuszność przyjętego założenia o adiabatycznym charakterze dynamicznego procesu deformacji niesprężystych. Wyniki wykazują dużą wrażliwość wystąpienia lokalizacji odkształceń plastycznych na prędkość deformacji. Miejsce lokalizacji zależy od prędkości deformacji. Dla procesów quasi-statycznych (średnia prędkość odkształceń plastycznych $\dot{\epsilon}_p \leq 10^{-3} s^{-1}$) procesy kończą się lokalizacją odkształceń plastycznych w tym samym miejscu. Dla procesów z większymi prędkościami następuje zmiana miejsca lokalizacji. Jednak po przekroczeniu wartości krytycznej następuje lokalne, intensywne zniszczenie w bezpośredniej okolicy przyłożenia oddziaływań zewnętrznych. Sama wartość krytyczna prędkości skręcania zależy od charakterystyki materiału i warunków początkowo-brzegowych i wymaga określenia dla każdego materiału i danego zadania brzegowego.

Analiza zachowania się materiału pod różnymi obciążeniami wymaga znajomości parametrów materiałowych. Dane dla danego materiału są uzyskiwane z dostępnych doświadczeń. Parametry są określane dla specyficznych warunków eksperymentu (proste rozciąganie, ściskanie, skręcanie). Przy przenoszeniu wartości zidentyfikowanych w tych próbach stałych materiałowych do innych zadań o odmiennej geometrii i dla innych stanów naprężenia zakłada się obiektywność tych wartości i uznaje się, że nie są one zależne od warunków, w jakich był prowadzony eksperyment. Najnowsze badania z zakresu mechaniki materiałów prowadzone są w coraz mniejszej skali przestrzennej, co pociąga za sobą analizę zjawisk w mniejszej skali. Konieczne wydaje się do określania własno-

ści materiału stosowanie analizy w wielu skalach (patrz np. prace: Hutchinson (2000) [100], Needleman (2000) [142], Ghosh, Nowak i Lee (2001) [76]).

Przedstawione rezultaty numeryczne zadania identyfikacji parametrycznej i selekcji modeli w mechanice stanowią oryginalne, własne wyniki autora. Przyjęte z literatury elementy sformułowania zagadnienia, model materiału, czynniki i ewolucja osłabienia, jak również właściwości sformułowanego zadania i rozwiązania zostały połączone w całość z elementami optymalizacji i selekcji modeli. Opracowaną oryginalną metodę identyfikacji dla sprężysto-plastycznych materiałów ciągliwych z mikrouszkodzeniami (rozd. 8) i weryfikacji modeli konstytutywnych przedstawioną w rozdz. 9 można zastosować do pełnej i szczegółowej identyfikacji modeli w każdym innym problemie. Metoda ta daje możliwość identyfikacji stałych w procesach dynamicznych o których mowa w rozdz. 2.12 i 6 oraz w problemach z powstawaniem pasm ścinania (rozd. 7), co jest celem następnych prac autora (np. Nowak i inni [155]).

Problem identyfikacji parametrów materiałowych w mechanice, to problem bardzo złożony, występuje w opisie dużo parametrów, badania eksperymentalne są skromne a rezultaty mają charakter statystyczny. Najlepszy model materiału bez identyfikacji może być bezużyteczny. Rozprawa nie wyczerpuje obszernej problematyki dotyczącej wyboru najlepszego modelu konstytutywnego w mechanice ciała stałego. Przedstawione przykłady obliczeniowe potwierdzają występowanie problemu wyboru struktury modelu konstytutywnego. Odmienne warunki geometryczne, wiele składników materiałowych, a także warunki obciążenia sprawiają, że ogólne sformułowanie generuje nowe zagadnienia badawcze.

Celowe jest więc podjęcie dalszych badań dotyczących:

- opisu wzrostu pustek w osnowie z materiału ze wzmocnieniem uwzględniający istnienie wewnątrz pustek sztywnych cząsteczek o pewnej masie, przenoszących część obciążeń i ograniczających ich swobodny wzrost, szczególnie dla stanów naprężenia o wskaźniku trójosiowości naprężeń $0.3 < \frac{\sigma_m}{\sigma_e} < 0.7$ (zakres panujący w obszarze szyjki) co podkreślono również np. w pracach: Steglich i Brocks (1997) [230] i Pardoen i Delannay (1998) [165],
- opracowania modelu wzrostu pustek dla reprezentatywnego elementu objętości jako kombinacja dwóch obszarów: materiału rodzimego i materiału porowatego o losowym rozkładzie wielkości i kształtu pustek (dla pustek sferycznych patrz praca Ohno i Hutchinson (1984) [161]),

- weryfikacja modelu mikromechanicznego łączenia się pustek w osnowie ze wzmocnieniem z wystąpieniem zlokalizowanych pasm ścinania i zidentyfikowania parametrów materiałowych w tym modelu dla różnych stanów obciążenia,
- określenia wpływu rozkładu pustek o dowolnym kształcie na sposób ich łączenia się i prędkość przebiegu tego procesu aż do zniszczenia
- analizy oddziaływania różnych populacji mikopustek z uwzględnieniem anizotropii materiału w obszarze między pustkami,
- opracowania nowych konstytutywnych modeli wieloskalowych dla materiałów z mikrouszkodzeniami i metod identyfikacji parametrów materiałowych użytych w tych modelach z wykorzystaniem pomiarów eksperymentalnych,
- identyfikacji odpornej i uwzględnienie w procesie identyfikacji testów statystycznych wspomagających wybór struktury modelu i optymalnej liczby parametrów.

Literatura

- [1] ABAQUS/Standard -Ver. 6.2, *Reference Manuals*, Hibbit, Karlsson and Sorensen Inc., Providence, 2001.
- [2] Akaike H., A new look at the statistical model identification, *IEEE Transactions on Automatic Control*, **19** (6), 716-723, 1974.
- [3] Anand L., Kalidindi S.R., The process of shear band formation in plane strain compression of fcc metals: Effects of crystallographic texture, *Mechanics of Materials*, **17**, 223-243, 1994.
- [4] Andersson H., Analysis of a model for void growth and coalescence ahead of a moving crack tip, *J. Mech. Phys. Solids*, **25**, 217-233, 1977.
- [5] Argon A.S., Im J., Separation of second-phase particles in spheroidized 1045 steel, Cu-0.6 pct Cr alloy and maraging steel in plastic straining, *Metall. Trans.*, **6A**, pp. 839-851, 1975.
- [6] Argon A.S., Im J. and Needleman A., Distribution of plastic strain and negative pressure in necked steel and copper bars, *Metall. Trans.*, **6A**, 815-824, 1975.
- [7] Argon A.S., Im J. and Safoglu R., Cavity formation from inclusions in ductile fracture, *Metall. Trans.*, **6A**, 825-838, 1975.
- [8] Argon A.S., Formation of cavities from nondeformable second-phase particles in low temperature ductile fracture, *J. Eng. Mat. Tech.*, Trans. ASME, **98**, 60-68, 1976.
- [9] Ashby M.F., Work hardening of dispersion-hardened crystals, *Phil. Mag.*, **14**, pp.1157-1178, 1966.
- [10] Ashby M.F., The deformation of plastically non-homogeneous alloys, *Phil. Mag.*, **21**, pp.399-424, 1970.
- [11] Ashby M.F., Ghandi C. and Taplin D.R.M., Fracture-mechanism maps and their construction for f.c.c. metals and alloys, *Acta Metall.*, **27**, pp. 699-729, 1979.
- [12] Barnby J.T., The initiation of ductile failure by fractured carbides in an anstenic stainless steel, *Acta Met.*, **15**, p.903, 1967.

- [13] Batra R.C., Kim C.H., Effect of viscoplastic flow rules on the initiation and growth of shear bands at high strain rates, *J. Mech. Phys. Solids*, **38**, 859-874, 1990.
- [14] Batra R.C., Zhang X., On the propagation of a shear band in steel tube, *ASME Journal of Engineering Materials and Technology* **116**, 155-161, 1994.
- [15] Batra R.C., Numerical solutions of initial boundary value problems with shear strain localization, w: *Localization and fracture phenomena in inelastic solids*, CISM Courses and Lectures No. 386, red. P. Perzyna, Wien, Spinger, 301-389, 1998.
- [16] Bauer R.W. and Wisdorf H.G.F., Void initiation in ductile fracture, *Scripta Metall.*, **7**, 1213-1220, 1973.
- [17] Bąk J., *Mata encyklopedia metrologii*, Warszawa, WNT, 1989.
- [18] Becker R., Needleman A., Richmond O., Tvergaard V., Void growth and failure in notched bars, *J. Mech. Phys. Solids*, **36**(3), pp.317-351, 1988.
- [19] Becker R., Ring fragmentation predictions using the Gurson model with material stability conditions as failure criteria, *Int. J. Solids and Structures*, **39**, pp. 3555-3580, 2002.
- [20] Berg C.A., Plastic dilatation and void interaction, *Proc. Batelle Memo. Ins. Sympo. on Inelastic Processes in Solids*, pp. 171-209, 1969.
- [21] Bishop J.F. and Hill R., The theory of the plastic distortion of a polycrystalline aggregate under combined stresses, *Phil. Mag.*, **42**, pp. 414-427, 1951.
- [22] Bluhm J.I. and Morrissey R.J., Fracture in a tensile specimen, *Proc. First Int. Conference on Fracture*, Sendai, Japan, September 1965, eds. T. Yokobori, T. Kawasaki and J.L. Swedlow, Vol. **3**, pp. 1739-1780, 1966.
- [23] Bochniak W., Korbel A., KOBO type forming: forging of metals under complex conditions of the process, *J. Matl. Process. Technol.*, **134**, 120-134, 2003.

- [24] Boender C.G., Rinnoy Kan A.H.G., Strougie L., Timmer G.T., A stochastic method for global optimization, *Mathematical Programming*, **22**, 125-140, 1982.
- [25] Brandt S., *Data Analysis. Statistical and Computational Methods for Scientists and Engineers*, 3rd ed., Springer-Verlag, New York, 1998.
- [26] Bridgman P.W., The stress distribution at the neck of a tension specimen, *Trans. Am. Soc. Metals*, **32**, 553-574, 1943.
- [27] Bridgman P.W., Effects of high hydrostatic pressure on the plastic properties of metals, *Rev. Mod. Phys.*, **17**, 3-14, 1945.
- [28] Bridgman P.W., *Studies in large plastic flow and fracture*, McGraw-Hill, 1952.
- [29] Bridgman P.W., *Studies in large plastic flow and fracture with special emphasis on the effects of hydrostatic pressure*, Harvard Univ. Press, Cambridge, 1964.
- [30] Broek D., Some contributions of electron fractography to the theory of fracture, *Int. Metallurg. Rev.*, **19**, 135-182, 1974.
- [31] Bronkhorst C.A., Kalidindi S.T., Anand L., Polycrystalline plasticity and the evolution of crystallographic texture in FCC metals, *Phil. Trans. R. Soc. London*, **A341**, 443-477, 1992.
- [32] Brown L.M. and Stobbs W.M., The work hardening of copper-silica. II. The role of plastic relaxation, *Philos. Mag.*, **23**, p.1201, 1971.
- [33] Brown L.M., Embury J.D., The initiation and growth of voids at second-phase particles, In: *Proc. of the Third Conference on Strength of Metals and Alloys*, London: Institute of Metals, pp. 164-169, 1973.
- [34] Broyden C.G., The convergence of a class of double rank minimization algorithms. Part I and II., *J. Inst. Maths. Appl.*, **6**, pp. 222-231, 1970.
- [35] Brüning M., Numerical analysis and modeling of large deformation and necking behavior of tensile specimens, *Finite Elements in Analysis and Design*, **28**, 303-319, 1998.

- [36] Budiansky B., Hutchinson J.W., Slutsky S., Void growth and collapse in viscous solids, In: Hopkins, H.G., Sewell, M.J. (Eds.), *Mechanics of Solids*, The Rodney Hill 60th Anniversary Volume. Pergamon Press, pp. 13-45, 1982.
- [37] Carroll M.M. and Holt A.C., Static and dynamic pore-collapse relations for ductile solids, *J. Appl. Phys.*, **43**, pp. 1626-1636, 1972.
- [38] Chan, K.S., Bodner, S.R., Lindholm, U.S., Phenomenological modelling of hardening and thermal recovery in metals, *J. Eng. Mat. Tech.*, **110**, p.18, 1988.
- [39] Chang Y.W. and Asaro R.J., An experimental study of shear localization in aluminum-copper single crystals, *Acta Metall.*, **29**, 241-257, 1981.
- [40] Chappelle O., Vapnik V., Bengio Y., Model selection for small sample regression, *Machine Learning*, **48** (1-3), 9-23, 2002.
- [41] Chen W.H., Necking of a bar, *Int. J. Solids Struct.*, **7**, 685-717, 1971.
- [42] Cho K., Chi Y.C. and Duffy J., Microscopic observations of adiabatic shear bands in three different steels, *Brown University Report*, 1988.
- [43] Chu C.C. and Needleman A., Void nucleation effects in biaxially stretched sheets, *Trans. ASME, J. Eng. Mat. Tech.*, **102**, pp. 249-256, 1980.
- [44] Cialone H. and Asaro R. J., The role of hydrogen in the ductile fracture of plain carbon steels, *Metall. Trans.*, **10A**, pp. 367-375, 1979.
- [45] Clarke K.A., Testing nonnested models of international relations: reevaluating realism, *American Journal of Political Science*, **45**, 1-62, 2001.
- [46] Clifton R.J., Duffy J., Hartley K.A., Shawki T.G., On critical conditions for shear band formation at high strain rates, *Scripta Metalurgica*, **18**, 443-448, 1984.
- [47] Clifton R.J., Response of materials under dynamic loading, *Int. J. Solids and Structures*, **37**, 105-113, 2000.
- [48] Costin L.S., Crisman E.E., Hawley R.H. and Duffy J., On the localization of plastic flow in mild steel tubes under dynamic torsional loading, In: *Mechanical Properties at High Rates of Strain*, (ed. Harding J.), pp. 90-100, Inst. Phys. Conf. Ser. No. 47, 1979.

- [49] Crussard C., Plateau J., Tamhanker R., Henry G., Lajeunesse D., In: *Fracture*, Int. Conf. Atomic Mechanisms Fracture, Mass., John Wiley, New York, p.524, 1959.
- [50] Curran D.R., Seaman L. and Shockey D.A., Dynamic failure of solids, *Physics Today*, January 1977, 46–55, 1977.
- [51] Curran D.R., Seaman L. and Shockey D.A., Dynamic failure of solids, *Physics Reports*, **147**, 253–388, 1987.
- [52] Davidon W.C., Variance algorithms for minimization, *Computer J.*, **10**, pp.406-410, 1968.
- [53] Dornowski W., *Numeryczna symulacja procesów plastycznego płynięcia przy dynamicznych obciążeniach cyklicznych*, Warszawa, WAT wewn. **2598/99**, 1999.
- [54] Dornowski W., Influence of finite deformations on the growth mechanism of microvoids contained in structural metals, *Archives of Mechanics*, **51** (1), 71–86, 1999.
- [55] Dornowski W. and Perzyna P., Localization phenomena in thermo-viscoplastic flow processes under cyclic dynamic loadings, *Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences*, **7**, 117–160, 2000.
- [56] Dornowski W., Perzyna P., Analysis of various effects in dynamic cyclic fatigue damage, *Archive of Applied Mechanics*, **72** (6-7), pp.418-438, 2002.
- [57] Dornowski W., Perzyna P., Localized fracture phenomena in thermo-visco-plastic flow processes under cyclic loading, *Acta Mechanica*, **155**, 233–255, 2002.
- [58] Dornowski W. and Perzyna P., Analysis of the influence of various effects on cycle fatigue damage in dynamic processes, *Arch. Applied Mechanics*, **72**, 418–438, 2002.
- [59] Duffy J., Campbell J.D., Hawley R.H., On the use of a torsional split Hopkinson bar to study rate effects in 1100-0 Aluminium, *ASME Journal of Applied Mechanics*, **38**, 83–91, 1971.

- [60] Duszek-Perzyna M.K. and Perzyna P., Analysis of the influence of different effects on criteria for adiabatic shear band localization in inelastic solids, *Material Instabilities: Theory and Applications* AMD–Vol. 183/MD–Vol.50, ASME, pp.59–85, 1994.
- [61] Eadie W.T., Drijard D., James F.E., Ross M. and Sadoulet B., *Metody statystyczne w fizyce doświadczalnej*, Warszawa, PWN, 1989.
- [62] Edmonds D.V. and Beevers C.J., The effect of inclusions on the stress distribution in solids, *J. Materials Sci.*, **3**, 457-463, 1968.
- [63] Eftis J., Constitutive modelling of spall fracture, in: High-Pressure Shock Compression of Solids, II. Dynamic Fracture and Fragmentation, (Eds. L. Davison, D.E. Grady and M. Shahinpoor), Springer-Verlag, New York, 399–451, 1996.
- [64] Eisenberg M.A., Yen C.F., An anisotropic generalization of the Bridgman analysis of tensile necking, *Trans. ASME, J. Eng. Mater. Tech.*, **105**, 264-267, 1983.
- [65] Eisenberg M.A., Anisotropic tensile necking, *Int. J. of Plasticity*, **1**, 29-38, 1985.
- [66] Eshelby J.D., The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems, *Proc. Roy. Soc. London*, **A241**, pp.376-396, 1957.
- [67] Findeisen W., Szymanowski J., Wierzbicki A., *Theoria i metody obliczeniowe optymalizacji*, PWN, Warszawa, Wyd.2, 1980.
- [68] Fisher J. R., *Void nucleation in spheroidized steels during tensile deformation*, Ph.D. Thesis, Brown University, 1980.
- [69] Fisher J. R. and Gurland J., Void nucleation in spheroidized carbon steels, Part 1: Experimental, *Metal Science*, **15**, No5, pp. 185-192, 1981.
- [70] Fisher J. R. and Gurland J., Void nucleation in spheroidized carbon steels, Part 2: Model, *Metal Science*, **15**, No5, pp. 193-202, 1981.
- [71] Fletcher R. and Powell M.J.D., A rapidly convergent descent method for minimization, *Computer J.*, **6**, pp.163-168, 1963.

- [72] Fletcher R., A new approach to variable metric algorithms, *Computer J.*, **13**, pp.317-322, 1970.
- [73] Fletcher R., *Practical Methods of Optimization, second edition* John Wiley & Sons, Chichester, 1987.
- [74] Gangulee A., Gurland J., On the fracture of silicon particles in aluminum-silicon alloys, *Trans. of Metall. Soc. of the A.I.M.E.*, **239**, pp.269-272, 1967.
- [75] Gardner R.N, Pollock T.C. and Wilsdorf H.G.F., Crack initiation at dislocation cell boundaries in the ductile fracture of metals, *Materials Science and Engineering*, **29**, pp.169-174, 1977.
- [76] Ghosh S., Lee K. and Raghavan P., A multi-level computational model for multi-scale damage analysis in composite and porous materials, *Int. J. Solids and Structures*, **38** (14), pp.2335-2385, 2001.
- [77] Giovanola J.H., Adiabatic shear banding under pure shear loading, Part I: Direct observation of strain localization and energy dissipation measurements, *Mechanics of Materials*, **7**, 59–71, 1988.
- [78] Giovanola J.H., Adiabatic shear banding under pure shear loading, Part II: Fractographic and metallographic observations, *Mechanics and Materials*, **7**, 73-87, 1988.
- [79] Glema A., Kąkol W., Łodygowski T., Numerical modelling of adiabatic shear band formation in a twisting test, *Engineering Transactions*, **45**(3-4), 419–43, 1997.
- [80] Golden R.M., Making correct statistical inferences using a wrong probability model, *The Journal of Mathematical Psychology*, **38**, pp. 3-20, 1995.
- [81] Goldfarb D., A family of variable metric methods derived by variational means, *Maths. Comp.*, **24**, pp.23-26, 1970.
- [82] Goods S.H. and Brown L.M., The nucleation of cavities by plastic deformation, *Acta Metall.*, **27**, pp. 1-15, 1979.
- [83] Granger C.W.J., King M.L., White H., Comments on testing economic theories and the use of model selection criteria, *Journal of Econometrics*, **67**, 173-187, 1995.

- [84] Gurland J. and Plateau J., The mechanism of ductile rupture of metals containing inclusions, *Transactions of the A.S.M.*, **56**, pp.443-454, 1963.
- [85] Gurland J., Observations on the fracture of cementite particles in spheroidized 1.05%C steel deformed at room temperature, *Acta Metall.*, **20**, 735-741, 1972.
- [86] Gurson A.L., *Plastic flow and fracture behaviour of ductile materials incorporating void nucleation, growth and interaction*, Ph.D Thesis, Brown University, 1975.
- [87] Gurson A.L., Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth. Part 1. Yield criteria and flow rules for porous ductile media, *J. Engng. Materials and Technology, Trans. of the ASME*, **99**, 2-15, 1977.
- [88] Hampel F.R., Ronchetti E.M., Rousseeuw P.J. and Stahel W.A., *Robust statistics*, Wiley, New York, 1986.
- [89] Hancock J.W., Mackenzie A.C., On the mechanisms of ductile failure in high-strength steels subjected to multi-axial stress states, *J. Mech. Phys. Solids*, **24**, 147-169, 1976.
- [90] Harth T., Schwan S., Lehn J., Kollmann F.G., Identification of material parameters for inelastic constitutive models: statistical analysis and design of experiments, *Int. Journal of Plasticity*, **20**, pp. 1403–1440, 2004.
- [91] Hartley K.A., Duffy J. and Hawley R.H., Measurement of the temperature profile during shear band formulation in steels deforming at high strain rates, *J. Mech. Phys. Solids*, **35**, 283-301, 1987.
- [92] Hill R., *The mathematical theory of plasticity*, Oxford University Press, London p.272, 1950.
- [93] Hill R., A general theory of uniqueness and stability in elastic-plastic solids, *J. Mech. Phys. Solids*, **6**, 236–249, 1958.
- [94] Holnicki P., Nahorski Z. and Zochowski A., *Modelowanie procesów środowiska naturalnego*, Wyższa Szkoła Informatyki Stosowanej i Zarządzania, Warszawa, 2000.
- [95] Hooke R. and Jeeves T.A., Direct search solution of numerical and statistical problems, *J. Assoc. Comp. Mach.*, **8**, pp. 212-229, 1961.

- [96] Huang W.C., Theoretical study of stress concentrations at circular holes and inclusions in strain hardening materials (Stress concentrations at circular holes and inclusions in elasto-plastic strain hardening plate under tension and shear), *I. J. Solids and Structure*, **8**, p.149, 1972.
- [97] Huang Y., Accurate dilatation rates for spherical voids in triaxial fields, *J. Appl. Mech*, **58**, pp. 1084-1086, 1991.
- [98] Huber P.J., Robust methods of estimation of regression coefficients, *Math. Operationsforsch. Stat., Ser., Stat.*, **8**, 141-153, 1977.
- [99] Huber P.J., *Robust statistics*, Wiley, New York, 1981.
- [100] Hutchinson J.W., Plasticity at the micron scale, *Int. J. Solids and Structures*, **37**, 225-238, 2000.
- [101] Johnson J.N., Dynamic fracture and spallation in ductile solids. *J. Appl. Phys.*, **52**, 2812-2825, 1981.
- [102] Kachanov L.M., On creep rupture time, *Izviestnaja Akademia Nauk SSSR, Otdeleniya Tekhnicheskich I Nauk*, **8**, pp. 26-31, 1958
- [103] Kachanov L.M., Time of the fracture process under creep conditions, *Izv. Akademii Nauk SSSR*, **8**, 26, (1958) [in Russian], Theory of creep (1960)(English Translation National Lending Library for Science and Technology), 1967.
- [104] Kalidindi S.R., Bronkhorst C.A., Anand L., Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals, *J. Mech. Phys. Solids*, **40**, 537-569, 1992.
- [105] Kikuchi M., Shiozawa K., Weertman J.R., Void nucleation in astroloy: theory and experiments, *Acta Metall.*, **29**, pp.1747-1758, 1981.
- [106] Kleiber M., *Komputerowe Metody Mechaniki Ciężła Statega*, Mechanika Techniczna, t. XI, Kleiber M. (ed.), WN PWN, Warszawa, 1995.
- [107] Koplik J. and Needleman A., Void growth and coalescence in porous plastic solids, *Int. J. Solids Structure*, **24**, 835-853, 1988.
- [108] Korbel A., Bochniak W., The structural based design of metal forming operations, *J. Matl. Process. Technol.*, **53**, 229-236, 1995.

- [109] Kotulski Z., Szczepiński W., *Rachunek błędów dla inżynierów*, WNT, Warszawa, 2004.
- [110] Kowalczyk-Gajewska K. , Gambin W., Pęcherski R.B., Ostrowska-Maciejewska J., Modelling of crystallographic texture development in metals accounting for micro-shear bands, *Arch. of Metallurgy and Materials*, **50**, 575-593, 2005.
- [111] Kowalski B., Sellars C.M., Pietrzyk M., Identification of rheological parameters on the basis of plane strain compression tests on specimens of various initial dimensions, *Computational Materials Science*, **35** (2), 92-97, 2006.
- [112] Kuester J.L., Mize J.E., *Optimization techniques with Fortran*, McGraw-Hill, Chapter 9, 1973.
- [113] Kusiak J., Kawalla R., Pietrzyk M., Pircher H., Inverse analysis applied to the evaluation of material parameters in the history dependent flow stress equation in hot forming of metals, *J. Materials Processing Technology*, **60**, 455-461, 1996.
- [114] Kwon D. and Asaro R.J., A study of void nucleation, growth, and coalescence in spheroidized 1518 steel, *Metall. Trans.*, **21A**, pp.117-134, 1990.
- [115] Lee E.H., Elastic-plastic deformations at finite strains, *Journal of Applied Mechanics*, **35**, 1-6, 1969.
- [116] Lehmann, E.L., *Teoria estymacji punktowej*, Warszawa, PWN, 1991.
- [117] LeRoy G., Embury J.D., Edward G. and Ashby M.F., A model of ductile fracture based on the nucleation and growth of voids, *Acta Metall.*, **29**, 1509-1522, 1981.
- [118] Lindley T.C., Oates G., Richards C.E., A critical appraisal of carbide cracking mechanisms in ferrite/carbide aggregates, *Acta Metall.*, **18**, pp.1127-1136, 1970.
- [119] Litoński J., Plastic flow of a tube under adiabatic torsion, *Bull. de l' Acad. Polonaise des Sciences*, **25**, 7-17, 1977.

- [120] Loret B., Prevost J.H., Dynamic strain localization in elasto-viscoplastic solids, Part I: General formulation and one-dimensional examples, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **83**, 247–273, 1990.
- [121] Łodygowski T. and Perzyna P., Localized fracture in inelastic polycrystalline solids under dynamic loading processes, *Int. J. Damage Mechanics*, **6**, 364-407, 1996.
- [122] Łodygowski T. and Perzyna P., Numerical modelling of localized fracture of inelastic solids in dynamic loading processes, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **40**, 4137-4158, 1997.
- [123] Łodygowski T., *Theoretical and numerical aspects of plastic strain localization*, Poznan, Wydawnictwo Politechniki Poznanskiej, 1996.
- [124] Łodygowski T., Lengnick M., Perzyna P., Stein E., Viscoplastic numerical analysis of dynamic plastic strain localization for a ductile material, *Archives of Mechanics*, **46**, 1–25, 1994.
- [125] Łodygowski T., On avoiding of spurious mesh sensitivity in numerical analysis of plastic strain localization, *Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences*, **2**, 231–248, 1995.
- [126] Łodygowski T., Perzyna P., Localized fracture in inelastic polycrystalline solids under dynamic loading processes, *I. J. Damage Mechanics*, **6**, 364–407, 1997.
- [127] Łodygowski T., Perzyna P., Numerical modelling of localized fracture of inelastic solids in dynamic loading processes, *I. J. Numerical Methods in Engineering*, **40**, 4137–4158, 1997.
- [128] Mahnken R., Stein E., Parameter identification for viscoplastic models based on analytical derivatives of a least-squares functional and stability investigations, *Int. J. Plasticity*, **12**(4), pp.451-479, 1996.
- [129] Malek-Madani R., Raouf R.A., Stability analysis of thermo-visco-plastic materials undergoing high-rate shear deformations, *Quarterly of Applied Mathematics*, **17**, 213–227, 1999.
- [130] Marchand A. and Duffy J., An experimental study of the formation process of adiabatic shear bands in a structural steel, *J. Mech. Phys. Solids*, **36**, 251-283, 1988.

- [131] Marchand A., Cho K. and Duffy J., The formation of adiabatic shear bands in an AISI 1018 cold-rolled steel, *Brown University Report*, 1988.
- [132] Mason J.J., Rosakis A.J. and Ravichandran R., On the strain and strain rate dependence of the fraction of plastic work converted to heat: an experimental study using high speed infrared detectors and the Kolsky bar, *Mechanics of Materials*, **17**, 135–145, 1994.
- [133] McAleer M., The significance of testing empirical non-nested models, *Journal of Econometrics*, **67**, 149-171, 1995.
- [134] McClintock F.A., A criterion for ductile fracture by the growth of holes, *Trans. ASME, Journal of Applied Mechanics* **35**, 363-371, 1968.
- [135] McClintock F.A., Plasticity aspects of fracture, in: *Fracture: An advanced treatise*, ed. Liebowitz H., Academic Press, New York, tom 3, pp.47-225, 1971.
- [136] Meyers M.A. and Aimone C.T., Dynamic fracture (spalling) of metals, *Prog. Mater. Sci.*, **28**, 1–96, 1983.
- [137] Mugglestone M.A., Barnett V., Nirel R. and Murray D.A., Modelling and analysing outliers in spatial lattice data, *Math. and computer Modelling*, **32**, pp.1-10, 2000.
- [138] Needleman A., Void growth in an elastic-plastic medium, *Trans. ASME, J. Appl. Mech.*, **94**, pp. 964-970, 1972.
- [139] Needleman A., A numerical study of necking in circular cylindrical bars, *J. Mech. Phys. Solids*, **20**, 111-127, 1972.
- [140] Needleman A., Material rate dependence and mesh sensitivity in localization problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **67**, 69–85, 1988.
- [141] Needleman A., Dynamic shear band development in plane strain, *Trans. ASME, Journal of Applied Mechanics* **56**, 1–9, 1989.
- [142] Needleman A., Computational mechanics at the mesoscale, *Acta Materialia*, **48**, 105-124, 2000.
- [143] Needleman A., Ortiz M., Effects of boundaries and interfaces on shear band localization, *I. J. Solids and Structures*, **28**, 859–877, 1991.

- [144] Needleman A., Rice J.R., Limits to ductility set by plastic flow localization, In: *Mechanics of Sheet Metal Forming*, eds. D.P. Koistinen, N.M. Wang, Plenum Publishing Co., New York, pp. 237-265, 1978.
- [145] Needleman A. and Tvergaard V., An analysis of ductile rupture in notched bars, *J. Mech. Phys. Solids*, **32**, pp. 461-490, 1984.
- [146] Nelles O., *Nonlinear system identification. From classical approaches to neural networks and fuzzy models*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2001.
- [147] Nemat-Nasser S. and M. Taya, Model studies of ductile fracture, *Fracture 1977*, Proc. 4th Inter. Conference on Fracture, ed. Taplin D.M.R., Vol.1, pp. 387-405, 1977.
- [148] Nemes J.A. and Eftis J., Constitutive modelling on the dynamic fracture of smooth tensile bars, *Int. J. Plasticity*, **9**, 243-270, 1993.
- [149] Nemes J.A., Eftis J., Randles P.W., Viscoplastic constitutive modelling of high strain-rate deformation, material damage and spall fracture, *ASME Journal of Applied Mechanics*, **57**, 282-291, 1990.
- [150] Nilsson K., Effects of elastic unloading on multiple necking in tensile bars, *Int. Journal of Impact Engineering*, **30**, 1353-1367, 2004.
- [151] Nilsson K., Effects of inertia on dynamic neck formation in tensile bars, *Eur. J. Mech. A Solids*, **20**, 713-729, 2001.
- [152] Norris D.M., Jr., Moran B., Scudder J.K., Quinones D.F., A computer simulation of the tension test, *J. Mech. Phys. Solids*, **26**, 1-19, 1978.
- [153] Nowacki W.K., *Fale naprężenia w ciałach plastycznych*, Poznań, Wydawnictwo Politechniki Poznańskiej, 1974.
- [154] Nowacki W.K., *Zagadnienia falowe w teorii plastyczności*, Warszawa, PWN, 1974.
- [155] Nowak Z., Perzyna P., Pęcherski R.B., Identification of viscoplasticity model accounting for micro-shear bands, w przygotowaniu do publikacji, 2006.
- [156] Nowak Z., Pęcherski R.B., Plastic strain in metals by shear banding. II. Numerical identification and verification of plastic flow law, *Arch. Mech.*, **54**, 621-634, 2002.

- [157] Nowak Z., Stachurski A., Nonlinear regression problem of material functions identification for porous media plastic flow, *Engng. Trans.*, **49**, 637-661, 2001.
- [158] Nowak Z., Stachurski A., Global optimization in material functions identification for voided media plastic flow, *Comp. Assisted Mech. Engr. Sci.*, **9**, 205-221, 2002.
- [159] Nowak Z., Stachurski A., Modelling and identification of voids nucleation and growth effects in porous media plastic flow, *Control and Cybernetics*, **32**, 819-849, 2003.
- [160] Nowak Z., Stachurski A., Robust identification of an augmented Gurson model for elasto-plastic porous media, *Archive of Mechanics*, **58** (2), 125-154, 2006.
- [161] Ohno N., Hutchinson J.W., Plastic flow localization due to non-uniform void distribution, *J. Mech. Phys. Solids*, **32** (1), pp. 63-85, 1984.
- [162] Ohser J and Mücklich F., *Statistical analysis of microstructures in material science*, John Wiley and Sons, Chichester, England, 2000.
- [163] Olejnik L., Plastic dilatation in void containing mild steel and its influence on material behaviour, *Arch. Hut.*, **31**, 185, 1986.
- [164] Palmer A. and Mellor P.B., Growth of voids in biaxial stress fields, *Int. J. Mech. Sci.*, **22**, pp. 133-150, 1980.
- [165] Pardoën T. and Delannay F., Assessment of void growth models from porosity measurements in cold-drawn copper bars, *Metallurgical and Materials Transactions*, **29A**, 1895-1909, 1998.
- [166] Pardoën T., Dumont D., Deschamps A., Brechet Y., Grain boundary versus transgranular ductile failure, *J. Mech. Physics of Solids*, **51**, pp. 637-665, 2003.
- [167] Perra M, Finnie I., Void growth and localization of shear in plane strain tension, *Fracture 1977*, Proc. 4th Inter. Conference on Fracture, ed. Taplin D.M.R., Vol.2, p.415, 1977.
- [168] Peracchi F., *Econometrics*, J. Wiley LTD, 2001.

- [169] Perzyna P., Thermodynamic theory of viscoplasticity, *Advances in Applied Mechanics*, **11**, 313–354, 1971.
- [170] Perzyna P., *Termodynamika materiałów niesprężystych*, PWN 1978.
- [171] Perzyna P., Stability of flow processes for dissipative solids with internal imperfections, *ZAMP*, **35**, pp. 848-867, 1984.
- [172] Perzyna P., Constitutive modelling of dissipative solids for postcritical behaviour and fracture, *ASME J. Eng. Materials and Technology*, **106**, 410-419, 1984.
- [173] Perzyna P., Internal state variable description of dynamic fracture of ductile solids, *Int. J. Solids Structures*, **22**, pp. 797-818, 1986.
- [174] Perzyna P., Constitutive modelling for brittle dynamic fracture in dissipative solids, *Arch. Mechanics*, **38**, pp. 725–738, 1986.
- [175] Perzyna P., Influence of anisotropic effects on micro-damage process in dissipative solids, In: *Proc. IUTAM/ICM Symposium on Yielding, Damage and Failure of Anisotropic Solids*, Villerd-de-Lance, Mech. Eng. Publ. Ltd., London, pp. 483-507, 1990.
- [176] Perzyna P., Instability phenomena and adiabatic shear band localization in thermoplastic flow processes, *Acta Mechanica*, **106**, 173–205, 1994.
- [177] Perzyna P., Adiabatic shear band localization fracture of solids in dynamic loading processes, w: *International Conference on Mechanical and Physical Behaviour of Materials under Dynamic Loading* red. Harding J., Oxford, September 26–30, 441–446, 1994.
- [178] Perzyna P., Interactions of elastic-viscoplastic waves and localization phenomena in solids, In: *Nonlinear Waves in Solids*, Proc. IUTAM Sympo. Nonlinear Waves in Solids, August 15-20 1993, Victoria, Canada, (eds. Wegner L.J. and Norwood F.R.), ASME Book No AMR 137, pp. 114–121, 1995.
- [179] Perzyna P., Dynamic localized fracture in inelastic solids, w: *Damage mechanics in engineering materials*, red. G.Z.Voyadjis, Elsevier Science, Amsterdam, 1998.

- [180] Perzyna P. and Drabik A., Description of micro-damage process by porosity parameter for nonlinear viscoplasticity, *Arch. Mechanics*, **41**, 895–908, 1989.
- [181] Perzyna P. and Drabik A., Micro-damage mechanism in adiabatic processes, *Engineering Transactions*, (in print), 2006.
- [182] Perzyna P. and Nowak Z., Równanie ewolucji pustek w obszarze szyjki, *Prace IPPT*, **24**/1985.
- [183] Perzyna P., Nowak Z., Evolution equation for the void fraction parameter in necking region, *Arch. Mech.*, **39**, No. 1-2, 73-84, 1987.
- [184] Perzyna P. and Z. Nowak, Determination of material functions in a model of dynamic fragmentation processes, *ZAMM*, **71**, 4, pp.378-382, 1991.
- [185] Perzyna P., Wierzbicki T., Temperature dependent and strain rate sensitive plastic materials, *Archive of Mechanics*, **1**, 136–143, 1964.
- [186] Perzyna P., Wojno W., Unified constitutive equations for elastic-viscoplastic material, *Bull. Acad. Polonaise Scien., Ser. Scien. Tech.*, **24**, 85-94, 1976.
- [187] Petryk H., Material instability and incrementally nonlinear plasticity, w: *Material instabilities in elastic and plastic solids*, red. H. Petryk, CISM Courses and Lectures No. 414, Wien, Springer, 2000.
- [188] Pęcherski R.B., A model of plastic flow within an account of micro-shear banding, *ZAMM*, **72**, T246-T250, 1992.
- [189] Pęcherski R.B., Modelling of large plastic deformations based on the mechanism of micro-shear banding. Physical foundations and theoretical description in plane strain, *Arch. Mech.*, **44**, 563-584, 1992.
- [190] Pęcherski R.B., Finite deformation plasticity with strain induced anisotropy and shear banding, *J. Mat. Processing Technology*, **60**, 35–44, 1996.
- [191] Pęcherski R.B., Macroscopic measure of the rate of deformation produced by micro-shear banding, *Arch. Mech.*, **49**, 385–401, 1997.

- [192] Pęczerski R.B., Continuum mechanics description of plastic flow produced by micro-shear bands, *Technische Mechanik*, **18**, 107-115, 1998.
- [193] Pęczerski R.B., Opis deformacji plastycznej metali z efektami mikropasm ocinania, *Prace IPPT*, **2/1998** – praca habilitacyjna, 1998.
- [194] Pęczerski R.B., Korbel K., Plastic strain in metals by shear banding. I. Constitutive description for simulation of metal shaping operations, *Arch. Mech.*, **54**, 5-6, 603-620, 2002.
- [195] Pęczerski R.B., Nalepka K., Nowak Z., Próba modelowania mechanicznych własności nanometali, *Inżynieria Materiałowa*, Nr **4**, 170-174, 2005.
- [196] Pęczerski R.B., Nowak Z., Numerical analysis of metal forming operations accounting for micro-shear banding, Proc. **32nd** Solid Mech. Conference, SolMec'98, Zakopane, Poland, September 1-5, 295-296, 1998.
- [197] Pęczerski R.B., Nowak Z., Korbel K., Plastyczność z efektami mikropasm ocinania. Zastosowanie numerycznej analizy próby kanalikowej do identyfikacji modelu, *Rudy Metale*, **R45**, 238-244, 2000.
- [198] Pęczerski R. B., Nowak Z., Korbel K., Numeryczna identyfikacja modelu plastyczności z efektami mikropasm ocinania, *Materiały 7-ej Konferencji KomPlas Tech 2000*, Krynica-Czarny Potok, 16-19 stycznia 2000 (ed. Pietrzyk M.), 2000.
- [199] Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P., *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, Cambridge, 1993.
- [200] Prevost J.H., Loret B., Dynamic strain localization in elasto-viscoplastic solids, II. Plane strain examples, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **83**, 274-294, 1990.
- [201] Puttick K.E., Ductile fracture in metals, *Phil. Mag.*, **4**, p. 964, 1959.
- [202] Ragab A.R., A model for ductile fracture based on internal necking of spheroidal voids, *Acta Materialia*, **52**, pp. 3997-4009, 2004.
- [203] Rice J.R., Tracey D.M., On the ductile enlargement of voids in triaxial stress fields, *J. Mech. Phys. Solids*, **17**, 201-217, 1969.

- [204] Rice J.R., Inelastic constitutive relations for solids: an internal-variable theory and its application to metal plasticity, *J. Mech. Phys. Solids*, **19**, 433–455, 1971.
- [205] Rice J.R., The localization of plastic deformation, w: *Theoretical and applied mechanics*, red. W.T. Koiter, North-Holand, 207–220, 1976.
- [206] Ritchie R.O., Knott J.F. and Rice J.R., On the relationship between critical tensile stress and fracture toughness in mild steel, *J. Mech. Phys. Solids*, **21**, 395-410, 1973.
- [207] Rogers H.C., The tensile fracture of ductile metals, *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, **218**, pp.498-506, 1960.
- [208] Rosochowski A., *Shear band localization in ductile porous materials* in: *Proc. of International Sympo. on Plastic Instability, Considere Memorial(1841-1914)*, Paris, 9-13 September 1985, pp. 135-146, Ecole Nationale des Ponts et Chaussees, 1985
- [209] Rosochowski A. and Olejnik L., Damage evolution in mild steel, *Int. J. Mech. Sci.*, **30**, pp.51-60, 1988.
- [210] Rudnicki J.W. and Rice J.R., Conditions for the localization of deformation in pressure-sensitive dilatant materials, *J. Mech. Phys. Solids*, **23**, pp.371-394, 1975.
- [211] Russ J.C., *Computer-assisted microscopy: the measurement and analysis of images*, Wyd. 2, Plenum Press, New York, 1991.
- [212] Russ J.C., Dehoff R.T., *Practical stereology*, Wyd. 2, Kluwer, New York, 2000.
- [213] Saje M., Necking of a cylindrical bar in tension, *Int. J. Solids Struct.*, **15**, 731-742, 1979.
- [214] Saje M., Pan J. and Needleman A., Void nucleation effects on shear localization in porous plastic solids, *Int. J. Fracture*, **19**, pp. 163-182, 1982.
- [215] Seber G.A.F. and Wild C.J., *Nonlinear Regression*, John Wiley and Sons, Inc., 1989.

- [216] Seibert T., Lehn J., Schwan S., Kollmann F.G., Identification of material parameters for inelastic constitutive models stochastic simulations for the analysis of deviations, *Continuum Mechanics and Thermodynamics* **12**, 95-120, 2000.
- [217] Shanno D.F, Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization, *Maths. Comp.*, **24**, pp. 647-656, 1970.
- [218] Shenoy V.B., Freund L.B., Necking bifurcations during high strain rate extension, *J. Mech. Phys. Solids*, **47**, 2209-2233, 1999.
- [219] Shibata M. and Ono K., Internal stresses due to an oblate spheroidal inclusion: Misfit, Inhomogeneity and Plastic Deformation Effects, *Acta Metall.*, **26** (6), p.921-932, 1978.
- [220] Shima S. and Oyane M., Plasticity for porous solids, *Int. J. Mech. Sci.* **18**, 285-291, 1976.
- [221] Simo J.C. and Hughes T.J.R., *Computational Inelasticity*, Springer, New York, 1998.
- [222] Sluys L.J., *Wave propagation, localization and dispersion in softening solids*, Doctoral Thesis, Delft, Delft University Press, 1992.
- [223] Sluys L.J., Bolck J. and de Borst R., Wave propagation and localization in viscoplastic media, *Proc. Third Inter. Conference on Computational Plasticity, Fundamentals and Applications* Barcelona, April 6-10, 1992, (eds. Owen D.R.J., Onate E. and E.Hinton), Pineridge Press, Swansea, pp. 539-550, 1992.
- [224] Sobczyk K., O identyfikacji układów, *Prace IPPT*, **26**/1986, 1986.
- [225] Sobczyk K. i Spencer B.F., Jr., *Stochastyczne modele zmęczenia materiałów*, WNT, Warszawa, 1996.
- [226] Söderström T. and Stoica P., *System identification*, Prentice Hall, International University Press, Cambridge, 1989.
- [227] Speich G.R., Spitzig W.A., Effect of volume fraction and shape of sulfide inclusions on through-thickness ductility and impact energy of high-strength 4340 plate steels, *Metall. Trans. A*, **13**, pp. 2239-2257, 1982.

- [228] Springmann M., Kuna M., Identification of material parameters of the Rousselier model by non-linear optimization, *Computational Materials Science*, **26**, 202–209, 2003.
- [229] Stachurski A., Wierzbicki A.P., *Podstawy Optymalizacji*, Wyd. 2, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warsaw, 2001.
- [230] Steglich D., Brocks W., Micromechanical modelling of the behaviour of ductile materials including particles, *Comput. Mater. Sci.*, **9**, pp.7-17, 1997.
- [231] Stoica P., Selén Y., Li J., Multi-model approach to model selection, *Digital Signal Processing*, **14** (5), 399-412, 2004.
- [232] Szeliga D., Matuszyk P., Kuziak R., Pietrzyk M., Identification of rheological parameters on the basis of various types of plastometric tests, *J. Materials Processing Technology*, **125-126**, 150-154, 2002.
- [233] Szyndler D., Pietrzyk M., Lenard J.G. and Fyke S.H., Inverse analysis applied to the evaluation of friction and rheological parameters in hot forming of steels, *Metal forming 2000*, Pietrzyk M. et al. (eds), 2000 Balkema, Rotterdam, 101-106, 2000.
- [234] Szyndler D., Problem odwrotny w zastosowaniu do identyfikacji parametrów procesów plastycznej przeróbki metali, Praca doktorska, AGH Wydz. Metalurgii i Inżynierii Materiałowej, Kraków, 2001.
- [235] Törn A., Žilinskas A., *Global Optimization. Lecture notes in computer science 350*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1989.
- [236] Taylor J.R., *Wstęp do analizy błędu pomiarowego*, Wyd. 2, Warszawa, PWN, 1999.
- [237] Taylor G.I. and Quinney H., The latent energy remaining in a metal after cold working, *Proc. R. Soc. Lond.*, **A143**, 307–326, 1934.
- [238] Thomason P.F., Three-dimensional models for the plastic limit-loads at incipient failure of the intervoid matrix in ductile porous solids, *Acta Metall.*, **33**, 1079-1085, 1985.
- [239] Toya M., A crack along the interface of a circular inclusion embedded in an infinite solid, *J. Mech. Phys. Solids*, **22**, 325-348, 1974.

- [240] Tracey D.M., Strain-hardening and interaction effects on the growth of voids in ductile fracture, *Engr. Fracture Mechanics*, **3**, pp. 301-315, 1971.
- [241] Tvergaard V., Influence of void nucleation on ductile shear fracture at a free surface, *J. Mech. Phys. Solids*, **30**, 399-425, 1982.
- [242] Tvergaard V., Material failure by void coalescence in localized shear bands, *Int. J. Solids Structures*, **18**, pp. 659-672, 1982.
- [243] Tvergaard V. and Needleman A., Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar, *Acta Metall.*, **32**, pp. 157-169, 1984.
- [244] Valiente A., On Bridgman's stress solution for a tensile neck applied to axisymmetrical blunt notched tension bars, *Trans. ASME, J. App. Mechanics*, **68**, 412-419, 2001.
- [245] Vuong Q., Likelihood ratio tests for model selection and nonnested hypothesis, *Econometrica*, **57**, 307-333, 1989.
- [246] Wang W.M., Stationary and propagative instabilities in metals – a computational point of view, Doctoral Thesis, Delft, Delft University Press, 1997.
- [247] Wang W.M., Sluys L.J., Borst R. de, Interaction between material length scale and imperfection size for localization phenomena in viscoplastic media, *European Journal of Mechanics*, **15**, 447-464, 1996.
- [248] Yoffe E.H., Calculation of elastic strain; spherical particle in a cubic material, *Philos. Mag.*, **30**, 923-933, 1974.
- [249] Zbib H.M. and Jurban J.S., Dynamic shear banding: A three-dimensional analysis, *Int. J. Plasticity*, **8**, 619-641, 1992.