

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

ОБЪЕДИНЕННОГО ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 99.2.039.02  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «САМАРСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ» И ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУ-  
ДАРСТВЕННОГО АВТОНОМНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕ-  
ГО ОБРАЗОВАНИЯ «САМАРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АКАДЕМИКА С.П. КОРОЛЁВА» МИНИСТЕРСТВА НАУКИ  
И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ ПО ДИССЕРТАЦИИ НА  
СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА ТЕХНИЧЕСКИХ НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_  
решение объединенного диссертационного  
совета от 03.11.2023 г. протокол № 20

О присуждении Беловой Оксане Николаевне, гражданину Российской Феде-  
рации, ученой степени кандидата технических наук.

Диссертация «Приложения метода молекулярной динамики к задачам меха-  
ники разрушения и атомистически-континуальное описание процессов разруше-  
ния» по специальности 1.1.8. Механика деформируемого твердого тела принята к  
защите 06 июля 2023 г. (протокол заседания № 10) объединенным диссертацион-  
ным советом 99.2.039.02, созданным на базе федерального государственного бюд-  
жетного образовательного учреждения высшего образования «Самарский государ-  
ственный технический университет» Министерства науки и высшего образования  
Российской Федерации, 443100, Самара, ул. Молодогвардейская, 244, и федераль-  
ного государственного автономного образовательного учреждения высшего обра-  
зования «Самарский национальный исследовательский университет имени акаде-  
мика С.П. Королёва» Министерства науки и высшего образования Российской Фе-  
дерации, 443086, Самара, Московское шоссе, 34, приказ Минобрнауки Российской  
Федерации № 45/нк от 30.01.2017 г.

Соискатель Белова Оксана Николаевна, 6 августа 1994 года рождения, в 2018  
году окончила ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский универ-  
ситет имени академика С.П. Королева» (г. Самара) по направлению подготовки  
01.04.03 Механика и математическое моделирование. В период с 2018 по 2022 год  
обучалась в аспирантуре в ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследователь-  
ский университет имени академика С.П. Королева» по направлению 01.02.04 Ме-  
ханика деформируемого твердого тела. С 2020 по 2022 год работала лаборантом-  
исследователем, а с 2023 года – младшим научным сотрудником НИЧ-90 и асси-  
стентом кафедры математического моделирования в механике ФГАОУ «Самарский  
национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева».

Диссертация выполнена на кафедре математического моделирования в механике федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – д.ф.-м.н., доцент Степанова Лариса Валентиновна, ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева», кафедра «Математическое моделирование в механике», заведующий кафедрой.

**Официальные оппоненты:**

- Лычев Сергей Александрович, доктор физико-математических наук, доцент, федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук», ведущий научный сотрудник лаборатории механики технологических процессов;

- Туманов Андрей Владиславович, кандидат технических наук, федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук», ведущий научный сотрудник лаборатории механики деформирования и разрушения;

дали положительные отзывы на диссертацию.

**Ведущая организация** Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Пермский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук, г. Пермь, в своем положительном отзыве, утвержденным заместителем директора по научной работе, профессором РАН, чл.-корр. РАН, доктором физико-математических наук Плеховым Олегом Анатольевичем, подписанном заведующим лабораторией нелинейной механики деформируемого твердого тела Института механики сплошных сред Уральского отделения РАН, доктором физико-математических наук Келлером Ильей Эрнстовичем, указала, что в работе методом молекулярной динамики изучены зависимости угла распространения трещины и коэффициенты разложения поля напряжений вблизи вершины трещины в пластине в зависимости от параметра смешанности нагружения. Выполнено сравнение данных величин с результатами аналитического решения задачи для пластины с центральным разрезом и с конечно-элементным решением задачи для пластины с боковым надрезом. Выполнено численное исследование траектории распространения трещины из продольного, поперечного и наклонного разрезов в трубе под действием комбинированного нагружения осевой силой и внутренним давлением методом молекулярной динамики и расширенным методом конечных элементов, в результате чего установлено хорошее соответствие результатов. Практическая значимость исследования определяется тем, что результаты расчета распространения трещины в трубе с продольным, окружным и наклонным разрезами, нагруженной внутренним давлением и осевой растягивающей нагрузкой, имеют

практическое приложение для оценки траектории роста трещины в насосно-компрессорных трубах в нефтегазовой промышленности.

Отзыв содержит следующие критические замечания:

Не исследована реакция модели на элементарные возмущения в виде возникновения дефекта атомной решетки (вакансии, межузельного атома или атома замещения в решетке) либо разрыва межатомной связи: характерные времена, волны на радиальных распределениях компонент напряжений в зависимости от радиуса. Представление результатов распределений компонент напряжений по угловой координате были бы более информативными, если бы компоненты напряжений рассматривались в локальном базисе полярной системы координат с центром в вершине надреза либо разреза. Не обсуждены в необходимой мере гипотезы о механизмах зарождения трещин в кристаллах, проверка которых с помощью атомной модели представляла бы интерес. Из текста не ясно, какому значению параметра смешанности нагружения соответствуют результаты на рисунке 3.15.

Соискатель имеет 35 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 24 работы, в том числе 8 опубликованы в рецензируемых научных изданиях, из них 5 в научных журналах, входящих в перечень ВАК, 3 – в научных журналах, реферируемых международными базами научного цитирования Web of Science и Scopus, одна из которых опубликована в издании, имеющим квартиль Q1. Работа выполнялась в рамках проекта РФФИ № 20-31-90082 и проекта РНФ № 21-11-00346.

**Наиболее значительные научные работы по теме диссертации:**

1. Stepanova L.V., Belova O.N. Coefficients of the Williams power expansion of the near crack tip stress field in continuum linear elastic fracture mechanics at the nanoscale // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. – 2022. – V. 119. – 103298.
2. Stepanova L.V., Belova O.N. Stress intensity factors, T-stresses and higher order coefficients of the Williams series expansion and their evaluation through molecular dynamics simulations // Mechanics of Advanced Materials and Structures. – 2023. – V. 30. Issue 19. – P. 3862-3884.
3. Степанова Л.В., Белова О.Н. Идентификация коэффициентов интенсивности напряжений, T-напряжений и коэффициентов регулярных слагаемых высокого порядка в разложении Уильямса с помощью молекулярно-динамического моделирования // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2023. – № 2. С. 47–77.
4. Степанова Л.В., Бронников С.А., Белова О.Н. Оценка направления роста трещины в условиях смешанного нагружения (нормальный отрыв и поперечный сдвиг): обобщенные критерии классической механики разрушения и атомистическое моделирование смешанного нагружения (метод молекулярной динамики) // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2017. – Т. 4. – С. 189-213.

5. Белова О.Н. Определение механических свойств материала, моделируемого с помощью метода молекулярной динамики // Вестник Самарского университета. Естественнаучная серия. – 2021. – Т. 27. – № 4. – С.14-21.

**На диссертацию и автореферат поступили отзывы официальных оппонентов.**

В отзыве официального оппонента **Лычева С.А.** указаны следующие критические замечания:

Требуется обоснование выбранных моделей описания напряженно-деформированного состояния на атомистическом и континуальном уровнях и их согласования. Из текста не ясно, как следует распорядиться возможностями процедуры локализации, приведенные в диссертации, при вычислительном моделировании образцов из монокристаллов меди и алюминия, обсуждаемых далее. Вопросу согласования понятий макроскопической деформации и её аналога в атомистической системе уделено очень мало внимания (стр. 62), и, почему-то, в терминах пластин. Не описано, почему значение энергии, вычисленной алгоритмом МД при искажениях бокса, содержащего атомистическую систему, представляется многочленным шестой степени (стр. 71 и далее). Не описана процедура вычисления средних значений упругих модулей (стр. 74 и далее). Не согласен с утверждением на стр. 87 «Вместе с тем, эти же представления вносят неопределенность в применении континуальной механики к атомистическим системам, где действуют межатомные связи конечной величины, и, следовательно, не может существовать присущей для континуальной теории сингулярности поля напряжений». Не показано, соблюдается ли аксиома локального состояния при задании шага расчета МД и скорости деформации. Рекомендовано в качестве прикладной задачи рассмотреть углеродные нанотрубки.

В отзыве официального оппонента **Туманова А.В.** сформулированы следующие замечания:

Выбранные цветовые градиенты для представленных в Главе 3, 4 и 5 результатов вычисления полей напряжений (Рис. 3.3-3.14, 4.2-4.19, 4.24-4.28 и 5.14) делают их нечитаемыми при уменьшении динамического диапазона оттенков. Помимо этого, выбранная форма представления результатов не позволяет однозначно подтвердить выводы о том, что «траектория роста острой трещины, найденная с помощью атомистического моделирования, совпадает с траекторией, обнаруживаемой с помощью технологии расширенного метода конечных элементов. Не обосновано применение асимптотического поля перемещений в области вершины трещины получены для двухмерной задачи о пластине бесконечных размеров, содержащей сквозную трещину для задачи о трехмерном полем цилиндре. Не обоснован выбор временного отрезка для сравнения полей напряжений и смещений. В списке используемой литературы отсутствуют современные работы Томской (основатель

Панин Виктор Евгеньевич), Пермской (Трусов Петр Валентинович) и Казанской (Шлянников Валерий Николаевич) школ.

**На автореферат поступило 7 отзывов от:**

к.ф.-м.н. Марии Анатольевны Гундиной, доцента кафедры «Инженерная математика» Белорусский национальный технический университет (г. Минск); д.т.н. Михаила Антоновича Легана, ведущего научного сотрудника лаборатории статической прочности ФГБУН Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук (г. Новосибирск); к.т.н. Святослава Игоревича Елеонского, старшего научного сотрудника НИЦ «Прочность» Федеральное автономное учреждение «Центральный аэрогидродинамический институт им. проф. Н.Е. Жуковского» (г. Жуковский); д.ф.-м.н. Александра Ивановича Жорника, профессора, Таганрогский институт имени А.П. Чехова (филиал) ФГБОУ ВО «Ростовский государственный экономический университет» (г. Таганрог); д.ф.-м.н. Валерия Эрвиновича Вильдемана, профессора, заведующего кафедрой «Экспериментальная механика и конструкционное материаловедение» ФГАОУ ВО «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» (г. Пермь); к.т.н. Василия Игоревича Никитина, доцента, научного руководителя лаборатории управления объектами разработки нефтяных и газовых месторождений ЦК «Арктика» ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский горный университет императрицы Екатерины II» (г. Санкт-Петербург); д.т.н. Алексея Михайловича Покровского, профессора, заместителя по научной работе заведующего кафедрой «Прикладная механика», ФГБОУ ВПО «Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана» (г. Москва).

В замечаниях указано, что в автореферате отсутствует расшифровка аббревиатуры ГЦК, отсутствует пояснение о том, что автор понимает под понятием «эффективно вычислены», на рисунке отсутствует шкала величин компонент напряженного состояния, не приведена сравнительная оценка процессов роста дефектов между реальными экспериментальными случаями и МД моделированием, из текста автореферата непонятно учитывает ли предложенная методика толщину пластины, рекомендовано рассмотреть не сквозную, а поверхностную трещину, например, полуэллиптическую. Остальные замечания связаны с ограниченным объемом автореферата, на которые даны ответы в диссертации.

Все отзывы положительные и содержат заключения, рекомендуемые при суждение соискателю ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.1.8. Механика деформируемого твердого тела.

**Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается** их высокой компетентностью в современной механике деформируемого твердого тела, что подтверждается публикациями в научных изданиях в сфере исследования соискателя, а также наличием в ведущей организации диссертационного совета

Д 004.036.01 по научной специальности 1.1.8. Механика деформируемого твердого тела (председатель - д.т.н., профессор, академик РАН Матвеев В.П.).

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

– **разработана** научная идея о применимости асимптотического представления М. Уильямса поля напряжений у вершины трещины классической континуальной механики разрушения на атомистическом уровне, позволившая выявить качественно новые закономерности описания напряженно-деформированного состояния у вершины трещины на наноскопическом уровне, повысить точность вычислений механических полей и расширить границы применимости классической механики хрупкого разрушения;

– **введены** обобщенные коэффициенты интенсивности напряжений (коэффициенты при высших приближениях ряда М. Уильямса) и показана необходимость сохранения высших приближений для целостного описания поля напряжений вблизи вершины трещины и повышения точности представления полей у вершины трещины;

– **предложена** новая методика расчета обобщенных коэффициентов ряда, основанная на методе молекулярной динамики, позволившая выявить новые закономерности и связи между полями напряжений, полученными с помощью конечно-элементного моделирования деформирования пластины с одним боковым надрезом, и посредством молекулярно-динамических расчетов в полном диапазоне смешанных форм нагружения

– **доказана** перспективность использования асимптотического описания М. Уильямса механических полей, ассоциированных с вершиной трещины или надреза, на атомистическом уровне.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

– **доказано** положение о применимости математического аппарата континуальной механики разрушения на атомистическом уровне, расширяющее границы применимости классической механики разрушения;

применительно к проблематике диссертации эффективно **использован** комплекс современных методов исследования (метод молекулярной динамики, реализованный в открытом коде Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)), существующий аппарат аналитического исследования, базирующийся на асимптотическом представлении М. Уильямса механических полей, ассоциированных с окрестностью вершины трещины;

– **изложены** доказательства и условия совпадения напряженно-деформированного состояния в окрестности вершины центральной трещины и бокового надреза, полученного посредством имитационного моделирования методом молекулярной динамики, точного аналитического решения механики хрупкого разрушения и конечно-элементного моделирования;

– **раскрыты и изучены** новые закономерности и связи между полями напряжений, полученными с помощью конечно-элементного моделирования деформирования пластины с одним боковым надрезом, и посредством молекулярно-динамических расчетов в полном диапазоне комбинированных форм нагружения;

– **проведена модернизация** алгоритмов и численных методов определения обобщенных коэффициентов интенсивности напряжений, обеспечивающих более точное представление полей напряжений и смещений вблизи вершины трещины.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

– **разработаны и внедрены** новые подходы расчета напряженно-деформированного состояния в деформируемых твердых телах с использованием атомистического моделирования в научную и производственную деятельность ООО «Ренфорс-НТ» и оценки траектории роста трещины в насосно-компрессорных трубах в расчетную практику проектного отдела ООО «СамараНИПИнефть» (г. Самара), что позволило существенно сократить количество натуральных экспериментов и повысить точность инженерных расчетов;

– **определены** пределы и перспективы прикладного использования построенных решений при исследовании проблем распространения трещин;

– **созданы** основы внесения атомистических молекулярно-динамических расчетов в схемы пакетов, реализующих метод конечных-элементов;

– **представлены** методические рекомендации для использования полученных теоретических решений и данных молекулярно-динамических расчетов в прикладных задачах определения напряженно-деформированного состояния.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

– **теория** основана на известных фундаментальных положениях и концепциях механики хрупкого разрушения и постулатах метода молекулярной динамики;

– **идея базируется** на использовании известного асимптотического разложения М. Уильямса и применении апробированных потенциалов межатомного взаимодействия при атомистическом моделировании;

– **использованы** современные методики обработки и визуализации численных результатов, полученных с помощью программных систем метода молекулярной динамики и метода конечных элементов;

– **установлено** качественное и количественное совпадение результатов молекулярно-динамического моделирования с конечно-элементным решением, а также данными, представленными в независимых источниках по данной тематике.

**Личный вклад соискателя состоит в:** проведении молекулярно-динамического решения краевых задач механики разрушения, постановки которых были предложены научным руководителем; разработке и реализации процедуры вычисления обобщенных коэффициентов интенсивности напряжений на основе результатов атомистического моделирования; обработке данных, полученных с по-

мощью программы LAMMPS, реализующей метод молекулярной динамики; непосредственном участии в подготовке всех основных опубликованных работ по результатам диссертации; формулировке основных научных положений и выводов.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания 1) недостаточно обоснован выбор рассмотренных материалов для молекулярно-динамического моделирования; 2) недостаточно обоснованы и раскрыты некоторые количественные сопоставления атомистического и континуального решений.

Соискатель Белова О.Н. ответила на задаваемые в ходе заседания вопросы и привела собственную аргументацию.

На заседании 3 ноября 2023 года диссертационный совет принял решение присудить Беловой Оксане Николаевне ученую степень кандидата технических наук по специальности 1.1.8. Механика деформируемого твердого тела за решение научной задачи механики упругого разрушения на основании молекулярно-динамического анализа полей у вершины трещины в условиях смешанного деформирования, имеющей значение для развития механики деформируемого твердого тела.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 8 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвующих в заседании, из 21 человек, входящих в состав совета, дополнительно введено на разовую защиту 0 человек, проголосовали: «за» присуждение ученой степени – 17 человек; «против» – 0 человек.

Председатель диссертационного  
совета 99.2.039.02

Секретарь диссертационного  
совета 99.2.039.02

03 ноября 2023 г.



Клебанов Яков Мордухович

Луца Альфия Расимовна