

## ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертацию Беловой Оксаны Николаевны

### «ПРИЛОЖЕНИЯ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ К ЗАДАЧАМ МЕХАНИКИ РАЗРУШЕНИЯ И АТОМИСТИЧЕСКИ-КОНТИНУАЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАЗРУШЕНИЯ»,

представленную на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.1.8 Механика деформируемого твердого тела

**Актуальность** диссертационного исследования обуславливается необходимостью и перспективностью исследования явлений и процессов разрушения на нано- и микроуровне. Положения и концепции механики сплошных сред перестают быть справедливыми на расстояниях, где существенными становятся особенности кристаллической структуры материала. Актуальность проблемы исследования заключается в необходимости создания эффективных расчетных схем напряженно-деформированного состояния в деформируемых телах с учетом их кристаллического строения, ибо особенности деформирования и разрушения на наноскопическом уровне обуславливают макроскопическое поведение деформируемого тела. Сочетание подходов механики сплошных сред и атомистического моделирования позволит получить более глубокое понимание и реалистичное описание поведения роста трещин и деформационных процессов в условиях воздействия различных сложных систем термомеханических нагрузок.

**Содержание диссертации.** Диссертация состоит из введения; пяти глав, заключения, списка литературы. Общий объем диссертации 222 страницы, включая 1 таблицу, 84 рисунка и 4 приложения. Список использованной литературы содержит 208 наименований.

**Во введении** обоснована актуальность, сформулированы цель и задачи работы. Отмечена научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, дана ее общая характеристика.

**Первая глава** посвящена фундаментальным положениям о моделировании процессов механике разрушения, в частности, о распространения трещин, с помощью метода молекулярной динамики. В главе приведены общие сведения о методе МД, описаны основные понятия метода: уравнение движения, алгоритм Верле, термостат и баростат, термодинамические ансамбли, межатомный потенциал. Приведен обзор программного обеспечения для реализации метода молекулярной динамики, в частности LAMMPS – вычислительного пакета по моделированию атомно-молекулярной динамики. Данная программа позволяет проводить крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты, как на отдельных

процессорах, так и на нескольких с использованием алгоритмов распараллеливания. База данных пакета LAMMPS содержит большое разнообразие одно- и многочастичных потенциалов взаимодействия. Далее приведен обзор работ, посвященных применению метода МД при моделировании распространения трещин. Описаны решаемые в данных работах задачи и основные выводы. В частности, приведены работы, направленные на вычисление коэффициентов интенсивности напряжений и углов распространения трещин в различных материалах.

**Во второй** главе приведено описание моделируемого материала и его механических свойств. На основании атомистического моделирования построена кривая зависимости энергии от деформации, что дало возможность найти компоненты тензора упругих модулей монокристаллических алюминия и меди. Определены механические свойства монокристаллических алюминия и меди, приведена визуализация механических свойств рассмотренных материалов.

**В третьей** главе на примере медной и алюминиевой пластин с центральной трещиной приведены результаты определения угла направления развития трещины в условиях смешанного нагружения. Сначала приводятся детали атомистического моделирования: размеры ячейки моделирования, граничные условия, термодинамические ансамбли и термостат, способы создания трещины и приложения смешанного нагружения. В ходе атомистического молекулярно-динамического моделирования рассчитываются углы направления роста дефекта для комбинированного нагружения (растяжение и сдвиг пластины). Далее проводится сравнение полученных результатов молекулярно-динамического моделирования со значениями из других источников. В диссертации приведены углы распространения центральной трещины в медной пластине в зависимости от параметра смешанности нагружения.

**В четвертой** главе представлены результаты моделирования смешанного нагружения пластины с центральной трещиной и пластины с боковым надрезом. В работе проведено сравнение аналитического решения континуальной механики разрушения с решением, полученным из молекулярно-динамического моделирования.

Показано, что результаты моделирования находятся в хорошем согласии с результатами континуальной механики разрушения. Глава 4 также содержит результаты атомистического моделирования пластины из алюминия с боковым надрезом. Взаимодействие атомов алюминия описано с помощью потенциала внедренного атома (EAM). Приведены сравнения полученных результатов МД-моделирования для алюминия и меди. Получены качественно одинаковые распределения компонент тензора напряжений для материалов с одинаковым видом симметрии упругих свойств.

**В пятой главе** приведены результаты конечно-элементных расчетов распространения продольной, окружной и наклонной трещины в трубе, находящейся под действием растягивающей нагрузки и внутреннего давления. Показано, что траектории развития трещины, полученные двумя принципиально различными подходами, подобны.

**В заключении** исследования излагаются его основные результаты и выводы.

Достоверность результатов проведенного исследования обусловлена применением классических и достоверных методов механики сплошных сред (теоретических подходов континуальной механики деформируемого твердого тела и вычислительных методов механики сплошных сред). Степень достоверности и обоснованности выносимых на защиту положений, выводов и рекомендаций обеспечивается строгостью, в рамках сформулированных допущений, математической постановки и методами решения рассматриваемых задач, совпадением в частных случаях представленных решений с известными результатами, соответствием экспериментальных данных, полученными автором работы, с теоретическими расчетами. Степень достоверности полученных результатов подтверждается сравнением значений амплитудных множителей ряда М. Уильямса, найденных численно методом МД и методом КЭ для двух различных конфигураций образцов с трещинами и надрезами, использованием классических математических методов механики сплошных сред: методы численного анализа (метод КЭ).

**Научная новизна** заключается в

1. Проведении молекулярно-динамического расчета углов направления распространения трещины в гранецентрированной монокристаллической меди и алюминии в полном интервале смешанных форм нагружения: от чистого нормального отрыва до чистого поперечного сдвига: показано, что значения углов направления распространения трещины, полученные с помощью атомистического (дискретного) моделирования, полностью согласуются с результатами классической макроскопической теории хрупкого разрушения.

2. Выполнении анализа угловых распределений компонент тензора напряжений вблизи вершины трещины, полученных с помощью атомистического молекулярно-динамического моделирования деформирования ГЦК медной и алюминиевой пластин с центральной трещиной в полном интервале смешанных форм нагружения от чистого нормального отрыва до поперечного сдвига с помощью потенциала внедренного атома в открытом коде LAMMPS, реализующем метод МД: показано, что 1) угловые распределения напряжений у вершины трещины совпадают с угловыми распределениями классической механики хрупкого разрушения, 2) материалы с кубической сингонией (медь, алюминий) проявляют одинаковое поведение при деформировании образцов с

трещинами и напряженно-деформированное состояние на атомистических масштабах может быть эффективно описано с помощью математического аппарата континуальной механики разрушения (даже при небольшом количестве атомов).

3. Разработке вычислительной процедуры определения обобщенных коэффициентов интенсивности напряжений (коэффициентов разложения М. Уильямса), основанная на МД вычислительном эксперименте: показано, что обобщенные коэффициенты интенсивности напряжений могут быть вычислены с помощью техники переопределенного метода, базирующегося на данных атомистически-молекулярных вычислений.

4. Конечно-элементном решении задачи о деформировании пластины с одним боковым горизонтальным и наклонным надрезом в полном интервале комбинированных форм нагружения: на основании полученного конечно-элементного решения с помощью техники переопределенного метода вычислены обобщенные коэффициенты разложения М. Уильямса.

5. Проведении атомистических расчетов для ГЦК медной и алюминиевой пластин в молекулярно-динамическом пакете LAMMPS: показано, что угловые распределения механических напряжений совпадают с результатами конечно-элементных вычислений, вычислены коэффициенты асимптотического разложения М. Уильямса с помощью данных, полученных посредством конечно-элементного (континуального) и атомистически-молекулярного (дискретного) подходов.

6. Выполнении вычислительного эксперимента, основанного на атомистически-молекулярном моделировании трубки с продольным, окружным и наклонным дефектом, находящейся под действием внутреннего давления и растягивающей нагрузки.

7. Анализе траектории роста трещины в трубке с наклонным дефектом, находящейся под действием растягивающей нагрузки на основании конечно-элементных расчетов трубы с наклонным дефектом, находящейся под действием внутреннего давления и растягивающей нагрузки, атомистического моделирования: показано, что траектории полностью совпадают.

**Теоретическая значимость** работы заключается в доказательстве возможности применения математического аппарата континуальной механики разрушения на атомистическом уровне: показано, что на атомистическом уровне асимптотическое описание М. Уильямса качественно и количественно описывает механические поля, ассоциированные с вершиной трещины или надреза.

**Практическая ценность** диссертационной работы заключается в том, что предлагаемые расчетные схемы могут быть использованы для определения напряженно-деформированного состояния в инженерных

элементах конструкций, находящихся в реальных эксплуатационных условиях.

**Апробация работы, публикации и соответствие паспорту специальности.** Основные положения научно-квалификационной работы были изложены и обсуждены в рамках работ 8 всероссийских и 11 международных конференций и достаточно полно отражены в публикациях соискателя. Результаты работы полностью отражены в 35 научных публикациях, в том числе в 6 статьях, опубликованных в периодических научных изданиях, рекомендованных ВАК России, и в 18 публикациях в изданиях, входящих в базы цитирования Scopus и Web of Science.

Научные исследования, проведенные в диссертационной работе, частично выполнялись в рамках НИР по проекту гранта РФФИ № 21-11-00346, тема «Параллельное атомистически-континуальное описание процессов разрушения и нелинейного деформирования» и полностью в рамках проекта гранта РФФИ № 20-31-90082 «Приложения метода молекулярной динамики к задачам механики разрушения и параллельное атомистически-континуальное описание процессов разрушения».

Диссертационная работа соответствует направлениям исследований, указанным в пунктах паспорта специальности 1.1.8. Механика деформируемого твердого тела:

3. Задачи теории упругости, пластичности и вязкоупругости.
6. Микромеханика, наномеханика, механика дискретных сред.
10. Прочность при сложных режимах нагружения. Теория накопления повреждений. Механика разрушения твердых тел.
11. Математическое моделирование поведения дискретных и континуальных деформируемых сред при механических, тепловых, электромагнитных, химических, гравитационных и прочих воздействиях.
12. Вычислительная механика деформируемого твердого тела.

Автореферат правильно и полностью отражает содержание диссертации.

По диссертации имеются следующие замечания.

1. Одним из важных вопросов, обсуждаемых в работе, является вопрос о связи сил взаимодействия отдельных элементов атомистической системы и эквивалентных им напряжений в континуальном представлении. К сожалению, этой проблеме уделено мало внимания, в частности, не поясняется, в связи с чем при формализации континуальных напряжений была использована теория напряжений Коши и формализация отклика в рамках теории простого материала (первого градиента). Поясню это более подробно. Классическая теория Коши основана на так называемом постулате Коши – гипотезе о том, что для достаточно точного представления интенсивности поля усилий, приложенных к поверхности воображаемого сечения, достаточно аппроксимировать эту поверхность многочленом Тейлора

первого порядка. Технически это означает, что поверхностные усилия (в тексте диссертации они названы “тягой”, видимо, в связи с буквальным переводом английского термина “traction”) зависят от точки, через которую проходит воображаемое сечение, и нормали к поверхности сечения. Теория простого материала предполагает зависимость отклика только от первого градиента континуальной деформации. Оба предположения характеризуют близкодействие в наиболее простой форме. Вместе с тем, в тексте работы отмечается, что простые парные атомистические потенциалы не позволяют адекватно описать рассматриваемую атомистическую структуру, и для более точного её описания предполагается использовать потенциал внедренного атома. Однако внедренный атом вводит некоторую нелокальность и, возможно, моментные составляющие в континуальное представление взаимодействия. Можно ли при этом оставаться в рамках теории Коши и простого материала? Полагаю, что можно при каких-то условиях, а при других – нет. Этот вопрос тесно связан с виральным представлением и его обобщением – виральным разложением (Камерлинг-Оннеса), а технически приводит к вычислительным проблемам. Действительно, на стр. 59 работы указано “Чтобы справиться с концентрацией напряжений, возникающей из-за несовершенства кристалла, локальное вириальное напряжение рассчитывается на основе среднего значения для небольшой группы атомов внутри бокса моделирования”. Здесь, на мой взгляд, требуется обоснование выбранных моделей описания напряженно-деформированного состояния на атомистическом и континуальном уровнях и их согласования.

2. С первым замечанием связано второе. На стр. 60 и далее обсуждается вопрос о локализации силового взаимодействия атомистической структуры и дан небольшой обзор возможных вариантов выбора функции локализации. Вместе с тем эта часть слабо связана с конкретным исследованием, представленным в диссертации. Из текста не ясно, как следует распорядиться возможностями процедуры локализации при вычислительном моделировании образцов из монокристаллов меди и алюминия, обсуждаемых далее. Но, на мой взгляд, более насущным вопросом, примыкающим к проблеме локализации, является вопрос о разделении микроскопического (стохастического) и макроскопического (коллективного) движения, первое из которых связано с макроскопической температурой, а второе – с макроскопической деформацией. К сожалению, вопрос о макроскопической температуре поднимается лишь эпизодически, в частности, на стр. 63 приведена ссылка на работу Харди. С другой стороны, большинство расчетов МД выполнены при температуре, близкой к абсолютному нулю (стр. 74, 124 и др.), хотя имеются ссылки на расчеты при высокой температуре (300К-1000К, стр. 109). В этом видно желание автора уйти от проблем, связанных с

температурой. Понимаю, что это вопрос сложен и связан с обоснованиями параметров “бокса осреднения”, а, в конечно итоге, с вопросом о согласовании понятия энтропии для дискретной и континуальной систем. Однако хотелось бы видеть в работе его обсуждение.

3. На мой взгляд, вопросу согласования понятий макроскопической деформации и её аналога в атомистической системе уделено очень мало внимания (стр. 62), и, почему-то, в терминах пластин. Хотелось бы увидеть здесь связь кинематики дискретной системы и классических мер деформаций (градиента места, меры Коши-Грина, поворотов, сопровождающих деформацию и т.д.) с последующим переходом к асимптотическим формулам для малых деформаций. Эта часть нелинейной механики не требует каких-либо сложных вычислений (в отличие от полноценной нелинейной теории), но существенно обогатила бы изложение и сделала его более понятным.
4. Значение энергии, вычисленной алгоритмом МД при искажениях бокса, содержащего атомистическую систему, представляется многочленом шестой степени (стр. 71 и далее). Вместе с тем, эффективные характеристики континуальной системы вычисляются в предположении линейности закона состояния, и, следовательно, квадратичности плотности упругой энергии. Есть ли здесь противоречие? Я проверил этот простой вопрос, аппроксимировав предлагаемые зависимости шестой степени квадратичными (полиномиальные зависимости в явном виде приведены в работе) и получил погрешность менее одного процента. Таким образом, вычисления линейных характеристик континуальной системы по результатам моделирования МД корректны. Хотелось, что бы такую проверку не нужно было проводить, а этот факт был бы указан в работе.
5. Вызывает вопросы процедуры вычисления средних значений упругих модулей (стр. 74 и далее). Видимо, под осреднением понимается вычисление эффективных модулей в поликристаллической структуре. Но в этом случае следует описать текстуру поликристалла, в которой в силу тех или иных причин появляются направления предпочтительной ориентации зерен, имеется характерный размер зерна и т.д. Эта информация в работе не приведена. Кроме того, для построения эффективных характеристик поликристалла следует использовать ансамбль состояний “второго уровня”, в котором стохастически распределены не только атомы, но и монокристаллы. *Это замечание, конечно, следует рассматривать как пожелание на дальнейшую работу. Тот факт, что после “некоторого” осреднения получены упругие характеристики, подобные справочным, является верификацией корректности МД вычислений.*
6. 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». Сингулярности появляются в решениях линеаризованных уравнений, и именно потому, что в окрестности этих точек нарушаются условия линеаризации. Кроме того, в вершине трещины не справедлив постулат Коши (см. замечание 1), и потому сами сингулярности являются артефактами.

7. Расчеты МД производились с шагом 1 фемтосекунда (фс), а скорость деформации составляла 0.04 1/фс. (стр.95). Эти расчеты затем интерпретировались в рамках континуальной модели. Соблюдается ли при этом аксиома локального состояния (см., например, П. Жермен. Курс механики сплошных сред. С. 144.)? Заметим, что в расчетах, результаты которых приведены на стр. 141 и далее, скорость деформации значительно меньше.
8. В работе приведен ряд расчетов процесса распространения трещины, а в последней главе эти расчеты связаны с прикладной задачей о растрескивании стальной трубы. Эти расчеты очень интересны с теоретической точки зрения, однако использовать их результаты для оценки реальных процессов разрушения, видимо, следует очень осторожно. Дело в том, что теоретическая прочность кристалла, как было показано в пионерских работах Френкеля, Борна и Оппенгеймера, очень высока и приближается к его модулю упругости. В реальности она на несколько порядков меньше из-за процессов миграции дефектов кристаллической структуры и коллективного ослабления её областей (Поляни и др.). В диссертационной работе расчеты МД представлены для идеального кристалла, ослабленного начальным нарушением связей, и миграции распределенных в его объеме дефектов не учитываются вовсе. В этой связи результаты расчетов “пределов прочности” (в отличие от упругих характеристик) следует считать очень грубой оценкой сверху. Видимо, по этой причине в работе детально обсуждаются упругие характеристики, а предельные прочностные свойства в значительно меньшей степени. Это обстоятельство следовало бы подчеркнуть в работе и, возможно, перенести прикладной акцент с трубопроводов на углеродные нанотрубки, инженерная составляющая которых в настоящий момент тоже очень значима.

Указанные замечания не влияют на общую положительную оценку диссертации в целом.

**Заключение по диссертации.** Диссертационная работа Беловой О.Н. «Приложения метода молекулярной динамики к задачам механики разрушения и атомистически-континуальное описание процессов разрушения», является завершенным научно-квалификационным трудом, выполненным на достаточно высоком научном уровне, в котором решена



важная научно-техническая задача, связанная с атомистически-континуальным расчетом напряженно-деформированного состояния у вершины трещины.

Считаю, что диссертационная работа Беловой Оксаны Николаевны соответствует требованиям п.9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.03.2013 г., а ее автор Белова Оксана Николаевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.1.8 Механика деформируемого твердого тела.

Я, Лычев Сергей Александрович, даю согласие на включение моих персональных данных в аттестационные документы соискателя и их дальнейшую обработку.

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук (01.02.04

Механика деформируемого твердого тела)

Ведущий научный сотрудник лаборатории

«Механики моделирования технологических процессов»

ФГБУН «Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского

Российской академии наук»,

119526, г. Москва, пр-т Вернадского, д.101, корп. 1.

Тел. 89160372 ~~100~~ e-mail lychevsad@mail.ru

Подпись \_  
Ученый сф  
ИПМех Р

- А. - заверяю  
М.А. Котов

