



ПРИТВЕРЖДАЮ»

ФГБУН Пермский

федеральный исследовательский

центр Урального отделения РАН, чл.-корр. РАН

О.А. Плехов

О.А. Плехов 2023 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Пермский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук

о диссертационной работе Беловой Оксаны Николаевны «Приложения метода молекулярной динамики к задачам механики разрушения и атомистически-континуальное описание процессов разрушения», представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.1.8 – Механика деформируемого твердого тела

1. Актуальность проблемы.

Изучение начальной стадии квазихрупкого разрушения металлов на атомном уровне представляет большой интерес. Основанные на первопринципах атомистические модели, в отличие от континуальных, не нуждаются в дополнительных гипотезах для прогнозирования направления распространения трещины при смешанном нагружении образца, и могут служить источником новых гипотез. Целью работы является исследование возможностей атомистического подхода к моделированию данного процесса, соответствия и различий в сравнении с континуальным подходом. В частности, интересует вопрос, насколько этот метод подходит для определения направления распространения трещины из вершины выреза либо разреза в пластине и коэффициентов асимптотического разложения напряжений вблизи вершины трещины, определяющих движущие силы для ее распространения, при смешанном нагружении.

2. Структура и содержание работы.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы из 208 наименований и пяти приложений, содержит 222 страницы текста с 84 рисунками и 16 таблицами. По структуре и

оформлению диссертация и автореферат диссертации соответствуют установленным требованиям.

Во *введении* сформулированы актуальность исследования, цель, задачи и методы исследования, научная новизна, практическая и теоретическая значимость полученных результатов, положения, выносимые на защиту, достоверность полученных результатов, апробация, публикации, личный вклад соискателя и благодарности. Кроме того, здесь же помещен обзор литературы, посвященный анализу современного состояния вопроса, рассматриваемого в диссертации, обосновывающий актуальность, новизну и теоретическую значимость исследования.

В *первой главе* излагаются основы метода молекулярной динамики (уравнения динамики, межатомные потенциалы, статистико-физические определения термодинамических величин, понятия термостата и баростата, методы численного моделирования деформирования атомных решеток методом молекулярной динамики) и дается обзор пакетов программ, в которых реализован метод. Дан обзор работ, посвященных моделированию распространения трещин в различных атомных решетках методом молекулярной динамики.

Во *второй главе* для образца кристалла с кубической атомной решеткой с рассматриваемыми многоточечными потенциалами межатомного взаимодействия, соответствующими меди и алюминию, определяются упругие модули. По данным упругим модулям с использованием различных схем осреднения по направлениям в пространстве определяются модули упругости изотропной среды, которые будут фигурировать в аналитических и численных решениях упругих задач о распространении трещин в пластинах, ослабленных разрезом и надрезами.

В *третьей главе* исследуется развитие трещины в пластине с центральным разрезом в зависимости от параметра смешанности нагружения. Задача решается методом молекулярной динамики, в терминах которой записываются все граничные условия. Описанию результатов предшествует обзор работ на тему механики трещин, выполненных атомистическими методами, а также основ механики хрупкого разрушения и существующих теорий для описания направления распространения трещины в условиях комбинированного нагружения. Определены зависимость угла направления распространения трещины от параметра смешанности

нагружения, а также исследованы зависимости кривых нагружения образца от длины разреза и от температуры.

В *четвертой главе* исследуется распределение напряжений вблизи вершины бокового надреза либо центрального разреза в пластине в зависимости от параметра смешанности нагружения. В качестве параметров, характеризующих это распределение, используются проекции определенного из молекулярно-динамического расчета поля напряжений вблизи вершины надреза либо разреза на базис асимптотического ряда Уильямса — оригинальный метод «цифровой фотоупругости». Эти коэффициенты, определяющие условия распространения трещины, сравниваются с коэффициентами аналитического решения задачи с центральным разрезом и с коэффициентами, определенными тем же методом цифровой фотоупругости по полю напряжений, определенному методом конечных элементов для задачи с боковым надрезом. Получено приемлемое соответствие результатов моделирования методом молекулярной динамики для определенного момента времени и данных конечно-элементного моделирования либо аналитического решения.

В *пятой главе* исследованы траектории распространения трещины в трубе с продольным, окружным и наклонным разрезами, нагруженной внутренним давлением и осевой растягивающей нагрузкой, с помощью моделей, построенных методом молекулярной динамики и расширенным методом конечных элементов. Установлено хорошее соответствие результатов.

В *заключении* сформулированы основные выводы и научные результаты работы.

В *приложениях* вынесены таблицы углов направления роста трещины и проекции напряженного состояния вблизи вершины трещины на базис асимптотического ряда Уильямса, а также акты внедрения результатов диссертационной работы в производственную деятельность ООО «Самарский научно-исследовательский и проектный институт нефтедобычи» и ООО «Ренфорс-НТ» (г. Самара) для уточнения оценки жизнеспособности нефтегазового оборудования.

3. Теоретические результаты диссертации и их научная новизна.

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. Для определения коэффициентов разложения по избыточным данным численного решения задачи использован метод цифровой фотоупругости. 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.

4. Практическая значимость результатов диссертации.

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.

5. Достоверность результатов диссертации.

Достоверность результатов расчетов обеспечивалась корректностью постановок задач, использованием известных в научном сообществе и апробированных пакетов программ и сравнением результатов, полученных методом молекулярной динамики, с результатами, полученными аналитическим методом либо моделированием методом конечных элементов. Для представительности численных экспериментов рассматривались образцы, состоящие из 800 тысяч атомов.

6. Апробация работы.

Основные положения диссертационной работы О.Н. Беловой опубликованы в восемнадцати статьях в научных журналах, реферируемых международными базами научного цитирования Web of Science и Scopus и в шести статьях в научных журналах, входящих в перечень ВАК, и докладывалась на девятнадцати международных и всероссийских конференциях по профилю механики деформируемого твердого тела. Работа выполнялась в рамках проекта РФФИ и проекта РНФ, результаты которых проходят полноценную научную экспертизу.

7. Замечания и вопросы по содержанию работы.

1. Большинство работ в обзоре литературы во введении посвящено исследованиям методом молекулярной динамики распространения трещин в бездефектных атомных решетках с неметаллической связью, хрупких по своей природе (графен, кварц, керамики). Есть соображения¹ о том, что металлическая связь сжимает атомные плоскости вблизи дислокаций и препятствует возникновению из них трещин. Хотя в работе рассматриваются потенциалы межатомного взаимодействия, соответствующие металлам, вряд ли они способны отразить взаимодействия ансамблей атомов, дефектов кристаллической решетки и электронного газа при зарождении и распространении трещины. Представляется, что природа процессов возникновения и распространения трещин в металлах является более сложным надатомным процессом. Работу можно воспринимать как моделирование зарождения и распространения трещин в бездефектной атомной решетке, материале монокристаллических «усов».

2. Судя по результатам и общим соображениям, атомная модель пластины, ослабленной геометрическим дефектом, под действием шага нагружения проявляет себя нестабильно, каждый разрыв атомных связей ведет к релаксации возмущений, перераспределению полей напряжений и появлению малого зубца на интегральной кривой деформирования. Было бы интересно предварительно исследовать реакцию 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. Необходимо иметь в виду, что исследование угла распространения трещины и сопровождающих его коэффициентов асимптотического ряда в работе ведется с использованием системы, статистические свойства которой далеки от термодинамического равновесия (во всяком случае, вблизи кончика трещины).

3. Представление результатов распределений компонент напряжений по угловой координате были бы более информативными, если бы возмущения

¹ А.А. Вакуленко О влиянии электронной структуры металлов на характерные особенности их механических свойств // Изв. РАН. МТТ. 1994. № 3. С.109-116.

компоненты напряжений рассматривались в локальном базисе полярной системы координат с центром в вершине надреза либо разреза. Направление распространения трещины согласно гипотезе максимального тангенциального напряжения в таком случае определялось бы элементарно.

4. В списке литературы только 10% источников принадлежат отечественным авторам, что вряд ли отражает их общий вклад в механику трещин, в том числе — в численные исследования этого процесса. Большинство работ имеют хрупкие кристаллы в качестве объекта исследования и атомистические методы математического моделирования в качестве инструмента. На наш взгляд, не обсуждены в необходимой мере гипотезы о механизмах зарождения трещин в кристаллах, проверка которых с помощью атомной модели представляла бы интерес.

5. На рис. 3.15 разрезам с длинами 5 и 20% от ширины пластины соответствуют максимальные напряжения 5 и 7 ГПа, которые не очень хорошо соответствуют закону квадратного корня. Из текста не ясно, какому значению параметра смешанности нагружения соответствуют эти результаты, но, возможно, причина несоответствия кроется в том, что закон квадратного корня справедлив для условия нормального отрыва?

Сформулированные замечания не возмущают положений, выносимых на защиту, а побуждают к более глубокому исследованию интересной научной проблемы.

8. Заключение по диссертации.

Диссертация представляет собой самостоятельную завершённую научно-квалификационную работу, в которой содержится решение актуальной научной задачи, имеющей значение для понимания закономерностей распространения трещин в условиях комбинированных мод нагружения. Диссертационная работа Беловой Оксаны Николаевны «Приложения метода молекулярной динамики к задачам механики разрушения и атомистически-континуальное описание процессов разрушения», выполнена на высоком научно-методическом уровне и отвечает всем требованиям п.9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24.03.2013 года (в редакции от 28.08.2017 года), а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата технических наук по специальности 1.1.8 – «Механика деформируемого твёрдого тела».

Диссертация рассмотрена на научном семинаре лаборатории нелинейной механики деформируемого твердого тела Института механики сплошных сред УрО РАН (ИМСС УрО РАН) — филиала ПФИЦ УрО РАН 9 октября 2023 года.

Отзыв подготовил:

заведующий лабораторией нелинейной механики деформируемого твердого тела ИМСС УрО РАН, доктор физико-математических наук (01.02.04)

Келлер Илья Эрнстович

И.о. директора ИМСС УрО Р

зико-математических наук

Орлова Наталия Алексеевна

Федеральное государственное учреждение науки Пермский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук (ПФИЦ УрО РАН),

Служебный телефон: +7(342)2126008

permsc.ru

Служебный адрес: 614990, г.Пермь, ул. Ленина, д.13 а, ПФИЦ УрО РАН

Личную подпись
удостоверяю
Специалист по кадрам

