

ОТЗЫВ

**научного руководителя на диссертационную работу «Приложения метода молекулярной динамики к задачам механики разрушения и атомистически-континуальное описание процессов разрушения» Беловой Оксаны Николаевны на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.1.8
Механика деформируемого твердого тела**

Представленная О.Н. Беловой диссертационная работа посвящена атомистически-континуальному описанию процессов разрушения и анализу полей напряжений вблизи вершины трещины в линейно упругом материале в условиях смешанного нагружения.

Современная механика разрушения предоставляет глубоко проработанный теоретически и широко обоснованный экспериментально математический аппарат, позволяющий оценить напряженно-деформированное состояние у вершины трещины и надреза для различных режимов нагружения. С помощью современных экспериментальных методов и вычислительных технологий в настоящее время стало возможным с высокой точностью определить напряженно-деформированное состояние в элементах конструкций, оценить их прочностные свойства, живучесть и долговечность. Однако при построении численных решений, например, в пакетах, реализующих метод конечных элементов, приходится прибегать к существенному измельчению сетки (особенно в областях с концентраторами напряжений), причем бесконечно уменьшать размер конечного элемента невозможно, ибо неизбежно мы столкнемся с масштабами, на которых теория механики сплошных сред перестанет быть справедливой и необходимо учитывать характерные особенности кристаллического строения материала. Более того, очевидно, что процессы и явления разрушения, наблюдаемые на макроскопическом уровне, обусловлены процессами и явлениями, происходящими на нано- и микроскопическом уровнях. В связи с этим актуальным, перспективным и важным представляется построение и применение подходов и методов, дающих возможность параллельно анализировать процессы разрушения и деформирования, протекающих на различных пространственных масштабах. Данной проблеме посвящена диссертация О.Н. Беловой.

В рамках диссертационного исследования Беловой О.Н. выполнена большая серия молекулярно-динамических расчетов в пакете Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS), нацеленных на атомистическое определение параметров классической макроскопической (континуальной) механики разрушения, таких как коэффициенты интенсивности напряжений, T-напряжения, амплитудные (масштабные) коэффициенты при высших слагаемых в разложении М. Уильямса поля напряжений в окрестности вершины трещины в изотропном линейно упругом материале. На основании проведенного молекулярно-динамического расчета вычислены параметры классической макроскопической механики разрушения: обобщенные коэффициенты интенсивности напряжений (коэффициенты при высших слагаемых в разложении М. Уильямса поля напряжений в окрестности вершины трещины в изотропном линейно упругом материале) вычислены для пластины с центральной трещиной и пластины с одним боковым надрезом, находящимися в условиях смешанного (комбинированного) нагружения. Показано, что атомистические поля напряжений, вычисленные в окрестности вершины трещины в условиях нормального отрыва и смешанного нагружения, близки к аналитическому решению для пластины с центральной трещиной и численному решению для пластины с одним боковым надрезом, подверженной смешанному деформированию, классической макроскопической механики разрушения. На основании большого количества вычислительных экспериментов, проведенных с помощью метода молекулярной динамики, переопределенного метода, адаптированного для

молекулярно-динамических вычислений, сопоставлений с аналитическим решением и численными (конечно-элементными) решениями механики хрупкого разрушения, можно заключить, что макроскопическая континуальная теория разрушения успешно описывает разрушение на атомистическом уровне, и, в перспективе, с помощью параметров механики разрушения можно соединить атомистический и макроскопический уровни. Новизна проведенного исследования заключается в том, что с помощью новых подходов найдены параметры механики разрушения (в том числе, коэффициенты при высших слагаемых ряда Уильямса), базирующиеся на молекулярно-динамических расчетах.

Вычисленные значения коэффициентов интенсивности напряжений, T-напряжений и коэффициентов высших приближений могут обеспечить «бесшовную» связь между атомарным и макроуровнем (континуальным уровнем). Это приведет не только к повышению надежности и конструкции промышленных устройств, которые в настоящее время состоят из наноразмерных объектов и материалов, но также обеспечит дополнительное атомистическое понимание параметров механики разрушения. Полученные результаты также инициируют проведение дальнейших вычислительных экспериментов, исследующих разрушение в наноразмерном масштабе и приводящих к новой теоретической и физической интерпретации явлений разрушения различных материалов, выходящих за рамки традиционной механики разрушения, что приведет к новым стратегиям повышения прочности материалов, опирающимся на широкий междисциплинарный синтез с применением новейших достижений вычислительных технологий.

Результаты диссертационной работы внедрены в учебный процесс Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королева в лекционные курсы для магистров направления 01.04.03 Механика и математическое моделирование дисциплин «Механика разрушения», «Метод молекулярной динамики в механике деформируемого твердого тела», «Использование МКЭ-пакета SIMULIA Abaqus для решения задач механики деформируемого твердого тела» и «Вычислительные методы механики деформируемого твердого тела» (программ «Вычислительные технологии в механике сплошных сред»).

Материалы диссертации изложены в 35 научных работах, в том числе в 6 изданиях, рекомендуемых ВАК при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации, и в 18 изданиях, индексируемых международными библиографическими базами данных Scopus и WebofScience.

Диссертация О.Н. Беловой соответствует всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Белова О.Н., достойна присуждения ученой степени кандидата наук по специальности 1.1.8 Механика деформируемого твердого тела.

Научный руководитель
доктор физико-математических наук, доцент,
заведующий кафедрой математического
моделирования в механике
федерального государственного автономного
образовательного учреждения высшего
образования «Самарский национальный
исследовательский университет имени академика
С.П. Королева»

Степанова Л.В.

