

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

Современные требования к обеспечению безопасности эксплуатации высоконагруженного оборудования обуславливают необходимость рассмотрения взаимодействия и взаимовлияния множества сложных физических процессов. Решение задач в рамках континуальной механики требует проведения широкого спектра исследований для разработки базовых моделей поведения среды и методов определения их параметров. При разработке подобных моделей, позволяющих объединять широкий спектр физических явлений и процессов, появляется необходимость сопряжения различных подходов к моделированию разрушения на различных структурных уровнях.

Актуальность представленной диссертации определяется насущной необходимостью применения для исследования процессов разрушения новых, широко развиваемых в последнее время многоуровневых подходов и методов, позволяющих учитывать особенности кристаллического строения материалов и физических явлений, происходящих на наноуровне. Разрушение материалов происходит вследствие зарождения, слияния и распространения трещин, дефектов и вакансий, которые могут быть количественно описаны классической механикой разрушения, основанной на гипотезах и представлениях механики сплошных сред. Критерии традиционной линейной механики разрушения используют интенсивность сингулярного поля напряжений вблизи вершины трещины, выражающуюся в терминах коэффициентов интенсивности напряжений. Однако, с помощью представлений механики разрушения, основанной на идеях континуума, затруднительно прогнозировать разрушения материалов на наноуровне из-за дискретности строения кристаллической решетки. Чтобы обеспечить физическое понимание явления разрушения на наноскопическом уровне и тщательно изучить атомистическую природу разрушения, необходимо использовать атомистическое моделирование, основанное на методах молекулярной динамики.

Содержание диссертации. Диссертационная работа включает введение; пять глав, заключение, список литературы. Общий объем диссертации составляет 222 страницы и содержит 1 таблицу, 84 рисунка и 4 приложения. Список использованной литературы состоит из 208 наименований.

Во введении дано обоснование актуальности темы диссертационной работы, сформулированы цель и задачи работы. Сформулированы научная

новизна, теоретическая и практическая значимость работы, приведена общая характеристика диссертации.

В первой главе приводятся основные сведения о методе молекулярной динамики и построении межатомных потенциалов взаимодействия, используемых в методе молекулярной динамики. Рассматриваются алгоритмы интегрирования уравнений движения в рамках метода молекулярной динамики, приводятся основные определения и понятия метода. Дана сравнительная характеристика имеющихся прикладных пакетов и программ, реализующих метод молекулярной динамики. Автор отдает предпочтение одному из наиболее развитых проектов с открытым исходным кодом Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS), который позволяет осуществить интегрирование уравнений движения молекулярной динамики. Рассмотрены основные принципы моделирования одно- и многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия. Приведен обзор работ, посвященных применению технологии молекулярной динамики для симуляции распространения трещин в различных материалах. Описаны основные рассматриваемые краевые задачи и полученные результаты. Основное внимание уделено работам, направленным на вычисление параметров механики разрушения: коэффициентов интенсивности напряжений, инвариантных интегралов и углов распространения трещин в различных материалах.

Вторая глава посвящена извлечению механических свойств моделируемого материала из молекулярно-динамических расчетов. В ходе серии молекулярно-динамических расчетов в пакете LAMMPS для каждого типа деформирования объемного образца из рассматриваемых материалов были построены зависимости потенциальной энергии от деформации, что позволило автору определить компоненты тензора упругих модулей алюминия и меди. Результатом расчета являются визуализированные упругие свойства монокристаллических алюминия и меди с гранецентрированной кубической решеткой (ГЦК). Приведены объемные распределения модуля Юнга, модуля сдвига и коэффициента Пуассона рассмотренных материалов.

Третья глава содержит результаты атомистического моделирования, нацеленные на вычисление угла направления распространения трещины в условиях смешанного нагружения на примере медной и алюминиевой пластин с центральной трещиной. В главе приводятся детали атомистического моделирования: размеры ячейки моделирования, граничные условия, термодинамические ансамбли, тип термостата, способы создания трещины и способы достижения смешанных форм деформирования в ее вершине. На основе результатов молекулярно-динамического моделирования вычисляются углы направления роста дефекта при смешанных формах деформирования. На следующем этапе полученные результаты молекулярно-динамического моделирования сравниваются со значениями углов направления распространения трещины, вычисленных с помощью классического аналитического решения линейной механики разрушения на основании ряда критериев разрушения, а именно, классического критерия максимального окружного напряжений, критерия минимума функции плотности энергии упругой деформации и деформационного критерия разрушения. Результатами

расчета являются углы распространения центральной трещины в медной пластине в зависимости от параметров смешанных форм деформирования, задающего вид нагружения.

Четвертая глава, содержит результаты проведенного моделирования нагружения пластины со сквозной центральной трещиной и пластины с боковым надрезом расположенными под различными углами к оси приложения нагрузки. Главный акцент данной главы делается на сравнении аналитического решения континуальной механики разрушения, а именно асимптотического решения М. Уильямса, с решением, полученным с помощью молекулярно-динамического моделирования.

Результаты определения полей напряженно-деформированного состояния в рассматриваемых временных диапазонах находятся в качественном соответствии с результатами классической континуальной механики разрушения. Взаимодействие атомов меди и алюминия описано с помощью потенциала внедренного атома. Приведены сравнения полученных результатов молекулярно-динамического моделирования распространения трещины. Получены качественно подобные распределения компонент тензора напряжений для материалов с одинаковым видом симметрии упругих свойств. Найдены значения коэффициентов интенсивности напряжений, T-напряжения и амплитудные коэффициенты слагаемых более высокого порядка в разложении Уильямса для полей напряжений вблизи вершины трещины при нормальном отрыве и смешанных формах деформирования ее берегов. Предлагаемый подход в вычислении коэффициентов слагаемых более высокого порядка в разложении Уильямса классической механики разрушения при молекулярно-динамическом моделировании является одним из пунктов научной новизны. На основе виртуальных экспериментов, выполненных в пакете программ LAMMPS, продемонстрирована возможность вычисления амплитудных коэффициентов членов более высоких порядков.

Проведено сравнение полей напряжений у вершины надреза, полученных в результате атомистического моделирования и теории разрушения механики сплошных сред. На основе проведенного анализа автор делает вывод о том, что механика сплошной среды может быть успешно применена на наноуровне. Наблюдается хорошее соответствие двух рассматриваемых подходов. Показана актуальность традиционной линейной механики в нанометровом диапазоне для упругих режимов деформирования. Полученное разложение полей напряжений в окрестности вершины трещины может быть использовано для построения многомасштабных моделей разрушения, объединяющих процессы и явления на макро-, мезо- и наноуровнях.

В **пятой главе** приводится сравнительное сопоставление результатов конечно-элементных расчетов распространения продольной, окружной и наклонной трещины в трубе, находящейся под действием растягивающей нагрузки и внутреннего давления, с результатами атомистического моделирования одноосного нагружения нанотрубки с наклонной сквозной трещиной. Выполнено имитационное моделирование осевого растяжения трубы со сквозной наклонной трещиной с применением расширенного метода конечных элементов комплекса программ для решения прикладных задач

SIMULIA ABAQUS. Параллельно с конечно-элементным анализом проведено молекулярно-динамическое моделирование растяжения наноскопической трубки со сквозной наклонной трещиной в программном пакете Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator. Моделирование проводилось для монокристаллической меди и монокристаллического алюминия с гранцентрированной кристаллической решеткой на основе потенциала внедренного атома. Размеры макроскопической и наноскопической труб и длины трещин выбирались с позиций геометрического подобия. Результатами расчета являются траектории распространения наклонной трещины в трубе, находящейся под действием осевой растягивающей нагрузки, посредством расширенного метода конечных элементов и с помощью метода молекулярной динамики. Результаты численных экспериментов демонстрируют, что траектории развития трещины, полученные двумя принципиально различными подходами, подобны.

В заключении диссертационной работы сформулированы основные результаты, положения и выводы.

Достоверность результатов диссертации определяется:

- 1) для механики сплошной среды применением классических методов и строгими математическими формулировками;
- 2) для молекулярно-динамического моделирования широко апробированными вычислительными подходами.

Степень достоверности и обоснованности выносимых на защиту положений, выводов и рекомендаций обеспечивается строгостью, в рамках сформулированных допущений, математической постановки и методами решения рассматриваемых краевых задач, совпадением в частных случаях представленных решений с известными в литературе результатами, соответствием данных, полученными автором работы в ходе вычислительного эксперимента, с теоретическими расчетами. Степень достоверности полученных результатов косвенно подтверждается сравнением значений обобщенных коэффициентов интенсивности напряжений, найденных численно методом молекулярной динамики и методом конечных элементов для двух различных конфигураций образцов со сквозными трещинами и боковым надрезом.

Научная новизна заключается в следующем.

1. В диссертационном исследовании впервые описан опыт применения метода молекулярной динамики для анализа полей напряжений в вершине сквозной трещины, находящейся под углом к оси приложения нагрузки.

2. Достигнута ключевая цель исследования, а именно: проведено сравнение континуального и атомистического подходов для оценки полей напряжений вблизи устья надреза на примерах распространенных конфигураций тел с трещинами. Рассмотрены три вида моделей: пластина с центральной трещиной, пластина с боковым надрезом и тонкостенный цилиндр содержащий сквозную трещину.

3. Рассчитаны коэффициенты интенсивности напряжений, T - напряжения и коэффициенты регулярных слагаемых более высокого порядка в

асимптотическом представлении Уильямса для медной пластины с боковым надрезом при нормальном отрыве и смешанном нагружении с помощью дискретного подхода молекулярной динамики и континуального подхода метода конечных элементов.

4. Продемонстрировано, что континуальная теория может описывать поля напряжений и смещений вблизи вершины трещины даже при чрезвычайно ограниченном поле сингулярных напряжений, составляющем всего несколько нанометров. Угловые распределения компонент напряжений при этом извлекаются из атомистического моделирования и сравниваются с угловыми распределениями напряжений континуальной механики линейного упругого разрушения. Сравнение показывает качественное соответствие в рамках оговоренных допущений между двумя принципиально разными подходами.

Теоретическая значимость диссертационной работы состоит в доказательстве возможности применения развитого математического аппарата классической континуальной механики разрушения на наноскопических масштабах: продемонстрировано, что на атомистическом уровне асимптотическое разложение М. Уильямса полей напряжений и перемещений у вершины трещины качественно и количественно описывает механические поля, ассоциированные с вершиной трещины или надреза на атомистических расстояниях от вершины трещины.

Практическая ценность диссертационной работы заключается в том, что предлагаемые вычислительные алгоритмы и подходы могут быть использованы для разработки многоуровневых моделей деформирования и разрушения элементов конструкций, находящихся в сложных эксплуатационных условиях.

Апробация работы, публикации и соответствие паспорту специальности. Основные результаты 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».

Автореферат правильно и полностью отражает содержание диссертации.

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

- п.3. Задачи теории упругости, пластичности и вязкоупругости;
- п.6. Микромеханика, наномеханика, механика дискретных сред;

п.10. Прочность при сложных режимах нагружения. Теория накопления повреждений. Механика разрушения твердых тел;

п.11. Математическое моделирование поведения дискретных и континуальных деформируемых сред при механических, тепловых, электромагнитных, химических, гравитационных и прочих воздействиях;

п.12. Вычислительная механика деформируемого твердого тела.

По диссертации имеются следующие **замечания**.

1. Автор диссертации не придерживается общепринятых норм представления результатов исследований. 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.» С учетом вышесказанного речь может идти только о качественном визуальном подобии траекторий распространения трещины.

2. Представленные в начале четвертой главы асимптотические поля перемещений в области вершины трещины получены для двухмерной задачи о пластине бесконечных размеров содержащей сквозную трещину. Использование подобных методов в пятой главе для задачи о трехмерном полом цилиндра требует дополнительного обоснования.

3. Модельные представления механики трещин, используемые в диссертации, подразумевают задачу равновесия при статическом нагружении методы же молекулярной динамики подразумевают интегрирование по времени. В связи с этим встает вопрос об обоснованности выбора временного отрезка для сравнения полей напряжений и смещений.

4. В списке используемой литературы отсутствуют современные работы Томской (основатель Панин Виктор Евгеньевич), Пермской (Трусов Петр Валентинович) и Казанской (Шлянников Валерий Николаевич) школ.

Сформулированные замечания не влияют на общую положительную оценку диссертации в целом. В настоящее время уже четко сформирована точка зрения, согласно которой крайне важно и естественно разрабатывать многомасштабные и иерархические модели. Сочетание подхода механики сплошных сред и молекулярно-динамического моделирования позволяет получить более глубокое понимание и реалистичное описание поведения процессов деформирования и разрушения при различных системах сложных нагрузок и химических процессов. Представленный в данной диссертационной работе подход обладает широкими перспективами для описания процессов деформирования и разрушения на различных масштабных уровнях.

Заключение по диссертации. Диссертационная работа Беловой О.Н. «Приложения метода молекулярной динамики к задачам механики разрушения и атомистически-континуальное описание процессов разрушения», является законченным 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, Туманов Андрей Владиславович, даю согласие на включение моих персональных данных в аттестационные документы соискателя и их дальнейшую обработку.

Официальный оппонент:


Кандидат технических наук по специальности 01.02.04 Механика деформируемого твердого тела. Ведущий научный сотрудник Испытательной лаборатории ФГБУН Федерального исследовательского центра Казанского научного центра Российской академии наук (ФИЦ КазНЦ РАН).

Контактная информация:

Почтовый адрес: 420111, Российская Федерация, Татарстан, г. Казань, ул. Лобачевского, 2/31

E-mail: tymanoff@rambler.ru

Телефон: +7 9046608601.


09.10.2023

Туманов Андрей Владиславович

