

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по науке

Пермского национального

исследовательского

политехнического университета,

доктор физ.-мат. наук, доцент

Швейкин А.И.

« 17 » _____ 2022 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации

Диссертация «Физически-ориентированная трёхуровневая модель для исследования неупругого деформирования поликристаллов: описание сложного циклического нагружения материалов с различной энергией дефекта упаковки» выполнена на кафедре «Математическое моделирование систем и процессов».

В период подготовки диссертации соискатель Грибов Дмитрий Сергеевич работал в ФГАОУ «Пермский национальный исследовательский политехнический университет», на кафедре «Математическое моделирование систем и процессов» в должности младшего научного сотрудника.

В 2014 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» по направлению «Прикладная математика и информатика».

В 2018 году окончил аспирантуру очной формы обучения федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования Пермского национального исследовательского политехнического университета по направлению Информатика и вычислительная техника (период обучения с «1» октября 2014 по «30» июля 2018 г.), специальность 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Трусов Пётр Валентинович, работает заведующим кафедры «Математическое моделирование систем и процессов».

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

1. Личное участие автора в получении результатов, изложенных в диссертации, заключается в следующем:

Д.С.Грибовым осуществлена (совместно с научным руководителем) концептуальная и математическая постановка поставленной проблемы. Соискателем предложена модификация двухуровневой модели для описания деформирования неупругого деформирования поликристаллов в условиях сложного циклического нагружения материалов с различной энергией дефекта упаковки. К решённым лично автором задачам относится построение замкнутой системы уравнений для описания плотностей дефектов с учётом процессов образования и аннигиляции дислокаций, а также образования барьеров на расщеплённых дислокациях и модификация закона упрочнения, позволяющего явным образом описать влияние плотностей дислокаций и барьеров на величину критических напряжений. Разработанный алгоритм был реализован лично автором в виде программы на ЭВМ. Автором решена задача определения значений параметров модели – проведение процедуры идентификации, а также осуществлена верификация модели. Д.С.Грибовым лично разработана программа и реализован ряд численных экспериментов, показано качественное и количественное соответствие полученных с использованием модели результатов данным натуральных экспериментов.

Все результаты, изложенные в диссертации, получены лично. В публикациях, написанных в соавторстве, список которых приведен в п.5 настоящего Заключения, лично автору принадлежит разработка алгоритмов, реализация их в виде программ для ЭВМ, проведение численных экспериментов, анализ результатов [1-6].

2. Научная новизна диссертационного исследования заключается в следующем:

Произведена модификация двухуровневой конститутивной модели за счет введения дополнительного уровня для описания эволюции плотностей дефектов, что позволило исследовать строение кристаллических материалов с учётом плотностей дефектов кристаллической решётки. Построена замкнутая система эволюционных уравнений для описания изменения плотностей дефектов, включая образование и аннигиляцию дислокаций. Впервые в моделях данного типа было введено явное описание реакций по образованию барьеров Ломера – Коттрелла и Хирта на расщеплённых дислокациях. Сформулирован

закон упрочнения, позволяющий учитывать взаимодействия дислокаций с барьерами различной природы. С использованием разработанной модели была показана возможность объяснить природу явления дополнительного циклического упрочнения в материалах с низкой энергией дефекта упаковки.

3. Степень достоверности результатов проведенных исследований

Достоверность полученных результатов моделирования деформирования поликристаллического агрегата обеспечивается удовлетворительным качественным и количественным соответствием результатов расчетов, полученных с использованием разработанной модели для материалов с различной величиной энергии дефекта упаковки, известным экспериментальным данным по определению величины дополнительного циклического упрочнения при циклическом нагружении по сложным траекториям деформации.

4. Практическая и теоретическая значимость исследования

Модель и программа ее реализации могут быть применены при описании отклика поликристаллических материалов с различной величиной ЭДУ в условиях сложного деформирования (свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2020665918). Следует отметить возможность применения разработанной модели для анализа текущего состояния дефектной микроструктуры (плотности дислокаций по системам скольжения, плотности барьеров Ломера–Коттрелла и Хирта, плотности источников дислокаций) при исследовании процессов обработки металлов и сплавов, что позволяет прогнозировать эксплуатационные характеристики готовых изделий.

5. Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем

По теме диссертационной работы Грибова Дмитрия Сергеевича опубликовано 6 научных работ, в том числе 5 в ведущих рецензируемых изданиях и в изданиях, индексируемых в международных базах цитирования Web of Science и/или Scopus, 1 свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. Основные положения и результаты работы отражены в следующих научных публикациях в журналах, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий, и/или в базы цитирования Web of Science, Scopus:

1. Volegov P.S., Trusov P.V., **Gribov D.S.** Investigation of the features of polycrystals complex loading using a two-level crystal plasticity theory // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2015. –Vol.71 . – № 012071 (6 p.). (**Web of Science, Scopus**)

Приведены концептуальная и математическая постановка задачи, алгоритм реализации модели. Соискателем произведена реализация двухуровневой модели, позволяющей описать упрочнение материалов в ходе сложного циклического деформирования, показано соответствие полученных результатов данным натурных экспериментов.

2. **Грибов Д.С.**, Трусов П.В. Трёхуровневая упруговязкопластическая модель: анализ влияния величины энергии дефекта упаковки на отклик материалов при сложном нагружении // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2020. – №4. – С.60-73. (**Scopus**)

Проанализированы особенности поведения материалов с различной величиной энергии дефекта упаковки. Соискателем выполнена модификация существующей двухуровневой модели: добавлен третий структурный уровень для описания отклика представительного объёма кристаллита с учётом плотностей дефектов, проведён ряд численных экспериментов с использованием разработанной модели.

3. **Gribov D.S.**, Popov F.S., Trusov P.V. Three-level elastic-viscoplastic model: The influence of the evolution of the dislocation substructure on the behavior of polycrystals under complex cyclic loading // AIP Conference Proceedings. –2020. –Vol.2310, Is.1. –020114 (5 p.). (**Scopus**)

В работе представлено развитие трёхуровневой модели для описания отклика поликристаллических материалов. Предложен учёт атомов примеси в законе упрочнения. Соискателем создан алгоритм реализации модели, проведены расчеты и проведен их анализ.

4. Trusov P.V., **Gribov D.S.** The three-level elastoviscoplastic model and its application to describing complex cyclic loading of materials with different stacking fault energies// Materials. – 2022. – Vol.15 (3). – № 760 (17 p.). (**Web of Science, Scopus**)

В работе представлена трёхуровневая модель для описания отклика поликристаллов, основной интерес уделён процедурам идентификации и верификации параметров модели, показаны результаты применения модели для описания отклика представительных объёмов меди и латуни, показаны существенные различия в образуемой микроструктуре (плотностях дислокаций и барьеров). Соискателем выполнены расчеты и анализ их результатов.

5. **Грибов Д.С.**, Трусов П.В. Дислокационно-ориентированная трёхуровневая модель для описания деформирования поликристаллов: структура, алгоритм

реализации, некоторые результаты применения для исследования сложного циклического нагружения// Физическая мезомеханика. – 2022. – Т.25, №4. – С.94-105. (ВАК)

В работе представлено дальнейшее развитие трёхуровневой модель для описания отклика поликристаллов, основной интерес уделён описанию образования источников дислокаций и барьеров на расщеплённых дислокациях. Приведены результаты применения модели для описания отклика представительных объёмов образцов с разной величиной энергии дефекта упаковки, показаны существенные различия в величине дополнительного циклического упрочнения, также зависящее от типа процесса нагружения. Соискателем осуществлена модификация модели в части определения вклада барьеров в упрочнение материала, произведены расчеты, проведен их анализ.

6. **Трусов П.В., Грибов Д.С.** Дислокационно-ориентированная трёхуровневая модель для описания деформирования поликристаллов: структура, алгоритмы реализации, результаты применения для исследования сложного нагружения // Вычислительная механика сплошных сред. – 2022. – Т.15, №3. – С.274-287. (Scopus)

В работе представлено дальнейшее развитие трёхуровневой модель путём введения зёрен – групп одинаково ориентированных кристаллитов. Основной интерес уделён описанию алгоритма реализации модели. Показано соответствие результатов численных экспериментов данным натурных испытаний. Соискателем разработана и реализована программа численных экспериментов по сложному (непропорциональному) циклическому нагружению, получены и проанализированы результаты расчетов.

Свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ и баз данных

1. Трусов П.В., Янц А.Ю., Грибов Д.С., Курмоярцева К.А. «Упруговязкопластическая математическая модель кристаллита с соотношениями в скоростной форме в актуальной конфигурации с учётом эволюции дислокационной структуры» («УВПММ с ЭДС»). – Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2020665918 ОТ 25.11.2020.

Публикации в тезисах докладов и материалах конференций:

1. **Грибов Д.С., Трусов П.В.** Трёхуровневая дислокационно-ориентированная модель: применение для описания процессов сложного деформирования // Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии. Тезисы международной конференции. Томск, 2021. С. 20-21.

2. Gerasimov R.M., Volegov P.S., **Gribov D.S.** Modeling of microcracks and edge dislocations trapping of impurity atoms in Fe-C: md simulation // AIP Conference Proceedings. 29. Сер. "29th Russian Conference on Mathematical Modeling in Natural Sciences" 2021. С. 020003.
3. **Грибов Д.С.** Трехуровневая упруговязкопластическая модель: описание непропорционального циклического нагружения // Математическое моделирование в естественных науках. Тезисы XXIX Всероссийской школы-конференции. 2020. С. 29.
4. **Грибов Д.С., Попов Ф.С., Трусов П.В.** Трехуровневая упруговязкопластическая модель: влияние эволюции дислокационной субструктуры на поведение поликристаллов при непропорциональном циклическом нагружении // Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии. Тезисы докладов Международной конференции 2020. С. 46-47.
5. **Gribov D.S., Popov F.S., Trusov P.V.** Three-level elastic-viscoplastic model: the influence of the evolution of the dislocation substructure on the behavior of polycrystals under complex cyclic loading // AIP Conference Proceedings. Сер. "Proceedings of the International Conference on Physical Mesomechanics. Materials with Multilevel Hierarchical Structure and Intelligent Manufacturing Technology" 2020. С. 020114.
6. **Gribov D.S., Popov F.S., Chechulina E.A., Trusov P.V.** Three-level mathematical model for describing inelastic deformation of alloys: interaction between dislocations and impurity atoms // AIP Conference Proceedings. 28th Russian Conference on Mathematical Modelling in Natural Sciences, RuMoNaS 2019. 2020. С. 040008.
7. **Грибов Д.С., Попов Ф.С., Зубко И.Ю., Чечулина Е.А.** Трехуровневая дискретно - континуальная модель для описания эффекта прерывистой пластичности // XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики. Сборник трудов. В 4-х томах. 2019. С. 1413-1415.
8. **Грибов Д.С., Трусов П.В.** Описание упрочнения моно- и поликристаллов с использованием дислокационно-ориентированной модели // Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций. XII международная конференция: Сборник материалов. 2018. С. 99-100.

9. Котельникова Н.В., Грибов Д.С., Волегов П.С. К описанию упрочнения при неупругом деформировании монокристаллов: учет дислокационных барьеров // Высокие технологии в современной науке и технике. Сборник научных трудов VI Международной научно-технической конференции молодых ученых, аспирантов и студентов. Под редакцией А.Н. Яковлева. 2017. С. 358-359.
10. Грибов Д.С., Трусов П.В. Модель для описания пластического деформирования с учетом взаимодействия дефектов кристаллической решетки // Современные технологии и материалы новых поколений. сборник трудов международной конференции с элементами научной школы для молодежи. Национальный исследовательский Томский политехнический университет. 2017. С. 38-39.
11. Грибов Д.С., Чечулина Е.А. Многоуровневые модели пластического деформирования: описание дислокационных взаимодействий // XI Международная конференция "Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций". Сборник материалов. 2017. С. 79-80.

6. Соответствие содержания диссертации специальности, по которой она рекомендуется к защите

Диссертация «Физически-ориентированная трёхуровневая модель для исследования неупругого деформирования поликристаллов: описание сложного циклического нагружения материалов с различной энергией дефекта упаковки» Грибова Дмитрия Сергеевича соответствует специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» по физико-математическим наукам.

7. Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем

В работах, опубликованных соискателем и представленных в п. 5 настоящего Заключения, материалы диссертации изложены полно.

Диссертация Грибова Дмитрия Сергеевича отвечает требованиям «Положения о присуждении ученых степеней» постановления Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 № 842 (в редакциях от 21.04.2016 № 335 и 12.10.18 № 1168), требованиям «Порядка присуждения ученых степеней в ПНИПУ», предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Диссертация «Физически-ориентированная трёхуровневая модель для исследования неупругого деформирования поликристаллов: описание сложного

циклического нагружения материалов с различной энергией дефекта упаковки» Грибова Дмитрия Сергеевича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Заключение принято на заседании кафедры «Математическое моделирование систем и процессов» Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет».

Присутствовало на заседании 13 чел. Результаты голосования: «за» – 13 чел., «против» – 0 чел., «воздержалось» – 0, протокол № 6 от «7» октября 2022г.

«» Останина Татьяна Викторовна
Зам. зав. кафедры «Математическое моделирование систем и процессов» Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет»

«» Няшина Наталья Дмитриевна
Секретарь кафедры «Математическое моделирование систем и процессов» Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет»