

«УТВЕРЖДАЮ»

проректор по научной и

исследовательской деятельности

Южного федерального университета,

доктор химических наук

А.В. Метелица

«12» мая 2022 г.



ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного автономного образовательного учреждения
высшего образования «Южный федеральный университет»

о диссертации Фроловой Ксении Петровны

«Анализ влияния микроструктуры деформируемого тела на характеристики
массопереноса», представленной на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук по специальности 1.1.8 (ранее 01.02.04) –
Механика деформируемого твердого тела

Актуальность темы диссертации

Наличие структурных неоднородностей в материале оказывает непосредственное влияние на накопление и распределение в нем примесей, что в конечном счете может изменить механические свойства и поведение композита под нагрузкой. Деградация механических свойств современных конструкционных материалов со сложной внутренней структурой зачастую наблюдается даже при общем малом содержании вредных примесей, но при значительном локальном увеличении концентрации. Для прогнозирования поведения композитов в таких ситуациях необходимо развитие существующих подходов, учитывающих совокупное влияние различных микроструктурных параметров. В связи с этим диссертационная работа Фроловой К.П., посвященная развитию моделей, интегральным образом учитывающих влияние микроструктуры на массоперенос в деформируемом твердом теле, представляется актуальной.

В диссертации определяются характеристики массопереноса и моделируется процесс диффузии с учетом структурных особенностей материала. Для учета влияния фиксированной микроструктуры в диссертации используются и развиваются существующие методы микромеханики. Описание размерных эффектов, проявляющихся на масштабах, сопоставимых с размером структурной неоднородности, реализовано в рамках микрополярной теории. Применение двух подходов к учету микроструктуры и установление взаимосвязи между микроструктурой и характеристиками массопереноса позволило описать ряд эффектов, связанных с локальным увеличением концентрации диффундирующего вещества в материале с неоднородной микроструктурой, что в перспективе способствует уточнению прогноза ресурса деталей конструкций.

Структура и содержание диссертационной работы

Диссертационная работа Фроловой К.П. состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы из 174 наименований. Работа изложена на 198 страницах и содержит 34 рисунка и 5 таблиц.

Во введении обоснована актуальность темы диссертационного исследования, сформулированы цели и задачи работы, описаны методы исследования, отмечены значимость работы и научная новизна, сформулированы основные положения, выносимые на защиту, обоснована достоверность полученных результатов, описан личный вклад автора, приведены сведения об апробации работы и публикациях автора по теме диссертационного исследования.

Первая глава посвящена определению эффективных диффузионных и упругих свойств материалов со сфероидальными неоднородностями с заданным распределением по ориентациям. Используется предложенный И. Севостьяновым и М.Л. Качановым подход, при котором макроскопические свойства определяются в терминах тензоров вклада, отражающих совокупное влияние физических свойств фаз композита и геометрии микроструктуры. Для учета сегрегации (скачка концентрации диффундирующего вещества на

границе раздела фаз) при определении эффективной диффузионной проницаемости материала в работе обобщаются методы эффективного поля, приведены границы известных вилок Фойгта-Рейсса и Хашина-Штрикмана. Полученные в работе аналитические выражения могут быть использованы для определения эффективных диффузионных свойств широкого класса двухфазных композитов. На основании выведенных формул в диссертации определяются эффективные диффузионные свойства трансверсально-изотропного и изотропного на макроуровне пористого материала с учетом сегрегации. С помощью схемы Максвелла в работе определяются эффективные упругие характеристики материала с характерными микротрещинами и порами, возникающими при водородной деградации. В рамках используемых подходов в диссертации установлены перекрестные соотношения между эффективными упругими и диффузионными свойствами, определяемыми общими микроструктурными параметрами, что позволяет находить одни характеристики через другие при отсутствии полной информации о внутренней структуре материала. При этом показана ограниченность применимости данных соотношений, связанная с тем, что наличие сегрегации оказывает влияние только на диффузионные свойства материала, в результате чего соотношения существенно зависят от параметра сегрегации, задающего скачок концентрации на границе раздела фаз. Полученные в главе результаты не противоречат имеющимся в литературе экспериментальным данным и результатам численного моделирования.

Вторая глава посвящена моделированию поверхностного эффекта в рамках линейной микрополярной теории упругости. Под поверхностным эффектом в данной главе понимается существенно неоднородное напряженно-деформированное состояние, связанное с наличием взаимодействия структурных неоднородностей, в частности, зерен, которое учитывается посредством введения моментных взаимодействий между частицами среды на макроуровне. Решается частная краевая задача для длинного цилиндра при задании на боковой поверхности неклассического

статического или кинематического граничного условия, моделирующего наличие реально наблюдаемых разворотов поверхностных зерен. Получено приближенное аналитическое решение типа пограничного слоя, которое сравнивается с численным, полученным с помощью разработанного в диссертации метода. Предполагается, что возникновение поверхностного слоя, характеризующегося дополнительными напряжениями и деформациями, впоследствии может стать причиной существенно неоднородного распределения диффундирующего вещества и его накопления вблизи поверхности, что наблюдается в частности, при насыщении стальных изделий водородом. При этом построенное в работе напряженно-деформированное состояние поверхностного слоя толщиной порядка характерного размера зерна позволяет, вообще говоря, описывать связанные с наличием структурных неоднородностей поверхностные эффекты различной природы. В работе на основании использования известных из литературы критериев пластичности типа Мизеса для микрополярных сред показано, что вблизи поверхности интенсивность напряжений значительно превышает предел текучести, что может привести к локализованной пластической деформации при общем упругом поведении материала.

Третья глава посвящена моделированию диффузии в деформируемом твердом теле с неоднородной микроструктурой, учитываемой в рамках микромеханики и микрополярной теории. В рамках двух подходов к учету микроструктуры устанавливается взаимосвязь между внутренней структурой материала и характеристиками массопереноса, что позволяет расширить область применимости существующих моделей диффузии. В первом случае в выражении для диффузионного потока анализируются эффективные характеристики материала, определенные в первой главе с помощью методов микромеханики. Моделируется процесс диффузии в пористом материале. Во втором случае учитывается зависимость диффузионного потока от напряженно-деформированного состояния, определенного во второй главе в рамках микрополярной теории. Моделируется диффузия в приповерхностной

области. С помощью разработанных в диссертации численных методов решаются задачи массопругости и диффузии для длинного цилиндра при поддержании на боковой поверхности постоянной концентрации. Разработанные подходы позволили описать локальное увеличение концентрации примеси в материале, что может привести к преждевременному выходу из строя элемента конструкции. Полученные результаты согласуются с наблюдаемыми экспериментальными явлениями при диффузии водорода. В частности, модель диффузии в пористом материале с неоднородным распределением несплошностей может быть применена при описании диффузии водорода в металлах. Модель диффузии с учетом влияния напряжений в поверхностном слое позволила описать малоисследованный поверхностный эффект при насыщении стальных изделий водородом, при котором практически вся примесь сосредоточена в тонком поверхностном слое порядка нескольких десятков микрон. Результаты моделирования качественно и количественно согласуются с экспериментальными данными.

В заключении приведены основные результаты работы и сформулированы выводы.

Автореферат в полной мере соответствует содержанию диссертации, корректно и достаточно полно отражает ее основные положения и результаты.

Основные результаты исследования и их научная новизна

Научную новизну представляют следующие основные результаты:

1. Определен вклад изолированной сфероидальной неоднородности в диффузионную проницаемость материала при наличии сегрегации – скачка концентрации на границе раздела фаз композита, являющегося частным случаем неидеального контакта. Методы гомогенизации обобщены для учета сегрегации при определении эффективных диффузионных свойств композита, состоящего из изотропной матрицы и изотропных неоднородностей с заданным распределением.

2. С учетом сегрегации определены эффективные коэффициенты диффузии в трансверсально-изотропном пористом материале, анизотропия которого обусловлена геометрией микроструктуры.

3. Разработан подход для описания поверхностных эффектов, связанных с наличием структурной неоднородности материала, основанный на полученном в рамках микрополярной теории упругости решении краевой задачи об определении напряженно-деформированного состояния длинного цилиндра при задании на боковой поверхности распределенного момента или микроповоротов.

4. В рамках микромеханики и микрополярной теории установлена взаимосвязь между микроструктурой материала и характеристиками массопереноса, на основании чего существующие модели диффузии уточнены для описания переноса примеси в твердом теле с неоднородной микроструктурой. Разработаны численные методы для решения связанных задач об определении напряженно-деформированного состояния длинного цилиндра и распределения диффундирующего вещества с учетом неоднородной микроструктуры в рамках двух подходов.

5. Разработаны основанные на применении методов микромеханики в рамках микрополярной среды подходы для описания локального увеличения концентрации диффундирующего вещества в деформируемом твердом теле с неоднородной микроструктурой. В частности, смоделирован поверхностный эффект при диффузии водорода в сталях.

Достоверность результатов диссертации

Достоверность полученных результатов обеспечивается адекватностью выбора методов исследования физических явлений, корректностью математической постановки задач, строгостью используемого математического аппарата, выполнимостью предельных переходов к известным из литературы решениям, непротиворечивостью полученных результатов известным представлениям о физически наблюдаемых явлениях,

качественным и количественным соответствием теоретических результатов имеющимся экспериментальным данным.

Значимость работы для науки и практики

В работе развиты континуальные подходы к учету микроструктуры материала при описании массопереноса. Обобщенные в диссертации для учета скачка концентрации на границе раздела фаз композита методы гомогенизации могут быть применены для определения эффективной диффузионной проницаемости широкого класса материалов. В рамках микромеханики и микрополярной теории установлена взаимосвязь между микроструктурой материала и такими характеристиками массопереноса, как коэффициент диффузии и связанные с напряженно-деформированным состоянием термодинамические силы, инициирующие дополнительные потоки диффундирующего вещества, что расширяет область применимости существующих моделей диффузии. Описано и проанализировано явление локального увеличения концентрации, что имеет принципиальное значение при исследовании водородной деградации металлов и сплавов. В частности, смоделирован малоисследованный поверхностный эффект, наблюдаемый экспериментально при насыщении стальных изделий водородом и влияющий на механизмы водородной деградации.

Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации

Полученные в диссертации результаты могут быть использованы в Институте проблем машиноведения РАН, Институте механики сплошных сред УрО РАН, Южном научном центре РАН, Санкт-Петербургском политехническом университете Петра Великого, Санкт-Петербургском государственном университете, Южном федеральном университете, Донском государственном техническом университете и в других учреждениях Российской академии наук, высших учебных заведениях и прочих организациях, занимающихся разработкой и исследованием материалов со сложной внутренней структурой.

Апробация работы

Все основные положения диссертации в достаточной мере отражены в опубликованных работах. Всего по материалам диссертации опубликовано 13 работ, в том числе 8 работ в изданиях, рекомендованных ВАК РФ. Работа прошла апробацию на всероссийских и международных научных конференциях, а также на семинарах российских и одного зарубежного ВУЗов.

По работе имеются следующие замечания

1. При моделировании плотности распределения неоднородностей использована функция (1.1.2), вместе с тем, видимо, могут быть использованы и другие законы. Из диссертации неясно, каким образом выбор закона влияет на окончательные результаты по определению осредненных характеристик.
2. Введение постоянного коэффициента сегрегации согласно равенства (1.1.4) накладывает весьма сильные ограничения на концентрационное поле, которое на границе раздела имеет разрывы и у функции и нормальной производной. Может оказаться, что краевая задача перестанет иметь решение при некоторой форме границы раздела. Скорее всего, коэффициент сегрегации должен зависеть от координат.
3. В соотношениях (2.1.9) введен параметр N , который играет важную роль в описании погранслоного решения. К сожалению, в значительной части работы рассматривается случай $N=1$, при котором большинство используемых соотношений теряет смысл (например, касательные напряжения (2.2.11), уравнения (2.2.14)). Согласно (2.15) параметр N всегда меньше 1, за счет чего можно его полагать равным 1, из текста диссертации неясно.
4. Помимо аналитического решения в задаче для цилиндра построено численное решение на основе разностной схемы. Неясно, каким образом осуществлялась верификация предложенной расчетной схемы.
5. В задаче для цилиндра строится решение задачи типа Сен Венана в моментной теории, имеющее погранслоный характер в окрестности радиальной границы. Вместе с тем отметим, что погранслоный характер решения задачи для цилиндра наблюдается и у торцов. Желательно было бы определить соотношение показателей в погранслоных решениях.
6. Из постановки задачи для цилиндра неясно: 1. каким образом можно приложить распределенный момент на боковой границе цилиндра; 2. каков

характер нагружения цилиндрических образцов, при котором концентрация минимальна или вообще отсутствует.

7. Имеется ряд технических замечаний

7.1. на с. 31 имеются обозначения для эллиптических интегралов (неясно, какого типа, от каких аргументов), неполная конкретизация появляется несколько ниже

7.2. на с. 139 имеется текст «модули упругости могут зависеть от радиальной координаты», однако на этой же странице приведены уравнения, в которых модули постоянны (3.1.24)

Вместе с тем отметим, что сделанные замечания скорее носят характер пожеланий и не влияют на положительную оценку работы. Диссертационная работа Фроловой К.П. «Анализ влияния микроструктуры деформируемого тела на характеристики массопереноса» вносит вклад в развитие механики деформируемого твердого тела в части развития подходов механики сплошных сред к учету влияния микроструктуры на процесс массопереноса посредством введения микроструктурных параметров и дополнительных степеней свободы частиц среды. Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, выполненную на высоком научном уровне. Тема и содержание диссертации соответствуют паспорту специальности 1.1.8 (ранее 01.02.04) – «Механика деформируемого твердого тела». Диссертационная работа отвечает всем требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 (с изменениями и дополнениями), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор Фролова Ксения Петровна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по указанной специальности.

Отзыв подготовлен доктором физико-математических наук (01.02.04) профессором, заведующим кафедрой теории упругости Института математики, механики и компьютерных наук им. И. И. Воровича Южного федерального университета Ватульяном Александром Ованесовичем (344090, г. Ростов-на-Дону, ул. Мильчакова, 8а Институт математики, механики и компьютерных наук им. И.И. Воровича тел. 8-918-58-96-075, e-mail aovatulyan@sfsu.ru)

Отзыв обсужден и утвержден на заседании кафедры теории упругости
Института математики, механики и компьютерных наук им. И. И. Воровича
Федерального государственного автономного образовательного учреждения
высшего образования «Южный федеральный университет» 6 мая
2022г(голосование единогласное), протокол № 7.

Заведующий кафедрой теории упругости
Института математики, механики и компьютерных
наук им. И. И. Воровича
Южного федерального университета,
профессор, доктор физико-математических наук



Ватульян Александр Ованесович

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Личную подпись <u>Ватульян А.О.</u>
ЗАВЕРЯЮ:
Ведущий специалист по управлению персоналом <u>М.И. Подшивалова</u>
<u>6</u> мая 20 <u>22</u> г.