

Отзыв официального оппонента на диссертацию А.С. Семенова
«Многоуровневые модели сегнетоэлектродупругих материалов и их
применение при решении краевых задач», представленную на соискание
ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.1.8
– Механика деформируемого твердого тела

В последние годы наблюдается неуклонный рост интереса к так называемым «умным» (или смарт) материалам, все более широко используемым в элементах различных ответственных конструкций; к их числу относятся весьма перспективные сегнетоэлектродупругие материалы. Проектирование подобных конструкций на основе чисто эмпирического подхода представляется чрезвычайно ресурсоемким (как с точки зрения материальных, так и временных затрат). В современных условиях решение подобных проблем немыслимо без использования методов и подходов, основанных на математическом моделировании, включающем постановку и решение краевых задач механики деформируемого твердого тела. Важнейшим компонентом таких моделей являются определяющие соотношения (конститутивные модели), отражающие физико-механические свойства материалов. Поскольку последние практически полностью определяются мезо- и микроструктурой материалов, в настоящее время для описания их поведения наиболее перспективным представляется использование многоуровневых физически-ориентированных моделей. В связи с вышесказанным тема, выбранная соискателем для исследования, является весьма **актуальной**.

О **научной новизне** диссертационной работы свидетельствует разработанная в рамках многоуровневого подхода новая комплексная модель для описания поведения поликристаллических и монокристаллических сегнетоэлектродупругих материалов с учетом эволюции их мезо- и микроструктуры и соответствующий математический аппарат ее реализации, а также полученные с помощью разработанной модели объяснение ряда физико-механических эффектов поведения рассматриваемых материалов.

Практическая значимость работы заключается в возможности применения разработанной модели (включая алгоритмы и комплекс программ ее реализации) для анализа напряженно-деформированного состояния в процессе эксплуатации и проектирования изделий из сегнетоэлектрoупругих материалов.

Достоверность результатов работы подтверждается удовлетворительным соответствием данных, полученных с применением созданной автором модели с результатами, полученными другими методами, в том числе – экспериментальными.

Основные результаты работы доложены и обсуждены на множестве Международных и Всероссийских конференциях, представлены в 45 публикациях автора (в том числе 16 – в изданиях, входящих в международные базы цитирования Web of Science и Scopus). **Автореферат соответствует** и достаточно полно отражает содержание **диссертации**.

Диссертационная работа состоит из введения, 6 глав, заключения, списка использованной литературы (515 источников) и 6 приложений. Во введении обосновывается актуальность, научная новизна и достоверность результатов работы, приведены основные положения, выносимые на защиту, данные о диссертации, апробации и публикациях соискателя по теме работы.

В первой главе приведены общие сведения об областях практического применения сегнетоэлектрoупругих материалов, а также некоторых проблемных аспектах при эксплуатации изделий из этих материалов, на решение части из отмеченных проблем и ориентирована предлагаемая работа. Приведена классификация пьезоэлектриков, описаны свойства и строение сегнетоэлектрoупругих материалов; рассмотрены изменения кристаллического строения при электрических и механических воздействиях, формирования доменной структуры. Отдельный параграф посвящен обзору имеющихся в литературе результатов экспериментальных исследований различных сегнетоэлектриков при различных условиях испытаний (включая комбинированное нагружение электрическим полем и механическим воздействием). В следу-

ющем параграфе приведен обзор математических моделей, используемых для описания поведения материалов рассматриваемого класса. Выделены две основные группы моделей – феноменологические и микроструктурные, отмечаются их достоинства, недостатки и области применимости. В моделях первой группы значительное внимание уделяется формулировке определяющих соотношений (связи поляризации с напряженностью электрического поля), основанной на термодинамическом подходе. Модели второй группы в значительной степени опираются на аналоги, используемые в физических теориях пластичности. В заключительном параграфе главы подробно обсуждаются балансовые уравнения механики деформируемого твердого тела и электростатики, приведена постановка связанной краевой задачи электромеханики, на основе термодинамического подхода сформулированы определяющие соотношения.

Детальное изложение многоуровневой модели для описания поведения сегнетоэлектриков содержится в главе 2. Приведен подробный вывод соотношений микроструктурной конститутивной модели для описания поведения кристаллитов как совокупности доменов, основанный на термодинамическом подходе; отдельно рассматриваются соотношения для бездефектного и дефектного (как с неизменной, так и эволюционирующей дефектной структурой) монокристаллов. Отдельный параграф главы посвящен анализу феноменологических определяющих соотношений, основанных на так называемой концепции стандартного материала и квазиравновесной термодинамике; рассмотрены модели поликристаллических материалов при отсутствии и наличии (изменяющихся и неизменных) дефектов.

В главе 3 подробно рассматриваются итерационные методы решения нелинейных краевых задач исследования поведения сегнетоэлектростатических материалов. Обосновывается введение векторно-потенциальной вариационной формулировки обобщенного (слабого) решения. Приведена постановка краевой задачи в классической (дифференциальной) и векторно-потенциальной формулировках, введены дополнительные условия, обеспечивающие един-

ственность решения задачи. Рассмотрена конечно-элементная формулировка краевой задачи сегнетоэлектрoупругости. Описан алгоритм решения нелинейной задачи, основанный на методе «возвратного отображения». Для реализации разработанной автором модели создан собственный конечно-элементный пакет программ PANTOCRATOR; приведены результаты решения ряда тестовых задач, полученные с использованием указанного пакета.

Глава 4 посвящена анализу и верификации (с использованием экспериментальных данных) конститутивных моделей (микроструктурных и феноменологических) для описания поведения представительного объема (ПО) сегнетоэлектрoупругого материала. Для микроструктурных моделей приведены результаты исследования влияния на отклик материала количества кристаллитов в ПО, их разбиений на конечные элементы, выбора типа эволюционных уравнений для описания процессов переключения. Детально анализируется влияние параметров модели на изменение отклика материала при различных режимах нагружения. Сопоставление результатов расчетов (при использовании моделей одно- и двухфазного материалов), теоретических и экспериментальных данных других авторов для различных программ нагружений демонстрируют удовлетворительное соответствие. Проведена верификация предложенного варианта склерономной модели сегнетоэлектрoупругого трансверсально-изотропного материала с квадратичным критерием переключения; показано удовлетворительное соответствие результатов расчетов экспериментальным данным для простых или близких к ним нагружений. Отмечается предпочтительность применения микроструктурных моделей для случаев многоосного сложного нагружения.

В главе 5 рассмотрено поведение сегнетоэлектрoупругих материалов вблизи морфотропной фазовой границы. Определены направления экстремальных значений остаточных деформаций и поляризации для различных типов решеток. С использованием этих данных определяются максимальные значения остаточных деформации и поляризации для морфотропных границ с различным сочетанием концентраций различных фаз. С помощью реологи-

ческой структурной модели оценивается взаимовлияние кристаллитов на остаточные поляризацию и деформацию; качественный анализ осуществляется на примере бикристалла, для рассмотрения поликристалла применяется конечно-элементная модель. Приведены результаты исследования с помощью реономной микроструктурной модели экстремальных остаточных деформации и поляризации в поликристаллическом образце из смеси тетрагональной и ромбоэдрической фаз в зависимости от их концентрации; анализируется влияние на экстремальные свойства параметров каждой из фаз.

Глава 6 посвящена анализу влияния на поведение сегнетоэлектродупругих материалов различных дефектов. Описано влияние точечных дефектов (вакансий и межузельных атомов, в том числе – легирующих добавок) на деградацию механических и сегнетоэлектрических свойств. С использованием микроструктурной модели исследовано поведение поли- и монокристаллических материалов с тетрагональной, ромбоэдрической и орторомбической структурой (как бездефектные, так и с дефектами различного типа) при различных программах нагружения электрическими и механическими воздействиями. Показано удовлетворительное соответствие результатов расчетов экспериментальным данным. Приведены результаты детального исследования чувствительности модели к выбору параметров моно- и поликристаллического материала для случаев изменяющейся (в процессе нагружения) и неизменной дефектной субструктуры. Проанализировано влияние ориентации дефектов на вид петли диэлектрического гистерезиса моно- и поликристаллов; отмечается необходимость учета изменяемости дефектов для более адекватного воспроизведения поведения сегнетоэлектриков наблюдаемому в экспериментах отклику.

В Заключение приведены основные результаты диссертационной работы. В приложениях содержатся некоторые дополнительные сведения и аналитические решения ряда задач, используемые при построении моделей рассматриваемых материалов.

Замечания по работе.

1. Сомневаюсь, что непосредственно из принципа максимума диссипации можно получить определяющее соотношение (см. стр. 9). Для этого надо сконструировать функцию диссипации, а это обычно делается «обратным ходом»: вначале определяется вид определяющего соотношения, по которому устанавливается функция, действием на которую тем или иным оператором (чаще всего – дифференцирования) можно получить искомое определяющее соотношение.
2. Можно ли об опытах, описанных на стр. 47-49, говорить, как о многоосных? Аналогичные опыты проводят по механическому нагружению предварительно текстурированных материалов (например, листовых материалов, полученных прокаткой): вырезаются образцы под различными углами по отношению к направлению прокатки, но при этом никто не говорит о многоосных испытаниях.
3. Введенные на стр. 113 операции осреднения требуют пояснений. Если рассматривать только механическую часть (соотношения (2.1), (2.2)), то для такого осреднения в общем случае не выполнится согласованность по энергии деформации (осредненная энергия не равна энергии осредненных полей), дополнительно требуется либо однородность одного из этих полей, либо, по крайней мере, некоррелированность полей напряжений и деформаций, а обосновать ее едва ли возможно.
4. Каким образом предполагается определять такое значительное число параметров, входящих в соотношения конститутивных моделей (см. п. 2.1)?
5. В значительной части работы определяющие соотношения сегнетоэластопластического материала формулируются по аналогии с соотношениями теории пластического течения. Насколько оправдана такая аналогия с позиций физики? Все-таки физические механизмы индивидуальных атомарных перестроек и эволюции коллективных изменений дислокационных субструктур существенно отличаются.

6. Чем обусловлен выбор тестовых задач, представленных в п. 3.4? Как представляется, этот выбор должен быть связан с особенностями строения и предсказанного (из физических соображений, экспериментальных данных) вида решений для реальных задач, которые предполагается решать с использованием разработанного инструментария.

Указанные замечания не умаляют значимости полученных результатов и не снижают общей положительной оценки работы. Диссертация составляет завершённую научно-квалификационную работу, в которой на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение. Полученные в ней новые и оригинальные результаты представляют большой теоретический и практический интерес и могут служить методическим материалом для научных и инженерно-технических работников, а также могут быть использованы в учебном процессе в высших учебных заведениях.

Заключение по диссертации.

Диссертационная работа А.С. Семенова «Многоуровневые модели сегнетоэлектродупругих материалов и их применение при решении краевых задач» вносит значительный вклад в решение крупной научной проблемы механики деформируемого твёрдого тела в части разработки подходов описания необратимых процессов деформирования и поляризации сегнетоэлектродупругих сред с учетом различных структурных уровней, многофазного состава и эволюции дефектов.

Диссертационная работа является завершённым научным исследованием, выполненным на высоком научно-методическом уровне, соответствует паспорту специальности 1.1.8 (ранее 01.02.04) – «Механика деформируемого твёрдого тела» и имеет важное научное значение и практические приложения.

Работа отвечает всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени доктора наук Положением о порядке присуждения ученой степени доктора наук в соответствии с Положением о порядке при-

суждения ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 года (в редакции от 28.08.2017 года), а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.1.8 (ранее 01.02.04) – «Механика деформируемого твердого тела».

Официальный оппонент:

Заведующий кафедрой математического моделирования систем и процессов ПермНИПУ, Заслуженный деятель науки РФ, д.ф.-м.н., профессор



/ П.В. Трусов /

Трусов Петр Валентинович, д.ф.-м.н. (специальность 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела), 614990, г. Пермь, Комсомольский проспект, 29, Пермский национальный исследовательский политехнический университет.

Сл.т. (342)2391297, электронная почта tpv@matmod.pstu.ac.ru

30.05.2022

Я, Трусов Петр Валентинович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации Семенова Артема Семеновича, и их дальнейшую обработку.



/П.В.Трусов /



Подпись

Трусов П.В.

ЗАВЕРЯЮ:

Заместитель секретаря ПНИПУ

В.И. Макаревич

30.05.2022г.