

Компьютерное имитационное моделирование роста трещины с помощью метода молекулярной динамики

Л.В. Степанова¹, С.А. Бронников¹

¹Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

Аннотация. В работе выполнено детальное изучение процессов нелинейного деформирования и разрушения с помощью вычислительного компьютерного имитационного эксперимента. Среди современных подходов моделирования роста трещины особыми преимуществами обладает метод молекулярной динамики, широко используемый в настоящее время. Проведено моделирование роста трещины в образцах из кристаллической меди и алюминия при смешанном деформировании в полном диапазоне смешанных форм нагружения от чистого нормального отрыва (тип I) до чистого поперечного сдвига (тип II). Перспективным представляется использование пакета LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator).

1. Введение

Детальное изучение процессов нелинейного деформирования и разрушения и нелинейных математических моделей, описывающих эти процессы, как правило, проводится с помощью вычислительного компьютерного имитационного эксперимента [1-9]. Среди современных подходов моделирования роста трещины особыми преимуществами обладает метод молекулярной динамики, широко используемый в настоящее время [1-3]. Целью настоящего исследования является моделирование роста трещины в образцах из кристаллической меди и алюминия при смешанном деформировании в полном диапазоне смешанных форм нагружения от чистого нормального отрыва (тип I) до чистого поперечного сдвига (тип II). Перспективным представляется использование пакета LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator).

В работе выполнено моделирование развития центральной трещины конечной длины в пластине в условиях смешанного нагружения в полном диапазоне смешанных форм деформирования от чистого нормального отрыва до чистого поперечного сдвига посредством метода молекулярной динамики в пакете LAMMPS. Получены и проанализированы траектории развития дефекта при различных формах смешанного нагружения. Рассмотрены эффекты воздействия температурного поля: моделирование с помощью метода молекулярной динамики проводилось при различных температурах от нуля градусов по шкале Кельвина до 150 градусов. Выполнено сопоставление результатов, полученных с помощью метода молекулярной динамики, с макроскопическими оценками направлений развития трещины при различных формах смешанного нагружения пластины с центральной трещиной в изотропном линейно упругом материале. Углы направления роста трещины были рассчитаны по трем критериям: критерий максимального тангенциального напряжения, критерий минимума

плотности энергии деформаций и критерий максимальной окружной деформации. Углы, под которыми трещина развивается при действии различных систем нагружения, совпадают с результатами линейной механики разрушения в том случае, если пользоваться критериями роста трещины, основанными на критерии минимума плотности энергии деформаций и многопараметрическом представлении поля напряжений, базирующимся на разложении М. Уильямса механических полей. Предложена и применена методика вычисления параметра смешанности нагружения в случае применения метода молекулярной динамики. Приведены результаты численного расчета, выполненного в программном комплексе LAMMPS, проведенного с применением различных потенциалов взаимодействия (потенциал Леннард – Джонса, потенциал внедренного атома (EAM)).

На основе проведенного вычислительного моделирования смешанного нагружения пластины с центральной трещиной можно заключить, что моделирование роста трещины с помощью метода молекулярной динамики является мощным и действенным средством понимания процессов разрушения и деформирования твердых тел с дефектами. Перспективным направлением дальнейших исследований является создание многоскейлинговых моделей разрушения на различных масштабных уровнях, что даст возможность более глубокого понимания механизмов разрушения и реалистичного описания процесса роста трещины при сложных условиях нагружения.

2. Моделирование роста трещины методом молекулярной динамики

Результаты вычислений приведены на рис. 1-4. Процесс распространения трещины в условиях смешанного нагружения в монокристаллической меди при нулевой температуре (24 пс и 40 пс) показан на рисунках 1 и 2. Процесс распространения трещины в условиях смешанного нагружения в монокристаллической меди при температуре 77K (50 пс и 60 пс) показан на рисунках 3 и 4.

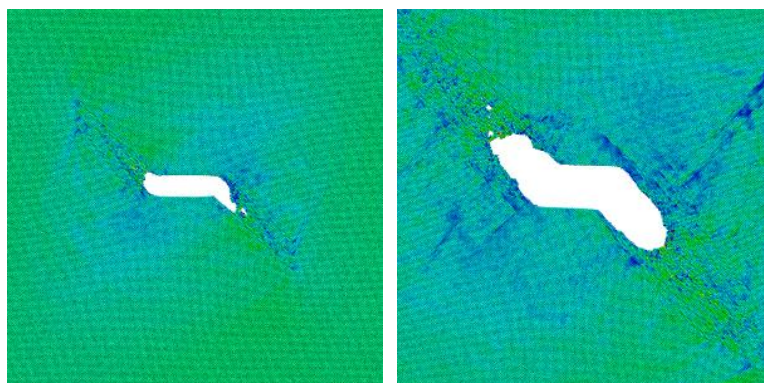


Рисунок 1. Процесс распространения трещины в условиях смешанного нагружения в монокристаллической меди при нулевой температуре (24 пс и 40 пс).

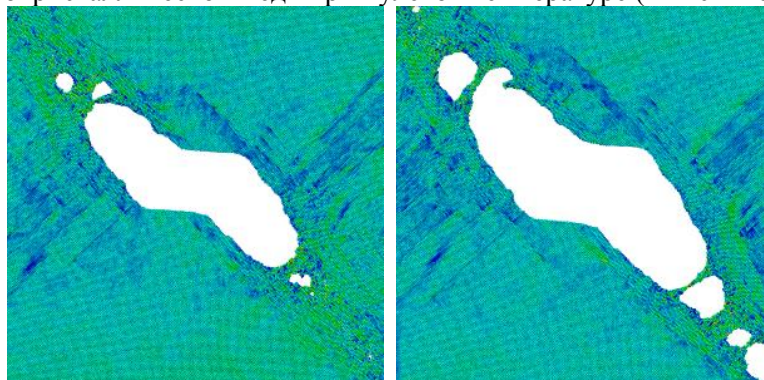


Рисунок 2. Процесс распространения трещины в условиях смешанного нагружения в монокристаллической меди при нулевой температуре (50 пс и 60 пс).

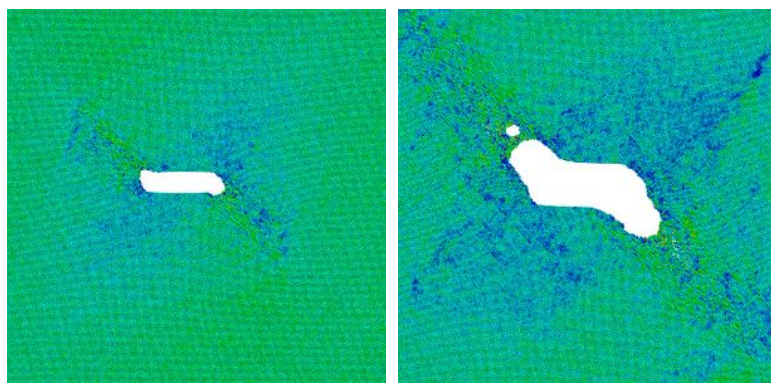


Рисунок 3. Процесс распространения трещины в условиях смешанного нагружения в монокристаллической меди при температуре 77K (24 пс и 40 пс).

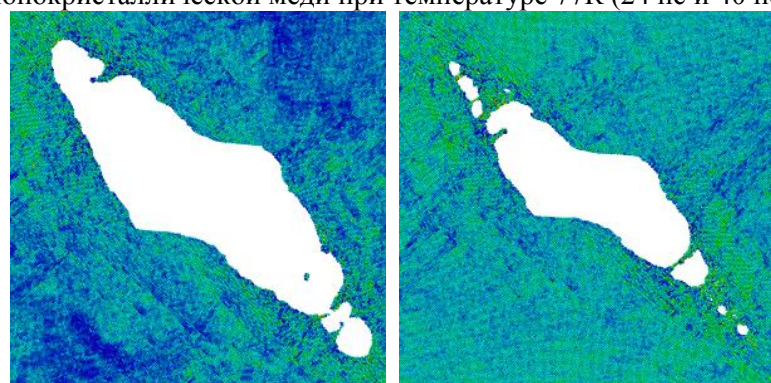


Рисунок 4. Процесс распространения трещины в условиях смешанного нагружения в монокристаллической меди при температуре 77K (50 пс и 60 пс).

Выполнено моделирование процесса распространения трещины в условиях смешанного нагружения и нормального отрыва в двух материалах: в меди с гранецентрированной плотной упаковкой (hcr-медь) и алюминии с fcc кристаллической решеткой. Для расчётов использовалась модель hcr-меди (гранецентрированная плотная упаковка, ГПУ) с ориентацией слоёв вдоль плоскости ху. Разница удельной потенциальной энергии между hcr и fcc медью составляет 0.004 эВ, исходя из квантовомеханических расчётов. В моделях присутствовали от 60000 до 300000 атомов одновременно. Распределения напряжений в медной пластине (на рисунках 5-7 приведено распределение компоненты σ_{22}).

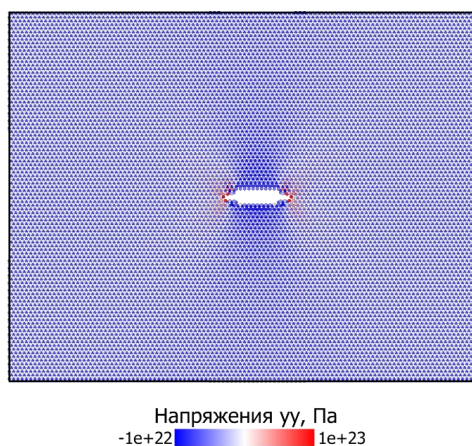


Рисунок 5. Распределение компоненты тензора напряжений σ_{22} . Начальное состояние (после инициализации системы).

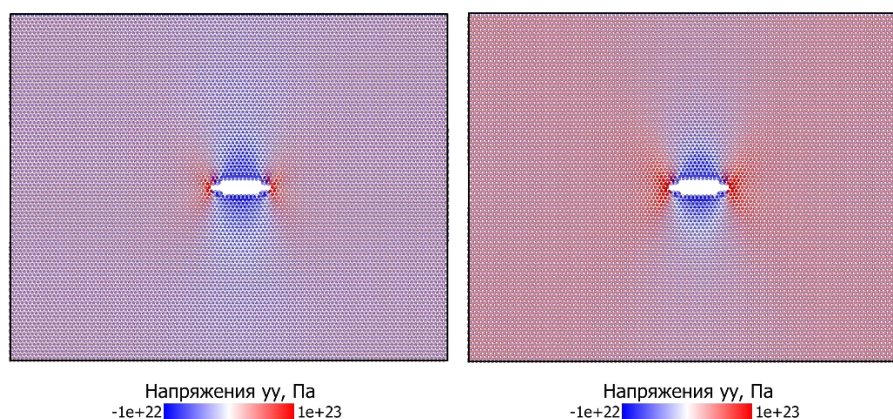


Рисунок 6. Распределение компоненты тензора напряжений σ_{22} , 4 пс и 7 пс.

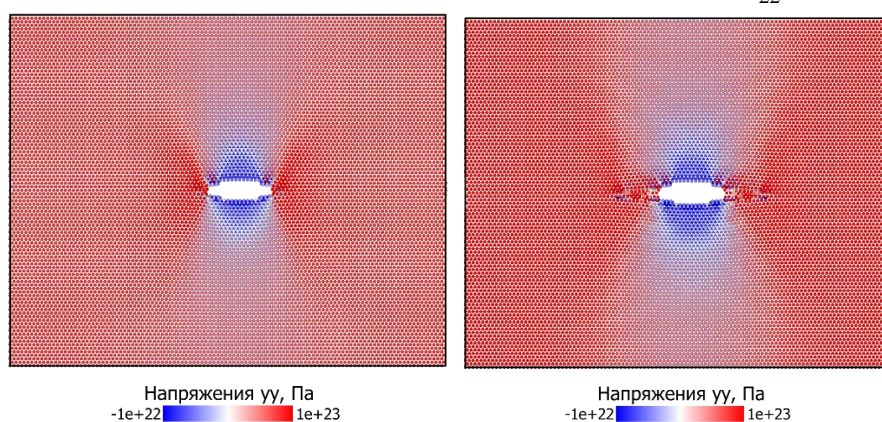


Рисунок 7. Распределение компоненты тензора напряжений σ_{22} , 12 пс и 15 пс.

3. Выводы

Выполнено моделирование развития центральной трещины конечной длины в пластине посредством метода молекулярной динамики в пакете LAMMPS. Получены и проанализированы траектории развития дефекта при различных формах смешанного нагружения. Рассмотрены эффекты взаимодействия температурного поля: моделирование с помощью метода молекулярной динамики проводилось при различных температурах. Выполнено сопоставление результатов, полученных с помощью метода молекулярной динамики, с макроскопическими оценками направлений развития трещины при различных формах смешанного нагружения. Углы, под которыми трещина развивается при действии различных систем нагружения, совпадают с результатами линейной механики разрушения в том случае, если пользоваться критериями роста трещины, основанными на минимуме плотности энергии деформаций и многопараметрическим представлением поля напряжений.

4. Литература

- [1] Степанова, Л.В. Полное асимптотическое разложение М. Уильямса у вершин двух коллинеарных трещин конечной длины в бесконечной пластине / Л.В. Степанова, П.С. Росляков // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2015. – № 4. – Р. 188-225.
- [2] Stepanova, L.V. Multi-parameter description of the crack-tip stress field: analytic determination of coefficients of crack-tip stress expansions in the vicinity of the crack tips of two finite cracks in an infinite plane medium / L.V. Stepanova, P.S. Roslyakov // International Journal of Solids and Structures. – 2016. – Vol. 100-101. – Р. 11-28.
- [3] Степанова, Л.В. Смешанное деформирование пластины с трещиной в условиях плоского напряженного состояния / Л.В. Степанова, Е.М. Яковлева // Вестник Пермского

- национального исследовательского политехнического университета. – 2014. – Т. 3. – С. 129-162.
- [4] Степанова, Л.В. Асимптотика поля напряжений у вершины усталостной трещины в среде с поврежденностью: вычислительный эксперимент и аналитическое решение / Л.В. Степанова, С.А. Игонин // Сибирский журнал вычислительной математики. – 2015. – Т.8, № 2. – С. 201-217.
- [5] Степанова, Л.В. Смешанное деформирование пластины с трещиной в условиях плоского напряженного состояния / Л.В. Степанова, Е.М. Яковлева // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. – 2014. – Т. 3. – С. 129-162.
- [6] Астафьев, В.И. Асимптотика напряженно-деформированного состояния в окрестности вершины трещины в условиях ползучести / В.И. Астафьев, Л.В. Степанова, С.А. Шестериков // Вестник Самарского государственного университета. – 1995. – № 5. – С. 59-64.
- [7] Степанова, Л.В. Оценка направления роста трещины в условиях смешанного нагружения (нормальный отрыв и поперечный сдвиг): обобщенные критерии классической механики разрушения и атомистическое моделирование смешанного нагружения (метод молекулярной динамики) / Л.В. Степанова, С.А. Бронников, О.Н. Белова // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2017. – Т.4. – С. 189-213.
- [8] Atomistic modeling for mechanism of crack cleavage extension on nano-scale / Y.-J. Gao, Q.Q. Deng, L.Ye. Huang, Z.C. Wen, Zh. -R. Luo // Computational Materials Science. – 2017. – Vol. 130. – P. 64-75.
- [9] Cui, C.B. Mixed-mode fracture toughness evaluation of a copper single crystal using atomistic simulations / C.B. Cui, G.H. Lee, H.G. Beom // Computational Materials Science. – 2017. – Vol. 136. – P. 216-222.

Благодарности

Авторы выражают глубокую благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований (проект 16-08-00571).

Computational modelling crack propagation by molecular dynamics method

L.V. Stepanova¹, S.A. Bronnikov¹

¹Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

Abstract. The study is focused on the application of the different approaches for the determination of the initial crack propagation angle. Copper plate with the central crack under complex mechanical stresses (Mode I and Mode II loading) is studied by extensive molecular dynamics simulations based on the EAM potential. On the other hand, the complete Williams expansion for the crack tip fields containing the higher-order terms is used. The crack propagation angle is obtained by 1) the multi-parameter fracture mechanics approach based on three fracture mechanics criteria, MTS, maximum tangential strain and SED; 2) atomistic modeling for the mixed-mode loading of the plane medium with the central crack. From our simulations we can get crack propagation directions and crack angles. Calculations of MD method were run for three different values of M^e : 0.4, 0.5 and 0.6. Calculated values of crack angles were -51.5° , -46.6° and -42.2° accordingly. All the fracture criteria tested give similar values of the crack growth angle for different values of the mixity parameter. It is shown that the initial crack propagation angles given by the both approaches are very close especially for the case when the higher order terms of the Williams series expansion for the stress/displacement field description are taken into account. Thus one can conclude that the criteria of classical continuum mechanics MTS and SED can give satisfactory predictions for crack initiation direction. The crack propagation direction angles given by the conventional fracture mechanics reasonably agree with the angles obtained from molecular dynamics simulations.