



ственное совпадение с образцами аналогичных процессов в БЭС будет надежным подтверждением пригодности библиотеки для настройки испытуемого регулятора.

2. Требуется убедиться, что характер переходных процессов в эталонных системах библиотеки (см. ссылку «X(t)») и показатели этих процессов согласуются с тем, что хотелось бы получить в настраиваемой системе управления.

Противоречие по первому моменту означает, что применение БЭС станет возможным только после ее корректировки под специфику настраиваемого регулятора. Проблемы по второму пункту решаются пополнением БЭС новыми образцами эталонных систем с требуемым типом переходных процессов.

Опыт показывает, что сформированный вариант БЭС позволяет качественно настраивать ПИД-регуляторы на преобладающей части реальных объектов управления. Библиотека находится в свободном доступе на сайте <http://uswo.lgg.ru>, Любой специалист имеет возможность полноценно воспользоваться преимуществами ММ. В опубликованных ранее статьях представлены разные технологии практического применения метода. Все технологии работоспособны. Наиболее простой и надежной является последняя, осуществляемая с помощью прикладной программы «ММ-настройка» [2].

### Литература

1. Бажанов В. Л. Метод масштабирования – эффективный инструмент для практической настройки регуляторов в замкнутых САР // Приборы и Системы. Управление, контроль, диагностика. 2006. № 6.
2. Бажанов В. Л., Вайшнарас А. В. Программа «ММ-настройка» для определения параметров ПИД-регуляторов по методу масштабирования // Автоматизация в промышленности. 2007. № 7.

О.Н. Белова, Л.В. Степанова

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА ТРЕЩИНЫ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ В ПАКЕТЕ LAMMPS

(Самарский университет)

Введение. Метод молекулярной динамики в механике разрушения

В настоящее время метод молекулярной динамики активно применяется для компьютерного имитационного моделирования роста трещины в различных материалах [1] –[5]. Особый интерес вызывает моделирование смешанного нагружения и анализ углов распространения трещины в условиях смешанного нагружения. В этой связи атомистическое моделирование процессов разрушения и деформирования позволяет получить дополнительную информацию об углах направления распространения дефекта. Перспективным представляется исполь-



зование пакета LAMMPS (англ. Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)[6].

Метод моделирования

LAMMPS является классическим кодом молекулярной динамики, который моделирует ансамбли частиц в жидкостях, газах и твердых телах. Этот комплекс программ предназначен для моделирования атомных, полимерных, биологических, металлических и гранулированных систем с разнообразными силовыми полями и граничными условиями.

Каждая симуляция в пакете LAMMPS имеет следующие этапы:

1. задание начальной структуры;
2. минимизация энергии;
3. приведение системы к динамическому равновесию;
4. рабочая часть симуляции.

Для моделирования задачи создается входной файл, который состоит из 4 частей:

- инициализация;
- описание атомных взаимодействий (выбор потенциала взаимодействия);
- настройки (задание силового поля, времени интеграции, параметров моделирования, формулировка граничных условий);
- выполнить моделирование

В первой части устанавливают размерность модели, систему единиц измерения, накладывают граничные условия, задают стиль атома и взаимосвязь с соседними элементами. При моделировании распространения трещины в направлении  $x$  и  $y$  устанавливают не периодические условия, а в направлении  $z$  периодические.

Далее описывают начальную структуру положения атомов с необходимыми размерами и свойствами. А также устанавливают размеры моделируемой области. При моделировании трещины в пластине из меди структура кристаллической решетки выбрана fcc 3.615. Размеры моделируемой области в Ангстремах ( $10^{-10}m$ ) [ $723\text{\AA} \times 361.5\text{\AA} \times 1.8075\text{\AA}$ ]. В пакете LAMMPS реализована поддержка большинства двухчастичных и многочастичных короткодействующих потенциалов (потенциалы Леннард-Джонса, Морзе, Юкавы, EAM, AI-REBO)

Потенциал Леннард-Джонса имеет вид

$$U(r_{ij}) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

и хорошо описывает Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия в инертных газах и молекулярных системах ( $Ar, Ne, Kr, CH_4, O_2, H_2, C_2H_4 \dots$ )[7].

Потенциал «погруженного атома» (EAM) складывается из двух слагаемых – энергии парного взаимодействия атомов и энергии взаимодействия каждого атома с электронной плотностью, создаваемой другими атомами:



$$U(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \varphi(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N f(\rho_i),$$

где  $\varphi(r_{ij})$  – парный потенциал,  $f(\rho_i)$  – функция «погружения» -го атома,  $\rho_i$  – суммарная электронная плотность для  $i$ -го атома, создаваемая сферически симметричными функциями одноэлектронной плотности  $n(r_{ij})$  других атомов

$$\rho_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N n(r_{ij}).$$

Были проведены вычислительные эксперименты, в ходе которых моделирования осуществлялось с помощью потенциала Леннард-Джонса и потенциала «погруженного атома» для меди. Взаимодействие атомов меди, описано в файле Cu\_u3.eam, имеющемся в библиотеке потенциалов LAMPPS.

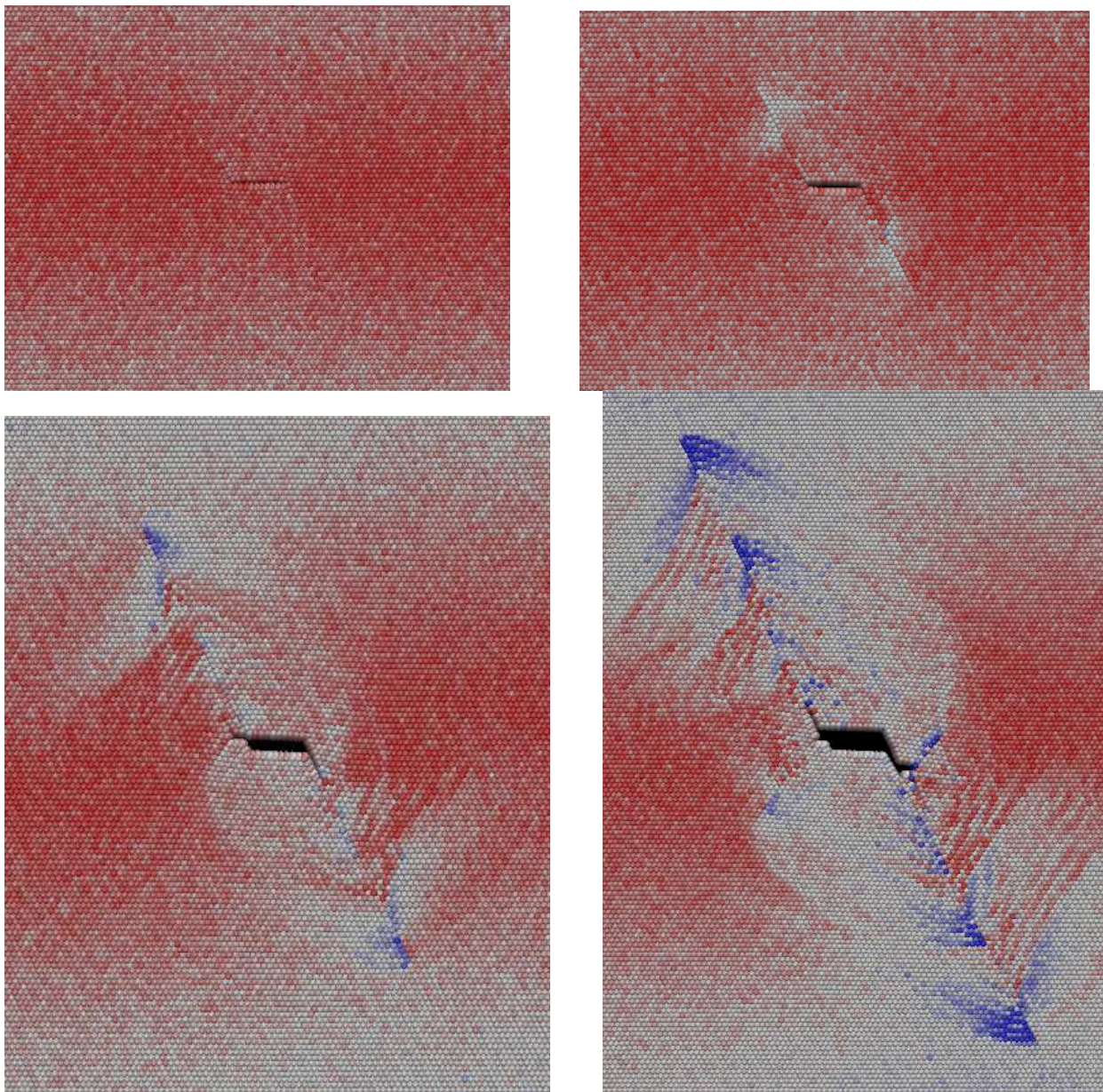
Для реализации смешанного нагружения пластина была разделена на несколько частей, а именно, верхняя и нижняя границы и средняя область. Была проведена серия вычислительных экспериментов. В рамках первой серии трещина создавалась путем удаления из тела одного ряда атомов длиной 36.15Å. В рамках второй серии экспериментов средняя область была разделена на части так, что в середине пластины создавалась граница между частями, которая выступала в качестве трещины. К граничным участкам были приложены растягивающая и сдвиговая нагрузки. На последнем этапе устанавливают, через какой промежуток времени, какие параметры необходимо выводить.

Результаты численного моделирования

В результате численного моделирования были получены следующие картины. На рисунках показан процесс распространения трещины в условиях смешанного нагружения.

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. Предложена методика вычисления параметра смешанности нагружения в случае применения метода молекулярной динамики.



### Литература

1. Wei Fanga, Molecular dynamics simulation of grain boundary geometry on crack propagation of bi-crystal aluminum/ Wei Fanga, Hongxian Xie, Fuxing Yin, Jia Li, Dil Faraz Khan, Qian Fang// Materials Science & Engineering A.—2016.—V. 666— P. 314-319
2. H.Y. Song, Molecular dynamics simulation of effect of hydrogen atoms on crack propagation behavior of  $\alpha$ -Fe/ H.Y. Song, L. Zhang, M.X. Xiao// Physics Letters A.—2016.—V. 380—P. 4049-4056
3. S. Chandra , Molecular dynamics simulations of crack growth behavior in Al in the presence of vacancies/ S. Chandra, N.N. Kumar, M.K. Samal, V.M. Chavan, R.J. Patel// Computational Materials Science. —2016.—V. 117—P. 518-526
4. Subhendu Chakraborty, Accelerated molecular dynamics simulations for characterizing plastic deformation in crystalline materials with cracks/ Subhendu



Chakraborty, Jiayi Zhang, Somnath Ghosh// Computational Materials Science –2016.–V. 121–P. 23-34

5. Jihoon Han, Molecular dynamics study of fracture toughness and trans-intergranular transition in bi-crystalline graphene/ Jihoon Han, Dongwoo Sohn, Wanchuck Woo, Dong-Kyu Kim/Computational Materials Science –2017. в печати.

6. lammps.sandia.gov

7. Leonid Zhigile, Introduction to Atomistic Simulations/ University of Virginia, MSE 4270/6270

О.А. Борисова, З.Ф. Камальдинова, С.А. Пиявский

## ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА ПОДДЕРЖКИ БАЗОВОЙ НАУЧНО-ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ «ПОЛЕТ»

(Самарский государственный архитектурно-строительный университет)

Привлечение творчески одаренной молодежи к занятиям научно-исследовательской деятельностью является приоритетным направлением в работе государственных и областных структур [1].

«Концепция Единой Самарской областной системы мер по выявлению и развитию творчески одаренной молодежи в сфере науки, техники и технологий и инновационному развитию Самарской области (далее – Единая система)», утвержденная председателем Координационного совета при Администрации Губернатора Самарской области по работе с одаренной молодежью в сфере науки и техники 27.01.2016г. направлена на многолетнее системное управление развитием творчески одаренной молодежи. На базе этой концепции в Самарской области с ноября 2015 года начала действовать научно-образовательная программа конкурсного отбора школьников Самарской области в Губернаторский реестр творчески одаренной молодежи в сфере науки, техники и технологий (Программа ВЗЛЕТ).

Она явилась первым блоком Единой системы. С ноября 2016 года начала свою работу с творчески одаренными студентами вузов Самарской области – вторая часть Единой системы – Программа ПОЛЕТ. Основные документы по ним можно найти на сайте Программы ПОЛЕТ, размещенной в Интернете по адресу [www.creative-youth.ru](http://www.creative-youth.ru) [1-2]. Целью Программы ПОЛЕТ является повышение эффективности выявления и развития творчески одаренной молодежи Самарской области среди студентов, магистрантов, аспирантов, молодых ученых и специалистов за счет:

- ведения систематической многолетней индивидуализированной развивающей работы с наиболее творчески одаренными студентами самарских вузов;

- использования в образовательном процессе современных информационно-коммуникационных технологий [4].