



## МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СМЕШАННОГО НАГРУЖЕНИЯ ОБРАЗЦОВ С ТРЕЩИНОЙ В УСЛОВИЯХ СМЕШАННОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ: ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

(Самарский национальный исследовательский университет  
имени академика С.П. Королева)

Детальное изучение процессов нелинейного деформирования и разрушения и нелинейных математических моделей, описывающих эти процессы, как правило, проводится с помощью вычислительных экспериментов [1-9]. Среди современных подходов моделирования роста трещины особыми преимуществами обладает метод молекулярной динамики, широко используемый в настоящее время [7-9]. Целью настоящего исследования является моделирование роста трещины в образцах из кристаллической меди и алюминия при смешанном нагружении в полном диапазоне смешанных форм нагружения от чистого нормального отрыва до чистого поперечного сдвига. Перспективным представляется использование пакета LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). При моделировании трещины в пластине из меди структура кристаллической решетки выбрана гранецентрированная кубическая.

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, 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. 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 Леннарда – Джонса, потенциал внедренного атома (EAM)).



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 рис. 1 и 2. Процесс распространения трещины в условиях смешанного нагружения в монокристаллической меди при температуре 77К (50 пс и 60 пс) показан на рис. 3 и 4.

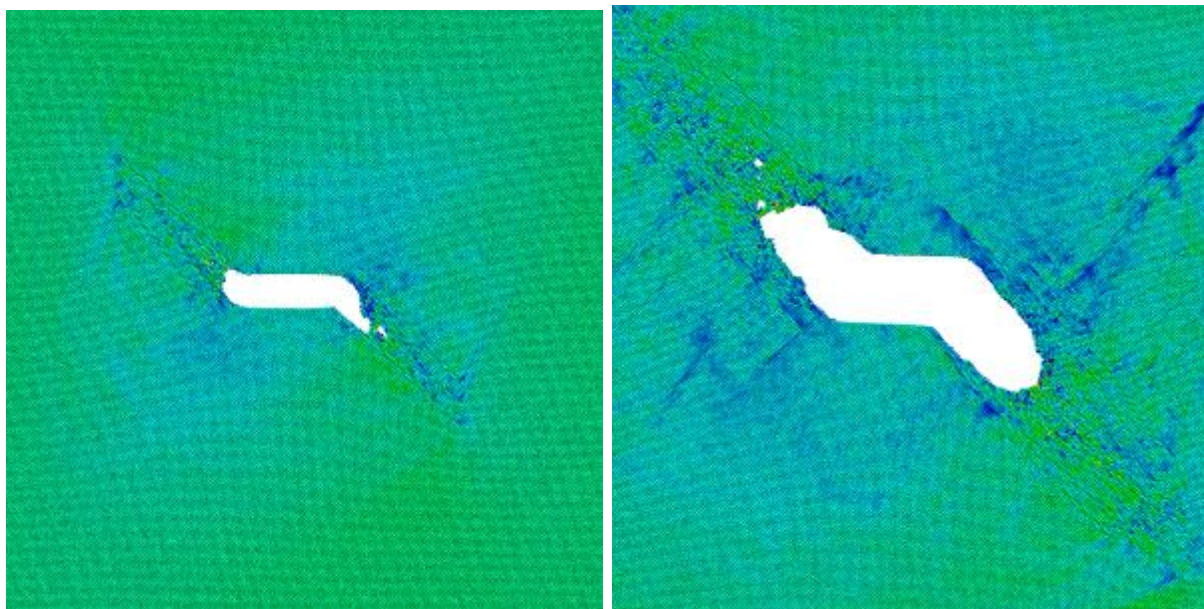


Рис. 1. Процесс распространения трещины в условиях смешанного нагружения в монокристаллической меди при нулевой температуре (24 пс и 40 пс)

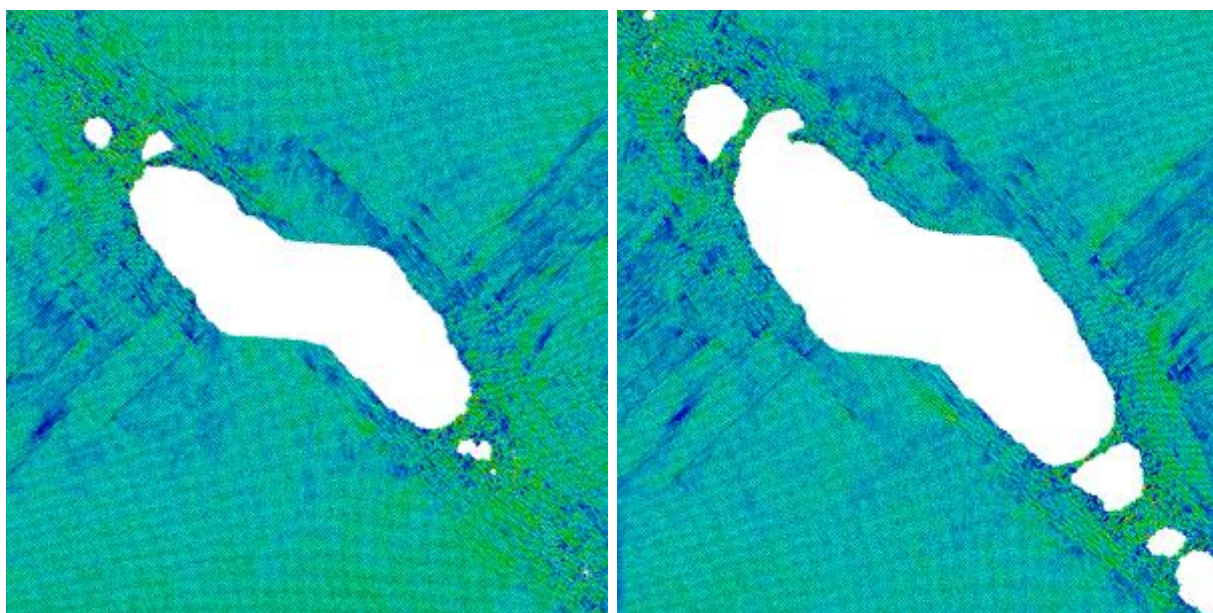


Рис. 2. Процесс распространения трещины в условиях смешанного нагружения в монокристаллической меди при нулевой температуре (50 пс и 60 пс)



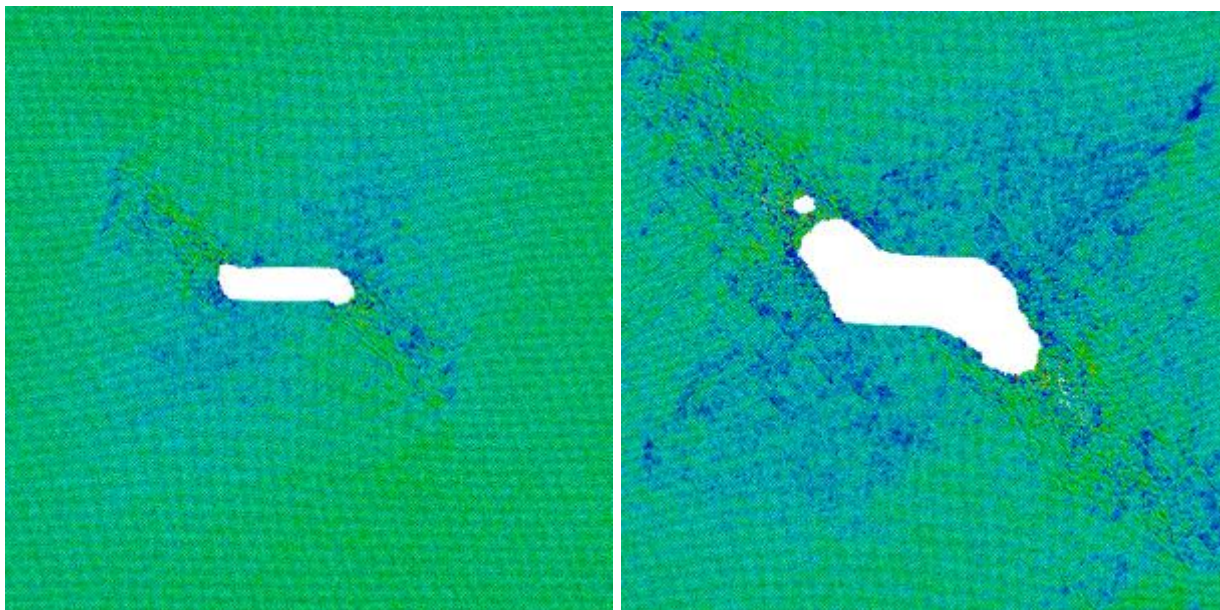


Рис. 3. Процесс распространения трещины в условиях смешанного нагружения в монокристаллической меди при температуре 77К (24 пс и 40 пс)

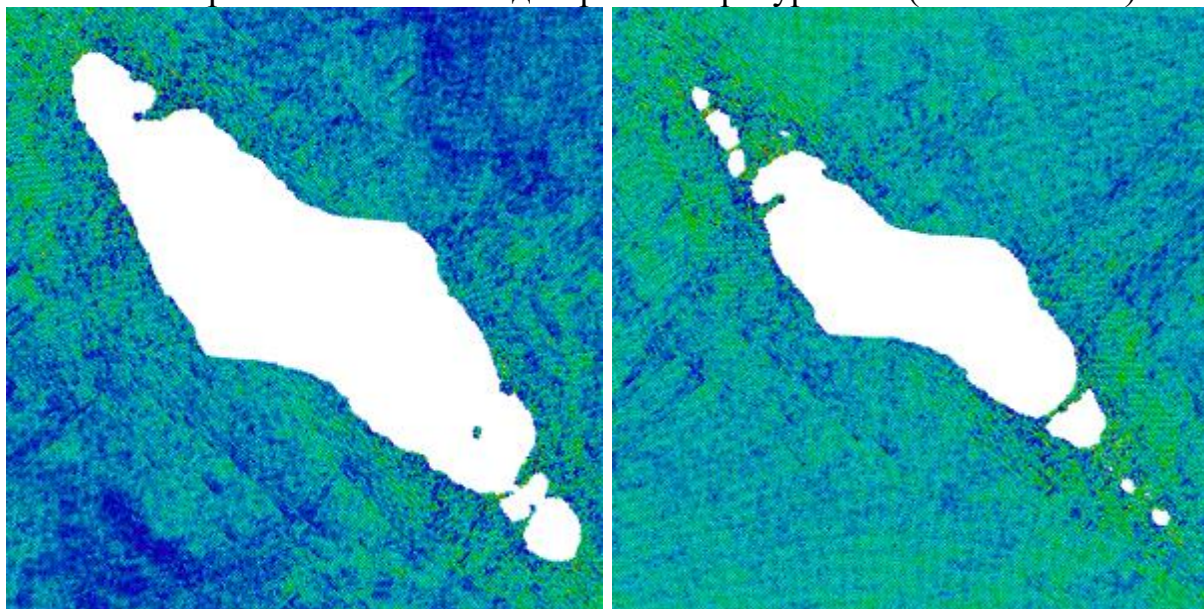


Рис. 4. Процесс распространения трещины в условиях смешанного нагружения в монокристаллической меди при температуре 77К (50 пс и 60 пс)

### 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

### Литература

1. Степанова, Л.В. Полное асимптотическое разложение М. Уильямса у вершин двух коллинеарных трещин конечной длины в бесконечной пластине [Текст]/ 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[Текст]/ L.V. Stepanova, P.S. Roslyakov// International Journal of Solids and Structures. – 2016. – V. 100-101. – P. 11-28.

3. Степанова, Л.В. Смешанное деформирование пластины с трещиной в условиях плоского напряженного состояния [Текст]/ 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 [Текст]/ 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 [Текст]/ 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 nanoscale[Текст]/ Y.-J. Gao, Q.Q. Deng, L. Ye. Huang, Z.C. Wen, Zhi -R. Luo// Computational Materials Science. – 2017. – V. 130. – P. 64-75.

9. Cui, C.B. Mixed-mode fracture toughness evaluation of a copper single crystal using atomistic simulations[Текст]/ C.B. Cui, G.H. Lee, H.G. Beom// Computational Materials Science. – 2017. – V. 136. – P. 216 – 222.