

УДК 539.3, 519.6

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЙ ПОДХОД В СОПОСТАВЛЕНИИ С КРАЕВОЙ ЗАДАЧЕЙ НАПРЯЖЁННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ПРИ КОНЦЕНТРАТОРАХ НАПРЯЖЕНИЙ

© Ермилов Е.П.

*Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация*

e-mail: katzero_0506@mail.ru

*Научный руководитель: Степанова Л.В., д-р физ.-мат. наук, доцент
Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация*

Ключевые слова: молекулярная динамика, континуальная механика, напряженно-деформированное состояние, концентраторы напряжений.

В данной работе выполнено сопоставление молекулярно-динамического и континуального решений задачи о бесконечной трещине в никелевой пластине с центральным разрезом. В качестве подхода механики сплошных сред представлено решение краевой задачи напряжённно-деформированного состояния в асимптотическом приближении по Уильямсу. Молекулярно-динамический метод реализован с помощью программного обеспечения LAMMPS, в котором проводилось моделирование исследуемого образца с дальнейшим построением полей напряжений при различных временных шагах.

Для сравнения молекулярно-динамического решения с континуальным в рамках упругой деформации производится реализация функции на языке программирования python с вызовом библиотечной интеграции LAMMPS. Конфигурация представляет собой пластину из никеля с линейными размерами $350,63 \times 350,63 \times 10,52$ Å с трещиной длиной 38,48 Å в NPT-ансамбле с температурой 300 К. К пластине применена одноосевая растягивающая нагрузка.

Рассматривается краевая задача следующего вида:

$$\begin{cases} \sigma_\theta = \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2}, \sigma_r = \nabla^2 \chi - \sigma_\theta, \tau_{r\theta} = -\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \chi}{\partial \theta} \right), \\ \sigma_\theta = \tau_{r\theta} = 0, \theta = \pm \alpha. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь σ, τ – компоненты тензора напряжений, χ – функция напряжения Эри, $r; \theta$ – радиальная и угловая координаты.

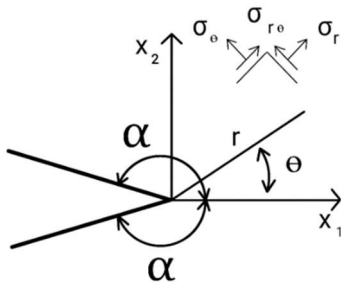


Рисунок 1 – Напряжения в полярной системе координат

Решение задачи проводится посредством нотации Колосова-Мусхелишвили [1; 2] при помощи аппарата теории функции комплексного переменного. Компоненты

напряжений представлены в следующем виде с универсальными угловыми распределениями для нормального отрыва $f_{2n+1}^{m,ij}$:

$$\sigma_{ij}(r, \theta) = a_2^1 f_2^{1,ij}(\theta) + \sum_{m=1}^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_{2n+1}^m f_{2n+1}^{m,ij}(\theta) r^{n-\frac{1}{2}}, \quad (2)$$

$$a_{2n+1}^1 = \frac{(-1)^{n+1} (2n)! \sigma_{22}^{\infty}}{2^{3n+\frac{1}{2}} (n!)^2 (2n-1) a^{n-\frac{1}{2}}}, n \geq 0, a_2^1 = \frac{1}{4} \sigma_{22}^{\infty} (\alpha - 1), a_k^1 = 0. \quad (3)$$

На рисунке 2 представлены поля напряжений компонент соответствующего тензора. Также были построены графики зависимости компонент тензора напряжений от угловой координаты при вершине разреза (рисунок 3).

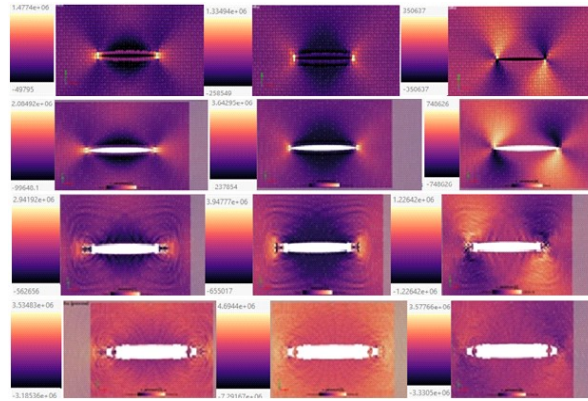


Рисунок 2 – Распределение полей напряжений для временных шагов 2,5; 5; 7,5; 10 нс

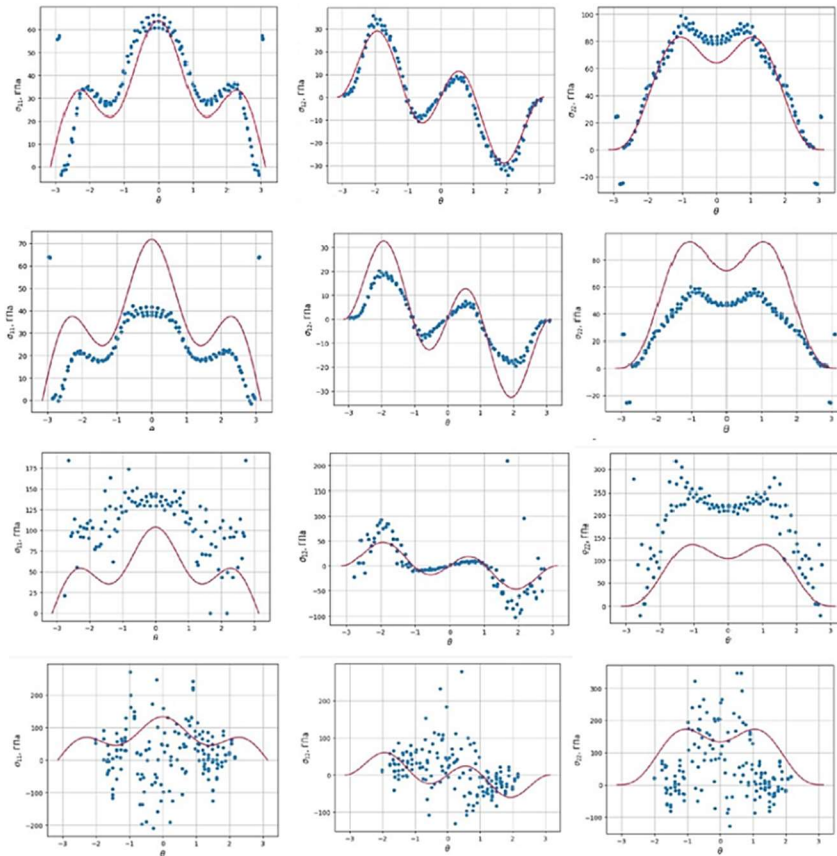


Рисунок 3 – Зависимость компонент тензора напряжений (слева направо – σ_{11} ; σ_{12} ; σ_{22}) от угла при вершине трещины

Видно, что на макроскопическом масштабе при построении континуального решения следует учитывать процессы накопления повреждений, которые аккумулируются вблизи вершины трещины и чётко визуализируются на атомистическом уровне. На начальных временных шагах (для линейного режима деформирования) решения совпадают, однако при приближении к нелинейному режиму деформирования следует обратиться к решениям деформационной теории пластичности (решение Хатчинсона–Райса–Розенгрена) [3–5].

Библиографический список

1. Степанова, Л.В. Влияние высших приближений в асимптотическом разложении М. Уильямса поля напряжений на описание напряженно деформированного состояния у вершины трещины. Часть I / Л.В. Степанова // Вестник Самарского университета. Естественная серия. – 2019. – Т. 25, № 1. – С. 63–79.
2. Hello, G. Analytical determination of coefficients in crack-tip stress expansions for a finite crack in an infinite plane medium / G. Hello, B. Mabrouk, J. Roelandt // International Journal of Solids and Structures. – 2012. – Vol. 49, issues 3–4. – P. 556–566. – DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2011.10.024.
3. Тартыгашева, А.М. Контурные интегралы в нелинейной механике разрушения при смешанных формах деформирования / А.М. Тартыгашева // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2022 – №. 2 – С. 10–24. – DOI: 10.15593/perm.mech/2022.2.02.
4. Stepanova, L.V. Asymptotic stress field in the vicinity of a mixed-mode crack under plane stress conditions for a power-law hardening material / L.V. Stepanova, E.M. Yakovleva // Journal of Mechanics of Materials and Structures. – 2015. – Vol. 10, no. 3. – P. 367–393. – DOI: 10.2140/jomms.2015.10.367.
5. Степанова, Л.В. Параметр поврежденности Ю.Н. Работнова и описание длительного разрушения: результаты, современное состояние, приложение к механике трещин и перспективы / Л.В. Степанова, С.А. Игонин // Прикладная механика и техническая физика. – 2015. – Т. 56, № 2 (330). – С. 133–145.