

На правах рукописи



Белова Оксана Николаевна

**ПРИЛОЖЕНИЯ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ К
ЗАДАЧАМ МЕХАНИКИ РАЗРУШЕНИЯ И АТОМИСТИЧЕСКИ-
КОНТИНУАЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАЗРУШЕНИЯ**

Специальность 1.1.8. Механика деформируемого твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Самара – 2023

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева»

Научный руководитель: **Степанова Лариса Валентиновна**, доктор физико-математических наук, доцент

Официальные оппоненты:

Лычев Сергей Александрович, доктор физико-математических наук, доцент, ведущий научный сотрудник лаборатории механики технологических процессов, федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук», г. Москва

Туманов Андрей Владиславович, кандидат технических наук, доцент, ведущий научный сотрудник лаборатории механики деформирования и разрушения, федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук», г. Казань

Ведущая организация:

«Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук» – филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук (ИМСС УрО РАН), г. Пермь

Защита состоится «3» ноября 2023 г., в 11 час. 00 мин. на заседании объединённого диссертационного совета 99.2.039.02 на базе ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет» и ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» по адресу: 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244, главный корпус, аудитория 200.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет»: <http://d99912202.samgtu.ru>

Отзывы на автореферат просим высылать в двух экземплярах, заверенных печатью, по адресу: 443100, г. Самара ул. Молодогвардейская, 244, ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет», главный корпус, ученому секретарю диссертационного совета 99.2.039.02.

Автореферат разослан « » _____ 2023 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
к.т.н., доцент



А.Р. Луц

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Математическое и компьютерное имитационное описание и моделирование нелинейных процессов разрушения, деформирования и усталостного нагружения в металлах, сплавах и композиционных материалах неизбежно приводит к необходимости рассмотрения процессов и явлений, происходящих на различных масштабных уровнях, варьирующихся от макроскопических размеров трещин и других дефектов до межатомных расстояний. Актуальность диссертационного исследования обусловлена перспективностью исследования процессов разрушения на нано- и микроуровне. Механика сплошных сред перестает быть рабочим инструментом на расстояниях, где существенными становятся особенности кристаллической структуры материала. Актуальность проблемы исследования заключается в необходимости создания эффективных расчетных схем напряженно-деформированного состояния в деформируемых телах с учетом их кристаллического строения, ибо особенности деформирования и разрушения на наноскопическом уровне обуславливают макроскопическое поведение деформируемого тела. Сочетание подходов механики сплошных сред и атомистического моделирования позволит получить более глубокое понимание и реалистичное описание стационарного состояния и продвижения трещин и деформационных процессов в условиях воздействия различных сложных систем термомеханических нагрузок.

Для исследования процессов разрушения и нелинейного деформирования на наноуровне перспективным представляется применение метода молекулярной динамики (МД). Впервые метод МД применен в пятидесятых годах прошлого века (Alder B.J., Wainwright T., 1959 г.). С развитием вычислительной техники молекулярно-динамическое моделирование стало широко применяться в различных областях науки (теоретическая физика, химия, биохимия и биофизика). В механике деформируемого твердого тела метод МД также начал активно использоваться в последнее время для исследования распространения трещин (Buhler M.J. 2004, Cheng S.H., Sun C.T. 2011, Wilson M.A., Grutzik S.J., Chandross M. 2019, Roy S., Roy A. A. 2019, Tsai J.-L., Tzeng S.-H., Tzou Y.-J. 2010, Dehaghani M.Z., Mashhadzadeh A.H., Salmankhani A., Karami Z., Habibzadeh S., Ganjali M.R., Saeb M.R., 2020, Molaei F., 2022, Le M.-Q., 2022. Nguen H.-T., Le M.-Q., Nguen V.-T. 2018). Несмотря на важные результаты, полученные к настоящему времени, многие вопросы и проблемы остаются открытыми.

Настоящая диссертационная работа посвящена исследованию применимости классической механики разрушения для описания процессов

разрушения на наноскопическом уровне, а именно применению многопараметрического решения разложения Уильямса механики сплошных сред для описания полей напряжений вблизи трещины на наноуровне с помощью атомистического моделирования методом молекулярной динамики.

Цель научно-квалификационной работы состоит в молекулярно-динамическом моделировании напряженно-деформированного состояния, ассоциированного с непосредственной окрестностью вершины трещины или надреза в условиях смешанного деформирования, и сопоставлении полученных результатов с решениями классической механики разрушения сплошных сред. Достижения поставленных целей предполагает решение следующих **задач**.

1. Вычисление углов направления распространения трещины в упругой пластине, находящейся под действием смешанной системы нагрузок (нормальный отрыв и поперечный сдвиг) во всем интервале смешанных форм нагружения: от чистого отрыва до чистого поперечного сдвига. Соотнесение результатов атомистического моделирования и континуальной механики хрупкого разрушения, полученных с помощью известных классических критериев разрушения: критериев максимального окружного напряжения и минимальной функции плотности энергии упругой деформации.

2. Разработка и реализация методики вычисления обобщенных коэффициентов интенсивности напряжений (коэффициентов разложения М. Уильямса) с помощью метода молекулярной динамики.

3. Выполнение МД моделирования смешанного деформирования пластины с центральным разрезом. Сравнение результатов, полученных посредством имитационного моделирования методом МД и точного аналитического решения механики хрупкого разрушения.

4. Реализация МД моделирования смешанного нагружения пластины с боковым надрезом в изотропной и анизотропной линейно упругой средах. Проведение конечно-элементного моделирования смешанного деформирования пластины с одним боковым надрезом и сопоставление полученных результатов с МД решением.

5. Проведение атомистически-молекулярного моделирования трубки с наклонным дефектом, находящейся под действием растягивающей нагрузки. Проведение конечно-элементного (КЭ) моделирования трубы с продольной, окружной и наклонной трещиной, находящейся под действием внутреннего давления и растягивающей нагрузки с помощью расширенного метода конечных элементов. Сравнение траекторий распространения трещин, получаемых дискретным и континуальным подходами.

Соответствие паспорту заявленной специальности

Диссертационная работа соответствует направлениям исследований, указанным в пунктах паспорта специальности 1.1.8. Механика деформируемого твердого тела: 3. Задачи теории упругости, пластичности и вязкоупругости. 6. Микромеханика, наномеханика, механика дискретных сред. 10. Прочность при сложных режимах нагружения. Теория накопления повреждений. Механика разрушения твердых тел. 11. Математическое моделирование поведения дискретных и континуальных деформируемых сред при механических, тепловых, электромагнитных, химических, гравитационных и прочих воздействиях. 12. Вычислительная механика деформируемого твердого тела.

Положения, выносимые на защиту.

1. Молекулярно-динамические расчеты углов направления распространения трещины в ГЦК меди и алюминии в полном интервале смешанных форм нагружения: от идеального нормального отрыва до идеального поперечного сдвига. Показано, что значения углов направления распространения трещины, полученные с помощью атомистического (дискретного) моделирования, полностью согласуются с результатами классических критериев макроскопической континуальной теории хрупкого разрушения.

2. Анализ угловых распределений компонент тензора напряжений вблизи вершины трещины, полученных с помощью атомистического МД моделирования деформирования ГЦК медной и алюминиевой пластин с центральной трещиной, в полном интервале комбинированных форм нагружения от идеального нормального отрыва до идеального поперечного сдвига с помощью потенциала внедренного атома в открытом коде Large-scale Atomic/ Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS), реализующем метод МД. Показано, что угловые распределения напряжений у вершины трещины совпадают с угловыми распределениями классической механики хрупкого разрушения. Показано, что материалы с кубической сингонией (медь, алюминий) проявляют одинаковое поведение при деформировании образцов с трещинами и напряженно-деформированное состояние на атомистических масштабах может быть эффективно описано с помощью математического аппарата континуальной механики разрушения (даже при небольшом количестве атомов).

3. Вычислительная процедура определения обобщенных коэффициентов интенсивности напряжений (коэффициентов разложения М. Уильямса), основанная на молекулярно-динамическом вычислительном эксперименте.

Показано, что обобщенные коэффициенты интенсивности напряжений могут быть эффективно вычислены с помощью техники переопределенного метода, базирующегося на данных атомистически-молекулярных вычислений.

4. Конечно-элементные решения задач о деформировании пластины с одним боковым горизонтальным и наклонным надрезом в полном интервале комбинированных форм нагружения. На основании полученного КЭ-решения с помощью техники переопределенного метода вычислены коэффициенты разложения М. Уильямса.

5. Атомистические расчеты полей напряжений в ГЦК медной и алюминиевой пластин с одним боковым горизонтальным и наклонным надрезом в МД-пакете LAMMPS. Показано, что угловые распределения механических напряжений совпадают с результатами конечно-элементных вычислений. Вычисленные коэффициенты асимптотического разложения М. Уильямса на основании данных, полученных посредством атомистически-молекулярного (дискретного) подхода, совпадают с обобщенными коэффициентами, найденными с помощью МКЭ.

6. Вычислительный эксперимент, основанный на атомистически-молекулярном моделировании трубки с продольным, окружным и наклонным дефектом, находящейся под действием внутреннего давления и растягивающей нагрузки. Определение траектории роста трещины в трубке с наклонным дефектом, находящейся под действием растягивающей нагрузки. Конечно-элементные расчеты трубы с продольным, окружным и наклонным дефектом, находящейся под действием внутреннего давления и растягивающей нагрузки. Анализ траектории роста трещины с помощью атомистического моделирования и с помощью технологии расширенного метода конечных элементов (XFEM).

Научная новизна заключается в следующем.

1. Впервые проведен молекулярно-динамический расчет углов направления распространения трещины в гранцентрированных монокристаллических меди и алюминии в полном интервале смешанных форм нагружения: от чистого нормального отрыва до чистого поперечного сдвига. Показано, что значения углов направления распространения трещины, полученные с помощью атомистического (дискретного) моделирования, полностью согласуются с результатами классической макроскопической теории хрупкого разрушения.

2. Впервые проведен анализ угловых распределений компонент тензора напряжений вблизи вершины трещины, полученных с помощью атомистического молекулярно-динамического моделирования

деформирования ГЦК медной и алюминиевой пластин с центральной трещиной в полном интервале смешанных форм нагружения от чистого нормального отрыва до поперечного сдвига с помощью потенциала внедренного атома в открытом коде LAMMPS, реализующем метод МД. Показано, что угловые распределения атомистических напряжений у вершины трещины совпадают с угловыми распределениями классической механики хрупкого разрушения. Показано, что материалы с кубической сингонией (медь, алюминий) проявляют одинаковое поведение при деформировании образцов с трещинами и напряженно-деформированное состояние на атомистических масштабах может быть эффективно описано с помощью математического аппарата континуальной механики разрушения (даже при небольшом количестве атомов).

3. Предложена вычислительная процедура определения обобщенных коэффициентов интенсивности напряжений (коэффициентов разложения М. Уильямса), основанная на МД вычислительном эксперименте. Показано, что обобщенные коэффициенты интенсивности напряжений могут быть вычислены с помощью техники переопределенного метода, базирующегося на данных атомистически-молекулярных вычислений.

4. Получены конечно-элементные решения задач о деформировании пластины с одним боковым горизонтальным и наклонным надрезом в полном интервале комбинированных форм нагружения. На основании полученного конечно-элементного решения с помощью техники переопределенного метода вычислены обобщенные коэффициенты разложения М. Уильямса. Проведены атомистические расчеты для ГЦК медной и алюминиевой пластин в молекулярно-динамическом пакете LAMMPS. Показано, что угловые распределения атомистических напряжений совпадают с результатами конечно-элементных вычислений. Вычислены коэффициенты асимптотического разложения М. Уильямса с помощью данных, полученных посредством конечно-элементного (континуального) и атомистически-молекулярного (дискретного) подходов.

5. Впервые проведен вычислительный эксперимент, основанный на атомистически-молекулярном моделировании трубки с продольным, окружным и наклонным дефектом, находящейся под действием внутреннего давления и растягивающей нагрузки. Особое внимание уделено анализу траектории роста трещины в трубке с наклонным дефектом, находящейся под действием растягивающей нагрузки. Параллельно проведены конечно-элементные расчеты трубы с продольным, окружным и наклонным дефектом, находящейся под действием внутреннего давления и растягивающей нагрузки.

Траектория роста трещины, найденная с помощью атомистического моделирования, полностью совпадает с траекторией трещины, обнаруживаемой с помощью технологии XFEM.

Теоретическая значимость работы заключается в доказательстве возможности применения математического аппарата континуальной механики разрушения на атомистическом уровне: показано, что на атомистическом уровне асимптотическое описание М. Уильямса качественно и количественно описывает механические поля, ассоциированные с вершиной трещины или надреза.

Практическая ценность диссертационной работы заключается в том, что предлагаемые расчетные схемы могут быть использованы для определения напряженно-деформированного состояния в инженерных элементах конструкций, находящихся в реальных эксплуатационных условиях.

Методологическая основа исследования

Компьютерное моделирование разрушения на атомно-молекулярном уровне реализовано с помощью метода молекулярной динамики в атомистическом пакете LAMMPS. С целью сравнения полученных результатов с решением механики разрушения сплошных сред выполнено моделирование нормального и смешанного нагружения образцов с трещиной с помощью метода конечных элементов.

Достоверность результатов проведенного исследования обусловлена применением классических и достоверных методов механики сплошных сред (теоретических подходов континуальной механики деформируемого твердого тела и вычислительных методов механики сплошных сред). Степень достоверности и обоснованности выносимых на защиту положений, выводов и рекомендаций обеспечивается строгостью, в рамках сформулированных допущений, математической постановки и методов решения рассматриваемых задач; совпадением в частных случаях представленных решений с известными результатами; соответствием вычислительных данных, полученными автором работы, с теоретическими результатами. Степень достоверности полученных результатов подтверждается сравнением значений амплитудных множителей ряда М. Уильямса, найденных численно методом МД и методом КЭ, для двух различных конфигураций образцов с трещинами и надрезами.

Публикации. Результаты работы полностью отражены в 35 научных публикациях, в том числе в 6 статьях, опубликованных в периодических научных изданиях, рекомендованных ВАК России, и в 18 публикациях в изданиях, входящих в международные базы цитирования Scopus и Web of Science. Научные исследования, проведенные в диссертационной работе,

частично выполнялись в рамках НИР по проекту гранта РФ № 21–11–00346, тема «Параллельное атомистически-континуальное описание процессов разрушения и нелинейного деформирования» и полностью в рамках проекта гранта РФФИ № 20–31–90082 «Приложения метода молекулярной динамики к задачам механики разрушения и параллельное атомистически-континуальное описание процессов разрушения».

Апробация работы. Основные положения научно-квалификационной работы были изложены и обсуждены в рамках 8 всероссийских и 11 международных конференций и достаточно полно отражены в публикациях аспиранта. Результаты работы докладывались на следующих международных и российских конференциях: Всероссийская конференция с международным участием «Современные проблемы механики сплошных сред и физики взрыва», посвященная 60-летию Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН (Новосибирск, 4-8 сентября 2017 г.); X Всероссийская конференция по механике деформируемого твердого тела (Самара, 18-22 сентября 2017 г.); Международная научно-техническая конференция «Перспективные информационные технологии» (Самара, 14–16 марта 2017 г., Самара, 14–16 апреля 2018 г.); IV и VI Международная конференция и молодежная школа «Информационные технологии и нанотехнологии» (Самара, 24-27 апреля 2018 г., 26-29 мая 2020 г.); XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (Уфа, 19-24 августа 2019 г.); XXIX, XXX и XXXI Всероссийская школа-конференция «Математическое моделирование в естественных науках» (Пермь, 07-09 октября 2020 г., 06-09 октября 2021 г., 05-08 октября 2022 г.); XIV Международная конференция «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций» (Екатеринбург, 09-13 ноября 2020 г.); Всероссийская научная конференция «Математика и математическое моделирование» (Самара, 10-12 ноября 2021 г.); XV и XVI Международные конференции «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций» (Екатеринбург, 20-24 декабря 2021 г., 16-20 мая 2022 г.); The 4th International Conference on Structural Integrity (ICSI, 2021) (Funchal, Madeira, Portugal, 30 August - 1 September, 2021); The 7th International Conference on Crack Paths (CP 2021) (September, 21 - 24, 2021); 14th World Congress in Computational Mechanics and ECCOMAS Congress (WCCM & ECCOMAS, 2020) (11-15 January, 2021); Международная конференция "Физическая мезомеханика материалов. Физические принципы формирования многоуровневой структуры и механизмы нелинейного поведения" (Томск, 05-08 сентября 2022 г.); Всероссийская конференция «XXIII Зимняя школа по механике сплошных сред» (Пермь, 13-17 февраля 2023 г.).

Личный вклад автора. Автором выполнено МД моделирование задач, постановки которых были предложены научным руководителем Степановой Л.В. Все необходимые МД- и КЭ-расчеты проведены автором самостоятельно, анализ результатов проводился совместно с руководителем.

Объем и структура диссертации. Диссертация состоит из введения; пяти глав, заключения, списка литературы. Общий объем диссертации – 222 страницы, включает 1 таблицу, 84 рисунка и 5 приложений. Список использованной литературы содержит 208 наименований.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность, сформулированы цель и задачи работы. Отмечена научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, дана ее общая характеристика.

Первая глава посвящена основным сведениям об атомистическом моделировании процессов разрушения и деформирования с помощью метода молекулярной динамики. В главе рассмотрены основы и фундаментальные положения методов атомистического компьютерного моделирования. Сначала приведены общие сведения о методе МД, описаны основные понятия метода: уравнения движения, алгоритм Верле, термостат и баростат, термодинамические ансамбли, межатомный потенциал. Приведен обзор имеющегося программного обеспечения для реализации метода МД, в частности, дана характеристика кода LAMMPS – вычислительного пакета для моделирования атомно-молекулярной динамики, позволяющего проводить крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты, как на отдельных процессорах, так и на нескольких с использованием алгоритмов распараллеливания. Библиотека данных пакета LAMMPS содержит большое разнообразие одно- и многочастичных потенциалов взаимодействия. В главе приведен обзор работ, посвященных применению метода МД для моделирования роста трещин. Описаны решаемые в данных работах задачи, основные результаты и выводы. Обсуждены работы, направленные на вычисление коэффициентов интенсивности напряжений и углов распространения трещин в различных материалах с помощью метода МД.

Во второй главе приведено описание моделируемых материалов и их механических свойств. В вычислительных экспериментах выбраны fcc медная и алюминиевая пластины. Определены компоненты тензоров упругих модулей fcc-материалов с использованием потенциальной энергии, вычисленной в ходе молекулярно-динамического расчета. Потенциальная энергия зависит от тензора деформаций и может быть разложена в ряд Тейлора:

$$E(\varepsilon) = E(\varepsilon_i^0) + \sum_{i=1}^6 \frac{\partial E}{\partial \varepsilon_i} \Big|_{\varepsilon_i=\varepsilon_i^0} \varepsilon_i + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^6 \sum_{i=1}^6 \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \Big|_{\varepsilon_i=\varepsilon_i^0} \varepsilon_i \varepsilon_j, \quad (1)$$

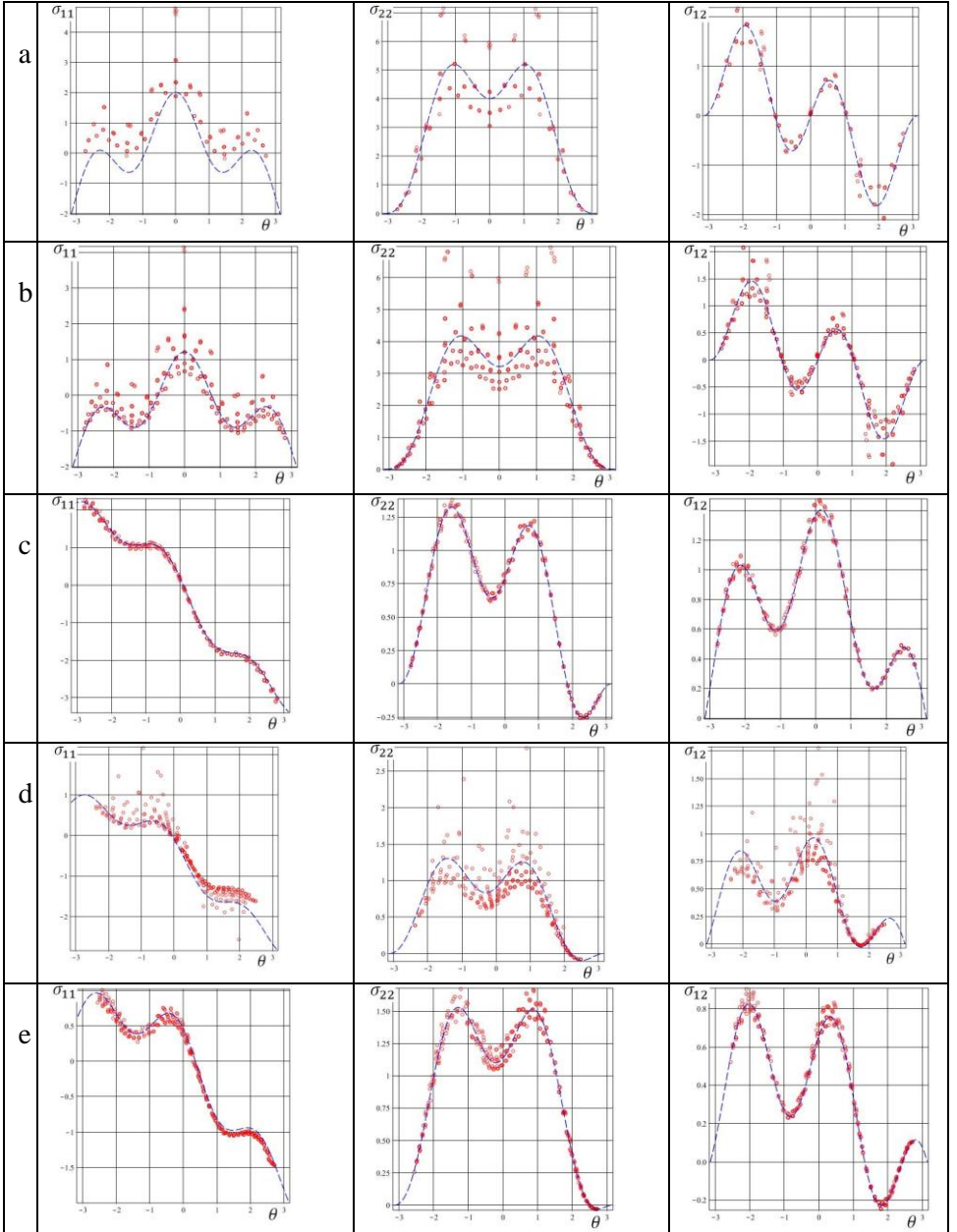
где $E(\varepsilon_i^0)$ – энергия исходного состояния, ε_i – деформации в нотации Фойгта. Компоненты тензора упругих модулей можно определить с помощью разложения (1): $C_{ij} = (1/V) (\partial^2 E / \partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j)_{\varepsilon_i=\varepsilon_i^0}$, где V – это объем, занятый атомами. По данным атомистического моделирования построена кривая зависимости энергии от деформации (1), что дало возможность найти компоненты тензора упругих модулей ГЦК алюминия и меди. Приведена пространственная визуализация упругих свойств материалов.

В третьей главе на примере медной и алюминиевой пластин с центральной трещиной вычислены и проанализированы углы направления развития трещины в условиях смешанного нагружения. Сначала приводятся детали атомистического моделирования: размеры ячейки моделирования, граничные условия, термодинамические ансамбли и термостат, способы создания трещины и особенности приложения смешанного нагружения. Взаимодействие атомов меди и алюминия описано с помощью потенциала внедренного атома (EAM). В ходе атомистического МД моделирования рассчитываются углы направления роста дефекта для комбинированного нагружения (растяжение и сдвиг пластины) в зависимости от параметра смешанности нагружения. Далее проведено сравнение полученных результатов МД моделирования со значениями, следующими из классических критериев континуальной механики. Показано хорошее соответствие углов, найденных с помощью двух различных подходов.

В четвертой главе представлены результаты моделирования смешанного нагружения пластины с центральной трещиной и пластины с боковым надрезом. В работе проведено сравнение аналитического решения континуальной механики разрушения с решением, полученным из МД моделирования. С этой целью разработана процедура для вычисления обобщенных коэффициентов a_k^m асимптотического разложения Уильямса:

$$\sigma_{ij}(r, \theta) = \sum_{m=1}^{m=2} \sum_{k=-\infty}^{k=\infty} a_k^m r^{k/2-1} f_{m,ij}^{(k)}(\theta), \quad (2)$$

где r, θ – полярные координаты; индекс m соответствует моде нагружения; $f_{m,ij}^{(k)}(\theta)$ – угловые функции. На рис. 1 приведены угловые распределения компонент тензора напряжений, полученные из МД-моделирования и из аналитического решения для пластины с центральным разрезом.



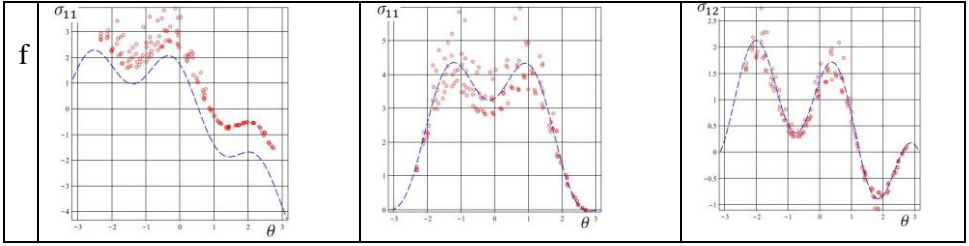


Рис. 1. Сравнение угловых распределений компонент $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{12}$, полученных с помощью метода МД (красные точки) и посредством аналитического решения (2) (синие линии) ((a) для $M^e = 1$ в кольце с внутренним радиусом 1 \AA и внешним 8 \AA ; (b) для $M^e = 1$ в кольце с внутренним радиусом 2 \AA и внешним 12 \AA ; (c) для $M^e = 0.33$ в кольце с внутренним радиусом 12 \AA и внешним 15 \AA , (d) для $M^e = 0.5$ в кольце с внутренним радиусом 1 \AA и внешним 13 \AA , (e) для $M^e = 0.66$ в кольце с внутренним радиусом 12 \AA и внешним 17 \AA , (f) для $M^e = 0.75$ в кольце с внутренним радиусом 3 \AA и внешним 9 \AA)

Из рис. 1 очевидно, что результаты МД моделирования находятся в хорошем согласии с результатами континуальной механики разрушения.

Выражения (2) могут быть представлены в матричной форме $J = AX$, где J – вектор-строка, содержащая компоненты тензора напряжений, A – матрица, содержащая угловые $f_{m,ij}^{(k)}(\theta)$ и радиальные функции $r^{k/2-1}$, X – искомые обобщенные коэффициенты. Полученное матричное уравнение может быть разрешено в замкнутой форме $X = (A^T A)^{-1} A^T J$. Для получения коэффициентов разложения (2) из результатов КЭ- и МД-моделирования выбран набор точек, принадлежащих концентрическим окружностям и кольцам, охватывающим вершину острой трещины. Для приложения к пластине с боковым надрезом нагрузок смешанного типа для различных значений параметра смешанности нагружения в пакете Abaqus моделируется наклонный надрез, угол наклона которого соответствует определенному значению параметра смешанности. Выполнено сравнение полученных КЭ-результатов с результатами атомистического моделирования. Глава 4 также содержит результаты атомистического моделирования пластины из меди и алюминия с боковым надрезом. На рис. 2 приведено сравнение полученных результатов МД-моделирования для алюминия и меди. Получены подобные распределения компонент тензора напряжений для материалов с одинаковым видом симметрии упругих свойств.

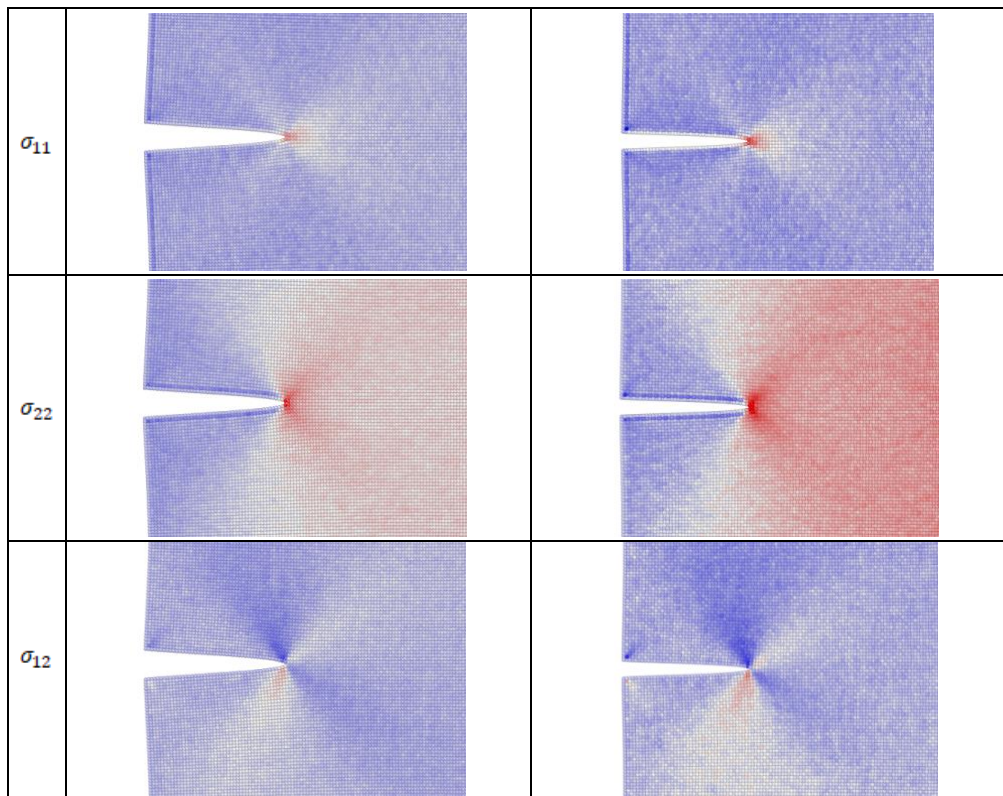


Рис. 2. Распределение компонент тензора напряжений в пластине с боковым надрезом из fcc-алюминия (слева) и из fcc-меди (справа) при действии растягивающей нагрузки, $M^e = 1$ (время 30 пс)

В пятой главе приведены результаты конечно-элементных расчетов распространения продольной, окружной и наклонной трещины в трубе, находящейся под действием внутреннего давления и растягивающей нагрузки. Результаты КЭ-моделирования приведены на рис. 3 и 4. Получены и проанализированы КЭ-результаты моделирования разрушения трубы вследствие подрастания трещин при действии внутреннего давления и распространения наклонной сквозной трещины при действии осевой нагрузки. Получены распределения второго инварианта тензора напряжений, картины распространения продольной трещины с течением времени и распределение напряжений в трубе с окружной трещиной, находящейся под действием осевого растяжения.

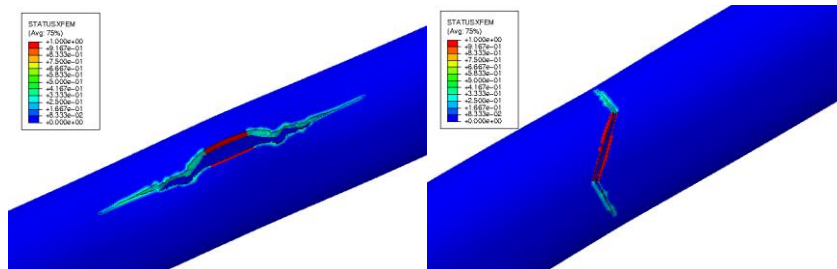


Рис. 3. КЭ-моделирование разрушения трубы вследствие подрастания продольной трещины (под действием внутреннего давления) (слева) и наклонной трещины (под действием растягивающей нагрузки) (справа)

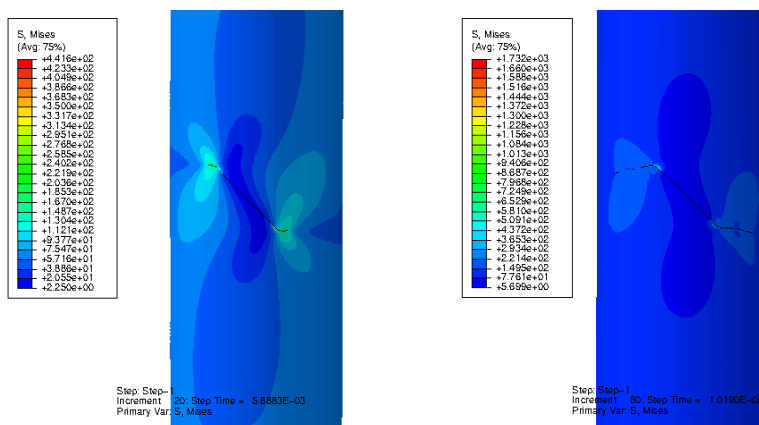


Рис. 4. Траектория распространения наклонной трещины в трубе, находящейся под действием растягивающей нагрузки

Особое внимание уделено анализу траектории роста трещины в трубке с наклонным дефектом, находящейся под действием растягивающей нагрузки (рис. 3 (справа) и рис. 4). Результаты вычислительных экспериментов, основанных на атомистически-молекулярном моделировании трубки с наклонным дефектом, находящейся под действием растягивающей нагрузки, приведены на рис. 5. Видно, что траектория роста трещины, найденная с помощью атомистического моделирования, полностью совпадает с траекторией трещины, обнаруживаемой с помощью технологии XFEM.

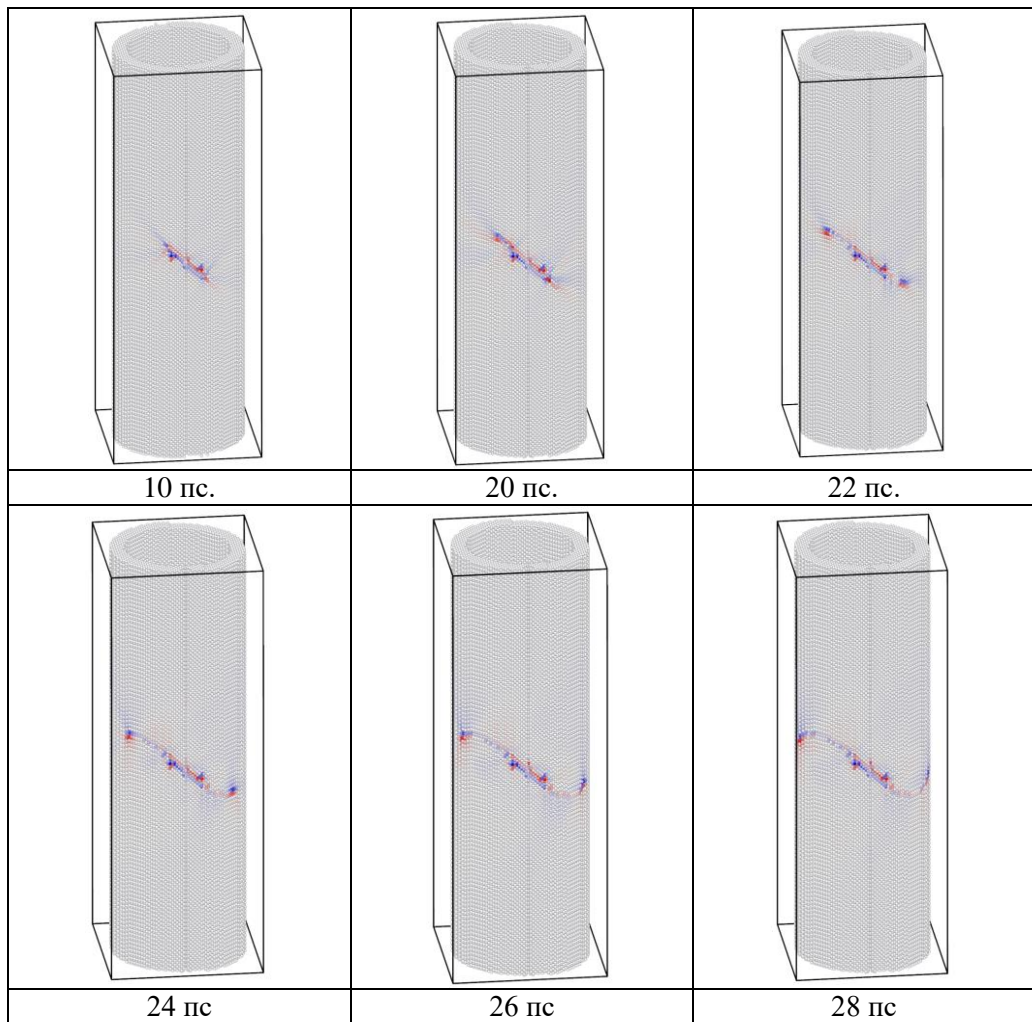


Рис. 5. Траектория распространения наклонной трещины в трубке с течением времени

В **заключении** исследования излагаются его основные результаты и выводы.

1. Выполнено компьютерное имитационное моделирование распространения трещины в монокристаллических материалах с кубической сингонией и проведен анализ распределений механических характеристик у ее вершины с помощью метода молекулярной динамики.

2. Выполнено молекулярно-динамическое моделирование роста трещины с помощью пакета LAMMPS для различных видов смешанного нагружения в полном диапазоне смешанных форм деформирования (от поперечного сдвига до нормального отрыва).

3. Определены углы направления распространения центральной трещины в ГЦК монокристаллической медной пластине, находящейся в условиях смешанного нагружения. Показано, что значения углов направления распространения трещины, полученные с помощью атомистического моделирования, согласуются с результатами классической макроскопической теории хрупкого разрушения.

4. Разработан алгоритм вычисления коэффициентов асимптотического разложения М. Уильямса более высокого порядка. Серией вычислений установлено, что необходимо учитывать высшие приближения в асимптотическом разложении М. Уильямса. Выполнено сравнение амплитудных множителей, вычисленных с помощью МД-моделирования и полученных из решения континуальной механики разрушения. Продемонстрировано, что результаты МД-моделирования и решения континуальной механики разрушения хорошо согласуются между собой.

5. Проведен вычислительный эксперимент, основанный на атомистическом молекулярном моделировании трубки с наклонным дефектом, находящейся под действием растягивающей нагрузки. Проведено моделирование трубы с продольной, окружной и наклонной трещиной, находящейся под действием внутреннего давления и растягивающей нагрузки с помощью расширенного метода конечных элементов. Показано, что траектория роста трещины, найденная с помощью атомистического моделирования, совпадает с траекторией трещины, полученной с помощью технологии XFEM.

6. Проведенные вычисления показывают, что математический аппарат классической механики разрушения может быть использован для характеристики полей напряжений на атомистическом уровне.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в изданиях, входящих в список ВАК и библиографические базы данных Scopus и WebofScience

1. Stepanova L.V., Belova O.N. Coefficients of the Williams power expansion of the near crack tip stress field in continuum linear elastic fracture mechanics at the nanoscale// Theoretical and Applied Fracture Mechanics. – 2022. – V. 119. – 103298.

2. Stepanova L.V., Belova O.N. Stress intensity factors, T-stresses and higher order coefficients of the Williams series expansion and their evaluation through molecular dynamics simulations// *Mechanics of Advanced Materials and Structures*. – 2022. doi:10.1080/15376494.2022.2084800.

3. Степанова Л.В., Белова О.Н. Идентификация коэффициентов интенсивности напряжений, T-напряжений и коэффициентов регулярных слагаемых высокого порядка в разложении Уильямса с помощью молекулярно-динамического моделирования// *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. – 2023. – № 2. С. 47–77

4. Stepanova L.V., Belova O.N. Atomistic evaluation of stress intensity factors and higher-order terms of 2D Williams series expansion by molecular dynamics method// *AIP Conference Proceedings*. – 2023. – Vol. 2627. – 020007.

5. Степанова Л.В., Бронников С.А., Белова О.Н. 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)// *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. – 2017. –Т. 4. – С. 189-213.

6. Белова О.Н., Степанова Л.В., Чаплий Д.В. Компьютерное моделирование роста трещины. Метод молекулярной динамики// *Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия*. – 2020. – Т. 26. – №4. – С. 44-55.

7. Белова О.Н., Степанова Л.В. Вычисление коэффициентов асимптотического разложения поля напряжений вблизи вершины трещины. Смешанное нагружение пластины// *Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия*. – 2020. – Т. 26. – №3. – С. 40-62.

8. Белова О.Н., Степанова Л.В. Изучение распространения трещины методом молекулярной динамики в медной пластине// *Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия*. – 2019. – Т. 25. – №3. – С. 39-61.

9. Степанова Л.В., Белова О.Н., Туркова В.А. Определение коэффициентов разложения М. Уильямса поля напряжений у вершины трещины с помощью метода цифровой фотоупругости и метода конечных элементов// *Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия*. – 2019. – Т. 25. – №3. – С. 62-82.

10. Белова О.Н. Определение механических свойств материала, моделируемого с помощью метода молекулярной динамики// *Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия*. – 2021. – Т. 27. – № 4. – С.14-21.

11. Stepanova L.V., Belova O.N. A molecular dynamics simulation analysis of mixed mode crack growth// AIP Conference Proceedings. – 2021. – V. 2371. – 020012.
12. Stepanova L.V., Belova O.N. Stress intensity factors of continuum fracture mechanics at the nanoscale// Procedia Structural Integrity. – 2021. – V. 37. – P. 900-907.
13. Belova O.N., Stepanova L.V., Kosygina L.N. Experimental study on the interaction between two cracks by digital photoelasticity method: construction of the Williams series expansion// Procedia Structural Integrity. – 2022. – V. 37. – P. 888-899.
14. Stepanova L.V., Belova O.N., Bronnikov S.A. Atomistic determination of fracture mechanics parameters// Procedia Structural Integrity. – 2021. – V. 32. Issue C. – P. 261-272.
15. Stepanova L.V., Belova O.N., Bronnikov S.A. Determination of continuum fracture mechanics parameters from molecular dynamics simulation// 14th World Congress in Computational Mechanics and ECCOMAS Congress. – 2021. – V. 100. – P. 1-7.
16. Stepanova L.V., Belova O.N. The digital photoelasticity method and finite element analysis for determination of the multi-point crack-tip field series expansions for notched semi-disks// Journal of Physics Conference Series. – 2021. – V. 1745. Issue 1. – 012104.
17. Belova O.N., Stepanova L.V. Holographic interferometry experiments and numerical analyses of the stress field on the Williams series expansion: Higher - Order terms// Procedia Structural Integrity. – 2021. – V. 39. Issue C. – P. 761-769.
18. Stepanova L.V., Belova O.N. An Over-deterministic Method Based on Atomistic Stress Fields: Higher Order Terms of the Williams power expansion// Procedia Structural Integrity. – 2021. – V. 39. – Issue C. – P. 748-760.
19. Stepanova L.V., Belova O.N. Importance of the Higher Order Terms of the Williams series expansion: Experimental Aspects and Finite Element Simulations// Procedia Structural Integrity. – 2021. – V. 39. – Issue C. – P. 770-785.
20. Belova O.N., Stepanova L.V. Photoelastic evaluation of stress fields and coefficients of multi-parameter asymptotic expansion of the crack-tip stress field// Procedia Structural Integrity. – 2021. – V. 32. Issue C. – P. 32-41.
21. Stepanova L.V., Belova O.N. Estimation of crack propagation direction angles under mixed mode loading in linear elastic isotropic materials by generalized fracture mechanics criteria and by molecular dynamics method// Journal of Physics: Conference Series. – 2018. – V. 1096. Issue 1. – 012060.

22. Stepanova L.V., Belova O.N. A computational study of mixed-mode crack growth: Molecular dynamics method// AIP Conference Proceedings. – 2020. – V. 2315. Issue 1. – 020042.
23. Belova O.N., Stepanova L.V. Computational and experimental identification of coefficients of the Williams series expansion by considering higher order terms in the cracked specimens through digital image analysis// Procedia Structural Integrity. – 2022. – V. 40. Issue C. – P. 46-60.
24. Stepanova L.V., Belova O.N. Computation of conventional fracture mechanics parameters via molecular dynamics simulations// Procedia Structural Integrity. – 2021. – V. 40. Issue C. – P. 392-405.

Научное издание

Белова Оксана Николаевна

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук на тему:

Приложения метода молекулярной динамики к задачам механики разрушения
и атомистически-континуальное описание процессов разрушения

Автореферат отпечатан с разрешения объединенного диссертационного совета
99.2.039.02 на базе ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический
университет» и ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский
университет имени С.П. Королева»
(протокол № 10 от «___» июля 2023 г.)

Формат 60×84 1/16. Набор компьютерный.

Усл. печ. л. 1,00. Тираж 100 экз. Заказ № _____.

ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет имени
академика С.П. Королева», Издательство Самарского университета
443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, д. 34.