

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева»

На правах рукописи

Белова Оксана Николаевна

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

1.1.8. Механика деформируемого твердого тела

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание учёной степени кандидата технических наук

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, доцент

Степанова Лариса Валентиновна

Самара, 2023

Оглавление

Введение	6
1 Основные сведения о методе молекулярной динамики	42
1.1 Статистическая механика и молекулярно-динамическое моделирование	42
1.2 Аналитическая механика	43
1.3 Микроканонические ансамбли	45
1.4 Эргодичность	48
1.5 Канонические ансамбли	48
1.6 Алгоритм интегрирования уравнения движения в методе молекулярной динамики	51
1.7 Межатомные потенциалы	54
1.8 Вычисление локальных напряжений в молекулярной динамике	55
1.8.1 Определение напряжений в атомистической системе. Вириальные напряжения	58
1.8.2 Определение напряжений в атомистической системе. Напряжения Харди	60
1.9 Определение напряжений, деформаций и параметра смешанности нагружения при атомистическом моделировании	61
1.10 Обзор программного обеспечения, реализующего метод молекулярной динамики	63
1.11 Выводы по главе 1	65
2 Определение механических свойств материала, моделируемого с помощью атомистического метода	66

2.1	Алгоритм нахождения упругих постоянных материала с помощью метода молекулярной динамики: монокристаллические ГЦК медь и алюминий	66
2.2	Пространственная визуализация упругих свойств среды . . .	75
2.3	Выводы по главе 2	79
3	Атомистическое (молекулярно-динамическое) моделирование роста трещин. Вычисление углов направления распространения дефекта в условиях смешанного деформирования	80
3.1	Обзор работ, направленных на исследование и анализ направления роста трещин и дефектов с помощью атомистического подхода	80
3.2	Краткий обзор критериев разрушения континуальной механики сплошной среды	84
3.3	Обзор современной научной литературы, посвященной нахождению углов направления продвижения острого дефекта на основании критериев континуальной механики упругого разрушения	88
3.4	Детали моделирования дискретной модели распространения трещины в медной пластине с центральной трещиной	94
3.5	Результаты молекулярно-динамического моделирования смешанного нагружения монокристаллической медной пластины с центральной трещиной	96
3.6	Выводы по главе 3	112
4	Параллельное молекулярно-динамическое и конечно-элементное моделирование смешанного нагружения пластины с трещиной. Процедура определения масштабных	

коэффициентов ряда Уильямса для образцов с трещинами на основе молекулярно-динамического моделирования	113
4.1 Асимптотические поля напряжений и перемещений в охватывающей вершину трещины области. Разложение Уильямса	113
4.2 Алгоритм извлечения коэффициентов разложения М. Уильямса из результатов атомистического и конечно-элементного моделирования	118
4.3 Молекулярно-динамическое моделирование нагружения монокристаллической медной пластины с центральной трещиной	123
4.4 Атомистическое (молекулярно-динамическое) моделирование смешанного нагружения монокристаллической ГЦК-медной и ГЦК-алюминиевой пластин с одним боковым вырезом	140
4.5 Конечно-элементное моделирование комбинированного нагружения пластины с одним боковым надрезом	150
4.6 Сравнение полей напряжений, полученных в результате моделирования, проведенного методом конечного элемента, и атомистическим методом	155
4.7 Моделирование монокристаллической FCC-алюминиевой пластины с боковым надрезом. Сравнение результатов моделирования для медной и алюминиевой пластин	158
4.8 Выводы по главе 4	163
5 Оценка напряженно-деформированного состояния в трубах с продольной, окружной и наклонной трещиной при действии внутреннего давления и растягивающих усилий	165
5.1 Особенности деформирования и разрушения насосно-компрессорных труб в реальных условиях	166

5.2	Конечно-элементное моделирование процесса распространения трещины в трубах	169
5.2.1	Рост продольной трещины в трубе под действием внутреннего давления	171
5.2.2	Распространение окружной трещины в трубе под действием растягивающей нагрузки	174
5.2.3	Рост наклонной трещины в трубе под действием осевой нагрузки	177
5.3	Молекулярно-динамическое моделирование НДС в трубе с дефектом	178
5.3.1	Моделирование распространения трещины в трубе с помощью метода молекулярной динамики	179
5.4	Сопоставление конечно-элементного расчета с результатами молекулярно-динамического моделирования НДС в трубе с дефектом	182
5.5	Выводы по главе 5	183
	Заключение	185
	Литература	188
	Приложения	209

Введение

Многомасштабное моделирование напряженно-деформированного состояния у вершины трещины

К 21 веку механика разрушения сформировалась в одну из наиболее развивающихся и многообещающих областей инженерной механики [11, 13]. Это связано с тем, что вызванные растрескиванием выходы из строя устройств и конструкций представляют собой гигантское беспокойство для человеческого сообщества и приводят к необходимости решения проблем безопасности и надежности конструкций. Достижения в области механики разрушения помогли оптимизировать многие конструктивные решения и, таким образом, устранить потенциальные опасности и угрозы для широкого спектра областей, начиная с машиностроения, авиации, железнодорожного строительства, геофизики и заканчивая биологией и медициной [124].

Как правило, разрушение материалов обычно начинается локально от вершины трещины, что впоследствии приводит к глобальному разрушению из-за распространения трещины по всей конструкции [11, 13]. Понимание механической реакции материала при зарождении и распространении трещины на атомном уровне имеет большое значение в механике разрушения. В связи с этим многомасштабный нано-макроанализ хрупкого разрушения приобретает ключевое значение.

Традиционным подходом к моделированию хрупкого разрушения являются гипотезы и представления механики сплошных сред [22], в которых материал рассматривается как континуум и в которых игнорируются все микроскопические особенности (химический состав, размер зерен, кристаллическая структура материала, расстояние между решетками и т.д.). В настоящее время в механике сплошных сред предложены мощные схемы

численного анализа [14], критерии разрушения, математические методы континуума, что привело к всестороннему пониманию механики хрупкого разрушения. Однако механизмы разрушения, которые объясняют потерю локального сцепления между частицами (молекулами и атомами) материала, невозможно описать с помощью макроскопических подходов. В частности, во время раскрытия трещины в атомном масштабе атомы в области вершины трещины отрываются друг от друга, чтобы разомкнуть хрупкий материал (разрушение одной пары атомов за раз).

В 1976 году В. Эшерст и В. Гувер впервые применили метод молекулярной динамики для моделирования разрушения [28]. Целью этой работы было изучение системы из нескольких атомов для исследования разрушения с использованием простого силового поля. Рассматривалась небольшая система с треугольной решеткой из 512 атомов, а взаимодействия определялись линейными пружинами. Интересно, что Эшерст и Гувер называли свои численные исследования "законами Ньютона". Однако после этой работы было широко распространено использование термина "молекулярная динамика" для описания численных исследований разрушения в атомном масштабе. С конца 1980-х годов и по настоящее время исследователи проявляли большой интерес к наноразмерной механике разрушения с использованием метода молекулярной динамики. Например, Битцер и др. [39] представили обзор литературы, а также обзор перспектив атомистических подходов к моделированию трещин с акцентом на кристаллические материалы. В последние годы особое внимание уделялось компьютерному моделированию изучения механизмов хрупкого разрушения материалов на наноуровне [8, 57, 58, 60–62, 90, 110, 111].

Методы и техники исследования процессов разрушения на наноуровне все еще находятся на стадии разработки, они постоянно совершенствуются и модифицируются представителями различных научных школ и дисци-

плин [9, 19]. Ключом к успеху в этой области является то, что предлагаемые методы должны постоянно пересматриваться исследователями с учетом их приложений к различным областям, чтобы можно было учесть все преимущества, а также недостатки. Рассмотрению проблем хрупкого разрушения на атомистическом уровне и посвящена настоящая диссертационная работа.

Микроскопическая структура материала оказывает значительное влияние на процесс разрушения [34, 43, 49, 57, 58, 60–62, 84, 90, 110, 111, 117, 122, 138, 143, 172, 174, 183, 187]. Континуальная механика разрушения продемонстрировала свою практическую применимость в моделировании механических свойств твердых тел и структур. Однако на расстояниях, сопоставимых с межатомными, концепция механики сплошных сред становится неприменимой и требуется учитывать особенности кристаллической структуры.

Очевидно, что для лучшего понимания и качественного представления процесса роста трещины необходимо знание процессов на атомном уровне. Назрела насущная необходимость развития методологий гомогенизации и осреднения для того, чтобы предложить соотношения на уровне одного кристалла и инкорпорировать эти соотношения в макромоделли и в пакеты моделирования, реализующие метод конечных элементов. Такие процедуры гомогенизации (осреднения) отсутствуют в современной литературе преимущественно из-за расхождений и противоречий в описании механизмов деформирования на основе дискретного и континуального подходов. Это усиливает необходимость разработки систематического подхода, включающего описание и представление процесса разрушения на каждом из масштабных уровней и последующее сращивание или согласование математических моделей на разных уровнях. С появлением мощных компьютеров набирает силу и становится общеупотребительным исследовательским подходом атомистическое моделирование на ос-

нове таких методов, как метод молекулярной динамики. Очевидно, что для описания процесса разрушения необходимы континуальные модели, базирующиеся на качественной информации о деформационных механизмах, получаемой из компьютерного имитационного моделирования методом молекулярной динамики кристаллической структуры, содержащей трещину. Необходимо разработать методологию для описания роста трещины и связанных с процессом распространения трещины деформационных механизмов, получаемых из имитационного моделирования методом частиц, информация о которых должна быть инкорпорирована в континуальную модель. Метод молекулярной динамики позволяет описать с хорошей разрешающей способностью кристаллическую структуру и дефекты, такие как поверхность разрыва или берег трещины, граница зерна. В настоящее время метод молекулярной динамики активно применяется для компьютерного моделирования роста трещины в различных материалах [34, 43, 49, 57, 58, 60–62, 84, 90, 110, 111, 117, 122, 138, 143, 172, 174, 183, 187].

Основная идея метода молекулярной динамики (МД) заключается в компьютерном слежении динамического поведения каждой частицы (атома) и их взаимодействия. Современные вычислительные средства, применение конструкций параллельной архитектуры и многопроцессорных вычислительных комплексов дали возможность использовать метод МД для систем, включающих $10^7 - 10^9$ атомов [15]. Математическое 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, изменяющихся от макроскопических размеров трещин, пор и других макроскопических дефектов до размеров зерна, размеров межзеренных границ и поликристаллических структур.

Актуальность исследования

Актуальность диссертационного исследования обусловлена необходимостью и перспективностью исследования процессов разрушения на нано- и микроуровнях. Механика сплошных сред перестает быть рабочим инструментом на расстояниях, где можно различить кристаллическую структуру материала. Хотелось бы расширить знания о процессах разрушения на расстояниях, сопоставимых с характерным линейным размером кристаллической решетки.

Уточнение моделей более высокого масштабного уровня и разработка методики создания многоуровневых моделей в различных развивающихся отраслях: нефтяной и газовой промышленности, машиностроении, авиационной и космической техники являются одними из перспективных направлений развития современных технологий.

Актуальность проблемы исследования обусловлена необходимостью 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. Актуальность проблемы исследования также определяется тем, что сочетание подходов механики сплошных сред и атомистического моделирования позволит получить более глубокое понимание и реалистичное описание поведения роста трещин и деформационных процессов в условиях воздействия различных сложных систем нагрузок.

Перспективным представляется использование метода молекулярной динамики для исследования процессов разрушения на микроуровне. Пионерской работой применения метода молекулярной динамики является статья середины пятидесятих годов прошлого века [26]. Свое звание метод носит в силу того, что первоначально под твердыми сферами подра-

зумевались молекулы, но впоследствии стали считать сферами атомы [26]. Пионерские работы были нацелены на исследование выполнения общих закономерностей движения большемерных систем частиц. С развитием вычислительной техники молекулярно-динамическое моделирование стало широко применяться в различных областях науки. В механике твердого тела метод молекулярной динамики применяется для изучения дефектов в кристаллах, таких как вакансии, дефекты, дислокации, межфазные и междоменные границы и т.д.

Сравнению напряженно-деформированного состояния молекулярно-динамического моделирования с решением теории континуума посвящен ряд работ [43, 60, 172, 183]. Исследования показали, что атомистическое моделирование хорошо согласуется с решениями теории континуума при определенных условиях. Однако остается открытым вопрос, сохраняется ли такое согласие между этими теориями в общем случае, например, при смешанном нагружении образца. Применимость механики разрушения сплошных сред в атомистических системах по-прежнему заслуживает глубокого рассмотрения и тщательного анализа. Механика сплошных сред предоставляет множество аналитических решений и хорошо разработанных методов, которые хотелось бы использовать на наноуровне. Одним из таких решений механики хрупкого разрушения является классическое асимптотическое представление поля напряжений М. Уильямса [181, 182]. Поэтому 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 моделирования молекулярной динамики.

В работе [183] авторы ввели аналог континуального коэффициента

интенсивности напряжений и представили метод его вычисления с помощью молекулярно-динамического моделирования. В исследовании авторы использовали поля перемещений, полученные из атомистического моделирования, и в асимптотическом разложении Уильямса удерживали два первых слагаемых. Имеющийся опыт использования асимптотического разложения Уильямса показывает, что существуют особенности, которые требуют доработки и дальнейшего исследования. В цикле работ [98–101, 116, 148, 163, 177], посвященном исследованию влияния количества удерживаемых слагаемых в разложении Уильямса, показана необходимость удержания слагаемых более высокого порядка.

Степень разработанности темы

Разрушения материалов происходят из-за зарождения, слияния и распространения трещин, дефектов и вакансий и могут быть количественно описаны классической механикой разрушения, основанной на механике сплошных сред [74, 87, 137, 142]. Традиционная механика разрушения сплошных сред определяет коэффициенты интенсивности напряжений (КИН) для характеристики полей напряжений, деформаций и перемещений вблизи вершины трещины. Критерии традиционной линейной механики упругого разрушения (ЛМУР) используют интенсивность сингулярного поля напряжений вблизи кончика трещины и концепцию коэффициента интенсивности напряжений [74, 87, 137, 142]. В работах [74, 87, 137, 142] показано, что разрушение последовательно описывается сингулярным полем континуальных напряжений. Однако механика разрушения, основанная на допущении континуума, затрудняет прогнозирование и исследование разрушения материалов на наноуровне из-за дискретности молекул и атомов [142]. Чтобы обеспечить физическое понимание явлений разрушения на наноуровне и тщательно изучить атомистическую природу разрушения, можно использовать атомистическое моделирование. До сих пор

с этой целью многие исследователи, основываясь на атомистическом моделировании, предприняли много успешных попыток рассчитать КИН и другие параметры механики разрушения [34, 43, 49, 57, 58, 60–62, 84, 90, 110, 111, 117, 122, 138, 143, 172, 174, 183, 187]. Таким образом, в самой ранней, на наш взгляд, работе 1983 года [34] были смоделированы внутренние процессы распространения трещины 1) путем расщепления, 2) путем зарождения дислокаций в нелинейной области у вершины трещины с помощью подхода молекулярной динамики в альфа-железе и меди, при использовании потенциалов Ленарда-Джонса и Морзе соответственно. Моделирование показало, что альфа-железо по своей природе хрупкое и разрушается путем расщепления вдоль плоскости куба, когда коэффициент интенсивности напряжений достигает своего критического значения согласно теории хрупкого разрушения. В [34] показано, что в железе не образуются дислокации, и даже развитие ограниченного двойникования вершин трещин в особых ориентациях не изменяет эту внутреннюю хрупкость. В меди затупление кончика трещины в области, контролируемой коэффициентом интенсивности напряжений, всегда предотвращало рост хрупкой трещины путем расщепления. Таким образом, медь по своей природе является более пластичным материалом.

В исследовании [43] представлено крупномасштабное атомистическое моделирование трещины моды I, распространяющейся в гармонической решетке. Основной целью работы [43] является изучение полей напряжений и деформаций вблизи быстро распространяющейся трещины моды I. Получены атомистические КИН, которые сопоставлены с асимптотическими решениями механики сплошной среды для динамических упругих полей для различных скоростей роста трещин. Авторы показывают, что как атомистическое напряжение, так и деформация могут быть последовательно связаны с соответствующими континуальными величинами. Исследование

показывает, что результаты атомистического моделирования хорошо согласуются с предсказаниями механической теории континуума. Это означает, что теория континуума может быть применена к задачам наноразмерного масштаба.

Применимость механики разрушения сплошной среды в атомистических системах обсуждается в [49]. Авторы приходят к выводу, что энергетический баланс Гриффитса на наноуровне все еще действителен, но концепция механики разрушения сплошной среды неприменима напрямую, поскольку размер зоны К-доминирования чрезвычайно мал. Если вязкость разрушения оценивается на основе сингулярности напряжений для прогнозирования разрушения наноструктур, необходимо учитывать двухпараметрическую модель, включающую вклад несингулярных членов в упругое решение, основанное на приближенном разложении Уильямса.

В [183] отмечается, что в механике разрушения КИН используются для количественной оценки полей механических напряжений, существующих вокруг трещины в однородном линейно-упругом материале. Критические значения КИН являются внутренней мерой сопротивления материала расщеплению (распространению трещины). Авторы подчеркивают, что на атомных масштабах разрушение происходит как серия разрывов атомных связей. Как следствие, формальный аналог КИН континуума, рассчитанный на основе атомистического моделирования, может иметь пространственно локализованные микроструктурные вклады, которые происходят от различных конфигураций связей. Способность характеризовать разрушение в атомном масштабе с точки зрения КИН дает как возможность исследовать влияние химических процессов, так и то, как добавление микроструктурного компонента влияет на точность оценки КИН. Авторы работы [183] представляют новый численный метод определения КИН на основе моделирования с помощью метода динамики частиц. Используя атомисти-

ческие координаты для описания поля перемещений вокруг вершины трещины, метод проецирует наблюдаемые перемещения на набор непрерывных полей перемещений, определяемых разложением Уильямса классической механики разрушения сплошных сред. Два члена разложения ряда Уильямса сохраняются и вычисляются с помощью моделирования методом молекулярной динамики. Точность этого метода проверяется на простой модели, а затем применяется к молекулярно-динамическому моделированию разрушения в аморфном кремнеземе. Моделирование методом МД предоставляет зависящие от времени и пространства КИН, значения которых, как показано, хорошо согласуются с экспериментальными значениями вязкости разрушения в кварцевом стекле. Главной целью статьи [138] является исследование обоснованности применения методологии линейной механики упругого разрушения, основанной на гипотезе сплошной среды. Авторы сравнивают предсказания, полученные с помощью атомистического моделирования для J -интеграла, с результатами континуальной теории. Результаты показывают значительное отклонение от ЛМУР для длин трещин ниже определенного порога. Ввиду некоторых расхождений между континуальным и атомистическим подходами все еще обсуждается вопрос о том, следует ли применять концепцию, основанную на континууме, к дискретной системе и можно ли вычислить параметры механики разрушения сплошных сред на основе моделирования методом МД. Таким образом, можно прийти к тому, что для подтверждения выводов необходимо провести дополнительное широкое моделирование методом МД. Это должно быть сделано с самым тщательным контролем, чтобы избежать ошибок при сравнении результатов континуального и атомистического подходов.

Авторы [138] приходят к выводу, что понятие скорости высвобождения энергии деформации можно рассматривать как физическую величину, которая может установить связи между атомистическим моделированием

и континуальным моделированием разрушения графенового листа. Параметры разрушения графенового листа с использованием атомистического моделирования и подходов механики разрушения сплошных сред оцениваются в работе [172]. Авторы отмечают, что ввиду дискретной структуры вблизи вершины трещины нет сингулярности напряжений, присущей решениям классической линейной механики разрушения, и делают вывод, что концепция КИН, которая обычно используется в механике разрушения сплошных сред, может не подходить для моделирования поведения трещины в атомистическом графеновом листе. Чтобы подтвердить концепцию скорости высвобождения энергии деформации, авторы статьи [172] анализируют поведение при разрушении графенового листа с центральной трещиной с использованием атомистического моделирования и ЛМУР и оценивают изменение энергии до и после расширения трещины как в континуальной, так и в атомистической моделях. В рамках атомистического моделирования графен рассматривался как атомная структура с дискретными атомами углерода, тогда как в рамках механики разрушения сплошных сред графен моделировался как изотропная однородная среда. Авторы приходят к выводу, что понятие скорости высвобождения энергии деформации можно рассматривать как физическую величину, которая устанавливает связь между атомистическим моделированием и континуальным моделированием разрушения ковалентно связанного графенового листа. Стоит отметить, что статья [172] была мотивирована более ранними работами [84, 122], в которых исследуются макроскопические параметры разрушения, как из атомистической, так и из континуальной модели. Результаты, полученные в [84, 122], показывают, что поле вблизи вершины трещины, вычисленное на основе атомистического моделирования, хорошо согласуется с полем напряжений, определяемым из решения механики сплошных сред.

В [84] представлено наноскопическое моделирование разрушения 2D-графеновых систем, содержащих трещины атомного масштаба, и исследованы макроскопические параметры разрушения. В дискретном атомистическом моделировании межатомные силы описываются потенциалом Терсоффа-Бреннера. Разработаны два метода расчета скоростей упругого высвобождения энергии в атомных системах, такие как метод глобальной энергии и метод локальных сил. Значения скоростей выделения энергии нескольких графеновых систем при симметричной (мода I) и антисимметричной (мода II) малой деформации получены из атомистического моделирования, а затем сопоставлены с результатами, полученными с помощью гомогенизированных свойств материала на основе ЛМУР. Результаты показывают хорошее согласие между дискретным атомистическим и континуальным моделированием разрушения, то есть с использованием гипотезы сплошной среды. Поля атомных напряжений в окрестности вершины трещины исследуются с помощью моделирования молекулярной механики с применением удаленной деформации, управляемой K_I -полем. Распределения атомных напряжений очень хорошо совпадают с распределениями упругих решений ЛМУР. Эти результаты устанавливают связи параметров разрушения между микроскопическим и макроскопическим описанием разрушения твердых телах с ковалентными связями.

В [122], где распространение трещины в графеновом листе в миллион атомов исследуется с помощью моделирования методом МД, с использованием эмпирического потенциала Бреннера, показано, что локальное напряжение вблизи вершины трещины может быть хорошо описано классической особенностью квадратного корня из расстояния от кончика трещины механики разрушения сплошных сред.

В [143] изучается новый графеноподобный двумерный материал и его механические свойства. Нанолист с критическими дефектами, такими как

линейные трещины и зазубрины, моделируется с помощью молекулярной динамики. Для прогнозирования механического отклика при различных температурах при одноосном растяжении учитывались различные длины трещин и диаметры надрезов. Авторы рассчитали критическое значение КИН для одной геометрии трещины при разных температурах. Авторы [143] используют распределения напряжений, полученные в результате моделирования молекулярной динамики. Использована аналитическая оценка ЛМУР для КИН в пластине с периодическими центральными трещинами при нагружении по моды I. Таким образом, критическое значение КИН оценивается путем подстановки напряжения разрушения, полученного с помощью моделирования молекулярной динамики, ширины нанолита и начальной длины трещины в формулу континуальной ЛМУР. Авторы показывают, что КИН лишь незначительно уменьшается с повышением температуры. Однако сравнение континуальных полей напряжений и атомистических полей отсутствует.

В целом, было опубликовано много исследований по моделированию молекулярной динамики двумерных нанослоев [57, 58, 60–62, 110, 111, 174]. В работе [60] моделирование молекулярной динамики было использовано для теоретического моделирования вязкости разрушения, механических свойств и поведения распространения трещин дефектных монослоев графеноподобных наноструктур оксида бериллия, подверженных некоторым дефектам формы. Критическое значение КИН рассчитывается в соответствии с ЛМУР. Таким образом, авторы предполагают, что механика разрушения сплошной среды может быть применена для характеристики поля напряжений в атомном масштабе.

Чтобы получить полное изображение наноструктуры поликристаллических нанолитов оксида бериллия, процесс разрушения был смоделирован с использованием метода молекулярной динамики в работе [62]. Получе-

ны критические значения КИН для образцов с периодической системой трещин в соответствии с ЛМУР. Авторы статьи [62] используют подход, аналогичный идее, разработанной в [60]. Используется теоретический результат для КИН из ЛМУР. Таким образом, авторы неявно принимают гипотезу, согласно которой ЛМУР работает в рассматриваемых масштабах, а поля напряжений у вершины трещины могут быть охарактеризованы КИН теории механики сплошных сред. Моделирование молекулярной динамики было использовано в [61] для изучения механики монокристаллических и поликристаллических кремний-германиевых нанослоев в зависимости от температуры. Критический КИН образцов с трещинами оценивается как функция температуры. ЛМУР используется для расчета критического КИН для пластины с центральной трещиной.

Механические свойства и поведение при разрушении поликристаллических нанослоев ВСЗ были исследованы с использованием метода молекулярной динамики в работе [57]. Как и в предыдущих исследованиях [60–62], рассчитаны критические значения КИН образцов с трещинами при различных температурах. Напряжение разрушения определяется с помощью моделирования молекулярной динамики, тогда как КИН оценивается по формуле ЛМУР. Таким образом, авторы не анализируют распределение напряжений вблизи вершины трещины. Априори предполагается, что теория сплошных сред может быть использована на наноуровне, а обычные параметры механики разрушения могут быть использованы для характеристики атомистического моделирования.

Исследование [58] направлено на изучение механических свойств и поведения при разрушении моно- и поликристаллических нанолистовых материалов ВСЗ. Авторы в [58] рассчитывают критические значения КИН как показатель вязкости разрушения, но в отличие от предыдущих работ [57, 60–62] они изучают образцы с краевыми трещинами разной длины.

Для получения критических КИН значения напряжения при разрушении были извлечены из механических свойств, полученных с помощью моделирования методом МД.

Статью [111] можно отнести к аналогичному классу работ [57, 58, 60–62], в которых моделирование методом молекулярной динамики применяется для исследования разрушения моно- и поликристаллических нанослоев. Авторы отмечают, что графеноподобные наноллисты являются ключевыми элементами многих современных материалов и систем. Авторы отмечают то, что механические свойства структурно совершенных двумерных наноструктур, включая модуль Юнга, напряжение при разрушении и деформацию разрушения, хорошо документированы, но свойства поликристаллических наноструктур менее изучены. Таким образом, методом молекулярной динамики моделируются поликристаллические наноллистовые структуры. Аналогично работам [57, 58, 60–62] оцениваются критические КИН для наноллистого материала, обладающего центральной трещиной.

Отличительной особенностью работ [57, 58, 60–62, 111] является применение метода атомистического компьютерного моделирования разрушения двумерных структур и использование обычных параметров ЛМУР для характеристики разрушения.

Распространение краевых трещин в монокристаллическом альфа-кварце в условиях нагружения по моде I было исследовано в [110] с использованием моделирования молекулярной динамики. Пять различных длин трещин используются для анализа влияния длины трещины на поведение роста трещин в каждом образце. Влияние длины трещины изучалось с точки зрения кривой напряжение-деформация материала, энергии деформации, вязкости разрушения, атомного анализа распространения трещины и деформации раскрытия трещины. Результаты показали, что при растягивающем нагружении предварительно растрескавшиеся образцы кристалли-

ческого кварца разрушаются в хрупком режиме. Напряжение разрушения в образце с предварительной трещиной (длина 40 Å) снижается примерно на 70% по сравнению кварцем без трещины. Кроме того, исследуется влияние скорости нагружения на механические свойства. Согласно полученным результатам, максимальное напряжение повышается за счет увеличения скорости нагружения, а также растет вязкость разрушения. Рассчитана поверхностная энергия разрушения монокристаллического альфа-кварца, и имеется хорошее согласие результатов с экспериментальными данными. Показано, что с помощью моделирования молекулярной динамики можно определить коэффициент интенсивности напряжения и независимый от пути J -интеграл [110].

В работе [174] моделирование молекулярной динамики используется для исследования поведения разрушения монокристаллического алюминия. Коэффициент интенсивности напряжений оценивается с помощью четырех различных методов, точность оценивается для каждого подхода и оценивается вязкость разрушения. Предложенная методология также применяется для оценки вязкости разрушения графена и алмаза с использованием опубликованных данных из других научных статей. Полученная вязкость разрушения монокристаллического алюминия сравнивается с другими наноматериалами, имеющими сходную микроструктуру. Эмиссия дислокаций во время моделирования разрушения треснувшего нанокристалла алюминия анализируется для изучения поведения разрушения. Поведение при хрупком разрушении является преобладающим режимом разрушения для наноматериалов, изученных в этом исследовании. Моделирование методом МД было проведено с использованием потенциала Стиллингера-Вебера при комнатной температуре для изучения механических свойств и определения критического КИН моды I деформированных двумерных гексагональных листов моносulfида кремния и селенида германия в ра-

боте [90]. Следовательно, в работах [57, 58, 60–62, 90, 110, 111, 174] изначально предполагается гипотеза о применимости ЛМУР на наноуровне.

В [117] метод молекулярной динамики использовался с применением потенциалов Терсоффа для определения КИН в условиях моды I гексагональных листов силицена, нитрида алюминия и карбида кремния. Обнаружено, что K_{Ic} (K_{Ic} - критическое значение КИН для моды I) для листов силицена, нитрида алюминия и карбида кремния составляет примерно 80, 66 и 47%; и на 73, 64 и 45% меньше значений для графена для трещин вдоль кресла и зигзагообразные направления соответственно. Таким образом, в работе [117] оцениваются КИН. Определение критического значения КИН основано на представлении поля перемещений вблизи вершины трещины ЛМУР. Поле перемещений вблизи вершины трещины было использовано для определения критических размеров графена в [187], где представлена методика изучения разрушения в наноматериалах путем объединения квантовой механики и механики сплошных сред. Таким образом, критические значения КИН для краевой трещины длиной 11.4 нм были вычислены с различными размерами квантовых областей. Область содержала от 110 до 210 атомов. Несмотря на это, показано, что КИН имеет смысл, а критический КИН не чувствителен к размеру области квантовой механики для кресельных трещин.

Принципиально иной подход был реализован в работе [91], где изучается распространение трещин в однослойном графеновом листе с краевыми трещинами, деформируемом с постоянной скоростью деформации. В [91] используются LAMMPS и потенциал Терсоффа для нахождения КИН в условиях нагружения по моде I. Осевые напряжение и КИН в точке листа графена вычислены 1) с помощью теоремы о вириале либо 2) с помощью напряжения в атоме, расположенном непосредственно у вершины трещины. Обнаружено, что два значения КИН отличаются друг от друга примерно

на 8% и согласуются с данными, приведенными в литературе, полученными либо аналитически, либо из данных испытаний. Авторы приходят к выводу, что предложенный и использованный метод может быть применен для поиска КИН в любой наноструктуре.

В работе [68] также обсуждаются некоторые соображения о КИН в атомном масштабе. П. Галло отмечает [68], что недавние результаты показали обоснованность концепций КИН. Основываясь на молекулярной статистике, автор формулирует два важных вывода: 1) анализ молекулярной статистики предсказывает не бесконечное напряжение вблизи вершины трещины, а скорее его конечное значение; 2) даже если сингулярность напряжения отсутствует вблизи области вершины трещины, напряжение все равно близко к зависимости обратно пропорциональной квадратному корню из расстояния от вершины трещины, поскольку предсказан с помощью ЛМУР.

В [97] разработана вычислительная схема, основанная на общем J интеграле на атомном уровне (или интеграле сохранения, который рассчитывается для двух соседних состояний) для анализа разрушения в при смешанном нагружении вдоль границ зерен в поликристаллических твердых телах. Дискретная атомистическая информация, полученная в результате молекулярно-динамического моделирования распространения трещин вдоль границ зерен в поликристаллических твердых телах, объединяется с асимптотическими сингулярными полями вблизи вершины межфазной трещины между разнородными материалами в интеграле, построенном на основе общего J интеграла на атомном уровне для извлечения отдельных КИН мод I и II. В работе [97] показано, что этот метод выгоден для изучения межзеренного разрушения хрупких поликристаллических твердых тел в атомном масштабе, поскольку распространение трещины вдоль границ зерен обычно можно рассматривать как разрушение в смешанном режиме

нагружения.

В [51] предложен репрезентативный многомасштабный метод на основе объемных элементов для исследования механизма распространения усталостных трещин с помощью молекулярной динамики и расширенного метода конечных элементов (extended finite element method — XFEM). В [51] построена атомная модель пластины из углеродистой стали для изучения поведения усталостной трещины в микромасштабе методом МД. Авторы предполагают, что коэффициент интенсивности напряжений может быть получен с помощью программы LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [202], поскольку LAMMPS может вычислять атомное напряжение по формуле Гриффитса. Более того, авторы показывают, что константы закона Пэриса могут быть вычислены по результатам МД моделирования, а затем константы могут быть переданы в XFEM для расчета срока службы образца. Таким образом, закон Пэриса можно рассматривать как связующее звено между методами XFEM и МД. Тем не менее, до сих пор обсуждается вопрос о том, следует ли применять основанную на континууме концепцию, такую как напряжение, к системе, состоящей из атомов [71, 95, 166, 189, 198].

Таким образом, несмотря на ряд исследований, посвященных этой теме, можно сделать вывод, что остаются пробелы, которые необходимо изучить и проанализировать, чтобы полностью понять взаимосвязь между различными уровнями процессов разрушения, их инициацией и эволюцией. В настоящее время нет единой точки зрения на возможность использования механики разрушения сплошных сред для описания процессов разрушения на атомном уровне. С одной стороны, классическая механика разрушения предоставляет исследователю глубокую и хорошо разработанную теоретическую базу, с другой стороны, метод молекулярной динамики предоставляет практически неограниченные вычислительные возможности для ком-

пьютерных экспериментов. Разумное сочетание и применение обоих подходов позволяют изучать процессы разрушения одновременно на каждом из уровней и учитывать взаимное влияние этих процессов.

В настоящей диссертационной работе реализован подход, основанный на широких вычислительных экспериментах, по вычислению атомистических КИН и коэффициентов более высокого порядка разложения Уильямса из атомистического исследования, выполненного в LAMMPS с использованием модельного материала.

Таким образом, применимость механики разрушения сплошных сред в атомистических системах по-прежнему заслуживает глубокого рассмотрения и тщательного анализа. Механика сплошных сред предоставляет множество аналитических решений и хорошо разработанных методов, которые хотелось бы использовать на наноуровне. Одним из таких решений механики хрупкого разрушения является классическое асимптотическое представление с помощью поля напряжений Уильямса [181, 182]. Поэтому диссертационная работа направлена на исследование применимости классической механики разрушения для описания процессов разрушения на наноскопическом уровне, а именно использование многопараметрического решения разложения Уильямса механики сплошных сред для описания полей напряжений вблизи трещины на наноуровне с помощью моделирования методом молекулярной динамики. Поля напряжений у кончика надреза будут определены с использованием двух подходов: континуального и атомистического. В рамках континуального подхода для вычисления полей напряжений используется метод конечных элементов, а коэффициенты многоточечного разложения Уильямса вычисляются с использованием алгоритма переопределенного метода, тогда как в рамках атомистического подхода также используется процедура переопределенного метода, но используются атомистические поля напряжений, найденные с помощью молекулярно-

динамического моделирования с учетом влияния дискретности.

В целом, первоначальная мотивация для этого исследования была тройственной. Первой мотивацией является взаимное сравнение угловых распределений компонентов тензора напряжений вблизи вершины трещины, полученных из концепций механики сплошных сред, и окружных зависимостей атомных напряжений вокруг вершины трещины, полученных с помощью моделирования методом молекулярной динамики. Вторая причина заключается в вычислении коэффициентов более высокого порядка разложения в ряд Уильямса с использованием двух совершенно разных подходов, континуальных и атомистических методов, а также возможности описания поля механических напряжений в окрестности вершины острой трещины с использованием разложения Уильямса на атомистическом уровне. Третья мотивация исходит из очевидной необходимости соединения метода МКЭ и метода МД, создания многомасштабных параллельных атомистически-континуальных моделей, сочетающих континуальное и атомистическое моделирование [53, 69, 118, 171, 188].

Следовательно, основная цель исследования заключается в том, чтобы вычислить КИН и члены более высокого порядка разложения Уильямса для нагрузок во всем диапазоне параметра смешанности, описывающего нагрузки смешанного режима, с помощью атомистического моделирования и сравнить результаты с коэффициентами разложения Уильямса, известными из ЛМУР [137] для пластины с центральной трещиной и боковым надрезом. Члены более высокого порядка могут вносить значительный вклад в напряжение вблизи трещины. В настоящее время существует четкое понимание того, что необходимо учитывать члены более высокого порядка разложения Уильямса [74, 87]. Важность членов более высокого порядка осознается на расстоянии от вершины трещины [53, 74, 75, 116, 150, 155, 159, 161], где эти слагаемые имеют существенный

вклад по сравнению с первыми слагаемыми. Таким образом, члены более высокого порядка асимптотического разложения в ряд Уильямса учитываются при анализе, основанном как на механике сплошных сред, так и на атомистическом моделировании.

Цели и задачи исследования

Одним из принципиальных направлений в области анализа и дизайна конструкций является учет наличия дефектов и трещин, поскольку у вершины трещины механические напряжения и деформации в значительной степени увеличиваются и формируется область концентрации напряжений. Присутствие трещин в образце приводит к повышению усилий и времени, затрачиваемых на техническое обслуживание важных элементов конструкций. Поскольку трещины и дефекты не могут быть ликвидированы, возникает необходимость в разработке процедуры для количественной оценки и прогнозирования поведения конструкций с трещинами в условиях эксплуатации. Современным и актуальным становится совершенствование и развитие методов и подходов исследования разрушения в атомистическом масштабе, в связи с очевидной необходимостью учета процессов и явлений, протекающих на наноскопическом уровне.

Цель диссертационной работы состоит в молекулярно-динамическом моделировании и нахождении напряженно-деформированного состояния, ассоциированного с непосредственной окрестностью вершины трещины или надреза, в образцах, подверженных действию нормального отрыва и смешанного деформирования, и сопоставлении полученных результатов с решениями классической континуальной механики разрушения.

Достижение поставленных целей предполагает решение следующих задач:

1. Вычисление углов направления распространения центральной сквоз-

ной трещины в пластине, находящейся под действием смешанной системы нагрузок (нормальный отрыв и поперечный сдвиг) во всем диапазоне смешанных форм нагружения: от чистого отрыва до чистого поперечного сдвига. Сравнение результатов атомистического моделирования и континуальной механики разрушения, полученных с помощью известных классических критериев разрушения, а именно, критерия максимального окружного напряжения и критерия минимальной плотности энергии упругой деформации.

2. Разработка и реализация методики вычисления коэффициентов интенсивности напряжений и коэффициентов слагаемых более высокого порядка разложения Уильямса (обобщенных коэффициентов интенсивности напряжений), с помощью метода молекулярной динамики.
3. Выполнение молекулярно-динамического моделирования смешанного деформирования пластины с центральным разрезом в изотропной и анизотропной средах. Сравнение результатов, полученных посредством имитационного моделирования методом молекулярной динамики и точного аналитического решения механики хрупкого разрушения.
4. Реализация молекулярно-динамического моделирования смешанного нагружения пластины с одним боковым надрезом в изотропной и анизотропной линейно упругих средах. Проведение конечно-элементного моделирования смешанного деформирования пластины с одним боковым надрезом и сопоставление полученных результатов с молекулярно-динамическим решением.
5. Проведение атомистически-молекулярного моделирования трубки с наклонным дефектом, находящейся под действием растягивающей

нагрузки. Проведение 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.

Методы исследования

Компьютерное моделирование разрушения на атомно-молекулярном уровне реализовано с помощью метода молекулярной динамики, который в последние десять лет приобрел разнообразное и обширное применение в различных сферах естествознания. Однако следует признать, что метод МД сравнительно мало применялся для изучения и описания механического отклика деформируемых твердых тел. Будучи типичным методом компьютерного моделирования, подход за счет расширения вычислительных возможностей позволяет получать качественно новые результаты. Будучи дискретным методом, метод молекулярной динамики не имеет недостатков континуальных теорий, которые не дают возможности описания нарушения сплошности вещества за счет дискретности внутренней структуры материала.

Компьютерное имитационное моделирование процессов разрушения и распространения трещины на атомно-молекулярном уровне методом молекулярной динамики, моделирование малоразмерных и наноразмерных кристаллических структур с дефектами для выяснения закономерностей процессов разрушения на малых масштабах было выполнено с помощью суперкомпьютера "Сергей Королев" и программы LAMMPS [202]. Свободно распространяемая программа LAMMPS реализует алгоритм метода молекулярной динамики и имеет большие библиотеки потенциалов взаимодействия, а также допускает параллельные вычисления.

Выполнено моделирование разрушения и структуры материала у вер-

шины трещины на атомном уровне: реализация метода молекулярно-динамического моделирования для предсказательного описания структуры области у вершины трещины и, в целом, многомасштабных процессов вблизи кончика трещины. Осуществлено моделирование методом динамики частиц изменения внутренней структуры и напряженного состояния в окрестности вершины трещины при действии различных форм нагружения: нормальный отрыв, поперечный сдвиг, смешанное нагружение.

С целью сопоставления результатов, полученных с помощью атомистического моделирования, с решениями континуальной механики выполнен расчет нормального и смешанного нагружения образцов с трещиной с помощью метода конечных элементов.

Решение системы уравнений, полученной с целью вычисления амплитудных множителей, выполнено с помощью переопределённого метода.

Научная новизна

Научная новизна заключается в следующем:

1) Впервые проведен молекулярно-динамический расчет углов направления распространения трещины в гранецентрированной монокристаллической меди и алюминии во всем диапазоне комбинированных форм нагружения, изменяющихся от идеального нормального отрыва до идеального поперечного сдвига. Обнаружено, что величины углов направления распространения трещины, полученные с помощью атомистического (дискретного) моделирования, полностью согласуются с результатами классической макроскопической теории хрупкого разрушения.

2) Впервые проведен анализ поля механических напряжений в окрестности вершины острой трещины с помощью атомистического молекулярно-динамического моделирования деформирования ГЦК медной и алюминиевой пластин с центральной острой трещиной для всего спектра комбинированных форм нагружения, начиная от идеального нормального прило-

жения нагрузки и заканчивая идеальным поперечным сдвигом пластин с помощью потенциала внедренного атома в открытом коде LAMMPS, реализующем метод молекулярной динамики. 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) Предложена 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 вычислены с помощью техники переопределенного метода, базирующегося на данных атомистически-молекулярных вычислений.

4) Построена последовательность численных (конечно-элементных) решений задач о деформировании пластины с одним боковым горизонтальным и наклонным надрезами для всего интервала значений параметра смешанности нагружения. На основании полученного конечно-элементного решения с помощью техники переопределенного метода вычислены коэффициенты разложения М. Уильямса. Проведены атомистические расчеты для ГЦК медной и алюминиевой пластин в молекулярно-динамическом пакете LAMMPS. Показано, что угловые распределения атомарных напряжений совпадают с результатами конечно-элементных вычислений, а коэффициенты асимптотического разложения М. Уильямса могут быть вычислены с помощью данных, полученных посредством конечно-элементного (континуального)

нуального) и атомистически-молекулярного (дискретного) подходов.

5) Впервые проведен вычислительный эксперимент, основанный на атомистически-молекулярном моделировании трубки с наклонным дефектом, подверженной действию растягивающей нагрузки. Параллельно были проведены конечно-элементные расчеты распространения продольной, окружной и наклонной трещин в трубе, 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 расширенного метода конечных элементов (XFEM).

Практическая и теоретическая значимость исследования

Теоретическая значимость работы состоит в доказательстве возможности применения математического аппарата континуальной механики разрушения на атомистическом уровне: доказано, что на атомистическом уровне асимптотическое описание М. Уильямса континуальной механики упругого разрушения качественно и количественно описывает механические поля, ассоциированные с вершиной трещины или надреза. Предложен алгоритм, основанный на дискретном подходе метода молекулярной динамики и на технике переопределенного метода, позволяющий вычислить обобщенные коэффициенты интенсивности напряжений.

Практическая ценность работы заключается в том, что предлагаемые расчетные схемы могут быть использованы для определения напряженно-деформированного состояния элементов и деталей ответственных конструкций, находящихся под действием реальных эксплуатационных систем нагружения.

Решение вопросов комбинированного нагружения образцов и конструкций с трещинами имеет принципиальное практическое значение и высокую теоретическую ценность. Оборудование, детали и различные устройства на

предприятиях зачастую подвергаются сложным системам термомеханических воздействий. Одновременно элементы конструкций могут находиться в агрессивной среде и быть подверженными коррозионному, химическому и тепловому воздействию. Несомненно, представляется существенным своевременно выявить образующиеся несовершенства (дефекты и трещины), знать причины их появления и прогнозировать пути их развития. На основе новых знаний можно предпринимать своевременные, соответствующие действия и решения для устранения трещин и дальнейшего предотвращения их появления.

Результаты настоящей диссертации могут найти широкое применение в инженерной практике во многих отраслях промышленности и сферах жизнедеятельности человека, таких как машиностроение, авиационная и космическая отрасли, атомная энергетика, материаловедение, медицина. Проведенные исследования и полученные результаты индикативно показывают, что в случаях, когда необходимы понимание и рассмотрение двойственной природы структуры среды (континуальной, непрерывной при рассмотрении в больших масштабах длины и дискретной при анализе в атомном масштабе), требуется многомасштабное моделирование материалов (МММ) для дополнения континуального и атомистического анализов. В переходных масштабах (между непрерывным (континуальным) и атомистическим (дискретным)) континуальные подходы перестают работать, а атомистические методы имеют присущие им ограничения по времени и размерам. В силу сформулированных свойств, совершенно очевидно, что требуется интеграция и сочетание двух подходов. Определенно необходимы, многоиерархические модели, направленные на учет механизмов атомистического уровня в континуальной формулировке деформационного отклика материала, что позволит сочетать сложное, в общем случае, микроструктурное строение материала и абстракцию континуальной теории. Поэтому оче-

видно, что проведенное исследование может быть успешно применено при анализе прочности и оценке несущей способности конструкций. Результаты молекулярно-динамического моделирования предоставляют возможность более полного понимания механизмов разрушения и реалистичного представления процесса распространения трещин в конструкциях и оборудовании, находящихся в условиях действия сложных термомеханических и иных воздействий.

Положения, выносимые на защиту

1) Молекулярно-динамическое определение углов продвижения трещины на атомарном уровне 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 зависимостей компонент тензора напряжений в охватывающей вершину трещины области, полученных с помощью атомистического МД моделирования ГЦК медной и алюминиевой пластин с центральной трещиной в полном интервале комбинированных форм нагружения от идеального нормального отрыва до идеального поперечного сдвига пластин 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 ато-

мистических 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 угловых зависимостей компонент тензора напряжений для ГЦК медной и алюминиевой пластин с одним боковым надрезом в МД-пакете LAMMPS. Показано, что угловые распределения атомистических напряжений совпадают с расчетами, проведенными в конечно-элементном комплексе. Алгоритм вычисления и вычисленные обобщенные коэффициенты асимптотического ряда М. Уильямса на основе данных, извлеченных из атомистически-молекулярного (дискретного) подхода.

6) Вычислительный эксперимент, основанный на атомистически-молекулярном моделировании трубки с продольным, окружным и наклонным дефектом, подверженной действию внутреннего давления и растягивающей нагрузки. Определение траектории роста трещины в трубке с наклонным дефектом, находящейся под действием растягивающей нагруз-

ки. Конечно-элементные расчеты распространения наклонной трещины в трубе, находящейся под действием растягивающей нагрузки. Анализ траектории роста трещины с помощью атомистического моделирования и с помощью технологии расширенного метода конечных элементов (XFEM).

Достоверность полученных научных результатов

Достоверность результатов, полученных в ходе исследования, обеспечивается применением классических и достоверных методов механики континуума (теоретических подходов континуальной механики деформируемого твердого тела и вычислительных методов механики сплошных сред). Достоверность результатов обусловлена применением современных методов компьютерного моделирования и апробированных программ, согласием полученных результатов, найденных различными методами.

Личный вклад автора В ходе исследования автором выполнено молекулярно-динамическое моделирование задач, постановки которых были предложены научным руководителем Степановой Л.В. Все необходимые расчеты проведены автором самостоятельно, анализ полученных результатов проводился совместно со Степановой Л.В.

Апробация работы Основные положения диссертационной работы были изложены и обсуждены в рамках 8 всероссийских и 11 международных конференций и достаточно полно отражены в публикациях. Автором было принято участие в следующих конференциях:

1. 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.);
2. X Всероссийская конференция по механике деформируемого твердого тела (г. Самара, 18-22 сентября 2017 г.);

3. Международная научно-техническая конференция "Перспективные информационные технологии" (Самара, 14-16 марта 2017 г.);
4. Международная научно-техническая конференция "Перспективные информационные технологии" (Самара, 14-16 апреля 2018 г.);
5. IV Международная конференция и молодежная школа "Информационные технологии и нанотехнологии" (Самара, 24-27 апреля 2018 г.);
6. XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (Уфа, 19-24 августа 2019 г.);
7. VI Международная конференция и молодежная школа "Информационные технологии и нанотехнологии" (Самара, 26-29 мая 2020 г.);
8. XXIX Всероссийская школа-конференция "Математическое моделирование в естественных науках" (Пермь, 07-09 октября 2020 г.);
9. XIV Международная конференция "Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций" (Екатеринбург, 9-13 ноября 2020 г.);
10. XXX Всероссийская школа-конференция "Математическое моделирование в естественных науках" (Пермь, 06-09 октября 2021 г.);
11. Всероссийская научная конференция "Математика и математическое моделирование" (Самара, 10-12 ноября 2021 г.);
12. XV Международная конференция "Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций" (Екатеринбург, 20-24 декабря 2021 г.);
13. XVI Международная конференция "Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций" (Екатеринбург, 16-20 мая 2022 г.);

14. The 4th International Conference on Structural Integrity (ICSI 2021) (Funchal, Madeira, Portugal, 30 August - 1 September, 2021);
15. The 7th International Conference on Crack Paths (CP 2021) (September 21st to 24th, 2021);
16. World Congress in Computational Mechanics and ECCOMAS Congress. 14th. Sep. "14th WCCM-ECCOMAS Congress, 2020".
17. XXXI Всероссийская школа-конференция "Математическое моделирование в естественных науках"(Пермь, 05-08 октября 2022 г.);
18. Международная конференция "Физическая мезомеханика материалов. Физические принципы формирования многоуровневой структуры и механизмы нелинейного поведения"(Томск, 05-08 сентября 2022 г.);
19. XXIII Зимняя школа по механике сплошных сред. (Пермь, 13-17 февраля 2023 г.)

Публикации Результаты диссертационной работы отражены в 35 работах, из которых 6 входят в издания, рекомендованные Высшей аттестационной комиссией. 18 работ опубликовано в изданиях, индексирующихся библиографическими базами данных Scopus и WebofScience.

Работа была поддержана средствами гранта Российского фонда фундаментальных исследований (проект №20-31-90082) и Российского научного фонда (№21-11-00346).

Структура и объем работы

Структура диссертации состоит из введения, пяти глав, общих выводов, списка литературы, включающего 208 наименований, среди которых 22 отечественных и 186 иностранных авторов, и 5 приложений. Текстовая

часть работы содержит 222 страницы машинного текста, включая 1 таблицу и 84 рисунка.

Во введении приведено обоснование актуальности рассматриваемой темы, сформулированы цель и основные задачи работы. Отмечена научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, приведена ее общая характеристика.

Первая глава посвящена обзору фундаментальных знаний о моделировании процессов механики разрушения, в частности, о распространении трещин с помощью атомистического метода. В главе рассмотрено развитие методов атомистического компьютерного моделирования. Сначала приведены общие сведения о методе молекулярной динамики, описаны основные понятия метода: уравнение движения, алгоритм Верле, термостат и баростат, термодинамические ансамбли, межатомный потенциал. Приведен обзор программного обеспечения для реализации метода молекулярной динамики. Затем приведен обзор применения молекулярной динамики с целью моделирования распространения трещин. Описаны решаемые в данных работах задачи и основные выводы. В частности, приведены работы, направленные на вычисление коэффициентов интенсивности напряжений и углов распространения трещин для различных материалов.

Во второй главе приведено описание моделируемого материала, его механических свойств. В вычислительных экспериментах были выбраны медь и алюминий с гранецентрированной кристаллической решеткой. Их тензоры упругих модулей были определены с использованием потенциальной энергии, вычисленной в ходе молекулярно-динамического расчета. Затем с помощью различных схем усреднения, получены средние значения модуля Юнга, коэффициента Пуассона и объемного модуля (по схемам Фойгта, Ройса и Хилла).

Третья, четвертая и пятая главы являются основной частью диссертации.

ции. В третьей главе на примере медной и алюминиевой пластин с центральной трещиной приведены результаты определения угла 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 приложения смешанного нагружения. В ходе атомистического молекулярно-динамического моделирования рассчитываются углы направления роста дефекта для комбинированного нагружения (растяжение и сдвиг) пластины. Далее проводится сравнение полученных результатов молекулярно-динамического моделирования со значениями из других источников. В диссертации приведены углы продвижения центральной трещины в ГЦК медной пластине в зависимости от параметра смешанности нагружения.

В четвертой главе представлены результаты имитационного моделирования комбинированного нагружения пластины с центральным разрезом и пластины с боковым надрезом. В работе проведено сравнение аналитического решения континуальной механики разрушения с решением, полученным из молекулярно-динамического моделирования. С этой целью была разработана процедура для вычисления коэффициентов асимптотического разложения Уильямса. Моделирование смешанного нагружения пластины с боковым надрезом проведено с помощью пакета Abaqus [206], реализующего метод конечного элемента. Для получения коэффициентов разложения Уильямса из результатов КЭ- и МД-моделирования был выбран набор точек, принадлежащих концентрическим окружностям и кольцам, охватывающим вершину острой трещины. Для приложения к пластине с трещиной нагрузок смешанного типа для варьируемых величин параметра смешанности нагружения в пакете Abaqus моделируется наклонный надрез. Каждый угол наклона ξ (угол между горизонтальной осью и вырезом)

соответствует определенному значению параметра смешанности. Выполнено сравнение полученных КЭ-результатов с результатами атомистического моделирования. Показано, что результаты моделирования находятся в хорошем согласии с результатами континуальной механики разрушения. Сравнение результатов для алюминиевой и медной пластин показало идентичное распределение компонент тензора напряжений.

В пятой главе приведены результаты конечно-элементных расчетов распространения продольной, окружной и наклонной трещины в трубе, подверженной действию внутреннего давления и растягивающей нагрузки. Приведены результаты МД моделирования задачи одноосного нагружения трубки с центральной наклонной трещиной и проведено сравнение траектории распространения трещины с результатами КЭ-моделирования.

В заключении исследования излагаются его основные результаты и выводы.

Благодарности Автор выражает глубочайшую благодарность и признательность научному руководителю Степановой Л.В., за поддержку и руководство на протяжении всей исследовательской работы, за постановку исследовательских задач и профессиональное консультирование. Особая благодарность тем людям, которые сделали возможным это диссертационное исследование, включая сотрудников кафедры математического моделирования в механике.

Глава 1. Основные сведения о методе молекулярной динамики

Глава посвящена обзору фундаментальных знаний об основах метода молекулярной динамики, приведены основные уравнения статистической механики, алгоритмах интегрирования уравнений движения. В рамках данной главы будут представлены общие сведения о методе атомистического компьютерного моделирования. Приведены теоретические основы метода молекулярной динамики, описаны основные понятия: уравнение движения, алгоритм Верле, термостат и баростат, термодинамические ансамбли, межатомный потенциал. Дан обзор программного обеспечения, реализующего метод молекулярной динамики.

1.1. Статистическая механика и молекулярно-динамическое моделирование

Метод молекулярной динамики заключается в изучении изменения состояний системы взаимодействующих частиц или атомов с течением времени посредством численного интегрирования уравнений движения (УД) атомов или молекул. Метод базируется на математическом описании изменения положений и скоростей частиц или атомов с учетом заданного межатомного взаимодействия [27]. После численного интегрирования УД системы частиц определяются их динамические траектории, а далее, средние значения всех динамических переменных. В основе метода динамики частиц лежат гипотезы о представлении материальных частиц материальными точками с постоянной массой и об описании их движения согласно классическим уравнениям движения второго закона Ньютона.

Статистическая механика, иллюстрирующая связь между микро-

пическими степенями свободы (положение \mathbf{r} и скорость \mathbf{v} каждого атома) и макроскопическими термодинамическими переменными (температура T и давление P системы, содержащей множество атомов), является теоретической основой молекулярного моделирования. Для метода Монте-Карло микроскопические конфигурации, генерируемые случайным процессом, должны удовлетворять распределению вероятностей из статистической механики [27, 173]. С другой стороны, в соответствии с различными термодинамическими условиями, гамильтониан, выводящий уравнения движения, необходимые для молекулярной динамики, также определяется на основе статистической механики. Поскольку МД-моделирование используется для представления и анализа процесса разрушения, возникающего в результате разрыва межатомных связей, и необходимо увидеть, способна ли механика твердого тела и, в частности, механика разрушения количественно описать явления разрушения в дискретных кристаллах, требуется обратиться к статистической механике.

1.2. Аналитическая механика

Рассмотрим систему, содержащую N атомов с одинаковой массой m , взаимодействующих посредством межатомного потенциала $U(\mathbf{r}^1, \mathbf{r}^2, \dots, \mathbf{r}^N)$, определяющего межатомную силу \mathbf{F}^α :

$$\mathbf{F}^\alpha = -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}^\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, N. \quad (1.2.1)$$

Уравнение движения этих частиц описываются с помощью второго закона Ньютона

$$\mathbf{F}^\alpha = m\ddot{\mathbf{r}}^\alpha. \quad (1.2.2)$$

Рассматривая изолированную систему, траекторию каждого атома можно оценить, решив уравнение (1.2.2). Кроме того, гамильтониан (полная энергия) \hat{H} всей системы представляет собой сумму кинетической K и

потенциальной энергий U

$$\widehat{H}(\mathbf{r}^1, \mathbf{r}^2, \dots, \mathbf{r}^N, \dot{\mathbf{r}}^1, \dot{\mathbf{r}}^2, \dots, \dot{\mathbf{r}}^N) = K + U. \quad (1.2.3)$$

Тогда, используя уравнение движения Лагранжа второго рода,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial K}{\partial \dot{\mathbf{r}}^\alpha} \right) + \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}^\alpha} = 0, \quad (1.2.4)$$

кинетическую энергию K

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} m (\dot{\mathbf{r}}^\alpha)^2 \quad (1.2.5)$$

и межатомные силы в уравнении (1.2.1), можно вывести те же уравнения движения, что и уравнение (1.2.2). Это показывает, что состояние равновесия каждой частицы можно рассматривать как состояние, отвечающее сохранению энергии. После определения обобщенных координат как импульсы каждого атома \mathbf{p}^α , полная энергия становится функционалом, обозначенным $\widehat{H}(\mathbf{r}^1, \mathbf{r}^2, \dots, \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^1, \mathbf{p}^2, \dots, \mathbf{p}^N)$ и кинетическая энергия может быть записана как

$$K = \sum_{\alpha} \frac{(\mathbf{p}^\alpha)^2}{2m}. \quad (1.2.6)$$

Из уравнения движения Лагранжа второго рода (1.2.4) следует

$$\dot{\mathbf{p}}^\alpha = -\frac{\partial \widehat{H}}{\partial \mathbf{r}^\alpha}. \quad (1.2.7)$$

Рассмотрим полную энергию

$$\frac{d\widehat{H}}{dt} = \sum_{\alpha} \frac{\partial \widehat{H}}{\partial \mathbf{r}^\alpha} \dot{\mathbf{r}}^\alpha + \frac{\partial \widehat{H}}{\partial \mathbf{p}^\alpha} \dot{\mathbf{p}}^\alpha = \sum_{\alpha} \frac{\partial \widehat{H}}{\partial \mathbf{r}^\alpha} \dot{\mathbf{r}}^\alpha - \frac{\partial \widehat{H}}{\partial \mathbf{p}^\alpha} \frac{\partial \widehat{H}}{\partial \mathbf{r}^\alpha} = 0, \quad (1.2.8)$$

откуда следует соотношение

$$\dot{\mathbf{r}}^\alpha = -\frac{\partial \widehat{H}}{\partial \mathbf{p}^\alpha}. \quad (1.2.9)$$

Уравнения (1.2.7) и (1.2.9) известны как уравнения движения Гамильтона [45,92]. В отличие от уравнения движения Лагранжа (1.2.4), являющегося набором $3N$ дифференциальных уравнений второго порядка, уравнение

Гамильтона представляет собой набор из $6N$ дифференциальных уравнений первого порядка.

1.3. Микростатистические ансамбли

Если уровень энергии изолированной системы обозначить E , количество микросостояний, которое позволяет энергию системы поддерживать на уровне E , выражается как

$$\Omega_{NVE} = \frac{1}{N!h^{3N}} \int dr^1 dr^2 \dots dr^N dp^1 dp^2 \dots dp^N \delta(\hat{H}(r, p) - E), \quad (1.3.1)$$

где δ – дельта функция Дирака, факториал $N!$ получен от неразличимых атомов (например, если два атома меняют свое положение, это все равно то же состояние) и h – это постоянная Планка, чтобы величина Ω_{NVE} была безразмерной. Принцип неопределенности Гейзенберга в квантовой механике гласит, что объем (ошибка) одновременного измерения положения и импульса любой частицы равен

$$dr^\alpha dp^\alpha = h^3. \quad (1.3.2)$$

Ω_{NVE} также называют микростатистической статистической функцией, представляющей собой сумму всех возможных событий. Согласно соотношению Больцмана энтропия S связана с тем, сколько микросостояний допускает система, при которых

$$S = k_b \ln \Omega_{NVE} \quad (1.3.3)$$

(k_b – постоянная Больцмана) и с термодинамическими переменными (например, контролируется, сколько внешней работы и тепла добавлено в изо-

лированной системе)

$$\begin{aligned}
dE &= Tds - PdV \\
\Rightarrow dS &= \frac{1}{T}dE + \frac{P}{T}dV \\
\Rightarrow \frac{\partial S}{\partial E} &= \frac{1}{T}, \quad \frac{\partial S}{\partial V} = \frac{P}{T},
\end{aligned} \tag{1.3.4}$$

тогда получаем соотношения, описывающие наблюдаемые макроскопические (температура T , давление P) и микросостояния

$$\frac{1}{k_b T} = \frac{\partial \ln \Omega_{NVE}}{\partial E}, \text{ пока } V \text{ фиксирован,} \tag{1.3.5}$$

$$\frac{P}{k_b T} = \frac{\partial \ln \Omega_{NVE}}{\partial V}, \text{ пока } E \text{ фиксирована.} \tag{1.3.6}$$

Кроме того, любые наблюдаемые состояния можно оценить средним по ансамблю

$$\begin{aligned}
\langle a \rangle_{NVE} &= \frac{1}{\Omega_{NVE}} \frac{1}{N! h^{3N}} \int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} a(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \delta(\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E) \\
&= \frac{\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} a(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \delta(\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E)}{\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \delta(\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E)}.
\end{aligned} \tag{1.3.7}$$

Определение ожидаемого значения – сумма возможных значений, умноженных на соответствующие вероятности. Определим среднюю кинетическую энергию любого атома в состоянии равновесия. Согласно уравнению (1.3.7)

$$\langle K^\alpha \rangle = \left\langle \frac{p_i^\alpha p_i^\alpha}{2m} \right\rangle = \left\langle \frac{p_i^\alpha}{2} \frac{\partial \hat{H}}{\partial p_i^\alpha} \right\rangle = \frac{1}{2} \frac{\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \left[p_i^\alpha \frac{\partial \hat{H}}{\partial p_i^\alpha} \delta(\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E) \right]}{\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \delta(\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E)}. \tag{1.3.8}$$

Следуя производной ступенчатой функции Хевисайда в качестве дельта-функции Дирака δ , функция разбиения Ω_{NVE} записывается как

$$\begin{aligned}
\Omega_{NVE} &= \frac{1}{N! h^{3N}} \int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \delta(\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E) = \\
&= -\frac{1}{N! h^{3N}} \int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \frac{\partial}{\partial E} \xi(\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E).
\end{aligned} \tag{1.3.9}$$

Числитель в уравнении (1.3.8) переписывается как

$$\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \left[p_i^\alpha \frac{\partial \hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial p_i^\alpha} \delta(\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E) \right] = \quad (1.3.10)$$

$$= - \int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \frac{\partial}{\partial E} \left[p_i^\alpha \frac{\partial \hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial p_i^\alpha} \xi(\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E) \right] =$$

$$= - \int_{\hat{H} > E} d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \frac{\partial}{\partial E} \left[p_i^\alpha \frac{\partial \hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E}{\partial p_i^\alpha} \right] = \quad (1.3.11)$$

$$= - \int_{\hat{H} > E} d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \frac{\partial}{\partial E} \left[\frac{\partial}{\partial p_i^\alpha} p_i^\alpha (\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E) - 3(\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E) \right].$$

Первое слагаемое в уравнении обращается в нуль, потому что $\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = E$ при стремлении к \mathbf{p}^α . Коэффициент 3 получен из

$$\frac{\partial p_i^\alpha}{\partial p_i^\alpha} = \delta_{ii} = 3, \quad (1.3.12)$$

оставшиеся слагаемые становятся равными

$$-3 \int_{\hat{H} > E} d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} = -3 \int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \xi(\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E). \quad (1.3.13)$$

Путем подстановки уравнений (1.3.9) и (1.3.13) в (1.3.8) можно вывести соотношение

$$\langle K^\alpha \rangle = \frac{3 \int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \xi(\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E)}{2 \int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \frac{\partial}{\partial E} \xi(\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E)} = \quad (1.3.14)$$

$$= \frac{3}{2} \left(\ln \int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \frac{\partial}{\partial E} \xi(\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E) \right)^{-1} =$$

$$= \frac{3}{2} \left(\frac{\partial}{\partial E} \ln \int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \delta(\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E) \right)^{-1} \text{ при } N \rightarrow \infty \quad (1.3.15)$$

$$= \frac{3}{2} \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right) = \frac{3k_b T}{2},$$

с учетом уравнения (1.3.5). Суммируя средние значения кинетической энергии каждого атома, получим

$$\langle K \rangle = \sum_{\alpha} \langle K^\alpha \rangle = \frac{3Nk_b T}{2}, \quad (1.3.16)$$

что приводит к известной зависимости между общей средней кинетической энергией и температурой.

1.4. Эргодичность

Зная положение и скорости каждого атома в любой момент времени, как можно связать эти состояния с поведением всей системы? Например, зная скорость каждого атома, можно ли оценить среднюю кинетическую энергию, фигурирующую в уравнении (1.3.16)? Эргодичность, предполагающая, что система прошла через все возможные микросостояния за бесконечное время, обеспечивает основу для демонстрации эквивалентности между средним по ансамблю и средним по времени любых наблюдаемых свойств, что приводит к равенству

$$\langle a \rangle = \frac{\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} a(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \delta(\widehat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E)}{\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \delta(\widehat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) - E)} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau a(t) dt. \quad (1.4.1)$$

Например, если временной отрезок τ равен $N_{\Delta t} \Delta t$ (τ принимается достаточно большим числом по сравнению с шагом по времени Δt), средняя полная кинетическая энергия равна

$$\langle K \rangle = \frac{1}{N_{\Delta t}} \sum_{n_{\Delta t}=1}^{N_{\Delta t}} \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m (\dot{\mathbf{r}}^{\alpha}(n_{\Delta t}))^2. \quad (1.4.2)$$

Комбинация уравнений (1.3.16) и (1.4.2) показывает способ управления температурой путем регулирования скоростей атомов. Это будет темой следующего раздела, в котором будем обсуждать, как вывести уравнение движения, если контролировать температуру T , а не энергию системы E .

1.5. Канонические ансамбли

Как показано в предыдущем разделе, в микроканоническом ансамбле изолированная система характеризуется числом атомов N , объемом V и полной энергией E . Однако, с точки зрения эксперимента, было бы практичнее контролировать температуру T , а не энергию E . Поэтому в каноническом

ансамбле с управляемыми переменными N, V, T , предполагается, что система контактирует с бесконечным тепловым резервуаром. Система с Гамильтонианом \widehat{H}_1 и тепловой резервуар с Гамильтонианом \widehat{H}_2 изолированы друг от друга, что приводит к соотношению

$$\Omega_{NVT} = \frac{1}{N!h^{3N}} \int d^{N_1}\mathbf{r}_1 d^{N_1}\mathbf{p}_1 d^{N_2}\mathbf{r}_2 d^{N_2}\mathbf{p}_2 \delta(\widehat{H}_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) + \widehat{H}_2(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) - E), \quad (1.5.1)$$

следующему из уравнения (1.3.1).

Рассмотрим сначала интегрирование по \mathbf{r}_2 и \mathbf{p}_2 и затем возьмем натуральный логарифм от полученного интеграла для применения соотношения Больцмана в (1.3.3)

$$\begin{aligned} \ln \int d^{N_2}\mathbf{r}_2 d^{N_2}\mathbf{p}_2 \delta(\widehat{H}_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) + \widehat{H}_2(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) - E) &= \\ = \ln \int d^{N_2}\mathbf{r}_2 d^{N_2}\mathbf{p}_2 \delta(\widehat{H}_2(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) - E) - \widehat{H}_1 \frac{\partial}{\partial E} \ln \int d^{N_2}\mathbf{r}_2 d^{N_2}\mathbf{p}_2 \delta(\widehat{H}_2(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) - E). \end{aligned} \quad (1.5.2)$$

Посредством разложения в ряд Тейлора при $\widehat{H}_1 = 0$ ($\widehat{H}_2 \gg \widehat{H}_1$) получим соотношение

$$\frac{\partial}{\partial \widehat{H}_1} \delta(\widehat{H}_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) - E) = -\frac{\partial}{\partial E} \delta(\widehat{H}_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) - E). \quad (1.5.3)$$

Определим соотношение

$$\begin{aligned} S_2 &= k_b \ln \int d^{N_2}\mathbf{r}_2 d^{N_2}\mathbf{p}_2 \delta(\widehat{H}_2(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) - E) \implies \\ \implies \frac{\partial \ln \int d^{N_2}\mathbf{r}_2 d^{N_2}\mathbf{p}_2 \delta(\widehat{H}_2(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) - E)}{\partial E} &= \frac{1}{k_b T}, \end{aligned} \quad (1.5.4)$$

следующее из уравнения (1.3.5), тогда из уравнения (1.5.2) получим

$$\int d^{N_2}\mathbf{r}_2 d^{N_2}\mathbf{p}_2 \delta(\widehat{H}_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) + \widehat{H}_2(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) - E) = e^{\frac{S_2}{k_b} - \frac{\widehat{H}_1}{k_b T}}. \quad (1.5.5)$$

Подставляя уравнения (1.5.5) в (1.5.1) и пренебрегая постоянным членом в уравнении (1.5.5), получим каноническую функцию разбиения как

$$\Omega_{NVT} = \frac{1}{N!h^{3N}} \int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} e^{-\frac{\widehat{H}}{k_b T}}, \quad (1.5.6)$$

где индекс "1" опущен. Подобно соотношению Больцмана (1.3.3), соотношение между допустимыми микросостояниями и термодинамическими переменными имеет вид

$$A = k_b T \ln \Omega_{NVT}, \quad (1.5.7)$$

где $A = E - TS$ – свободная энергия Гельмгольца. Более того, среднее значение по ансамблю может быть представлено в виде

$$\begin{aligned} \langle a \rangle &= \frac{1}{\Omega_{NVT}} \frac{1}{N! h^{3N}} \int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} a(\mathbf{r}, \mathbf{p}) e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}} \\ &= \frac{\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} a(\mathbf{r}, \mathbf{p}) e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}}}{\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}}}. \end{aligned} \quad (1.5.8)$$

Следуя микроканоническому ансамблю в уравнении (1.3.16), посмотрим на среднюю кинетическую энергию атома α в каноническом ансамбле

$$\langle K_\alpha \rangle = \left\langle \frac{p_i^\alpha p_i^\alpha}{2m} \right\rangle = \left\langle \frac{p_i^\alpha}{2} \frac{\partial \hat{H}}{\partial p_i^\alpha} \right\rangle = \frac{1}{2} \frac{\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} p_i^\alpha \frac{\partial \hat{H}}{\partial p_i^\alpha} e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}}}{\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}}}. \quad (1.5.9)$$

Согласно следующему соотношению

$$\frac{\partial}{\partial p_i^\alpha} e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}} = \frac{\partial}{\partial \hat{H}} e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}} \frac{\partial \hat{H}}{\partial p_i^\alpha} = -\frac{1}{k_b T} e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}} \frac{\partial \hat{H}}{\partial p_i^\alpha} \implies \frac{\partial \hat{H}}{\partial p_i^\alpha} e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}} = -k_b T \frac{\partial}{\partial p_i^\alpha} e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}} \quad (1.5.10)$$

можно получить

$$\begin{aligned} \langle K^\alpha \rangle &= \frac{1}{2} \frac{-k_b T \left[\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \frac{\partial}{\partial p_i^\alpha} p_i^\alpha e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}} - \int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}} \frac{\partial p_i^\alpha}{\partial p_i^\alpha} \right]}{\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}}} = \\ &= \frac{1}{2} \frac{-k_b T \left[\int d^N \mathbf{r} d^{N-1} \mathbf{p} p_i^\alpha e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}} \Big|_{-\infty}^{\infty} - 3 \int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}} \right]}{\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}}}. \end{aligned} \quad (1.5.11)$$

Первое слагаемое в уравнении (1.5.11) равно нулю, так как гамильтониан является функцией от $(\mathbf{p}^\alpha)^2$. Таким образом, справедливо соотношение

$$\langle K^\alpha \rangle = \frac{3k_b T}{2} \frac{\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}}}{\int d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} e^{-\frac{\hat{H}}{k_b T}}} = \frac{3}{2} k_b T. \quad (1.5.12)$$

Средняя кинетическая энергия всей системы составляет

$$\langle K \rangle = \sum_{\alpha} \langle K^{\alpha} \rangle = \frac{3Nk_bT}{2}, \quad (1.5.13)$$

это означает, что как микроканонический, так и канонический ансамбли имеют одинаковую форму, описывающую среднюю кинетическую энергию и температуру. В следующем разделе показано, что это важный шаг для вывода уравнений движения.

1.6. Алгоритм интегрирования уравнения движения в методе молекулярной динамики

Безусловно, что для качественной и точной реализации метода динамики частиц требуется избрать надлежащую и точную процедуру численного интегрирования дифференциальных УД (1.2.2), которую можно представить как

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N), \quad (1.6.1)$$

$$m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N), \quad \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i, \quad (1.6.2)$$

где приняты классические обозначения m_i , \vec{r}_i и \vec{v}_i – масса, радиус-вектор и скорость i -ой частицы ($i = 1, \dots, N$) соответственно, \vec{F}_i – сила, действующая на i -ую частицу, вычисляется согласно равенству

$$\vec{F}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = -\frac{\partial U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i}, \quad (1.6.3)$$

где потенциальная энергия U и обуславливает физические свойства исследуемой среды.

Из имеющихся начальных скоростей и координат атомов путем интегрирования получают траектории движения всех частиц системы в любой

момент времени. На сегодняшний день существуют различные развитые методы интегрирования УД. В их основе лежит известный метод конечных разностей, в рамках которого время изменяется дискретным образом с шагом Δt . Широко известными основными методами интегрирования УД являются алгоритм Верле [175, 176], алгоритм "прыжков лягушки" (leap frog) [20], метод предиктора-корректора [129]. В диссертационной работе все атомистические расчеты выполняются в программе LAMMPS, в которой реализован алгоритм интегрирования уравнений движения Верле. Данный алгоритм является наиболее популярным и распространенным в МД. С помощью алгоритма Верле без использования скоростей частиц по текущему и прошлому положению точки можно определить ее следующее положение. Далее рассмотрим процедуру интегрирования УД подробнее.

В разложении радиус-вектора $\vec{r}(t)$ с удержанием слагаемых третьей степени относительно Δt в два момента времени $t + \Delta t$ и $t - \Delta t$, принимается во внимание, что $\vec{r}(t)' = \vec{v}(t)$, $\vec{r}(t)'' = \vec{a}(t)$ и можно представить положение частицы с помощью соотношений:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)(\Delta t)^2 + \frac{1}{6}\vec{b}(t)(\Delta t)^3 + O((\Delta t)^4), \quad (1.6.4)$$

$$\vec{r}(t - \Delta t) = \vec{r}(t) - \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)(\Delta t)^2 - \frac{1}{6}\vec{b}(t)(\Delta t)^3 + O((\Delta t)^4), \quad (1.6.5)$$

где \vec{r} – позиция точки, \vec{v} – скорость, \vec{a} – ускорение, \vec{b} – производная ускорения по времени. Суммируя уравнения (1.6.4) и (1.6.5) и выражая $\vec{r}(t + \Delta t)$, можно найти:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)(\Delta t)^2 + O((\Delta t)^4). \quad (1.6.6)$$

Это выражение представляет собой основное уравнение алгоритма интегрирования Верле. Из уравнения (1.6.6) хорошо видно, что значение

радиус-вектора атома может определяться без знания его скорости движения. При этом ускорения частиц легко вычисляются, используя силы, с помощью классического уравнения Ньютона:

$$\vec{a}(t) = \frac{\vec{F}(\vec{r}(t))}{m} = -\frac{1}{m}\nabla U(\vec{r}(t)). \quad (1.6.7)$$

Процедура интегрирования Верле дает ошибку усечения относительно временного шага четвертого порядка. Более того, данный алгоритм устойчивый и простой в реализации. В силу указанных свойств процедура нашла свое широкое применение в компьютерных атомистических вычислениях. Однако, данный алгоритм обеспечивает меньшую точность определения скоростей частиц. Хотя для того, чтобы интегрировать УД частицы, не требуется знать их скорость, в некоторых приложениях знание скоростей важно. Например, для проверки сохранения полной энергии системы атомов $E = K + U$ необходимо определить кинетическую энергию K и потенциальную энергию U , а для вычисления кинетической энергии требуется знание скорости частиц. Вычитая из уравнения (1.6.4) уравнение (1.6.5), можно получить следующее уравнение для определения скорости частицы:

$$\vec{v}(t) = \frac{1}{2}\Delta t[\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t)] + O(\Delta t^2). \quad (1.6.8)$$

Отметим, что скорость атомов имеет ошибку усечения второго порядка Δt^2 , что значительно больше, чем ошибка в оценке точности для координат. Таким образом, погрешность метода МД определяется погрешностью выбранной конечно-разностной схемы численного интегрирования дифференциальных УД, а также обусловлена выбором потенциала межатомного взаимодействия.

1.7. Межатомные потенциалы

В предыдущих разделах была рассмотрена потенциальная энергия, входящая в гамильтониан, но не приведена ее точная форма. В твердых телах межатомный потенциал напрямую связан с материальными константами, поскольку он описывает, как энергия деформации запасается в кристаллических структурах. Кроме того, разрыв межатомных связей обычно рассматривается как точка инициации разрушения материала. С точки зрения квантовой механики межатомное взаимодействие должно быть решением уравнения Шредингера для взаимодействующих электронов, что соответствует первым принципам или теории *ab initio*. Однако численные расчеты, основанные на квантовой механике, требуют больших вычислительных ресурсов и, таким образом, охватывают только сотни атомов. В контексте обсуждения применимости механики сплошной среды в атомистических системах такие маленькие образцы увеличивают неопределенность, поскольку требуется более обширная кристаллическая структура в качестве эталона для изучения размерного эффекта. Альтернативным способом является использование межатомных потенциалов, описанных в относительно простой функциональной форме. Соответствующие параметры обычно аппроксимируются экспериментальными данными или данными имитационного моделирования *ab initio*. В зависимости от типа связи, то есть ковалентной, ионной или металлической, для различных видов материалов были предложены многочисленные межатомные потенциалы.

Концепция полной потенциальной энергии как суммы взаимодействий каждой пары приносит нам большое удобство, но также приводит к большим проблемам, особенно для металлов. Одно из известных свидетельств состоит в том, что для парного потенциала получение одинакового значения упругих постоянных $C_{12} = C_{44}$ неизбежно. Напротив, отношение C_{12} и

C_{44} близко к 2 в ГЦК металлах. Основная причина заключается в неспособности парного потенциала отражать локальное окружение вокруг атома: объемное или поверхностное. Так, метод внедренного атома (EAM) был введен Доу и Баскесом [59, 66] с дополнительным слагаемым для описания того, сколько энергии необходимо для внедрения атома в электронное облако

$$U^\alpha = F^\alpha \left(\sum_{\alpha \neq \beta} \rho_e(r^{\alpha, \beta}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \Phi^\alpha(r^{\alpha, \beta}), \quad (1.7.1)$$

где Φ – парное взаимодействие, а ρ_e – электронная плотность, зависящая от локальной среды около атома α .

В результате потенциал EAM способен воспроизводить более реалистичное изотропное упругое поведение материала, чем парные потенциалы и, следовательно, в общем случае $C_{12} \neq C_{44}$. С целью уменьшения сложности, а также времени расчета, часто прибегают к ограничению числа соседей, так называемым "радиусом усечения". Для моделирования в настоящем исследовании был использован потенциал внедренного атома. В электронной библиотеке потенциалов, находящейся по адресу [200], можно найти потенциалы различных материалов и сплавов для моделирования широкого спектра различных задач.

1.8. Вычисление локальных напряжений в молекулярной динамике

Континуальная теория продемонстрировала свою ценность в моделировании механических свойств твердых тел и структур. Однако по мере уменьшения размера до атомистического масштаба непрерывное напряжение и атомистическое напряжение могут не совпадать друг с другом из-за дискретного характера атомистической структуры. Это поднимает вопрос о

том, как можно интерпретировать результаты молекулярного моделирования с точки зрения механики сплошной среды. Одним из возможных решений этой проблемы является гомогенизация группы атомов как материальной точки, подобно микромеханике в композитных материалах [169]. Поскольку этот метод не был стандартизирован, значение напряжения может зависеть от выбора используемого метода гомогенизации. Эта проблема становится еще более заметной, когда размер геометрической неоднородности также уменьшается до нанометрового диапазона. Чтобы связать явление в наномасштабе с переменной макроскопического континуума, необходимо разработать физически разумный метод гомогенизации для получения информации о локальном напряжении в атомарных системах.

Кроме того, особое внимание уделяется определению локального атомистического напряжения в связи с появлением многомасштабного моделирования. Для увеличения продолжительности и временного масштаба молекулярных симуляций было предложено несколько различных методов (квазиконтинуума [170], мостиковой шкалы [178], мостиковой области [185] и т.д.). Подробный обзор методов многомасштабного моделирования можно найти в работе Миллера и Тадмора [107]. Поскольку эти методы многомасштабного моделирования включают два или более уровня методов моделирования, таких как молекулярная динамика и метод конечных элементов, представляет практический интерес понять, как определить понятие напряжения в атомарных системах и обеспечить плавную связь между двумя областями разного масштаба.

Развитие определения напряжений можно проследить до 19 века. Клаузиус [54] и Максвелл [105] разработали теорему вириала для измерения внутреннего напряжения в фиксированном объеме, содержащем взаимодействующие атомы, при высокой температуре. Авторы работы [52] пересмотрели теорему вириала для расчета потока импульса и силы по пло-

щади и заявили, что их определение может представить правильное распределение напряжения вблизи свободной поверхности. Чжоу [196] указал, что вириальные напряжения, включая кинетический вклад, не эквивалентно напряжениям Коши континуальной механики. Однако Субраманьян и Сан [166] выполнили анализ теплового напряжения, чтобы продемонстрировать, что как кинетическая, так и потенциальная части теоремы вириала важны для интерпретации вириального напряжения как напряжения Коши в МД-моделировании. Ирвинг и Кирквуд [80] рассмотрели сохранение массы, импульса и энергии в терминах статистического ансамбля, чтобы вывести формализм альтернативных напряжений. Чтобы упростить разложение в ряд дельта-функций Дирака в работе Ирвинга и Кирквуда, Харди [73] и Мердок [114] предложили функцию локализации для представления распределения плотности вероятности. В результате дискретные переменные, такие как атомная масса, скорость и полная энергия на атом, могут быть отображены в непрерывные поля, такие как плотность, импульс и плотность энергии соответственно. Другие родственные работы могут быть отнесены к Лутско [96] и Кормиер [56] и др.

Сосредоточив внимание на совершенных кристаллах при равномерной нагрузке, Циммерман [198], Бранисио и Сроловиц [41], а также Адмал и Тадмор [23] изучали размер сферы, который необходим для сходимости локального вириального напряжения или напряжения Харди к непрерывному напряжению. Если рассматривать одноатомный кристалл, радиусы сходимости вириального напряжения и напряжения Харди пересекаются и умножаются на величину постоянной решетки соответственно [23, 198]. Что касается многоатомного кристалла, преимущество определения Харди уменьшается, и оба определения напряжения требуют радиуса, умноженного на размер постоянной решетки, для достижения сходимости [41]. В [141] показано что, если объем пространственного усреднения является перио-

дическим, то сходимость вириального напряжения и напряжения Харди может быть достигнута в пределах одного единственного расстояния решетки.

1.8.1. Определение напряжений в атомистической системе.

Вириальные напряжения

Для фиксированного объема V , содержащего N взаимодействующих атомов, уравнения движения каждого атома внутри вычисляются следующим образом

$$\sum_{\alpha \neq \beta} F_i^{\alpha\beta} + b_i^\alpha = m^\alpha \dot{v}_i^\alpha, \quad (1.8.1)$$

где $i, j = 1, 2, 3$ обозначают x, y, z направления, $\mathbf{F}^{\alpha\beta}$ – взаимодействие атома α с атомом β , \mathbf{b}^α – внешняя сила, m^α и \mathbf{v}^α – масса и объем атома α соответственно. Сумма тензорного произведения между уравнениями (1.8.1) и $(\mathbf{x}^\alpha - \mathbf{x}^0)$, где \mathbf{x}^α – позиция атома и \mathbf{x}^0 – произвольная фиксированная позиция в пространстве, может быть выражена как

$$\sum_{\alpha} \sum_{\alpha \neq \beta} (x_j^\alpha - x_j^0) F_i^{\alpha\beta} + \sum_{\alpha} (x_j^\alpha - x_j^0) b_i^\alpha = \sum_{\alpha} (x_j^\alpha - x_j^0) m^\alpha \dot{v}_i^\alpha. \quad (1.8.2)$$

Используя третий закон Ньютона

$$F_i^{\alpha\beta} = -F_i^{\beta\alpha} \quad (1.8.3)$$

и интегрируя по частям

$$\sum_{\alpha} (x_j^\alpha - x_j^0) m^\alpha \dot{v}_i^\alpha = \frac{d}{dt} \sum_{\alpha} (x_j^\alpha - x_j^0) m^\alpha v_i^\alpha - \sum_{\alpha} m^\alpha v_i^\alpha v_j^\alpha, \quad (1.8.4)$$

уравнение (1.8.2) может быть переформулировано как

$$\sum_{\alpha} (x_j^\alpha - x_j^0) b_i^\alpha = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\alpha \neq \beta} (x_j^\alpha - x_j^\beta) F_i^{\alpha,\beta} - \sum_{\alpha} m^\alpha v_i^\alpha v_j^\alpha + \frac{d}{dt} \sum_{\alpha} (x_j^\alpha - x_j^0) m^\alpha v_i^\alpha. \quad (1.8.5)$$

Осреднение по времени необходимо, чтобы уравнение (1.8.5) наблюдалось макроскопически. Следовательно, последний член в уравнении (1.8.5) может быть устранен, если продолжительность осреднения по времени взять достаточно большой [113].

Между тем, с точки зрения континуума, момент, создаваемый тягой \mathbf{t} по отношению к расстоянию между фиксированной точкой \mathbf{x}^0 и положением материала \mathbf{x} , равен

$$\int (x_j - x_j^0) t_i ds = \int (x_j - x_j^0) \sigma_{ik} n_k ds. \quad (1.8.6)$$

По теореме о дивергенции (Остроградского-Гаусса)

$$\int (x_j - x_j^0) \sigma_{ik} n_k ds = \int \frac{\partial}{\partial x_k} (x_j - x_j^0) \sigma_{ik} dV = \int \sigma_{ij} + x_j \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} dV. \quad (1.8.7)$$

Последний член сокращается из-за условия равновесия. Уравнение (1.8.7) переписывается как

$$\int (x_j - x_j^0) \sigma_{ik} n_k ds = \sigma_{ij} V. \quad (1.8.8)$$

Предполагая, что члены внешней силы в дискретной и континуальной точках зрения, то есть уравнения (1.8.5) и (1.8.8) эквивалентны, можно определить вириальное напряжение

$$\sigma_{ij} = -\frac{1}{V} \sum_{\alpha} \left(m^{\alpha} v_i^{\alpha} v_j^{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} (x_j^{\alpha} - x_j^{\beta}) F_i^{\alpha\beta} \right). \quad (1.8.9)$$

Как показывает уравнение (1.8.9), информация для расчета вириального напряжения, например, атомистическая скорость и сила взаимодействия между парами атомов, уже известна благодаря численному интегрированию в МД-моделировании. Эта простая реализация делает теорему вириала наиболее широко используемым определением атомистического напряжения. Следует отметить, что уравнение (1.8.9) получено с учетом общего объема бокса моделирования V . Чтобы справиться с концентрацией напряжений, возникающей из-за несовершенства кристалла, локальное

вириальное напряжение рассчитывается на основе среднего значения для небольшой группы атомов внутри бокса моделирования.

1.8.2. Определение напряжений в атомистической системе.

Напряжения Харди

Вводя функцию локализации ψ , Харди [73] преобразовал дискретную атомистическую массу m^α , атомистическую скорость \mathbf{v}^α и полную энергию атома (потенциальная энергия U^α + кинетическая энергия K^α) в непрерывные поля плотности ρ , импульса \mathbf{p} и плотности энергии E в материальной точке \mathbf{x}

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha} m^{\alpha} \psi(r^{\alpha}), \quad (1.8.10)$$

$$p_i(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha} m^{\alpha} v_i^{\alpha} \psi(r^{\alpha}), \quad (1.8.11)$$

$$B(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha} \left[\frac{1}{2} M^{\alpha} (v_i^{\alpha} v_i^{\alpha})^2 + U^{\alpha} \right] \psi(r^{\alpha}), \quad (1.8.12)$$

где $r^{\alpha} = |\mathbf{x}^{\alpha} - \mathbf{x}|$ – расстояние между позицией атома \mathbf{x}^{α} и материальной точкой \mathbf{x} . Функция локализации обладает следующими свойствами

1. ψ имеет единицу измерения обратную объему, как следует из (1.8.10),
2. ψ нормированная функция, такая что $\int \psi dV = 1$,
3. ψ имеет максимум в материальной точке \mathbf{x} и плавно уменьшается до нуля на границе объема локализации R .

Приведем примеры двух видов функций локализации. Одна из них — ступенчатая функция, остающаяся постоянной в пределах объема локализации, другая — полином 3-й степени следующего вида

$$\frac{\psi(r^{\alpha})}{\psi|_{r^{\alpha}=0}} = 1 - 3 \left(\frac{r^{\alpha}}{R} \right)^2 + \left(\frac{r^{\alpha}}{R} \right)^3. \quad (1.8.13)$$

Отметим, что уравнение (1.8.13) и его первые производные равны нулю вдоль $r^{\alpha} = R$.

На основании уравнений (1.8.10) и (1.8.11) скорость материала определяется как

$$v_i(\mathbf{x}, t) = \frac{\sum_{\alpha} m^{\alpha} v_i^{\alpha} \psi(r^{\alpha})}{\sum_{\alpha} m^{\alpha} \psi(r^{\alpha})}. \quad (1.8.14)$$

Подставляя уравнения (1.8.10) - (1.8.12) и (1.8.14) в соотношения сохранения массы, импульса и энергии

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j), \quad (1.8.15)$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \frac{\partial p_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_i v_j), \quad (1.8.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} v_i) = \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (E v_j) + \frac{\partial q_j}{\partial x_j}, \quad (1.8.17)$$

где q_j – тепловой поток, напряжение Харди в материальной точке \mathbf{x} выражается как

$$\sigma_{ij} = - \sum_{\alpha} \left(m^{\alpha} (v_i^{\alpha} - v_i) (v_j^{\alpha} - v_j) \psi + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} (x_j^{\alpha} - x_j^{\beta}) F_i^{\alpha\beta} B^{\alpha\beta} \right). \quad (1.8.18)$$

Было показано, что уравнение (1.8.18) справедливо для многочастичных потенциалов [50]. Относительная скорость между скоростью атома \mathbf{v}^{α} и скоростью материала \mathbf{v} рассматривается в кинетическом слагаемом и $B^{\alpha\beta}$ представляет собой вес длины связи между атомом α и атомом β и имеет вид

$$B^{\alpha\beta} = \int_0^1 \psi[\lambda(\mathbf{x}^{\alpha} - \mathbf{x}^{\beta}) + \mathbf{x}^{\beta} - \mathbf{x}] d\lambda, \quad (1.8.19)$$

где $r^{\alpha\beta}$ – межатомное расстояние и r_{β} представляет собой расстояние между атомом β и материальной точкой. Харди [73] также привел выражение для теплового потока \mathbf{q} .

1.9. Определение напряжений, деформаций и параметра смешанности нагружения при атомистическом моделировании

Расчет напряжений на атомистическом уровне отличается от вычислений напряжений на макроскопическом уровне. Компоненты локального тензо-

ра напряжений $\sigma_{\alpha\beta}$ в LAMMPS вычисляются согласно вириальному уравнению (1.8.9) и могут быть записаны как

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V_b} \sum_i^{N_b} m_i v_i^\alpha v_i^\beta - \frac{1}{2V_b} \sum_i^{N_b} \sum_{j(j \neq i)}^{N_b} \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \frac{r_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta}{r_{ij}}, \quad (1.9.1)$$

где V_b и N_b – объем и число атомов в каждом блоке моделирования соответственно, m_i – масса i атома, v_i^α и v_i^β – две компоненты вектора скорости атома i , r_{ij}^α и r_{ij}^β – две компоненты вектора перемещения от атома i к j .

Компонента тензора деформации, отвечающая растяжению вдоль оси y , вычисляется в молекулярной динамике в соответствии с выражением

$$\varepsilon_y = \frac{|L_{y_0} - L_y|}{L_{y_0}}, \quad (1.9.2)$$

где L_{y_0} и L_y – начальная длина стороны квадратной пластины и длина стороны пластины в деформируемой конфигурации в направлении оси y , соответственно.

Обычно вид комбинированного деформирования задается посредством задания величины параметра смешанности нагружения M^e . На сегодняшний день предложены различные определения данного параметра, опирающиеся на классическое определение Ши. В данном исследовании значение M^e задается согласно следующему соотношению:

$$M^e = \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \left| \frac{\varepsilon_{22}}{\varepsilon_{12}} \right|. \quad (1.9.3)$$

Вид комбинированного нагружения описывается с помощью задания параметра смешанности нагружения, варьирующегося от единицы (идеальный нормальный отрыв) до нуля (идеальный поперечный сдвиг). Справедливо следующее неравенство $0 < M^e < 1$.

1.10. Обзор программного обеспечения, реализующего метод молекулярной динамики

В диссертационной работе для атомистического моделирования используется программа LAMMPS. Это вычислительный пакет по моделированию атомно-молекулярной динамики, разработанный и бесплатно распространяющийся Сандийскими национальными лабораториями (Sandia National Laboratories) Министерства энергетики США. Данная программа позволяет проводить крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты, как на отдельных процессорах, так и на нескольких с использованием алгоритмов распараллеливания. База данных пакета LAMMPS содержит большое разнообразие потенциалов межчастичного взаимодействия.

Отличительной особенностью этой программы является подача на ее "вход" текстового файла, где посредством специальных команд указываются тип необходимой кристаллической решетки материи, физические условия проведения имитационного эксперимента и контролируемые величины на "выходе". Следовательно, для работы помимо программы LAMMPS необходим текстовый редактор. Графический интерфейс необходим исследователю для визуализации численных результатов эксперимента. В настоящей диссертации для визуализации результатов применяется программа OVITO (Open Visualization Tool) [204], вместе с тем можно применять любую иную программу визуализации, поддерживающую формат выходного файла кода LAMMPS.

Программный вычислительный инструмент LAMMPS оснащен всеобъемлющей, детальной и качественной документацией, описывающей используемые основополагающие научные концепции, применяемые алгоритмы и детали их реализации. Приводятся возможные форматы файлов, синтаксис и функциональные возможности всех команд и программ пакета, нюансы,

особенности и сценарии их применения.

В настоящее время предложен целый ряд программных средств, ориентированных на моделирование методом молекулярной динамики. В сфере программного обеспечения для молекулярно-динамического моделирования существует целая совокупность кодов как со свободным доступом (LAMMPS, Gromacs, VMD, PyMOL, Avogadro, XMD), так и проприетарных кодов (CHARMM, AMBER, GAUSSIAN).

Например, пакет молекулярной динамики Gromacs (GRONingen MAchine for Chemical Simulations) [201] университета Гронингена (Нидерланды) был разработан в 90-х годах. В первую очередь данная программа предназначена для моделирования биохимических молекул, таких как белки, липиды и нуклеиновые кислоты.

NAMD (NANoscale Molecular Dynamics) [203] – это еще один популярный пакет молекулярной динамики, который разрабатывается в Университете Иллинойса (США) с 1995 года. Этот пакет работает в связке с программой визуализации этого же университета VMD (Visual Molecular Dynamics) [207]. Программа NAMD написана с использованием модели параллельного программирования и используется для симуляции больших систем.

Пакет XMD [208] предназначен преимущественно для моделирования явлений и процессов, характерных для металлов и керамических материалов. Код разработан достаточно время тому назад в Университете города Коннектикут (США) под научным руководством Джона Рифкина. Программа имеет открытый доступ к коду и распространяется бесплатно.

1.11. Выводы по главе 1

В рамках 1 главы приведены основные понятия и знания о моделировании распространения трещин с помощью атомистического метода. Представлены общие сведения о методе атомистического компьютерного моделирования. Приведены теоретические основы метода молекулярной динамики, описаны основные понятия: уравнение движения, алгоритм Верле, термостат и баростат, термодинамические ансамбли, межатомный потенциал. Дан обзор программного обеспечения, реализующего метод молекулярной динамики.

Глава 2. Определение механических свойств материала, моделируемого с помощью атомистического метода

В главе 2 приведено описание вычисления механических свойств материала, моделируемого с помощью метода динамики частиц. В вычислительных экспериментах в основной части расчетов была использована FCC-медная пластина. Поэтому в данной главе приведена подробная процедура определения механических свойств FCC-меди. Также приведены результаты расчета механических свойств FCC-алюминия.

2.1. Алгоритм нахождения упругих постоянных материала с помощью метода молекулярной динамики: монокристаллические ГЦК медь и алюминий

Обобщенный закон Гука в индексной форме имеет вид

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}, \quad (2.1.1)$$

где σ_{ij} и ε_{kl} – тензоры механических напряжений и деформаций соответственно. Поскольку тензоры напряжения и деформации симметричны, тензор упругих модулей также обладает симметрией и его представляют в следующей матричной форме:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & C_{1113} & C_{1112} \\ \cdot & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & C_{2213} & C_{2212} \\ \cdot & \cdot & C_{3333} & C_{3323} & C_{3313} & C_{3312} \\ \cdot & \cdot & \cdot & C_{2323} & C_{2313} & C_{2312} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & C_{1313} & C_{1312} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & C_{1212} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{pmatrix} \quad (2.1.2)$$

Закон Гука также альтернативно может быть представлен в виде, разрешенном относительно компонент тензора деформаций, с помощью компонент тензора четвертого ранга – тензора податливости S_{ijkl}

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl}. \quad (2.1.3)$$

В этом случае закон Гука может быть представлен в иной матричной форме

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{1111} & S_{1122} & S_{1133} & S_{1123} & S_{1113} & S_{1112} \\ \cdot & S_{2222} & S_{2233} & S_{2223} & S_{2213} & S_{2212} \\ \cdot & \cdot & S_{3333} & S_{3323} & S_{3313} & S_{3312} \\ \cdot & \cdot & \cdot & S_{2323} & S_{2313} & S_{2312} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & S_{1313} & S_{1312} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & S_{1212} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} \quad (2.1.4)$$

В данной части исследования вычисляются составляющие тензора упругих модулей монокристаллической меди и алюминия с конкретными избранными потенциалами взаимодействия посредством метода молекулярной динамики. Механические свойства обуславливаются видом кристаллической решетки. Вычисление составляющих тензора упругих модулей было выполнено для ГЦК меди и алюминия.

Потенциальная энергия (ПЭ) при различных видах деформирования зависит от компонент тензора деформаций и может быть представлена своим разложением в ряд Тейлора с сохранением квадратов компонент тензора деформации:

$$U(\varepsilon) = U(0) + \sum_i^6 \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_i} \varepsilon_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^6 \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \varepsilon_i \varepsilon_j, \quad (2.1.5)$$

где $U(0)$ – энергия начального состояния равновесия, $\varepsilon_i, \varepsilon_j$ – деформации в нотации Фойгта.

Компоненты тензора упругих модулей вычисляются согласно соотношению

$$C_{ij} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j}. \quad (2.1.6)$$

После процедуры минимизации второе слагаемое в разложении (2.1.5) обращается в нуль. Для того, чтобы определить компоненту C_{11} выполнено атомистическое моделирование одноосного растяжения образца в направлении оси x_1 . Поэтому тензор деформации задается в виде

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.1.7)$$

Формула для вычисления ПЭ приобретает форму

$$E(\varepsilon_1) = E(0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_1^2} \delta^2 + \dots = \alpha + \beta \delta^2 + \gamma \delta^3 + \dots \quad (2.1.8)$$

Тогда первую компоненту тензора упругих модулей C_{11} можно вычислить согласно соотношению

$$C_{11} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_1^2} = \frac{2\beta}{V}. \quad (2.1.9)$$

Возможности вычислить компоненту C_{12} напрямую нет, поэтому прибегают к вычислению разности констант $C_{11} - C_{12}$. Зададим компоненты тензора деформаций как

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \delta & 0 & 0 \\ 0 & -\delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.1.10)$$

тогда разложение в ряд ПЭ принимает вид

$$E(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = E(0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_1^2} \delta^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_2^2} \delta^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_1 \partial \varepsilon_2} \delta^2 + \dots = \alpha + \beta \delta^2 + \gamma \delta^3 + \dots \quad (2.1.11)$$

Упругую постоянную C_{12} вычисляем, используя равенство

$$C_{12} = C_{11} - \frac{\beta}{V}. \quad (2.1.12)$$

Для определения упругой постоянной C_{44} тензор деформаций задается в форме

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \eta \\ 0 & \eta & 0 \end{pmatrix} \quad (2.1.13)$$

где $\delta = 2\eta$. При этом выражение для ПЭ принимает вид

$$E(\varepsilon_4) = E(0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_4^2} \delta^2 + \dots = E(0) + 2 \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_4^2} \eta^2 + \dots = \alpha + \beta \eta^2 + \gamma \eta^3 + \dots \quad (2.1.14)$$

Упругая постоянная C_{44} находится в соответствии с равенством

$$C_{44} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_4^2} = \frac{\beta}{2V}. \quad (2.1.15)$$

Проверим те компоненты тензора упругих модулей, которые должны быть равны нулю при кубической симметрии, например, константу C_{14} .

Зададим тензор деформаций в виде

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \eta \\ 0 & \eta & 0 \end{pmatrix} \quad (2.1.16)$$

где $\delta = 2\eta$. Тогда выражение для энергии будет иметь вид

$$\begin{aligned} E(\varepsilon_1 \varepsilon_4) &= E(0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_1^2} \delta^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_4^2} \delta^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_1 \partial \varepsilon_4} \delta^2 + \dots = \\ &= E(0) + 2 \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_1^2} \eta^2 + 2 \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_1 \partial \varepsilon_4} \eta^2 + \dots = \alpha + \beta \eta^2 + \gamma \eta^3 + \dots \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

Выразим компоненту C_{14}

$$C_{14} = \frac{b}{V} - \frac{C_{11}}{2} - \frac{C_{44}}{2}. \quad (2.1.18)$$

Знание матриц упругих постоянных весьма информативно и позволяет рассчитать упругие модули Юнга и сдвига, объемный модуль, коэффициент Пуассона, а также другие упругие характеристики.

Чаще всего для моделирования металлов с ГЦК решеткой, например, для моделирования алюминия и меди, применяется хорошо апробированный потенциал внедренного (или погруженного) атома (embedded atom model - EAM). Параметры потенциала внедренного атома меди реализованы в виде файла Cu_u3.eam, который включен в достаточно масштабную библиотеку потенциалов межатомного взаимодействия кода со свободным доступом LAMMPS. Сначала рассматривается монокристаллическая медь, обладающая гранецентрированной кубической структурой с постоянной кристаллической решетки, равной 3.615 Å.

В ходе вычислительных экспериментов был смоделирован образец кубической формы с размерами $10 \times 10 \times 10$ ячеек моделирования вдоль координатных осей x_1 , x_2 , x_3 соответственно. К образцу кубической формы прикладывались различные виды деформирования, позволяющие отыскать упругие постоянные, отвечающие кубической сингонии. Температура атомистической системы составляла 0.1 К и поддерживалась с помощью термостата Нойза-Гувера в каноническом ансамбле NVT. Целью проведенных расчетов было вычисление значений потенциальной энергии и деформаций с течением времени. Единицами измерения потенциальной энергии в LAMMPS является эВ, а объема Å³. Проведен пересчет энергии в ГПа, а объема в м³. Затем для полученных соответствующих значений энергии и деформации строилась аппроксимирующая полиномиальная кривая. В соответствии со значениями коэффициентов данной полиномиальной кривой проведены вычисления компонент тензора упругих модулей C_{ij} .

На рисунке 2.1 приведен график зависимости ПЭ от компоненты тензора деформации ε_{11} , построенный на основании выполненного атоми-

стического моделирования, нацеленного на определение компоненты тензора упругих модулей C_{11} . Точками отмечены результаты молекулярно-динамического расчета (ПЭ для соответствующего значения компоненты ε_{11} тензора деформации). Сплошная линия представляет собой аппроксимирующую атомистические вычисления полиномиальную кривую. На рис. 2.1 указано также уравнение, посредством которого и находится необходимый коэффициент $\beta = 24656$. Подставляя данное значение в уравнение (2.1.9), получаем упругий модуль $C_{11} = 167.25$ ГПа.

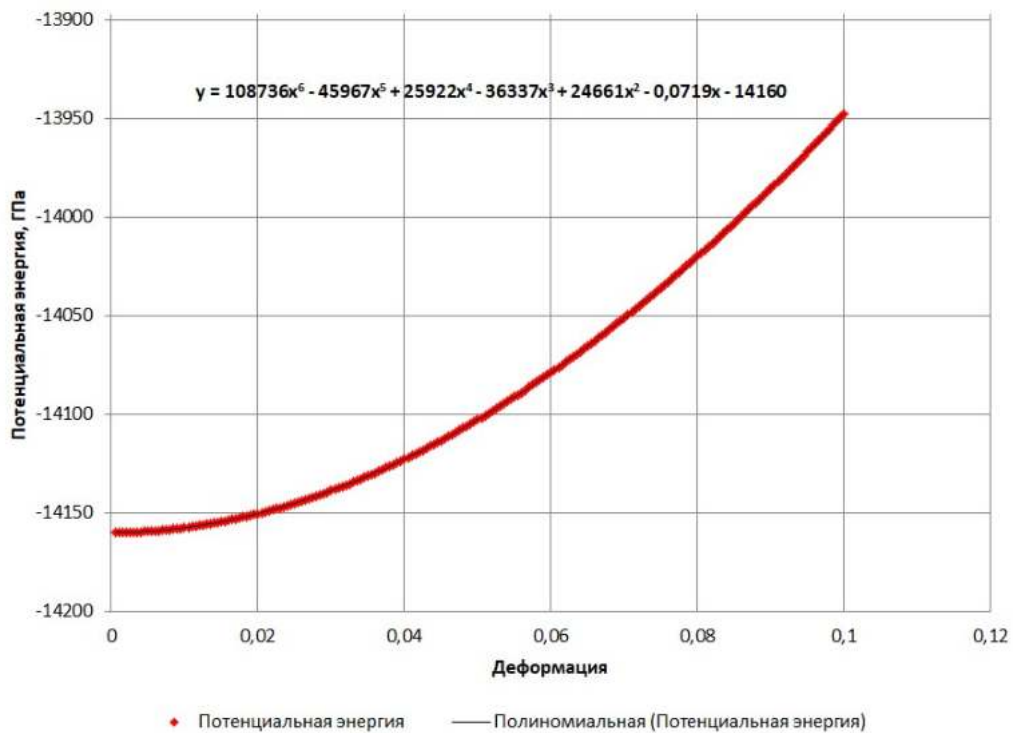


Рис. 2.1: Зависимость потенциальной энергии от приложенной деформации к кубическому образцу и ее аппроксимация полиномом: результаты атомистического (молекулярно-динамического моделирования). Вычисление упругой постоянной C_{11}

Следующим шагом является приложение к образцу кубической формы деформации $\varepsilon_{11} = \delta$ вдоль оси x_1 и $\varepsilon_{22} = \delta$ вдоль оси x_2 равной величины. Вновь необходимо построить график зависимости ПЭ от приложенной

деформации. На рисунке 2.2 изображено уравнение для построенной полиномиальной кривой, из которого можно найти $\beta = 12737$. Подставив данное число в уравнение (2.1.12), получим $C_{12} = 123.81$ ГПа.

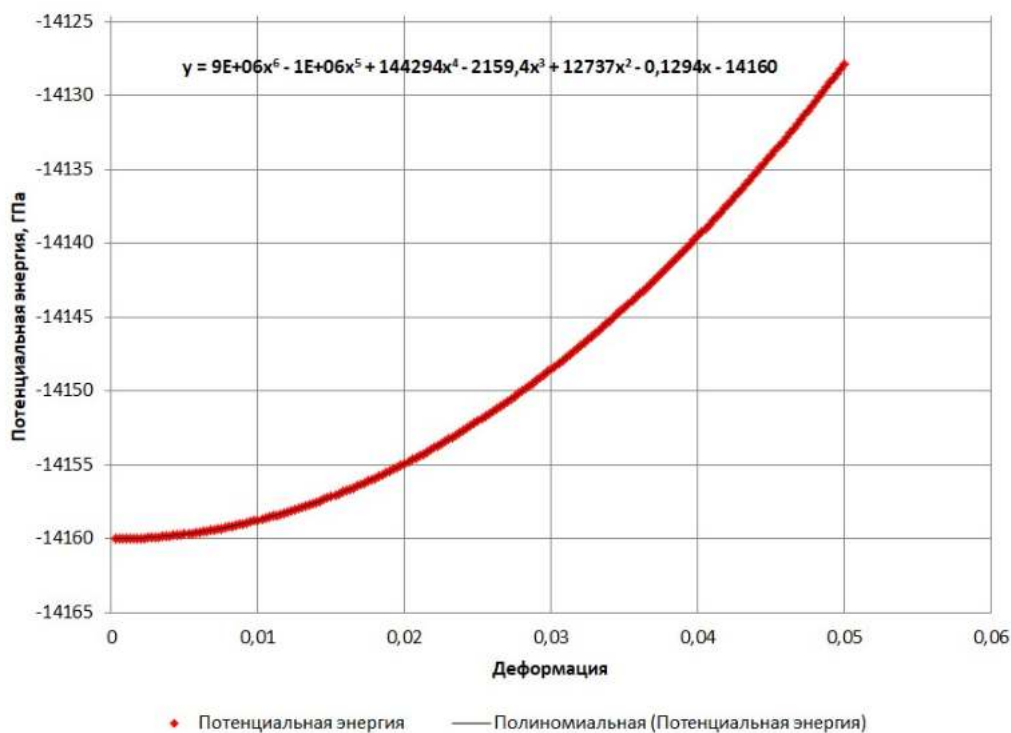


Рис. 2.2: Зависимость ПЭ системы от приложенной деформации и ее приближение аппроксимирующей полиномиальной функцией. Результаты атомарного молекулярно-динамического моделирования для вычисления упругих модулей (компоненты C_{12})

Подобно ранее описанной процедуре вычисления компонент тензора упругих модулей анализируются график зависимости ПЭ от деформации и кривая, аппроксимирующая ее. Согласно соотношению (2.1.15) находим $C_{44} = 76.46$ ГПа.

В итоге найдены компоненты тензора упругих модулей моделируемой среды, имеющего три независимых упругих постоянных, что отвечает кубической кристаллической решетке (материалам с кубической сингонией).

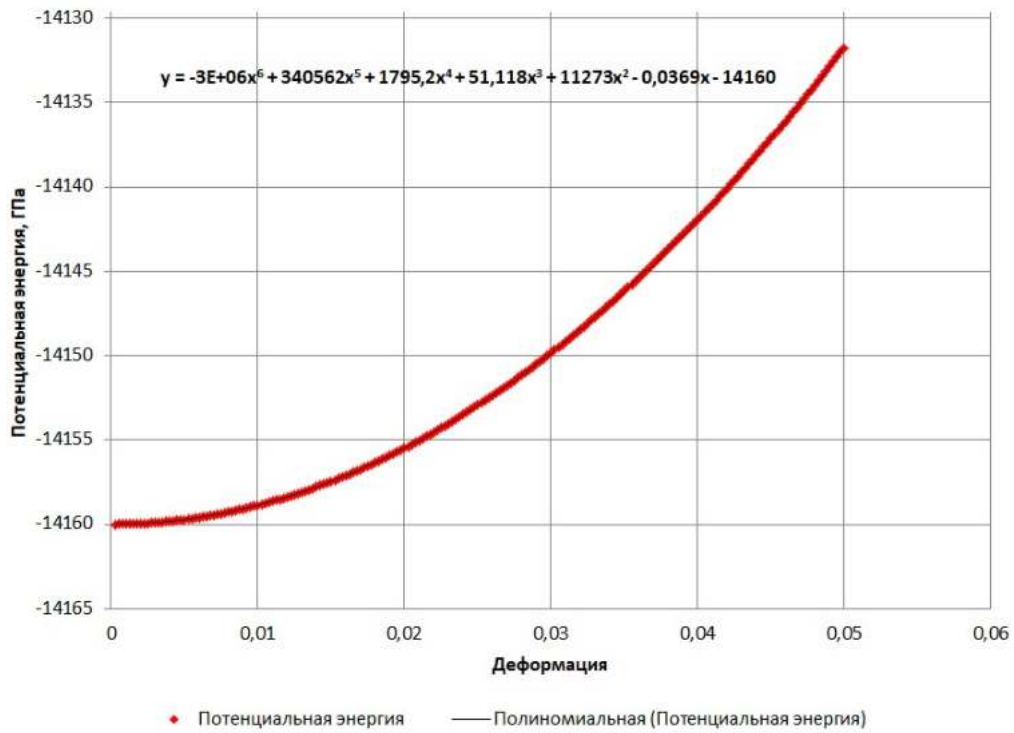


Рис. 2.3: Зависимость потенциальной энергии от приложенной деформации к кубическому образцу и ее аппроксимация полиномом: результаты атомистического (молекулярно-динамического моделирования). Вычисление упругих постоянных материала

$$\begin{pmatrix} 167.25 & 123.81 & 123.81 & 0 & 0 & 0 \\ 123.81 & 167.25 & 123.81 & 0 & 0 & 0 \\ 123.81 & 123.81 & 167.25 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 76.46 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 76.46 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 76.46 \end{pmatrix} \quad (2.1.19)$$

Для того, чтобы определить компоненты тензора упругих модулей Эйденом Томсоном предложен программный код, написанный в LAMMPS, модификация и усовершенствование которого позволит найти упругие модули для других типов кристаллической решетки и потенциалов. В програм-

ме описывается образец кубической формы размерами $20 \times 20 \times 20$ ячеек моделирования, находящийся при нулевой температуре. Программа нацелена на вычисление упругих постоянных материала путем растяжения и сжатия кубического образца в одном из трех направлений и приложения сдвиговых деформаций с помощью команды `change_box`. Результаты расчетов, полученные в настоящей диссертационной работе, были сопоставлены с результатами вычислений, проведенных с помощью программного кода Э.Томпсона, и найдены близкие значения компонент тензора упругих модулей.

Хорошо известно несколько схем расчета средних значений компонент тензора упругих модулей: схема Ройса, Фойгта и их комбинация в формулировке Хилла. По Фойгту общие соотношения, выражающие зависимость модуля упругости и модуля сдвига, имеют вид:

$$9B_V = (C_{11} + C_{22} + C_{33}) + 2(C_{12} + C_{23} + C_{31}), \quad (2.1.20)$$

$$15G_V = (C_{11} + C_{22} + C_{33}) - (C_{12} + C_{23} + C_{31}) + 3(C_{44} + C_{55} + C_{66}),$$

согласно Ройсу:

$$\frac{1}{B_R} = (S_{11} + S_{22} + S_{33}) + 2(S_{12} + S_{23} + S_{31}), \quad (2.1.21)$$

$$\frac{15}{G_R} = 4(S_{11} + S_{22} + S_{33}) - 4(S_{12} + S_{23} + S_{31}) + 3(S_{44} + S_{55} + S_{66}).$$

Зачастую применяют аппроксимационные формулы Фойгта-Ройса-Хилла, в которых упругие постоянные (модуль упругости, модуль сдвига и изотермический коэффициент всестороннего сжатия) вычисляются согласно следующим формулам

$$G = \frac{1}{2}(G_V + G_R), \quad B = \frac{1}{2}(B_V + B_R), \quad \tau = \frac{1}{B}. \quad (2.1.22)$$

Усредненные величины коэффициента Пуассона ν и модуля Юнга E вы-

числяются с помощью вышеприведенных соотношений для G и B :

$$\nu = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)}, \quad E = \frac{9BG}{3B + G}. \quad (2.1.23)$$

Для других (более сложных) типов сингоний кристаллической решетки количество независимых упругих модулей возрастает, поэтому для заданного типа кристаллической решетки формулы для их определения уникальны. Для кубической кристаллической решетки имеется три независимых постоянных C_{11} , C_{12} , C_{44} . Упругие постоянные: модули всестороннего сжатия и сдвига согласно схеме Фойгта и Ройса вычисляются согласно следующим формулам

$$B_V = B_R = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}, \quad G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5}, \quad G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})}. \quad (2.1.24)$$

Для рассматриваемой в данной диссертационной работе меди получены следующие значения констант: модуль всестороннего сжатия равен $B_V = B_R = 138.29$ ГПа, модуль сдвига по Фойгту и Ройсу $G_V = 54.56$ ГПа, $G_R = 38.07$ ГПа, соответственно. Согласно соотношениям Хилла найдена величина модуля сдвига $G = 46.32$ ГПа, модуля всестороннего сжатия $B = 138.29$ ГПа, коэффициента Пуассона $\nu = 0.35$ и модуля Юнга $E = 125$ ГПа.

2.2. Пространственная визуализация упругих свойств среды

Для графической пространственной визуализации свойств упругого материала можно воспользоваться расчетно-графическим открытым онлайн приложением ELATE (Elastic tensor analysis, онлайн-инструмент для анализа тензоров упругости, предложенный Роменом Галиаком и Франсуа-Ксавье Кудером). Расчетно-графическое приложение ELATE представлено на сайте [199], по этому же адресу можно найти инструкцию по работе с данной оболочкой. В распоряжении исследователей предусмотрены мно-

жество функций, таких как поворот графиков вокруг двух осей, добавление на график линий каркаса, экспорт графика в графический онлайн-редактор Plotly [205] и сохранение графика в виде изображения. Пользователю необходимо ввести лишь матрицу упругих модулей, а программа выведет средние значения упругих свойств, вычисленные в соответствии с различными схемами их определения, их плоскую и пространственную визуализацию, их числовые значения при различных значениях деформаций.

После нахождения тензора упругих модулей C_{ij} и тензора податливости S_{ij} , можно построить распределения упругих характеристик. Отличные от нуля компонент тензора податливости могут быть вычислены в соответствии с формулами

$$S_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}, S_{12} = \frac{-C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}, S_{44} = \frac{1}{C_{44}}. \quad (2.2.1)$$

Таким образом, тензор податливости, может быть представлен в следующем виде

$$\begin{pmatrix} 16.15E - 3 & -6.86E - 3 & -6.86E - 3 & 0 & 0 & 0 \\ -6.86E - 3 & 16.15E - 3 & -6.86E - 3 & 0 & 0 & 0 \\ -6.86E - 3 & -6.86E - 3 & 16.15E - 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 13.07E - 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 13.07E - 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 13.07E - 3 \end{pmatrix} \quad (2.2.2)$$

После определения тензоров упругих модулей и податливости строят пространственные распределения модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля сдвига в зависимости от заданного направления в пространстве

по следующим формулам

$$E = \frac{1}{(a_i a_j a_k a_l S_{ijkl})}, a = \begin{pmatrix} \sin\theta \cos\varphi \\ \sin\theta \sin\varphi \\ \cos\theta \end{pmatrix} \quad (2.2.3)$$

$$G = \frac{1}{(4a_i b_j a_k b_l S_{ijkl})}, b = \begin{pmatrix} \cos\theta \cos\varphi \cos\gamma - \sin\theta \sin\gamma \\ \cos\theta \sin\varphi \cos\gamma + \cos\theta \sin\gamma \\ -\sin\theta \cos\gamma \end{pmatrix} \quad (2.2.4)$$

$$G = -\frac{a_i a_j b_k b_l S_{ijkl}}{(a_i a_j a_k a_l S_{ijkl})} \quad (2.2.5)$$

С помощью вычисленных компонент тензора податливости, путем изменения координат x_1, x_2, x_3 радиуса - вектора точки, откладываются относительные удлинения в каждом направлении. Полученные изображения иллюстрируют относительное удлинение в каждом направлении для монокристаллической ГЦК меди.

На рис. 2.4 показаны пространственные представления упругих постоянных монокристалла меди, полученные с помощью работы приложения ELATE.

Аналогичные шаги для вычисления упругих констант выполнены для алюминия. Составляющие тензора упругих постоянных для монокристалла ГЦК алюминия, обладающего тремя независимыми упругими постоянными (что отвечает кубической сингонии), равны

$$\begin{pmatrix} 107.87 & 81.44 & 81.44 & 0 & 0 & 0 \\ 81.44 & 107.87 & 81.44 & 0 & 0 & 0 \\ 81.44 & 81.44 & 107.87 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 46.16 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 46.16 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 46.16 \end{pmatrix} \quad (2.2.6)$$

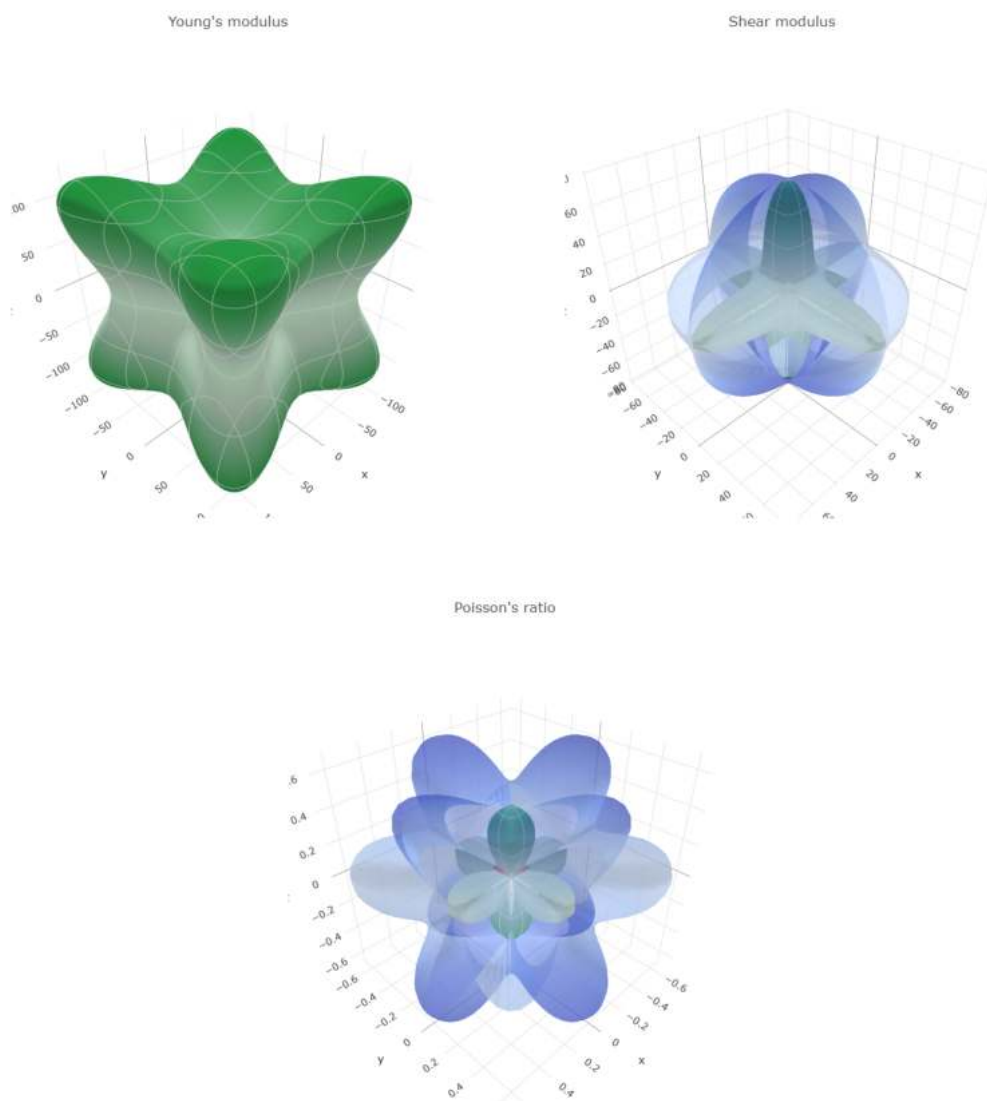


Рис. 2.4: Пространственная визуализация постоянных ГЦК меди: модуля Юнга, модуля сдвига и коэффициента Пуассона

Упругие модули алюминия, вычисленные с помощью атомарного молекулярно-динамического моделирования, с использованием усреднения по Хиллу равны: модуль Юнга $E = 76.24$ ГПа, коэффициент Пуассона $\nu = 0.36$, модуль всестороннего сжатия $B = 90.25$ ГПа, модуль сдвига $G = 28.05$ ГПа.

На рис. 2.5 изображены пространственные представления упругих свойств ГЦК алюминия.

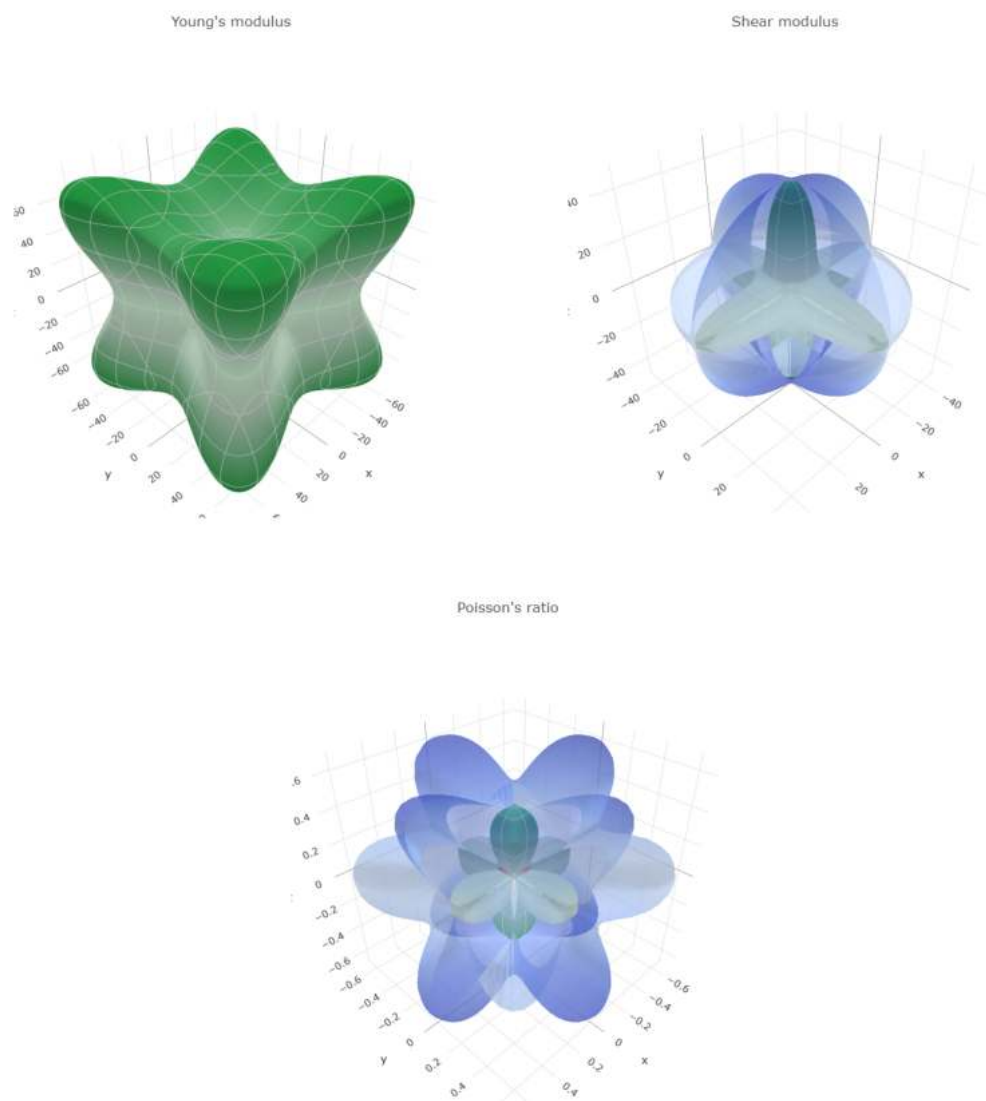


Рис. 2.5: Пространственная визуализация постоянных ГЦК алюминия: модуля Юнга, модуля сдвига и коэффициента Пуассона

2.3. Выводы по главе 2

В главе 2 приведено детальное описание процедуры атомарного молекулярно-динамического расчета компонент тензора упругих модулей ГЦК меди и алюминия. Полученные величины упругих постоянных находятся в полном соответствии с имеющимися в литературе значениями и будут ниже использованы в конечно-элементных расчетах.

Глава 3. Атомистическое (молекулярно-динамическое) моделирование роста трещин. Вычисление углов направления распространения дефекта в условиях смешанного деформирования

В главе приводятся атомистический и континуальный (основанный на критериях континуальной механики разрушения) расчеты углов направления роста трещины при комбинированном нагружении (одновременное действие нормального отрыва и поперечного сдвига) образцов с трещиной, сопоставление и анализ полученных результатов. Сначала описаны детали, технические требования и особенности атомистического моделирования: размеры ячейки моделирования, размер моделируемой области, граничные условия, термодинамические ансамбли и термостат; способы создания трещины и способы приложения смешанного нагружения. На втором шаге вычисляются значения углов распространения дефекта из дискретного моделирования (атомистического, молекулярно-динамического) и из критериев континуальной механики разрушения (макроскопических критериев максимального окружного направления и минимальной функции плотности энергии упругой деформации). Затем проведено сопоставление полученных с помощью двух принципиально различных подходов (дискретного и континуального) результатов для значений углов направления роста дефекта.

3.1. Обзор работ, направленных на исследование и анализ направления роста трещин и дефектов с помощью атомистического подхода

Неотъемлемой частью дизайна, проектирования и эксплуатации технического оборудования является полномасштабный анализ живучести, проч-

ности и надежности его элементов, который проводится на основании расчетов напряженно-деформированного состояния составляющих технического оборудования. Для обеспечения прочности материалов необходимым является знание и полное представление о причинах и механизмах возникновения разрушения. Следовательно, проблемы разрушения являются одними из первостепенных и важных задач в изучении и оценке сопротивления материалов внешним нагрузкам.

Со стремительным развитием нано- и микроэлектромеханических систем анализ механических свойств и характеристик металлических материалов на наноскопическом уровне приобретает жизненно важную роль. Нанопластины представляют собой основу многих микро- и наноустройств [21]. В нанопластине, подверженной действию различных процессов, неизбежным образом появляются такие дефекты как микропоры, трещины, влияющие на механические свойства нанопластины. Более того, на механические свойства среды могут оказывать влияние такие факторы как размеры пластины, температура, скорость приложенной деформации и ее величина.

Широко известно, что впервые задачей об определении критического состояния тела с трещиной занимался Гриффитс [72] и он решал ее с позиции общего энергетического баланса тела с трещиной. Далее Вестергард [180] и Снеддон [147] смогли аналитически описать распределение напряжений у вершины трещины в упругом теле. На основании исследований Дж. Ирвина [82] был сформулирован силовой критерий локального разрушения, в котором использовался коэффициент интенсивности напряжений как важнейшая критическая величина. Ирвин показал, что его подход и энергетический критерий Гриффитса эквивалентны в условиях упругости. Кроме того, концепция квазихрупкого разрушения, сформулированная Ирвином [82] и Орованом [123], является одним из важнейших достижений ме-

ханики разрушения. Работы вышеупомянутых ученых и их последователей сформировали классическую теорию линейной механики разрушения, являющейся на сегодняшний день фундаментом актуально-современных инженерных технологий проектирования ответственных элементов конструкций. Согласно линейной механике разрушения состояние тел с трещинами изучается в рамках предположения, что во всей среде сохраняется свойство линейной упругости вплоть до достижения состояния разрушения.

Изучение процессов разрушения и проблемы критического состояния тел с трещинами продолжают оставаться актуальными в современной науке. В настоящее время, атомистическое (дискретное) моделирование методом МД стало эффективной и перспективной техникой изучения процессов деформационного поведения и разрушения материалов. Микротрещины и иные дефекты в материале оказывают принципиальное и существенное влияние на его механические свойства и процесс распространения трещин. Например, в [48] методом молекулярной динамики было показано, что наличие дополнительных вакансий в образце с макротрещиной увеличивает его трещиностойкость. Моделирование поведения образцов с трещинами при действии растягивающих усилий в алюминии с гранцентрированной кристаллической решеткой было проведено в идеальной решетке и с учетом распределенных дефектов [48]. Полученные расчеты обнаружили, что существующее взаимодействие между вершиной макротрещины и вакансиями приводит к изменению величины концентрации напряжений в охватывающей вершины трещины области. Возрастание числа дефектов приводит, в свою очередь, к усилению затупления кончика дефекта и снижению скорости роста трещины по сравнению с материалом, который не содержит вакансий, что далее повышает прочность материала. Всесторонний анализ явления распространения трещины методом МД было проведено в [17, 40, 48, 64, 65, 67, 112, 120, 121, 134, 140, 191, 193, 194]. В работе [112] было

исследовано влияние размера зерна и кристаллографической ориентации трещины на поведение её роста в столбчатых нанокристаллических образцах. Было показано, что ориентация кристаллической решетки и размер зерна существенным образом не влияют на механизмы роста трещины при размере зерна в поликристаллическом материале менее, чем 11.65 нм, тогда как эти же фактора приводят к затуплению или остановке роста трещины в нанокристаллических материалах со средними размерами зерен, превышающими 11.65 нм. В работе [64] было изучено влияние температуры на рост трещины в кремневом нанолисте. Основным выводом, сформулированный в работе, гласит, что с увеличением температуры вычисленные деформации и предельные напряжения уменьшаются.

В [191] с помощью методов МД и конечных элементов исследуются эффекты наличия наноразмерных дефектов (таких как нановакансии и нанотрещины) в графеновых нанолитах. Были проверены концепции линейной механики разрушения для некоторых конфигураций образцов с трещиной и было показано, что оба метода имеют высокую точность в предсказании углов продвижения трещины при сочетании нагрузок, отвечающих растяжению и сдвигу. В статье [140] был исследован механизм разрушения и воздействия поверхностной трещины на механические свойства кварцевого стекла, такие как модуль упругости и прочность. Итоги моделирования показали, что приповерхностные трещины не оказывают значительно воздействия на модуль упругости кварцевого стекла, однако существенно влияют на его прочность. Молекулярно-динамические расчеты также показали, что трещина длины приблизительно 35 нм снижает прочность стекловолокна до 3.5 ГПа. При этом режим разрушения является хрупким и начинается с разрыва связей Si-O. Подрастание трещины происходит путем последовательного разрыва связей Si-O. Также было установлено, что перед вершиной трещины не образуется зона неупругого деформирования

с возникающими и сливающимися нанополостями и вакансиями.

Метод молекулярной динамики был успешно применен для оценки влияния примесей в материале на процесс распространения трещины. В работе [134] изучено влияние содержания в нанокристалле железо-азот азота на продвижение трещины при повышенных температурах. Атомистические расчеты и итоги моделирования показали, что при более высоких температурах (порядка 900К, 1100 К) создается большое число систем скольжения, приводящих к затуплению трещины, росту вакансий и их объединению. Более того, было обнаружено, что в зависимости от концентрации азота механизм деформирования и характер разрушения значительно изменяются. Трещина медленно распространяется при низком содержании азота (до 0.1% общей массы). А при высоком содержании азота (свыше 0.51% общей массы) за счет изменения пути распространения трещины ее роста увеличивается. Работы [65, 193, 194] нацелены на исследование воздействия угла наклона и угла закручивания границы зерна на рост трещины в бикристаллических материалах. Статьи [40, 67, 120, 121] также направлены на исследование распространения трещин в условиях нормального отрыва. Вместе с тем остаются открытыми и невыясненными вопросы, относящиеся к условиям комбинированного нагружения, когда одновременно действует растягивающая нагрузка и поперечный сдвиг.

3.2. Краткий обзор критериев разрушения континуальной механики сплошной среды

Для хрупкого разрушения, рассматриваемого как разрыв межатомных связей (в отличии от скольжения кристаллических плоскостей, известного как дислокация или вязкое разрушение), критерий разрушения описан в работах Гриффитса [72] и Ирвина [81]. В теории разрушения Гриффитса в твер-

дом теле распространение трещины должно сопровождаться уменьшением энергии деформации, накопленной в теле, как

$$-\Delta U = 2\gamma\Delta c, \quad (3.2.1)$$

где ΔU – изменение энергии деформации с отрицательным знаком, γ – поверхностная энергия, рассматриваемая как константа материала, Δc – расширение трещины. Преобразуя уравнение (3.2.1), критическая скорость выделения энергии определяется как

$$G_{Ic} = -\frac{\Delta U}{\Delta c} = 2\gamma. \quad (3.2.2)$$

Согласно уравнению (3.2.2), если связь между энергией деформации и размером трещины известна, критерий Гриффитса применим как к дискретному, так и к сплошному телу, в зависимости от рассмотрения либо конечной трещины, либо бесконечно малого расширения трещины ($\Delta c \rightarrow dc, \Delta U \rightarrow dU$). Поскольку определение энергии деформации как функции длины трещины может быть сложной задачей, Ирвин предположил, что общий энергетический баланс Гриффитса можно рассматривать как работу, выполняемую напряжением вблизи вершины трещины и перемещением для удаления новой поверхности трещины. При растяжении (мода I) напряжения σ_{yy} у вершины и перемещения u_y в линейно-упругом теле равны

$$\sigma_{yy} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}}, \quad u_y = 2\frac{K_I}{\pi E^*}\sqrt{2\pi r}, \quad (3.2.3)$$

где r – расстояние от вершины трещины, E^* – константа материала, зависящая от плоского напряженного или плоского деформированного состояния, K_I – коэффициент интенсивности напряжения. Соответствующая работа, сделанная для раскрытия трещины, равна полной выделенной энергии, что

дает

$$G_I dc = 2 \int_0^{dc} \frac{1}{2} \sigma_{yy}(r) u_y(dc - r) dr = \frac{2K_I^2}{\pi E^*} \int_0^{dc} \sqrt{\frac{dc - r}{r}} dr = \quad (3.2.4)$$

$$= \frac{2K_I^2}{\pi E^*} \left(\frac{\pi}{2} \right) dc \Rightarrow G_I = \frac{K_I^2}{E^*}.$$

Следует отметить, что расширение трещины, рассматриваемое в уравнении (3.2.4) должно быть бесконечно малым. Поскольку уравнение (3.2.4) показывает эквивалентность коэффициента интенсивности напряжений и скорость выделения энергии, Ирвин переопределил уравнение (3.2.2) как критерий разрушения, основанный на критическом коэффициенте интенсивности напряжений.

$$K_I = K_{Ic}. \quad (3.2.5)$$

Если включить пластическую деформацию, аналогичную уравнению Уильямса в линейной упругости, то напряжения вблизи вершины трещины определяются в соответствии со следующей формулой

$$\sigma_{ij} = A \sigma_Y r^\lambda \tilde{\sigma}_{ij}(\theta), \quad (3.2.6)$$

где A – неизвестный коэффициент и σ_Y – предел текучести. Подставляя уравнение (3.2.6) в закон степенного упрочнения

$$\frac{\varepsilon_{ij}}{\varepsilon_Y} = \alpha \left(\frac{\sigma_e}{\sigma_Y} \right)^{n-1} \frac{S_{ij}}{\sigma_Y}, \quad (3.2.7)$$

где α – параметр материала, n – показатель деформационного упрочнения, деформация вблизи вершины трещины может быть получена как

$$\varepsilon_{ij} = \alpha A^n \varepsilon_Y r^{\lambda n} \tilde{\varepsilon}_{ij}(\theta), \quad (3.2.8)$$

а соответствующая плотность энергии деформации равна

$$w = \int \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} = \alpha A^{n+1} \sigma_Y \varepsilon_Y r^{\lambda(n+1)} \tilde{w}(\theta). \quad (3.2.9)$$

Следует отметить, что, поскольку значения показателя деформационного упрочнения в металлах находится в диапазоне от 0.1 до 0.5, уравнение (3.2.7) касается только пластической деформации с более сильной сингулярностью и, таким образом, упругая деформация не учитывается в уравнении (3.2.8). Выражая J -интеграл в полярной системе координат, получим следующее выражение

$$J = r \oint \left[w \cos \theta - \sigma_{ij} n_j \frac{\partial u_i}{\partial x} \right] d\theta. \quad (3.2.10)$$

Для J -интеграла, не зависящего от пути, степень r в уравнении (3.2.9) должна быть равной -1, тогда

$$\lambda(n + 1) = -1 \Rightarrow \lambda = -\frac{1}{n + 1}. \quad (3.2.11)$$

Подставив перемещения u_r и u_θ (полученные из соотношения деформация-перемещения) в уравнение (3.2.10), Хатчинсон [77], Райс и Розенгрэн [136] вычислили неизвестный коэффициент A как

$$A^{n+1} = \frac{J}{\alpha \sigma_Y \varepsilon_Y I_n}, \quad (3.2.12)$$

где I_n постоянная, определяемая подынтегральным выражением в J -интеграле. В охватывающей вершину трещины области напряжения и деформации в пластическом материале с упрочнением по степенной функции согласно решению Хатчинсона, Райса, Розенгрэна представляются как

$$\sigma_{ij} = \sigma_Y \left(\frac{J}{\alpha \sigma_Y \varepsilon_Y I_n r} \right)^{\frac{1}{n+1}} \tilde{\sigma}_{ij}(\theta), \quad (3.2.13)$$

$$\varepsilon_{ij} = \alpha \varepsilon_Y \left(\frac{J}{\alpha \sigma_Y \varepsilon_Y I_n r} \right)^{\frac{n}{n+1}} \tilde{\varepsilon}_{ij}(\theta), \quad (3.2.14)$$

где интенсивность сингулярного поля напряжений и деформаций характеризуется значением J -интеграла.

Можно констатировать, что по существу представления (3.2.3), (3.2.4) вкупе с (3.2.13) и (3.2.14), задающие сингулярные поля напряжений у вершины трещины, заложили основу современной континуальной механики

разрушения. Вместе с тем, эти же представления вносят неопределенность в применении континуальной механики к атомистическим системам, где действуют межатомные связи конечной величины, и, следовательно, не может существовать присущей для континуальной теории сингулярности поля напряжений.

3.3. Обзор современной научной литературы, посвященной нахождению углов направления продвижения острого дефекта на основании критериев континуальной механики упругого разрушения

Проблема определения направления роста трещины и ее траектории в режиме комбинированного деформирования и формулирование критериальных условий, позволяющих отыскать угол направления продвижения трещины или дефекта, является одной из широко обсуждаемых задач в актуально-современной континуальной механике упругого и неупругого разрушения [10, 29, 36–38, 94, 98–100, 104, 109, 115, 131–133, 145, 146, 184]. В настоящее время предложен целый ряд теоретически хорошо обоснованных и экспериментально с помощью многих методов подтвержденных макроскопических критериальных условий подрастания трещины [10, 29, 36–38, 94, 98–100, 104, 109, 115, 131–133, 145, 146, 184]. Физическая интерпретация и физическое обоснование критериев базируется на различных соображениях, но все критерии, указанные в перечне ниже, нашли свое широкое использование в теоретических и практических приложениях, сфера их применения широка и разнообразна. Например, в практическом проектировании и дизайне разрушение в смешанном режиме, которое демонстрирует комбинацию морфологий, связанных с чистыми режимами I и II, часто происходит в бетонных конструкциях, металлических материалах, биологических

материалах и многих других, приводя к неожиданным повреждениям и деградации материала.

В целом, предложенные макроскопические критериальные условия (критерии) роста трещины континуальной механики подразделяются на четыре основных класса [37]: а) критерии, использующие составляющие тензоров деформаций и напряжений, ассоциированные с трещиной, среди которых наибольшее распространение получили критерии максимального окружного (тангенциального) напряжения (МОН) и максимальной окружной деформации; [10, 104]; б) энергетические критерии, такие как, критерий минимальной функции плотности энергии упругой деформации [36, 38, 94, 98–100, 104, 109, 115, 131–133, 145, 146]; в) условия распространения трещины, заслуживающие на введение в рассмотрение и использовании различных мер поврежденности [184]; г) эмпирические критерии распространения дефектов и трещин, опирающиеся на эксперимент [29].

Перечисленные критерии разрушения стали основополагающими и классическими и нашли свое широкое теоретическое и практическое применение. Тем не менее, многие задачи и вопросы остаются неразрешенными и открытыми и в настоящее время продолжают появляться новые формулировки критериев. Так, в статье [10] был сформулирован новый критерий разрушения, основанный на том, что хрупкое разрушение происходит, когда градиент деформации достигает своего предельного значения. Еще один интересный подход был предложен в [104]. Авторами предложен новый критерий разрушения, основанный на идее достижения градиентом деформации своего предельного значения в момент разрушения. Новый критериальный подход к разрушению предлагается в [36], согласно которому для прогнозирования и расчета траектории трещины при комбинированных нагружениях можно опираться на экстремальное значение осредненных напряжений в охватывающей окрестность вершины трещи-

ны области. Дополнительно выдвигаются критерии усредненной функции плотности энергии упругой деформации на основании экспериментальных данных статических испытаний на циклическое нагружение образцов двух типов: образцов со сварными швами и образцов с острыми и затупленными V-образными вырезами. В рамках единого подхода величина плотности энергии упругой деформации усредняется по области с высокими напряжениями (по области концентрации напряжений). В случае тупого выреза исследуемая область имеет достаточно сложную форму и ее ширина оценивается в ортогональном к вырезу направлении. Для острых вырезов в плоских задачах объем, по которому производится усреднение, принимает форму круга или кругового сектора.

Первостепенным аспектом в изучении траектории распространения трещин и дефектов является нахождение угла направления подрастания дефекта в условиях комбинированного нагружения. С целью определения направления роста трещины в [104] обсуждаются два основных пути: глобальный (интегральный) и локальный (инкрементальный) подходы. При этом применяется критериальное условие – условие достижение максимума тангенциальным напряжением на некотором расстоянии от кончика острой трещины. В соответствии с данным критерием дефект (трещина) начинает расти в направлении действия МОН и математическая формулировка критериального условия представляется в следующей форме:

$$\frac{\partial \sigma_{\theta\theta}}{\partial \theta} = 0, \quad \frac{\partial^2 \sigma_{\theta\theta}}{\partial \theta^2} < 0, \quad (3.3.1)$$

где $\sigma_{\theta\theta}$ – тангенциальная компонента напряжения на некотором заданном (известном) расстоянии от вершины острой трещины в полярных координатах r, θ , соотнесенных с вершиной трещины.

При практическом инженерном применении критерия МОН (3.3.1) в подавляющем большинстве случаев в критериальное условие (3.3.1) вносят

известное асимптотическое представление М. Уильямса, в котором сохраняют исключительно первое доминирующее (преобладающее) в окрестности вершины трещины слагаемое [131, 132]. Однако, при этом подход не принимает во внимание зависимость угла направления от расстояния от вершины трещины, что является принципиальным моментом в механике разрушения. Критическое расстояние от вершины макроскопической трещины является коренным и фундаментальным понятием механики разрушения. Именно это расстояние и фигурирует в критерии для вычисления максимального значения окружной компоненты напряжения (особенно это становится важным при использовании многопараметрического разложения полей, ассоциированных с вершиной трещины).

Необходимо отметить, что критериальное условие, базирующееся на максимальном значении окружной компоненты напряжений, не учитывает вид напряженного состояния и не зависит от того, какое состояние в действительности осуществляется: плоское деформированное или плоское напряженное. В силу указанной причины часто обращаются к критерию минимальной функции плотности упругой энергии деформации [131, 132]. Математическое представление критерия имеет вид

$$\frac{\partial S}{\partial \theta} = 0, \frac{\partial^2 S}{\partial \theta^2} > 0, S = \frac{1}{2\mu} \left[\frac{\kappa}{8} (\sigma_{rr} + \sigma_{\theta\theta})^2 - \sigma_{rr}\sigma_{\theta\theta} + \sigma_{r\theta}^2 \right] \quad (3.3.2)$$

где S – функция плотности энергии упругой деформации, μ – модуль сдвига, κ – постоянная плоской задачи теории упругости: $\kappa = 3 - 4\nu$ для плоского деформированного состояния, $\kappa = (3 - \nu)/(1 + \nu)$ для плоского напряженного состояния.

В рамках критерия, основанного на минимальной функции плотности энергии упругой энергии, который является локальным критерием, рассматривается и анализируется элемент континуума, находящийся непосредственно перед вершиной трещины. Согласно критерию минимальной

функции плотности упругой энергии трещина получает возможность распространяться, если накопленная энергия dW элемента объема dV , находящегося непосредственно перед вершиной острой трещины, достигает своего критического значения. Предполагается [145, 146], что функция плотности энергии деформации S определяется следующим выражением: $dW/dV = S/r$, где r – расстояние от кончика трещины. Функция плотности энергии деформаций S , запасенной элементом объема V , может быть записана как

$$S = r \frac{dW}{dV} = r \left[\frac{1}{2E} (\sigma_{rr}^2 + \sigma_{\theta\theta}^2 + \sigma_{zz}^2) \right] - r \left[\frac{\nu}{E} (\sigma_{rr}\sigma_{\theta\theta} + \sigma_{rr}\sigma_{zz} + \sigma_{zz}\sigma_{\theta\theta}) - \frac{1}{2G} (\sigma_{r\theta}^2 + \sigma_{rz}^2 + \sigma_{z\theta}^2) \right], \quad (3.3.3)$$

где dW/dV носит название функции плотности энергии деформаций; E – модуль Юнга, $G = E/(2(1 + \nu))$ – модуль сдвига. Исключая компоненту тензора напряжений σ_{zz} из последнего уравнения, можно упростить выражение (3.3.3) для плоской задачи теории упругости

$$S = r \frac{dW}{dV} = \frac{r}{2G} \left[\frac{\kappa + 1}{8} (\sigma_{rr}^2 + \sigma_{\theta\theta}^2) - \sigma_{rr}\sigma_{\theta\theta} + \sigma_{r\theta}^2 \right]. \quad (3.3.4)$$

В работах [145, 146] Дж. Си предложил новую концепцию ядра, которое представляет собой область вокруг вершины трещины, которая до этого не рассматривалась в физических исследованиях из-за проблем с применением механики сплошных сред на данных расстояниях. Он определил размеры ядра через такую характеристику, как плотность энергии деформаций, и отметил необходимость его учёта в аналитических решениях. В работе [94] подробно обсуждался критерий плотности энергии деформаций, а также необходимость его экспериментальной верификации. В связи с прогрессивным развитием вычислительной и экспериментальной техники стало возможным провести такую верификацию. В [36] были рассмотрены различные критерии разрушения, и, опираясь на экспериментальные ис-

следования и теоретические результаты, дана оценка возможности применения различных критериев для определения направления роста трещины. Авторами работы [109] был проанализирован ряд критериев разрушения (критерий плотности энергии деформаций, максимального тангенциального напряжения и максимальной окружной деформации) и на основе экспериментальных и теоретических данных была предложена модифицированная форма критерия максимальной окружной деформации, учитывающая T -напряжения. Показано, что удержание T -напряжения в асимптотическом решении приводит к хорошему описанию экспериментальных данных, однако авторы статьи [109] ограничились экспериментальными исследованиями лишь для одного типа образца (полудиск с надрезом) и для одного материала (бетон). Рассмотрен расширенный критерий максимальной окружной деформации только для одного значения критического расстояния от кончика трещины. Графики, представленные в [109], не позволяют говорить о хорошем согласовании результатов между экспериментальными точками и теоретическими оценками. Таким образом, нельзя утверждать о значительных преимуществах модифицированного критерия максимальной окружной деформации перед другими критериями разрушения. Для более точной оценки результатов необходимы более широкие экспериментальные данные и анализ различных типов образцов и материалов. В [132] был разработан новый подход к прогнозированию разрушения материалов, учитывающий влияние T -напряжения на распределение энергии упругой деформации в окрестности трещины. Эксперименты на бразильском диске и полукруглом образце подтвердили высокую точность нового критерия. Важным выводом работы [132] стало подчёркивание необходимости учёта T -напряжения в анализе разрушения материалов.

Целью диссертационной работы является расчет угла направления роста трещины в пластине с центральной трещиной, где длина трещины

много меньше длины стороны пластины, для разных значений параметра смешанности нагружения с использованием метода молекулярной динамики. Для данной конфигурации, существуют точные выражения для масштабных множителей полного асимптотического разложения М. Уильямса [18, 75, 164, 165], которые используются для вычисления углов распространения трещины по двум критериям: критерию максимального тангенциального напряжения и критерию минимума плотности энергии упругой деформации. При использовании многопараметрического представления поля напряжений необходимо задать расстояние, на котором будет рассматриваться тангенциальное напряжение или функция плотности энергии упругой деформации S . Результаты молекулярно-динамического моделирования сравнивались с результатами, приведенными в работе [17]. Полученные сопоставления приведены в таблицах 1–5 приложения 1.

3.4. Детали моделирования дискретной модели распространения трещины в медной пластине с центральной трещиной

В рамках диссертационной работы проведено молекулярно-динамическое моделирование распространения центральной трещины в FCC-медной пластине, находящейся в условиях смешанного нагружения.

В качестве объекта молекулярно-динамического моделирования была выбрана пластинка монокристаллической FCC-меди со сквозной центральной трещиной. На рис. 3.1 представлена схематическая модель, где оси x , y , z соответствуют положительным направлениям. В решетке монокристалла основными направлениями являются $[100]$, $[010]$ и $[001]$. Размеры пластины определены длиной L , шириной W , толщиной H , причем $L : W = 1$.

Для создания трещины было удалено несколько рядов атомов из исходной структуры. Размеры моделирования варьировались, а периодические

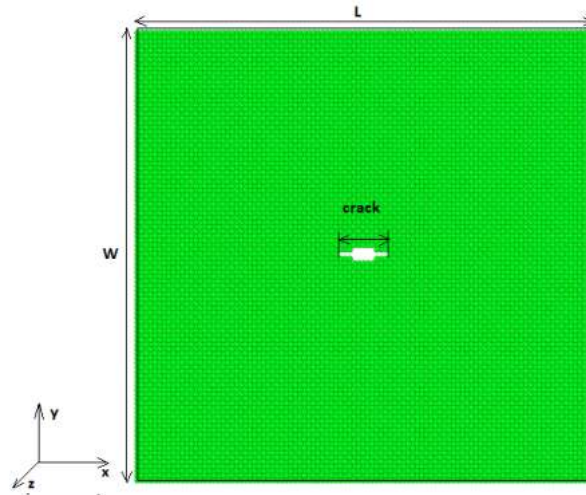


Рис. 3.1: Схема геометрической конфигурации модели FCC-металлической пластины с центральной трещиной

граничные условия были использованы как в двух, так и в трех направлениях. Численные эксперименты проводились в ячейке моделирования с порядка 400 тысячами атомов, а в некоторых случаях их число доходило до 800 тысяч.

Для поддержания температурного режима использовался термостат Нойза-Гувера [76] в каноническом (NVT) ансамбле. Для моделирования процесса распространения трещины при механическом нагружении, использовалась программа, написанная с использованием кода LAMMPS, с шагом интегрирования 1 фемтосекунда. Скорость деформации при заданных граничных условиях изменялась в диапазоне от 0.001 1/фс до 0.04 1/фс.

Наконец, углы направления распространения трещины были определены на основе изображений состояния системы, используя инструменты программы визуализации OVITO (Open Visualization Tool) [204]. В результате применения данного метода был получен диапазон значений углов, который мог варьироваться в зависимости от выбранного способа измере-

ния, с погрешностью в 1-2 градуса.

3.5. Результаты молекулярно-динамического моделирования смешанного нагружения монокристаллической медной пластины с центральной трещиной

На рис. 3.2 приведены зависимости напряжения от времени в пластине, нагруженной в соответствии с различными значениями параметра смешанности.

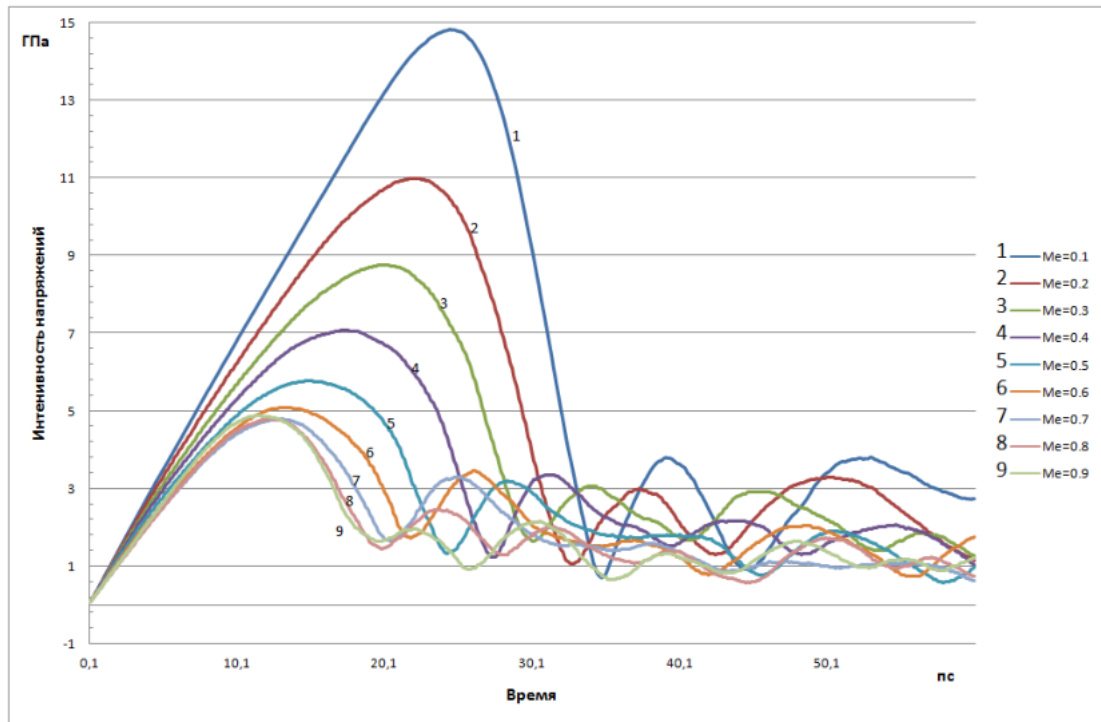
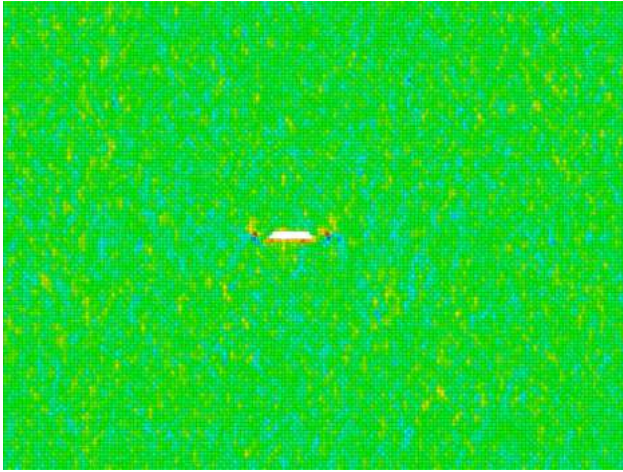
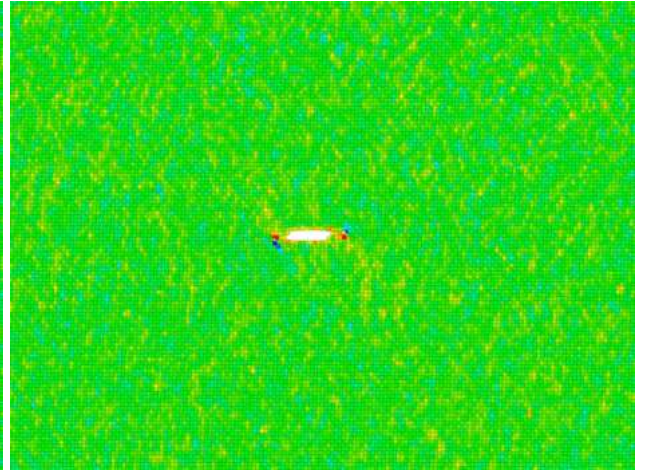


Рис. 3.2: Кривые зависимости интенсивности напряжения в медной пластине с центральной трещиной в зависимости от времени при различных значениях параметра смешанности нагружения

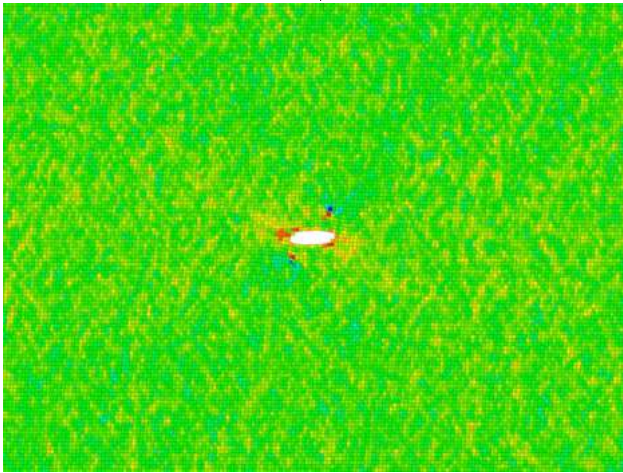
На рис. 3.3-3.13 приведены состояния системы с течением времени для различных значений параметра Me^e . Цветом показано распределение компонент σ_{11} , σ_{22} и σ_{12} тензора напряжений. Значения выводятся в диапазоне от -20 ГПа до 20 ГПа.



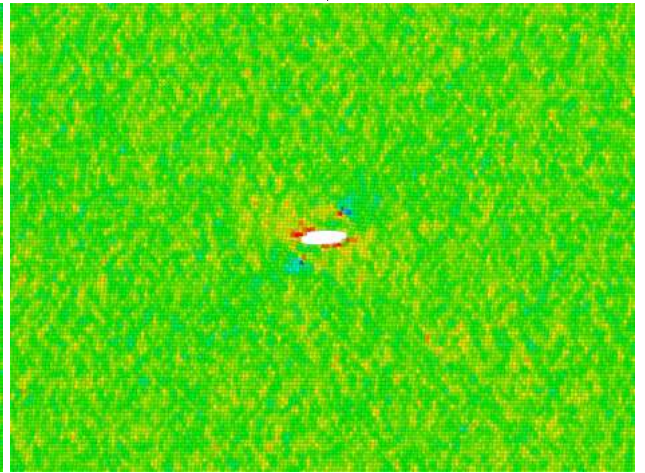
а)



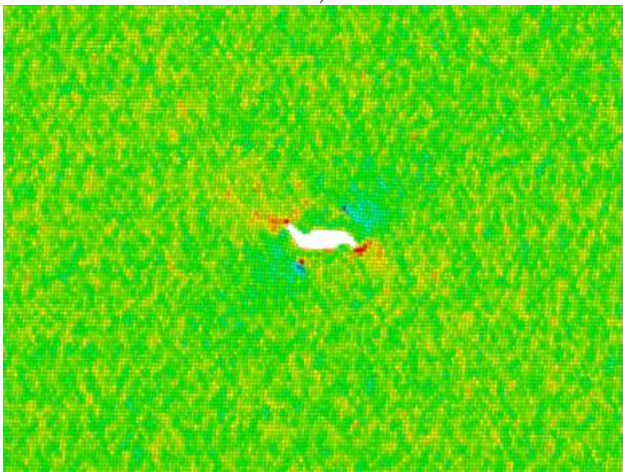
б)



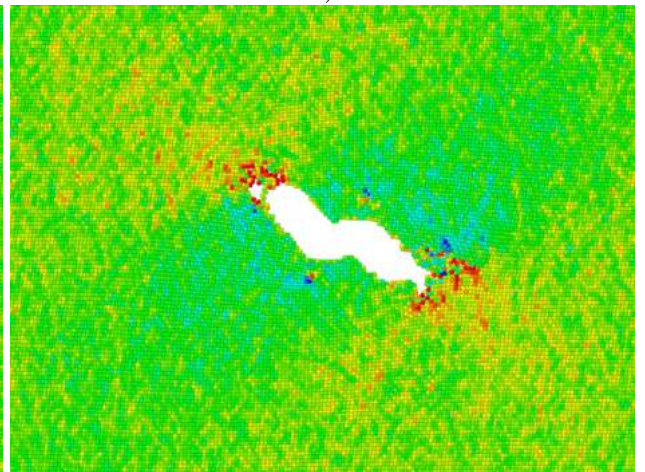
в)



г)

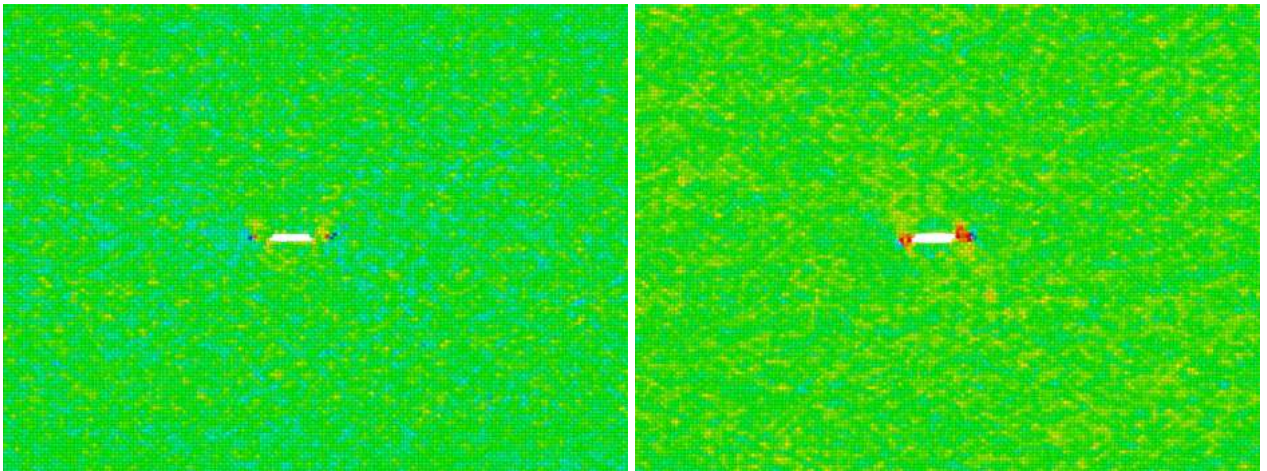


д)



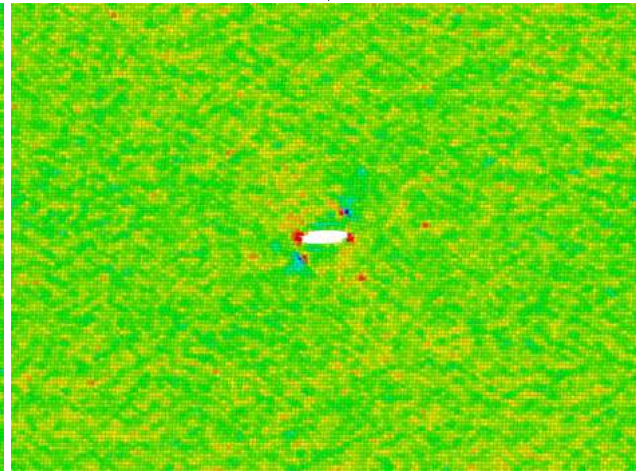
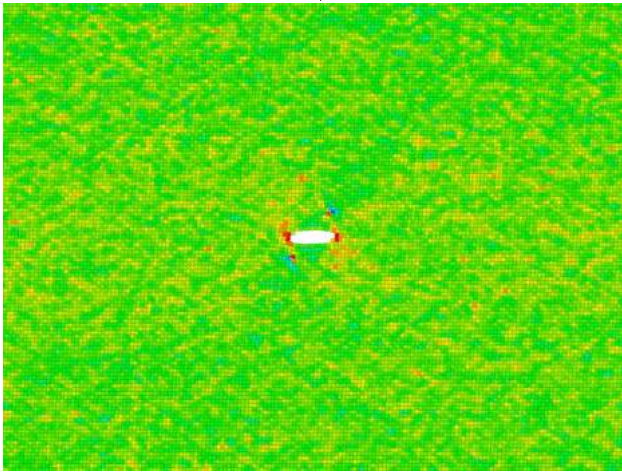
е)

Рис. 3.3: Процесс подрастания дефекта для значения параметра смешанности нагружения $M^e = 0.3$, компонента σ_{11} , время а) 0 пс, б) 5 пс, в) 10 пс, г) 12 пс, д) 15 пс, е) 20 пс



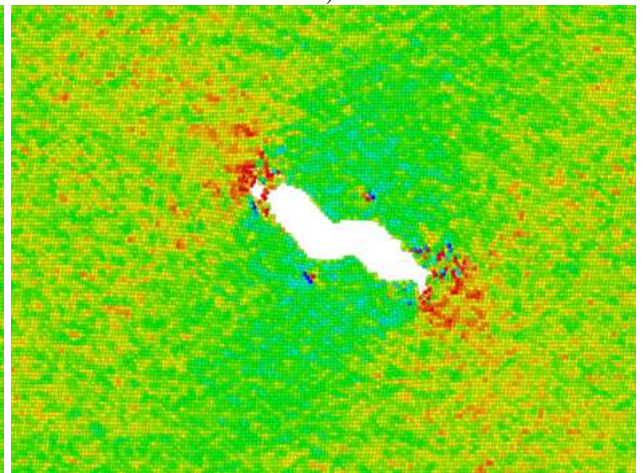
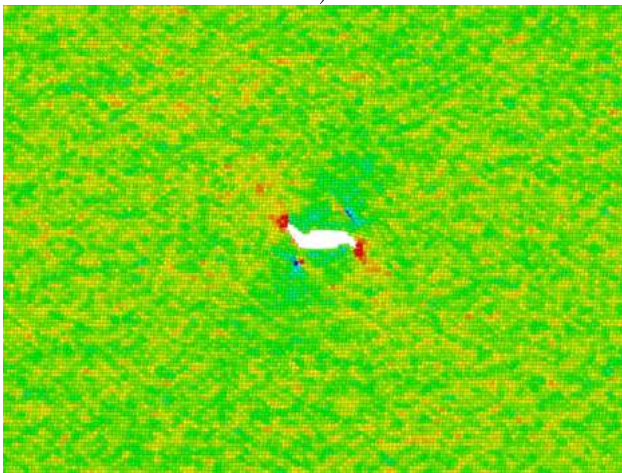
а)

б)



в)

г)



д)

е)

Рис. 3.4: Процесс подрастания дефекта для значения параметра смешанности нагружения $M^e = 0.3$, компонента σ_{22} , время а) 0 пс, б) 5 пс, в) 10 пс, г) 12 пс, д) 15 пс, е) 20 пс

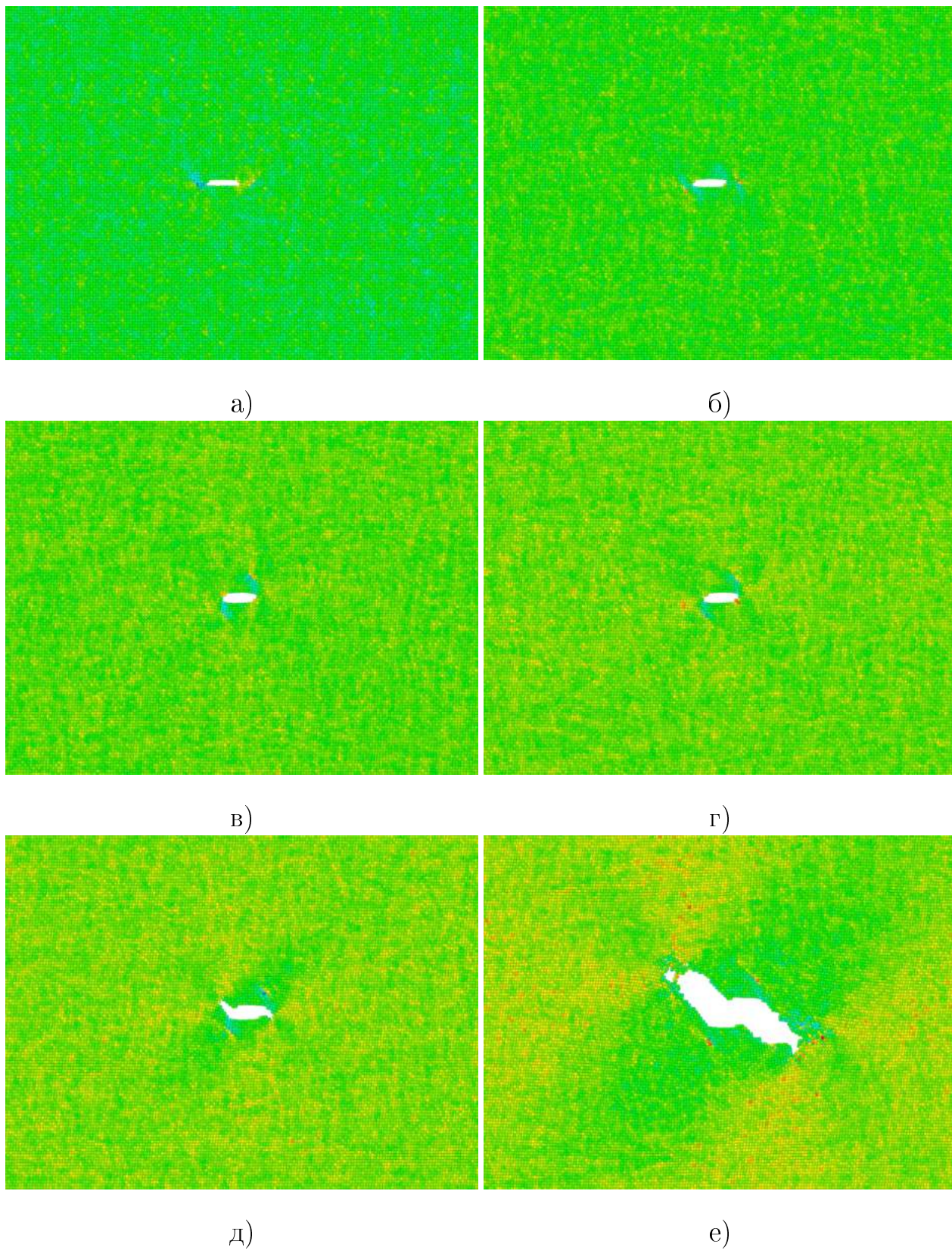


Рис. 3.5: Процесс подрастания дефекта для значения параметра смешанности нагружения $M^e = 0.3$, компонента σ_{12} , время а) 0 пс, б) 5 пс, в) 10 пс, г) 12 пс, д) 15 пс, е) 20 пс

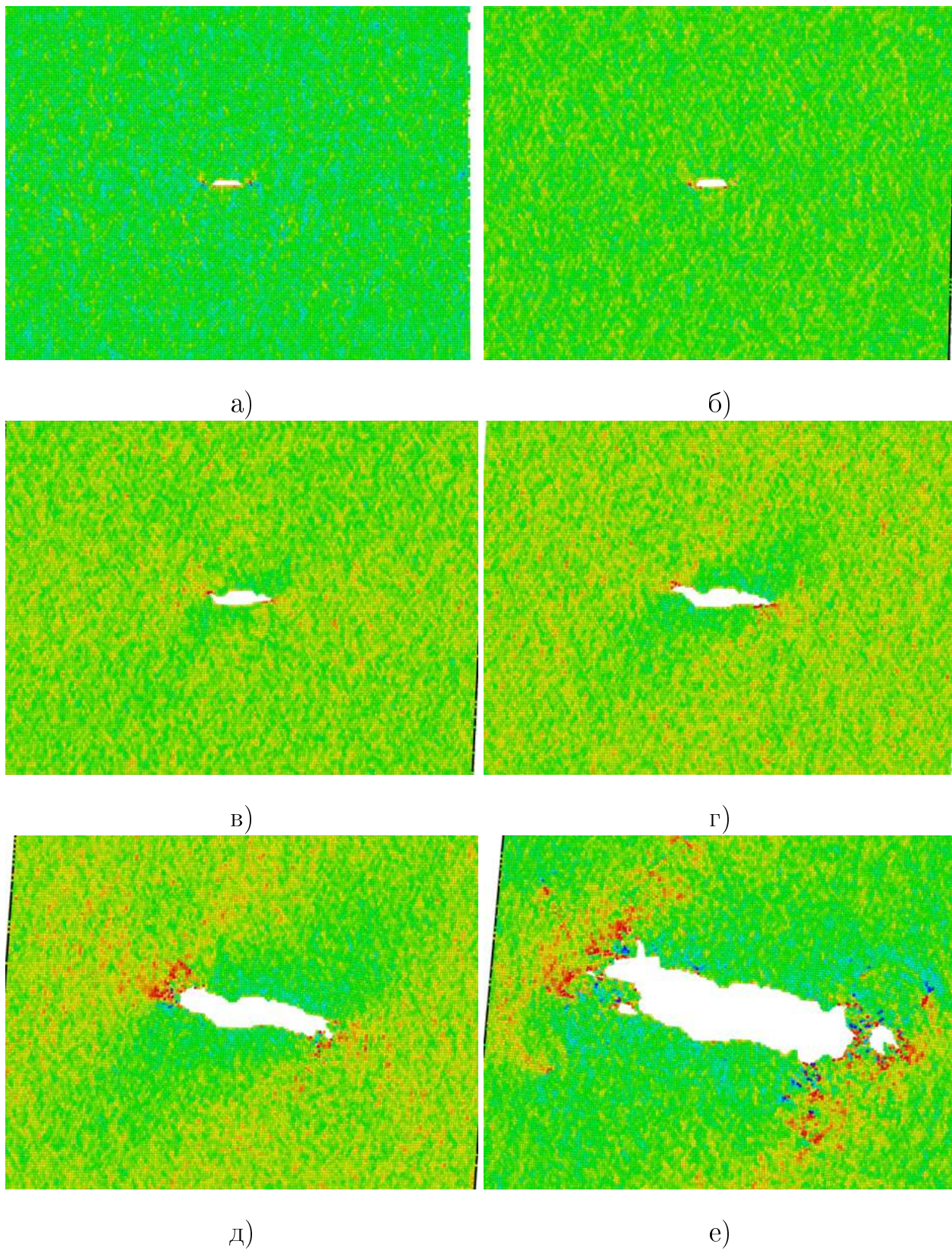
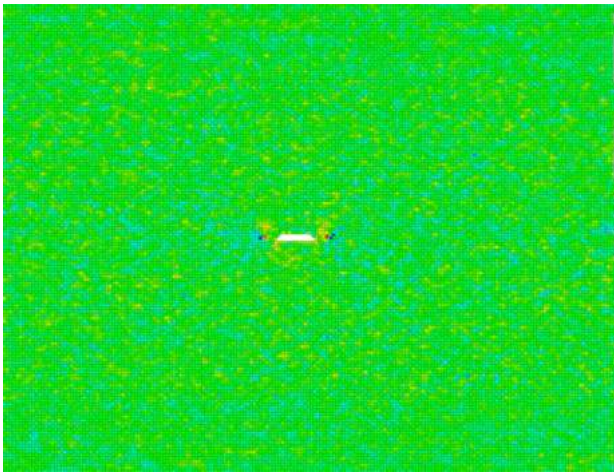
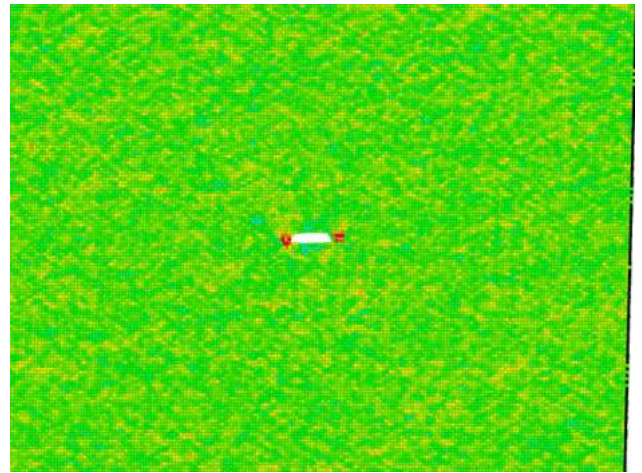


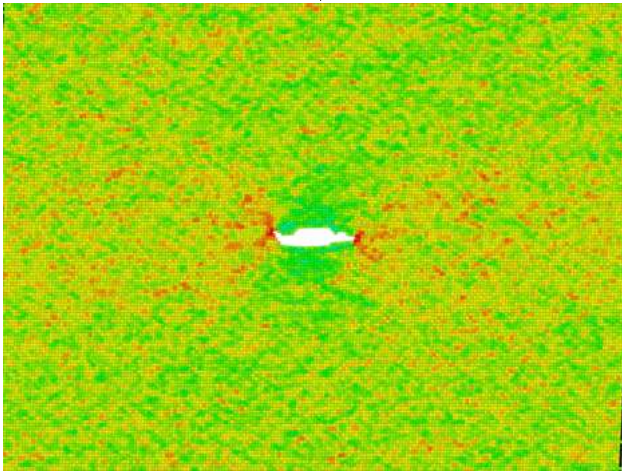
Рис. 3.6: Процесс подрастания дефекта для значения параметра смешанности нагружения $M^e = 0.5$, компонента σ_{11} , время а) 0 пс, б) 5 пс, в) 10 пс, г) 12 пс, д) 15 пс, е) 20 пс



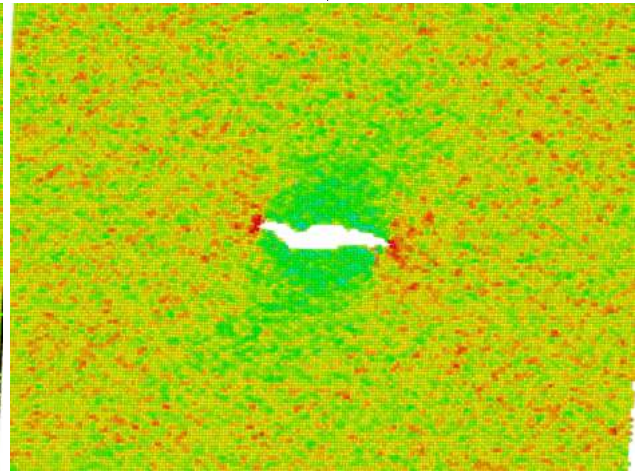
а)



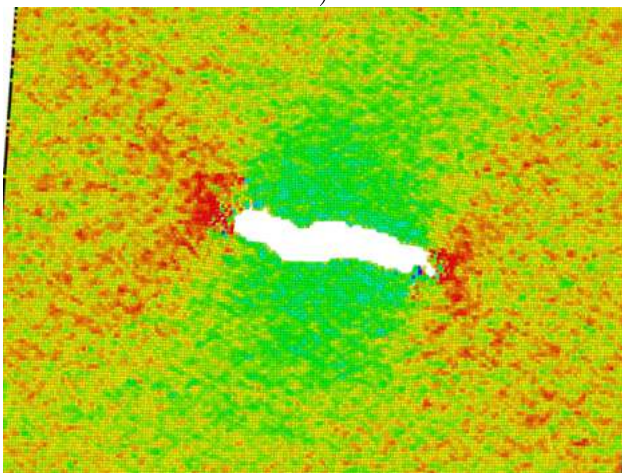
б)



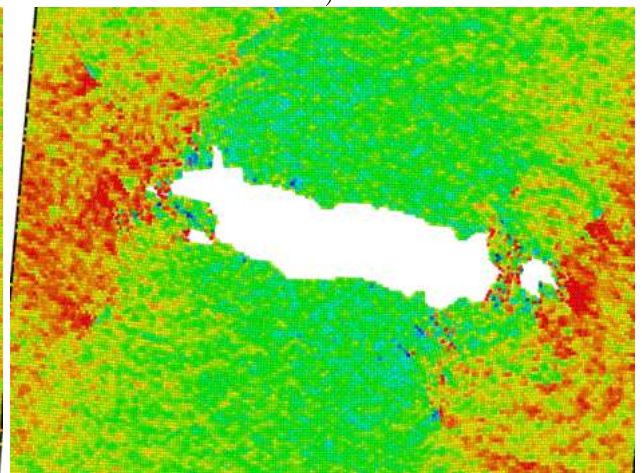
в)



г)



д)



е)

Рис. 3.7: Процесс подрастания дефекта для значения параметра смешанности нагружения $M^e = 0.5$, компонента σ_{22} , время а) 0 пс, б) 5 пс, в) 10 пс, г) 12 пс, д) 15 пс, е) 20 пс

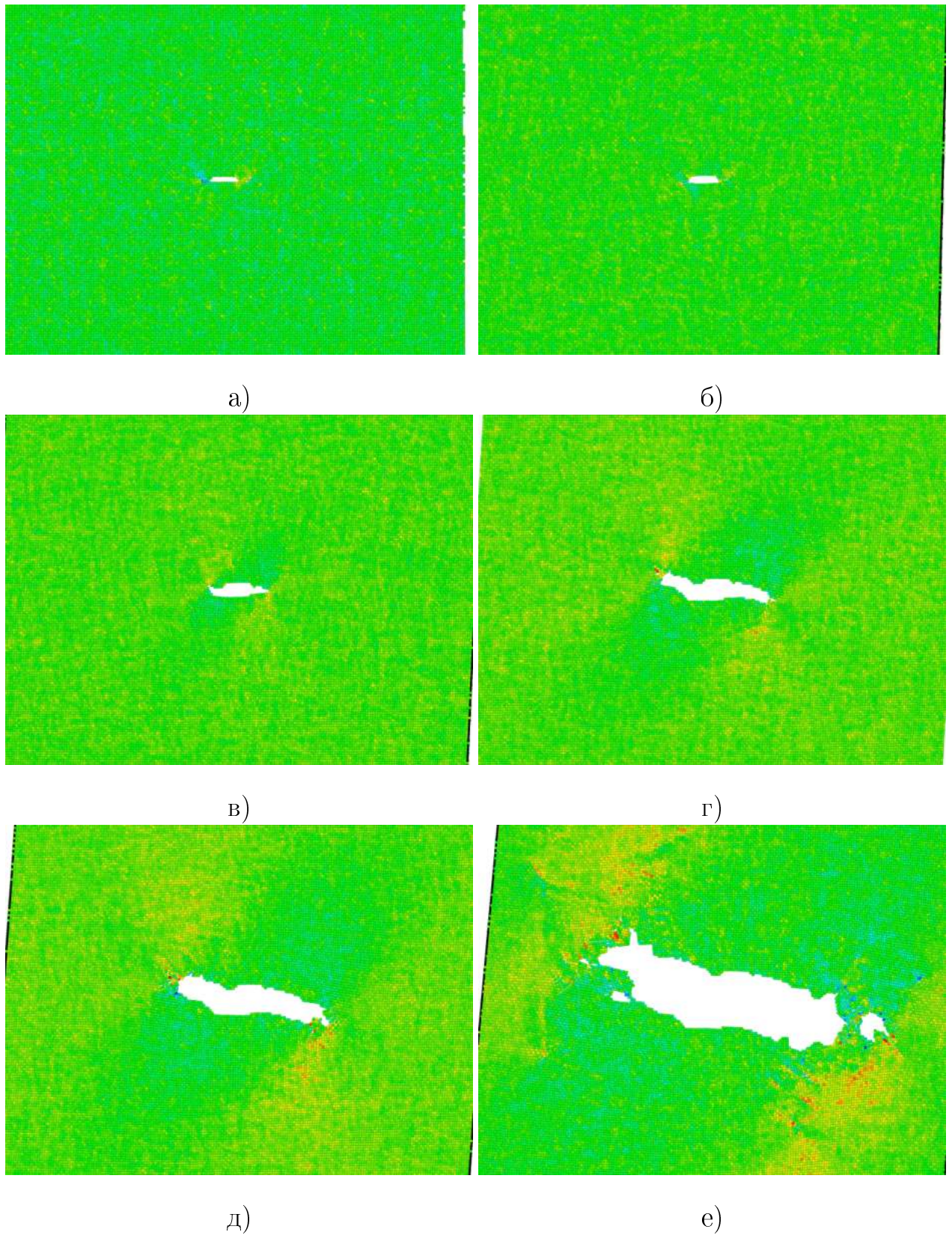
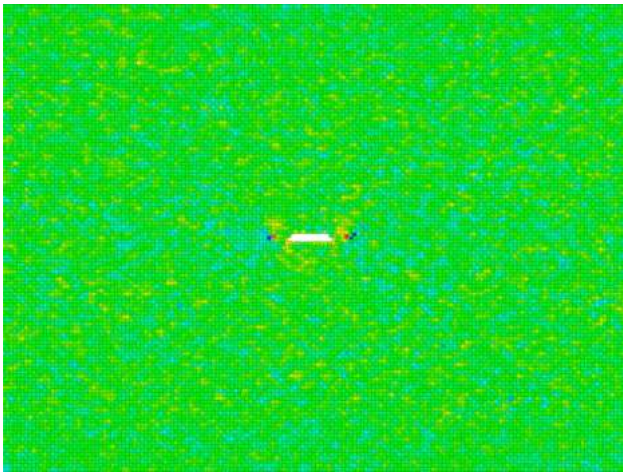
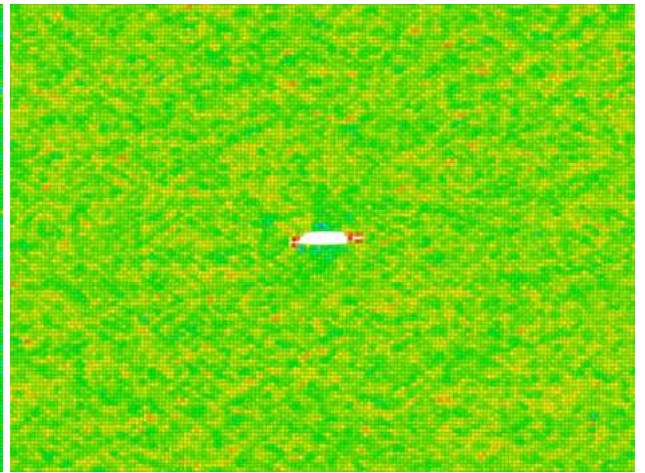


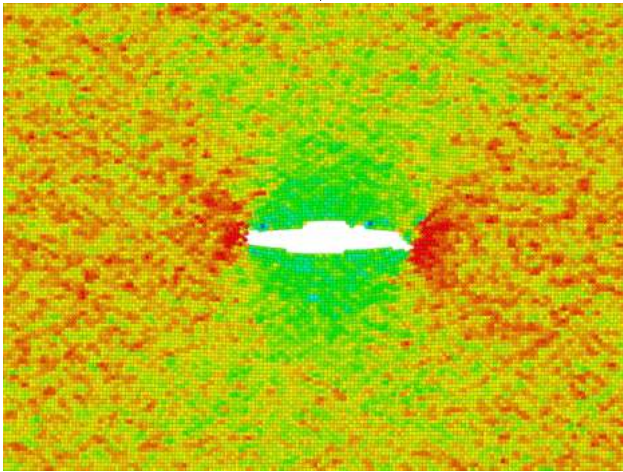
Рис. 3.8: Процесс подрастания дефекта для значения параметра смешанности нагружения $M^e = 0.5$, компонента σ_{12} , время а) 0 пс, б) 5 пс, в) 10 пс, г) 12 пс, д) 15 пс, е) 20 пс



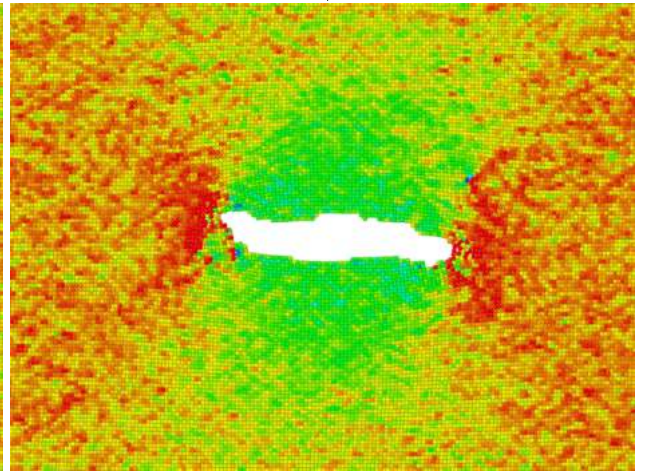
а)



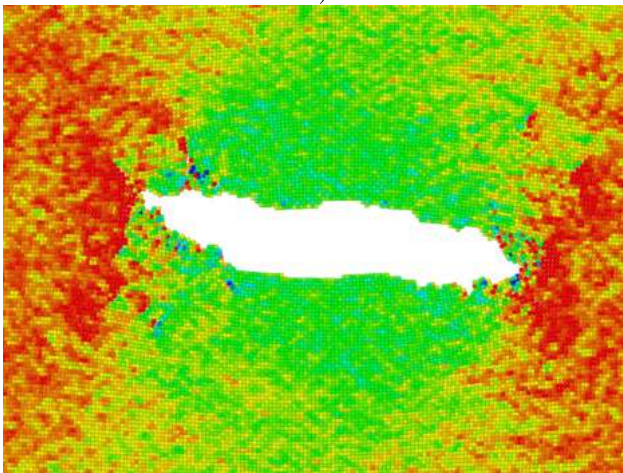
б)



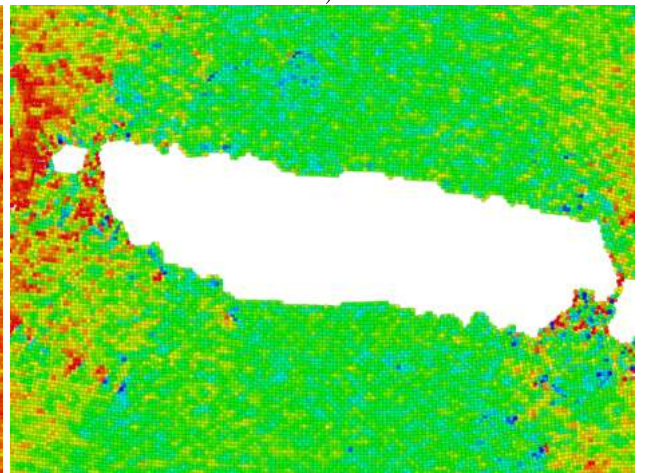
в)



г)



д)



е)

Рис. 3.10: Процесс подрастания дефекта для значения параметра смешанности нагружения $M^e = 0.7$, компонента σ_{22} , время а) 0 пс, б) 5 пс, в) 10 пс, г) 12 пс, д) 15 пс, е) 20 пс

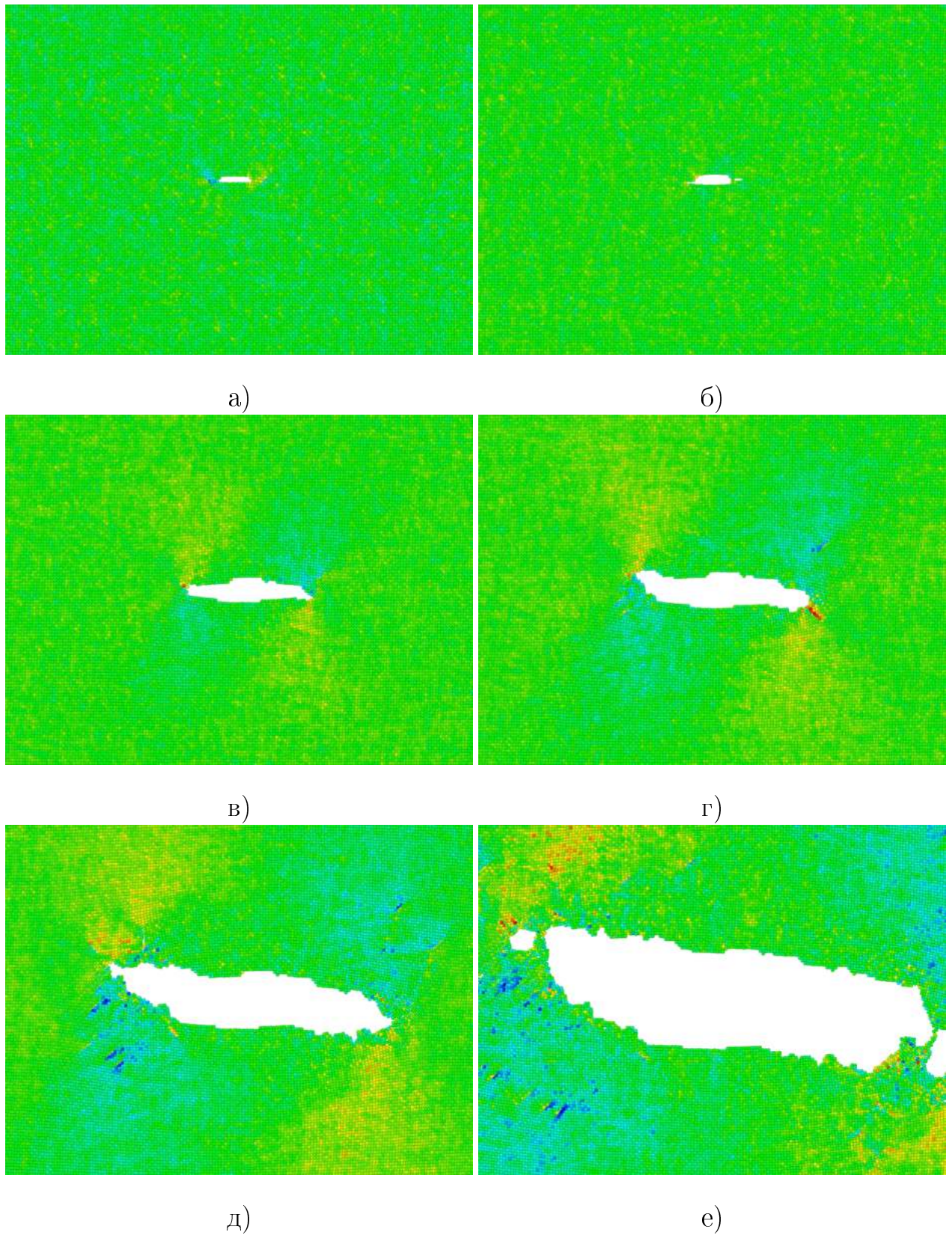


Рис. 3.11: Процесс подрастания дефекта для значения параметра смешанности нагружения $M^e = 0.7$, компонента σ_{12} , время а) 0 пс, б) 5 пс, в) 10 пс, г) 12 пс, д) 15 пс, е) 20 пс

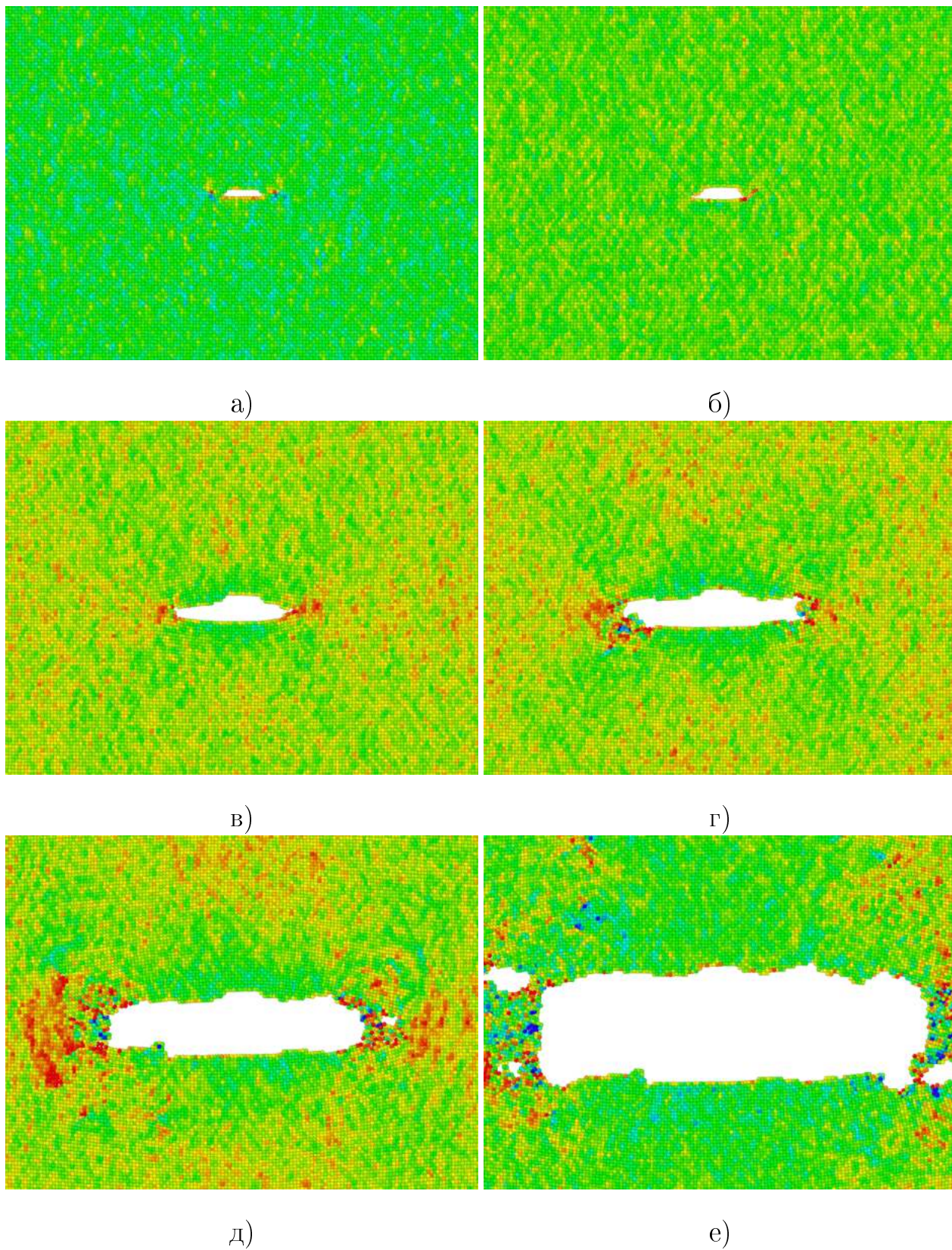
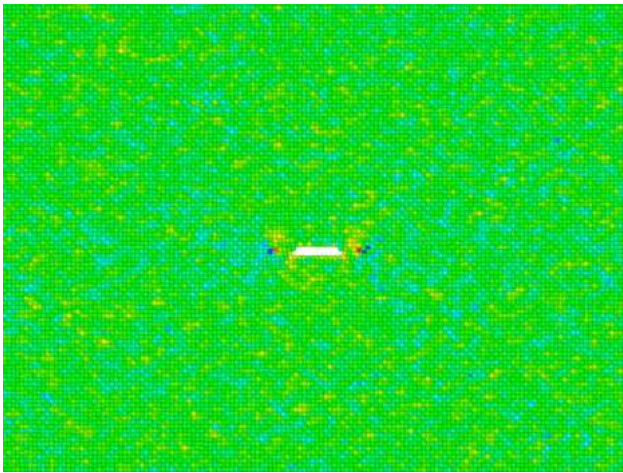
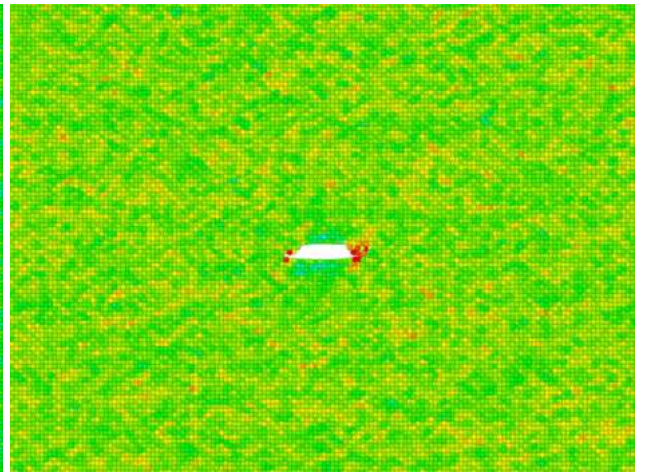


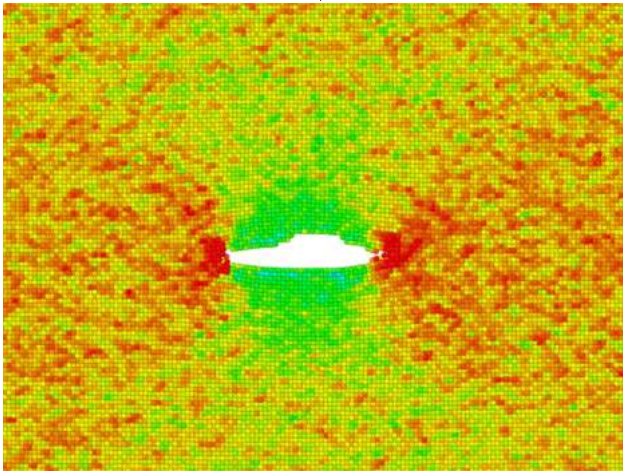
Рис. 3.12: Процесс подрастания дефекта для значения параметра смешанности нагружения $M^e = 1$, компонента σ_{11} , время а) 0 пс, б) 5 пс, в) 10 пс, г) 12 пс, д) 15 пс, е) 20 пс



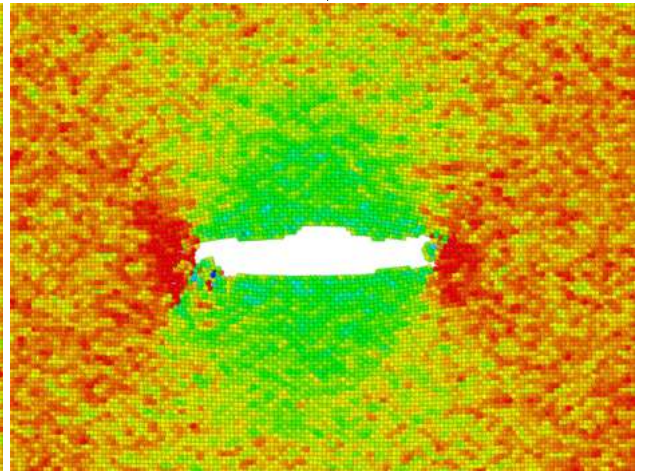
а)



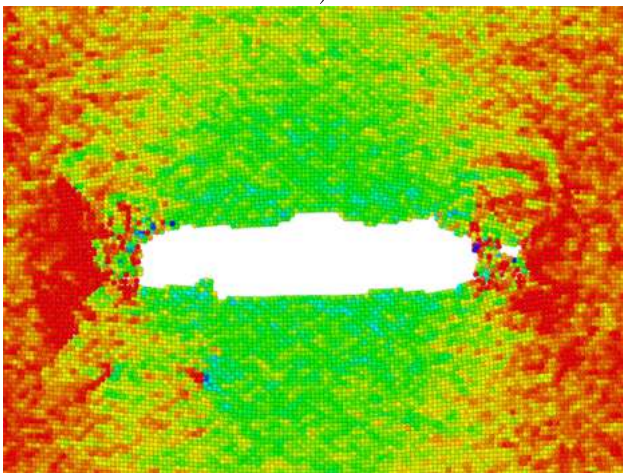
б)



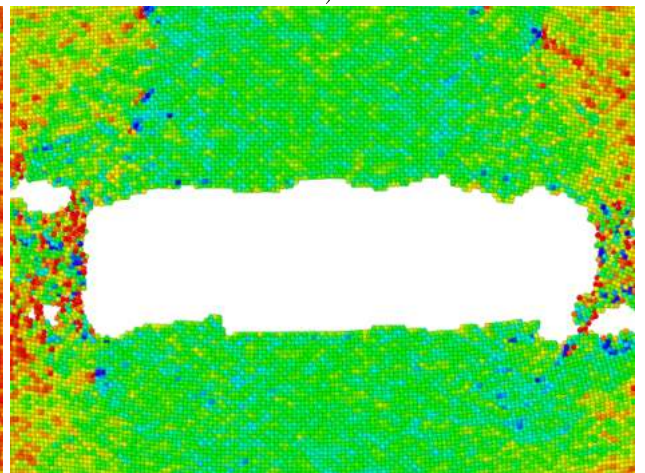
в)



г)



д)



е)

Рис. 3.13: Процесс подрастания дефекта для значения параметра смешанности нагружения $M^e = 1$, компонента σ_{22} , время а) 0 пс, б) 5 пс, в) 10 пс, г) 12 пс, д) 15 пс, е) 20 пс

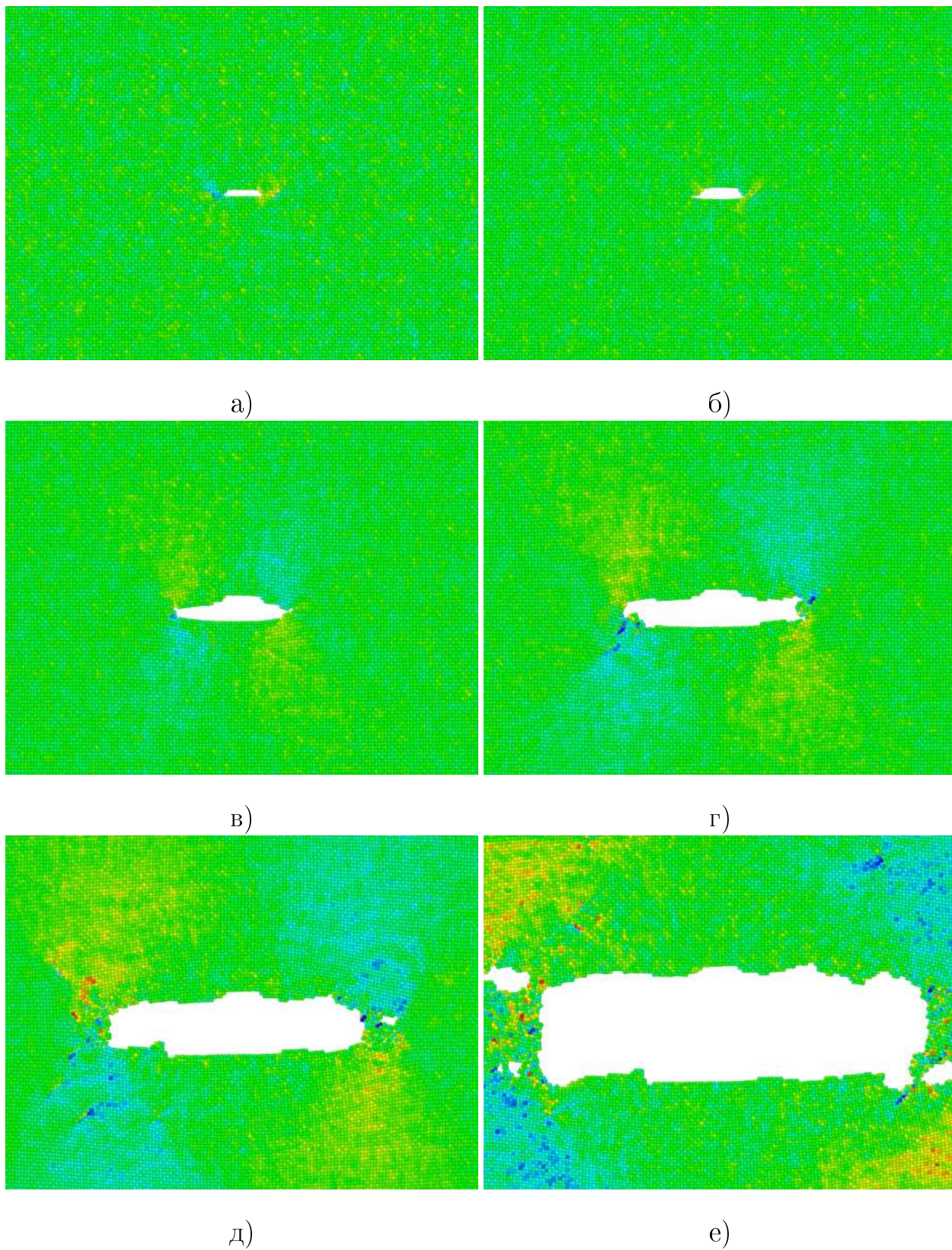


Рис. 3.14: Процесс подрастания дефекта для значения параметра смешанности нагружения $M^e = 1$, компонента σ_{12} , время а) 0 пс, б) 5 пс, в) 10 пс, г) 12 пс, д) 15 пс, е) 20 пс

На рис. 3.15 приведены зависимости напряжения от времени при длине трещины составляющей 5%, 10% и 20% от длины пластины.

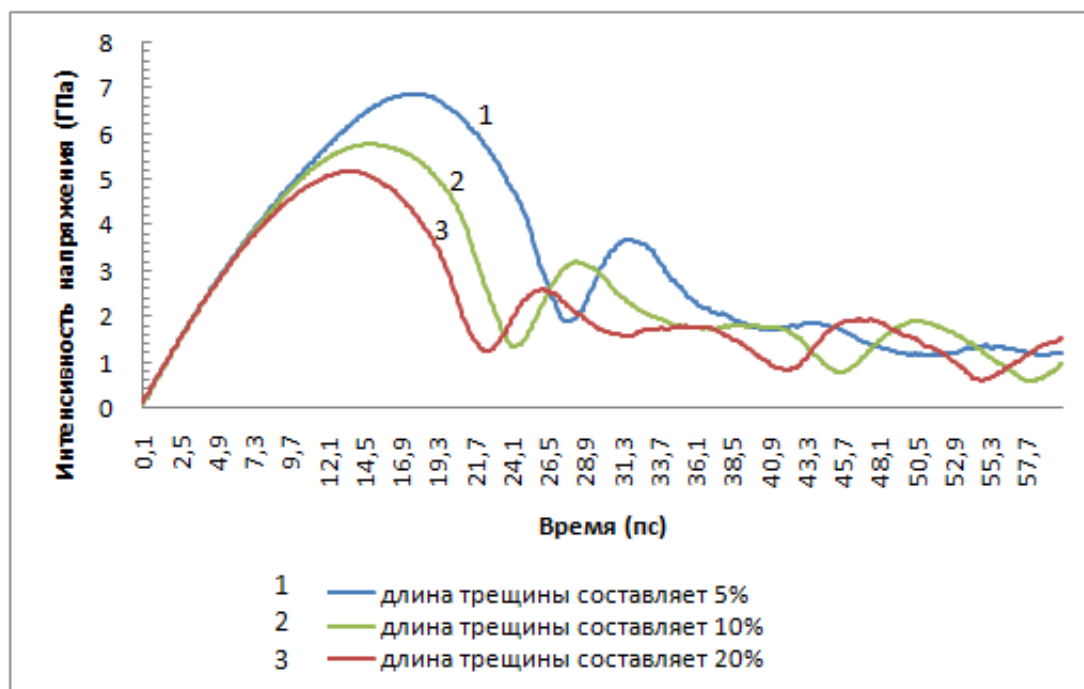


Рис. 3.15: Зависимость интенсивности напряжений от времени для разных длин трещины в FCC-медной монокристаллической пластине

Если увеличить начальные размеры трещины (длину), можно отметить, что уменьшается максимальное напряжение системы. Известно, что прочность хрупких твердых тел уменьшается обратно пропорциональна квадратному корню от размера трещины. Видно, что полученные значения находятся в согласии с этим фактом.

На рис. 3.16 приведены зависимости напряжения от времени при различных значениях температур. Моделирование проводилось при разных температурах. Кроме температуры 300К рассматривалась модель с температурой 500К (температура рекристаллизации меди 453-573К) и 1000К (высокая температура, температура плавления меди 1358К).

Из графика 3.16 можно заметить, что чем выше температура системы, тем позже происходит разрыв пластины и тем большее напряжение возни-

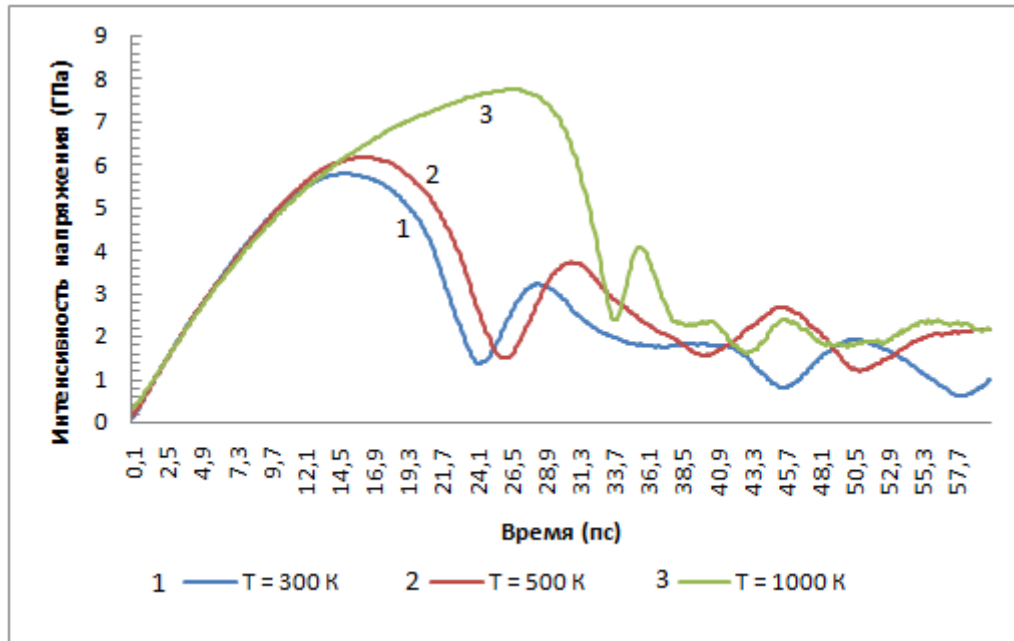


Рис. 3.16: Зависимость интенсивности напряжений от времени в монокристаллической FCC-медной пластине с центральной трещиной при различных значениях температур

кает.

Для различных значений параметров нагружения измерялись углы продвижения трещины. Угол α измерялся между осью ординат и направлением продвижения трещины слева, как показано на рис. 3.17.

В таблице 1 перечислены параметры смешанности нагружения, соответствующие им значения скоростей деформации пластины и полученные из молекулярно-динамического моделирования углы распространения трещины.

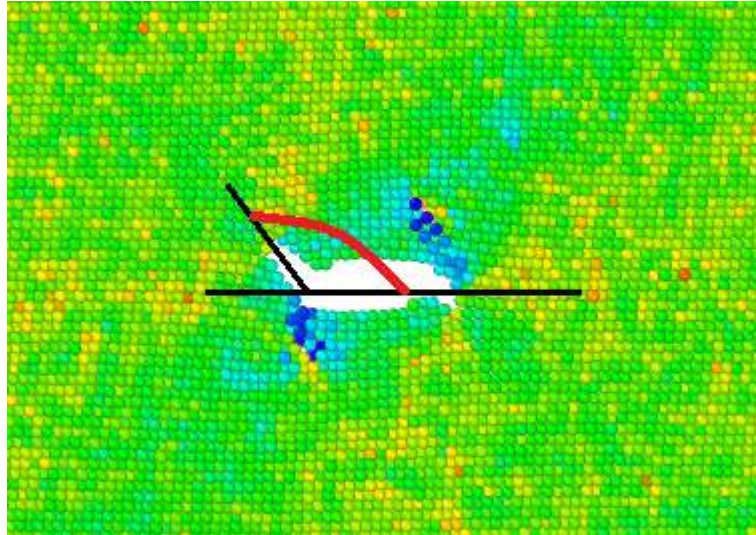


Рис. 3.17: Схема определения угла распространения трещины α

Таблица 1

Углы распространения трещины при различных параметрах M^e

Параметр смешанности нагружения M^e	Скорость деформации ε_{22}	Скорость деформации ε_{12}	Угол распространения трещины α
0.1	0.00027	0.00174	115
0.2	0.00055	0.00169	118
0.3	0.00083	0.0016	122
0.4	0.00111	0.00152	125
0.5	0.00138	0.00138	135
0.6	0.00166	0.00119	145
0.7	0.00194	0.00097	150
0.8	0.00221	0.00069	165
0.9	0.00249	0.00039	170
1	0.00194	0.0	180

3.6. Выводы по главе 3

В ходе исследования проведено атомистическое моделирование монокристаллической FCC-медной пластины с центральной сквозной трещиной под действием комбинированного нагружения с применением метода молекулярной динамики. Проверка достоверности модели и выполненных расчетов была проведена на примере идеального нормального отрыва. В случае действия нагрузки, ортогональной трещине, распространение трещины должно происходить ортогонально направлению действия нагрузки. Модельная трещина показала такое распространение.

В рамках работы проведено исследование влияния размеров модели, длины трещины, температуры, скорости деформации и параметра смешанности нагружения на прочность пластины и рост трещины. Определены углы распространения центральной трещины и проведено сравнение их с результатами, полученными с помощью двух классических критериальных условий разрушения: 1) критерия максимального тангенциального напряжения; 2) критерия минимума плотности энергии упругой деформации. Показано, что углы распространения трещины при различных значениях параметра смешанности нагружения, рассчитанные методом молекулярной динамики, хорошо согласуются с результатами, получаемыми критериями континуальной механики разрушения (таблицы 1–5 приложения 1).

Глава 4. Параллельное молекулярно-динамическое и конечно-элементное моделирование смешанного нагружения пластины с трещиной. Процедура определения масштабных коэффициентов ряда Уильямса для образцов с трещинами на основе молекулярно-динамического моделирования

В главе представлены результаты параллельного конечно-элементного и молекулярно-динамического моделирования комбинированного деформирования пластины с центральной трещиной и пластины с одним боковым надрезом. Приведены результаты моделирования пластины из меди и алюминия с боковым надрезом. В исследовании проводилось сравнение результатов моделирования медной и алюминиевой пластин с центральной трещиной и с боковым разрезом. Приведена процедура определения коэффициентов асимптотического разложения М. Уильямса на основе результатов атомистического моделирования.

4.1. Асимптотические поля напряжений и перемещений в охватывающей вершину трещины области. Разложение Уильямса

Разработка аналитических решений для описания распределений напряжений и перемещений в телах с дефектами – это важная задача механики разрушения. Для достижения этой цели используются различные методы линейной теории упругости, такие как методы теории функций комплексного переменного и метод интегральных преобразований. Одним из наиболее высокоэффективных методов является традиционный и широкоиспользуемый метод разложения по собственным функциям, который был разработан и усовершенствован во многих работах [53, 74, 75, 87, 116, 161–163],

начиная от классических работ М. Уильямса [181, 182], и по-прежнему является одним из наиболее часто используемых подходов для получения аналитических решений в данной области.

Разложение, которое было предложено М. Уильямсом, представляет собой важное асимптотическое представление полей напряжений и перемещений вблизи вершины трещины в традиционной линейной механике разрушения [53, 74, 75, 87]. В работах М. Уильямса впервые получено каноническое асимптотическое представление поля напряжений, формально содержащее бесконечное количество слагаемых. В целой серии работ [98–101, 116, 148, 177] показано, что высшие приближения играют существенную роль, однако, как правило, удерживают исключительно первые два слагаемых, в которые входили коэффициенты интенсивности напряжений и T -напряжения.

В статье [116] приведено исследование асимптотических полей в непосредственной окрестности вершины трещины в линейно упругом анизотропном материале. Специальное внимание уделено первым членам разложения поля напряжений, в частности, выражению для T -напряжения. Авторы представили решение задачи в упругой постановке для бесконечной анизотропной ортотропной пластины, содержащей наклонную центральную трещину, находящейся под действием одноосного или двухосного нагружения с различным расположением трещины и главных осей симметрии упругих свойств. Были получены точные аналитические решения для всех коэффициентов разложения у вершины трещины. В результате исследования было доказано, что T -напряжение является единственным параметром, зависящим от упругих констант анизотропного материала. Кроме того, в результате дана оценка зависимости T -напряжения от свойств материала. Таким образом, очевидно, что члены более высокого порядка, и особенно T -напряжение, играют фундаментальную роль в описании поля напряже-

ния вблизи вершины трещины в анизотропной средах.

Исследование, проведенное в рамках цикла работ [98–101, 116, 148, 177], было посвящено анализу полей напряжений и перемещений вблизи трещин в условиях различных режимов нагружения (нагруженных как в режиме I, так и во II режиме). Одной из специальных задач исследования было получение точных оценок полей вблизи вершины трещины, которые могут быть использованы для вычисления и анализа протяженности нелинейной зоны и зоны процесса разрушения в квазихрупких материалах. Для определения множителей высших членов разложения Уильямса (обобщенных коэффициентов), которые используются для аппроксимации механических полей, был применен регрессионный метод, основанный на результатах численных расчетов. Для анализа использовались двумерные численные модели, а для проведения расчетов была использована вычислительная система ANSYS FE. В работах [98–101, 116, 148, 177] были рассмотрены различные аспекты, связанные с описанием полей напряжений и перемещений с помощью разложения Уильямса. Отдельное внимание было уделено сходимости коэффициентов первых нескольких членов разложения ряда, их абсолютных значений и значимости для точной аппроксимации напряжений. Следовательно, представление поля напряжений с учетом высших приближений – важная задача, решение которой необходимо для правильного и точного описания поля напряжений у вершины трещины в линейно упругом теле. Для нахождения решения этой задачи используются различные теоретические, экспериментальные и численные методы. В настоящей диссертационной работе выполнено построение разложения М. Уильямса и определение коэффициентов разложения с помощью результатов молекулярно-динамического и конечно-элементного моделирования.

Компьютерное имитационное моделирование процессов деформирования и разрушения имеет первостепенное инженерное значение и позволяет

количественно оценить разрушение материала под действием различных нагрузок. Повышенное внимание уделено оценке коэффициентов интенсивности напряжения, которые используются для количественной оценки полей напряжения вблизи вершины трещины в изотропном однородном линейно упругом материале. Их значения находятся с помощью коэффициентов асимптотического разложения М. Уильямса, которые могут быть определены, например, с помощью конечно-элементного моделирования для образцов с различной геометрией.

Для изотропного линейного упругого тела с трещиной под нагружением произвольной формы была определена форма бесконечного степенного разложения. При этом использовалась суперпозиция двух решений, соответствующих нагрузкам по моде I и моде II. В случае центральной трещины в пластине под нагрузками моды I и моды II, напряжения, ассоциированные с вершиной трещины, могут быть описаны универсальным разложением М. Уильямса, имеющим вид

$$\sigma_{ij}(r, \theta) = \sum_{m=1}^2 \sum_{k=-\infty}^{\infty} a_k^m f_{m,ij}^{(k)}(\theta) r^{\frac{k}{2}-1}, \quad (4.1.1)$$

где r, θ – полярная система координат с полюсом в вершине рассматриваемой трещины, a_k^m – коэффициенты, зависящие от геометрии и от типа и величины приложенных нагрузок; $f_{m,ij}^{(k)}(\theta)$ – универсальные угловые функции, зависящие от компонент напряжения и типа нагрузки. Аналитическое представление функциональных зависимостей $f_{m,ij}^{(k)}(\theta)$ приведено в

работе [75] и имеет следующий вид

$$\begin{aligned}
f_{1,11}^{(k)}(\theta) &= k/2 \left[(2 + k/2 + (-1)^k) \cos(k/2 - 1)\theta - (k/2 - 1) \cos(k/2 - 3)\theta \right], \\
f_{1,22}^{(k)}(\theta) &= k/2 \left[(2 - k/2 - (-1)^k) \cos(k/2 - 1)\theta + (k/2 - 1) \cos(k/2 - 3)\theta \right], \\
f_{1,12}^{(k)}(\theta) &= k/2 \left[(k/2 - 1) \sin(k/2 - 3)\theta - (k/2 + (-1)^k) \sin(k/2 - 1)\theta \right], \\
f_{2,11}^{(k)}(\theta) &= -k/2 \left[(2 + k/2 - (-1)^k) \sin(k/2 - 1)\theta - (k/2 - 1) \sin(k/2 - 3)\theta \right], \\
f_{2,22}^{(k)}(\theta) &= -k/2 \left[(2 - k/2 + (-1)^k) \sin(k/2 - 1)\theta + (k/2 - 1) \sin(k/2 - 3)\theta \right], \\
f_{2,12}^{(k)}(\theta) &= k/2 \left[(k/2 - 1) \cos(k/2 - 3)\theta - (k/2 - (-1)^k) \cos(k/2 - 1)\theta \right].
\end{aligned} \tag{4.1}$$

Доминирующие члены разложения (4.1.1) описывают асимптотическое поведение решения вблизи вершины трещины и играют фундаментальную роль в механике разрушения. Вычислив первые коэффициенты асимптотического разложения М.Уильямса, можно найти значения коэффициентов интенсивности напряжения и Т-напряжения в соответствии со следующими формулами

$$K_I = \sqrt{2\pi} a_1^1 f_{1,22}^{(1)}(0), \quad K_{II} = -\sqrt{2\pi} a_1^2 f_{2,12}^{(1)}(0), \quad T = a_2^1 f_{1,11}^{(2)}(0). \tag{4.1.3}$$

Произвольное плоское нагружение образца приводит к появлению поля перемещений, которое может быть выражено рядами для компонент смещений u_1 и u_2 соответственно, как

$$\begin{aligned}
u_1(r, \theta) &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=1}^2 a_k^m f_m^{(k)}(r, \theta) = \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} a_k^1 \frac{r^{\frac{k}{2}}}{2\mu} \left[\left(\kappa + \frac{k}{2} + (-1)^k \right) \cos \frac{k}{2} \theta - \frac{k}{2} \cos \left(\frac{k}{2} - 2 \right) \theta \right] + \\
&+ \sum_{k=0}^{\infty} a_k^2 \frac{r^{\frac{k}{2}}}{2\mu} \left[\left(-\kappa - \frac{k}{2} + (-1)^k \right) \sin \frac{k}{2} \theta + \frac{k}{2} \sin \left(\frac{k}{2} - 2 \right) \theta \right]
\end{aligned} \tag{4.1.4}$$

и

$$\begin{aligned}
 u_2(r, \theta) &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{k=1}^2 a_k^m g_m^{(k)}(r, \theta) = \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k^1 \frac{r^{\frac{k}{2}}}{2\mu} \left[\left(\kappa - \frac{k}{2} - (-1)^k \right) \sin \frac{k}{2} \theta + \frac{k}{2} \sin \left(\frac{k}{2} - 2 \right) \theta \right] + (4.1.5) \\
 &+ \sum_{k=0}^{\infty} a_k^2 \frac{r^{\frac{k}{2}}}{2\mu} \left[\left(\kappa - \frac{k}{2} + (-1)^k \right) \cos \frac{k}{2} \theta + \frac{k}{2} \cos \left(\frac{k}{2} - 2 \right) \theta \right]
 \end{aligned}$$

где приняты обозначения μ – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, и a_k^m – коэффициенты разложения полей напряжений и перемещений в ряд, подлежащие определению. Константа Колосова κ равна $3-4\nu$ для плоского деформированного состояния или $3-4\nu^*$, где $\nu^* = \nu/(1+\nu)$, для плоского напряженного состояния.

4.2. Алгоритм извлечения коэффициентов разложения М. Уильямса из результатов атомистического и конечно-элементного моделирования

В настоящей части работы будет описан используемый для извлечения коэффициентов разложения М. Уильямса алгоритм. Алгоритм изначально опирается на схему переопределенного метода, развитого в [125], где представлен новый метод оценки параметров разрушения для различных конфигураций трещины. Метод изначально был ориентирован на цифровой метод фотоупругости и конечно-элементное моделирование. С помощью известных матричных преобразований на основе экспериментальных данных и данных численного моделирования были определены коэффициенты асимптотического разложения М. Уильямса. Затем в работе [125] применяется формула (4.1.1). Используя результаты натуральных экспериментов или численного моделирования, можно для выбранных точек (узлов сетки) получить значения компонент тензора напряжений. Следовательно, известны

значения в левой части уравнения (4.1.1). Так как известны координаты, отвечающие выбранным точкам, можно вычислить угловые функции и подставить в уравнение значения r . Пусть будет выбрано M точек и необходимо вычислить N приближений ($M \geq N$). Здесь под приближением N понимается вычисление $2N$ коэффициентов разложения М. Уильямса. То есть, если $N = 1$, то вычисляются коэффициенты a_1^1, a_2^1 , если $N = 2$, то вычисляются коэффициенты $a_1^1, a_2^1, a_1^2, a_2^2$ и т.д. Значения компонент тензора напряжения для каждой точки можно представить в виде вектора-столбца J размерности $3M \times 1$.

$$J = \begin{pmatrix} \sigma_{11}^1 \\ \sigma_{11}^2 \\ \dots \\ \sigma_{11}^M \\ \sigma_{12}^1 \\ \sigma_{12}^2 \\ \dots \\ \sigma_{12}^M \\ \sigma_{22}^1 \\ \sigma_{22}^2 \\ \dots \\ \sigma_{22}^M \end{pmatrix}. \quad (4.2.1)$$

Для вычисления обобщенных коэффициентов выбраны три компоненты тензора напряжения – это $\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{22}$, которые пересчитываются в соответствии с новой системой координат, повернутой относительно горизонтальной оси на угол наклона трещины и с центром в вершине разреза.

Составим прямоугольную матрицу A из угловых зависимостей $f_{m,ij}^{(k)}(\theta)$ и радиальных функций $r^{\frac{k}{2}-1}$. Размерность полученной матрицы будет равна

$3M \times (K + L - 1)$, где K, L – количество удерживаемых слагаемых ряда в решении, отвечающих идеальному нормальному отрыву и идеальному поперечному сдвигу соответственно и $K + L = 2N$.

$$\begin{pmatrix} r_1^{-1/2} f_{1,11}^{(1)}(\theta_1) & f_{1,11}^{(2)}(\theta_1) & r_1^{1/2} f_{1,11}^{(3)}(\theta_1) & \dots & r_1^{K-1/2} f_{1,11}^{(K)}(\theta_1) & r_1^{-1/2} f_{2,11}^{(2)}(\theta_1) & r_1^{1/2} f_{2,11}^{(3)}(\theta_1) & \dots & r_1^{L-1/2} f_{2,11}^{(L)}(\theta_1) \\ r_2^{-1/2} f_{1,11}^{(1)}(\theta_2) & f_{1,11}^{(2)}(\theta_2) & r_2^{1/2} f_{1,11}^{(3)}(\theta_2) & \dots & r_2^{K-1/2} f_{1,11}^{(K)}(\theta_2) & r_2^{-1/2} f_{2,11}^{(2)}(\theta_2) & r_2^{1/2} f_{2,11}^{(3)}(\theta_2) & \dots & r_2^{L-1/2} f_{2,11}^{(L)}(\theta_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_M^{-1/2} f_{1,11}^{(1)}(\theta_M) & f_{1,11}^{(2)}(\theta_M) & r_M^{1/2} f_{1,11}^{(3)}(\theta_M) & \dots & r_M^{K-1/2} f_{1,11}^{(K)}(\theta_M) & r_M^{-1/2} f_{2,11}^{(2)}(\theta_M) & r_M^{1/2} f_{2,11}^{(3)}(\theta_M) & \dots & r_M^{L-1/2} f_{2,11}^{(L)}(\theta_M) \\ r_1^{-1/2} f_{1,12}^{(1)}(\theta_1) & f_{1,12}^{(2)}(\theta_1) & r_1^{1/2} f_{1,12}^{(3)}(\theta_1) & \dots & r_1^{K-1/2} f_{1,12}^{(K)}(\theta_1) & r_1^{-1/2} f_{2,12}^{(2)}(\theta_1) & r_1^{1/2} f_{2,12}^{(3)}(\theta_1) & \dots & r_1^{L-1/2} f_{2,12}^{(L)}(\theta_1) \\ r_2^{-1/2} f_{1,12}^{(1)}(\theta_2) & f_{1,12}^{(2)}(\theta_2) & r_2^{1/2} f_{1,12}^{(3)}(\theta_2) & \dots & r_2^{K-1/2} f_{1,12}^{(K)}(\theta_2) & r_2^{-1/2} f_{2,12}^{(2)}(\theta_2) & r_2^{1/2} f_{2,12}^{(3)}(\theta_2) & \dots & r_2^{L-1/2} f_{2,12}^{(L)}(\theta_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_M^{-1/2} f_{1,12}^{(1)}(\theta_M) & f_{1,12}^{(2)}(\theta_M) & r_M^{1/2} f_{1,12}^{(3)}(\theta_M) & \dots & r_M^{K-1/2} f_{1,12}^{(K)}(\theta_M) & r_M^{-1/2} f_{2,12}^{(2)}(\theta_M) & r_M^{1/2} f_{2,12}^{(3)}(\theta_M) & \dots & r_M^{L-1/2} f_{2,12}^{(L)}(\theta_M) \\ r_1^{-1/2} f_{1,22}^{(1)}(\theta_1) & f_{1,22}^{(2)}(\theta_1) & r_1^{1/2} f_{1,22}^{(3)}(\theta_1) & \dots & r_1^{K-1/2} f_{1,22}^{(K)}(\theta_1) & r_1^{-1/2} f_{2,22}^{(2)}(\theta_1) & r_1^{1/2} f_{2,22}^{(3)}(\theta_1) & \dots & r_1^{L-1/2} f_{2,22}^{(L)}(\theta_1) \\ r_2^{-1/2} f_{1,22}^{(1)}(\theta_2) & f_{1,22}^{(2)}(\theta_2) & r_2^{1/2} f_{1,22}^{(3)}(\theta_2) & \dots & r_2^{K-1/2} f_{1,22}^{(K)}(\theta_2) & r_2^{-1/2} f_{2,22}^{(2)}(\theta_2) & r_2^{1/2} f_{2,22}^{(3)}(\theta_2) & \dots & r_2^{L-1/2} f_{2,22}^{(L)}(\theta_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_M^{-1/2} f_{1,22}^{(1)}(\theta_M) & f_{1,22}^{(2)}(\theta_M) & r_M^{1/2} f_{1,22}^{(3)}(\theta_M) & \dots & r_M^{K-1/2} f_{1,22}^{(K)}(\theta_M) & r_M^{-1/2} f_{2,22}^{(2)}(\theta_M) & r_M^{1/2} f_{2,22}^{(3)}(\theta_M) & \dots & r_M^{L-1/2} f_{2,22}^{(L)}(\theta_M) \end{pmatrix}.$$

Искомые значения параметров моды I и моды II $a_1^1, a_1^2, a_2^1, \dots, a_N^1, a_N^2$ представим в виде вектора X размером $(K + L - 1) \times 1$. Для избежания появления столбца с нулевыми значениями в матрице, при ее построении пропускаем столбец при $f_{2,ij}^{(2)}(\theta)$. При этом значение коэффициента a_2^2 полагается равным нулю.

$$A = \begin{pmatrix} a_1^1 \\ a_2^1 \\ \dots \\ a_K^1 \\ a_1^2 \\ a_3^2 \\ \dots \\ a_L^2 \end{pmatrix}. \quad (4.2.2)$$

В итоге уравнение (4.1.1) представим в матричном виде

$$J = AX. \quad (4.2.3)$$

Значения обобщенных коэффициентов оцениваются путем минимизации целевой функции $F(X)$

$$F(X) = (1/2)(J - AX)^T(J - AX). \quad (4.2.4)$$

Целевая функция (4.2.4) представляет собой квадратичную форму относительно обобщенных коэффициентов интенсивности напряжений. Стоит отметить, что в этом случае решение в замкнутой форме существует для параметров X и имеет вид

$$X = (A^T A)^{-1} A^T J. \quad (4.2.5)$$

Вектор-столбец X будет содержать искомые значения коэффициентов a_k^m . Для получения коэффициентов a_k^m разложения Уильямса из результатов конечно-элементного или молекулярно-динамического моделирования выбирается набор точек, принадлежащих концентрическим окружностям или кольцевым областям. Затем используется переопределенный метод (ПМ), основанный на полях напряжений выбранных точек. В работах [130,139] показано, что ПМ является точным и эффективным средством расчета параметров ЛМУР по экспериментальным и расчетным данным.

Задача об идеальном нормальном отрыве и об идеальном поперечном сдвиге горизонтальной трещины эквивалентна задаче о растяжении наклонной трещины [2]. Для задачи растяжения бесконечной пластины с центральной трещиной, например, в работе [75] аналитически определены коэффициенты разложения М. Уильямса.

При приложении к пластине растягивающей нагрузки обобщенные ко-

эффиценты вычисляются следующим образом

$$\begin{aligned} a_{2n+1}^1 &= \frac{(-1)^{n+1}(2n)!}{2^{3n+\frac{1}{2}}(n!)^2(2n-1)} \frac{\sigma_{22}^\infty}{a^{n-\frac{1}{2}}}, \quad n \geq 0, \\ a_2^1 &= \frac{\sigma_{22}^\infty(\gamma-1)}{4}, \\ a_{2n}^1 &= 0. \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

При действии сдвиговой нагрузки, обобщенные коэффициенты вычисляются как

$$\begin{aligned} a_{2n+1}^2 &= \frac{(-1)^n(2n)!}{2^{3n+\frac{1}{2}}(n!)^2(2n-1)} \frac{\sigma_{12}^\infty}{a^{n-\frac{1}{2}}}, \quad n \geq 0, \\ a_{2n}^2 &= 0, \end{aligned} \quad \text{остальные коэффициенты.} \quad (4.2.7)$$

В итоге, полученное разложение М. Уильямса принимает следующий вид

$$\sigma_{ij}(r, \theta) = \sum_{m=1}^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_{2n+1}^m f_{m,ij}^{(2n+1)}(\theta) r^{n-\frac{1}{2}}. \quad (4.2.8)$$

Необходимо преобразовать приложенную к пластине растягивающую нагрузку в соответствии с новой системой координат. Таким образом, растягивающая нагрузка в новой системе координат примет вид $\sigma_{22} = P \cos^2 \alpha$, а сдвиговая нагрузка – $\sigma_{12} = \frac{P}{2} \sin(2\alpha)$. Более того, коэффициент γ в формуле (4.2.6) описывает нагрузку, действующую параллельно трещине пластины при растяжении, то есть $\sigma_{11} = \gamma \sigma_{22}$. Коэффициент γ будет вычисляться по следующей формуле:

$$\gamma = \frac{\sin^2 \alpha}{\cos^2 \alpha}.$$

В данном случае компонента a_2^1 вычисляется в связи с переходом к новой системе координат следующим образом:

$$a_2^1 = P \frac{\sin^2 \alpha - \cos^2 \alpha}{4}.$$

Таким образом, использование аналитического решения задачи о трещине в бесконечной линейно упругой однородной пластине позволяет верифицировать и обосновать результаты молекулярно-динамического или

конечно-элементного моделирования. Этот подход был использован для тестирования процедуры извлечения масштабных множителей a_k^m разложения М. Уильямса полей напряжений, деформаций и перемещений. После успешного тестирования алгоритма была создана программа, которая позволяет вычислять амплитудные множители асимптотического разложения в ряд М. Уильямса поля напряжений вблизи вершины центральной трещины и бокового надреза в пластине.

4.3. Молекулярно-динамическое моделирование нагружения монокристаллической медной пластины с центральной трещиной

В вычислительных экспериментах медная пластина с центральной трещиной была выбрана для сравнения атомистического поля напряжений с классическим разложением в ряд Уильямса. Схематическое изображение модели металлической FCC пластины с центральной трещиной представлено на рис. 4.1.

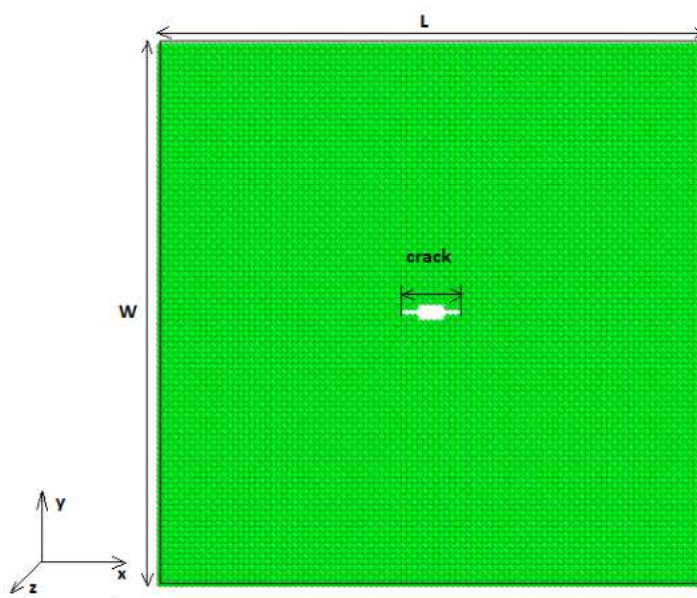


Рис. 4.1: Схема геометрической конфигурации модели FCC металлической пластины с центральной трещиной

Моделирование взаимодействия атомов меди было реализовано с использованием потенциала внедренного атома (EAM). Монокристаллическая медь имеет гранецентрированную кубическую структуру (ГЦК, FCC) с постоянной решетки, равной 3.615 \AA . Общее число атомов в системе в численных экспериментах варьировалось от 300 тыс. до 800 тыс. Большинство экспериментов проводится для пластины с 720 тысячами атомов. Кристаллическая ориентация вдоль осей x_1 , x_2 и x_3 была $[100]$, $[010]$, $[001]$ соответственно. Трещина предварительно устанавливается в центре модели путем удаления части рядов атомов из кристаллической структуры. Всего удалено 180 атомов в центре. Типичная пластина имеет размеры $723 \times 723 \times 14.46 \text{ \AA}$ в x_1 , x_2 и x_3 - направлениях соответственно. Длина трещины составляет 72.3 \AA , а толщина пластины равна 7.23 \AA . Таким образом, в расчетах задействовано 719820. Ансамбли NVE и NVT используются для задания начальных условий в атомных структурах. Напомним, что NVE – это классический микроканонический ансамбль системы с фиксированным числом атомов N , объемом V и полной энергией E , тогда как NVT – это классический микроканонический ансамбль с фиксированным числом атомов N , объемом V и температурой T . Ансамбль NVE в течение 200 фс моделировался для релаксации системы; временной шаг составлял 1 фс. Затем в течение 30 пс выполняется NVT моделирование молекулярной динамики с помощью интегрирования уравнений движения по времени в рамках модели скорости Верле с параметром затухания 0.1 пс и шагом по времени 1 фс. Деформация пластины с трещиной осуществляется путем ее растяжения и сдвига для моделирования смешанного режима нагружения. Были наложены периодические граничные условия во всех трех направлениях. Чтобы четко наблюдать упругий режим в атомном масштабе, температура в моделях была выбрана равной 10К. Термостат Нойза-Гувера используется для создания определенного температурного диапазона. Этот

процесс происходит путем управления потоком тепловой энергии в моделируемую атомную структуру или из нее.

Поскольку при моделировании методом МД скорость деформации задается в качестве граничных условий, удобнее использовать определение (4.3.1) для параметра смешанности нагружения

$$M^e = \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \left| \frac{\dot{\epsilon}_{22}}{\dot{\epsilon}_{12}} \right|, \quad (4.3.1)$$

где $\dot{\epsilon}_{22}$ и $\dot{\epsilon}_{12}$ приложенные скорости деформации. В описанном ниже анализе параметр смешанности определяется согласно формуле (4.3.1) вместо классического определения (1.9.3). Согласно (4.3.1) при вычислении параметра смешанности для ЛМУР необходим коэффициент Пуассона. Механические свойства монокристаллической меди были определены с помощью метода МД ранее. Было найдено, что коэффициент Пуассона равен 0.35.

Скорость деформации при нагрузке в режиме I составляет $2 \times 10^{-3} 1/c$. Скорости деформации для смешанного режима нагружения задаются уравнением (4.3.1) для заданного значения параметра смешанности. Таким образом, скорости деформации $\dot{\epsilon}_{12}$ варьировались от $8 \times 10^{-4} 1/c$ до $2 \times 10^{-3} 1/c$. Результаты моделирования показаны на рис. 4.2 - 4.19, где представлены морфология деформации и компоненты напряжений для различных показателей параметра смешанности нагружения. На рис. 4.2 - 4.19 показана концентрация напряжений вблизи вершины трещины на разных временных этапах. Согласно этим рисункам, с увеличением временного шага концентрация напряжений вокруг трещины увеличивается, и число атомов, несущих напряжение высокого уровня, также увеличивается, варьируясь от низкого (синий) до высокого (красный). На рисунках 4.2 - 4.4 показано распространение трещины и процесс разрушения медной пластины с центральной трещиной в условиях нагружения моды I в момент времени 5 пс, 10 пс, 15 пс, 20 пс, 25 пс, 30 пс. Рисунки 4.5 - 4.7 иллюстрируют пла-

стину из меди с центральной трещиной при нагружении соответствующем величине параметра смешанности $M^e = 0.75$ при 5 пс, 10 пс, 15 пс, 20 пс, 25 пс, 30 пс. На рисунках 4.8 - 4.10 показаны вириальные напряжения для параметра смешанности $M^e = 0.66$ при 5 пс, 10 пс, 15 пс, 20 пс, 25 пс, 30 пс.

Процесс разрушения и компоненты тензора напряжений для параметра смешанности $M^e = 0.5$ при 5 пс, 10 пс, 15 пс, 20 пс, 25 пс, 30 пс. показаны на рис. 4.11 - 4.13. Идентификационные карты, полученные с помощью МД-моделирования для морфологии деформации и компонентов тензора напряжений для параметра смешанности $M^e = 0.33$ при 5 пс, 10 пс, 15 пс, 20 пс, 25 пс, 30 пс. показан на рис. 4.14 - 4.16.

Моментальные картины продвижения трещины для значения параметра смешанности $M^e = 0.25$ при 5 пс, 10 пс, 15 пс, 20 пс, 25 пс, 30 пс. показаны на рис. 4.17 - 4.19. Можно заметить, что вершина трещины обладает высоким значением концентрации напряжений, а ее смежные контуры напряжений в моменты времени 5 пс, 10 пс и 15 пс аналогичны контурам из механики сплошности при соблюдении упругого режима. Затем используется ПМ, основанный на атомистических полях напряжений выбранных точек.

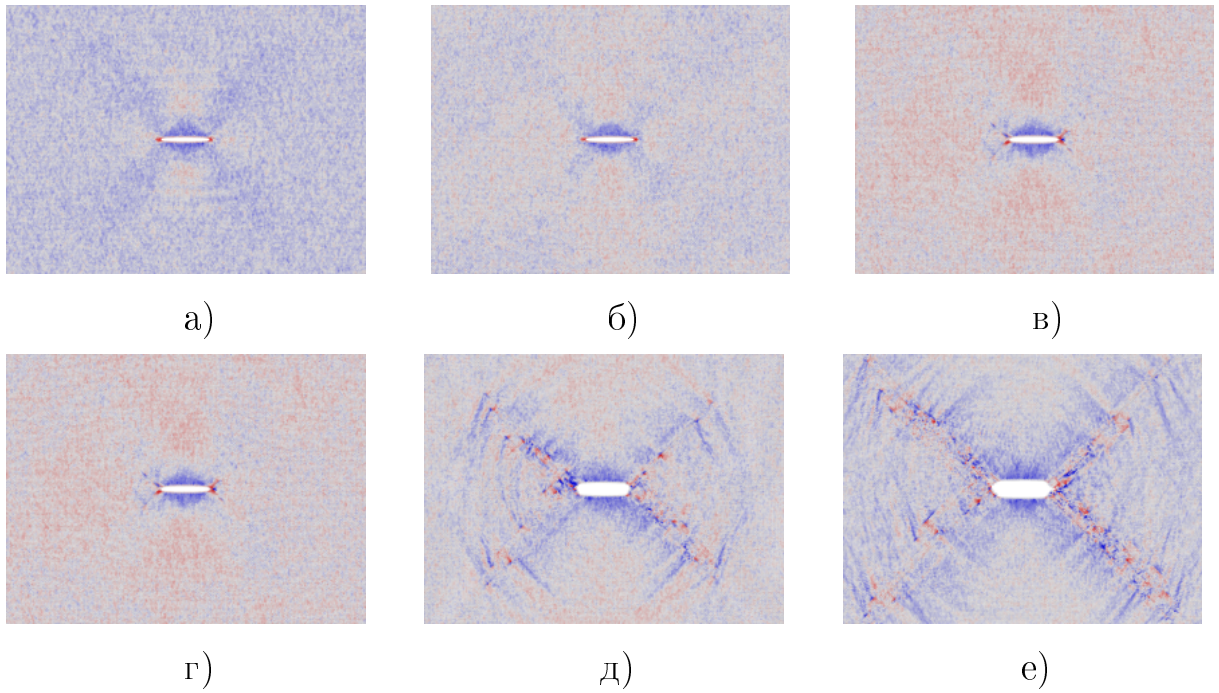


Рис. 4.2: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 1$, компонента σ_{11} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

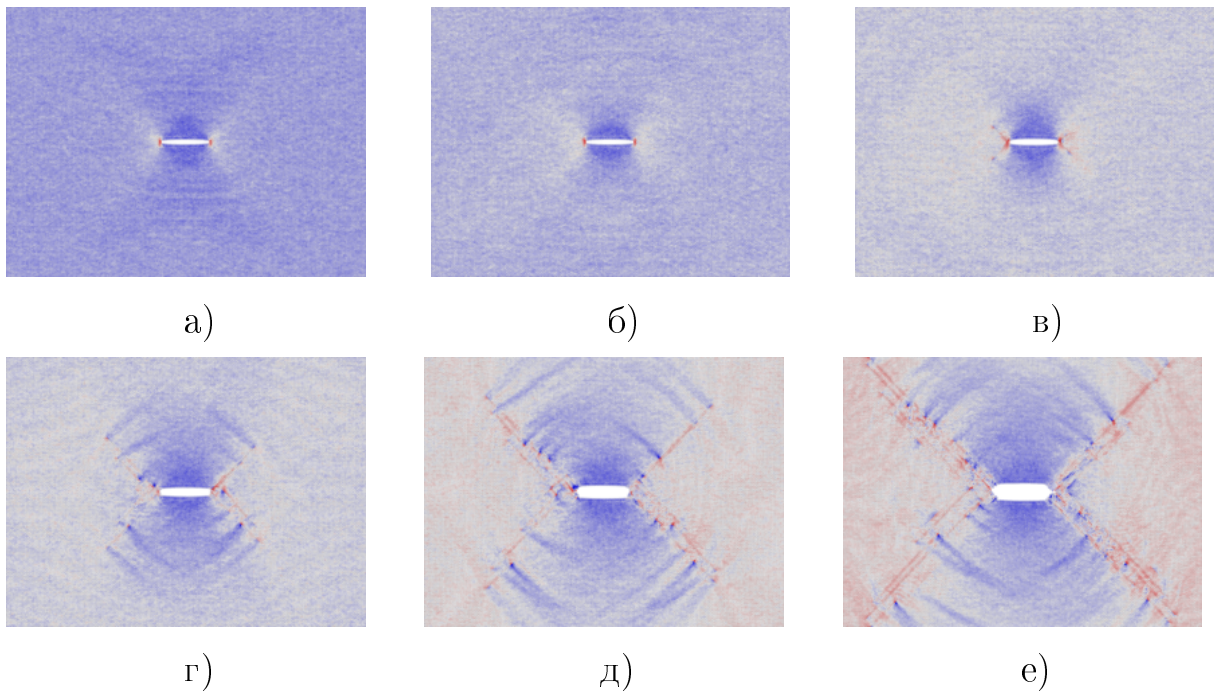


Рис. 4.3: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 1$, компонента σ_{22} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

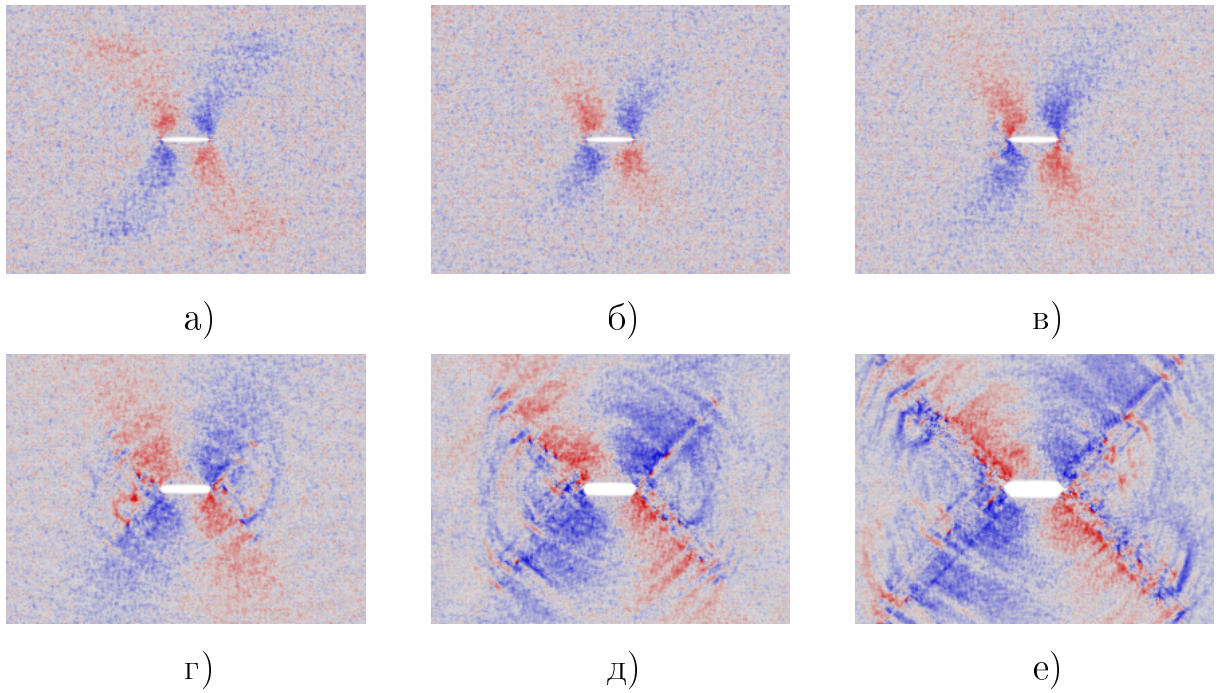


Рис. 4.4: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 1$, компонента σ_{12} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

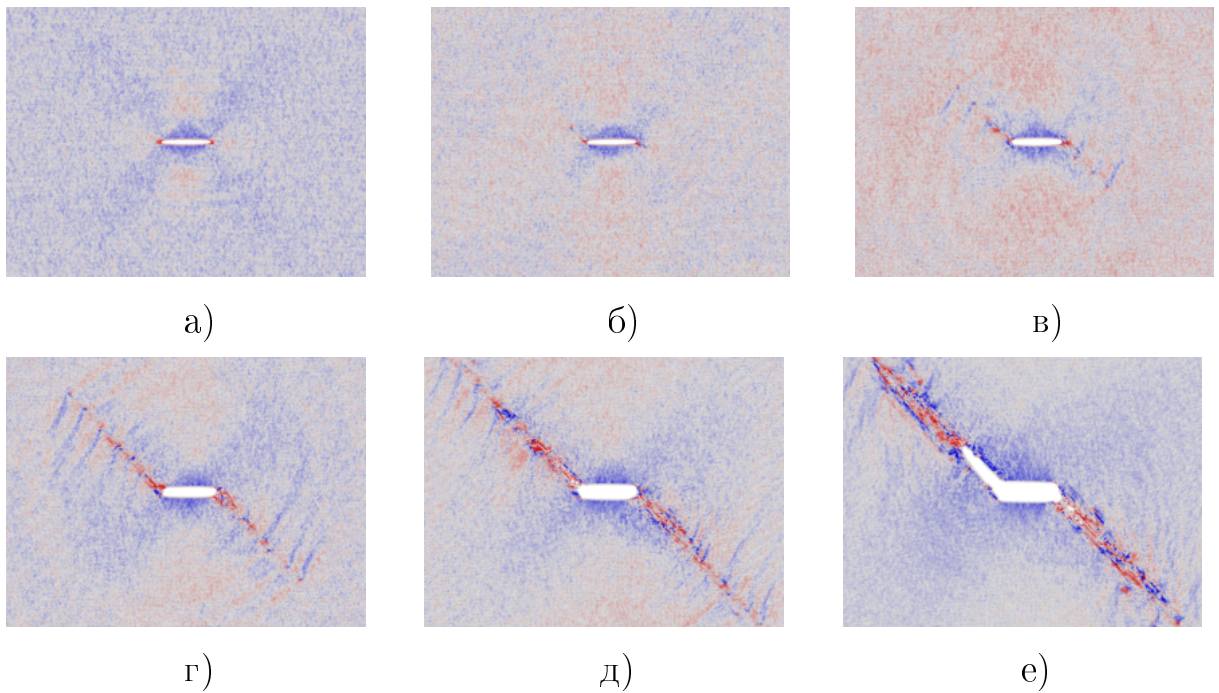


Рис. 4.5: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 0.75$, компонента σ_{11} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

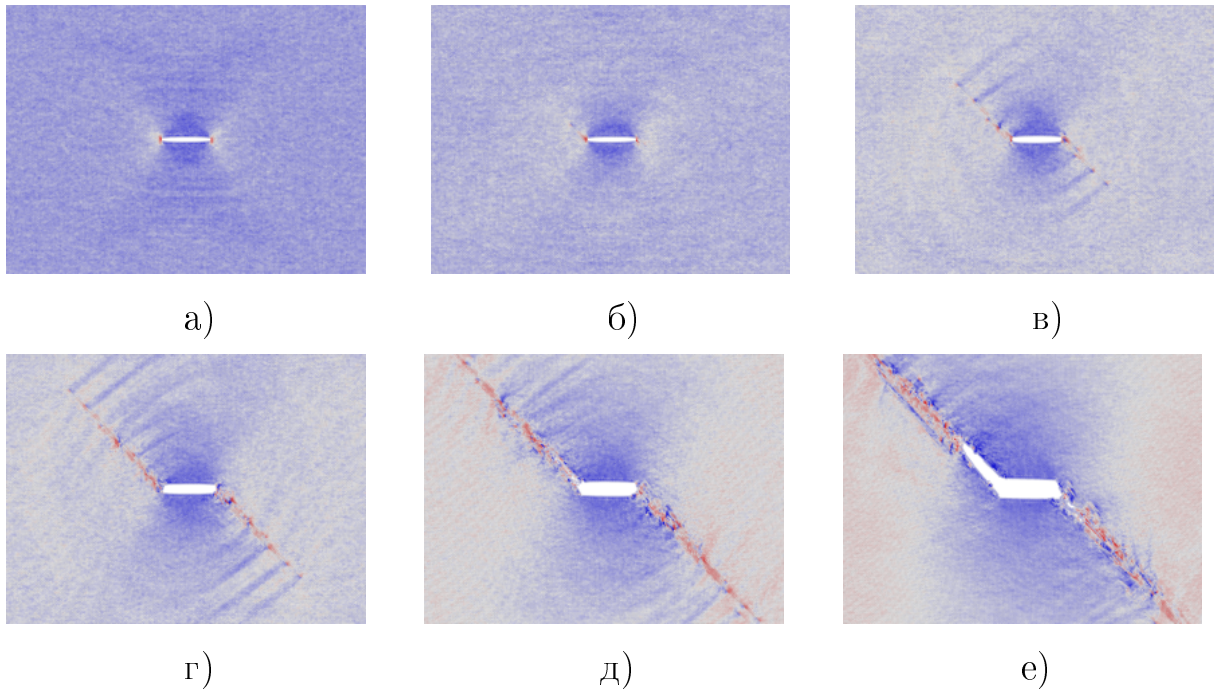


Рис. 4.6: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 0.75$, компонента σ_{22} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

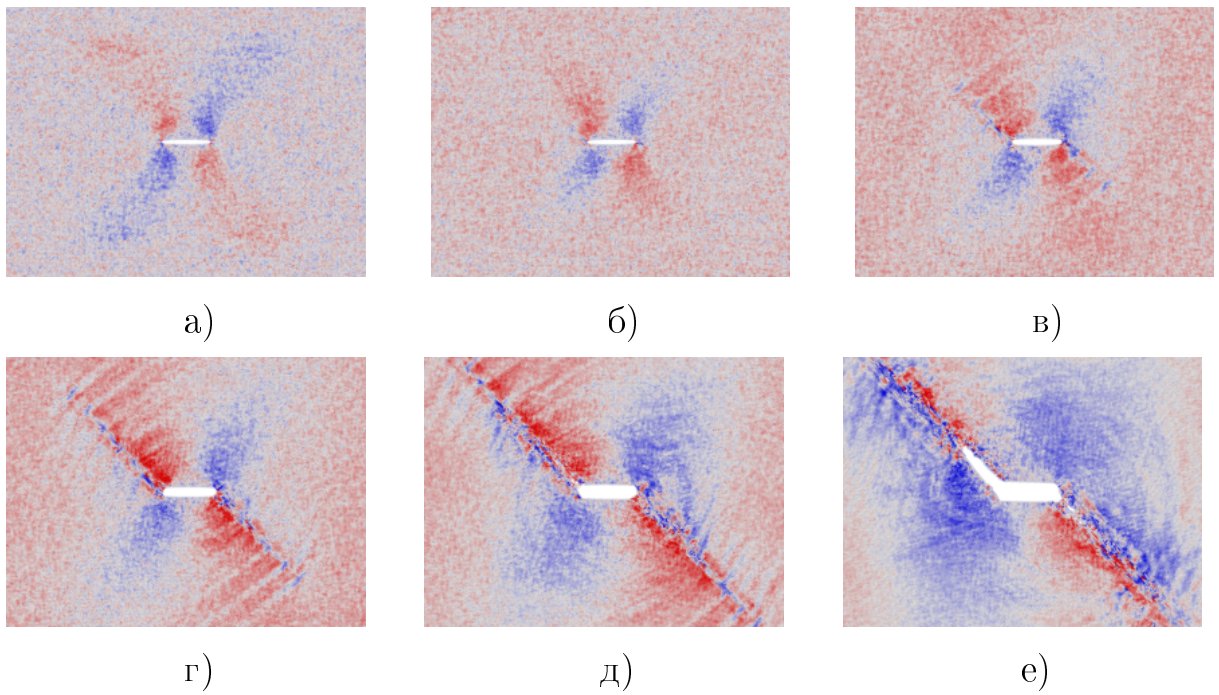


Рис. 4.7: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 0.75$, компонента σ_{12} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

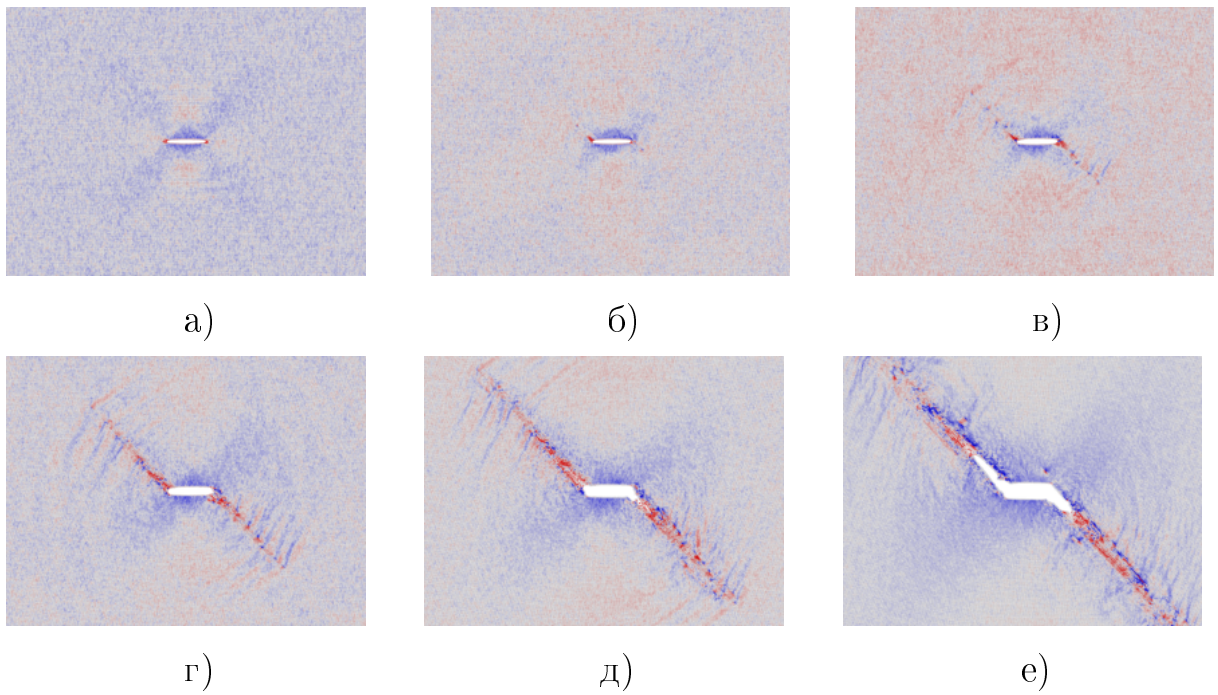


Рис. 4.8: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 0.66$, компонента σ_{11} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

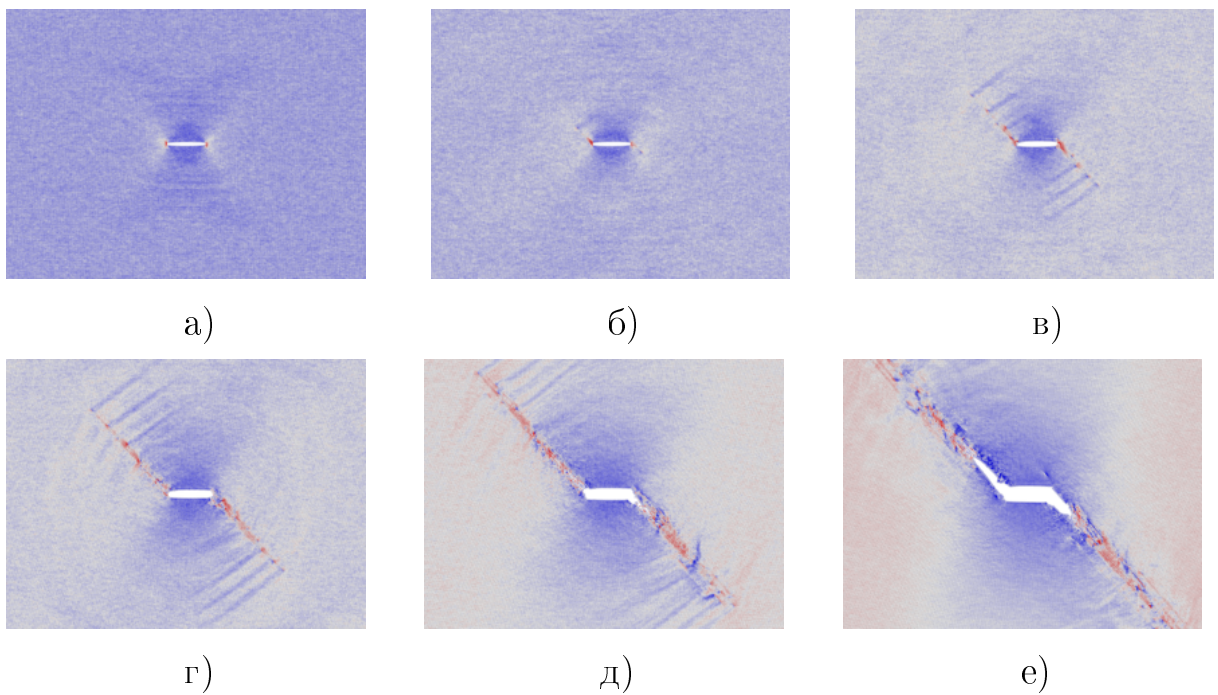


Рис. 4.9: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 0.66$, компонента σ_{22} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

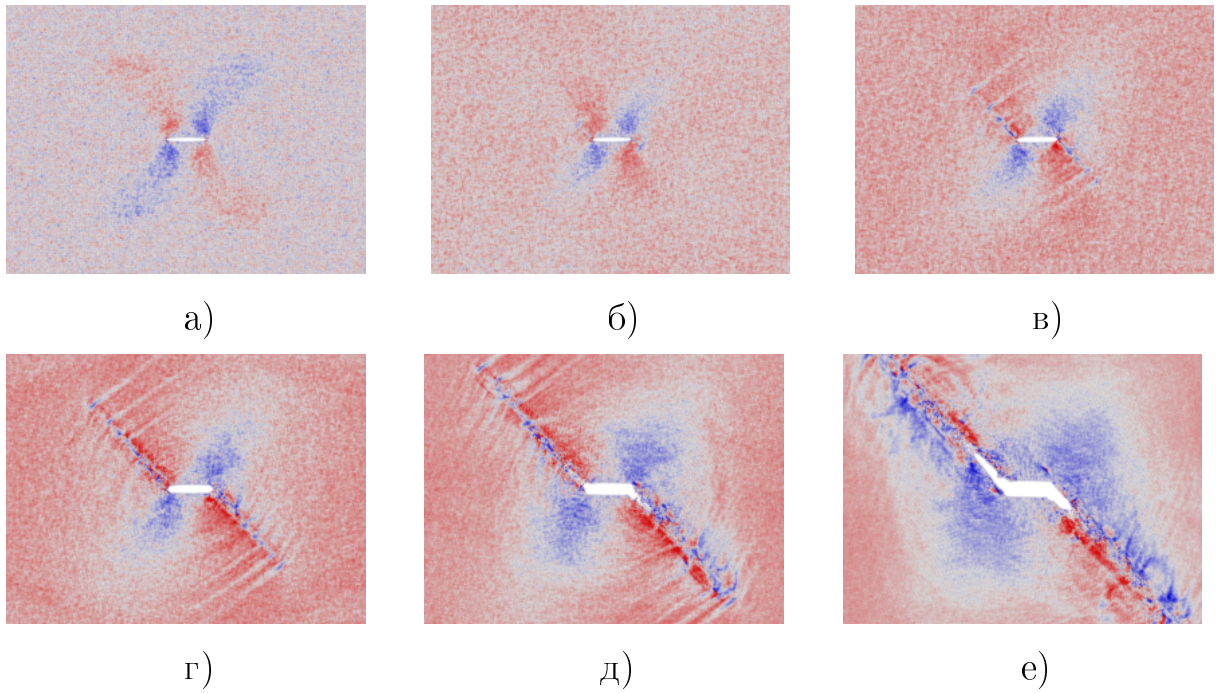


Рис. 4.10: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 0.66$, компонента σ_{12} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

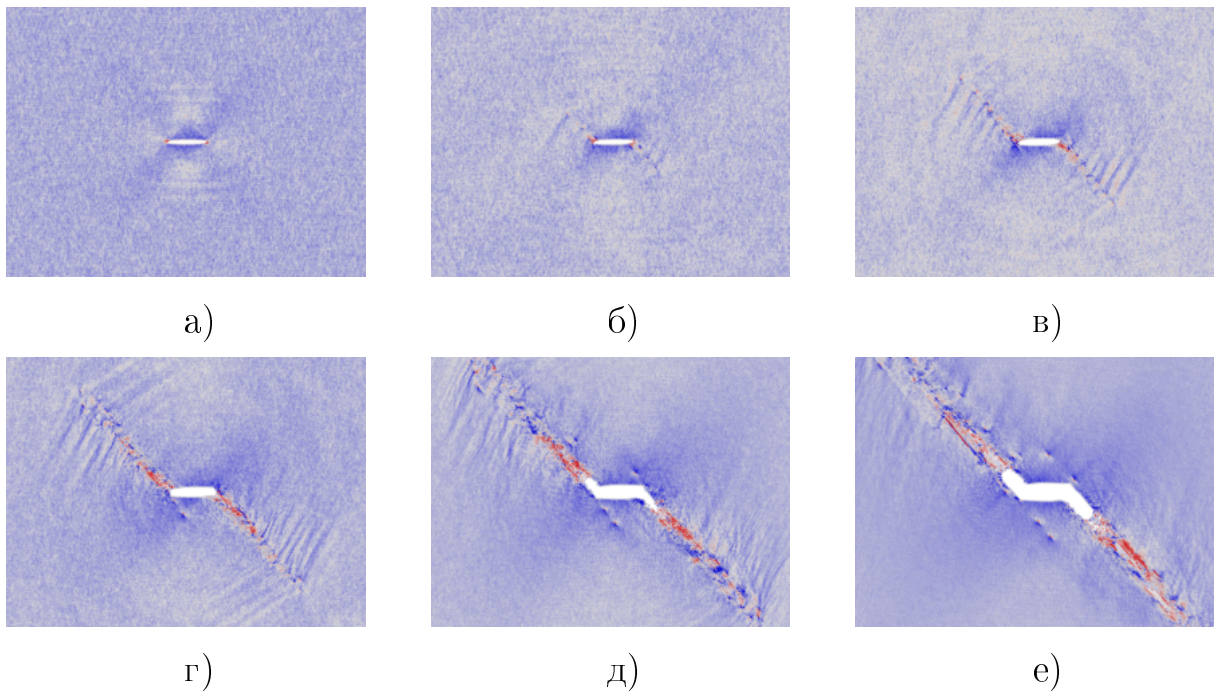


Рис. 4.11: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 0.5$, компонента σ_{11} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

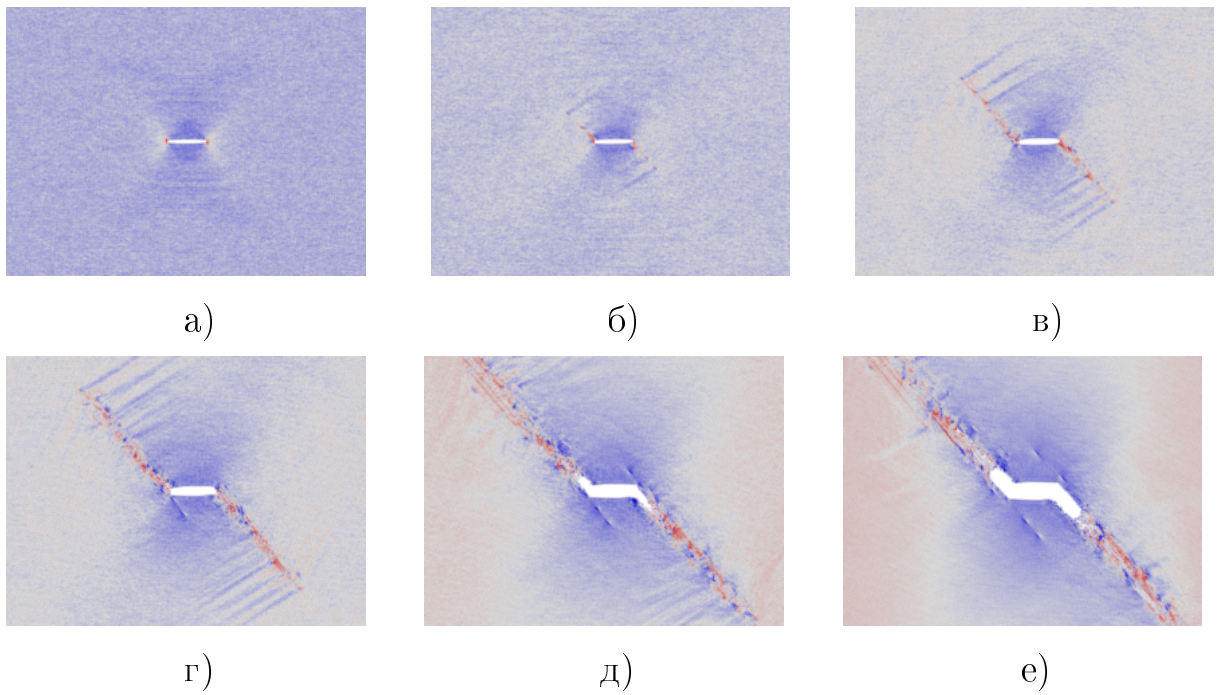


Рис. 4.12: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 0.5$, компонента σ_{22} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

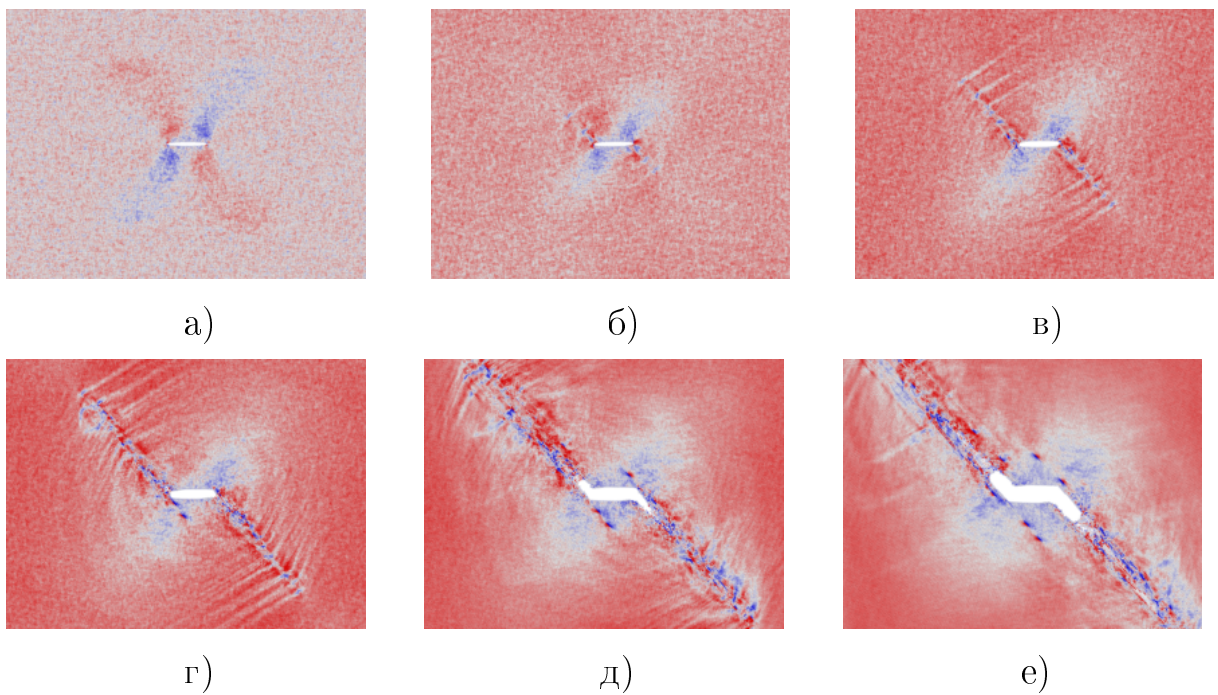


Рис. 4.13: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 0.5$, компонента σ_{12} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

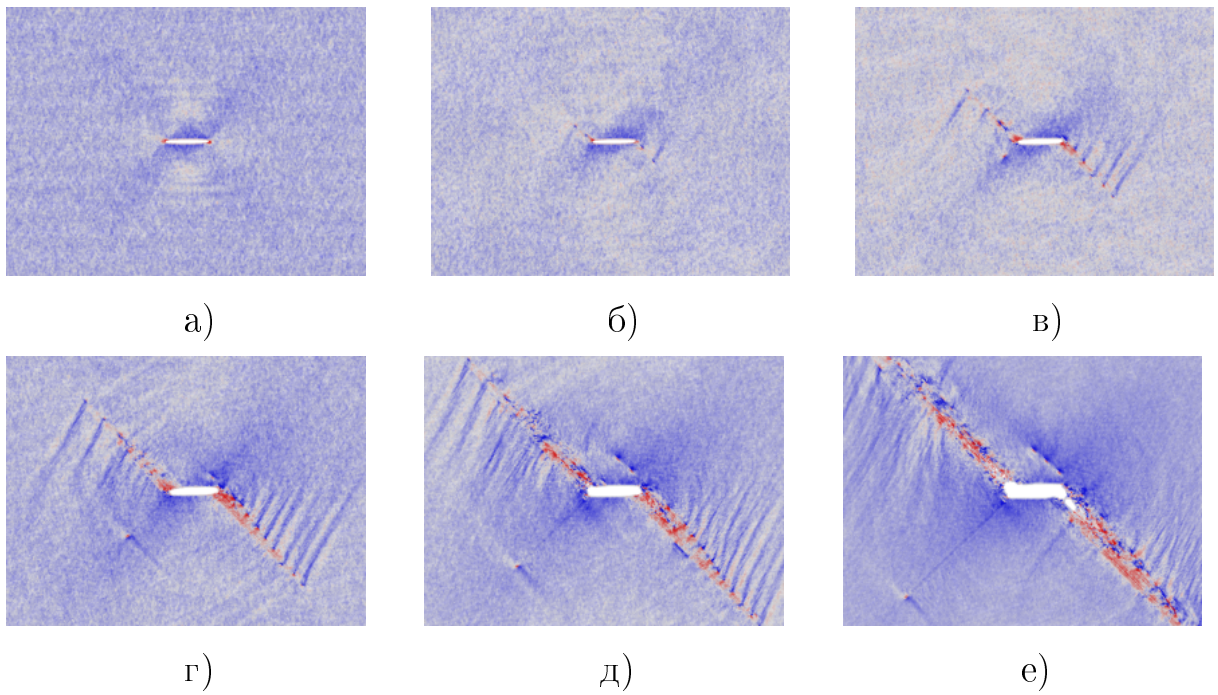


Рис. 4.14: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 0.33$, компонента σ_{11} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

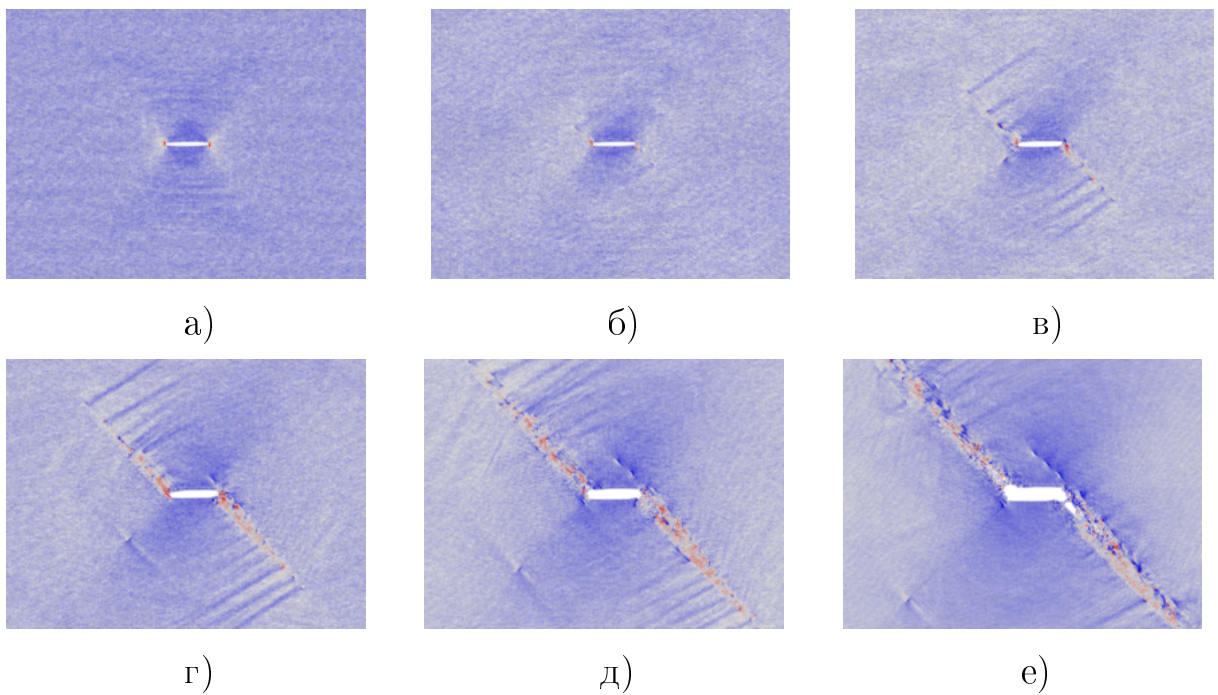


Рис. 4.15: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 0.33$, компонента σ_{22} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

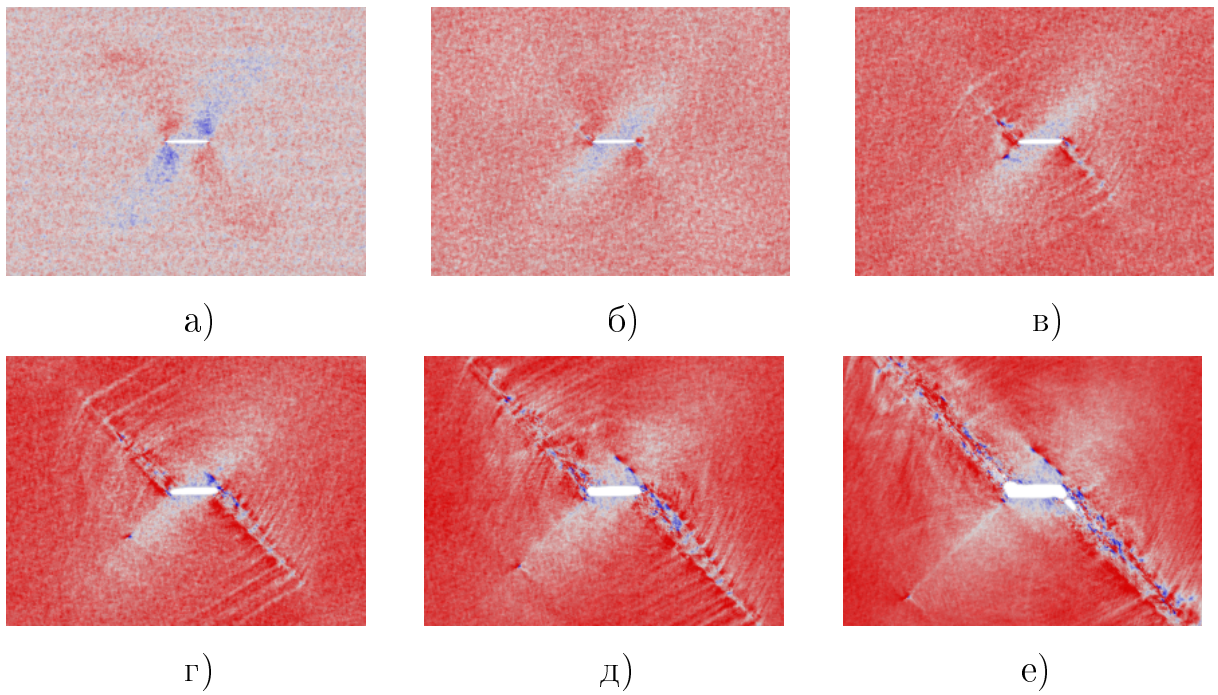


Рис. 4.16: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 0.33$, компонента σ_{12} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

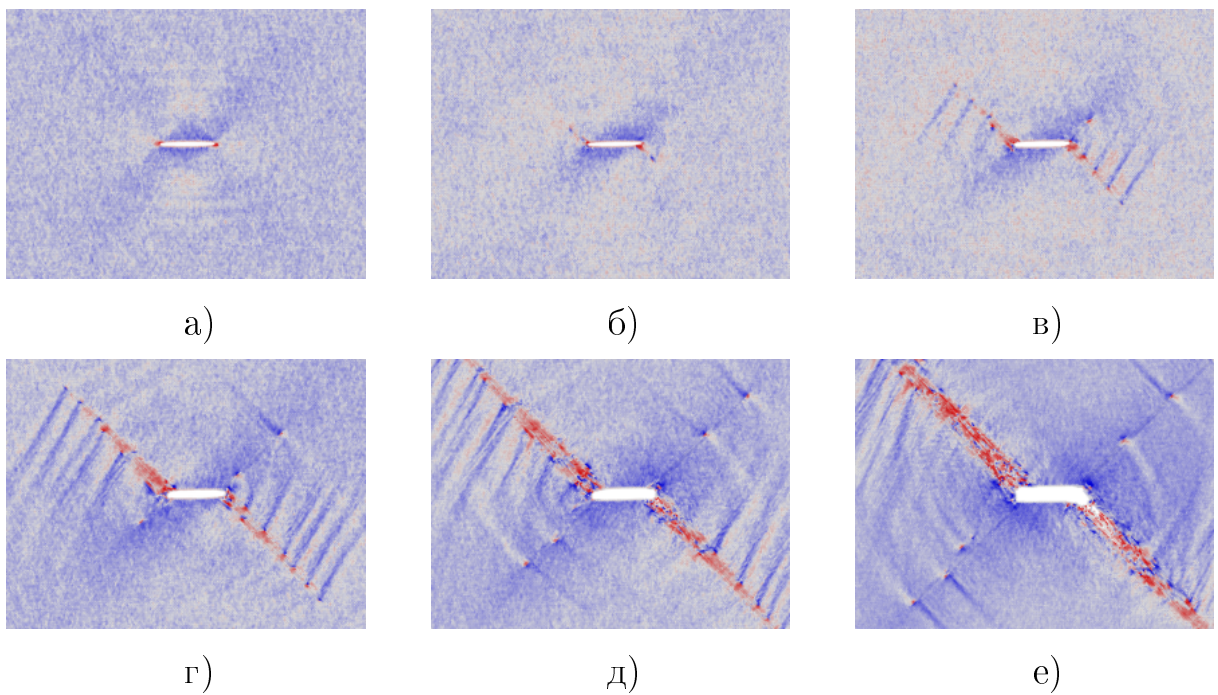


Рис. 4.17: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 0.25$, компонента σ_{11} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

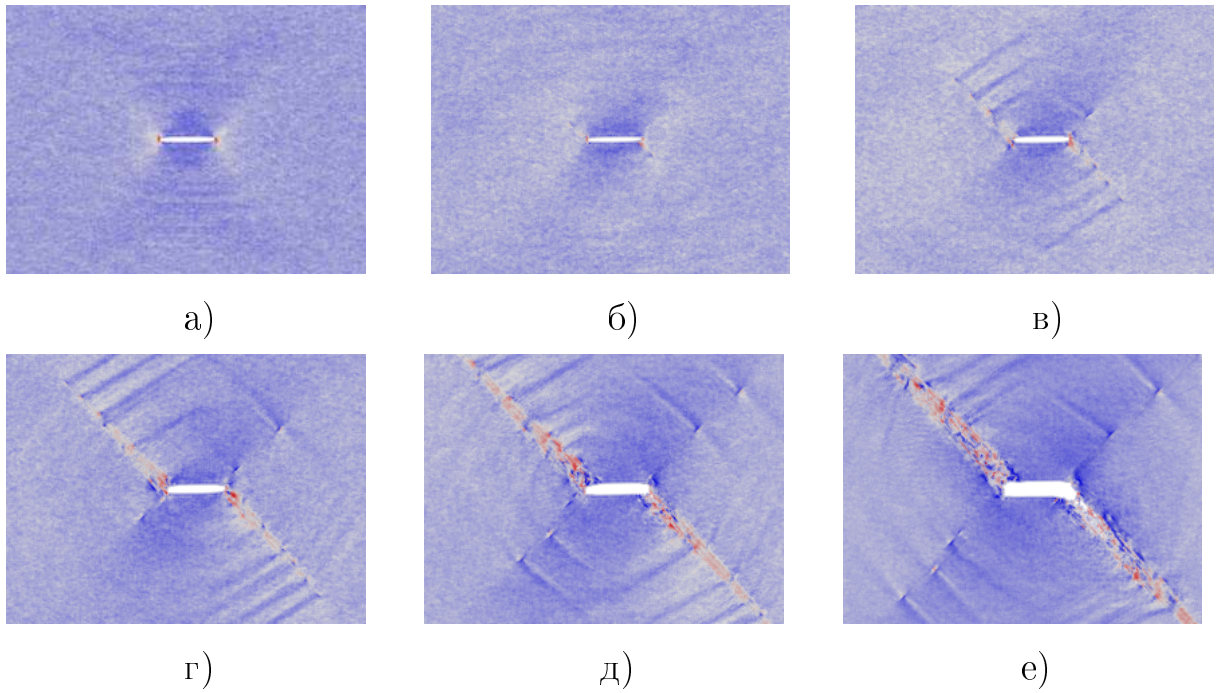


Рис. 4.18: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 0.25$, компонента σ_{22} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

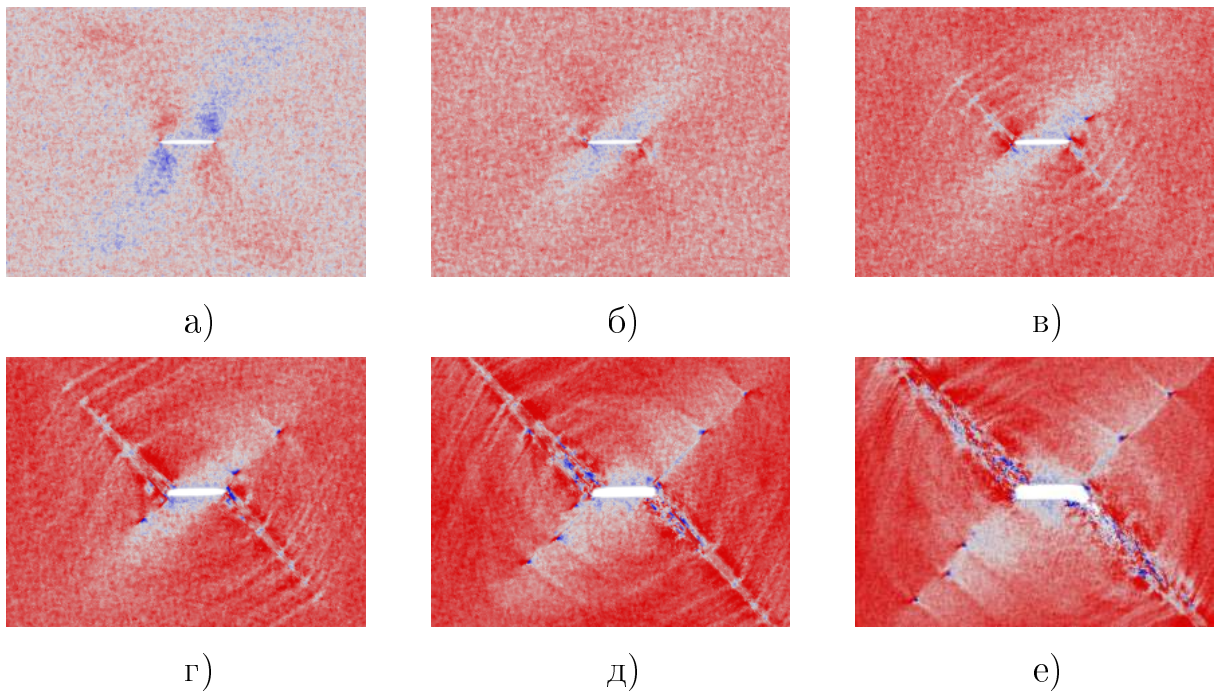


Рис. 4.19: Процесс роста дефекта при величине параметра смешанности нагружения $M^e = 0.25$, компонента σ_{12} , время а) 5 пс, б) 10 пс, в) 15 пс, г) 20 пс, д) 25 пс, е) 30 пс

Используя значения напряжений, найденные методом МД, показанные на рис. 4.2 - 4.19, была реализована процедура ПМ на основе решений МД и вычислены коэффициенты слагаемых высокого порядка в разложении Уильямса. В схеме необходимы только значения атомистических напряжений и координаты атомов в полярной системе координат. В молекулярно-динамическом решении выбирались атомы из кольцевых областей с различными внутренними и внешними радиусами, как показано на рис.4.20. На рис. 4.20 приведены способы выбора атомов. Показано угловое распределение компоненты тензора напряжений σ_{22} в момент времени 5 пс. Множество атомов выбиралось в виде круговой или кольцевой области.

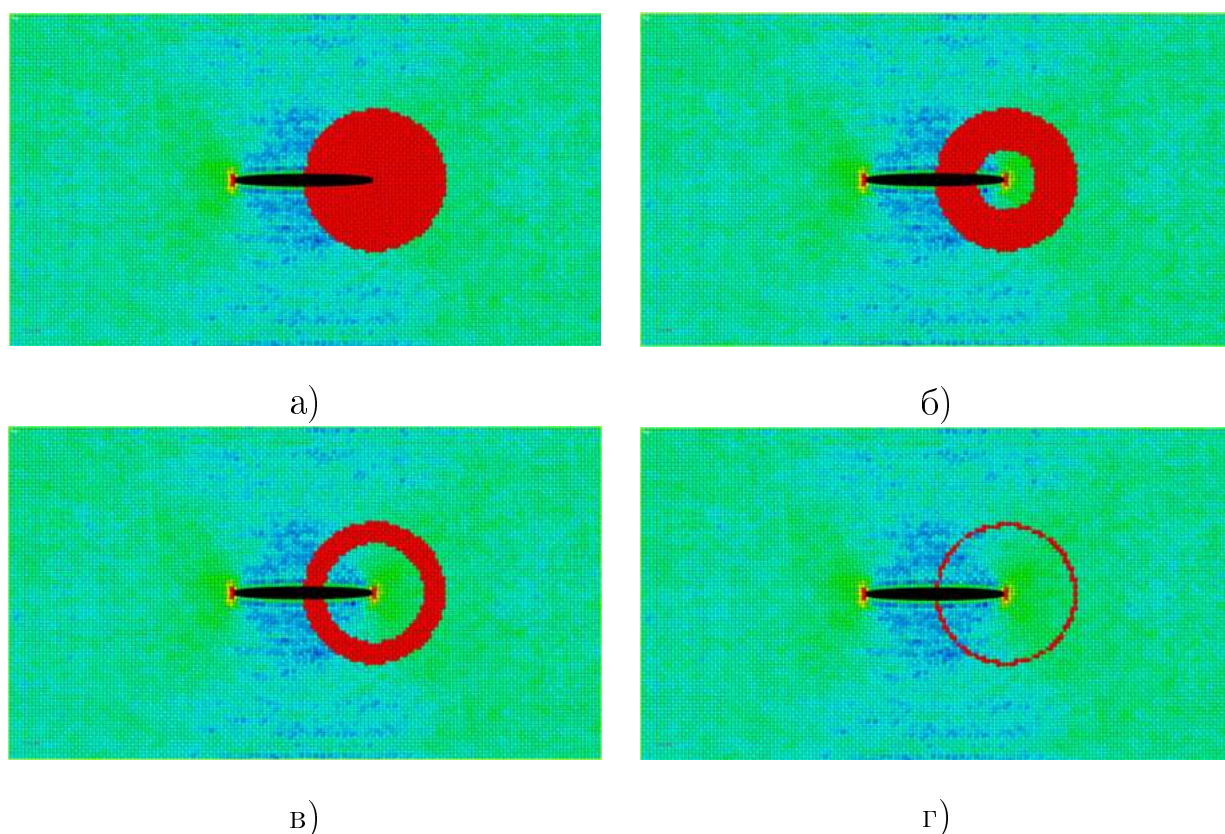


Рис. 4.20: Способы выбора областей а) круг радиусом 36 \AA , б) кольцо радиусом от 15 до 36 \AA , в) кольцо радиусом от 25 до 36 \AA , г) кольцо радиусом от 34 до 36 \AA

Угловые распределения атомистических напряжений и сравнение асимптотического решения механики разрушения сплошной среды и рас-

пределений атомистических напряжений, полученных на разных расстояниях от вершины трещины, показаны на рис. 4.21-4.22. Красные точки соответствуют результатам моделирования методом МД, тогда как синяя пунктирная линия показывает усеченное разложение в ряд Уильямса континуальной теории. На рис. 4.21- 4.22 показано угловое распределение компонент тензора напряжений для различных значений параметра смешанности. Строки (а) и (б) на рис. 4.21 отображают угловые распределения компонент тензора напряжений для $M^e = 1$ при 5 пс и 10 пс соответственно. Строка (а) рис. 4.22 показывает угловые распределения для $M^e = 0.33$ при 15 пс, строка (б) отображает угловые распределения для $M^e = 0.5$ при 20 пс, строка (в) показывает угловые распределения для $M^e = 0.66$ при 20 пс, и строка (г) показывает угловые распределения для параметра смешанности $M^e = 0.75$ в момент времени 15 пс. Найдено хорошее соответствие между атомистическими и механическими полями напряжений сплошной среды. Во всех случаях сплошные и атомистические распределения напряжений по окружности демонстрируют одинаковое качественное поведение во всем угловом изменении.

Для сопоставления коэффициентов разложения Уильямса a_k^1 и a_k^2 как функций параметра смешанности M^e целесообразно ввести безразмерные коэффициенты разложения Уильямса согласно формулам

$$\bar{a}_k^1 = a_k^1 \frac{a^{k/2-1}}{\sigma_{22}^\infty \cos^2 \xi}, \quad \bar{a}_k^2 = a_k^2 \frac{a^{k/2-1}}{\sigma_{22}^\infty \sin \xi \cos \xi}, \quad (4.3.2)$$

где a – это длина надреза, σ_{22}^∞ – приложенная нагрузка, ξ – угол наклона трещины (угол между горизонтальной осью и вырезом). Затем удобно перейти к нормированным коэффициентам

$$\bar{\bar{a}}_k^1 = \frac{\bar{a}_k^1}{\sqrt{(\bar{a}_1^1)^2 + (\bar{a}_2^1)^2}}, \quad \bar{\bar{a}}_k^2 = \frac{\bar{a}_k^2}{\sqrt{(\bar{a}_1^1)^2 + (\bar{a}_2^1)^2}} \quad (4.3.3)$$

Таким образом, в соответствии с формулами (4.3.2) и (4.3.3) коэффи-

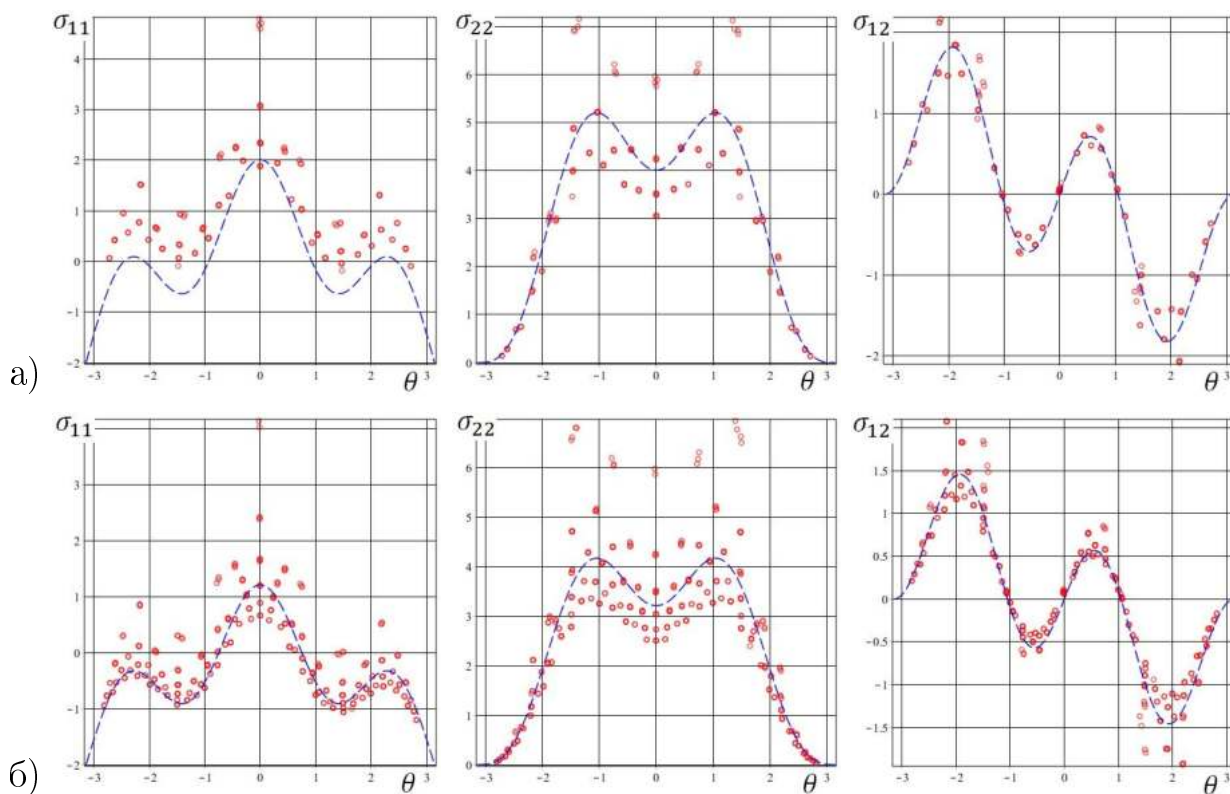


Рис. 4.21: а) Угловое распределение напряжений для $M^e = 1$ в кольцевой области с внутренним радиусом 1 \AA и внешним радиусом 8 \AA ; б) Угловое распределение напряжений для $M^e = 1$ в кольцевой области с внутренним радиусом 2 \AA и внешним радиусом 12 \AA

коэффициенты a_k^1 и a_k^2 нормируются со значениями коэффициентов более высокого порядка в разложении Уильямса. Нормированные коэффициенты \bar{a}_k^1 и \bar{a}_k^2 приведены в таблицах 1-5 приложения 2. В таблицах 2-5 представлены коэффициенты \bar{a}_k^1 и \bar{a}_k^2 для четырех различных значений показателя смешанности нагружения, полученных с помощью двух подходов. Можно видеть, что КИН и Т-напряжения могут быть вычислены с высокой точностью, тогда как расхождения в коэффициентах более высокого порядка разложения Уильямса увеличиваются с увеличением индекса коэффициента для всех значений параметра смешанности. Тем не менее, установлено хорошее соответствие между результатами моделирования МД и результатами МКЭ.

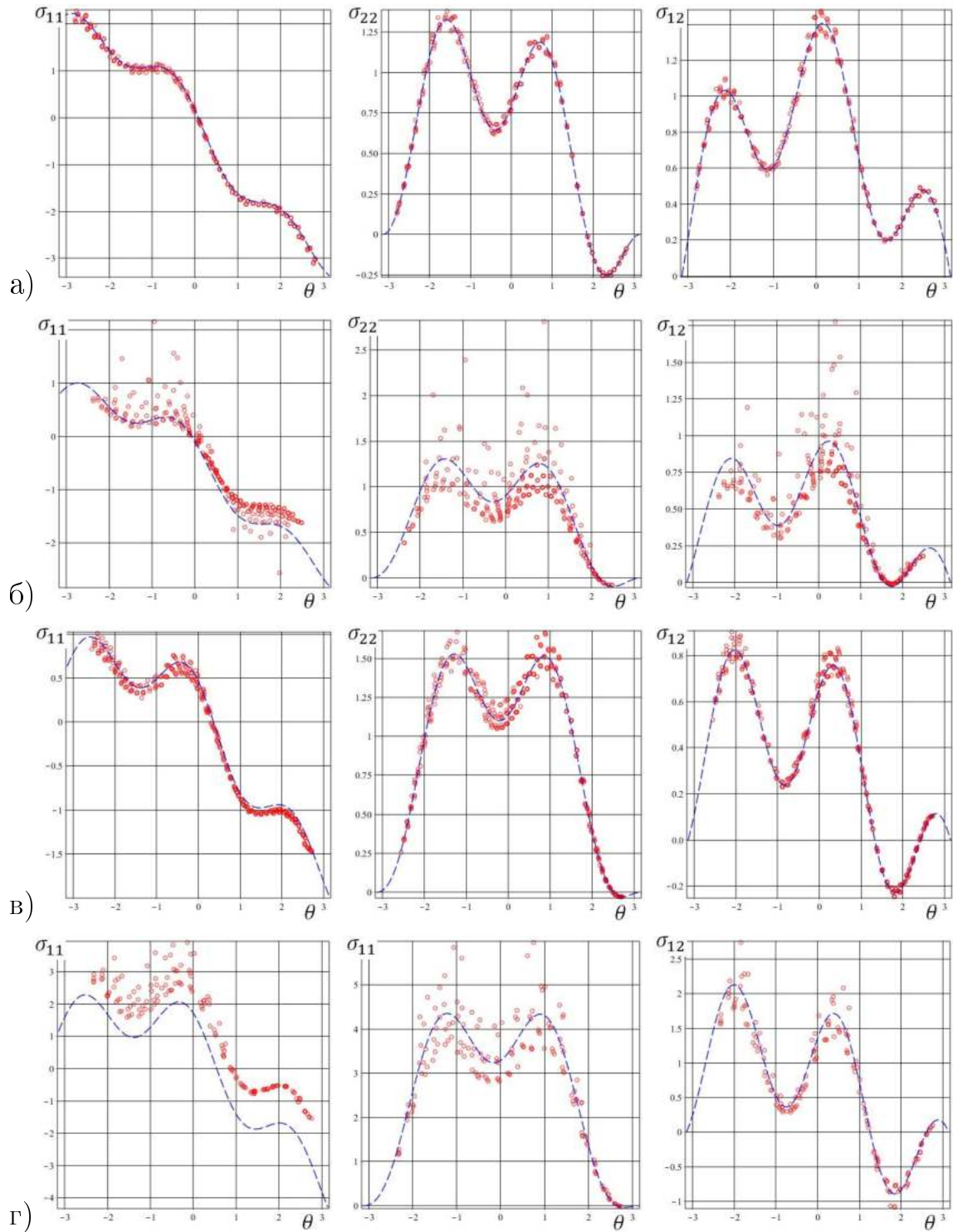


Рис. 4.22: Угловое распределение напряжений а) для $M^e = 0.33$ в кольцевой области с внутренним радиусом 12 \AA и внешним радиусом 15 \AA ; б) для $M^e = 0.5$ в кольцевой области с внутренним радиусом 1 \AA и внешним радиусом 13 \AA ; в) для $M^e = 0.66$ в кольцевой области с внутренним радиусом 12 \AA и внешним радиусом 17 \AA ; г) для $M^e = 0.75$ в кольцевой области с внутренним радиусом 3 \AA и внешним радиусом 9 \AA

4.4. Атомистическое (молекулярно-динамическое) моделирование смешанного нагружения монокристаллической ГЦК-медной и ГЦК-алюминиевой пластин с одним боковым вырезом

Следующая серия расчетов была проведена на пластине с одним боковым надрезом. В вычислительных экспериментах была выбрана FCC-медная пластина с одним боковым надрезом. Проведено сравнение между атомистическим полем напряжений и классическим разложением поля напряжений в ряд Уильямса классической механики разрушения. Общее число атомов в системе в численных экспериментах составило 321602. Кристаллическая ориентация осей x_1 , x_2 , x_3 была [100], [010], [001], соответственно. Длина надреза составляет 72.3 Å. Типичная пластина имеет размеры $723 \times 723 \times 7.23$ Å в направлениях x_1 , x_2 , x_3 соответственно. Как показано на рис. 4.23, трещина в атомистической области моделируется путем деления общей области на различные регионы. Области 1 и 2, которые являются граничными областями, состоят из атомов на верхнем и нижнем краях. Ограничивая взаимодействия между атомами в областях 3 и 4, моделируется трещина. Область 5 представляет собой неповрежденную часть образца.

В соответствии с общей процедурой метода МД вычислительное исследование состоит из двух основных этапов [195]: процесс уравнивания атомных структур и процесс механического нагружения пластины с трещиной при смешанном режиме деформирования. Ансамбль NVE в течение 100 фс моделировался для релаксации; временной шаг составлял 1 фс. Деформация пластины с трещиной осуществляется путем ее растяжения и сдвига для моделирования смешанного режима нагружения. Периодические граничные условия были применены в направлении x_3 . Граничные условия по осям x_1 и x_2 не являются периодическими. Чтобы четко наблюдать упру-

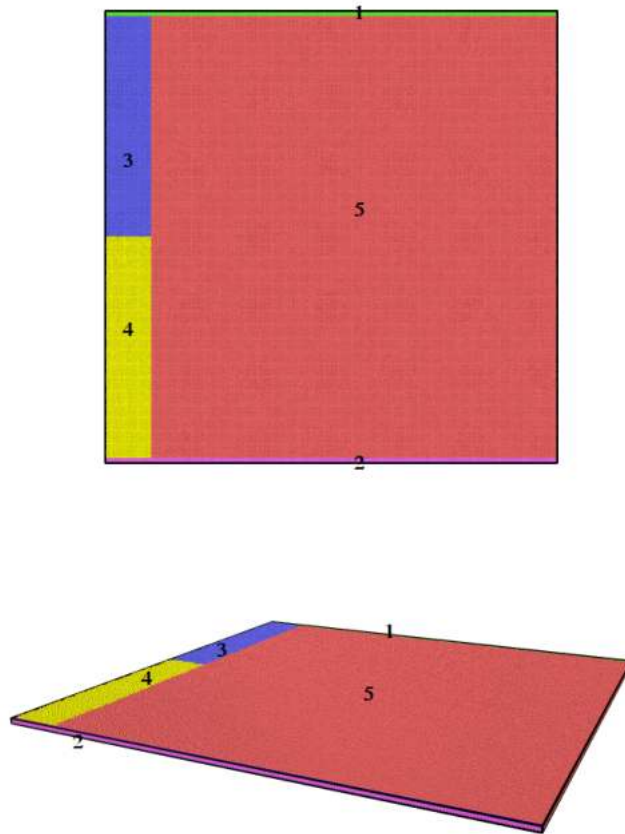


Рис. 4.23: МД модель: схематическое изображение моделируемой геометрии

гий режим в атомном масштабе, температура имитационных моделей была выбрана равной 10К. Для контроля над температурой используется NVE ансамбль с функцией для масштабирования температуры `temp/rescale`.

Скорость деформации при нагружении по моде I равна $\dot{\epsilon}_{22} = 5.53 \times 10^{-2} c^{-1}$. Скорость деформации для смешанного нагружения задаются уравнением (4.3.1) для заданного значения параметра смешанности M^e . Скорости деформации для $M^e = 0.66$ были равны $\dot{\epsilon}_{12} = 3.19 \times 10^{-2} c^{-1}$ и $\dot{\epsilon}_{22} = 5.53 \times 10^{-2} c^{-1}$. Скорости деформации для $M^e = 0.5$ предполагались равными $\dot{\epsilon}_{12} = 2.76 \times 10^{-2} c^{-1}$ и $\dot{\epsilon}_{22} = 3.19 \times 10^{-2} c^{-1}$. Скорость деформации для $M^e = 0.33$ были равны $\dot{\epsilon}_{12} = 5.53 \times 10^{-2} c^{-1}$ и

$\dot{\epsilon}_{22} = 3.19 \times 10^{-2} c^{-1}$. Скорости деформации для $M^e = 0.16$ установлены равными $\dot{\epsilon}_{12} = 5.53 \times 10^{-2} c^{-1}$ и $\dot{\epsilon}_{22} = 1.48 \times 10^{-2} c^{-1}$. Таким образом, скорости деформации $\dot{\epsilon}_{22}$ и $\dot{\epsilon}_{12}$ варьировались от $1.48 \times 10^{-2} c^{-1}$ до $5.53 \times 10^{-2} c^{-1}$. Результаты моделирования показаны на рис. 4.24 - 4.28, где представлены морфология деформации и компоненты тензора напряжений для различных величин параметра смешанности. Изображения создаются в программе визуализации постобработки OVITO. На рис. 4.24 - 4.28 показана концентрация напряжений вблизи вершины трещины на разных временных этапах. Согласно этим цифрам, с увеличением временного шага концентрация напряжений вокруг кончика надреза увеличивается, и число атомов, которые несут высокие напряжения также увеличивается, варьируясь от низкого (синий) до высокого (красный).

На рисунке 4.24 показано распространение трещин и процесс разрушения медной пластины с боковым надрезом в течение 5 пс, 15 пс, 25 пс, 30 пс для $M^e = 1$. Моментальные снимки распространения трещины для параметра смешанности $M^e = 0.66$ при 5 пс, 15 пс, 25 пс, 30 пс показаны на рис. 4.25. Идентификационная карта, полученная с помощью МД-моделирования для морфологии деформации и компонентов напряжений для параметра смешанности $M^e = 0.5$ при 5 пс, 15 пс, 25 пс, 30 пс, показана на рис. 4.26. Процесс разрушения и компоненты тензора напряжений для параметра смешанности $M^e = 0.33$ при 5 пс, 15 пс, 25 пс, 30 пс показаны на рис. 4.27. На рис. 4.28 показана растрескавшаяся медная пластина с боковым надрезом для параметра смешанности $M^e = 0.16$ в моменты времени 5 пс, 15 пс, 25 пс, 30 пс.

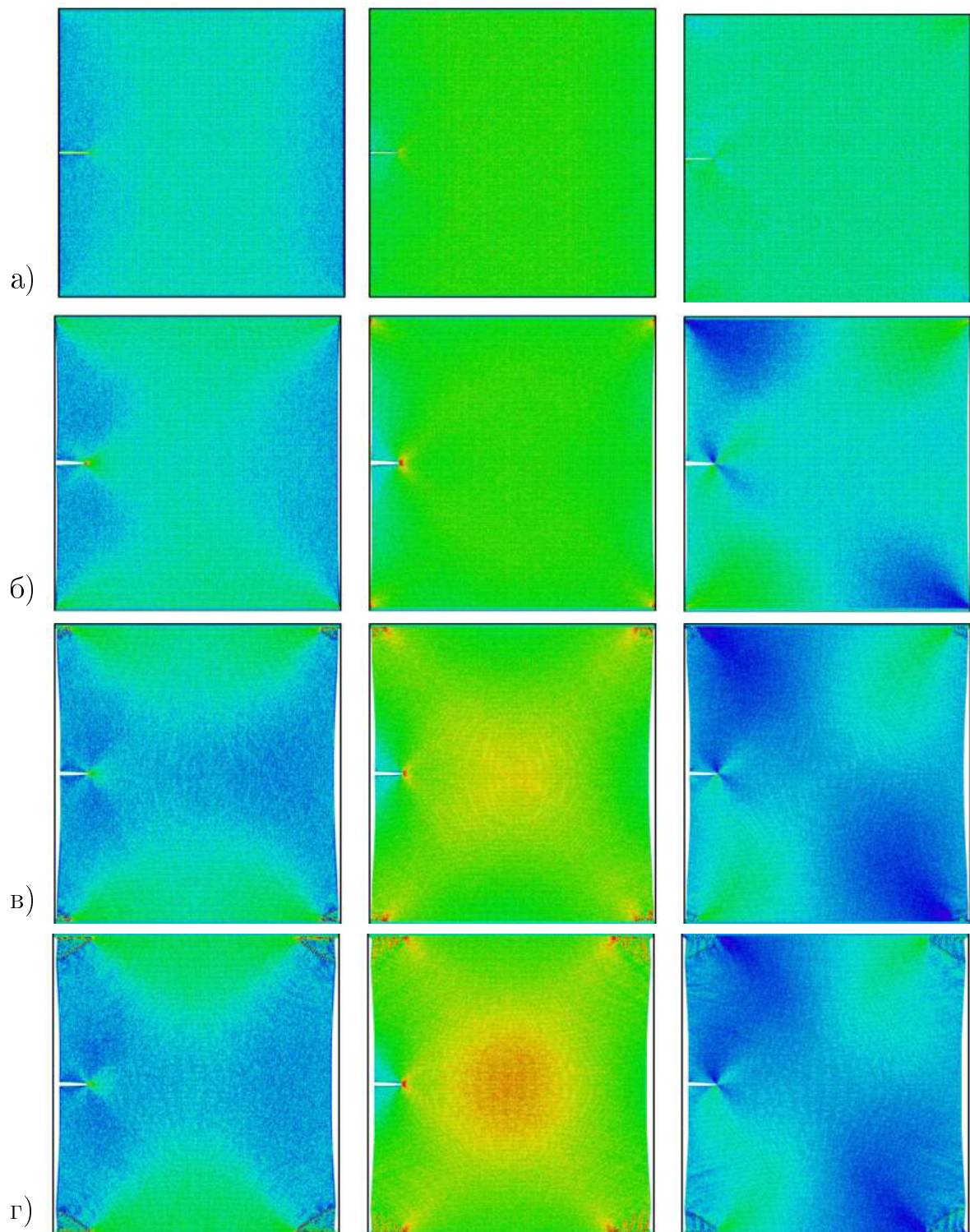


Рис. 4.24: Процесс роста дефекта (параметр смешанности нагружения $M^e = 1$), компоненты $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{12}$ с течением времени: а) 5 пс, б) 15 пс, в) 25 пс, г) 30 пс

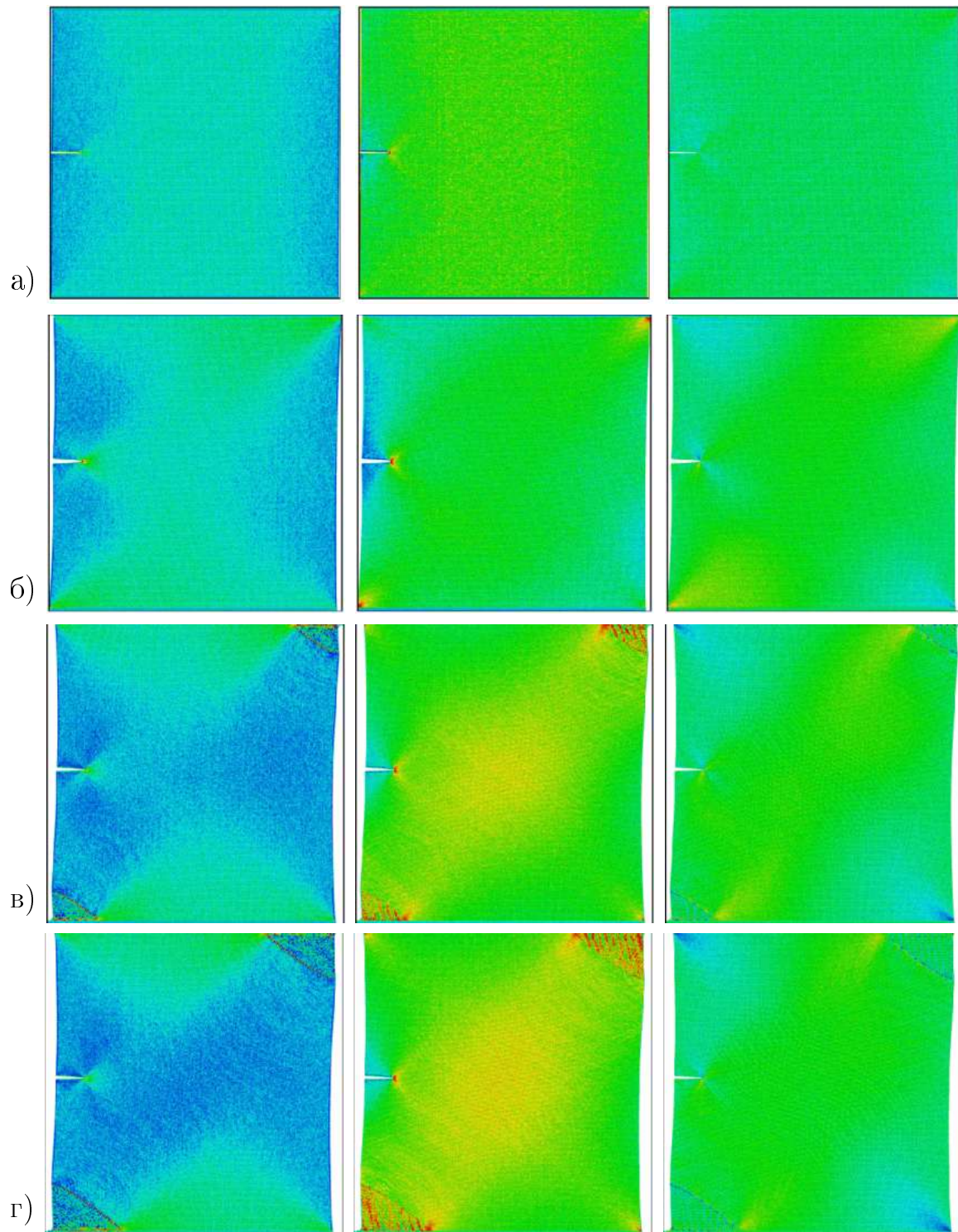


Рис. 4.25: Процесс роста дефекта (параметр смешанности нагружения $M^e = 0.66$), компоненты $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{12}$ с течением времени: а) 5 пс, б) 15 пс, в) 25 пс, г) 30 пс

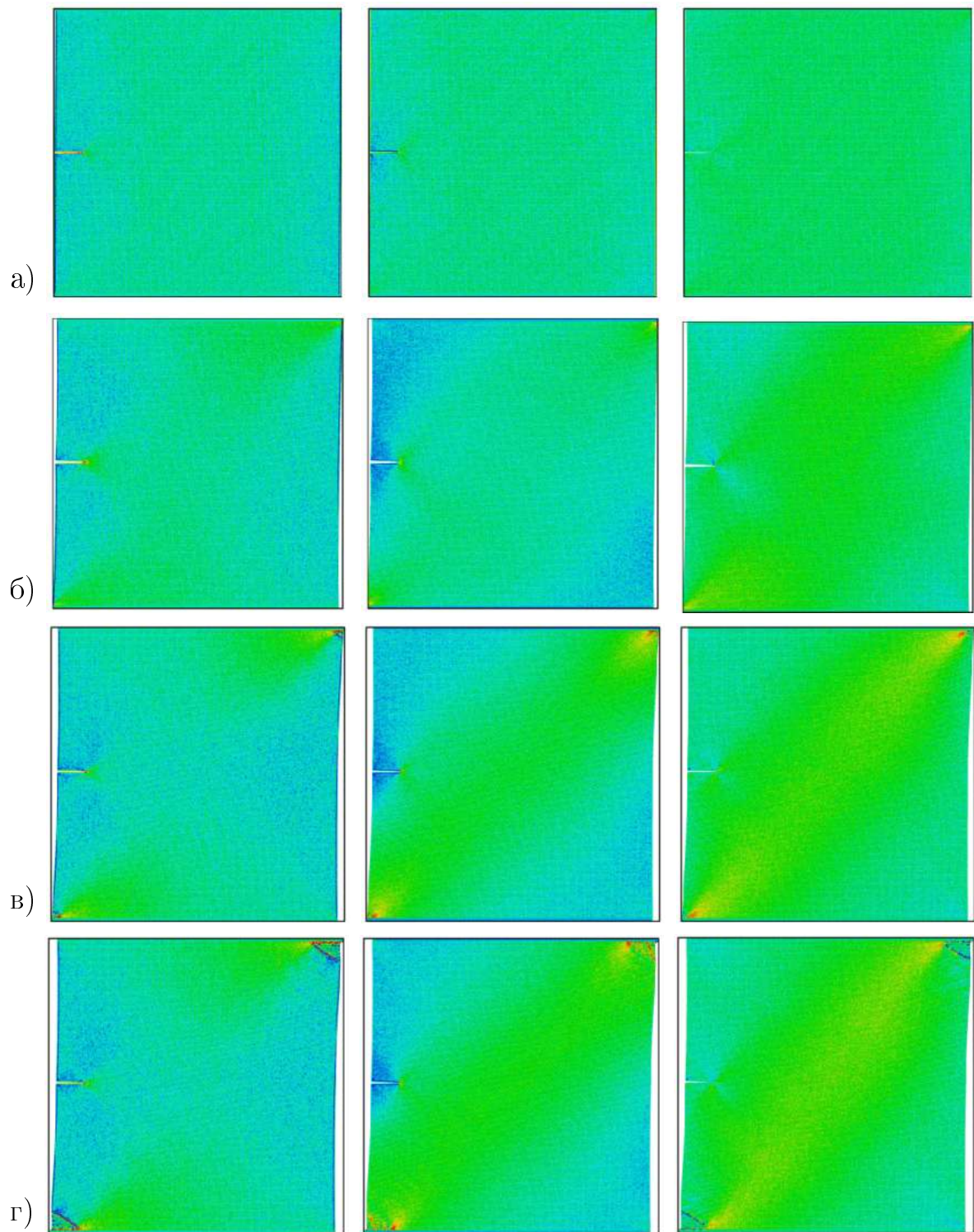


Рис. 4.26: Процесс роста дефекта (параметр смешанности нагружения $M^e = 0.5$), компоненты $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{12}$ с течением времени: а) 5 пс, б) 15 пс, в) 25 пс, г) 30 пс

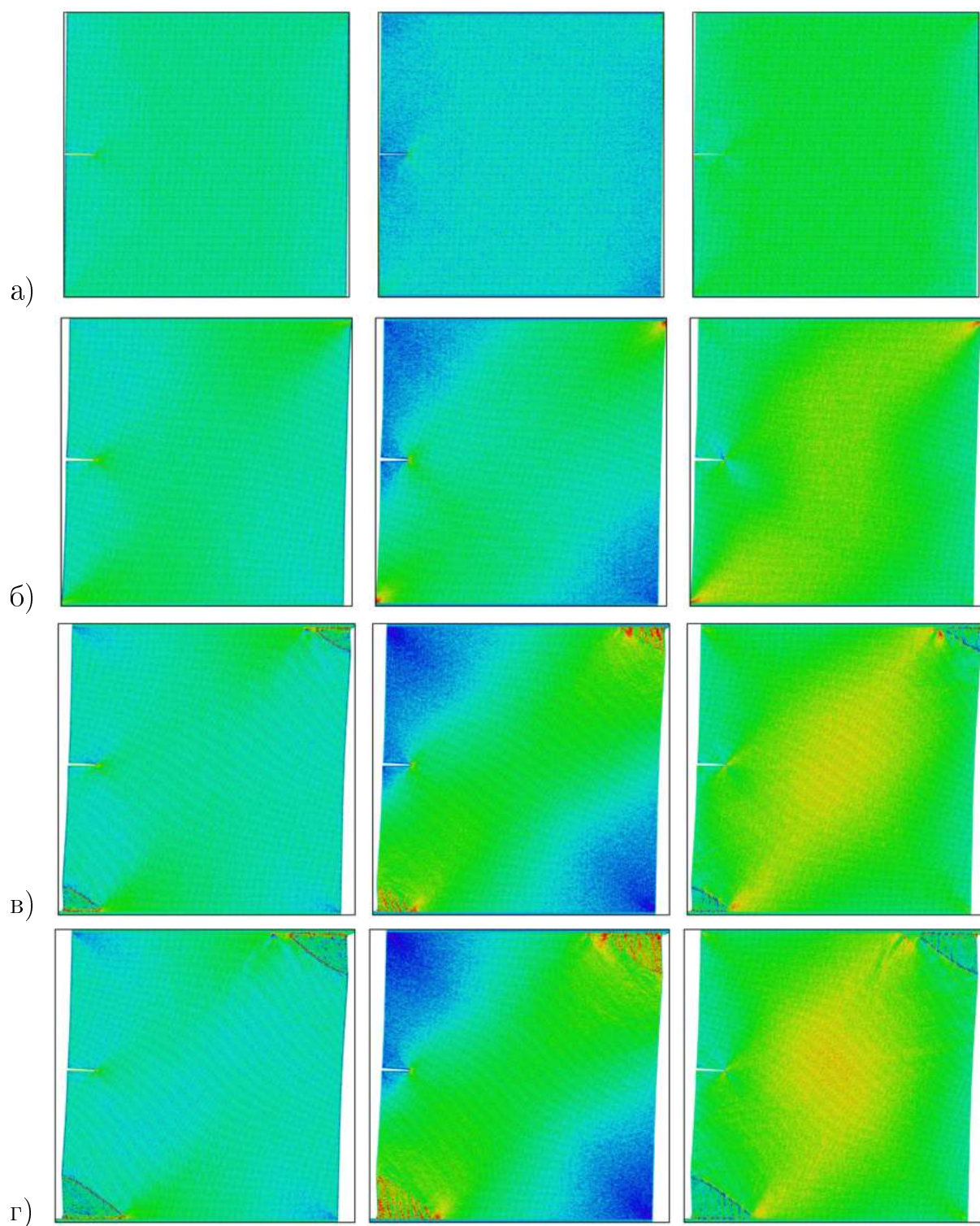


Рис. 4.27: Процесс роста дефекта (параметр смешанности нагружения $M^e = 0.33$), компоненты $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{12}$ с течением времени: а) 5 пс, б) 15 пс, в) 25 пс, г) 30 пс

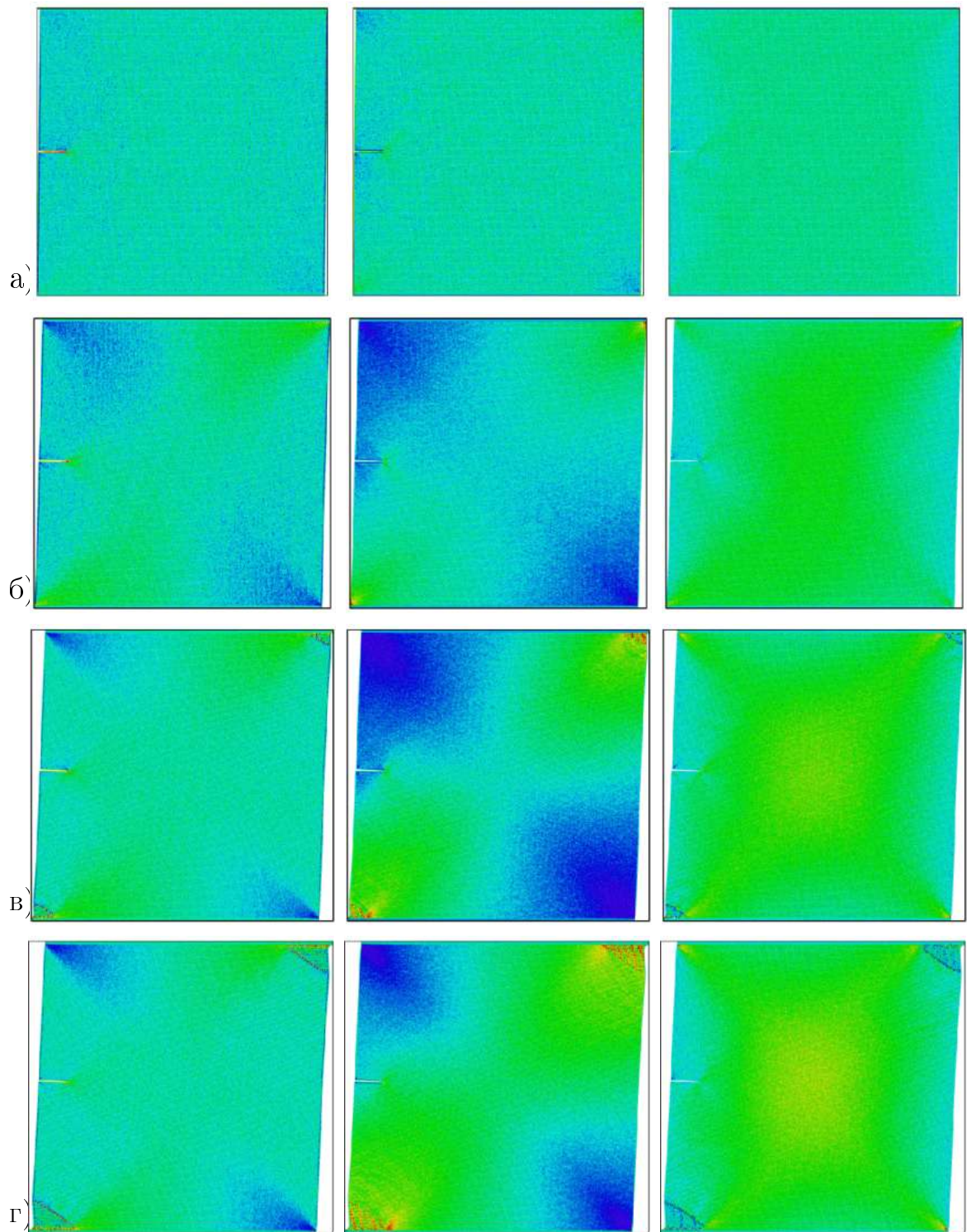


Рис. 4.28: Процесс роста дефекта (параметр смешанности нагружения $M^e = 0.16$), компоненты $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{12}$ с течением времени: а) 5 пс, б) 15 пс, в) 25 пс, г) 30 пс

На рисунках можно увидеть, что вершина трещины обладает высоким значением концентрации напряжений, а ее смежные контуры напряжений в моменты времени 25 пс и 30 пс аналогичны контурам решения механики сплошной среды при соблюдении упругого режима.

Для получения коэффициентов усеченного разложения в ряд Уильямса набор точек, принадлежащих концентрическим окружностям, был выбран из моделирования методом МД. На рис. 4.29 показаны угловые распределения компонент тензора напряжений для различных значений параметра смешанности. Первая строка показывает угловые распределения напряжений для $M^e = 0.16$, вторая строка показывает угловые распределения компонент тензора напряжений для $M^e = 0.33$, третья строка показывает угловые распределения для $M^e = 0.5$, четвертая строка показывает угловые распределения для $M^e = 0.66$ в момент времени 20 пс.

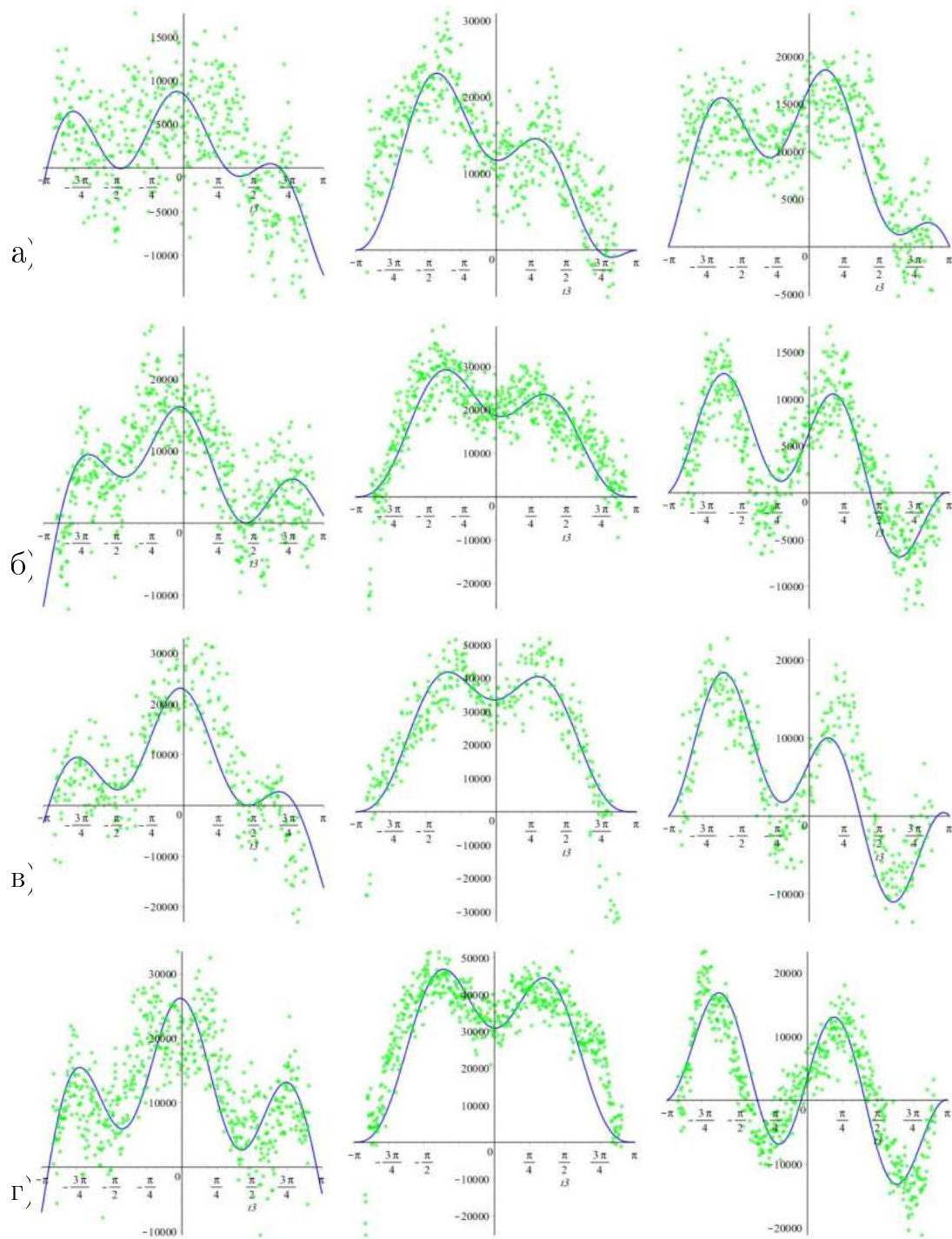


Рис. 4.29: Угловые распределения напряжений для а) $M^e = 0.16$; б) $M^e = 0.33$; в) $M^e = 0.5$ и г) $M^e = 0.66$, полученные для кольцевой области с внутренним радиусом 28 \AA , а внешним 32 \AA

4.5. Конечно-элементное моделирование комбинированного нагружения пластины с одним боковым надрезом

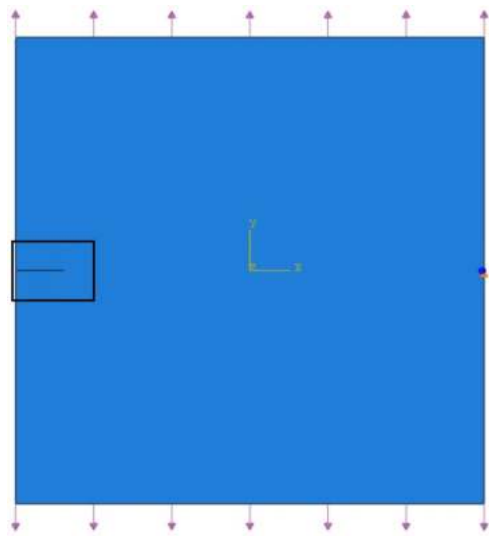
Точного аналитического решения для задачи растяжения пластины с боковой трещиной не существует. Поэтому было получено численное решение с помощью метода конечных элементов в пакете SIMULIA Abaqus [206]. Анализ конечных элементов, популярный численный метод механики сплошных сред, используется здесь для вычисления коэффициентов интенсивности сплошных напряжений, Т-напряжения и коэффициентов более высокого порядка разложения в ряд Уильямса для полей напряжений и перемещений вблизи вершины бокового надреза в пластине. Геометрия модели для нагружения по моде I и приложенные нагрузки показаны на рис. 4.30, а). Параметры материала совпадают с параметрами моделирования молекулярной динамики. На рис. 4.30, б) показано эквивалентное напряжение фон Мизеса вблизи вершины надреза при нагружении по моде I. На рисунках 4.30, в)-е) показаны эквивалентные напряжения фон Мизеса вблизи вершины надреза при смешанной нагрузке для спектра значений параметра смешанности. Выделенная область на рис. 4.30, б)-е) представляет собой прямоугольную область на пластине, показанную на рис. 4.30, а).

Для моделирования нагрузок смешанного типа при различных значениях параметра смешанности M^e рассматривается наклонный вырез. Каждый угол наклона ξ (угол между горизонтальной осью и вырезом) соответствует определенному значению параметра M^e . Угол наклона ξ и значение параметра смешанности нагружения M^e связаны формулой $M^e = 1 - 2\xi/\pi$.

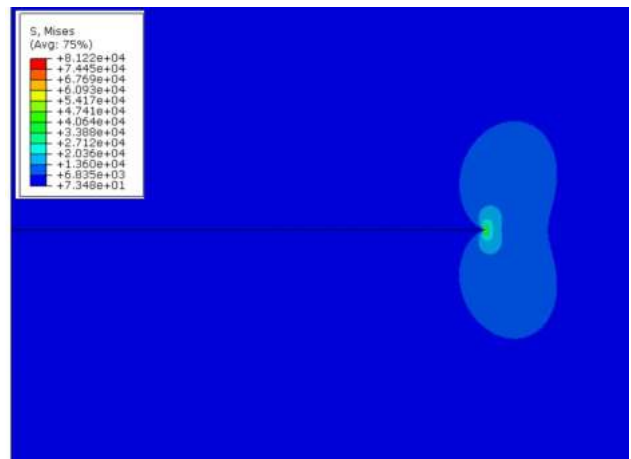
Для получения коэффициентов a_k^m разложения Уильямса из анализа конечных элементов выбран набор точек, принадлежащих концентрическим окружностям. Количество точек варьировалось от 219 до 1757. Затем используется переопределенный метод, основанный на полях напряжений

в узлах конечно-элементного разбиения. Таким образом, асимптотические коэффициенты поля вершины трещины оцениваются путем подгонки узловых результатов анализа МКЭ. Метод основан на нахождении наилучшего соответствия полей напряжений на вершине надреза полю напряжений, взятому из большого числа узлов вокруг вершины надреза. В этом исследовании для оценки амплитудных коэффициентов разложения Уильямса выполняется алгоритм ПМ. Результаты ПМ показаны на рис. 4.31, 4.32. Черные точки показывают угловые распределения компонент тензора напряжений, полученные с помощью МКЭ-анализа. На основе этих значений вычисляются коэффициенты разложения ряда Уильямса с помощью процедуры ПМ.

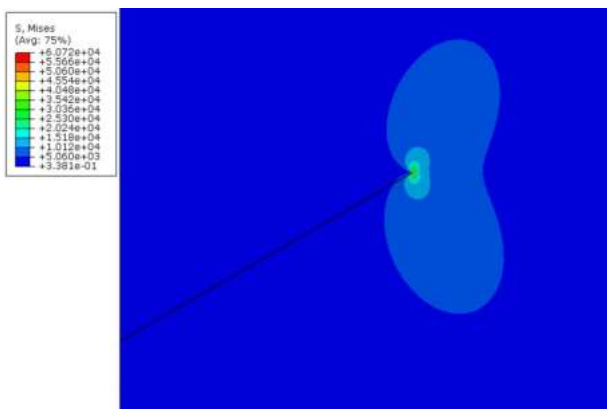
Затем усеченное разложение Уильямса, в котором сохранены пятнадцать слагаемых, используется для определения угловых распределений компонент тензора напряжений, показанных красными линиями на рис. 4.31, 4.32. Коэффициенты разложения Уильямса, оцененные с помощью МКЭ для трещины моды I с помощью ПМ, приведены в приложении 3 таблице 1. Из рис. 4.31 видно, что разложение в пятнадцатичленный ряд Уильямса точно описывает поле напряжений вблизи вершины трещины. Восстановленное поле напряжений, показанное красным цветом, полностью совпадает с решениями, полученными методом конечных элементов. Тщательный числовой анализ показал, что меньшее число членов в разложении ряда Уильямса приводит к расхождениям с МКЭ [150]. На рисунке 4.32 показаны угловые распределения компонент тензора напряжений для смешанного режима нагружения при различных значениях M^e . Из рис. 4.32 видно, что восстановленное поле напряжений с членами более высокого порядка совпадает с численным решением. Коэффициенты разложения Уильямса, полученные с помощью ПМ, основанного на результатах МКЭ, приведены в приложении 3 таблицах 1-5.



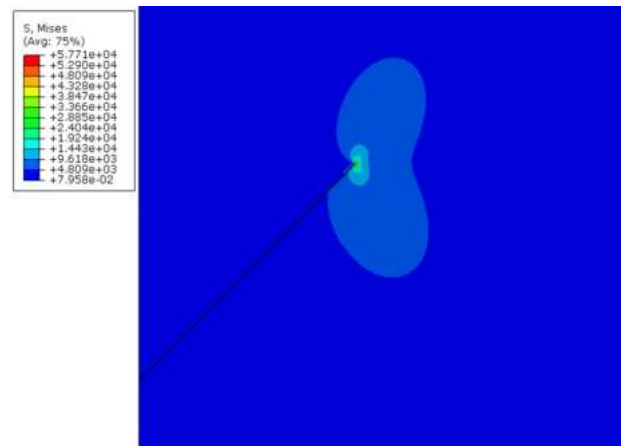
а)



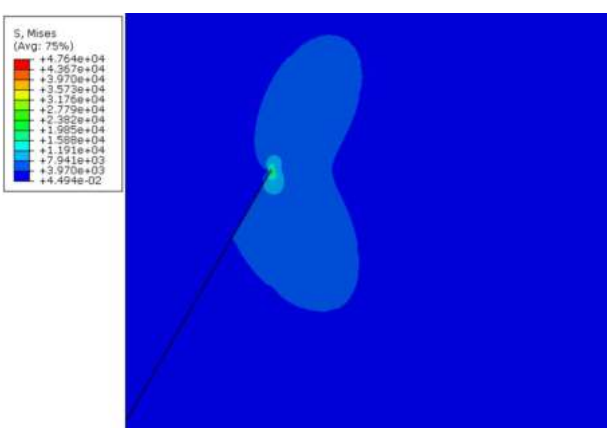
б)



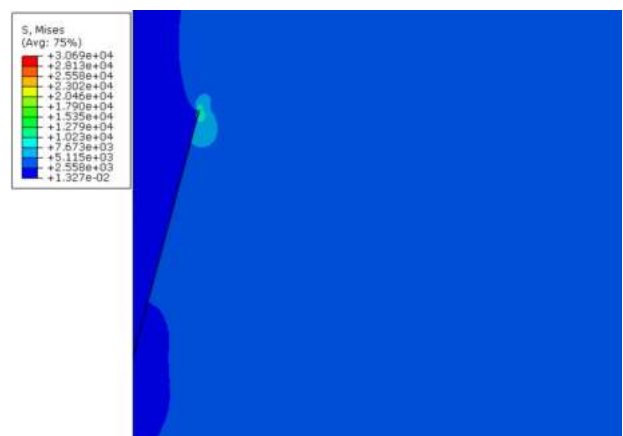
в)



г)



д)



е)

Рис. 4.30: Геометрия модели (а) и распределение эквивалентного напряжения фон Мизеса в окрестности вершины бокового выреза для различных параметров смешанности нагружения: б) $M^e = 1$, в) $M^e = 0.66$, г) $M^e = 0.5$, д) $M^e = 0.33$, е) $M^e = 0.16$

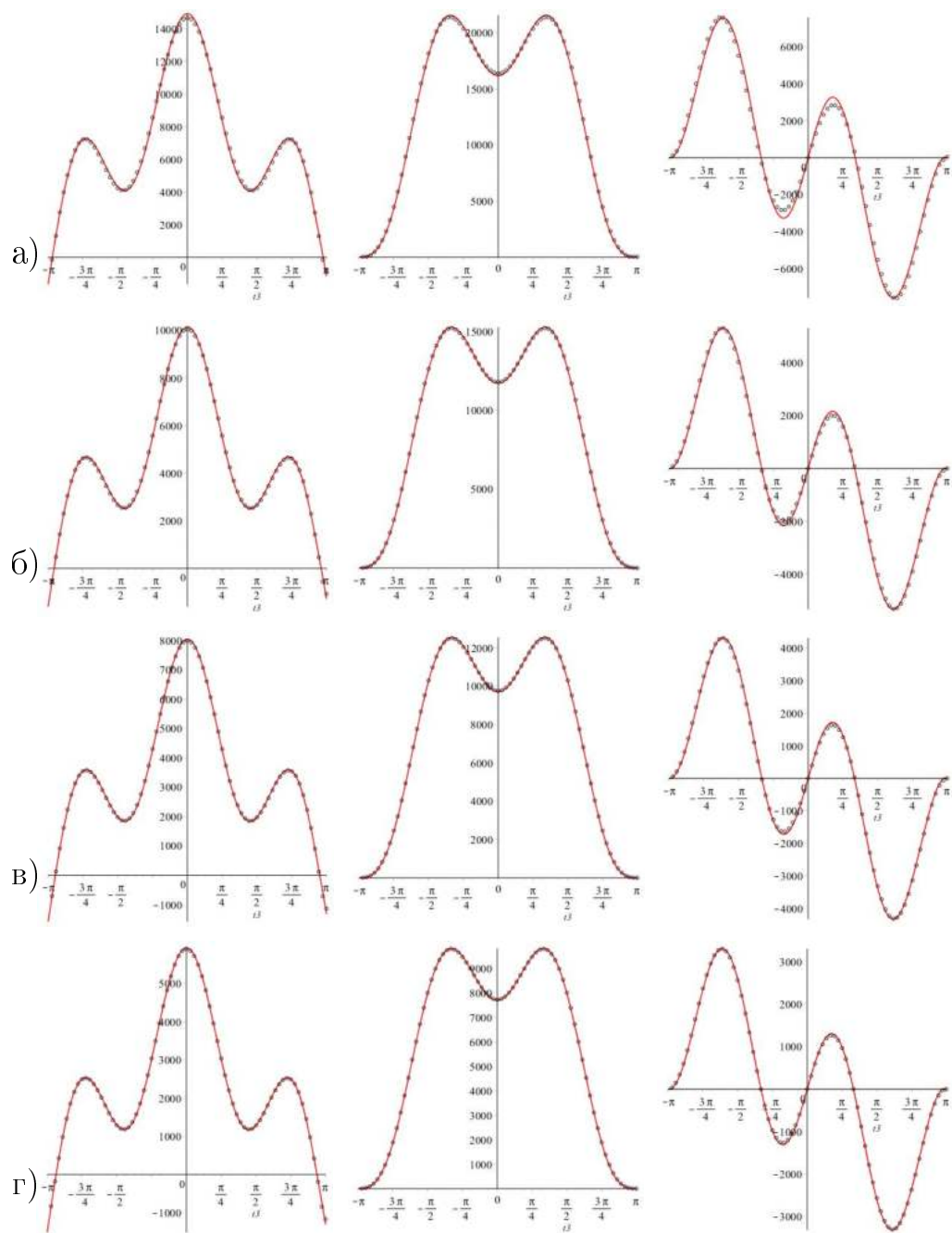


Рис. 4.31: Угловые распределения компонент тензора напряжений в окрестности вершины трещины моды I для различных расстояний от вершины трещины а) $r/a = 0.5$, б) $r/a = 1$, в) $r/a = 1.5$, г) $r/a = 3$

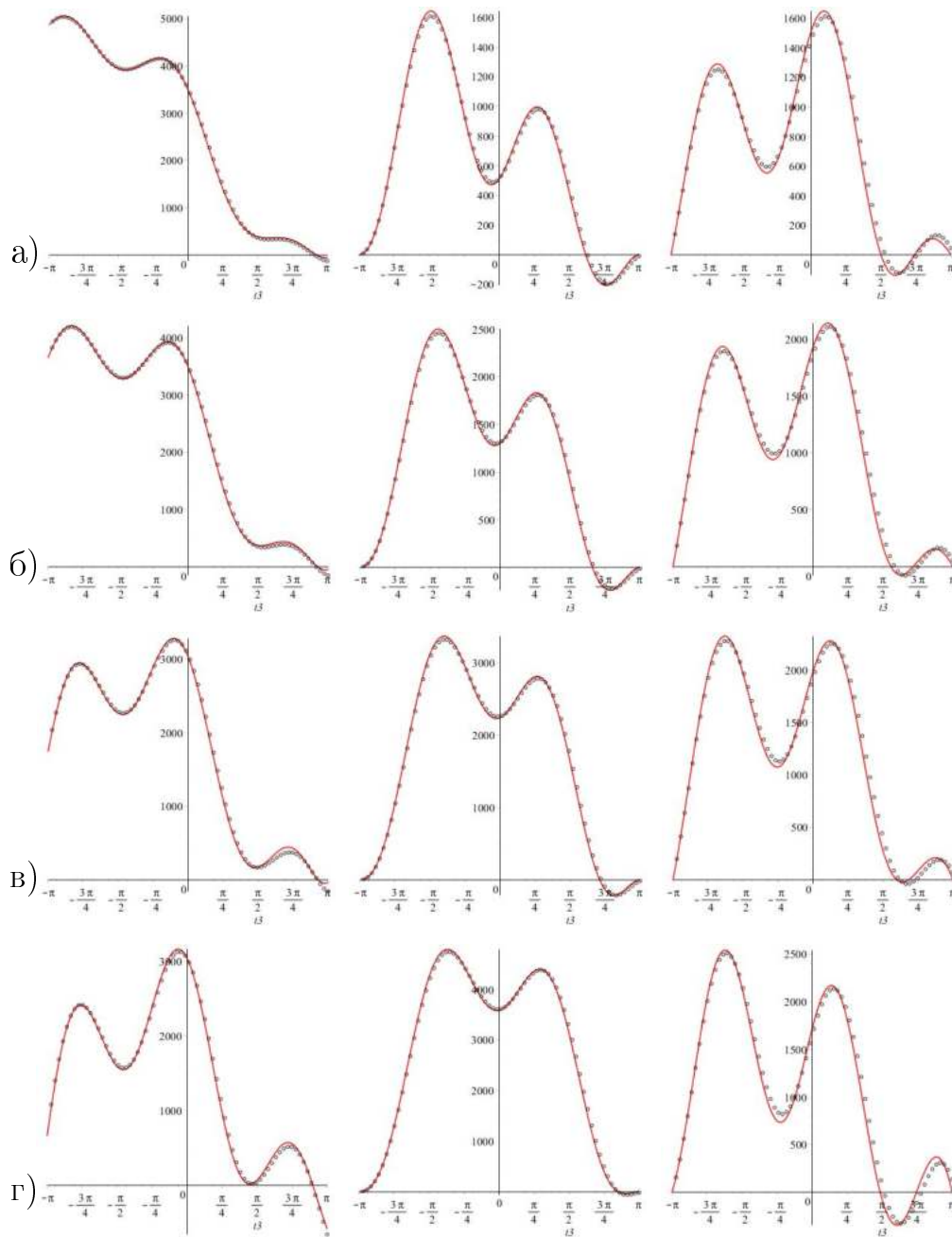


Рис. 4.32: Угловые распределения компонент тензора напряжений в окрестности вершины трещины для смешанных нагрузок при различных значениях параметра смешанности а) $M^e = 0.16$, б) $M^e = 0.33$, в) $M^e = 0.5$, г) $M^e = 0.66$, при $r/a = 1$. Черные точки соответствуют численному решению МКЭ. Красная линия показывает восстановленное асимптотическое разложение Уильямса со слагаемыми более высокого порядка, где коэффициенты получены из результатов ПМ

4.6. Сравнение полей напряжений, полученных в результате моделирования, проведенного методом конечного элемента, и атомистическим методом

Проведено сравнение угловых распределений атомистических напряжений и напряжений из конечно-элементного решения о смешанном нагружении пластины с одним боковым надрезом, полученных на разных расстояниях от кончика трещины. Результаты вычислений и их сопоставление показаны на рис. 4.33.

Рисунок 4.33 иллюстрирует окружные распределения компонент тензора напряжений, полученные с помощью моделирования методом МД (зеленые точки), восстановленные решения ряда из МКЭ (красные линии). Здесь r/a – безразмерное расстояние от вершины трещины. Можно еще раз отметить, что синяя линия показывает распределение, основанное на усеченном разложении ряда Уильямса, в котором сохраняются пятнадцать коэффициентов, полученных ПМ из моделирования методом МД. Черные точки, показывающие распределения МКЭ, и красные линии, показывающие реконструированное разложение Уильямса из анализа конечных элементов, являются теми же точками, которые показаны на рис. 4.31. Можно видеть, что красные и синие линии, изображающие усеченное расширение приближенного ряда, расположены очень близко друг к другу. Выявленные закономерности действительны для разных расстояний от кончика надреза.

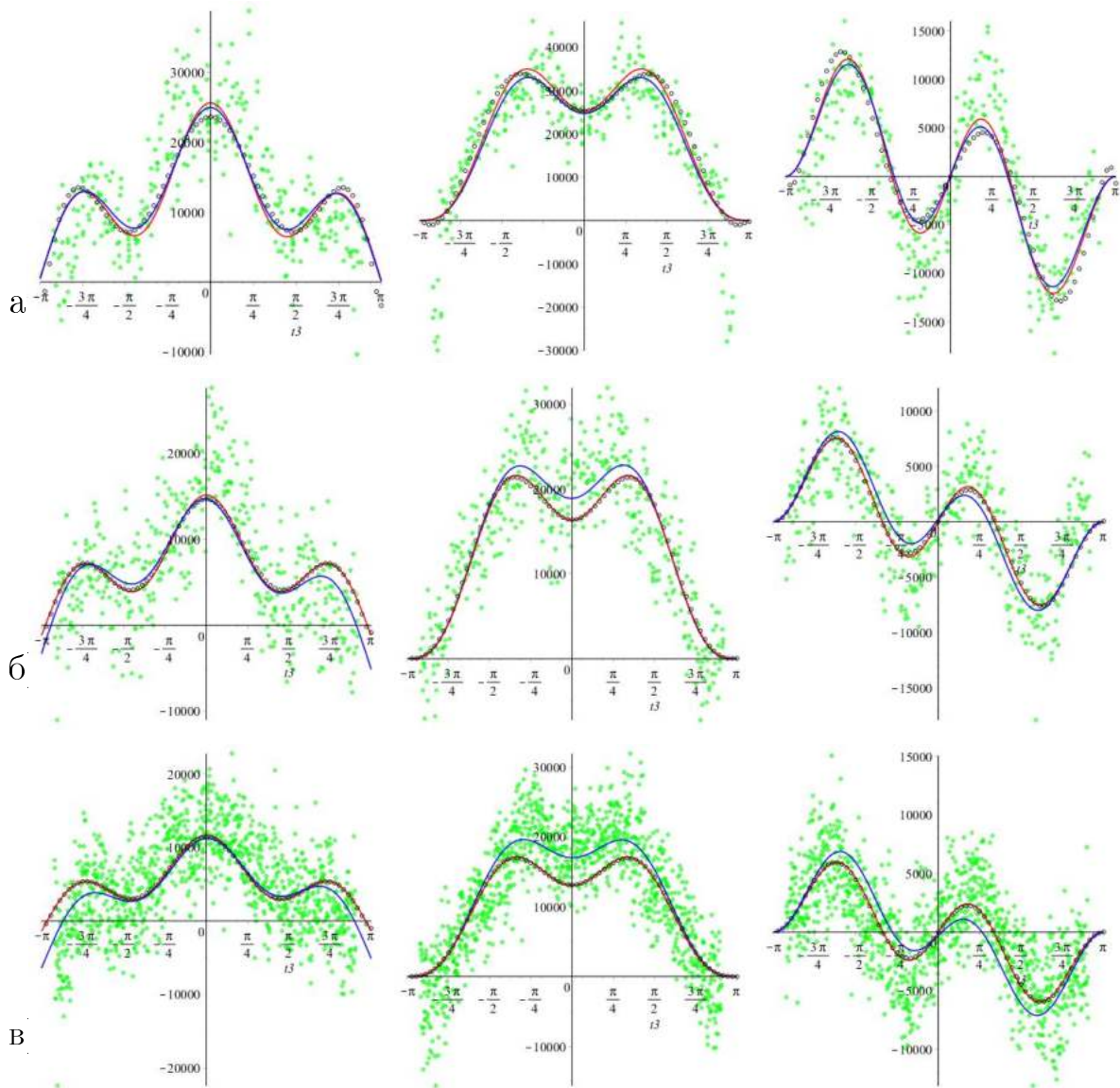


Рис. 4.33: Угловые распределения напряжений для $M^e = 1$, полученные для кольцевой области (а) с внутренним радиусом 7 \AA , а внешним 15 \AA ; (б) с внутренним радиусом 28 \AA , а внешним 32 \AA ; (в) с внутренним радиусом 49 \AA , а внешним 55 \AA . Первый столбец соответствует компоненте тензора напряжений σ_{11} , второй – σ_{22} , третий – σ_{12}

Установлено хорошее соответствие между атомистическими и механическими полями напряжений механики сплошной среды. Во всех случаях напряжения континуальной теории и атомистические распределения напряжений по окружности демонстрируют одинаковое качественное поведение во всем угловом изменении.

Вычисленные значения коэффициентов слагаемых более высокого порядка асимптотического разложения Уильямса a_k^1 и a_k^2 , полученные с помощью ПМ, приведены в приложении 3 таблицах 1-5. Можно наблюдать хорошее соответствие между коэффициентами, полученными с помощью молекулярно-динамического моделирования и континуальным подходом ЛМУР. Нормированные коэффициенты \bar{a}_k^1 и \bar{a}_k^2 приведены в таблицах 1-5 приложения 3. В таблицах 2-5 представлены коэффициенты \bar{a}_k^1 и \bar{a}_k^2 для четырех различных значений параметра смешанности нагружения, полученных с помощью двух подходов. Можно видеть, что КИН и Т-напряжения могут быть вычислены с высокой точностью, тогда как расхождения в коэффициентах слагаемых более высокого порядка в разложении Уильямса увеличиваются с увеличением индекса коэффициента для всех значений параметра смешанности. Тем не менее, установлено хорошее соответствие между результатами моделирования МД и результатами МКЭ.

Поле напряжений в непосредственной окрестности вершины трещины моды I определяется только коэффициентами \bar{a}_k^1 (таблица 1, приложения 2 и 3). В этом случае все коэффициенты \bar{a}_k^2 равны нулю, в то время как для моды II все коэффициенты \bar{a}_k^1 равны нулю и поле вблизи вершины трещины описывается исключительно коэффициентами \bar{a}_k^2 . С уменьшением параметра смешанности M^e от 1 до нуля нормированные коэффициенты \bar{a}_k^1 уменьшаются, а коэффициенты \bar{a}_k^2 увеличиваются по абсолютному значению. В таблице 1 приложения 3 показаны нормированные коэффициенты разложения Уильямса, полученные с помощью МД моделирования

(вторая колонка) и МКЭ моделирования (третья колонка). Коэффициенты \bar{a}_k^1 , полученные при использовании двух подходов, равны друг другу с точностью не менее пяти знаков после запятой. Различие между коэффициентами \bar{a}_{15}^1 , вычисленными с использованием двух подходов, составляет менее 9%. Таким образом, можно заметить, что чем выше индекс коэффициента, тем больше ошибка. Из таблиц 1-5 приложения 3 видно, что КИН, Т-напряжения и коэффициенты \bar{a}_3^1 и \bar{a}_3^2 для всех значений параметра смешанности надежно вычисляются с высокой точностью. Погрешность увеличивается с увеличением порядкового номера коэффициента. Чем больше порядковый номер коэффициента, тем больше ошибка в вычисленных коэффициентах. Но даже для коэффициентов с более высокими порядковыми номерами погрешность не превышает десяти процентов.

4.7. Моделирование монокристаллической FCC-алюминиевой пластины с боковым надрезом. Сравнение результатов моделирования для медной и алюминиевой пластин

В ходе исследования выполнено моделирование пластины из алюминия с одним боковым надрезом в условиях смешанного нагружения. Процедура расчета, приведенная в главе 2, применена для определения механических свойств алюминия. Межатомное взаимодействие алюминия описывается с помощью потенциала внедренного атома.

На рис. 4.34-4.38 приведено сравнение результатов молекулярно-динамического моделирования, а именно, распределений компонентов тензора напряжений σ_{11} , σ_{22} , σ_{12} , для смешанного нагружения пластины с одним боковым надрезом из монокристаллического алюминия (слева) и меди (справа) в моменты времени 10 пс и 30 пс.

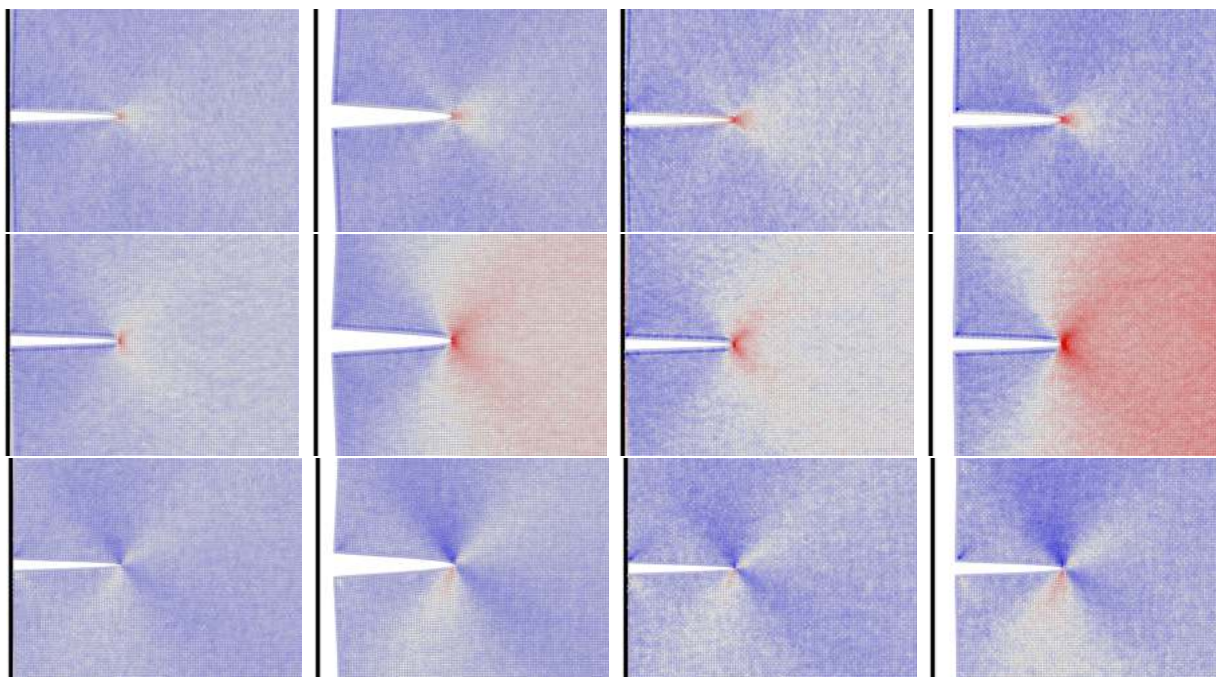


Рис. 4.34: Сравнение результатов молекулярно-динамического (атомистического) моделирования (компонентов тензора напряжений σ_{11} , σ_{22} , σ_{12} в первой, второй и третьей строке, соответственно) растяжения пластины с боковым надрезом из монокристаллического алюминия (слева) и меди (справа) в моменты времени 10 пс и 30 пс

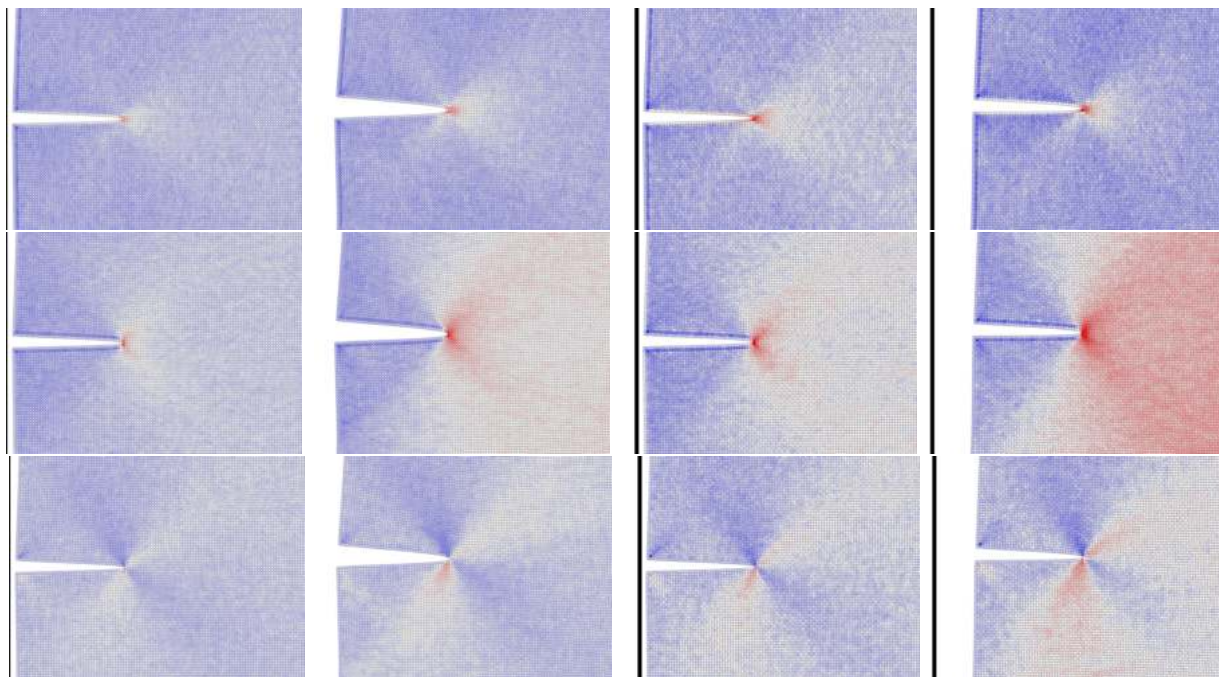


Рис. 4.35: Сравнение результатов молекулярно-динамического (атомистического) моделирования (компонентов тензора напряжений σ_{11} , σ_{22} , σ_{12} в первой, второй и третьей строке, соответственно) смешанного нагружения пластины с боковым надрезом из монокристаллического алюминия (слева) и меди (справа) в моменты времени 10 пс и 30 пс, соответствующего параметру смешанности нагружения $M^e = 0.66$

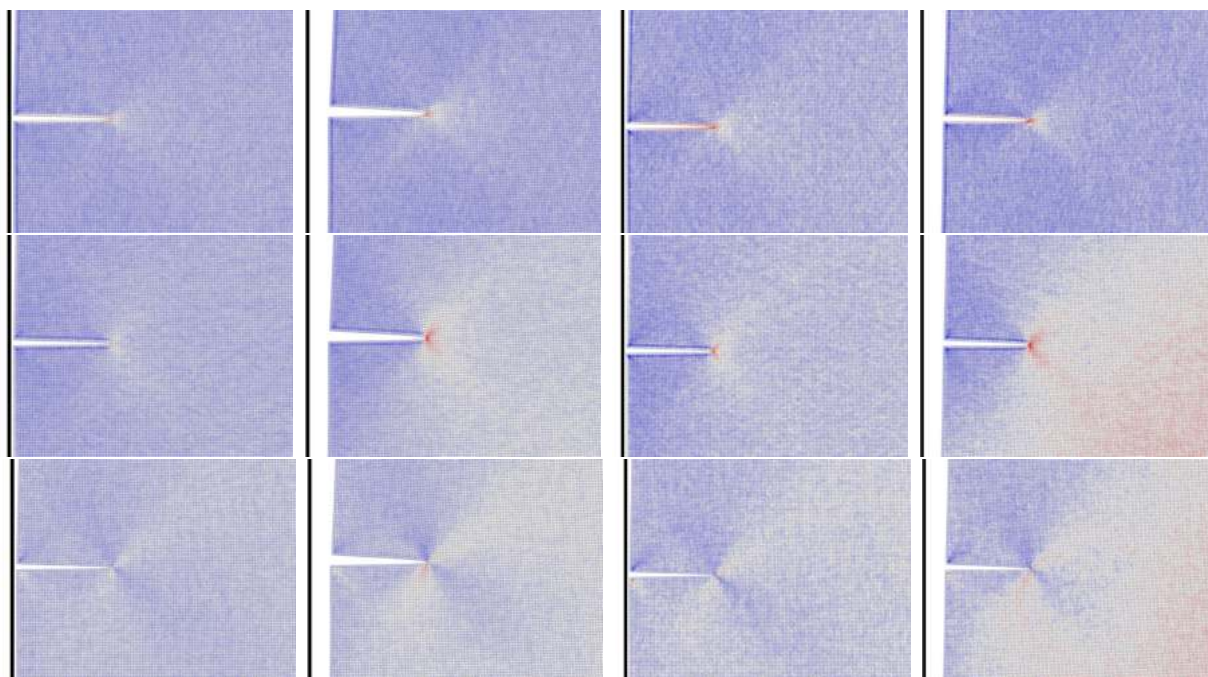


Рис. 4.36: Сравнение результатов молекулярно-динамического (атомистического) моделирования (компонентов тензора напряжений σ_{11} , σ_{22} , σ_{12} в первой, второй и третьей строке, соответственно) смешанного нагружения пластины с боковым надрезом из монокристаллического алюминия (слева) и меди (справа) в моменты времени 10 пс и 30 пс, соответствующего параметру смешанности нагружения $M^e = 0.5$

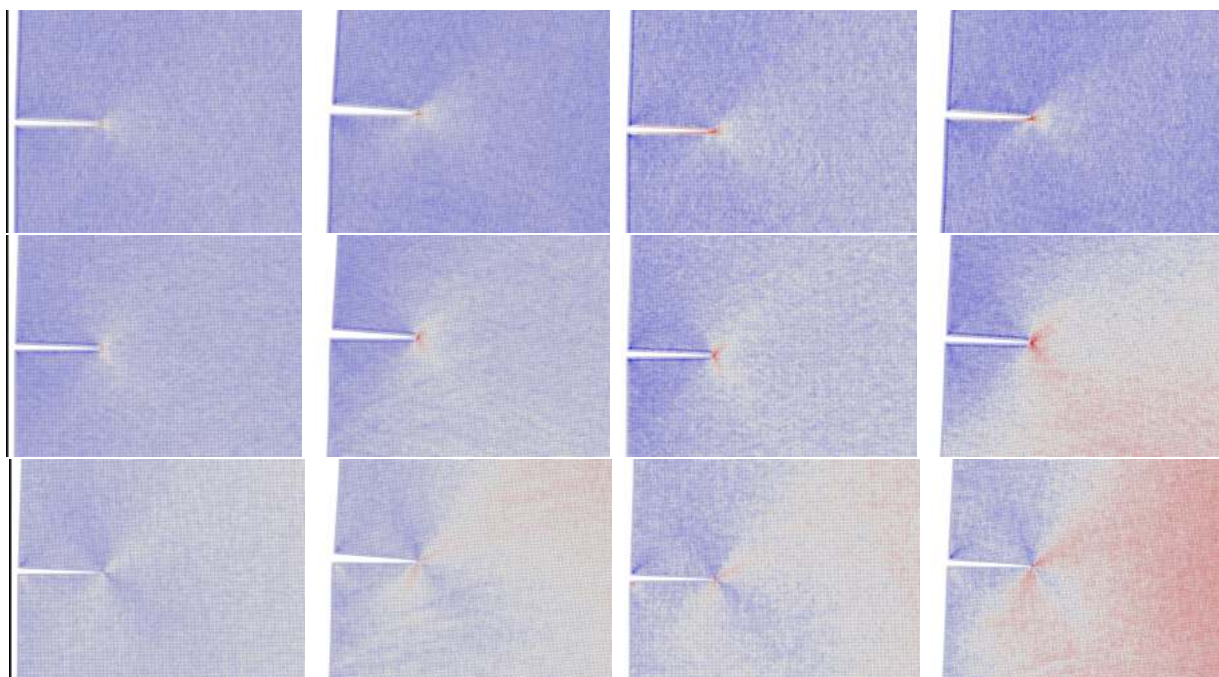


Рис. 4.37: Сравнение результатов молекулярно-динамического (атомистического) моделирования (компонентов тензора напряжений σ_{11} , σ_{22} , σ_{12} в первой, второй и третьей строке, соответственно) смешанного нагружения пластины с боковым надрезом из монокристаллического алюминия (слева) и меди (справа) в моменты времени 10 пс и 30 пс, соответствующего параметру смешанности нагружения $M^e = 0.33$

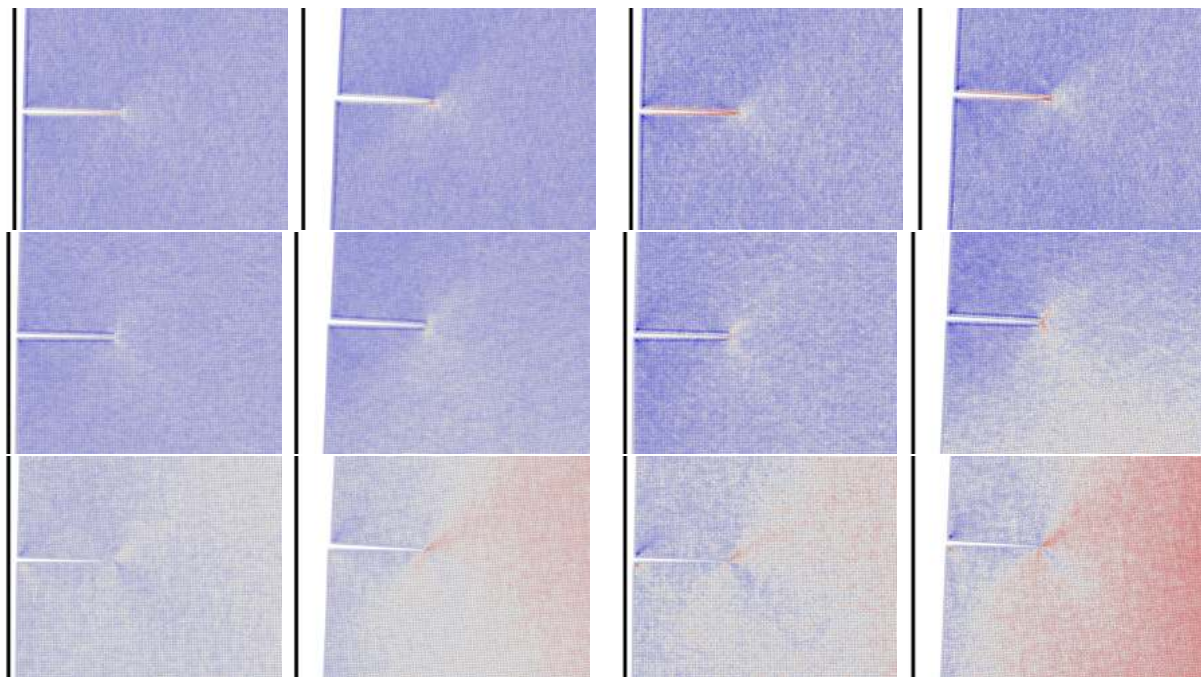


Рис. 4.38: Сравнение результатов молекулярно-динамического (атомистического) моделирования (компонентов тензора напряжений σ_{11} , σ_{22} , σ_{12} в первой, второй и третьей строке, соответственно) смешанного нагружения пластины с боковым надрезом из монокристаллического алюминия (слева) и меди (справа) в моменты времени 10 пс и 30 пс, соответствующего параметру смешанности нагружения $M^e = 0.16$

Таким образом, сравнение компонент тензора напряжений в пластинах из меди и алюминия показало их идентичность, то есть угловые распределения не зависят от кристаллической структуры материала (по крайней мере, для материалов, относящихся к одной группе сингоний).

4.8. Выводы по главе 4

В главе выполнены исследования поведения трещины во всем спектре комбинированных форм нагружения методом динамики частиц. Полученные распределения сопоставлены с многопараметрическим описанием поля напряжений в непосредственной окрестности вершины трещины классиче-

ской механики разрушения. Моделирование методом молекулярной динамики было направлено на вычисление параметров механики разрушения сплошных сред. Коэффициенты интенсивности напряжений для медной пластины с центральной трещиной при нагрузках моды I и смешанных нагрузениях оцениваются с помощью атомистического моделирования. Атомистические значения коэффициентов интенсивности напряжений сравниваются со значениями, полученными из соображений механики разрушения сплошных сред. Установлено хорошее соответствие между атомистическим и континуальным описанием напряжений.

Глава 5. Оценка напряженно-деформированного состояния в трубах с продольной, окружной и наклонной трещиной при действии внутреннего давления и растягивающих усилий

Результаты изложенных выше исследований и, в общем, последние достижения в механике разрушения имеют высокую значимость для оценки напряженно-деформированного состояния конструкций, включая цилиндрические трубы, которые используются в нефтяной и газовой промышленности. Проблема расчета насосно-компрессорных, обсадных и бурильных труб, в которых могут возникать трещины, является остро актуальной. В ряде случаев, например, при воздействии на них агрессивной среды, в этих трубах могут возникать трещины, приводящие к внезапным серьезным нарушениям работоспособности конструкции.

В этой главе представлены результаты численного моделирования нагружения труб с различными дефектами с помощью методов конечных элементов и молекулярной динамики. В рамках исследования проведены численные расчеты с помощью расширенного метода конечных элементов в пакете SIMULIA Abaqus и представлены результаты конечно-элементного моделирования нагружения труб с окружной, продольной и наклонной центральной трещиной. Параллельно выполнены молекулярно-динамические расчеты и приведены результаты атомистического моделирования распространения наклонной трещины в трубке, находящейся в условиях одноосного растяжения.

Анализ полученных результатов показал, что метод молекулярной динамики позволяет моделировать распространение трещин в трубах и может стать перспективным инструментом для исследования процессов разрушения при действии, например, коррозионных факторов.

5.1. Особенности деформирования и разрушения насосно-компрессорных труб в реальных условиях

Насосно-компрессорные трубы (НКТ) в нефтегазовой промышленности служат для извлечения жидкости и газа из скважин, нагнетания воды, газа и проведения различных видов работ по текущему и капитальному ремонту скважин. Они применяются в суровых условиях эксплуатации: постоянное давление, высокие механические нагрузки, воздействия на стенки агрессивных сред, что приводит к коррозии и эрозии. Одним из видов отказа НКТ, возникающий во время эксплуатации, является разрыв по телу трубы, происходящий как по поперечному, так и по продольному сечению; трещины образуются и расширяются до тех пор пока не произойдет разрушение. Возникает необходимость исследования прочности труб при совместном действии нагрузок и коррозионных воздействий пластовых вод нефтегазовых месторождений. Колонны НКТ в процессе эксплуатации подвержены негативному воздействию целого ряда химических веществ и многокомпонентных растворов, асфальто-смоло-парафиновых отложений (АСПО), солей, а также высокоминерализованных пластовых вод и добываемых высокосернистых нефтей (содержание серы более 2%). Долговечность работы НКТ снижается значительно на месторождениях, продукция которых содержит углекислый газ. Особенно интенсивно проходит процесс углекислотной коррозии в скважинах, работающих на газоконденсатных месторождениях. Одними из самых опасных форм разрушения считаются специфические типы сероводородной коррозии - сульфидное коррозионное растрескивание под напряжением (СКРН) и водородное растрескивание (ВР), развитие которых происходит лишь при наличии в среде сероводорода и воды [7].

Как правило, растрескивание при нагружении труб в агрессивной сре-

де связывают с процессами коррозионного воздействия на поверхностные слои металла, в частном случае стали, и их охрупчиванием в результате насыщения водородом. Такие разрушения происходят путем медленного стабильного и предсказуемого развития трещин или внезапного катастрофического разлома. Для НКТ, применяемых при добыче углеводородов, содержание в окружающей среде значительного количества сероводорода означает развитие специфических неконтролируемых видов разрушения.

Примеры таких разрушений в трубах приведены на рис. 5.1, 5.2.

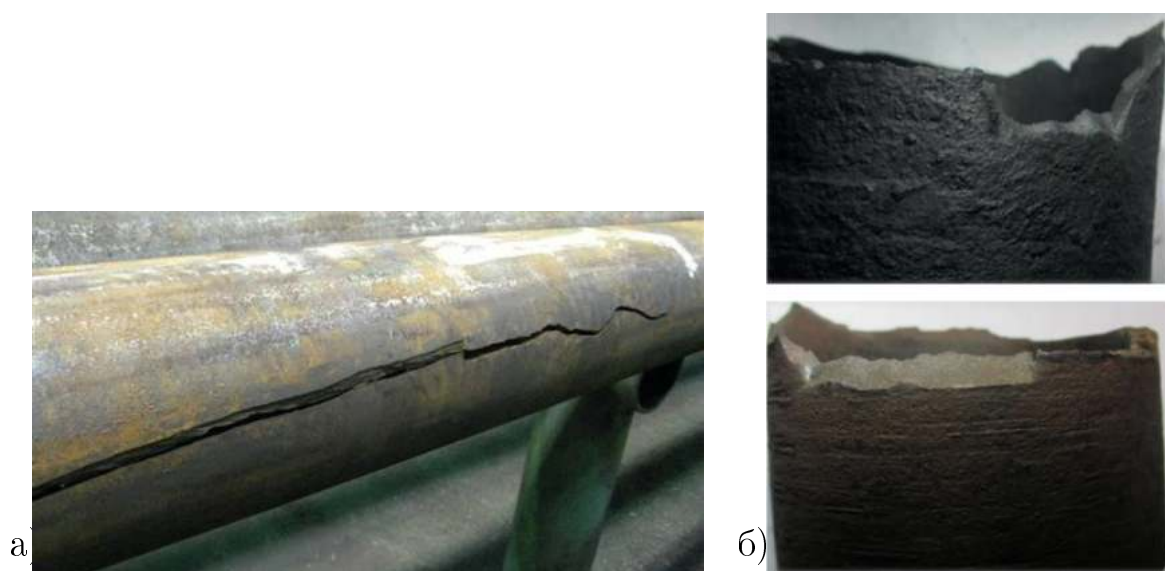


Рис. 5.1: а) Общий вид разрушение НКТ по механизму СКРН (Северо-Покачевское месторождение, скв. 1718, куст № 27А), б) разрушение НКТ по механизму СКРН (Черноозерское месторождение)

Методы предотвращения коррозионных явлений основываются на

- применении ингибиторов коррозии, что может являться дорогостоящим типом воздействия,
- использовании стали в коррозионностойком исполнении (с легирующими добавками), что также является дорогостоящим,
- использовании неметаллических материалов, но при этом возникают множественные ограничения, например, температура и рабочее давление,

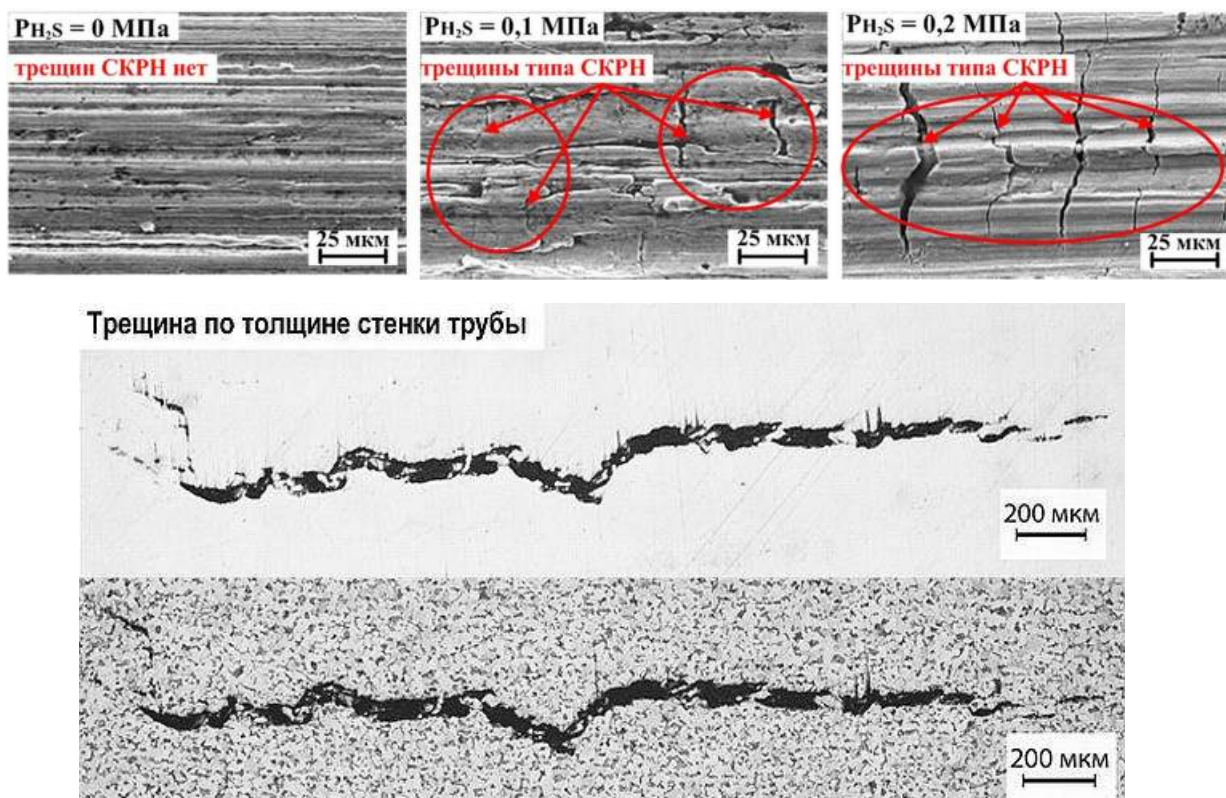


Рис. 5.2: Разрушения по механизму СКРН

- применении труб с антикоррозионными покрытиями, что является самым оптимальным методом.

Тщательное исследование НКТ в условиях воздействия на них различной агрессивной среды является важной задачей, решение которой может быть достигнуто различными методами. Конечно-элементное моделирование широко применяется для расчета прочностных свойств НКТ в различных условиях нагружения. Преимуществом этого метода является возможность создания сложных элементов конструкций, приложения различных систем нагрузок и моделирования распределений напряжений, температур и потоков жидкостей и др. Однако есть сложности связанные с моделированием НКТ в условиях агрессивных сред. Это связано с тем, что в этом случае необходимо учитывать взаимодействия между средой и металлом НКТ. Необходимо ввести в схему метода конечных элементов уравнения

или соотношения, описывающие эти взаимодействия, что может быть затруднено, поскольку необходимо сначала провести ряд экспериментальных исследований, а затем правильно вывести эти уравнения. В этой связи перспективным представляется применение метода молекулярной динамики, поскольку в этом случае можно лишь описать систему и задать потенциал взаимодействия между атомами. Таким образом, необходимо задать материал, из которого сделана НКТ, и описать окружающую среду в соответствии с химическим составом.

5.2. Конечно-элементное моделирование процесса распространения трещины в трубах

В основном в нашей стране изготавливают НКТ из сталей различных групп прочности. Наибольшее распространение получили гладкие НКТ. Основной вид нагружения НКТ - силы собственного веса, при котором верхняя труба испытывает растяжение от веса всей колонны. Именно такой вид нагружения НКТ рассмотрен в данной главе. Моделирование выполнено как конечно-элементным, так и молекулярно-динамическим методом. Для конечно-элементного моделирования в качестве материала выбрана сталь. Размеры модели НКТ заданы в соответствии с ГОСТ 633-80. Условный диаметр трубы равен $d = 102$ мм, номинальная толщина стенки составляла $h = 6.5$ мм, а длина задана равной $L = 1000$ мм. Растягивающая нагрузка приложена к обоим торцам трубы равная $P = 10$ ГПа. Рассмотрено три случая расположения трещины в трубе: поперечная, продольная и под наклоном 45 градусов. Длина трещины a составляла от 40 до 50 мм.

В рамках стандартного метода конечных элементов с целью корректного моделирования роста трещины необходимо введение в окрестности вершины трещины специальных сингулярных элементов. Для нетривиаль-

ных моделей построение такой сетки может вызывать большие сложности. При этом геометрия трещины жестко привязана к конечно-элементной сетке. В связи с этим специально для моделирования распространения трещины разработан расширенный метод конечных элементов (XFEM). Этот метод "расширяет" возможности обычного метода конечных элементов в первую очередь для моделирования фронта трещины. Необходимо определить область, где предполагается появление трещины, и ввести некоторую конститутивную модель, которая описывает сопротивление материала растрескиванию. То есть, когда материал деформируется, модель сопротивления растрескиванию используется для проверки того, сохранил ли материал целостность, или нет. Если выполняется критерий разрушения, то трещина распространяется. При этом тип конечно-элементной сетки может быть выбран любым. Таким образом, вершина трещины появляется внутри элемента тогда, когда напряжения в этом элементе превышают некоторые критические значения σ_f . После этого в материале начинает накапливаться энергия, которая компенсируется соответствующим выделением потенциальной энергии деформации (при отсутствии других видов энергии). Трещина начинает расти тогда, когда скорость высвобождения упругой энергии превышают некоторое критическое значение G_f .

Для конечно-элементного моделирования в качестве образца выбрана стальная гладкая труба. Коэффициент Пуассона равным 0.3, а модуль Юнга равным 200 ГПа в расчетах заданы в соответствии с выбранным материалом. Плотность материала равна 7800 кг/м³. Для моделирования выбран критерий максимального главного напряжения для описания разрушения и задана следующая константа: $\sigma_f = 150$ МПа.

5.2.1. Рост продольной трещины в трубе под действием внутреннего давления

Первая серия расчетов посвящена моделированию роста осевой трещины в трубе под действием внутреннего давления. Типичный вид разрушение трубопровода вследствие распространения осевой трещины приведен на рис. 5.3.



Рис. 5.3: Типичный вид разрушение трубопровода вследствие распространения осевой трещины

Давление приложено к внутренней поверхности трубы и равно $P = 10$ ГПа. Схема приложения нагрузок и типичная КЭ сетка приведены на рис. 5.4. Построенная КЭ-модель содержала 208800 элементов. Результаты моделирования стальной трубы под действием внутреннего давления с осевой центральной трещиной с помощью расширенного метода конечных элементов приведены на рис. 5.5, 5.6.

На рис. 5.5 показаны распределения интенсивности напряжений по Мизесу с течением времени и проиллюстрирована траектория распространения трещины с течением времени.

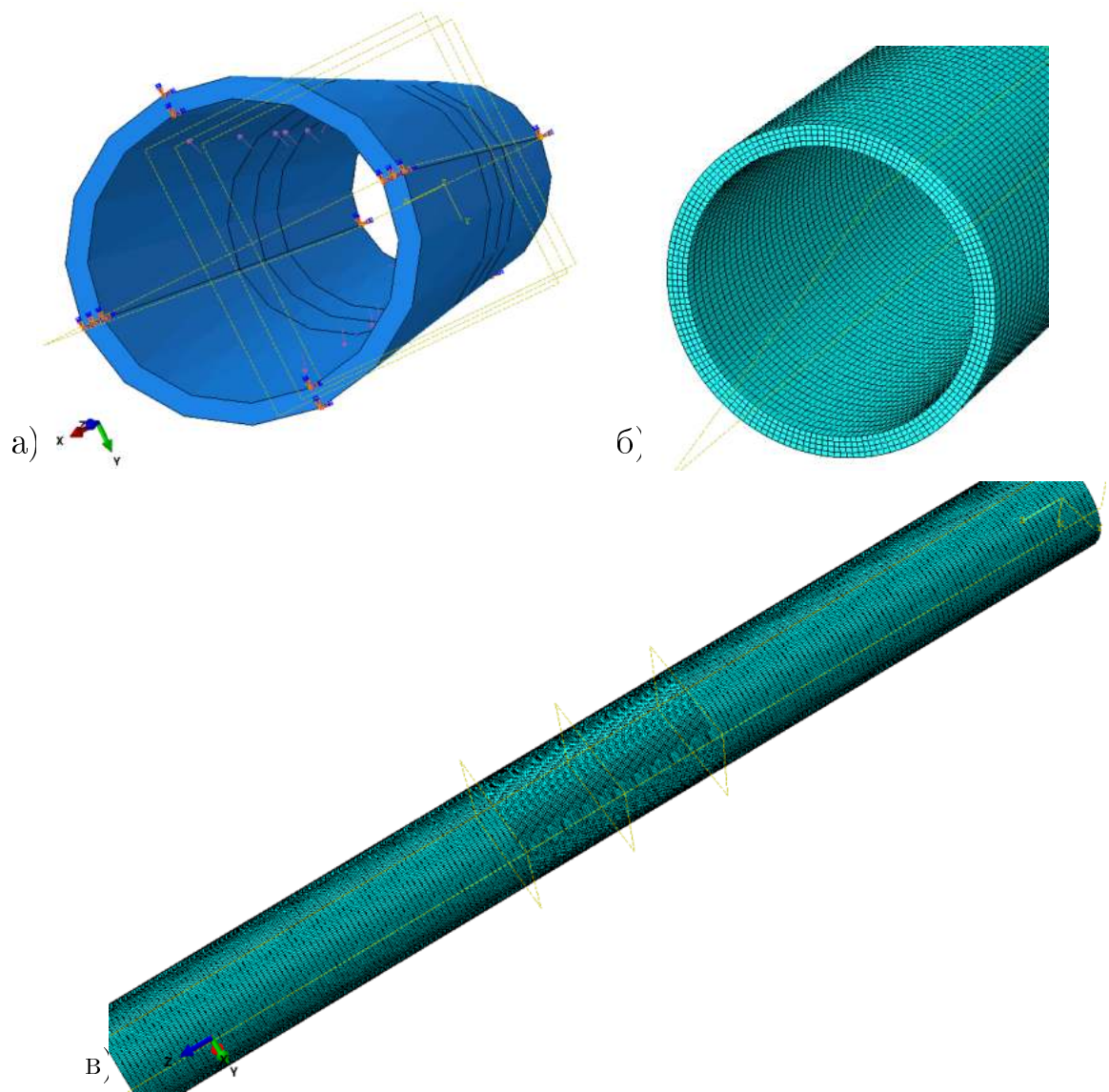


Рис. 5.4: а) Геометрия трехмерной конечно-элементной модели и схема приложения нагрузок к трубе с осевой трещиной, б) конечно-элементная сетка по толщине трубы, в) конечно-элементная сетка по длине трубы

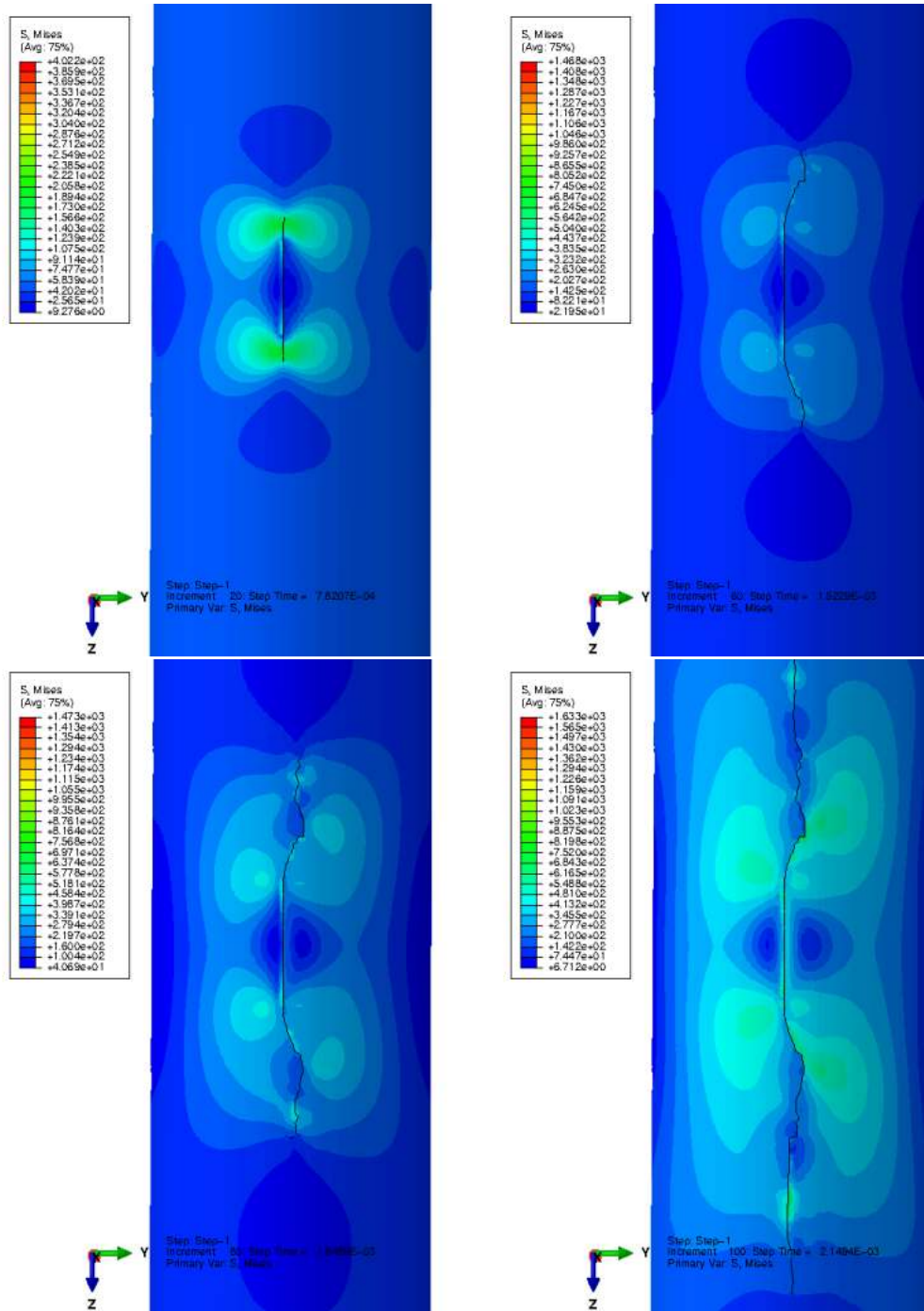


Рис. 5.5: Траектория распространения осевой трещины в трубе, находящейся под внутренним давлением, в недеформируемой конфигурации. Распределения интенсивности напряжений по Мизесу

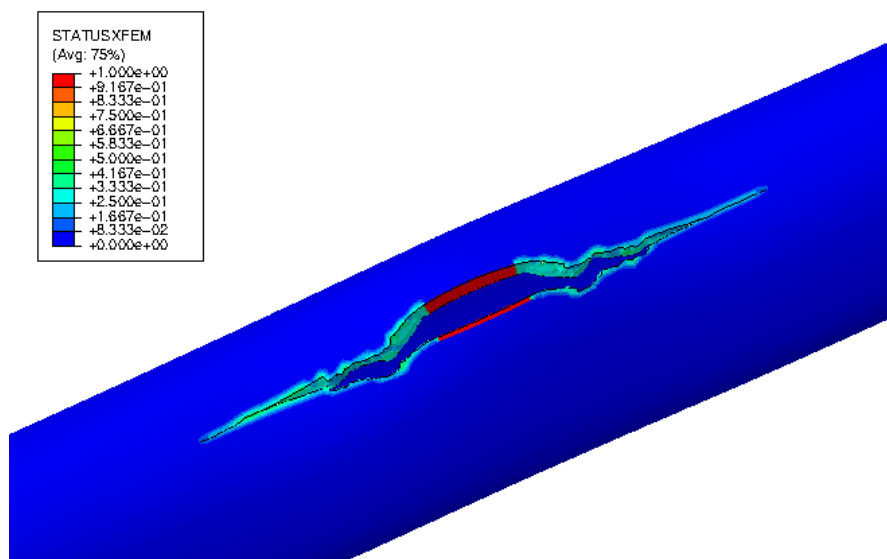


Рис. 5.6: Разрушение вследствие роста продольной трещины в деформированной конфигурации

5.2.2. Распространение окружной трещины в трубе под действием растягивающей нагрузки

Следующая серия расчетов направлена на конечно-элементное моделирование роста окружной трещины в трубе под действием растягивающей деформации. Типичный пример разрушения трубопровода вследствие распространения окружной трещины приведен на рис. 5.7.

Одноосное растяжение приложено к обоим торцам трубы и равно $P = 10$ ГПа. Построенная КЭ-модель содержала 60300 элементов. Схема приложения растягивающей нагрузки приведена на рис. 5.8. Результаты моделирования стальной трубы под действием растягивающей нагрузки с окружной центральной трещиной с помощью расширенного метода конечных элементов приведены на рис. 5.9, 5.10.

Результаты моделирования растяжения трубы с окружной центральной трещиной с помощью расширенного метода конечных элементов в недефор-



Рис. 5.7: Картина разрушения трубопровода вследствие распространения окружной трещины

мированной конфигурации приведены на рис. 5.10. На рис. 5.10 показаны распределения интенсивности напряжений по Мизесу с течением времени.

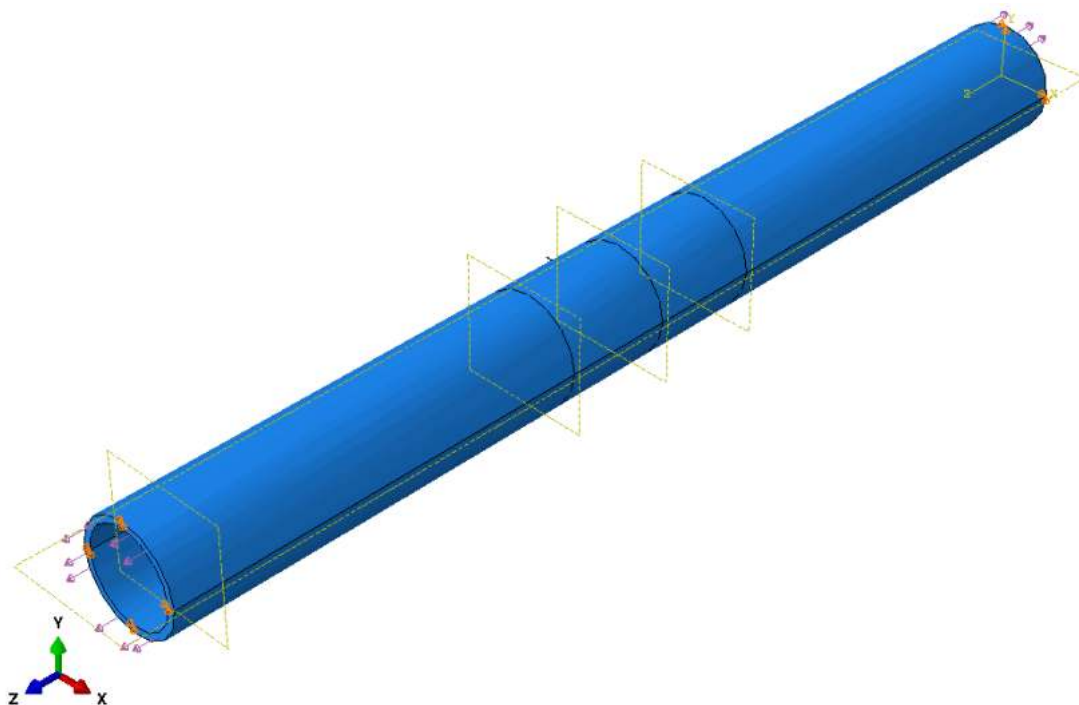


Рис. 5.8: Схема приложения нагрузок к трубе с окружной трещиной

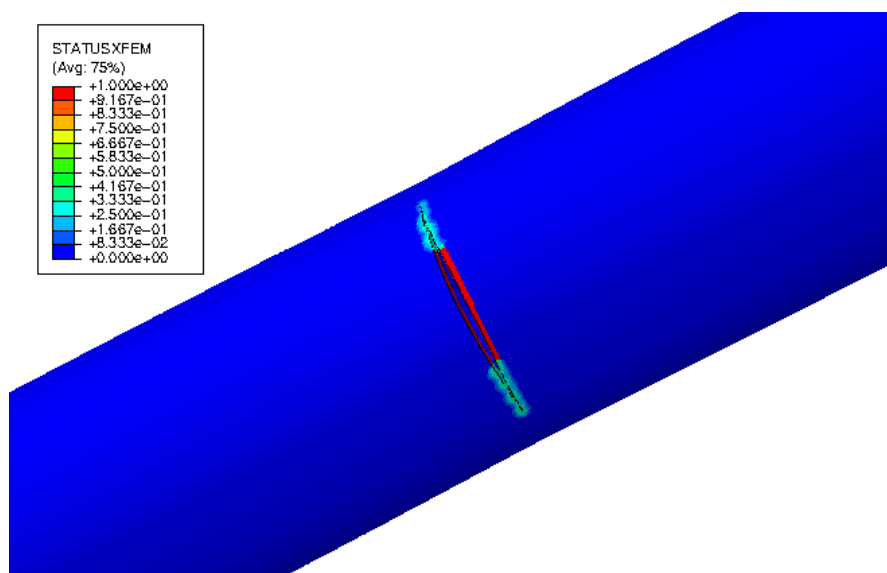


Рис. 5.9: Разрушение трубы вследствие подрастание окружной трещины в деформированной конфигурации

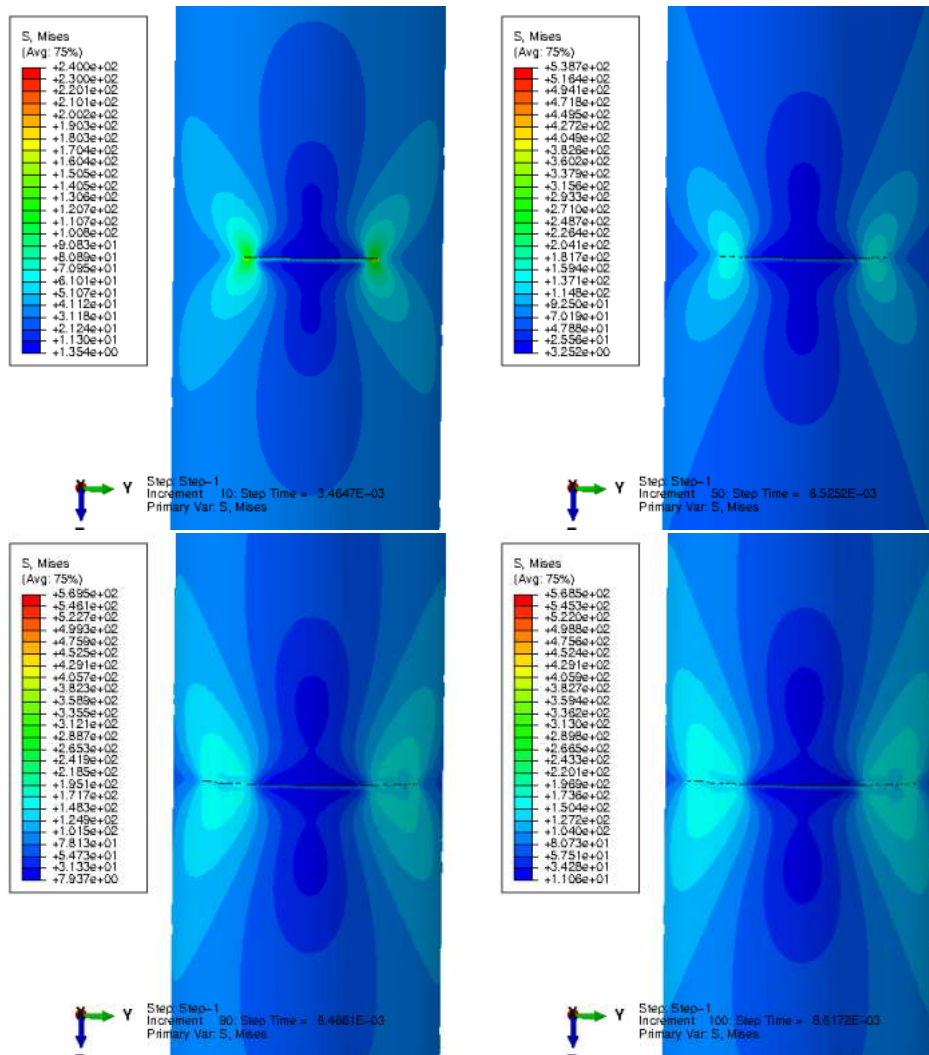


Рис. 5.10: Траектория распространения окружной трещины в трубе под действием растягивающей нагрузки в недеформированной конфигурации. Распределения интенсивности напряжений по Мизесу

5.2.3. Рост наклонной трещины в трубе под действием осевой нагрузки

В реальных эксплуатационных условиях в трубах может образовываться и наклонная трещина. Интерес вызывает исследование распространения наклонной трещины в трубе под действием осевой нагрузки или под внутренним давлением или при их одновременном действии. В данной диссер-

тационной работе ограничимся рассмотрением трубы с наклонной трещиной под действием одноосной растягивающей нагрузки. Растягивающая нагрузка приложена к обоим торцам трубы и равна $P = 10$ ГПа. Построенная КЭ-модель содержала 144800 элементов. Схема приложения растягивающей нагрузки приведена на рис. 5.8. Угол наклона трещины составлял 45° . Результаты моделирования стальной трубы со сквозной наклонной центральной трещиной под действием растягивающей нагрузки с помощью расширенного метода конечных элементов приведены на рис. 5.11, 5.12.

5.3. Молекулярно-динамическое моделирование НДС в трубе с дефектом

Вопросы повышения эксплуатационных характеристик стальных труб, находящихся в условиях комбинированного нагружения в средах, отличающихся высокой коррозионной активностью, не теряют актуальности до настоящего времени. Решение этих вопросов приводит к необходимости учета процессов происходящих на микроуровне, так как именно на этом уровне происходят основные межмолекулярные взаимодействия, приводящие к разрушениям на макроуровне. Необходима разработка более детальных методик исследования коррозионного растрескивания под напряжениями. В этой связи перспективным представляется применение метода динамики частиц, как инструмент для моделирования, например, диффузии водорода коррозионного происхождения и его скопления в местах дефектов кристаллической решетки металла. Начальным этапом к такому роду исследований является сравнение результатов моделирования методом молекулярной динамики и с помощью методов континуальной механики разрушения.

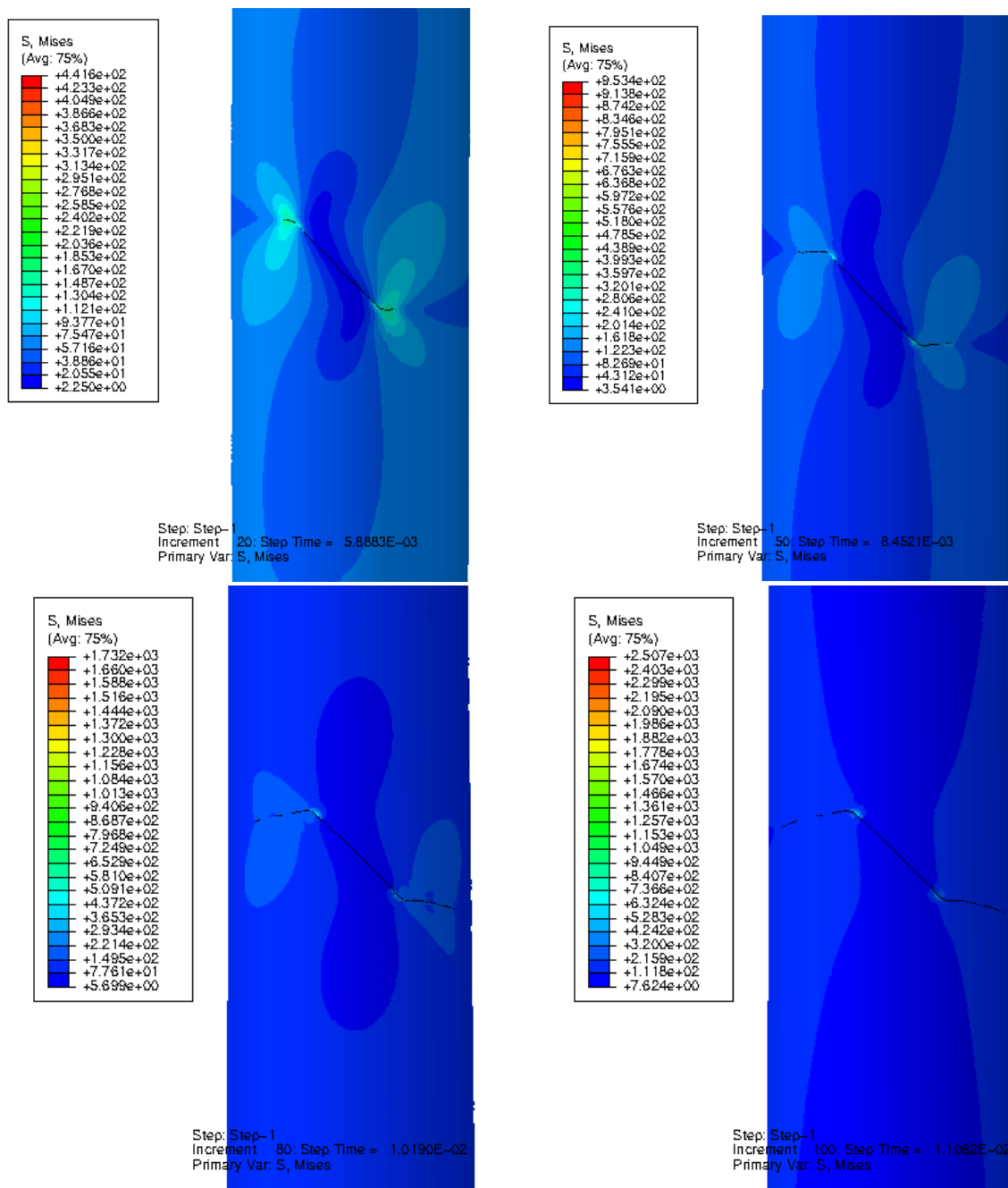


Рис. 5.11: Траектория распространения наклонной трещины в трубе под действием растягивающей нагрузки в недеформированной конфигурации. Распределения интенсивности напряжений по Мизесу

5.3.1. Моделирование распространения трещины в трубе с помощью метода молекулярной динамики

С помощью пакета LAMMPS, реализующего метод молекулярной динамики, выполнено моделирование одноосного растяжения трубки с наклонной

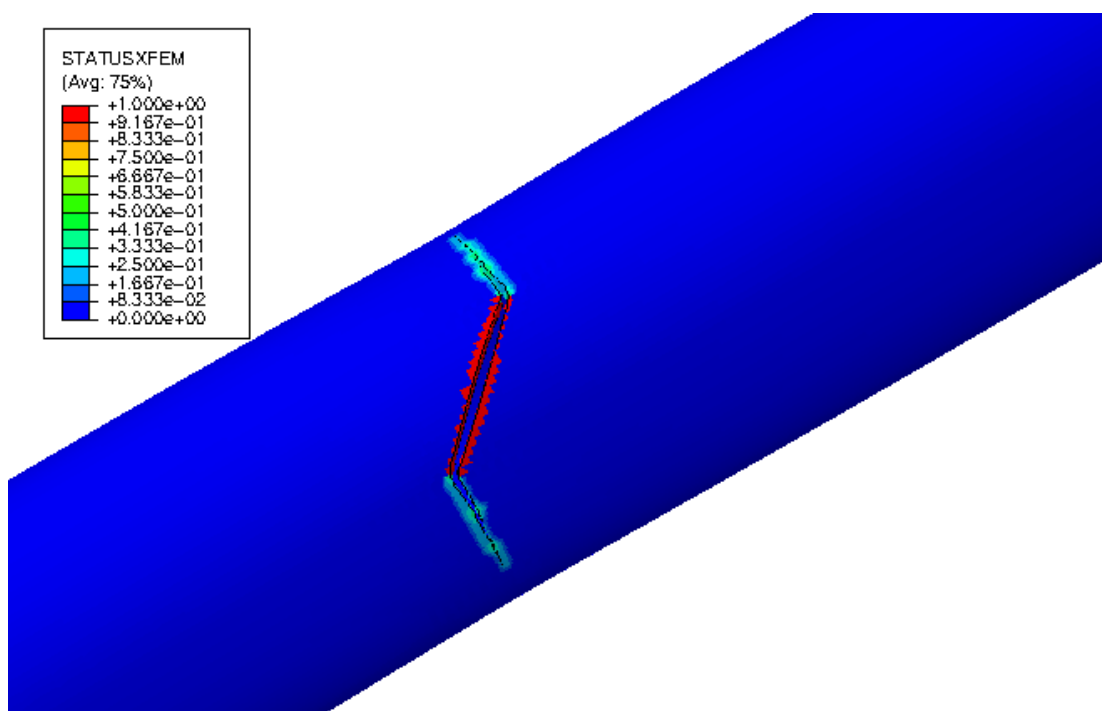


Рис. 5.12: Разрушение трубы вследствие подрастание наклонной трещины в деформированной конфигурации

трещиной. Трубка в основной серии расчетов имела следующие размеры: радиус внешнего радиуса трубки равен 54.225 \AA , внутреннего – 43.38 \AA , длина трубки составляла 361.5 \AA . Размер трубки подбирался для максимального соответствия ее размеров моделям труб из конечно-элементного расчета. При этом моделирование более тонкой трубки способствует существенному влиянию на процесс распространения трещины поверхностных эффектов, а увеличение размеров трубки влечет возрастание времени расчета. Граничные условия устанавливались периодическими во всех направлениях. Чтобы исключить влияние соседних образов вдоль осей x_1 и x_2 , внешний диаметр трубки был меньше размера ячейки моделирования на 4 \AA по этим направлениям. Моделируемая система содержала 58900 атомов. Трещина задана путем определения двух регионов в виде призм (с целью моделирования наклонной трещины) и исключения взаимодействия атомов из первой области со второй. Угол наклона трещины составлял 45° . В те-

чение 20 пс проводилась релаксация системы. Температура задана 0.1К с целью исключения температурных эффектов. В течение 30 пс к трубке прикладывалась растягивающая нагрузка вдоль ее оси. Геометрия трехмерной молекулярно-динамической модели трубки с наклонной трещиной приведена на рис. 5.13. Красным и розовым цветом отмечены области, между атомами которых исключено взаимодействие, соответственно между этими регионами и инициирована трещина. Траектория распространения трещины с течением времени приведена на рис. 5.14.

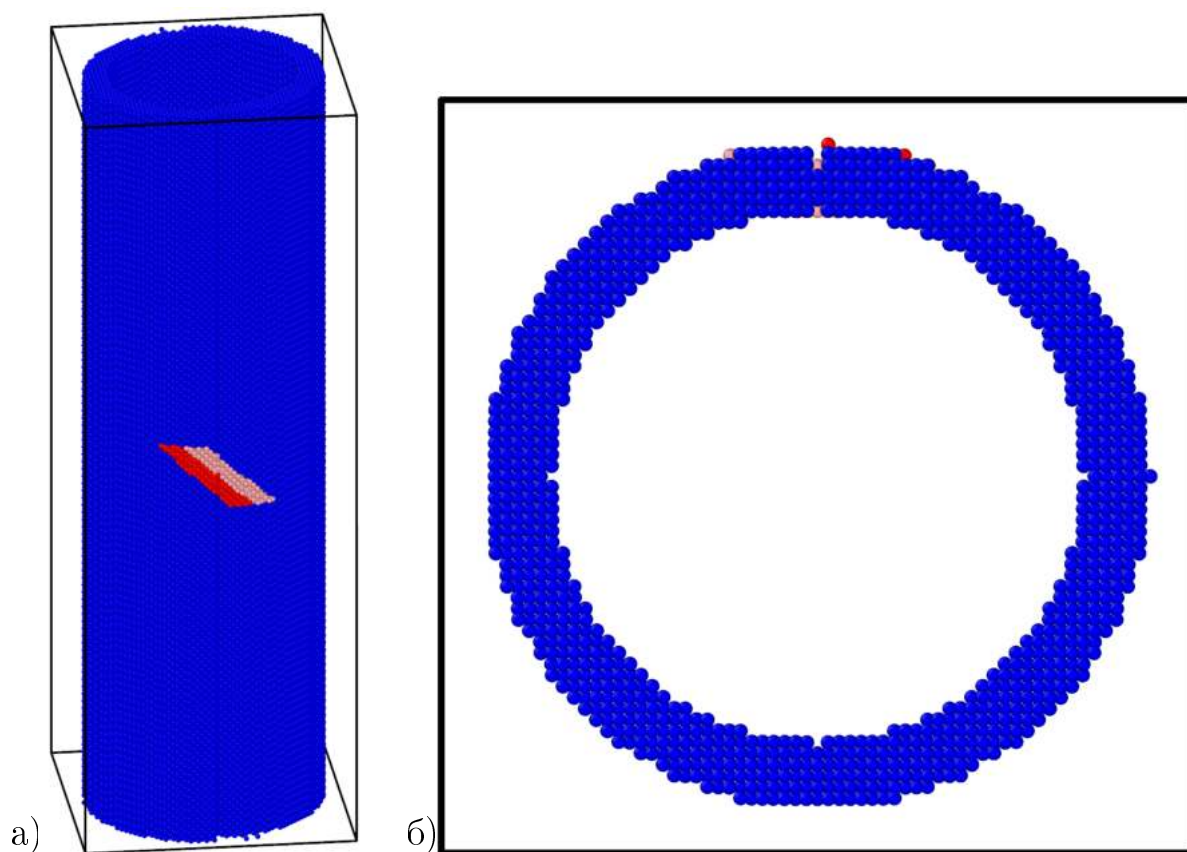


Рис. 5.13: Геометрия трубки с наклонной центральной трещиной в LAMMPS, а) вид сбоку, б) вид сверху

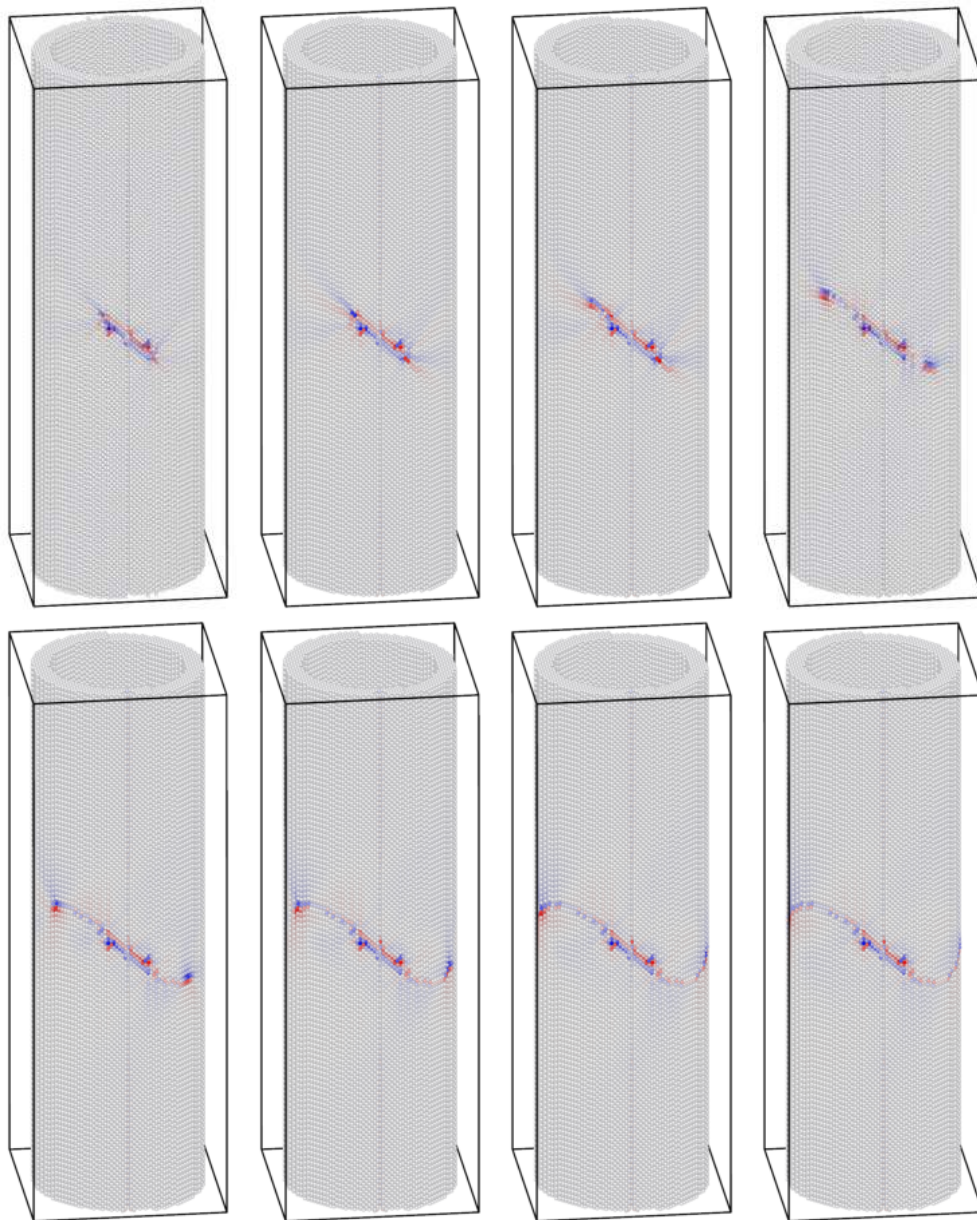


Рис. 5.14: Траектория распространения центральной наклонной трещины в трубке на молекулярном уровне с течением времени

5.4. Сопоставление конечно-элементного расчета с результатами молекулярно-динамического моделирования НДС в трубке с дефектом

Анализ полученных результатов конечно-элементного и молекулярно-динамического расчетов позволяет увидеть подобие/совпадение траекто-

рий распространения наклонной трещины в растягиваемой трубе при моделировании двумя различными подходами. Это говорит о том, что метод молекулярной динамики является рабочим инструментом для моделирования распространения трещин не только в пластинах, но и в более сложных образцах, например, трубах. Анализ литературных источников показал, что весьма мало работ посвящено исследованию распространения трещин в трубках с помощью метода динамики частиц. Однако, имея широкие возможности моделирования межатомного взаимодействия, метод молекулярной динамики становится перспективным методом исследования таких процессов, как водородное или сульфидное коррозионное растрескивание под напряжением, происходящих на микроуровне, к примеру, в насосно-компрессорных трубах.

5.5. Выводы по главе 5

В главе 5 приведены результаты вычислительного эксперимента, основанного на атомистически-молекулярном моделировании трубки с наклонным дефектом, находящейся под действием одноосной растягивающей нагрузки. Параллельно выполнены конечно-элементные расчеты распространения осевой, окружной и наклонной трещины в трубе, находящейся под действием внутреннего давления и растягивающей нагрузки. Установлено, что траектория роста острой трещины, найденная с помощью атомистического моделирования, совпадает с траекторией трещины, обнаруживаемой с помощью технологии расширенного метода конечных элементов.

Разработанный подход оценки траектории роста трещины в насосно-компрессорных трубах и методика расчета напряженно-деформированного состояния у вершины трещины нашли применение в научно-исследовательской и в производственной деятельности

ООО "Самарский научно-исследовательский и проектный институт нефтедобычи" (приложение 4). Материалы диссертации были использованы ООО "Ренфорс-НТ" в целях повышения эффективности научно-исследовательской деятельности (приложение 5).

Заключение

В работе проведен широкий вычислительный эксперимент с использованием большемерных образцов и применением параллельных вычислений на суперкомпьютере "Сергей Королев". Выполнено компьютерное моделирование смешанного деформирования образцов с трещинами с разными конфигурациями: рассмотрена пластина с центральной трещиной и образец с боковым надрезом. В качестве материала были выбраны монокристаллическая ГЦК-медь и монокристаллический ГЦК-алюминий с потенциалами внедренного атома, имеющимися в открытом пакете LAMMPS.

В первой части исследования были вычислены углы подрастания трещины в монокристаллической пластине при различных формах нагрузки. Оказалось, что эти значения соответствуют углам распространения трещины, которые можно определить через известные критериальные условия разрушения механики континуума (обобщенного критерия максимального тангенциального напряжения и обобщенного критерия минимума плотности энергии упругой деформации). Дальнейший анализ показал, что углы направления распространения трещины, полученные с помощью метода динамики частиц, совпадают с углами, предсказанными ЛМУР. Кроме того, обнаружено, что углы раскрытия трещины, определенные с помощью двух разных подходов, очень близки друг к другу, особенно если учитывать высшие приближения в асимптотическом представлении М. Уильямса поля напряжений у вершины трещины. В целом, результаты исследования показывают, что использование молекулярно-атомистического метода для имитации распространения трещины является эффективным способом понимания процессов деформирования и разрушения твердых тел с дефектами.

Найдены значения КИН, T-напряжения и коэффициентов слагаемых более высокого порядка разложения Уильямса для полей вблизи вершины центральной трещины в медной пластине и бокового надреза в образце при нагружении по моде I и смешанном типе нагружения для всего интервала значений параметра смешанности нагружения с помощью МД моделирования. Показано, что, располагая координатами атомов и значениями напряжений в непосредственной окрестности вершины трещины атомистической модели, можно определить амплитудные множители многоточечного разложения Уильямса континуальной механики.

В диссертационной работе выполнено сравнение результатов атомистического моделирования и результатов континуальной классической механики хрупкого разрушения. Оказалось, что даже для сравнительно небольшого количества атомов (сотни атомов) угловые распределения компонент тензора напряжений являются весьма близкими и приводят к одним и тем же значениям параметров механики разрушения. Таким образом, установлено, что результаты классической механики разрушения могут быть распространены на атомистические размеры (на наноуровень). Поэтому, можно заключить, что аналитические выражения, описывающие поля напряжений в континуальной механике справедливы и на атомистическом уровне. Более того, сравнение компонент тензора напряжений в пластинах из меди и алюминия показало их идентичность, то есть их угловые распределения не зависят от кристаллической структуры материала (по меньшей мере, для материалов, относящихся к одной группе сингоний).

Новизна подхода заключается в вычислении коэффициентов слагаемых более высокого порядка разложения Уильямса классической механики разрушения. Вычислительные эксперименты, выполненные в гибком инструменте моделирования LAMMPS, наглядно демонстрируют возможность надежного вычисления коэффициентов более высокого порядка. Как показа-

но в таблице 1-5 приложений 1 и 2, чем больше порядковый номер коэффициента, тем больше разница между МД и конечно-элементным решением. Стоит отметить, что полученные пятнадцать коэффициентов показывают, что атомистическое поле напряжений может быть точно описано многопараметрическим разложением Уильямса.

Полученное разложение в многопараметрический ряд поля напряжений в окрестности вершины острой трещины может быть полезно для многомасштабных моделей разрушения, объединяющих процессы и явления на макро-, микро- и наноуровнях [47, 119, 190]. Можно сделать вывод, что крайне важно и естественно разрабатывать многомасштабные и иерархические методы, а сочетание подходов механики сплошных сред и атомистического моделирования позволит получить более глубокое понимание и реалистичное описание поведения роста трещин и процесса деформации при различных сложных нагрузках. Такой подход открывает широкие перспективы для описания процессов разрушения на разных масштабных ступенях, а именно в больших пространственных и временных диапазонах.

Разработанный подход оценки траектории роста трещины в насосно-компрессорных трубах и методика расчета напряженно-деформированного состояния у вершины трещины нашли применение в научно-исследовательской и в производственной деятельности ООО "Самарский научно-исследовательский и проектный институт нефтедобычи" (приложение 4). Материалы диссертации были использованы ООО "Ренфорс-НТ" в целях повышения эффективности научно-исследовательской деятельности. В расчетные схемы пакетов, реализующих метод конечных элементов, была внедрена возможность интеграции молекулярно-динамических расчетов с целью оценки траектории роста трещины для элементов оборудования (приложение 5).

Литература

1. Агафонов А.Н., Еремин А.В. Метод классической молекулярной динамики в моделировании физико-химических процессов: учеб. пособие - Самара: Издательство "Самарский университет 2017. - 68 с.
2. Астафьев В.И., Радаев Ю.Н., Степанова Л.В. Нелинейная механика разрушения. - Самара: Издательство "Самарский университет 2001. - 562 с.
3. 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. - DOI: 10.18287/2541-7525-2020-26-3-40-62.
4. 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. - DOI: 10.18287/2541-7525-2019-25-3-39-61.
5. Белова О.Н., Степанова Л.В., Чаплий Д.В. Компьютерное моделирование роста трещин. Метод молекулярной динамики // Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия. - 2020. - Т. 26. - №4. - С. 44-55. - DOI: 10.18287/2541-7525-2020-26-4-44-55.
6. Волегов П.С., Герасимов Р.М., Давлетшин Р.П. Модели молекулярной динамики: обзор ЕАМ-потенциалов. Часть 1: Потенциалы для однокомпонентных систем // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. - 2017. Т. 4. - С. 214-237. - DOI: 10.15593/perm.mech/2017.4.14.
7. Ерехинский Б.А., Чернухин В.И., Арабей А.Б., Пышминцев И.Ю., Веселов И.Н., Ширяев А.Г. Разработка отечественных высокопрочных труб нефтяного сортамента, стойких в средах, содержащих сероводород // Проектирование, сооружение и эксплуатация газонефтепроводов и газонефтехранилищ - 2016. - №4. - С. 40-46
8. Кривцов А.М., Кривцова Н.В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневосточный математический журнал - 2002. - V. 3. - №2. - С. 254-276.

9. Кривцов А.М., Кривцова Н.В. Описание пластических эффектов при молекулярно-динамическом моделировании откольного разрушения // Физика твердого тела. - 2004. - V. 46. - №6. - С. 1025-1030.
10. Кулиев В.Д., Морозов Е.М. Градиентный деформационный критерий хрупкого разрушения // Живучесть и конструкционное материаловедение (ЖИВКОМ-2016). Труды конференции. - 2016. - С. 24-27.
11. Матвиенко Ю.Г. Двухпараметрическая механика разрушения. - М.: Физматлит, 2021. - 208 с.
12. Матвиенко Ю.Г. Моделирование кинетики развития трещин в поверхностных слоях материала // Заводская лаборатория. - 2017. - Т. 83. - №1. - С. 65-71.
13. Матвиенко Ю.Г. Основы физики и механики разрушения. - М.: Физматлит, 2022. - 144 с.
14. Морозов Е.М., Никишков Г.П. Метод конечных элементов в механике разрушения. - М.: USSR, 2020. - 254 с.
15. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. - 2012. - Т. 24. - №6. - С. 3-44.
16. 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. Естественная серия. - 2019. - Т. 25. - №3. - С. 62-82. - DOI: 10.18287/2541-7525-2019-25-3-62-82.
17. 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. - 2017. - Т. 4. - С. 189-213. - DOI: 10.15593/perm.mech/2017.4.13.
18. Степанова Л.В., Росляков П.С. Полное асимптотическое разложение М. Уильямса у вершин двух коллинеарных трещин конечной длины в бесконеч-

- ной пластине // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. - 2015. - №4. - С. 188–225. - DOI: 10.15593/perm.mech/2015.4.12.
19. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // Физическая мезомеханика. - 2011. - Т. 14. - №4. - С. 17-28.
 20. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. - М.: Мир, 1967. - Т. 1. - с. 260.
 21. Чаплыгин Ю.А. Нанотехнологии в электронике-3.1. - М.: Техносфера, 2016. - 480 с.
 22. Эглит М.Э. Лекции по основам механики сплошных сред. - М.: USSR, 2022. - 208 с.
 23. Admal N.C., Tadmor E.B. A unified interpretation of stress in molecular systems // Journal of Elasticity. - 2010. - V. 100. - P. 63-143.
 24. Adnan A., Sun C.T. Evolution of nanoscale defects to planar cracks in a brittle solid // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. - 2010. - V. 58. - P. 983-1000.
 25. Aizenberg J., Weaver J.C., Thanawala M.S., Sunder V.C., Morse D.E., Fratzl P. Skeleton of Euplectella sp.: Structural hierarchy from the nanoscale to the macroscale // Science. - 2005. - V. 309. - P. 275-278. - DOI: 10.1126/science.1112255.
 26. Alder B.J., Wainwright T.E. Studies in molecular dynamics. I. General method // Journal of Chemical Physics. - 1959. - V. 31. - P. 459-466. - DOI: 10.1063/1.1730376.
 27. Allen M. P., Tildesley D. J. Computer Simulation of Liquids - Oxford University Press, 1989. - 385 p.
 28. Ashurst W.T., Hoover W.G. Microscopic fracture studies in the two-dimensional triangular lattice // Physical Review B. - 1976. - V. 14. - P. 1465. - DOI: 10.1103/PhysRevB.14.1465.
 29. Ayatollahi M.R., Rashidi Moghaddam M., Berto F. A generalized strain energy density criterion for mixed mode fracture analysis in brittle and quasi-brittle materials // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. - 2015. - V. 79. - P. 70-76.

30. Belova O.N., Stepanova L.V. Estimation of crack propagation direction angle under mixed mode loading in linear elastic isotropic materials by generalized fracture mechanics criteria and atomistic modeling (molecular dynamics method) // Journal of Physics: Conference Series. - 2018. - V. 1096. - P. 012060. - DOI: 10.1088/1742-6596/1096/1/012060.
31. 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. - DOI: 10.1016/j.prostr.2022.03.150.
32. 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. - DOI: 10.1016/j.prostr.2021.09.006.
33. 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. - DOI: 10.1016/j.prostr.2022.02.023.
34. Benito deCelis, Argon Ali S. Molecular dynamics simulation of crack tip processes in alpha-iron and copper // Journal of Applied Physics. - 1983. - V. 54. - №9. 4864. - DOI: 10.1063/1.332796.
35. Bernstein N., Hess D.W. Lattice trapping barrier to brittle fracture // Physical Review Letters. - 2003. - V. 91. - №2. - P. 025501. - DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.025501.
36. Berto F., Ayatollahi M.R. A review of the local strain energy density approach to V-notches // Physical mesomechanics. - 2017. - V. 5. - №2. - P. 113-132. - DOI: 10.5267/j.esm.2017.3.001.
37. Berto F., Ayatollahi M.R., Borsato T., Ferro P. Local strain energy density to predict size-dependent brittle fracture of cracked specimens under mixed mode loading // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. - 2016. - V. 86. - P. 217-224. - DOI: 10.1016/j.tafmec.2016.07.004.
38. Berto F., Lazzarin P. Recent developments in brittle and quasi-brittle failure assessment

- of engineering materials by means of local approaches // *Materials Science and Engineering*. - 2014. - V. 75. - №1. - P. 1-48. - DOI: 10.1016/j.mser.2013.11.001.
39. Bitzek E., Kermode J.R., Gumbsch P. Atomistic aspects of fracture // *International Journal of Fracture*. - 2015. - V. 191. - №1-2. - P. 13–30. - DOI: 10.1007/s10704-015-9988-2. - DOI: 10.1007/s10704-015-9988-2.
 40. Bose S.K., Kudrnovsky J., Drchal V., Turek I. Pressure dependence of Curie temperature and resistivity in complex Heusler alloys // *Physical Review* - 2011. - V. 84. - №18. - P. 174422. - DOI: 10.1103/PhysRevB.84.174422.
 41. Branicio P.S., Srolovitz D.J. Local stress calculation in simulations of multicomponent systems // *Journal of Computational Physics*. - 2009. - V. 228. - №22. - P. 8467-8479. - DOI: 10.1016/j.jcp.2009.08.024.
 42. Buehler M.J. Nature designs tough collagen: explaining the nanostructure of collagen fibrils // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. - 2006. - V. 103. - №33. - P. 12285-12290. - DOI: 10.1073/pnas.0603216103.
 43. Buehler M.J., Gao H.J., Huang Y. Atomistic and continuum studies of stress and strain fields near a rapidly propagating crack in a harmonic lattice // *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. - 2004. - V. 41. - №1-3. - P. 21-42. - DOI: 10.1016/j.tafmec.2003.11.022.
 44. Buehler M.J., Yao H., Gao H., Ji B. Cracking and adhesion at small scales: atomistic and continuum studies of flaw tolerant nanostructures // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. - 2006. - V. 14. - №5. - P. 799-816. - DOI: 10.1088/0965-0393/14/5/001.
 45. Bulatov V.V., Cai W. *Computer Simulations of Dislocations*. - Oxford University Press. - 2006. - DOI: 10.1093/oso/9780198526148.001.0001.
 46. Catlow C.R.A., Diller K.M., Norgett M.J. Interionic potentials for alkali halides // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. - 2001. - V. 10. - №9. - P. 1395-1412. - DOI: 10.1088/0022-3719/10/9/013.
 47. Chakraborty S., Ghost S. A concurrent atomistic-crystal plasticity multiscale model for crack propagation in crystalline metallic materials // *Computer methods in Applied Mechanics and Engineering*. - 2021. - V. 379. - №2. - P. 113748. - DOI: 10.1016/j.cma.2021.113748.

48. Chandra S., Kumar N.N., Samal M.K., Chavan V.M., Patel R.J. Molecular dynamics simulations of crack growth behavior in Al in the presence of vacancies // Computational materials Science. - 2016. - V. 117. - P. 518-526. - DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.02.032.
49. Cheng S.H., Sun C.T. Applicability of continuum fracture mechanics in atomistic systems // Proc. ASME. IMECE2011. - 2011. - №8.- P. 283-288. - DOI: 10.1115/IMECE2011-63478.
50. Chen Y. Local stress and heat flux in atomistic systems involving threebody force // Journal of Chemical Physics. - 2006. - V. 124. - P. 054113. - DOI:10/1016/j.commatsci.2021.110873.
51. Chen Z., Wang H., Liu G.-R. Fatigue crack propagation in carbon steel using RVE based model // Engineering Fracture Mechanics. - 2021. - V. 258. - №2. - DOI: 10.1016/j.engfracmech.2021.108050.
52. Cheung K.S., Yip, S. Atomic-level stress in an inhomogeneous system // Journal of Applied Physics. - 1991. - V. 70. - P. 5688-5690. - DOI: 10.1063/1.350186.
53. Chu K., Diaz A., Chen Y., Zhu T., McDowell D.L. Multiscale Concurrent Atomistic (CAC) modeling of multicomponent alloys // Computational Materials Science. - 2022. - V. 201. - P. 110873. DOI: 10.1016/j.commatsci.2021.110873.
54. Clausius R. On a mechanical theorem applicable to heat // Philosophical Magazine. - 1870. - V. 40. - P. 122-127.
55. Cleri F., Phillpot S.R., Wolf D., Yip S. Atomistic simulations of material fracture and the link between atomic and continuum length scales // Journal of the American Ceramic Society. - 1998. - V. 81. - P. 501-516.
56. Cormier J., Rickman J.M., Delph T.J. (2001). Stress calculation in atomistic simulations of perfect and imperfect solids // Journal of Applied Physics. - 2001. - V. 89. - №1. - P. 99-104. - DOI: 10.1063/1.1328406.
57. Dadrasi A., Albooyeh A., Fooladpanjeh S., Salmankhani A., Mashhadzadeh A.H., Saeb M.R. Theoretical examination of the fracture behavior of BC3 polycrystalline nanosheets: Effect of crack size and temperature // Mechanics of Materials. - 2022. - V. 165. - P. 104158. - DOI: 10.1016/j.mechmat.2021.104158.

58. Dadrasi A., Fooladpanjeh S., Albooyeh A., Salmankhani A., Mashhadzadeh A.H., Saeb M.R. A theoretical insight into the fracture behavior of the edge-cracked polycrystalline BC3 polycrystalline nanosheets // *Computational Materials Science*. - 2021. - V. 192. - P. 110345. - DOI: 10.1016/j.commatsci.2021.110345.
59. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces and other defects in metals // *Physical Review B*. - 1984. - V. 29. - P. 6443-6453. DOI: 10.1103/PhysRevB.29.6443
60. Dehaghani M.Z., Mashhadzadeh A.H., Salmankhani A., Karami Z., Habibzadeh S., Ganjali M.R., Saeb M.R. Fracture toughness and crack propagation behavior of nanoscale beryllium oxide graphene-like structures: A molecular dynamics simulation analysis // *Engineering Fracture Mechanics*. - 2020. - V. 235. - P. 107194. - DOI: 10.1016/j.engfracmech.2020.107194.
61. Dehaghani M.Z.,Safa M.E., Yousefi F., Salmankhani A.,Karami Z., Dadrasi A., Mashhadzadeh A.H., Stadler F.J., Saeb M.R. Fracture behavior of SiGe nanosheets: Mechanics of monocrystalline vs. polycrystalline structure // *Engineering Fracture Mechanics*. - 2021. - V. 251. - P. 107782. - DOI: 10.1016/j.engfracmech.2021.107782.
62. Dehaghani M.Z., Salmankhani A., Mashhadzadeh A.H., Habibzadeh S., Abida O., Saeb M.R. Fracture mechanics of polycrystalline beryllium oxide nanosheets: A theoretical basis. // *Engineering Fracture Mechanics*. - 2021. - V. 244. - P. 107552. - DOI: 10.1016/j.engfracmech.2021.107552.
63. Emmerich F.G. Tensile strength and fracture toughness of brittle materials // *Journal of Applied Physics*. - 2007. - V. 102. - №7 - P. 073504. - DOI: 10.1063/1.2785008.
64. Fang Te-Hua, Shen Chien-Yu, Fan Yu-Cheng, Chang Win-Jin. Fracture characteristics of silicene nanosheet with a crack under tension estimated using molecular dynamics simulation // *Superlattice and Microstructures* - 2019. - V. 129. - P. 124-129. - DOI: 10.1016/j.spmi.2019.03.021.
65. Fang W., Xie H., Yin F., Li J., Khan D.F., Fang O. Molecular dynamics simulation of grain boundary geometry on crack propagation of bi-crystal aluminum // *Materials Science and Engineering*. -2016. - V. 666. - P. 314-319. - DOI: 10.1016/j.msea.2016.04.077.

66. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw, M.S. Embedded-atom-method functions for the FCC metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt., and their alloys // *Physical Review B*. - 1986. - V. 33. - №12 - P. 7983-7991. - DOI: 10.1103/PhysRevB.33.7983.
67. Freitas R., Asta M., Bulatov V. Quantum effects on dislocation motion from ring-polymer molecular dynamics // *Computational Materials*. - 2018. - V. 4. - P. 55. - DOI: 10.1038/s41524-018-0112-9.
68. Gallo P. Some Considerations on Stress Intensity Factor at Atomic Scale // In: Gdoutos E., Konsta-Gdoutos M. (eds) *Proceedings of the Third International Conference on Theoretical, Applied and Experimental Mechanics. ICTAEM 2020. Structural Integrity*. - 2020. - V. 16. - P. 319-324. - DOI: 10.1007/978-3-030-47883-4_57.
69. Ganesh K.V., Patra P.K., Travis K.P. Multiscale modelling of impact through molecular dynamics and smooth particle hydrodynamics // *Physica A*. - 2022. - V. 593. - P. 126903. - DOI: 10/1016/j.physa.2022.126903.
70. Gao H., Ji B, Jager I.L., Arzt E., Fratzl P. Materials become insensitive to flaws at nanoscale: lesson from nature // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. - 2003. - V. 100. - №10 - P. 5597-5600. - DOI: 10.1073/pnas.0631609100.
71. Gasemi A., Gao W. A method to apply Piola-Kirchhoff stress in molecular statics simulations // *Computational Materials Science*. - 2021. - V. 195. - P. 110496. - DOI: 10.1016/j.commatsci.2021.110496.
72. Griffith A.A. The phenomenon of rupture and flow in solids // *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*. - 1921. - V. 221. - P. 163-198. - DOI:10.1098/rsta.1921.0006.
73. Hardy R.J. (1982). Formulas for determining local properties in molecular dynamics simulations: Shock waves // *Journal of Chemical Physics*. - 1982. - V. 76. - P. 622-628. - DOI: 10.1063/1.442714.
74. Hello G. Derivation of complete crack-tip stress expansions from Westergaard-Sanford solutions // *International Journal of Solids and Structures*. - 2018. - V. 144-145. - P. 265-275. - DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2018.05.012.
75. Hello G., Tahar M.B., Roeland J.-M. Analytical determination of coefficients in crack-tip stress expansions for a finite crack in an infinite plane medium //

- International Journal of Solids and Structures. - 2012. - V. 49. - P. 556-566. - DOI:10.1016/j.ijsolstr.2011.10.024.
76. Hoover W.G., Holian B.L. Kinetic moments method for the canonical ensemble distribution // Physics Letters A. - 1996. - V. 211. - №5. - P. 253–257. - DOI: 10.1016/0375-9601(95)00973-6.
 77. Hutchinson J.W. Singular behavior at the end of a tensile crack in a hardening material // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. - 1968. - V. 16. - P. 13-31. - DOI: 10.1016/0022-5096 (68)90014-8.
 78. Hwu C. Anisotropic Elastic Plates. - Springer. - 2010. - DOI: 10.1007/978-1-4419-5915-7.
 79. Ippolito M., Mattoni A., Colombo L., Pugno N. Role of lattice discreteness on brittle fracture: Atomistic simulations versus analytical models // Phys. Rev. B. - 2006. - V. 73. - P. 104111. - DOI: 10.1103/PhysRevB.73.104111.
 80. Irving J.H., Kirkwood, J.G. The statistical mechanical theory of transport processes IV: The equation of hydrodynamics // Journal of Chemical Physics. - 1950. - V. 18. - P. 817-829. - DOI: 10.1063/1.1747782.
 81. Irwin G.R. Analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate // Journal of Applied Mechanics. - 1957. - V. 24. - P. 361-364.
 82. Irwin G.R. Fracture dynamics // Fract. Met. American Society of Metals. - 1948. - P. 147-166.
 83. Jang D., Greer J.R. Transition from a strong-yet-brittle to a stronger-and-ductile state by size reduction of metallic glass // Nature Materials. - 2010. - V. 9. - №3 - P. 215-219. - DOI: 10.1038/nmat2622.
 84. Jin Y., Yuan F.G. Nanoscopic modelling of fracture of 2D graphene systems // Journal of Nanoscience and Nanotechnology. - 2005. - V. 5. - №4. - P. 601-608. - DOI: 10.1166/jnn.2005.071.
 85. Kachanov L.M. Fundamentals of fracture mechanics. - M.: Science, 1974. - 312 p.
 86. Kachanov M., Shafiro B., Tsukrov I. Handbook of elasticity solutions. - Berlin: Springer, 2003. - 324 p.

87. Karihaloo B.L., Xiao Q.Z. Accurate determination of the coefficients of elastic crack tip asymptotic field by a hybrid crack element with p-adaptivity // *Engineering Fracture Mechanics*. - 2001. - V. 68. - №15 - P. 1609-1630. - DOI: 10.1016/S0013-7944(01)00063-7.
88. Khare R., Mielke S.L., Paci J.T., Zhang S., Ballarini R., Schatz G.C., Belytschko T. Coupled quantum mechanical/molecular mechanical modeling of the fracture of defective carbon nanotubes and graphene sheets // *Physical Review B*. - 2007. - V. 75. - P. 075412.
89. Kumar S., Wolfe D. E., Haque M. A. Dislocation shielding and flaw tolerance in titanium nitride // *International Journal of Plasticity*. - 2011. - V. 27. - №5 - P. 739-747. - DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.09.003.
90. Le M.Q. Molecular dynamics study of the fracture of single layer buckled silicon monosulfide and germanium selenide // *Archives of mechanics*. -2022. - V. 74. - P. 1-10. - DOI: 10.244423/aom.3871.
91. Le M.Q., Batra R.C. Mode-I stress intensity factor in single layer graphene sheets // *Computational Materials Science*. - 2016. - V. 118. - P. 251-258. - DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.03.027.
92. Leach A.R. *Molecular Modelling. Principles and Applications*. Pearson Education Limited. Second edition. - Harlow, England : Longman, 2001. - 744 p.
93. Lee J.G. *Computational materials science: an introduction*. Second edition. - Boca Raton: CRC Press, 2017. - 376 p.
94. Li Q.M. Strain energy density failure criterion // *International Journal of Solids and Structures*. - 2001. - V. 38. - P. 6997-7013.
95. Liu B., Qiu X., How to compute the atomic stress objectively // *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*. - 2008. - V. 6. №5. - P. 1081-1089. - DOI: 10.48550/arXiv.0810.0803.
96. Lutsko J.F. Stress and elastic constants in anisotropic solids: Molecular dynamics techniques // *Journal of Applied Physics*. - 1988. - V. 64. - №3 - P. 1152-1154. - DOI: 10.1063/1.341877.

97. Mai N.T., Choi S.T. Atomic-scale mutual integrals for mixed-mode fracture: Abnormal fracture toughness of grain boundaries in graphene // International Journal of Solids and Structures. - 2018. - V. 138. - P. 205-216. - DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2018.01.013.
98. Malikova L. Multi-parameter fracture criteria for the estimation of crack propagation direction applied to a mixed-mode geometry // Engineering Fracture Mechanics. - 2015. - V. 143. - P. 32-46.
99. Malikova L., Vesely V. Estimation of the crack propagation direction in a mixed-mode geometry via multi-parameter fracture criteria// Frattura ed Integrita Strutturale. - 2015. - V. 9. - №33 - P. 25-32. - DOI: 10.3221/IGF-ESIS.33.04.
100. Malikova L., Vesely V. Influence of the elastic mismatch on crack propagation in a silicate-based composite // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. - 2017. - V. 91. - P. 25-30. - DOI: 10.1016/j.tafmec.2017.03.004.
101. Malikova L., Vesely V. Seitzl S. Crack propagation direction in a mixed mode geometry estimated via multi-parameter fracture criteria// International Journal of fatigue. - 2016. - V. 89. - P. 99-107. - DOI: 10.1016/j.ijfatigue.2016.01.010.
102. Mattoni, A., Colombo, L., and Cleri, F. Atomic scale origin of crack resistance in brittle fracture // Physical Review Letters. - 2005. - V. 95. - №11 - P. 115501. - DOI: 10.1103/PhysRevLett.95.115501.
103. Mattoni, A., Colombo, L., and Cleri, F. Atomistic study of interaction between a microcrack and a hard inclusion in B-SiC // Physical Review B. - 2004. - V. 70. - №9 - P. 094108. - DOI: 10.1103/PhysRevB.70.094108.
104. Matvienko Y.G., Morozov E.M. Two basic approaches in a search of the crack propagation angle // Fatigue & Fracture of Engineering materials & Structures. - 2017. - V. 40. - №8 - P. 1191-1200. - DOI: 10.1111/ffe.12583.
105. Maxwell J. C. On reciprocal figures, frames and diagrams of forces // Transactions of the Royal Society of Edinburg. - 1870. - V. 26 - P 1-43. - DOI:10.1017/S0080456800026351.
106. Meyers M.A., Chen P.Y., Lin A.Y.M., Seki Y. Biological materials: structure and mechanical properties // Progress in Materials Science. - 2007. - V. 53. - №1 - P. 1-206. - DOI: 10.1016/j.pmatsci.2007.05.002.

107. Miller R.E., Tadmor E.B. A unified framework and performance benchmark of fourteen multiscale atomistic/continuum coupling methods // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. - 2009. - V. 17. - №5 - P. 053001. - DOI: 10.1088/0965-0393/17/5/053001.
108. Miller R.E., Tadmor E.B., Phillips R., Ortiz M. Quasicontinuum simulation of fracture at the atomic scale // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. - 1998. - V. 6. - №5 - P. 607-638. - DOI: 10.1088/0965-0393/6/5/008.
109. Mirsayar M.M., Razmi A., Berto F. Tangential strain-based criteria for mixed-mode I/II fracture toughness of cement concrete // *Fatigue Fracture Engineering material and Structures*. - 2017. - P. 1-9. DOI: 10.1111/ffe.12665.
110. Molaei F. Molecular dynamics simulation of edge crack in single crystalline alpha quartz // *Journal of Molecular Graphics and Modelling*. - 2022. - V. 111. - P. 108085. - DOI: 10/1016/j.jmgm.2021.108085.
111. Molaei F., Dehaghani M.Z., Salmankhani A., Fooladpanjeh S., Sajadi S.M., Safa M.E., Abida O., Habibzadeh S., Mashhadzadeh A.H., Saeb M.R. Applying molecular dynamics simulation to take the fingerprint of polycrystalline SiC nanosheets // *Computational Materials Science*. - 2021. - V. 200. - P. 110770. - DOI: 10.1016/j.commatsci.2021.110770.
112. Morandi M., Farrahi G.H., Chamani M. Effect of microstructure on crack behavior in nanocrystalline nickel using molecular dynamics simulation // *Theoretical and Applied fracture Mechanics*. -2019. - V. 104. - P. 102390. - DOI: 10.1016/j.tafmec.2019.102390.
113. Murdoch A.I. A critique of atomistic definitions of the stress tensor // *Journal of Elasticity*. -2007. - V. 88. -P. 113-140.
114. Murdoch A.I. The motivation of continuum concepts and relations from discrete considerations // *Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics* - 1983. - V. 36. - №2 - P. 163-187. - DOI: 10.1093/qjmam/36.2.163.
115. Muthu N., Maiti S.K., Falzon B.G., Yan W. Crack propagation in non-homogenous materials: Evaluation of mixed-mode SIFs, T-stress and kinking angle using a variant of EFG Method // *Engineering Analysis with Boundary Elements*. - 2016. - V. 72. - P. 11-26. - DOI: 10.1016/j.enganabound.2016.07.017.

116. Nejati M., Ghouli S., Ayatollahi M.R. Crack tip asymptotic fields in anisotropic planes: Importance of higher order terms // Applied Mathematical Modelling. - 2021. - V. 91. - P. 837-862. - DOI: 10.1016/j.apm.2020.09.025
117. Nguen H.-T., Le M.-Q., Nguen V.-T. Mode-I stress intensity factors of silicene, AlN, and SiC hexagonal sheets // Material Research Express. - 2018. - V. 5. - №6 - P. 065025. - DOI: 10.1088/2053-1591/aac807.
118. Nikravesht Y., Sameti A.R., Khoel A.R. An atomistic-continuum multiscale analysis for heterogeneous nanomaterials and its application in nanoporous gold foam // Applied Mathematical Modelling. - 2022. - DOI: 10/1016/j.apm.2022.02.029.
119. Nirwal S., Katukam R. An approach for Coupling FEM & Molecular Dynamics // International Journal of Emerging Trends in Engineering Research. - 2015. - V. 3. - №10 - P. 7-19.
120. Nishimura K., Miyazaki N. Molecular dynamics simulation of crack growth under cyclic loading // Computational Materials Science. - 2004. - V. 31. - P. 269-278. - DOI: 10.1016/j.commatsci.2004.03.009.
121. Nishimura K., Miyazaki N. Molecular dynamics simulation of crack propagation in polycrystalline material // CMES. - 2001 - V. 2. - P. 143-154. - DOI:10.3970/cmcs.2001.002.143.pdf.
122. Omeltchenko A., Yu J., Kalia R.K., Vashishta P. Crack front propagation and fracture in a graphene sheet: a molecular-dynamics study on parallel computers // Physical Review Letters. - 1997. - V. 78. - P. 2148-2151. - DOI: 10.1103/PhysRevLett.78.2148.
123. Orowan E. Energy criteria of fracture // Weld. Res. Suppl. - 1955. - V. 20. - P. 1575.
124. Patil S.P., Heider Y. A Review on Brittle Fracture Nanomechanics by All-Atom Simulations // Nanomaterials. - 2019. - V. 9. - №7. - P. 1050. - DOI: 10.3390/nano9071050.
125. Patil P., Vyasarayani C.P., Ramji M. Linear least squares approach for evaluating crack tip fracture parameters using isochromatic and isoclinic data from digital photoelasticity // Optics and Lasers in Engineering. - 2017. - V. 93. - P. 182-194. - DOI: 10.1016/j.optlaseng.2017.02.003.
126. Pestrikov V.M., Morozov E.M. Fracture mechanics. - Spb.: Profession, - 2012. - 552 p.

127. Plimpton S.J. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // Journal of Computational Physics. - 1995. - V. 117. - P. 1-19. - DOI: 10.1006/jcph.1995.1039.
128. Pugno N.M., Ruoff R.S. Quantized fracture mechanics // Philosophical Magazine. - 2004. - V. 84. - №27 - P. 2829-2845. - DOI: 10.1080/14786430412331280382.
129. Rahman A. Correlations in the motion of atoms in liquid argon // Phys. Rev. - 1964. - V. 136. - P. A405.
130. Ramesh K., Gupta S., Kelkar A.A. Evaluation of stress field parameters in fracture mechanics by photoelasticity-Revisited // Engineering Fracture Mechanics. - 1997. - V. 56. - №3 - P. 25-45.
131. Rashidi Moghaddam M., Ayatollahi M., Berto F. Mixed mode fracture analysis using generalized averaged strain energy density criterion for linear elastic materials // International Journal of Solids and Structures. - 2017. - V. 120. - P. 137-145. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2017.04.035.
132. Rashidi Moghaddam M., Ayatollahi M., Berto F. The application of strain energy density criterion to fatigue crack growth behavior of cracked components // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. - 2018. - V. 97. - P. 440-447. - DOI: 10.1016/j.tafmec.2017.07.014.
133. Razavi M.J., Aliha M.R.M., Berto F. Application of an average strain energy density criterion to obtain the mixed mode fracture load of granite rock tested with the cracked asymmetric four-point bend specimen // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. - 2018. - V. 97. - P. 419-425. - DOI: 10.1016/j.tafmec.2017.07.004.
134. Razmara N., Mohammadzadeh R. Effect of nitrogen content on the crack growth behavior in the Fe-N alloy at high temperatures via molecular dynamics simulations // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. - 2018. - V. 97. - P. 30-37. - DOI: 10.1016/j.tafmec.2018.07.007.
135. Recho N. Fracture Mechanics and Crack Growth. - ISTE Ltd.: Hoboken, NJ : John Wiley & Sons, - 2012. - 493 p. - DOI:10.1002/9781118387184.
136. Rice J.R., Rosengren G.F. Plate strain deformation near a crack tip in a power-law hardening material // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. - 1968. - V. 16. - №1 - P. 1-12. - DOI: 10.1016/0022-5096(68)90013-6.

137. Ritchie R.O., Liu D. Introduction to fracture mechanics - Elsevier. 2021.
138. Roy S., Roy A. A computational investigation of length-scale effects in the fracture behaviour of a graphene sheet using the atomistic J-integral // Engineering Fracture Mechanics. - 2019. - V. 207. - P. 165-180. - DOI: 10.1016/j.engfracmech.2018.12.012.
139. Sanford R.J., Dally J.W. A general method for determining mixed mode stress intensity factors // Engineering Fracture Mechanics. - 1972. - V. 4. - P. 357-366.
140. Sanjib C., Chowdhury Ethan Wise, Raja Ganesh, John W., Gillespie Jr. Effects of surface crack on the mechanical properties of Silica: A molecular dynamics simulation study // Engineering Fracture Mechanics. - 2019. - V. 207. - P. 99-108. - DOI: 10.1016/j.engfracmech.2018.12.025.
141. Shao-Huan Cheng. In Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Doctor of Philosophy // Applicability of continuum fracture mechanics in atomistic systems - Purdue University West Lafayette, Indiana.
142. Shimada T., Ouchi K., Chihara Y., Kitamura T. Breakdown of Continuum Fracture Mechanics at the Nanoscale // Sci Rep. - 2015. - V. 8596. - DOI: 10.1038/srep08596.
143. Shirazi A.H.N., Abadi R., Izadifar M., Alajlan N., Rabczuk T. Mechanical responses of pristine and defective C₃N nanosheets studied by molecular dynamics simulations // Computational Materials Science. - 2018. - V. 147. - P. 316-321. - DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.01.058.
144. Sen D., Thaulow C., Schieffer S. V., Cohen A., Buehler M. J. (2010). Atomistic study of crack-tip cleavage to dislocation emission transition in silicon single crystals // Physical Review Letters. - 2010. - V. 104. - №23 - P. 235502. - DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.235502.
145. Sih G.C. Application of Strain - Energy - Density Theory to Fundamental Fracture Problem // Institute of Fracture and Solid Mechanical Technical Report, Lehigh University, AFOSR-RT-73-1. - 1973.
146. Sih G.C. Strain-energy factor applied to mixed mode crack problems // Int. J. Fracture. - 1974. - V. 10. - P. 305-321.
147. Sneddon I.N. The distribution of stress in the neighborhood of a crack in an elastic solid // Proc. Roy. Soc. Ser. A. - 1946. - V. 187. - P. 229-260. - DOI:10.1098/rspa.1946.0077.

148. Sobek J., Frantik P., Vesely V. Analysis of accuracy of Williams series approximation of stress field in cracked body - influence of area of interest around crack-tip on multi-parameter regression performance // *Frattura ed Integrita Strutturale*. - 2017. - V. 11. - №39. - P.129-142. - DOI: 10.3221/IGF-ESIS.39.14.
149. Stepanova L.V. Asymptotic analysis of crack tip stress field (consideration of higher order terms) // *Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. Novosibirsk*. - 2019. - V. 22. - №3 - P. 345-361. - DOI: 10.15372/SJNM20190307.
150. Stepanova L. V., Belova O.N. A molecular dynamics simulation analysis of mixed mode crack growth // *AIP Conference Proceedings*. - 2021. - V. 2371. - №1 020012. - DOI: 10.1063/5.0059574.
151. 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. - №3-4 - P. 748-760. - DOI: 10.1016 / j.prostr.2022.03.149.
152. 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. - DOI: 10.1016/j.tafmec.2022.103298.
153. 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. - DOI: 10.1088/1742-6596/1096/1/012060.
154. 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. - №10 Issue C. - P. 770-785. - DOI: 10.1016/j.prostr.2022.03.151.
155. Stepanova L.V., Belova O.N. Stress intensity factors of Continuum fracture mechanics at the nanoscale // *Procedia Structural Integrity*. - 2022. - V. 37. - №15 - P. 900-907. DOI: 10.1016/j.prostr.2022.02.024.
156. 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.
157. 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. - P. 012104. - DOI:10.1088/1742-6596/1745/1/012104.
158. 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. - DOI: 10.1016/J.PROSTR.2021.09.037.
159. Stepanova L.V., Bronnikov S.A. Computational study of the mixed-mode crack behavior by molecular dynamics method and the multi-parameter crack field description of classical fracture mechanics // *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. - 2020. - V. 109. - P. 102691. - DOI: 10.1016/j.tafmec.2020.102691.
160. Stepanova L.V., Belova O.N., Bronnikov S.A. Determination of continuum fracture mechanics parameters from molecular dynamics simulations // *World Congress in Computational Mechanics and ECCOMAS Congress*. - 2021. - V. 100. - P. 1-7. - DOI: 10.23967/wccm-eccomas.2020.008.
161. Stepanova L.V., Bronnikov S.A. Molecular Dynamics Modeling of Crack Propagation // *Journal of Physics: Conference Series*. - 2019. - V. 1368. - V. 4. - P. 042039. - DOI: 10.1088/1742-6596/1368/4/042039.
162. Stepanova L.V., Igonin S.A. Asymptotics of the near-crack-tip stress field of a growing fatigue crack in damaged materials: Numerical experiment and analytical solution // *Numerical Analysis and Applications*. - 2015. - V. 8. - №2. - P. 168-181. - DOI: 10.1134/S1995423915020081.
163. Stepanova L.V., Roslyakov P.S. Complete asymptotic expansion of M. Williams at the vertices of two collinear cracks of finite length in an infinite plate // *Bulletin of the Perm National Research Polytechnic University. Mechanics*. - 2015. - V. 4. - №4. - P. 188-225. DOI: 10.15593/perm.mech/2015.4.12.
164. Stepanova L.V., Roslyakov P.S. Complete Williams asymptotic expansion of the stress field near the crack tip: Analytical solutions, interference-optic methods and

- numerical experiments // AIPConference Proceedings. - 2016. - V. 1785. - №1 030029. - DOI:10.1063/1.4967050.
165. Stepanova L.V., Roslyakov P. S. 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 // International Journal of Solids and Structures. - 2016. - V. 100–101. - P. 11–28. - DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2016.06.032.
 166. Subramanian A.K., Sun C.T. Continuum interpretation of virial stress in molecular simulations // International Journal of Solids and Structures. - 2008. - V. 45. - P. 4340-4346. - DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2008.03.016.
 167. Sun C.T., Jin Z.H. Griffith Theory of Fracture // Fracture mechanics. - 2012. - P. 11-24. - DOI: 10.1016/b978-0-12-385001-0.00002-x.
 168. Sun C.T., Qian H. Brittle fracture beyond the stress intensity factor // Journal of Mechanics of Materials and Structures. - 2009. - V. 4. - №4 - P. 743-753. - DOI: 10.2140/jomms.2009.4-4.
 169. Sun C.T., Vaidya R. S. Prediction of composite properties from a representative volume element. - Composites Science and Technology. - 1996. - V. 56. - №2 - P. 171-179. - DOI: 10.1016/0266-3538(95)00141-7.
 170. Tadmor E.B., Ortiz M., Phillips R. Quasicontinuum analysis of defects in solids // Philosophical Magazine A. - 1996. - V. 73. - №6 - P. 1529-1563. - DOI: 10.1080/01418619608243000.
 171. Tan J., Villa U., Shamsaei N., Shao S., Zbib H., Faghihi D. A predictive discrete-continuum multiscale model of plasticity with quantified uncertainty // International Journal of Plasticity. - 2021. - V. 138. 102935. - DOI: 10/1016/j.ijplas.2021.102935.
 172. Tsai J.L., Tzeng S.H., Tzou Y.J. Characterizing the fracture parameters of a graphene sheet using atomistic simulation and continuum mechanics // International Journal of Solids and Structures. - 2010. - V. 47. - P. 503-509. - DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2009.10.017.
 173. Tuckerman M.E. Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation. - Oxford University Press, 2010 - p. 691

174. Velilla-Diaz W., Ricardo L., Palencia A., Zambrano H.R. Fracture Toughness Estimation of Single-crystal Aluminum at Nanoscale // *Nanomaterials*. - 2021. - V. 11. - P. 689. - DOI: 10.3390/nano11030680.
175. Verlet L. Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // *Phys. Rev.* - 1967. - V. 159. - P. 98.
176. Verlet L. Computer “experiments” on classical fluids. II. equilibrium correlation functions // *Phys. Rev.* - 1967. - V. 165. - P. 201.
177. Vesely V., Sobek J., Seitzl S. Multi-parameter approximation of the stress field in a cracked body in the more distant surrounding of the crack tip // *International Journal of Fatigue*. - 2016. - V. 89. - №3 - P. 20-35. - DOI: 10.1016/j.ijfatigue.2016.02.016.
178. Wagner G.J., Liu W.K. Coupling of atomistic and continuum simulations using a bridging scale decomposition. *Journal of Computational Physics*. - 2003. - V. 190. - №1 - P. 249-274. - DOI: 10.1016/S0021-9991(03)00273-0.
179. Wang L., Zheng Q., Liu J.Z., Jiang Q. Size dependence of the thinshell model for carbon nanotubes // *Physical Review Letters*. - 2005. - V. 95. - №10 - P. 105501. - DOI: 10.1103/PhysRevLett.95.105501.
180. Westergaard H.M. Bearing pressures on cracks // *ASTM Trans. J. Appl. Mech.* - 1939. - V. 6. - P. A49-A53.
181. Williams M.L. On the stress distribution at the base of a stationary crack // *Trans. ASME. J. of Applied Mechanics*. - 1957. - V. 24. - P. 109-114.
182. Williams M.L. Stress singularities resulting from various boundary conditions in angular corners of plates in extension // *Journal of Applied Mechanics*. - 1952. - V. 74. - P. 526-528.
183. Wilson M.A., Grutzik S.J., Chandross M. Continuum stress intensity factors from atomistic fracture simulations // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* - 2019. - V. 354. - P. 732-749. - DOI: 10.1016/j.cma.2019.05.050.
184. Wulfinghoff S., Fassin M., Reese S. A damage growth criterion for anisotropic damage models motivated from micromechanics // *International Journal of Solids and Structures*. - 2017. - V. 121. - №11 - P. 21-32. DOI: 10.1016 / j.ijsolstr.2017.04.038.

185. Xiao S.P., Belytschko T. A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. - 2004. - V. 193. - №17-20 - P. 1645-1669. - DOI: 10.1016/j.cma.2003.12.053.
186. Xu S., Deng X. (2008). Nanoscale void nucleation and growth and crack tip stress evolution ahead of a growing crack in a single crystal // *Nanotechnology*. - 2008. - V. 19. - №11 - P. 115705. - DOI: 10.1088/0957-4484/19/11/115705.
187. Xu M., Tabarraei A., Paci J.T., Oswald J., Belytschko T. A coupled/continuum study of graphene fracture // *International Journal of Fracture*. - 2012. - V. 173. - P. 163-173. - DOI: 10.1007/s10704-011-9675-x.
188. Yamakov V.I., Warner D.H., Zamora R.J., Saether E., Curtin W.A., Glassgen E.N. Investigation of crack tip dislocation emission in aluminum using multiscale molecular dynamics simulation and continuum modelling // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. - 2014. - V. 65. - P. 35-53. - DOI: 10/1016/j.jmps.2013.12.009.
189. Yang J., Komvopoulos K. A stress analysis method for molecular dynamics systems // *International Journal of Solids and Structures*. - 2020. - V. 193-194. - P. 98-105. - DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2020.02.003.
190. Yasbolaghi R., Khoei A.R. A continuum-atomistic multi-scale analysis of temperature field problems and its application in phononic nano-structures // *Finite Elements in Analysis & Design*. - 2022. - V. 198. 103643. - DOI: 10/1016/j.finel.2021.103643.
191. Yao J., Xia Y., Dong S., Yu P., Zhao J.-H. Finite element analysis and molecular dynamics simulations of nanoscale crack-hole interactions in chiral graphene nanoribbons // *Engineering Fracture Mechanics*. - 2019. - V. 218. - P. 106571. - DOI: 10.1016/j.engfracmech.2019.106571.
192. Zhang T., Li X., Kadkhodaei S., Gao H. Flaw insensitive fracture in nanocrystalline graphene // *Nano Letters*. - 2012. - V. 12. 4605-4610.
193. Zhang Y., Jiang S., Zhu X., Zhao Y. A molecular dynamics study of intercrystalline crack propagation in nano-nickel bicrystal films with (0 1 0) twist boundary // *Engineering Fracture Mechanics*. - 2016. - V. 168. Part A. - P. 147-159. - DOI: 10.1016/j.engfracmech.2016.10.008.
194. Zhang Y., Jiang S., Zhu X., Zhao Y. Influence of twist angle on crack propagation of nanoscale bicrystal nickel film based on molecular dynamics simulation // *Physica E*:

- Low-dimensional Systems and Nanostructures. - 2017. - V. 87. - P. 281-294. - DOI: 10.1016/j.physe.2016.11.005.
195. Zhao L., Nasuton M.K.M., Hekmatifar M., Sabetvand R., Kamenkov P., Toghraie D., Alizadeh A., Ghahari T. The improvement of mechanical properties of conventional concretes using carbon nanoparticles using molecular dynamics simulations // Scientific Reports. - 2021. - V. 11. 20265. - DOI: 10.1038/s41598-021-99616-y.
 196. Zhou M. A new look at the atomic level virial stress: on continuummolecular system equivalence // Proceedings of the Royal Society of London A.- 2003. - V. 459. - P. 2347-2392. - DOI: 10.1098/rspa.2003.1127.
 197. Zhou X.W., Moody N.R., Jones R.E., Zimmerman J.A., Reedy E.D. Molecular-dynamics-based cohesive zone law for brittle interfacial fracture under mixed loading conditions: Effect of elastic constant mismatch // Acta Materialia. - 2009. - V. 57. - №16 PP. 4671-4686. - DOI: 10.1016/j.actamat.2009.06.023.
 198. Zimmerman J.A., Webb III E.B., Hoyt J.J., Jones R.E., Klein P.A., Bammann D.J. Calculation of stress in atomistic simulation // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. - 2004. - V. 12. Iss. 4. - P. S319-S332. - DOI: 10.1088/0965-0393/12/4/S03.
 199. ELATE - Elastic tensor analysis: URL.: <http://progs.coudert.name/elate/>
 200. Interatomic Potentials Repository: URL.: <https://www.ctcms.nist.gov/potentials/>
 201. GROningen MACHine for Chemical Simulations : URL.: <http://www.gromacs.org/>
 202. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator: URL.: <http://lammps.sandia.gov/>
 203. NANOScale Molecular Dynamics: URL.: <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>
 204. Open Visualization Tool : URL.: <https://www.ovito.org/>
 205. Plotly: URL.: <https://plotly.com/>
 206. SIMULIA Abaqus: <https://www.3ds.com/ru/produkty-i-uslugi/simulia/produkty/abaqus/>
 207. Visual Molecular Dynamics: URL.: <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
 208. XMD: URL.: <http://xmd.sourceforge.net/doc/manual/xmd.html/>

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение 1

Таблица 1. Углы направления роста трещины, полученные с помощью обобщенного критерия максимального тангенциального напряжения

$N=1$	$r_c = 0.05$	$r_c = 0.1$	$r_c = 0.25$	$r_c = 0.5$	$r_c = 0.75$	$r_c = 1.25$	$r_c = 1.5$	$r_c = 1.75$	M^e
-70.53	-66.21	-62.49	-55.08	-49.65	-47.39	-45.72	-45.40	-45.29	0
-67.53	-67.53	-62.20	-58.34	-51.34	-46.55	-44.63	-42.99	-42.70	0.1
-64.47	-58.01	-54.10	-47.60	-43.44	-41.83	-40.72	-40.52	-40.67	0.2
-62.86	-55.83	-51.91	-45.69	-41.84	-40.38	-39.39	-39.06	-39.06	0.25
-61.18	-53.53	-49.64	-43.72	-40.18	-38.87	-38.01	-37.87	-37.56	0.3
-57.48	-48.60	-44.83	-39.58	-36.65	-35.63	-35.01	-34.93	-34.14	0.4
-53.13	-43.03	-39.50	-35.00	-32.62	-31.95	-31.56	-31.52	-31.37	0.5
-47.72	-36.61	-33.46	-29.80	-28.11	-27.63	-27.44	-27.45	-27.35	0.6
-40.61	-29.12	-26.52	-23.77	-22.66	-22.42	-22.40	-22.44	-22.61	0.7
-36.12	-24.93	-22.68	-20.40	-19.54	-19.39	-19.44	-19.49	-19.47	0.75
-30.81	-20.42	-18.55	-16.75	-16.13	-16.06	-16.14	-16.20	-16.26	0.8
-17.19	-10.57	-9.59	-8.71	-8.60	-8.46	-8.55	-8.59	-8.53	0.9

Таблица 2. Углы направления роста трещины, полученные с помощью обобщенного критерия минимума плотности энергии упругой деформации, на различных расстояниях от кончика трещины, (плоское деформированное состояние), $\nu = 0.3$

$N=1$	$r_c = 0.05$	$r_c = 0.1$	$r_c = 0.25$	$r_c = 0.5$	$r_c = 0.75$	$r_c = 1.25$	$r_c = 1.5$	$r_c = 1.75$	M^e
-82.34	-82.36	-82.33	-81.74	-79.05	-75.27	-68.55	-66.02	-63.70	0
-76.19	-75.98	-75.84	-74.94	-72.04	-68.56	-62.68	-60.68	-57.95	0.1
-70.14	-69.52	-69.20	-67.94	-64.95	-61.81	-56.72	-54.81	-52.18	0.2
-67.14	-66.24	-65.81	-64.35	-61.37	-58.40	-53.69	-51.93	-51.36	0.25
-64.13	-62.90	-62.34	-60.72	-57.76	-54.97	-50.63	-49.00	-46.38	0.3
-58.10	-55.99	-55.17	-53.26	-50.45	-48.03	-44.38	-43.01	-40.55	0.4
-51.91	-48.65	-47.59	-45.52	-42.97	-40.93	-37.92	-36.81	-34.64	0.5
-45.35	-40.71	-39.47	-37.43	-35.24	-33.58	-31.20	-30.33	-24.63	0.6
-38.01	-31.95	-30.69	-28.88	-27.15	-25.90	-24.13	-23.48	-22.46	0.7
-33.82	-27.21	-26.01	-24.40	-22.93	-21.89	-20.42	-19.88	-20.53	0.75
-29.04	-22.20	-21.14	-19.77	-18.58	-17.74	-16.58	-16.15	-15.99	0.8
-16.75	-11.44	-10.82	-10.08	-9.48	-9.06	-8.49	-8.28	-8.56	0.9

Таблица 3. Углы направления роста трещины, полученные с помощью обобщенного критерия минимума плотности энергии упругой деформации, на различных расстояниях от кончика трещины, (плоское деформированное состояние), $\nu = 0.5$

$N=1$	$r_c = 0.05$	$r_c = 0.1$	$r_c = 0.25$	$r_c = 0.5$	$r_c = 0.75$	$r_c = 1.25$	$r_c = 1.5$	$r_c = 1.75$	M^e
-90.00	-89.28	-88.54	-86.07	-81.11	-76.21	-68.81	-66.17	-63.74	0
-83.99	-82.82	-81.85	-78.90	-73.92	-69.49	-63.00	-60.69	-58.01	0.1
-77.91	-76.14	-74.88	-71.50	-66.65	-62.70	-57.07	-55.05	-52.26	0.2
-74.82	-72.68	-71.26	-67.02	-62.97	-59.27	-54.03	-52.17	-51.41	0.25
-71.68	-69.12	-67.55	-63.86	-59.28	-55.88	-50.97	-49.24	-46.47	0.3
-65.19	-61.66	-59.80	-55.98	-51.78	-48.78	-44.68	-43.22	-40.65	0.4
-58.28	-53.60	-51.55	-47.80	-44.10	-41.57	-38.17	-36.97	-34.73	0.5
-50.68	-44.80	-42.70	-39.28	-36.16	-34.10	-31.38	-30.42	-28.69	0.6
-41.90	-35.06	-33.13	-30.28	-27.84	-26.27	-24.22	-23.50	-22.47	0.7
-36.84	-29.80	-28.05	-25.57	-23.50	-22.18	-20.47	-19.87	-20.27	0.75
-31.13	-24.27	-22.77	-20.70	-19.03	-17.97	-16.60	-16.11	-15.95	0.8
-17.21	-12.46	-11.63	-10.54	-9.70	-9.16	-8.47	-8.23	-8.38	0.9

Таблица 4. Углы направления роста трещины, полученные с помощью обобщенного критерия минимума плотности энергии упругой деформации, на различных расстояниях от кончика трещины, (плоское напряженное состояние), $\nu = 0.3$

$N=1$	$r_c = 0.05$	$r_c = 0.1$	$r_c = 0.25$	$r_c = 0.5$	$r_c = 0.75$	$r_c = 1.25$	$r_c = 1.5$	$r_c = 1.75$	M^e
-79.66	-80.01	-80.26	-80.33	-78.36	-74.95	-68.48	-65.96	-63.70	0
-73.35	-73.59	-73.78	-73.60	-71.39	-68.24	-62.58	-60.40	-57.94	0.1
-67.19	-67.14	-67.20	-66.69	-64.35	-61.50	-56.60	-54.73	-52.16	0.2
-64.16	-63.88	-63.85	-63.16	-60.79	-59.09	-53.57	-51.84	-51.34	0.25
-61.14	-60.58	-60.44	-59.58	-57.21	-54.67	-50.51	-48.92	-46.36	0.3
-55.14	-53.80	-53.41	-52.25	-49.96	-47.76	-44.26	-42.94	-40.52	0.4
-49.09	-46.66	-46.03	-44.64	-42.54	-40.69	-37.83	-36.75	-34.62	0.5
-42.83	-39.00	-38.16	-36.70	-34.88	-33.39	-31.14	-30.30	-28.61	0.6
-36.00	-30.60	-29.67	-28.32	-26.88	-25.76	-24.10	-23.48	-22.45	0.7
-32.17	-26.06	-25.15	-23.93	-22.70	-21.77	-20.40	-19.89	-20.62	0.75
-27.82	-21.27	-30.44	-19.39	-18.40	-17.66	-16.57	-16.17	-16.02	0.8
-16.44	-10.97	-10.47	-9.89	-9.39	-9.02	-8.49	-8.30	-8.63	0.9

Таблица 5. Углы направления роста трещины, полученные с помощью обобщенного критерия минимума плотности энергии упругой деформации, на различных расстояниях от кончика трещины, (плоское напряженное состояние), $\nu = 0.5$

$N=1$	$r_c = 0.05$	$r_c = 0.1$	$r_c = 0.25$	$r_c = 0.5$	$r_c = 0.75$	$r_c = 1.25$	$r_c = 1.5$	$r_c = 1.75$	M^e
-83.62	-83.50	-83.34	-82.44	-79.39	-75.43	-68.60	-66.04	-68.48	0
-77.53	-77.13	-76.84	-75.60	-72.36	-68.72	-62.74	-60.51	-61.59	0.1
-71.51	-70.66	-70.17	-68.54	-62.24	-61.96	-56.78	-54.86	-49.39	0.2
-68.51	-67.35	-66.74	-64.93	-61.65	-58.56	-53.75	-51.96	-42.16	0.25
-65.51	-63.98	-63.24	-61.26	-58.03	-55.12	-50.69	-49.04	-44.43	0.3
-59.42	-57.00	-55.99	-53.74	-50.69	-48.17	-44.43	-43.04	-35.74	0.4
-53.13	-49.56	-48.30	-45.93	-43.17	-41.04	-37.97	-36.84	-33.50	0.5
-46.41	-41.47	-40.07	-37.77	-35.40	-33.68	-31.24	-30.35	-29.23	0.6
-38.83	-32.55	-31.15	-29.14	-27.28	-25.97	-24.15	-23.49	-20.86	0.7
-34.47	-27.71	-26.40	-24.62	-23.04	-21.94	-20.43	-19.86	-17.90	0.75
-29.51	-22.61	-21.45	-19.95	-18.66	-17.79	-16.58	-16.15	-17.27	0.8
-16.86	-11.65	-10.98	-10.17	-9.52	-9.08	-8.49	-8.27	-9.30	0.9

Таблица 1. Вычисленные значения коэффициентов более высокого порядка разложения Уильямса поля напряжений в окрестности вершины центральной трещины, нагружение по моде I.

Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, мода I	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, аналитическое решение
\bar{a}_1^1	1.00000	1.00000
\bar{a}_2^1	-0.35324	-0.35355
\bar{a}_3^1	0.24998	0.25000
\bar{a}_5^1	-0.03124	-0.03125
\bar{a}_7^1	0.00781	0.00781
\bar{a}_9^1	-0.00240	-0.00244
\bar{a}_{11}^1	0.00084	0.00085
\bar{a}_{13}^1	-0.00027	-0.00032
\bar{a}_{15}^1	0.00011	0.00012

Таблица 2. Вычисленные значения коэффициентов более высокого порядка разложения Уильямса поля напряжений в окрестности вершины центральной трещины в условиях смешанного нагружения, параметр смешанности $M^e = 0.66$

Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, мода I	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, аналитическое решение	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, мода II	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, аналитическое решение
\bar{a}_1^1	0.86603	0.86603	\bar{a}_1^2	-0.49999	-0.49999
\bar{a}_2^1	-0.20412	-0.20412	\bar{a}_2^2	0	0
\bar{a}_3^1	0.21646	0.21651	\bar{a}_3^2	-0.12499	-0.12499
\bar{a}_5^1	-0.02690	-0.02706	\bar{a}_5^2	0.01561	0.01562
\bar{a}_7^1	0.00667	0.00677	\bar{a}_7^2	-0.00390	-0.00391
\bar{a}_9^1	-0.00209	-0.00211	\bar{a}_9^2	0.00122	0.00122
\bar{a}_{11}^1	0.00070	0.00074	\bar{a}_{11}^2	-0.00040	-0.00043
\bar{a}_{13}^1	-0.00015	-0.00028	\bar{a}_{13}^2	0.00012	0.00016
\bar{a}_{15}^1	0.00008	0.00011	\bar{a}_{15}^2	-0.00003	-0.00006

Таблица 3. Вычисленные значения коэффициентов более высокого порядка разложения Уильямса поля напряжений в окрестности вершины центральной трещины в условиях смешанного нагружения, параметр смешанности $M^e = 0.5$

Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, мода I	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, аналитическое решение	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, мода II	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, аналитическое решение
\bar{a}_1^1	0.70711	0.70711	\bar{a}_1^2	-0.70711	-0.70711
\bar{a}_2^1	0	0	\bar{a}_2^2	0	0
\bar{a}_3^1	0.17678	0.17678	\bar{a}_3^2	-0.17678	-0.17678
\bar{a}_5^1	-0.02201	-0.02210	\bar{a}_5^2	0.02204	0.02210
\bar{a}_7^1	0.00550	0.00552	\bar{a}_7^2	-0.00549	-0.00552
\bar{a}_9^1	-0.00170	-0.00173	\bar{a}_9^2	0.00169	0.00173
\bar{a}_{11}^1	0.00059	0.00060	\bar{a}_{11}^2	-0.00059	-0.00060
\bar{a}_{13}^1	-0.00020	-0.00023	\bar{a}_{13}^2	0.00018	0.00023
\bar{a}_{15}^1	0.00007	0.00009	\bar{a}_{15}^2	-0.00007	-0.00009

Таблица 4. Вычисленные значения коэффициентов более высокого порядка разложения Уильямса поля напряжений в окрестности вершины центральной трещины в условиях смешанного нагружения, параметр смешанности $M^e = 0.33$

Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, мода I	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, аналитическое решение	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, мода II	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, аналитическое решение
\bar{a}_1^1	0.49999	0.49999	\bar{a}_1^2	-0.86602	-0.86603
\bar{a}_2^1	0.35355	0.35355	\bar{a}_2^2	0	0
\bar{a}_3^1	0.12495	0.12499	\bar{a}_3^2	-0.21649	-0.21651
\bar{a}_5^1	-0.01560	-0.01562	\bar{a}_5^2	0.02694	0.02706
\bar{a}_7^1	0.00386	0.00391	\bar{a}_7^2	-0.00670	-0.00677
\bar{a}_9^1	-0.00121	-0.00122	\bar{a}_9^2	0.00192	0.00211
\bar{a}_{11}^1	0.00040	0.00043	\bar{a}_{11}^2	-0.00067	-0.00074
\bar{a}_{13}^1	-0.00012	-0.00016	\bar{a}_{13}^2	0.00020	0.00028
\bar{a}_{15}^1	0.00005	0.00006	\bar{a}_{15}^2	-0.00007	-0.00011

Таблица 5. Вычисленные значения коэффициентов более высокого порядка разложения Уильямса поля напряжений в окрестности вершины центральной трещины в условиях смешанного нагружения, параметр смешанности $M^e = 0.16$

Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, мода I	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, аналитическое решение	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, мода II	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, аналитическое решение
\bar{a}_1^1	0.25882	0.25882	\bar{a}_1^2	-0.96593	-0.96593
\bar{a}_2^1	1.18299	1.18301	\bar{a}_2^2	0	0
\bar{a}_3^1	0.06470	0.06470	\bar{a}_3^2	-0.24149	-0.24148
\bar{a}_5^1	-0.00809	-0.00809	\bar{a}_5^2	0.02905	0.03019
\bar{a}_7^1	0.00199	0.00202	\bar{a}_7^2	-0.00703	-0.00755
\bar{a}_9^1	-0.00057	-0.00063	\bar{a}_9^2	0.00234	0.00236
\bar{a}_{11}^1	0.00020	0.00022	\bar{a}_{11}^2	-0.00081	-0.00083
\bar{a}_{13}^1	-0.00007	-0.00008	\bar{a}_{13}^2	0.00024	0.00031
\bar{a}_{15}^1	0.00002	0.00003	\bar{a}_{15}^2	-0.00007	-0.00012

Таблица 1. Вычисленные значения коэффициентов более высокого порядка разложения Уильямса поля напряжений в окрестности вершины трещины, нагружение по моде I

Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, мода I	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормированные коэффициенты разложения Уильямса, МКЭ	Разница между МД моделированием и МКЭ
\bar{a}_1^1	1.000000	1.000000	0%
\bar{a}_2^1	-0.156644	-0.156644	0%
\bar{a}_3^1	0.122136	0.122997	0.7%
\bar{a}_4^1	-0.089284	-0.090369	1.2%
\bar{a}_5^1	0.012002	0.012235	1.9%
\bar{a}_6^1	0.008880	0.009108	2.5%
\bar{a}_7^1	-0.007128	-0.007341	2.9%
\bar{a}_8^1	-0.006428	-0.006647	3.3%
\bar{a}_9^1	0.004396	0.004567	3.8%
\bar{a}_{10}^1	0.001376	0.001435	4.1%
\bar{a}_{11}^1	-0.001002	-0.001051	4.6%
\bar{a}_{12}^1	0.000830	0.000880	5.3%
\bar{a}_{13}^1	0.000269	0.000286	5.8%
\bar{a}_{14}^1	-0.000580	-0.000626	7.4%
\bar{a}_{15}^1	-0.000172	-0.000189	8.7%

Таблица 2. Вычисленные значения коэффициентов более высокого порядка разложения Уильямса поля напряжений в окрестности вершины трещины, смешанное нагружение, параметр смешанности $M^e = 0.66$

Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, мода I	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, МКЭ	Разница между МД моделированием и МКЭ	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, мода II	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, МКЭ	Разница между МД моделированием и МКЭ
\bar{a}_1^1	0.951104	0.951104	0%	\bar{a}_1^2	-0.308872	-0.308872	0%
\bar{a}_2^1	-0.034953	-0.034953	0%	\bar{a}_2^2	0	0	0%
\bar{a}_3^1	0.003690	0.003690	0%	\bar{a}_3^2	-0.159587	-0.159587	0%
\bar{a}_4^1	-0.043062	-0.043279	0.5%	\bar{a}_4^2	0.103658	0.103970	0.3%
\bar{a}_5^1	0.051488	0.052273	1.5%	\bar{a}_5^2	0.018770	0.018884	0.6%
\bar{a}_6^1	0.0037369	-0.003821	2.2%	\bar{a}_6^2	0.050030	-0.050383	0.7%
\bar{a}_7^1	-0.002251	-0.002319	2.9%	\bar{a}_7^2	0.011338	0.011441	0.9%
\bar{a}_8^1	0.001913	0.001976	3.2%	\bar{a}_8^2	0.009921	0.010032	1.1%
\bar{a}_9^1	-0.001671	-0.001732	3.5%	\bar{a}_9^2	0.008254	-0.008354	1.2%
\bar{a}_{10}^1	-0.000928	-0.000965	3.8%	\bar{a}_{10}^2	0.003273	0.003347	2.2%
\bar{a}_{11}^1	0.000768	0.000802	4.2%	\bar{a}_{11}^2	0.002877	0.002966	3.0%
\bar{a}_{12}^1	0.000620	0.000651	4.8%	\bar{a}_{12}^2	-0.001746	-0.001821	4.1%
\bar{a}_{13}^1	-0.000385	-0.000407	5.5%	\bar{a}_{13}^2	-0.000885	-0.000934	5.2%
\bar{a}_{14}^1	0.000209	0.000225	6.7%	\bar{a}_{14}^2	0.000347	0.000369	5.9%
\bar{a}_{15}^1	0.000038	0.000041	8.0%	\bar{a}_{15}^2	-0.000025	-0.000027	6.7%

Таблица 3. Вычисленные значения коэффициентов более высокого порядка разложения Уильямса поля напряжений в окрестности вершины трещины, смешанное нагружение, параметр смешанности $M^e = 0.5$

Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, мода I	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, МКЭ	Разница между МД моделированием и МКЭ	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, мода II	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, МКЭ	Разница между МД моделированием и МКЭ
\bar{a}_1^1	0.892768	0.892768	0%	\bar{a}_1^2	-0.450517	-0.450517	0%
\bar{a}_2^1	0.134018	0.134018	0%	\bar{a}_2^2	0	0	0%
\bar{a}_3^1	-0.098480	-0.098598	0.12%	\bar{a}_3^2	-0.226138	-0.226138	0%
\bar{a}_4^1	-0.021063	-0.021093	0.14%	\bar{a}_4^2	0.199294	0.199493	0.1%
\bar{a}_5^1	0.106156	0.106337	0.17%	\bar{a}_5^2	0.113325	0.113552	0.2%
\bar{a}_6^1	-0.039648	-0.039787	0.35%	\bar{a}_6^2	-0.078524	-0.078760	0.3%
\bar{a}_7^1	-0.013781	-0.013891	0.79%	\bar{a}_7^2	0.039687	0.039887	0.5%
\bar{a}_8^1	0.010634	0.010752	1.1%	\bar{a}_8^2	-0.008410	-0.008513	1.2%
\bar{a}_9^1	-0.009644	-0.009831	1.9%	\bar{a}_9^2	-0.045587	-0.024666	2.3%
\bar{a}_{10}^1	-0.006739	-0.006926	2.7%	\bar{a}_{10}^2	0.016783	0.017231	2.6%
\bar{a}_{11}^1	0.004748	0.005003	5.1%	\bar{a}_{11}^2	-0.008256	-0.008529	3.2%
\bar{a}_{12}^1	-0.004587	-0.004854	5.5%	\bar{a}_{12}^2	-0.006994	-0.007324	4.5%
\bar{a}_{13}^1	-0.003402	-0.003627	6.2%	\bar{a}_{13}^2	0.003252	0.0034471	6.3%
\bar{a}_{14}^1	0.002291	0.002471	7.3%	\bar{a}_{14}^2	-0.000991	-0.001068	7.2%
\bar{a}_{15}^1	-0.000799	-0.000882	9.4%	\bar{a}_{15}^2	0.000233	0.000254	8.1%

Таблица 4. Вычисленные значения коэффициентов более высокого порядка разложения Уильямса поля напряжений в окрестности вершины трещины, параметр смешанности $M^e = 0.33$

Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, мода I	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, МКЭ	Разница между МД моделированием и МКЭ	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, мода II	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, МКЭ	Разница между МД моделированием и МКЭ
\bar{a}_1^1	0.811486	0.811486	0%	\bar{a}_1^2	-0.584370	-0.584370	0%
\bar{a}_2^1	0.423408	0.423408	0%	\bar{a}_2^2	0	0	0%
\bar{a}_3^1	-0.373289	-0.373663	0.1%	\bar{a}_3^2	-0.258031	-0.258289	0.1%
\bar{a}_4^1	0.278854	0.279413	0.2%	\bar{a}_4^2	0.103880	0.104099	0.21%
\bar{a}_5^1	0.229121	0.229810	0.3%	\bar{a}_5^2	-0.094738	-0.094966	0.24%
\bar{a}_6^1	-0.174783	-0.175838	0.6%	\bar{a}_6^2	0.073484	-0.073713	0.31%
\bar{a}_7^1	0.118878	0.120322	1.2%	\bar{a}_7^2	0.064157	0.064421	0.41%
\bar{a}_8^1	0.108276	0.109925	1.5%	\bar{a}_8^2	-0.049189	-0.049837	1.3%
\bar{a}_9^1	-0.008786	-0.008947	1.8%	\bar{a}_9^2	0.028069	0.0286711	2.1%
\bar{a}_{10}^1	0,007147	0.007301	2.1%	\bar{a}_{10}^2	0.014809	0.015299	3.2%
\bar{a}_{11}^1	0.005064	0.005286	4.2%	\bar{a}_{11}^2	-0.008819	-0.009225	4.4%
\bar{a}_{12}^1	-0.003737	-0.003951	5.4%	\bar{a}_{12}^2	0.007624	0.008034	5.1%
\bar{a}_{13}^1	0,001871	0.002012	7.0%	\bar{a}_{13}^2	0.005762	0.006236	7.6%
\bar{a}_{14}^1	-0,000920	-0.001001	8.0%	\bar{a}_{14}^2	-0.003931	-0.004291	8.4%
\bar{a}_{15}^1	-0.004203	-0.004466	9.8%	\bar{a}_{15}^2	-0.000925	-0.001025	9.8%

Таблица 5. Вычисленные значения коэффициентов более высокого порядка разложения Уильямса поля напряжений в окрестности вершины трещины, параметр смешанности $M^e = 0.16$

Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, мода I	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, МКЭ	Разница между МД моделированием и МКЭ	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, мода II	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, метод МД	Нормиро-ванные коэффициенты разложения Уильямса, МКЭ	Разница между МД моделированием и МКЭ
\bar{a}_1^1	0.713306	0.713306	0%	\bar{a}_1^2	-0.700852	-0.700852	0%
\bar{a}_2^1	0.998023	0.998023	0%	\bar{a}_2^2	0	0	0%
\bar{a}_3^1	-1.126277	-1.126277	0%	\bar{a}_3^2	-0.173304	-0.173304	0%
\bar{a}_4^1	0.306639	0.306946	0.1%	\bar{a}_4^2	0.147978	0.148722	0.5%
\bar{a}_5^1	0.210141	0.210773	0.3%	\bar{a}_5^2	-0.134715	-0.137324	1.9%
\bar{a}_6^1	-0.105048	-0.106002	0.9%	\bar{a}_6^2	-0.113041	-0.115466	2.1%
\bar{a}_7^1	0.007485	0.007599	1.5%	\bar{a}_7^2	0.104874	0.107784	2.7%
\bar{a}_8^1	0.004900	0.005021	2.4%	\bar{a}_8^2	-0.008972	-0.009288	3.4%
\bar{a}_9^1	-0.003650	-0.003822	4.5%	\bar{a}_9^2	0.007892	0.008325	5.2%
\bar{a}_{10}^1	0.001716	0.001804	4.9%	\bar{a}_{10}^2	0.007262	0.007718	5.9%
\bar{a}_{11}^1	0.001209	0.001282	5.7%	\bar{a}_{11}^2	-0.006027	-0.006439	6.4%
\bar{a}_{12}^1	-0.000885	-0.000944	6.2%	\bar{a}_{12}^2	0.005066	0.005447	7.0%
\bar{a}_{13}^1	0.000805	0.000865	6.9%	\bar{a}_{13}^2	0.001673	0.001815	7.8%
\bar{a}_{14}^1	-0.000663	-0.000721	8.1%	\bar{a}_{14}^2	-0.000886	-0.000965	8.5%
\bar{a}_{15}^1	0.000391	-0.000434	9.8%	\bar{a}_{15}^2	-0.000715	-0.000794	9.9%



**ОБЩЕСТВО С ОГРАНИЧЕННОЙ ОТВЕТСТВЕННОСТЬЮ
«САМАРСКИЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ И ПРОЕКТНЫЙ ИНСТИТУТ НЕФТЕДОБЫЧИ»**
(ООО «СамараНИПИнефть»)

«УТВЕРЖДАЮ»

Заместитель генерального директора по геологии и разработке Общества с ограниченной ответственностью «Самарский научно-исследовательский и проектный институт нефтедобычи»



Демин С.В.

«08.» июня 2023 г.

АКТ ВНЕДРЕНИЯ

в производственную деятельность результатов диссертационной работы
Беловой Оксаны Николаевны по теме:
«Приложения метода молекулярной динамики к задачам механики разрушения и атомистически-континуальное описание процессов разрушения»

Настоящим актом утверждаем, что в целях повышения эффективности работы ООО «СамараНИПИнефть» были использованы материалы кандидатской диссертации О.Н. Беловой «Приложения метода молекулярной динамики к задачам механики разрушения и атомистически-континуальное описание процессов разрушения», представленной на соискание степени кандидата технических наук, посвященной атомистически-континуальному исследованию процессов разрушения. Была внедрена новая методика оценки напряженно-деформированного состояния у вершины трещины.

Разработанный О.Н. Беловой подход оценки траектории роста трещины в насосно-компрессорных трубах позволяет получить уточненную оценку жизнеспособности нефтегазового оборудования, выполняемую ООО «СамараНИПИнефть».

Начальник отдела проектирования разработки месторождений Самарской области

Чернышева Н.В.

Подпись Чернышевой Н.В. заверяю.
Ученый секретарь дов.311 от 21.03.2023г.



Кирыанова Е.В.

ООО «Ренфорс-НТ»
 443031, г. Самара,
 ул. Солнечная, 83/2
 Тел.: +7 (846) 214-02-26
<http://www.renforce-nt.ru>
 E-mail: info@renforce-nt.ru



Renforce-NT OOO
 Solnechnaya 83, kv.2, Samara,
 Russia, 443031
 Tel.: +7 (846) 214-02-26
<http://www.renforce-nt.ru>
 E-mail: info@renforce-nt.ru

АКТ ВНЕДРЕНИЯ

в производственную деятельность результатов диссертационной работы
 Беловой Оксаны Николаевны по теме:
 «Приложения метода молекулярной динамики к задачам механики разрушения и
 атомистически-континуальное описание процессов разрушения»

ООО «Ренфорс-НТ» занимается разработкой проектов промышленных процессов и производств, относящихся к машиностроению, электронной технике, химической технологии и промышленному строительству, нефтегазовой промышленности.

Настоящим актом подтверждаем, что в целях повышения эффективности научно-исследовательской работы ООО «Ренфорс-НТ» были использованы материалы кандидатской диссертации О.Н. Беловой «Приложения метода молекулярной динамики к задачам механики разрушения и атомистически-континуальное описание процессов разрушения», представленной на соискание степени кандидата технических наук, посвященной атомистически-континуальному исследованию процессов разрушения. В расчетные схемы пакетов, реализующих метод конечных элементов, была внедрена возможность интеграции атомистических молекулярно – динамического расчетов с помощью вычислительных средств, предложенных и развитых в диссертационной работе О.Н. Беловой, а именно, с помощью команды fix, преобразующей поле атомистических напряжений в поле напряжений, связанных с узлами конечно-элементной сетки, возможно получить атомистические поля в форме, пригодной для конечно-элементного моделирования процесса разрушения.

Разработанный О.Н. Беловой вычислительный подход оценки траектории роста трещины для элементов оборудования, выполняемой ООО «Ренфорс-НТ».

Генеральный директор
 ООО «Ренфорс-НТ»



Филипченко С.А.

Самара 2023