



ПОЛИТЕХ

Санкт-Петербургский
политехнический университет
Петра Великого

КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ
СПБПУ

ДИСЦИПЛИНА: КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
В МЕХАНИКЕ

**Моделирование откольного
разрушения методом
молекулярной динамики**

Работу выполнил
студент кафедры
«Теор. механика»
группы 53604/1:
Соколов А.

Преподаватель:
Ле-Захаров А.А.

2015

Содержание

1. Постановка задачи	2
2. Математическая модель	3
2.1. Уравнения движения	3
2.2. Алгоритм 'Leapfrog'	3
3. Структура программы	4
4. Результаты моделирования	4
5. Выводы	7

1. Постановка задачи

При ударе свободно летящей пластины (ударника) по неподвижной плите (мишени), или при падении (по нормали) плоской детонационной волны на плиту (преграду) из исследуемого материала, в плите распространяются волны сжатия, а в процессе отражения этих волн от свободных границ и последующего взаимодействия между волнами могут возникнуть растягивающие напряжения, приводящие при соответствующих условиях к разрушению плиты (рис.2). Такой специфический вид разрушения получил название откольного разрушения или откола — динамического разрыва материала, который в соответствии с принятой классификацией относится к разрушению отрывом. Поверхность откольного разрушения обычно является шероховатой и содержит как хрупкий, так и вязкий излом.

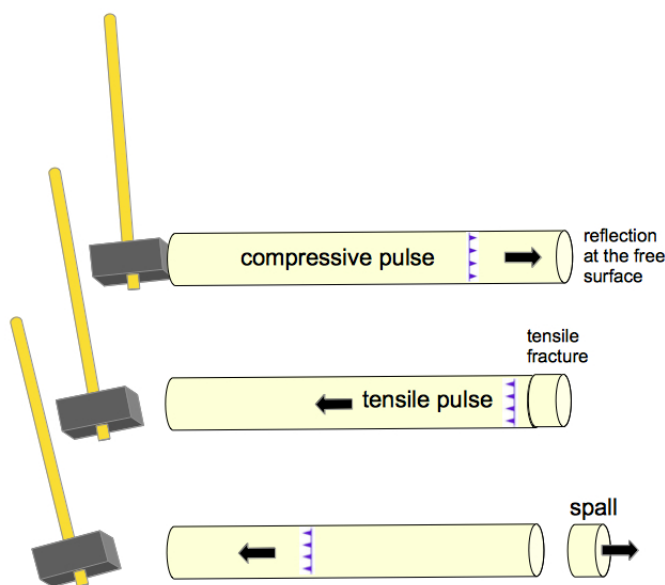


Рис. 1: Откольное разрушение

Основная цель исследований разрушения откольного типа — установление функциональной связи разрушающих напряжений в плоскости откола с параметрами нагрузки, т.е. определение характеристик откольной прочности материала. При этом главным образом применяются экспериментальные методы изучения процесса образования отколов при воздействии ударных волн в условиях одноосного деформирования.

2. Математическая модель

2.1. Уравнения движения

Рассматривается система из N частиц. В случае консервативной системы получаем следующие уравнения движения i -й частицы:

$$m_i \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial t} = \sum_{k=1..N} \mathbf{F}_{ik}, \quad (1)$$

где m_i — масса i -й частицы, \mathbf{r}_i — радиус вектор от i -й частицы, \mathbf{F}_i — сила действующая на частицу i со стороны частицы k . В качестве потенциала взаимодействия используется потенциал Леннарда-Джонса:

$$F_{ik} = \Pi'(r_{ik}) = D \left(\left(\frac{a}{r_{ik}} \right)^6 - 2 \left(\frac{a}{r_{ik}} \right)^{12} \right) \quad (2)$$

Эта система дифференциальных уравнений не может быть решена аналитически, однако может быть произведено численное интегрирование с шагом по времени Δt . Сходимость результата, получаемого численным интегрированием, во многом зависит от правильного выбора шага Δt , чем меньше значение Δt тем точнее получаемый результат. В то же время чем меньше шаг, тем больше длительность расчета выбранного промежутка времени моделирования системы. Грамотный выбор шага интегрирования решающим образом влияет на сходимость и должен быть произведен в соответствии с конкретной задачей. В процессе интегрирования на каждом шаге подсчитываются характеристики частиц такие как координата, скорость и суммарная действующая на частицу сила. В этом случае необходимо использовать быстрые и точные численные алгоритмы применимые к решению подобных систем дифференциальных уравнений.

2.2. Алгоритм 'Leapfrog'

Алгоритм 'Leapfrog' представляет собой модификацию алгоритма Верле, в котором скорость используется как промежуточный результат используемый для подсчета следующего шага. В отличие от метода Верле, где решается одно дифференциальное уравнение второго порядка, в методе Leapfrog решаются два уравнения первого порядка. Подсчет скоростей ведется на шаге, смещенном на $\frac{\Delta t}{2}$ относительно подсчета ко-

ординат r_i :

$$\begin{cases} r_i(t + \Delta t) = r_i(t + \Delta t) + \Delta \dot{r}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) \\ \dot{r}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) = \dot{r}_i(t - \frac{\Delta t}{2}) + \Delta t \ddot{r}_i(t) \end{cases} . \quad (3)$$

При необходимости можно подсчитать скорость на текущем шаге, как среднее скоростей на двух соседних шагах:

$$\dot{r}_i = \frac{\dot{r}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) + \dot{r}_i(t - \frac{\Delta t}{2})}{2}. \quad (4)$$

3. Результаты моделирования

Рассматривается система из 171 частицы. В начальный момент времени они составляют FCC решетку и заполняют кубический объем. На одной из граней куба частицы имеют начальные скорости V_0 направленные по оси X , симулирующие воздействие ударника.

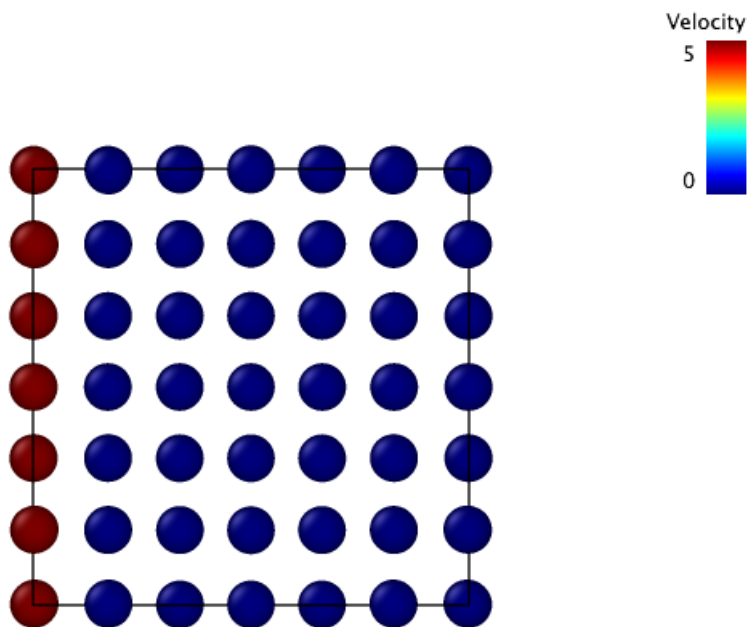


Рис. 2: Начальные условия

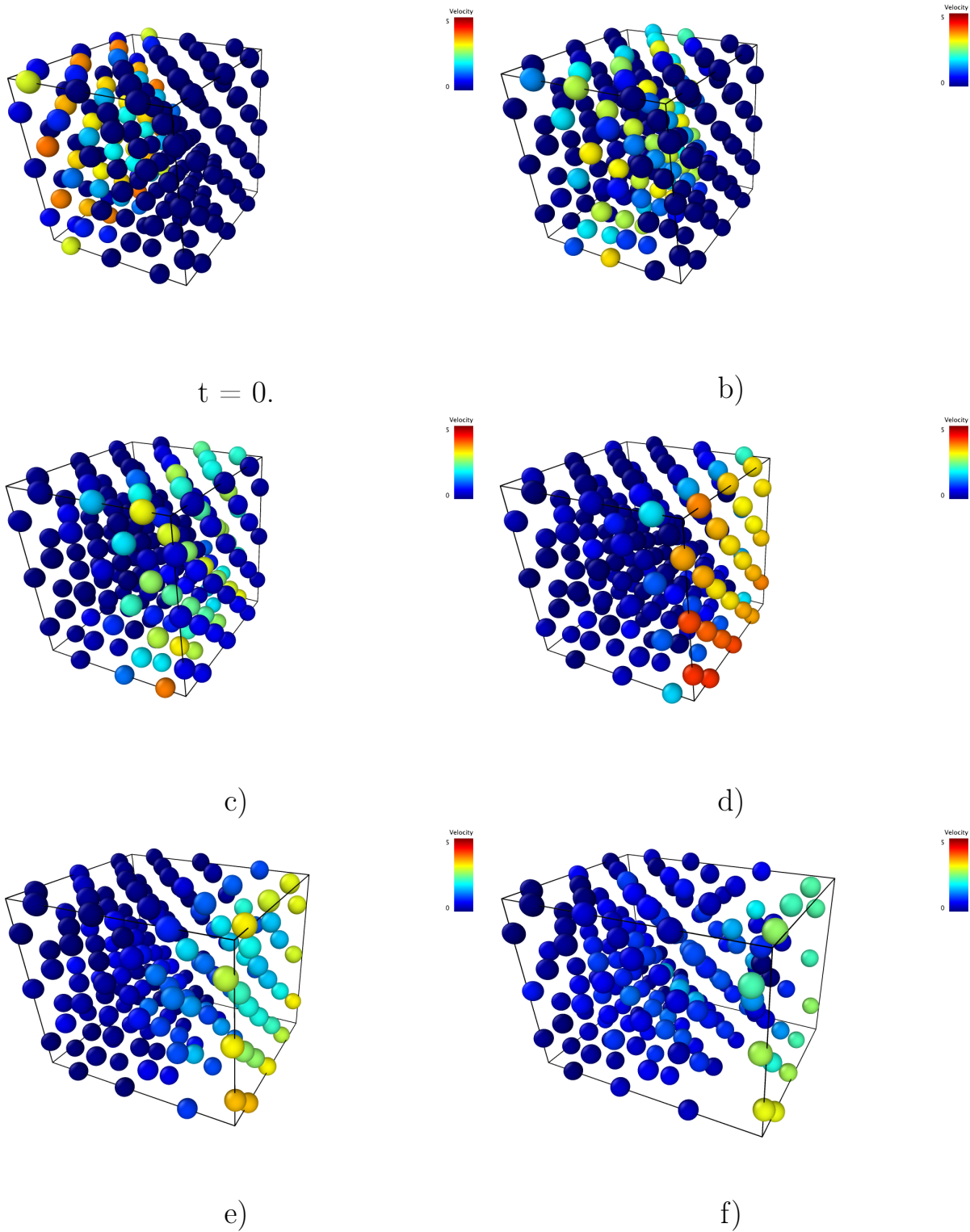


Рис. 3: Результат моделирования: а) $t = 0.01$, б) $t = 0.02$, в) $t = 0.03$, д) $t = 0.04$, е) $t = 0.06$, ф) $t = 0.08$, Распространение прямой волны деформации

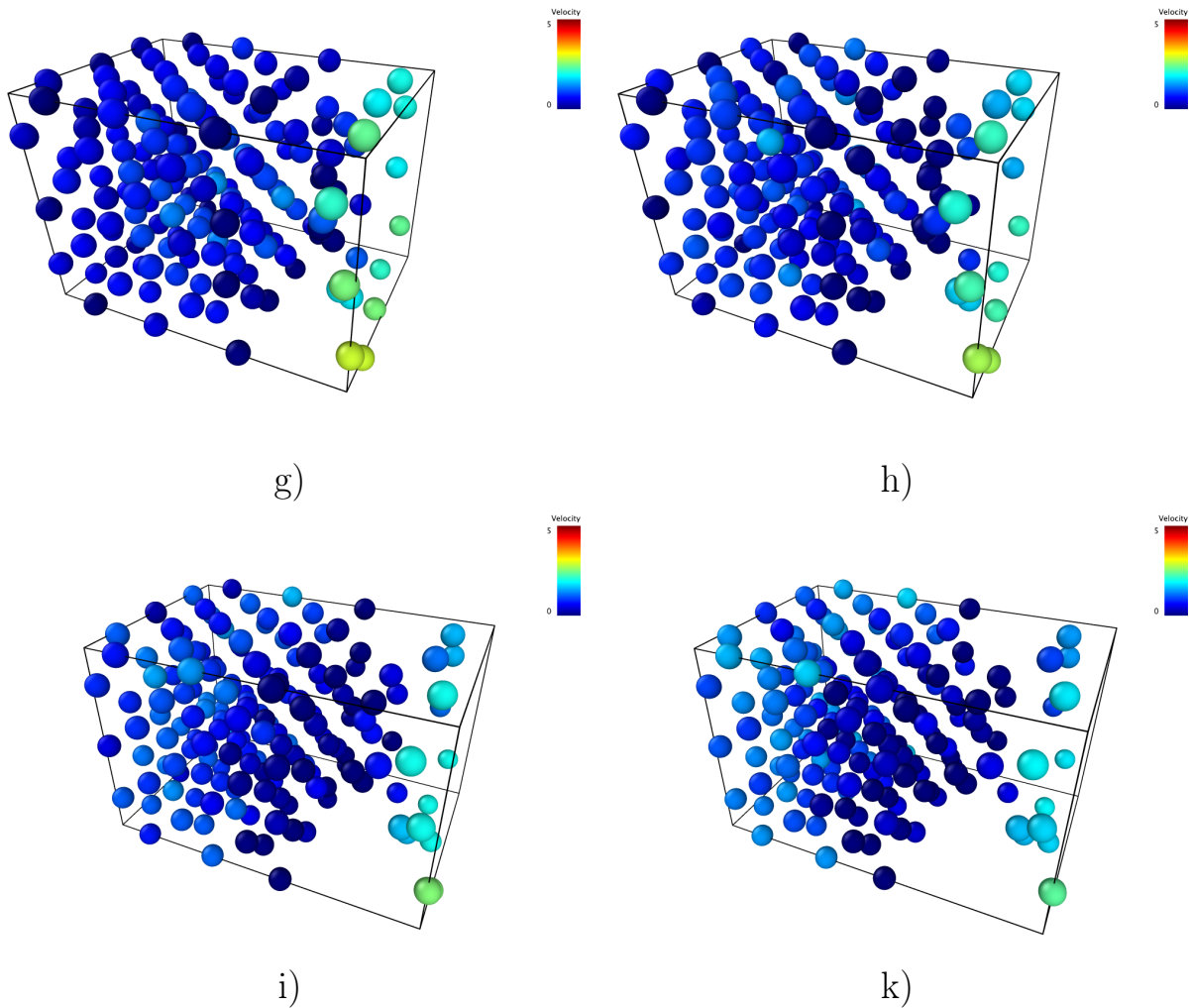


Рис. 4: Результат моделирования: g) $t = 0.09$, h) $t = 0.10$, i) $t = 0.11$, k) $t = 0.12$. Отделение обломка. Распространение обратной волны деформации.

4. Структура программы

Программа для решения дифференциальных уравнений (2) написана на языке C#. Три компоненты координат и скоростей выводятся в текстовый файл, для дальнейшей визуализации. Язык C# является объектно ориентированным, приведем классы, использованные в программе:

- **Const.cs** - класс, содержащий в себе все константы, используемые для расчета.
- **Vector.cs** - класс, позволяющий работать с векторами.
- **Particle.cs** - класс, описывающий одну частицу.
- **Creator.cs** - класс, создающий начальную конфигурацию системы.
- **WorkingModel.cs** - класс описывает полную конфигурацию систе-

мы.

- **OutputHelp.cs** - класс, позволяющий сохранять данные в текстовый файл для дальнейшей визуализации

5. Выводы

Получено, что результаты, наблюдаемые в компьютерном эксперименте качественно совпадают с наблюдаемыми в реальном эксперименте. Наблюдается распространение волны деформации вдоль оси, совпадающей с направлением скорости начального импульса. Наблюдается отделение части образца и распространение волны деформации в обратном направлении. В процессе движения волны наблюдается увеличение ширины скачка и падение его амплитуды. Использование метода частиц для решение данной задачи позволяет описать разрушение и большие деформации только лишь с использованием информации о взаимодействии частиц на атомарном уровне. Это позволяет предсказать условия разрушения и получить значение критической скорости разрушения.