

Степанова Л.В., Бронников С.А., Белова О.Н. Оценка направления роста трещины в условиях смешанного нагружения (нормальный отрыв и поперечный сдвиг): обобщенные критерии классической механики разрушения и атомистическое моделирование смешанного нагружения (метод молекулярной динамики) // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2017. – № 4. – С. 189–213. DOI: 10.15593/perm.mech/2017.4.13

Stepanova L.V., Bronnikov S.A., Belova O.N. Estimation of crack propagation direction angle under mixed – mode loading (Mode I and Mode II): generalized fracture mechanics criteria and atomistic modeling (molecular dynamics method). *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2017, no. 4, pp. 189-213. DOI: 10.15593/perm.mech/2017.4.13



ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА
№ 4, 2017
PNRPU MECHANICS BULLETIN
<http://vestnik.pstu.ru/mechanics/about/inf/>



DOI 10.15593/perm.mech/2017.4.13

УДК 539.42

ОЦЕНКА НАПРАВЛЕНИЯ РОСТА ТРЕЩИНЫ В УСЛОВИЯХ СМЕШАННОГО НАГРУЖЕНИЯ (НОРМАЛЬНЫЙ ОТРЫВ И ПОПЕРЕЧНЫЙ СДВИГ): ОБОБЩЕННЫЕ КРИТЕРИИ КЛАССИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ РАЗРУШЕНИЯ И АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СМЕШАННОГО НАГРУЖЕНИЯ (МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ)

Л.В. Степанова, С.А. Бронников, О.Н. Белова

Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, Самара, Россия

О СТАТЬЕ

Получена: 8 сентября 2017 г.
Принята: 10 ноября 2017 г.
Опубликована: 29 декабря 2017 г.

Ключевые слова:

направление роста трещины, смешанное нагружение, критерий максимального тангенциального напряжения, критерий минимума плотности энергии упругой деформации, атомистическое моделирование, метод молекулярной динамики.

АННОТАЦИЯ

Работа посвящена оценке направления роста трещины в условиях смешанного нагружения (нормальный отрыв и поперечный сдвиг) в изотропном линейно-упругом материале с использованием двух подходов: с помощью обобщенных критериев классической континуальной механики разрушения и атомистического моделирования, выполненного с помощью метода молекулярной динамики в пакете LAMMPS (Large-scale Molecular Massively Parallel Simulator). В рамках континуальной классической линейной механики разрушения использовались два критерия: 1) критерий максимального тангенциального напряжения; 2) критерий минимума плотности упругой энергии деформации на примере пластины с одной центральной трещиной. В каждом критерии разрушения использовалось многопараметрическое представление поля напряжений у вершины трещины – полное асимптотическое разложение М. Уильямса, в котором удерживались высшие приближения. Получены углы направления роста трещины для параметра смешанности нагружения, задающего вид нагружения в полном диапазоне смешанных форм деформирования. Выполнено компьютерное атомистическое моделирование процесса роста трещины в пакете LAMMPS для различных видов смешанного нагружения. Получены углы направления распространения трещины на примере пластины с центральной трещиной для различных значений параметра смешанности нагружения в широком диапазоне температур. Проведено сравнение углов распространения трещины, полученных с помощью двух подходов: подхода континуальной механики разрушения и атомистического моделирования, базирующегося на

© **Степанова Лариса Валентиновна** – доктор физико-математических наук, профессор, e-mail: stepanovlv@samsu.ru
Бронников Сергей Андреевич – аспирант, e-mail: s.a.bronnikov@mail.ru
Белова Оксана Николаевна – магистрант, e-mail: belovaoknik@mail.ru

Larisa V. Stepanova – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, e-mail: stepanovlv@samsu.ru
Sergey A. Bronnikov – PhD Student, e-mail: s.a.bronnikov@mail.ru
Oksana N. Belova – Postgraduate Student, e-mail: belovaoknik@mail.ru



методе молекулярной динамики. Углы, найденные с помощью многопараметрического асимптотического описания поля напряжений у вершины трещины, находятся в хорошем соответствии с результатами атомистического моделирования, особенно в том случае, когда в асимптотическом разложении М. Уильямса удерживаются высшие приближения (слагаемые высоких порядков).

© ПНИПУ

ESTIMATION OF CRACK PROPAGATION DIRECTION ANGLE UNDER MIXED-MODE LOADING (MODE I AND MODE II): GENERALIZED FRACTURE MECHANICS CRITERIA AND ATOMISTIC MODELING (MOLECULAR DYNAMICS METHOD)

L.V. Stepanova, S.A. Bronnikov, O.N. Belova

Samara University, Samara, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 8 September 2017
Accepted: 10 November 2017
Published: 29 December 2017

Keywords:

crack propagation direction angle, mixed mode loading, criterion of maximum tangential stress, minimum strain energy density criterion, atomistic modeling, molecular dynamics method.

ABSTRACT

This study is devoted to the estimation of the crack propagation direction angle in the plate with the central crack under mixed-mode loading (Mode I and Mode II) in an isotropic linear elastic medium using two approaches: the generalized criteria of continuum mechanics (the generalized maximum tangential stress criterion and the generalized strain energy density criterion) and atomistic modeling of the Cu single crystal with the central crack. Molecular dynamics simulations of the central crack's growth in a plane medium using Large-scale Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) are performed. The inter-atomic potential used in this investigation is the Embedded Atom Method (EAM) potential. The specimens with the initial central crack were subjected to Mixed-Mode loadings. The crack propagation direction angles under different values of the mixed parameter in a wide range of values from pure tensile loading to pure shear loading in a wide range of temperatures are obtained and analyzed. It is shown that the crack propagation direction angles obtained by the molecular dynamics method coincide with the crack propagation direction angles given by the multi-parameter fracture criteria based on the strain energy density and the multi-parameter description of the crack-tip fields.

© PNRPU

Введение. Направление роста трещины в условиях смешанного нагружения

Определение направления роста трещины в условиях смешанного нагружения и критерии разрушения, позволяющие найти направление распространения трещины, являются одними из широко обсуждаемых проблем современной механики разрушения [1–19]. В настоящее время предложен и широко используется целый ряд критериев разрушения [1–19]. Физическое обоснование критериев различно и область их применения может варьироваться в зависимости от материала и типа образца.

В целом макроскопические критерии разрушения могут быть разделены на четыре типа [19]: 1) критерии, базирующиеся на компонентах тензоров напряжений и деформаций (критерий максимального тангенциального напряжения, критерий максимальной окружной деформации) [1, 2]; 2) энергетические критерии разрушения [3–16]; 3) критерии, основанные на введении и использовании различных мер поврежденности [17]; 4) эмпирические критерии разрушения [18]. Несмотря на то, что многие критерии разрушения стали классическими и широко используются, некоторые вопросы остаются открытыми. В [1] сформулирован новый критерий разрушения, исходящий из предположения, что хрупкое разрушение происходит, когда градиент деформации достигает некоторого пре-

дельного значения. В [2] предложен критерий осредненных напряжений вблизи вершины трещины для прогнозирования траектории трещины при смешанных условиях нагружения. В [3] в рамках единого подхода на основе критерия усредненной плотности энергии деформации в заданном объеме конечного размера вокруг области с высокими напряжениями обсуждаются экспериментальные данные статических испытаний образцов с острыми и тупыми V-образными надрезами, а также испытаний на усталость сварных швов. В случае тупого надреза исследуемая область принимает изогнутую форму и ее ширина измеряется вдоль линии, перпендикулярной надрезу. В двумерных задачах при рассмотрении трещин или острых V-образных надрезов изучаемый объем принимает форму круга или кругового сектора соответственно. В [4] обсуждаются два базисных подхода для вычисления угла направления подрастания трещины: инкрементальный и глобальный (интегральный) методы. В [4] используется локальный критерий механики разрушения – критерий максимального тангенциального напряжения, который является одним из широко используемых критериев разрушения. Согласно критерию максимального тангенциального напряжения трещина растет в направлении максимального тангенциального напряжения. Математическое представление критерия имеет вид

$$\frac{\partial \sigma_{\theta\theta}}{\partial \theta} = 0, \quad \frac{\partial^2 \sigma_{\theta\theta}}{\partial \theta^2} < 0, \quad (1)$$

где $\sigma_{\theta\theta}$ – тангенциальное напряжение в окрестности вершины трещины в полярной системе координат r, θ с полюсом в вершине трещины.

При использовании критерия максимального окружного напряжения (1), как правило, в выражение (1) подставляют асимптотическое решение – поле напряжений у вершины трещины, базирующееся на асимптотическом решении М. Уильямса, в котором удерживают лишь первое слагаемое – главный член асимптотического разложения [5, 6]. Поэтому критерий в такой формулировке не отражает зависимость вычисленного угла от расстояния от кончика трещины, тогда как критическое расстояние от кончика макротрещины является фундаментальным понятием механики разрушения и важным представляется расстояние, на котором вычисляется максимальное тангенциальное напряжение. Из формулировки критерия разрушения, основанного на максимальном значении тангенциального напряжения, также следует, что данный критерий не зависит от того, какое напряженное состояние реализуется – плоское напряженное или плоское деформированное. В силу указанных причин многие исследователи обращаются к критерию минимума плотности энергии упругой деформации [5, 6], математическая формулировка которого имеет вид

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

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. Критерий минимума плотности энергии деформации является локальным и рассматривает элемент континуума, расположенный перед вершиной трещины. Разрушение наступает, когда накопленная энергия dW элемента объема dV , расположенного перед вершиной трещины, достигает критического значения. Предполагается [13, 14], что функция плотности энергии дефор-

магии S определяется следующим выражением: $dW/dV = S/r$, где S – функция плотности энергии деформации и r – расстояние от кончика трещины. Функция плотности энергии деформации S , запасенной элементом объема dV , может быть записана как

$$S = r \frac{dW}{dV} = r \left[\frac{1}{2E} (\sigma_{rr}^2 + \sigma_{\theta\theta}^2 + \sigma_{zz}^2) - \frac{\nu}{E} (\sigma_{rr}\sigma_{\theta\theta} + \sigma_{rr}\sigma_{zz} + \sigma_{zz}\sigma_{\theta\theta}) + \frac{1}{2G} (\sigma_{r\theta}^2 + \sigma_{rz}^2 + \sigma_{z\theta}^2) \right], \quad (3)$$

где dW/dV носит название функции плотности энергии деформации; $G = E/(2(1+\nu))$, E – модуль Юнга. Исключая компоненту тензора напряжений σ_{zz} из последнего уравнения, можно упростить выражение (3) для плоской задачи теории упругости:

$$S = r \frac{dW}{dV} = \frac{r}{2G} \left[\frac{\kappa+1}{8} (\sigma_{rr}^2 + \sigma_{\theta\theta}^2) - \sigma_{rr}\sigma_{\theta\theta} + \sigma_{r\theta}^2 \right]. \quad (4)$$

В [13, 14] Дж. Си ввел в рассмотрение область, окружающую вершину трещины, называемую ядром, которая в любом теоретическом или экспериментальном исследовании должна быть исключена из рассмотрения из физических соображений, поскольку на рассматриваемых расстояниях не работает концепция сплошной среды. Дж. Си связал характерный размер данной области с расстояниями, на которых не работают представления механики сплошных сред, и ввел в рассмотрение плотность энергии деформации (3). Определение функции плотности энергии деформации S требует знания радиуса области – ядра, окружающего вершину трещины. Необходимость введения ядра обусловлена трудностями интерпретации полей напряжений и перемещений в непосредственной окрестности вершины трещины, даваемых аналитическими решениями [13, 14]. В [15] дано термодинамическое обоснование критерия плотности энергии деформации, и отмечена необходимость экспериментальной верификации критерия разрушения для определения всех параметров и функций, входящих в критерий разрушения. В настоящее время в связи с бурным развитием экспериментальной и вычислительной техники стало возможным провести такую верификацию. В [3] приведен обзор критериев разрушения, известных к настоящему времени, и на основе экспериментальных исследований и теоретических результатов дана оценка возможности применения различных критериев для определения направления роста трещины. Авторы работы [16] анализируют критерий плотности энергии деформации, критерий максимального тангенциального напряжения и критерий максимальной окружной деформации. На основании сравнения экспериментальных результатов и теоретических оценок авторы предлагают усовершенствованную форму критерия максимальной окружной деформации. Модифицированная форма критерия разрушения предполагает учет T -напряжений в полном асимптотическом разложении поля напряжений у вершины трещины. Показано, что удержание T -напряжений в асимптотическом решении приводит к хорошему описанию экспериментальных данных, однако авторы статьи [16] провели экспериментальное исследование лишь для одного типа образца (полудиск с надрезом), для одного материала (цементный бетон), рассмотрен расширенный критерий максимальной окружной деформации только для одного значения критического расстояния от кончика трещины. Графики, сопоставляющие экспериментальные точки и теоретические оценки, приведенные в [16], не свидетельствуют о хорошем согласовании результатов. Поэтому нельзя говорить о значительных преимуществах модифицированного критерия максимальной окружной деформации перед другими критериями разрушения. В [5] предложен модифицированный критерий плотности энергии деформации

для прогнозирования разрушения в хрупких и квазихрупких материалах. Модификация критерия заключается в учете T -напряжений при вычислении плотности энергии упругой деформации, усредненной по объему, окружающему вершину трещины. Результаты, полученные посредством предложенного модифицированного критерия, были сопоставлены с экспериментальными данными, полученными на бразильском диске и полукруговом образце. Показано, что теоретические результаты очень хорошо согласуются с результатами экспериментальных наблюдений. Основным вывод, сформулированный авторами [5], заключается в том, учет T -напряжений позволяет хорошо описать экспериментальные результаты. Подход, развитый ниже, позволяет учесть в критерии разрушения не только первое несингулярное слагаемое в асимптотическом разложении М. Уильямса, как это сделано в [5, 16], но удержать любое наперед заданное число слагаемых в асимптотическом разложении.

Многопараметрическое асимптотическое представление поля напряжения у вершины трещины – асимптотическое разложение М. Уильямса – имеет вид

$$\sigma_{ij}(r, \theta) = \sum_{m=1}^2 \sum_{k=1}^{\infty} a_k^m r^{k/2-1} f_{m,ij}^{(k)}(\theta), \quad (5)$$

где $\sigma_{ij}(r, \theta)$ – компоненты тензора напряжений в полярной системе координат; m отвечает виду нагружения и принимает значения 1 и 2 для нормального отрыва и поперечного сдвига соответственно; a_k^m – амплитудные, масштабные множители, зависящие от геометрии образца с дефектом, а также от природы и величины нагрузки; $f_{m,ij}^{(k)}(\theta)$ – угловые распределения компонент тензора напряжений, определяемые из решения краевых задач о нормальном отрыве и поперечном сдвиге:

$$f_{1,11}^{(k)}(\theta) = \frac{k}{2} \left[(2 + k/2 + (-1)^k) \cos(k/2 - 1)\theta - (k/2 - 1) \cos(k/2 - 3)\theta \right],$$

$$f_{1,22}^{(k)}(\theta) = \frac{k}{2} \left[(2 - k/2 - (-1)^k) \cos(k/2 - 1)\theta + (k/2 - 1) \cos(k/2 - 3)\theta \right],$$

$$f_{1,12}^{(k)}(\theta) = \frac{k}{2} \left[-(k/2 + (-1)^k) \sin(k/2 - 1)\theta + (k/2 - 1) \sin(k/2 - 3)\theta \right],$$

$$f_{2,11}^{(k)}(\theta) = -\frac{k}{2} \left[(2 + k/2 - (-1)^k) \sin(k/2 - 1)\theta - (k/2 - 1) \sin(k/2 - 3)\theta \right], T = a_2^1 f_{1,11}^{(2)}(\theta = 0),$$

$$f_{2,22}^{(k)}(\theta) = -\frac{k}{2} \left[(2 - k/2 + (-1)^k) \sin(k/2 - 1)\theta + (k/2 - 1) \sin(k/2 - 3)\theta \right],$$

$$f_{2,12}^{(k)}(\theta) = \frac{k}{2} \left[-(k/2 - (-1)^k) \cos(k/2 - 1)\theta + (k/2 - 1) \cos(k/2 - 3)\theta \right].$$

Асимптотическое разложение поля напряжений (5) называют универсальным разложением поля напряжений у вершины трещины: разложение имеет одинаковую структуру для всех конфигураций тел с трещинами и для всех типов нагрузки, все многообразие задач о трещинах отражается в амплитудных (масштабных) множителях a_k^m . Первые коэффициенты $K_I = \sqrt{2\pi} a_1^1 f_{1,22}^{(1)}(\theta = 0)$ и $K_{II} = \sqrt{2\pi} a_1^2 f_{2,12}^{(1)}(\theta = 0)$, носящие название коэффициентов интенсивности напряжений, хорошо исследованы, имеется целый ряд справочников, где указана зависимость коэффициентов интенсивности напряжений от геометрии образца

и системы приложенных нагрузок. Второй коэффициент носит название T -напряжений: $T = a_2^1 f_{1,11}^{(2)}(\theta = 0)$. В практических инженерных приложениях высшими приближениями в асимптотическом разложении М. Уильямса обычно пренебрегают, но в последние годы сложилось ясное и четкое представление о необходимости удержания высших приближений в асимптотическом разложении, и высшие приближения играют существенную роль [4–11, 16–35].

В большинстве случаев при определении направления роста трещины в асимптотическом разложении (3) удерживают лишь одно слагаемое. Однако многими авторами [8, 19–28, 31, 34] показана необходимость удержания высших приближений как для оценки геометрии области пластического течения в окрестности вершины трещины в упругопластических материалах, так и для оценки угла направления роста трещины. Поэтому в настоящей работе определены углы направления роста трещины для различных значений параметра смешанности нагружения

$$M^e = \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \left| \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\sigma_{22}(r, \theta = 0)}{\sigma_{12}(r, \theta = 0)} \right|,$$

задающего вид нагружения и изменяющегося от нуля, что соответствует поперечному сдвигу, до единицы, что отвечает нормальному отрыву, для всех промежуточных видов нагружения $0 < M^e < 1$.

1. Определение угла направления роста трещины в пластине с центральной трещиной в условиях смешанного нагружения

Целью настоящей части работы является вычисление угла направления роста трещины для различных значений параметра смешанности нагружения (в полном диапазоне смешанных форм деформирования от нормального отрыва до поперечного сдвига) с применением асимптотического разложения поля напряжений (5), в котором сохраняются высшие приближения (слагаемые высоких порядков малости).

Для ряда конфигураций получены точные выражения для масштабных множителей полного асимптотического разложения М. Уильямса [22–25]. В [25] найдены выражения для масштабных множителей поля напряжений в изотропной линейно-упругой бесконечной пластине с центральной трещиной длиной $2a$.

Для трещины нормального отрыва

$$a_{2n+1}^1 = (-1)^{n+1} \frac{(2n)! \sigma_{22}^\infty}{2^{3n+1/2} (n!)^2 (2n-1) a^{n-1/2}}, \quad (6)$$

$$a_2^1 = -\sigma_{22}^\infty / 4, \quad a_{2n}^1 = 0. \quad (7)$$

Для трещины поперечного сдвига

$$a_{2n+1}^2 = (-1)^{n+1} \frac{(2n)! \sigma_{12}^\infty}{2^{3n+1/2} (n!)^2 (2n-1) a^{n-1/2}}, \quad (8)$$

$$a_{2n}^2 = 0. \quad (9)$$

Поскольку амплитудные множители для данной конфигурации известны (уравнения (6)–(9)), можно вычислить углы распространения трещины с помощью двух критериев классической механики разрушения: критерия максимального тангенциального напряжения и критерия минимума плотности энергии упругой деформации. Структура многопараметрического асимптотического представления поля напряжений при удержании пяти слагаемых в разложении имеет вид

$$\begin{aligned} \sigma_{11}(r, \theta) = & a_1^1 r^{-1/2} \left(\frac{3}{4} \cos \frac{\theta}{2} + \frac{1}{4} \cos \frac{5\theta}{2} \right) + a_1^2 r^{-1/2} \left(\frac{7}{4} \sin \frac{\theta}{2} + \frac{1}{4} \sin \frac{5\theta}{2} \right) + 4a_2^1 + \\ & + a_3^1 r^{1/2} \left(\frac{15}{4} \cos \frac{\theta}{2} - \frac{3}{4} \cos \frac{3\theta}{2} \right) - a_3^2 r^{1/2} \left(\frac{27}{4} \sin \frac{\theta}{2} + \frac{3}{4} \sin \frac{3\theta}{2} \right) + \\ & + 8a_4^1 r \cos \theta - 8a_4^2 r \sin \theta + \\ & + a_5^1 r^{3/2} \left(\frac{35}{4} \cos \frac{3\theta}{2} - \frac{15}{4} \cos \frac{\theta}{2} \right) - a_5^2 r^{3/2} \left(\frac{55}{4} \sin \frac{3\theta}{2} + \frac{15}{4} \sin \frac{\theta}{2} \right) + \dots, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{22}(r, \theta) = & a_1^1 r^{-1/2} \left(\frac{5}{4} \cos \frac{\theta}{2} - \frac{1}{4} \cos \frac{5\theta}{2} \right) + a_1^2 r^{-1/2} \left(\frac{1}{4} \sin \frac{\theta}{2} - \frac{1}{4} \sin \frac{5\theta}{2} \right) + \\ & + a_3^1 r^{1/2} \left(\frac{9}{4} \cos \frac{\theta}{2} + \frac{3}{4} \cos \frac{3\theta}{2} \right) + a_3^2 r^{1/2} \left(\frac{3}{4} \sin \frac{\theta}{2} + \frac{3}{4} \sin \frac{3\theta}{2} \right) + \\ & + a_5^1 r^{3/2} \left(\frac{15}{4} \cos \frac{\theta}{2} + \frac{5}{4} \cos \frac{3\theta}{2} \right) + a_5^2 r^{3/2} \left(\frac{15}{4} \sin \frac{\theta}{2} + \frac{15}{4} \sin \frac{3\theta}{2} \right) + \dots, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{12}(r, \theta) = & a_1^1 r^{-1/2} \left(-\frac{1}{4} \sin \frac{\theta}{2} + \frac{1}{4} \sin \frac{5\theta}{2} \right) - a_1^2 r^{-1/2} \left(\frac{3}{4} \cos \frac{\theta}{2} - \frac{1}{4} \cos \frac{5\theta}{2} \right) - N = 100 \\ & - a_3^1 r^{1/2} \left(\frac{3}{4} \sin \frac{\theta}{2} + \frac{3}{4} \sin \frac{3\theta}{2} \right) + a_3^2 r^{1/2} \left(-\frac{15}{4} \cos \frac{\theta}{2} + \frac{3}{4} \cos \frac{3\theta}{2} \right) - 8a_4^1 r \sin \theta - \\ & - a_5^1 r^{3/2} \left(\frac{15}{4} \sin \frac{\theta}{2} + \frac{15}{4} \sin \frac{3\theta}{2} \right) + a_5^2 r^{3/2} \left(-\frac{35}{4} \cos \frac{3\theta}{2} + \frac{15}{4} \cos \frac{\theta}{2} \right) + \dots \end{aligned} \quad (12)$$

При использовании многопараметрического представления поля напряжений (10)–(12) следует задать расстояние, на котором будет рассматриваться тангенциальное напряжение или функция плотности энергии упругой деформации S . В табл. 1–5 представлены результаты вычислений угла направления роста трещины на различных расстояниях от кончика трещины. В первом столбце каждой таблицы приведены углы направления распространения трещины, вычисленные с помощью асимптотического разложения М. Уильямса, в котором удерживается только первое слагаемое – главный член асимптотического разложения ($N = 1$). В следующих столбцах каждой таблицы приведены результаты вычислений, основанные на многопараметрическом представлении поля напряжений у вершины трещины ($N = 100$). Для определения угла направления роста трещины в асимптотическом решении М. Уильямса (5) удерживалось 100 слагаемых, для чего в программе компьютерной алгебры Waterloo Maple был написан код, позволяющий вычислить угол направления роста трещины с помощью: 1) критерия максимального тангенциального напряжения; 2) критерия минимума плотности энергии упругой деформации. Проведенный вычислительный эксперимент показал, что число удерживаемых слагаемых в асимптотическом разложении влияет на значение угла: чем больше расстояние от кончика трещины, тем больше слагаемых следует удерживать в решении. В ходе вычислений установлено, что для самого большого расстояния, рассматриваемого в настоящей работе

$r_c = r/a = 1,75$, где a – полудлина трещины, значение угла изменения составляет величину, меньшую наперед заданной погрешности (10^{-6}) при удержании 100 слагаемых. Поэтому во всех вычислениях удерживалось 100 слагаемых в асимптотическом разложении М. Уильямса

Таблица 1

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

Table 1

Angles of crack growth direction obtained with the generalized criterion of the maximum tangential stress

$N = 1$	$r_c = 0,05$	$r_c = 0,1$	$r_c = 0,25$	$r_c = 0,5$	$r_c = 0,75$	$r_c = 1,25$	$r_c = 1,5$	$r_c = 1,75$	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), $\nu = 0,3$

Table 2

The angles of crack growth direction obtained with the generalized criterion for the minimum energy density of elastic deformation at different distances from the tip of the crack (plane deformed state) $\nu = 0.3$

$N = 1$	$r_c = 0,05$	$r_c = 0,1$	$r_c = 0,25$	$r_c = 0,5$	$r_c = 0,75$	$r_c = 1,25$	$r_c = 1,5$	$r_c = 1,75$	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

поля напряжений у вершины трещины. Сравнение значений углов направления распространения трещины, приведенных в первом и втором столбцах таблиц, показало, что значения углов существенно зависят от высших приближений, особенно в тех случаях, когда вид смешанного

нагружения близок к первой моде нагружения – нормальному отрыву. Это особенно заметно для критерия минимума плотности энергии упругой деформации (см. табл. 2–5). Для поперечного сдвига (первая строка табл. 2) влияние T -напряжений и высших приближений не заметно вблизи кончика трещины, тогда как при удалении от вершины трещины значения углов, даваемых однопараметрическим и многопараметрическим критериями разрушения, сильно отличаются друг от друга. Различие в значениях углов с увеличением расстояния от вершины трещины доходит до 20° . Для нагружений, близких к нормальному отрыву, сильнее зависимость от количества удерживаемых слагаемых в окрестности вершины трещины (первый и второй столбцы табл. 2–5), но значения углов быстрее стабилизируются при увеличении расстояния от кончика трещины. Например, различие углов в первом и втором столбцах табл. 4 для параметра смешанности нагружения $M^e = 0,9$ составляет $5,5^\circ$, а различие углов 4-го и 9-го столбцов равно $1,2^\circ$, в то время как для поперечного сдвига это отличие равно $17,1^\circ$

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), $\nu = 0,5$

Table 3

The angles of crack growth direction obtained with the generalized criterion for the minimum energy density of elastic deformation at different distances from the tip of the crack (plane deformed state) $\nu = 0.5$

$N = 1$	$r_c = 0,05$	$r_c = 0,1$	$r_c = 0,25$	$r_c = 0,5$	$r_c = 0,75$	$r_c = 1,25$	$r_c = 1,5$	$r_c = 1,75$	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

Как отмечалось выше, Дж. Си ввел концепцию ядра – области, окружающей вершину трещины [13, 14], в которой перестают быть справедливыми представления континуальной механики. В силу этого естественным является переход от континуальной теории к атомистическому моделированию роста трещины. Следует отметить, что метод молекулярной динамики в настоящее время широко используется для вычисления параметров моделей механики разрушения [36–49]. В [36] изучены механизмы роста трещины в меди и алюминии с помощью атомистического подхода, исследованы эффекты влияния длины трещины в пластине на характер разрушения. В [37] вычислена скорость высвобождения энергии при распространении трещины в листе графена с центральной трещиной. В дискретной модели локальное поле напряжений вычислялось по формуле Харди [41–47] и обсуждалась применимость концепций коэффициента интенсивности напряжений и скорости высвобождения энергии при подрастании трещины как параметров, характеризующих процесс разрушения.

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), $\nu = 0,3$

Table 4

The angles of crack growth direction obtained with the generalized criterion for the minimum energy density of elastic deformation at different distances from the tip of the crack (plane deformed state) $\nu = 0.3$

$N = 1$	$r_c = 0,05$	$r_c = 0,1$	$r_c = 0,25$	$r_c = 0,5$	$r_c = 0,75$	$r_c = 1,25$	$r_c = 1,5$	$r_c = 1,75$	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), $\nu = 0,5$

Table 5

The angles of crack growth direction obtained with the generalized criterion for the minimum energy density of elastic deformation at different distances from the tip of the crack (plane deformed state) $\nu = 0.5$

$N = 1$	$r_c = 0,05$	$r_c = 0,1$	$r_c = 0,25$	$r_c = 0,5$	$r_c = 0,75$	$r_c = 1,25$	$r_c = 1,5$	$r_c = 1,75$	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

Сравнение результатов расчета по двум схемам: 1) континуальной механики и 2) атомистического моделирования методом молекулярной динамики показало, что поле напряжений у вершины трещины в дискретной модели не является сингулярным при приближении к вершине трещины, в то время как скорость высвобождения энергии имеет близкие

значения для образца с одной и той же геометрией, если использовать 1) подход механики сплошной среды; 2) конечно-элементный метод расчета; 3) атомистическое моделирование дискретной структуры листа графена. Поэтому целью следующей части работы является атомистическое моделирование процесса распространения трещины в условиях смешанного нагружения (нормальный отрыв и поперечный сдвиг) с помощью метода молекулярной динамики в программном комплексе LAMMPS.

2. Атомистическое моделирование процесса распространения трещины

2.1. Потенциал межатомного взаимодействия

Крайне важным в моделировании методом молекулярной динамики является задание потенциала, описывающего силовое поле в моделируемой системе. Для металлических материалов широко используется потенциал внедренного атома (EAM – embedded atom method), предложенный в [36]. Потенциал внедренного атома может достоверно описывать межатомные связи в металлах. В многочисленных работах [37–48] показано, что потенциал внедренного атома может очень эффективно описать влияние дефектов и трещин, и поэтому потенциал очень хорошо подходит для моделирования процессов разрушения металлических материалов. Полная потенциальная энергия системы при использовании потенциала внедренного атома имеет вид [37]

$$U = \sum_i F^i(\rho^i) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \varphi(r^{ij}), \quad \rho^i = \sum_{j \neq i} \rho^j(r^{ij}), \quad (13)$$

где F^i – энергия, являющаяся функцией атомистической плотности электронов ρ^i ; индексы i, j обозначают i -й и j -й атомы. Здесь плотность ρ^i обусловлена всеми другими атомами, взаимодействующими с i -м атомом. Обозначение $\varphi(r^{ij})$ представляет парный потенциал, и r^{ij} обозначает расстояние между i -м и j -м атомами. Для меди и алюминия потенциалы, предложенные и развитые в [45, 46], были параметризованы с помощью различных экспериментальных данных и *ab initio* расчетов [45, 46]. Потенциал внедренного атома хорошо воспроизводит упругие постоянные материала, энергию формирования вакансий, поверхностную энергию материала и другие свойства металлов [38–50].

2.2. Определение напряжений

Определение напряжений при атомистическом моделировании отличается от концепции механики сплошных сред, но в целом атомистические вириальные напряжения эквивалентны напряжениям Коши континуальной механики. В атомистическом подходе компоненты тензора напряжений вычисляются в соответствии с выражением [42]

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \sum_i \left[\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (r_\alpha^j - r_\alpha^i) f_\beta^{ij} - m^i v_\alpha^i v_\beta^i \right], \quad (14)$$

где α, β – индексы декартовой прямоугольной системы координат; V – полный объем системы. Здесь i -й атом имеет N соседних атомов с номерами $j = 1, N$. Обозначения r_α^i и r_α^j приняты для координат положения атома i и атома j ; f_β^{ij} – компонента силы, действующей

щей на атом i со стороны атома j ; m^i – масса i -го атома и v_α^i и v_β^i – скорости атома i вдоль направлений α и β соответственно. В каждый момент времени положения и скорости атомов получаются путём решения уравнений Ньютона. Напряжения в формуле (14) состоят из двух частей, определяемых потенциальной и кинетической энергией системы.

2.3. Детали моделирования

В качестве объекта моделирования нами была выбрана пластинка монокристаллической FCC-меди с заранее созданной центральной трещиной. Периодические граничные условия были использованы в двух направлениях – в случае плоского напряжённого состояния, и в трёх – в случае плоского деформированного состояния. Ячейка моделирования содержала порядка 400 тысяч атомов в основной серии численных экспериментов и до 800 тысяч в отдельных случаях. Для поддержания температурного режима использовался термостат Нойза-Гувера [51] в каноническом (NVT) ансамбле. Процесс квазистатического распространения центральной трещины в медной пластине в условиях смешанного нагружения моделировался в программе LAMMPS. Шаг интегрирования в модели был равен 1 фемтосекунде. Скорость деформации при задании граничных условий изменялась от 0,001/(1fs) до 0,04/(1fs). Результаты вычислений анализировались с помощью программы OVITO [52, 53], а также авторских программ обработки результатов вычислений. Результаты расчетов показаны на рис. 1–8.

На рис. 1–3 показан процесс деформирования пластины и распространения трещины для значений параметра смешанности нагружения $M^e = 0,3$ и $M^e = 0,5$, который вычислялся как

$$M^e = \frac{2}{\pi} \arctan \frac{\varepsilon_{22}}{\varepsilon_{12}}. \quad (15)$$

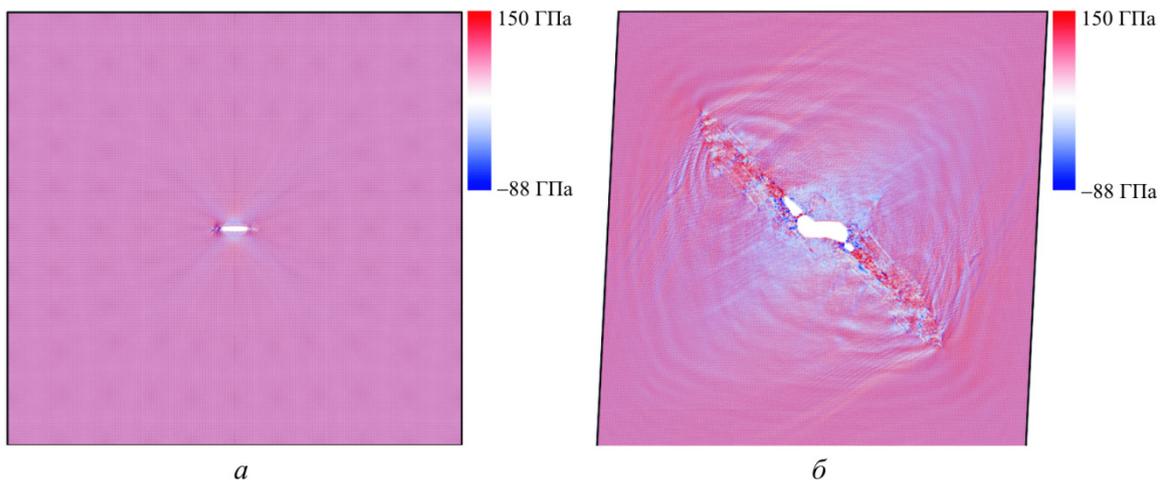


Рис. 1. Медная пластинка с центральной трещиной после процесса минимизации энергии (а) и после 25 пс (б), распределение компоненты тензора σ_{11} (смешанное нагружение для параметра смешанности нагружения $M^e = 0,3$)

Fig. 1. Copper plate with a central crack after the energy minimization process and after 25 picoseconds: the distribution of the tensor component σ_{11} (mixed loading for the mixed-load parameter $M^e = 0,3$)

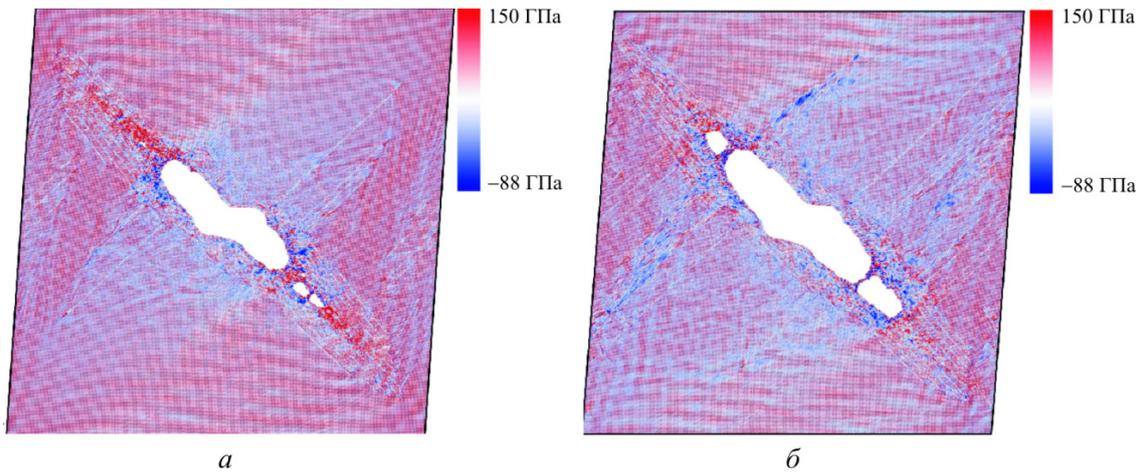


Рис. 2. Медная пластина с растущей трещиной после 35 пс (а) и 45 пс (б), распределение компоненты тензора σ_{11} (смешанное нагружение для параметра смешанности нагружения $M^e = 0,3$)
 Fig. 2. Copper plate with a growing crack after 35 picoseconds and 45 picoseconds: the distribution of the tensor component σ_{11} (mixed loading for the mixed-load parameter $M^e = 0.3$)

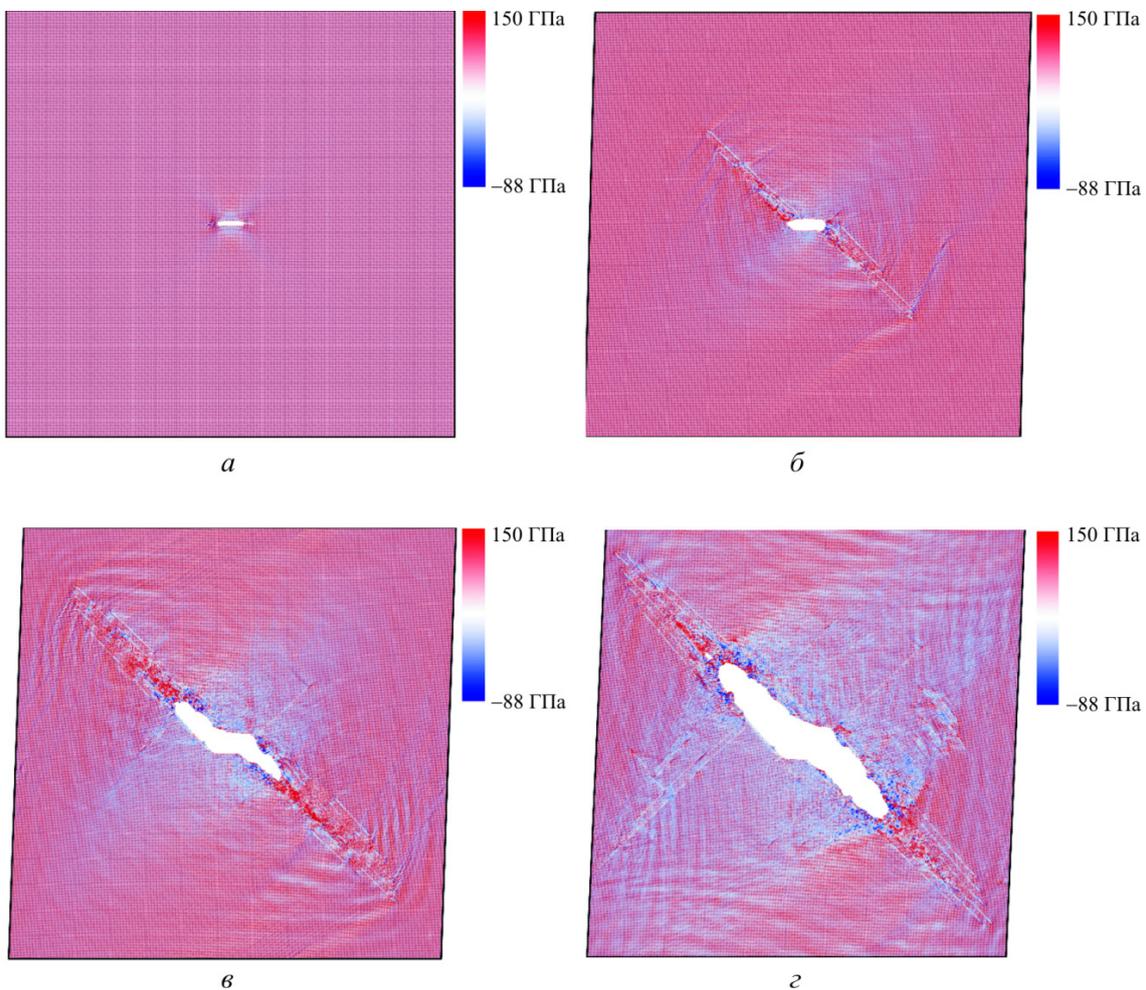


Рис. 3. Медная пластина в условиях смешанного деформирования для значения параметра смешанности нагружения $M^e = 0,5$: а – пластина в начальный момент времени; б – после 25 пс (цветом показано распределение компоненты тензора напряжений σ_{11}); в – после 35 пс; г – 45 пс
 Fig. 3. Copper plate under mixed deformation for the value of the mixed-load parameter $M^e = 0.5$. At the top: the plate at the initial moment of time (on the left) and after 25 picoseconds (on the right) (the color shows the distribution of the stress tensor component); at the bottom: after 35 picoseconds (on the left) and 45 picoseconds (on the right)

На рис. 4–6 показаны процессы деформирования образца и распространения трещины для параметра смешанности нагружения $M^e = 0,7$. На рис. 1 изображен процесс роста дефекта в медной пластине, на рис. 1, *a* изображена пластина сразу после минимизации энергии, на рис. 1, *б* – после 25 пс. На рис. 2 изображена пластина с растущей трещиной после 35 и 45 пс (распределение компоненты σ_{11}). На рис. 3 показана пластина с центральной трещиной в условиях смешанного деформирования для значения параметра смешанности нагружения $M^e = 0,5$. На рис. 1–3 показано распределение нормальной компоненты тензора напряжения σ_{11} .

Для правильного учета всех факторов, влияющих на процесс распространения трещины, был протестирован образец в условиях разных скоростей деформирования. Результаты более медленного нагружения представлены на рис. 7–11. Стоит отметить, что изменение скорости нагружения не оказало значительного влияния на направление роста трещины.

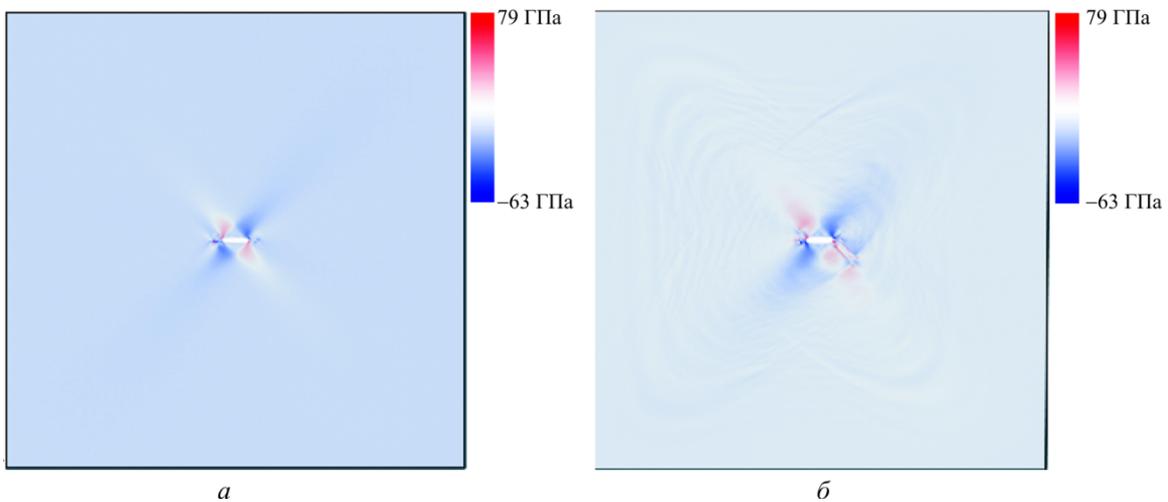


Рис. 4. Медная пластина непосредственно после процедуры минимизации энергии (*a*) и после 25 пс (*б*) (показано распределение компоненты тензора напряжений σ_{12})
 Fig. 4. Copper plate directly after the energy minimization procedure and after 25 picoseconds. The distribution of the stress tensor component σ_{12}

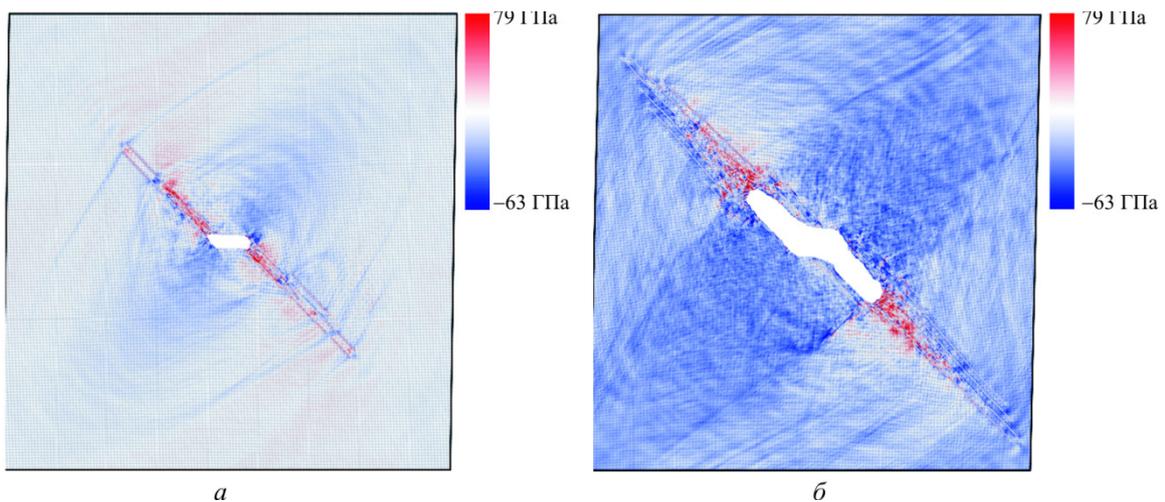


Рис. 5. Медная пластина для $M^p = 0,7$: после 35 пс (*a*) и после 45 пс (*б*).
 Распределение компоненты σ_{12}
 Fig. 5. Copper plate for $M^p = 0.7$ after 35 picoseconds and 45 picoseconds. The distribution of σ_{12} component

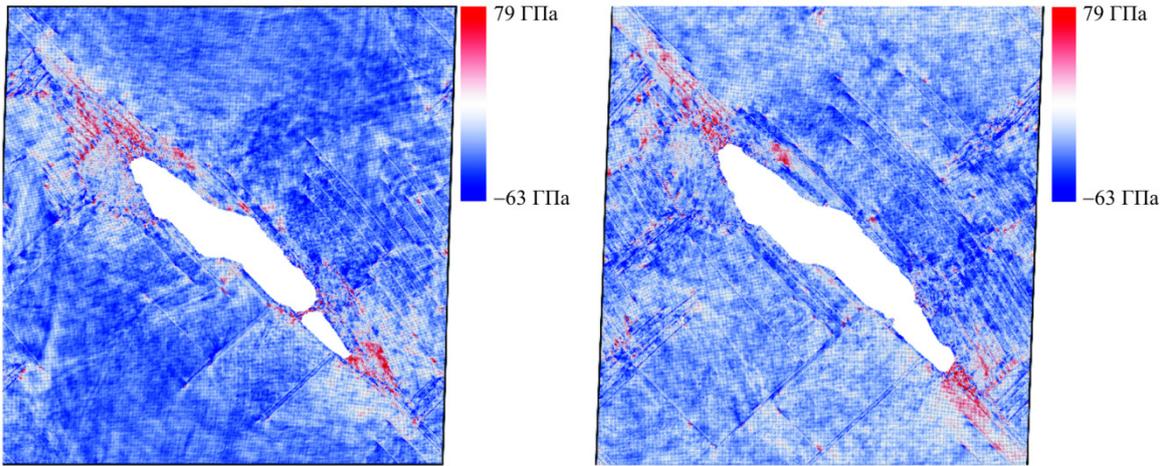


Рис. 6. Пластина с центральной трещиной в условиях смешанного нагружения $M^e = 0,7$: при 60 пс (а) и при 75 пс (б) (распределение компоненты тензора напряжений σ_{12})

Fig. 6. Plate with a central crack under mixed loading $M^e = 0.7$ at 60 picoseconds (on the left) and 75 picoseconds (on the right) (distribution of the stress tensor component σ_{12})

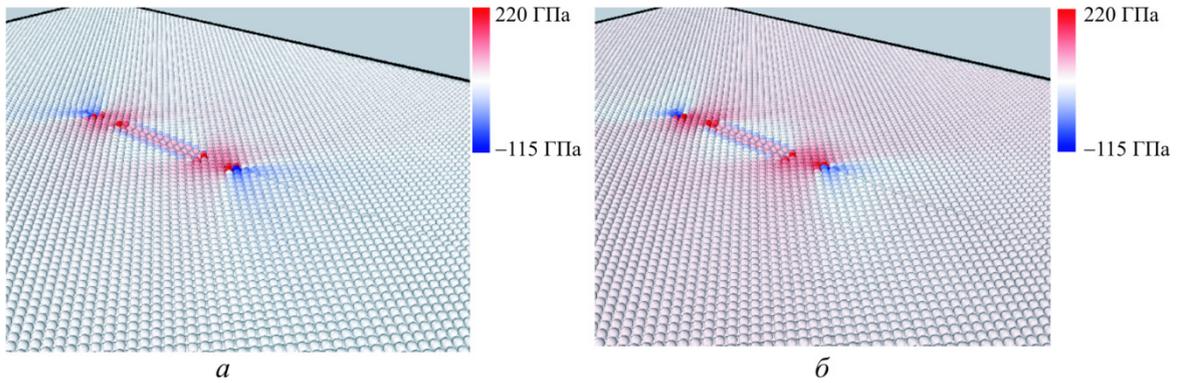


Рис. 7. Распределение компоненты тензора σ_{22} в медной пластине с центральной трещиной после процесса минимизации энергии (а) и после 25 пс (б)

Fig. 7. The distribution of the tensor component σ_{22} in a copper plate with a central crack after the energy minimization process and after 25 picoseconds

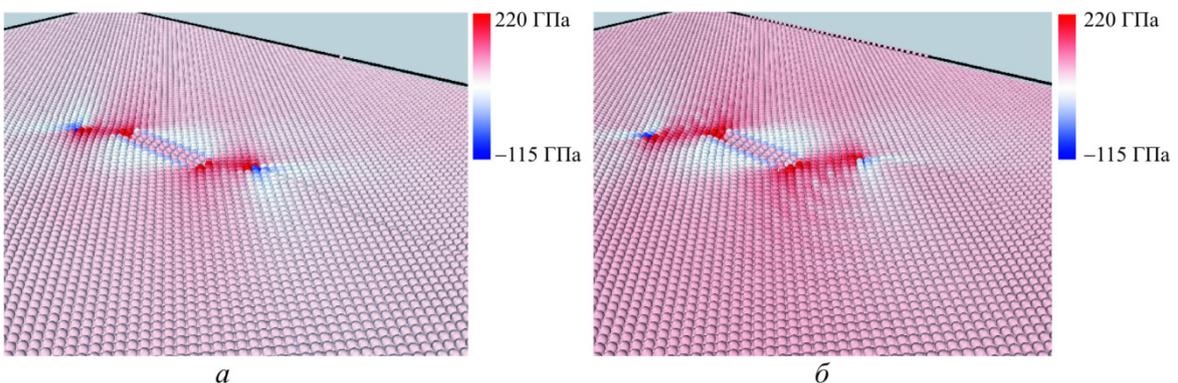


Рис. 8. Распределение компоненты тензора σ_{22} в медной пластине с центральной трещиной после 35 пс (а) и после 45 пс (б)

Fig. 8. The distribution of the tensor component σ_{22} in a copper plate with a central crack after 35 and 45 picoseconds

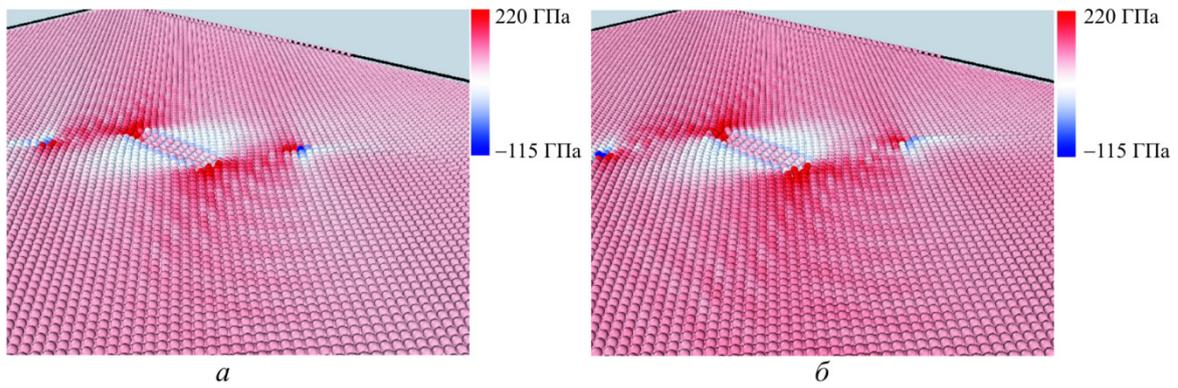


Рис. 9. Распределение компоненты тензора σ_{22} в медной пластине с центральной трещиной после 55 пс (а) и после 65 пс (б)
Fig. 9. The distribution of the tensor component σ_{22} in a copper plate with a central crack after 55 and 65 picoseconds

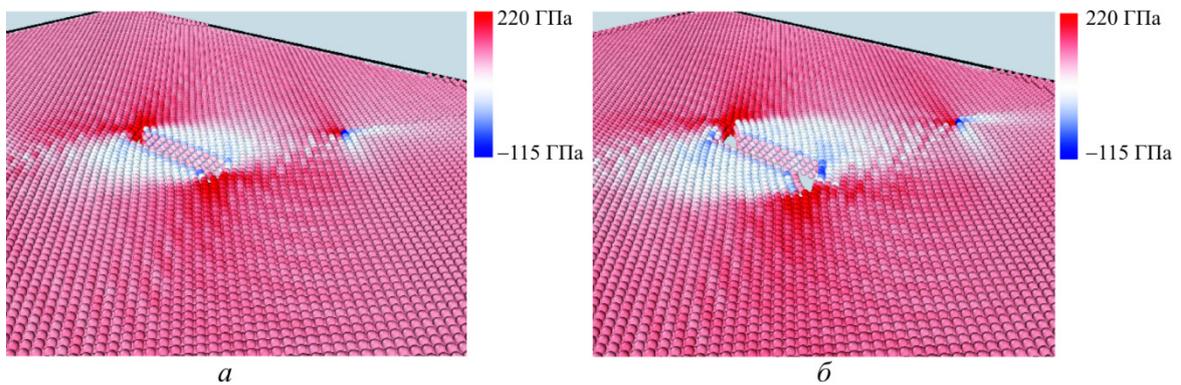


Рис. 10. Распределение компоненты тензора σ_{22} в медной пластине с центральной трещиной после 75 пс (а) и после 85 пс (б)
Fig. 10. The distribution of the tensor component σ_{22} in a copper plate with a central crack after 75 and 85 picoseconds

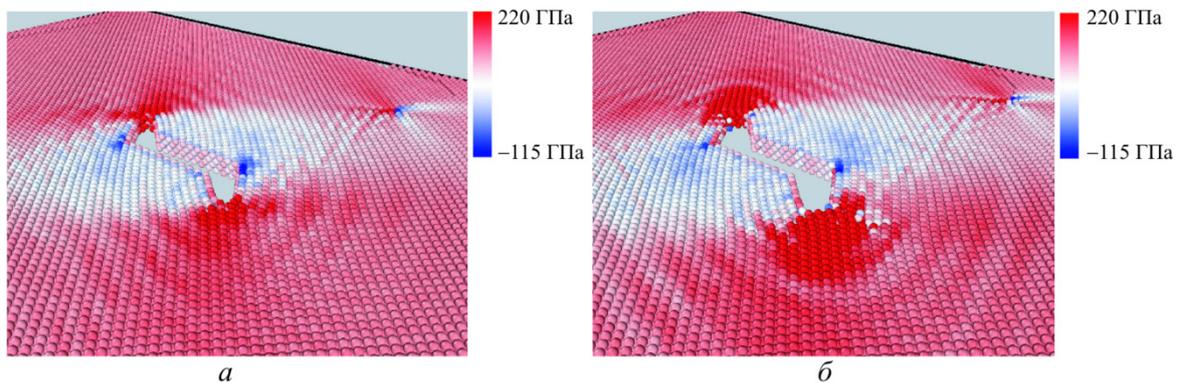


Рис. 11. Распределение компоненты тензора σ_{22} в медной пластине с центральной трещиной после 95 пс (а) и после 105 пс (б)
Fig. 11. The distribution of the tensor component σ_{22} in a copper plate with a central crack after 95 and 105 picoseconds

Кривая интенсивность напряжений-интенсивность деформации для кристалла меди показана на рис. 12. Интенсивность напряжений и интенсивность деформаций для тонкой пластины вычислялись по формулам

$$\sigma_e = \sqrt{\sigma_{11}^2 + \sigma_{22}^2 - \sigma_{11}\sigma_{22} + 3\sigma_{12}^2}, \quad (16)$$

$$\varepsilon_e = \frac{2}{3} \sqrt{\varepsilon_{11}^2 + \varepsilon_{22}^2 + \varepsilon_{33}^2 - \varepsilon_{11}\varepsilon_{22} - \varepsilon_{11}\varepsilon_{33} - \varepsilon_{22}\varepsilon_{33} + 3\varepsilon_{12}^2}. \quad (17)$$

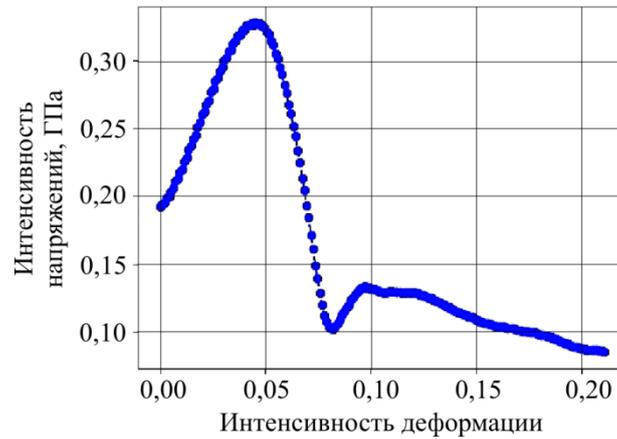


Рис. 12. Кривая интенсивность напряжения – интенсивность деформации для кристалла меди, полученная в ходе расчета
 Fig. 12. Stress intensity curve, the intensity of deformation for a crystal of copper obtained during the calculation

Из графика, приведенного на рис. 12, видно, что пластина остается упругой до достижения значения интенсивности деформаций 5 %. Последующее пластическое течение, обусловленное развитием дислокаций, приводит к затуплению трещины, что видно из рис. 2, 3, 6. Это явление подтверждается результатами расчетов, выполненных ранее [37, 38]. Процесс зарождения, роста и слияния вакансий у вершины трещины показан на рис. 13. Из рис. 13 ясно видно, что в окрестности вершины трещины образуются, развиваются и сливаются микродефекты, полости и вакансии.

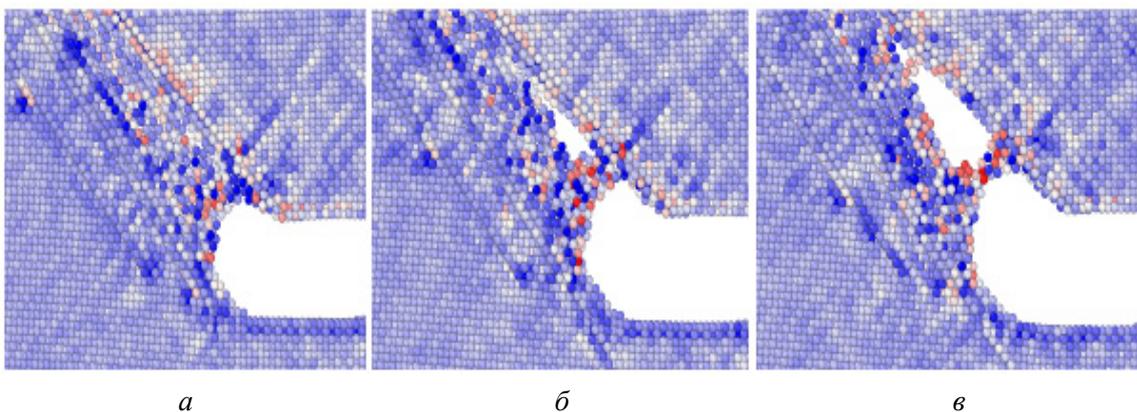


Рис. 13. Процесс деформирования у вершины трещины в условиях смешанного деформирования: появление вакансий (а), их рост (б) и их слияние (в)
 Fig. 13. The process of deformation at the crack tip under mixed-load deformation: the start of vacancies (picture on the left), their growth (in the center) and their junction (on the right)

Поскольку температурные эффекты могут оказать значительное влияние на процесс распространения трещины, мы провели серию экспериментов при различных параметрах термостата. На рис. 14, а, б, в приведены графики зависимости температуры от времени моделирования в сериях вычислений с различной начальной температурой 0,1; 77, 150К соответственно. Сопоставляя значения времени на различных этапах моделирования, показанных на рис. 1–3, можно увидеть, что при низких температурах наблюдается развитие острой трещины путем расклинивания (см. рис. 1, б). С ростом температуры начинает преобладать затупление трещины, а также видно увеличение количества вакансий перед вершиной трещины (см. рис. 2).

Легко заметить, что температура начинает резко возрастать с некоторого времени, до того оставаясь практически неизменной. Если посмотреть на поведение трещины в этот момент (см. рис. 1–11), можно увидеть первичное образование дислокаций, при помощи которых впоследствии распространяется трещина.

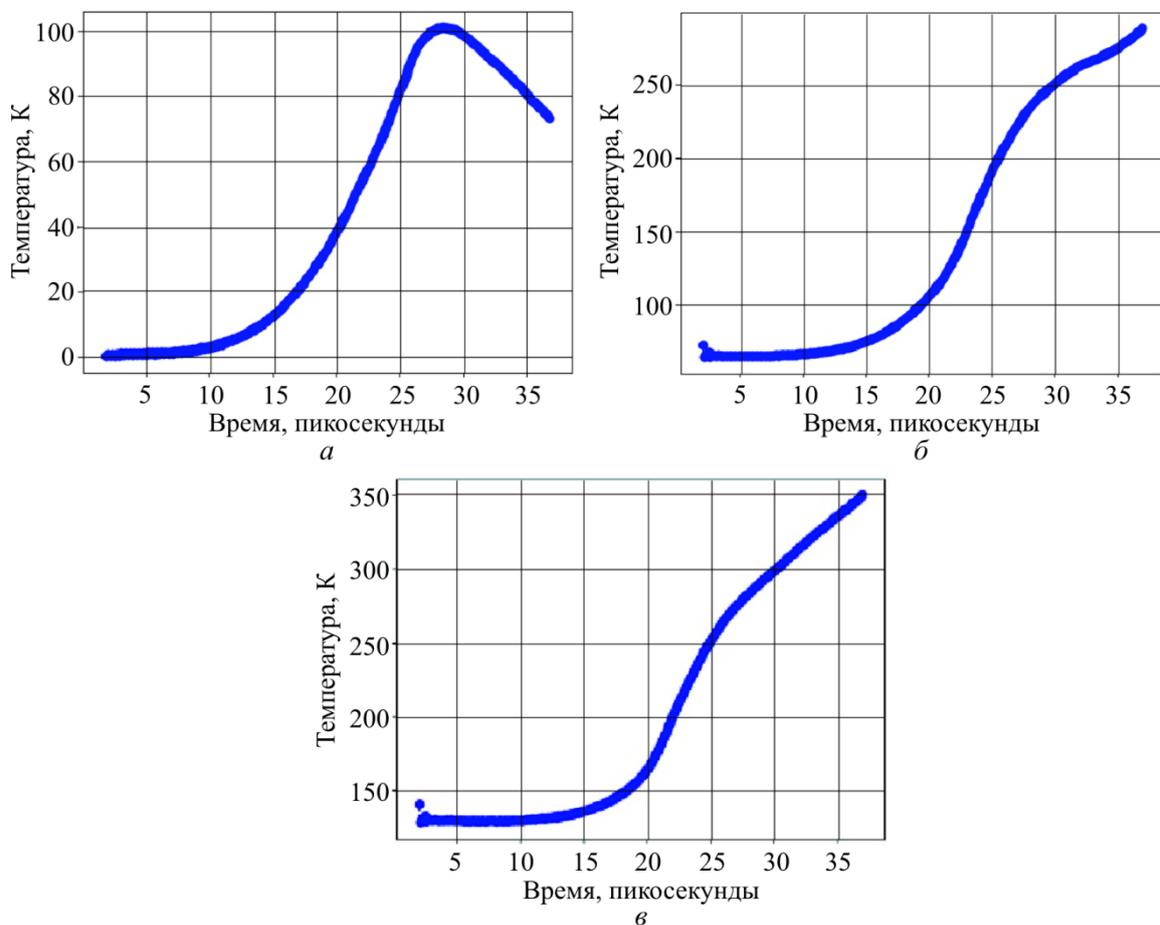


Рис. 14. Изменение температуры с течением времени
 Fig. 14. Alteration of temperature within time

Вычисления, проведенные с помощью метода молекулярной динамики для трех значений параметра смешанности нагружения M^e : 0,2; 0,3; 0,4; 0,5; 0,6 и 0,7, позволили получить следующие углы $-67,3^\circ$, $-59,6^\circ$, $-51,5^\circ$, $-46,6^\circ$, $-42,2^\circ$ и $-31,4^\circ$ соответственно, что хорошо согласуется с результатами классической линейной механики разрушения (см. табл. 2, 4). Следует отметить хорошее совпадение углов, полученных методом мо-

лекулярной динамики и с помощью критериев классической механики разрушения, когда в асимптотическом разложении М. Уильямса (5) удерживаются слагаемые высоких порядков.

Выводы и обсуждение результатов

В работе определены углы распространения центральной трещины в пластине, находящейся в условиях смешанного нагружения в полном диапазоне смешанных форм нагружения, изменяющихся от нормального отрыва до поперечного сдвига. Углы распространения трещины найдены 1) с помощью обобщенных критериев разрушения континуальной механики: обобщенного критерия максимального тангенциального напряжения и обобщенного критерия минимума плотности энергии упругой деформации; 2) с помощью атомистического моделирования методом молекулярной динамики в программном комплексе LAMMPS. Для вычисления углов направления распространения трещины с помощью критериев механики разрушения использовалось многопараметрическое асимптотическое разложение поля напряжения у вершины трещины, в котором удерживались высшие приближения. Показано, что удержание высших приближений существенно влияет на значение угла распространения трещины. Также на основе атомистического моделирования на примере кристалла меди определены углы направления роста трещины. Проведено сравнение углов, полученных с помощью двух различных подходов: континуального и дискретного. Показано, что углы, определенные с помощью двух различных подходов, близки друг к другу, особенно в тех случаях, когда учитываются высшие приближения в полном асимптотическом разложении М. Уильямса поля напряжений у вершины трещины.

На основании проведенного анализа смешанного нагружения пластины с центральной трещиной можно заключить, что моделирование роста трещины с помощью метода молекулярной динамики является мощным и действенным средством понимания процессов разрушения и деформирования твердых тел с дефектами. Возможным и перспективным направлением дальнейших исследований является создание многоскейлинговых моделей разрушения на различных масштабных уровнях [54–59], что даст возможность более глубокого понимания механизмов разрушения и реалистичного описания процесса роста трещины при сложных условиях нагружения.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №16-08-00571).

Авторы выражают глубокую признательность профессору кафедры физики Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королева д.ф.-м.н. В.А. Салееву за инициативу в проведении данного исследования.

Расчеты были проведены на кластере «Сергей Королев» суперкомпьютерного центра Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королева.

Acknowledgments

The work has been carried out with the financial support from the Russian Foundation for Basic Research (Grant №16-08-00571).

The authors extend their appreciation to V.A. Saleyev, Doctor of Medical Sciences, Professor of the Physics Department of the Samara National Research University named after Academician S.P. Korolev for the initiative in carrying out this study.

The calculations were carried out using the cluster "Sergey Korolev" of the Supercomputer Center of the Samara National Research University named after Academician S.P. Korolev.

Библиографический список

1. Кулиев В.Д., Морозов Е.М. Градиентный деформационный критерий хрупкого разрушения // Живучесть и конструкционное материаловедение (ЖИВКОМ-2016): тр. конф. / Институт машиноведения им. А.А. Благонравова. – М., 2016. – С. 24–27.
2. Матвиенко Ю.Г. Моделирование кинетики развития трещин в поверхностных слоях материала // Заводская лаборатория. – 2017. – Т. 83, № 1. – С. 65–71.
3. Berto F., Ayatollahi M.R. A review of the local strain energy density approach to V-notches // Physical mesomechanics. – 2017. – Vol. 20. – No. 2. – P. 14–27.
4. Matvienko Y.G., Morozov E.M. Two basic approaches in a search of the crack propagation angle // Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures, 2017. DOI: 10.1111/ffe.12583
5. 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. – 2017. – No. 1. – С. 33–56.
6. 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. – Vol. 120. – P. 137–145.
7. 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. – 2017. – No. 33. – P. 25–33.
8. 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. – No. 33. – P. 25–32.
9. Malikova L. Multi-parameter fracture criteria for the estimation of crack propagation direction applied to a mixed-mode geometry // Engineering fracture mechanics. – 2015. – No. 143. – P. 32–46.
10. Malikova L., Vesely V. Influence of the elastic mismatch on crack propagation in a silicate-based composite // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. – 2017. – Vol. 91. – P. 25–30.
11. Crack propagation in non-homogenous materials: Evaluation of mixed-mode SIFs, T-stress and kinking angle using a variant of EFG Method / N. Muthu, S.K. Maiti, B.G. Falzon, W. Yan // Engineering Analysis With Boundary Elements. – 2016. – Vol. 72. – P. 11–26.
12. 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. – R. 75. – P. 1–48.
13. 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.
14. Sih G.C. Strain-energy factor applied to mixed mode crack problems // Int. J. Fracture. – 1974. – Vol. 10. – P. 305–321.
15. Li Q.M. Strain energy density failure criterion // International Journal of Solids and Structures. – 2001. – Vol. 38. – P. 6997–7013.
16. 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

17. Wulfinghoff S., Fassin M., Reese S. A damage growth criterion for anisotropic damage models motivated from micromechanics // *International Journal of Solids and Structures*. – 2017. – Vol. 121. – P. 21–32.
18. 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. – Vol. 79. – P. 70–76.
19. Local strain energy density to predict size-dependent brittle fracture of cracked specimens under mixed mode loading / F. Berto, M.R. Ayatollahi, T. Borsato, P. Ferro // *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. – 2016. – Vol. 86. – P. 217–224.
20. Mirsayar M.M. Mixed mode fracture analysis using extended maximum tangential strain criterion // *Materials and Design*. – 2015. – Vol. 86. – P. 941–947.
21. Seidl S., Malikova L. Williams expansion-based approximation of the stress field in an Al 2024 body with a crack from optical measurements // *Frattura ed Integrita Strutturale*. – 2017. – No. 41. – P. 323–331.
22. 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. – Vol. 100–101. – P. 11–28.
23. Stepanova L., Roslyakov P. Complete Williams asymptotic expansion of the stress field near the crack tip: Analytical solutions, interference–optic methods and numerical experiments // *AIP Conference Proceedings*. – 2016. – Vol. 1785. – 030029.
24. Степанова Л.В., Росляков П.С. Полное асимптотическое разложение М. Уильямса у вершин двух коллинеарных трещин конечной длины в бесконечной пластине // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. – 2015. – № 4. – P. 188–225.
25. Hello G., Tahar M.B., Roelandt 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. – Vol. 49. – P. 556–566.
26. 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. – Vol. 8. – No. 2. – P. 168–181.
27. Stepanova L.V., Adylina E.M. Stress-strain state in the vicinity of a crack tip under mixed loading // *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. – 2014. – Vol. 55(5). – P. 885–895.
28. Krepl O., Klusak J. The influence of non-singular terms on the precision of stress description near a sharp material inclusion tip // *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. – 2017. – Vol. 90. – P. 85–99.
29. Stepanova L.V. Eigenspectra and orders of stress singularity at a mode I crack tip for a power-law medium // *Comptes Rendus – Mecanique*. – 2008. – Vol. 336. – No. 1-2. – P. 232–237.
30. Stepanova L.V. Eigenvalue of the antiplane shear crack problem for a power-law material // *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. – 2008. – Vol. 49. – No. 1. – P. 142–147.
31. Ayatollahi M.R., Moazzami M. Digital image correlation method for calculating coefficients of Williams expansion in compact tension specimen // *Optics and Lasers in Engineering*. – 2017. – Vol. 90. – P. 26–33.
32. Stepanova L.V., Fedina M.Ye. Self-similar solution of a tensile crack problem in a coupled formulation // *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*. – 2008. – Vol. 72. – No. 3. – P. 360–368.
33. Stepanova L.V. Eigenvalue analysis for a crack in power-law material // *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. – 2009. – Vol. 49. – No. 8. – P. 1332–1347.
34. Malikova L., Klusak J., Kersner Z. Assessment of Crack Stability in a Quasi-brittle Particle Composite // *Procedia Engineering*. – 2017. – Vol. 190. – P. 49–53.
35. Stepanova L.V., Yakovleva E.M. Mixed-mode loading of the cracked plate under plane stress conditions // *PNRPU Mechanics Bulletin*. – 2014. – No. 3. – P. 129–162. DOI: 10.15593/perm.mech/2014.3.08

36. 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. – Vol. 33. – P. 7983–7991.
37. Cui C.B., Beom H.G. Molecular dynamics simulation of edge cracks in copper and aluminium single crystals // *Materials Science and Engineering A*. – 2014. – Vol. 609. – P. 102–109. DOI: 10.1016/j.msea.2014.04.101
38. 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. – Vol. 47. – P. 503–509.
39. Atomistic modeling for mechanism of crack cleavage extension on nano-scale / Y.-J. Gao, Q.-Q. Deng, L.Ye. Huang, Z.C. Wen, Zhi-R. Luo // *Computational Materials Science*. – 2017. – Vol. 130. – P. 64–75.
40. Cui C.B., Lee G.H., Beom H.G. Mixed-mode fracture toughness evaluation of a copper single crystal using atomistic simulations // *Computational Materials Science*. – 2017. – Vol. 136. – P. 216–222.
41. Andric P., Curtin W.A. New theory for Mode I crack-tip dislocation emission // *Journal of Mechanics and Physics of Solids*. – 2017. – Vol. 106. – P. 315–337.
42. Hardy R.J. Formulas for determining local properties in molecular-dynamics simulations: shock waves // *Journal Chemical Physics*. – 1982. – Vol. 76. – P. 622–628.
43. Calculation of stress in atomistic simulation. Calculation of stress in atomistic simulation / J.A. Zimmerman, E.B. Webb III, J.J. Hoyt, R.E. Jones, P.A. Klein, D.J. Bammann // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2004. – Vol. 12. – Iss. 4. – P. S319–S332.
44. Tadmor E.B., Miller R.E. *Modeling Materials. Continuum, Atomistic and Multiscale Techniques*. – Cambridge: Cambridge University Press, 2011. – 789 p.
45. Structural stability and lattice defects in copper: *Ab initio*, tight-binding, and embedded-atom calculations / Y. Mishin, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos, A.F. Voter, J.D. Kress // *Physical Review B*. – 2001. – Vol. 63. – 224106-1–224106-16.
46. Mishin Y., Farkas D., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and *ab initio* calculations // *Physical Review B*. – 1999. – Vol. 59. – No. 5. – P. 3393–3407.
47. Molecular Dynamics Simulation of Crack Propagation in Single-Crystal Aluminum Plate with Central Cracks / J. Ding, L.-S. Wang, K. Song, B. Liu, X. Huang // *Journal of Nanomaterials*. – 2017. – 5181206. DOI: 10.1155/2017/5181206
48. Molecular dynamics simulation of crack growth behavior in Al in the presence of vacancies / S. Chandra, N.N. Kumar, M.K. Samal, V.M. Chavan, R.J. Patel // *Computational Materials Science*. – 2016. – Vol. 117. – P. 518–526.
49. Curtin W.A. What can atomistic modeling contribute to the understanding of fracture // 14th International Conference on Fracture (ICF 14), June 18–23, 2017. – Rhodes, Greece, 2017.
50. Daw M.S., Baskes M.I. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals // *Physical Review Letters*. – 1983. – Vol. 50. – P. 1285–1288.
51. Hoover W.G., Holian B.L. Kinetic moments method for the canonical ensemble distribution // *Physics Letters A*. – 1996. – Vol. 211. – No. 5. – P. 253–257. DOI: 10.1016/0375-9601(95)00973-6
52. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2009. – Vol. 18 (1). – 015012.
53. Stukowski A. *Visualisation and Analysis Strategies for Atomic Simulations // Introduction to Atomistic Simulation Methods*. Eds. C.R. Weinberger, G.J. Tucker– Berlin: Springer, 2016. – P. 317–336.
54. Mesh refinement schemes for the concurrent atomistic-continuum method / S. Xu, L. Xiong, Q. Deng, D.L. McDowell // *International Journal of Solids and Structure*. – 2016. – Vol. 90. – P. 144–152.
55. Li S., Urat S. An atomistic-to-continuum molecular dynamics: Theory, algorithm, and applications // *Computational Methods of Applied Mechanical Engineering*. – 2016. – Vol. 306. – P. 452–478.

56. Liew K.M., Yan J.-W., Zhang L.-W. Atomistic Finite Element Method and Coupling With Atomistic-Continuum Method // *Mechanical Behaviors of Carbon Nanotubes. Theoretical and Numerical Approaches*. Elsevier. – 2017. – P. 249–259.

57. Volegov P.S., Gribov D.S., Trusov P.V. Damage and fracture: Review of Experimental Studies // *Physical Mesomechanics Journal*. – 2016. – No. 3. – P. 319–331.

58. Volegov P.S., Gribov D.S., Trusov P.V. Damage and Fracture: Classical continuum Theories // *Physical Mesomechanics Journal*. – 2017. – No. 2. – P. 157–173.

59. Volegov P.S., Gribov D.S., Trusov P.V. Damage and Fracture: Crystal Plasticity Models // *Physical Mesomechanics Journal*. – 2017. – No. 2. – P. 174–184.

References

1. Kuliev V.D., Morozov E.M. Gradient deformation criterion of brittle fracture // Zhivuchect and konstrukcionnoe materialovedenie Zhivkom-2016). Materials of Conference. *Moscow: Institute of machines Science named after A.A. Blagonravov of the Russian Academy of Sciences*, 2016, pp. 24-27.

2. Matvienko Yu.G. Modeling of the crack growth kinetics in the surface layers of materials. *Industrial Laboratory*, 2017, vol. 83, no. 1, pp. 65-71.

3. Berto F., Ayatollahi M.R. A review of the local strain energy density approach to V-notches. *Physical mesomechanics*, 2017, vol 20, no. 2, pp. 14-27.

4. Matvienko Y.G., Morozov E.M. Two basic approaches in a search of the crack propagation angle. *Fatigue & Fracture of Engineering materials & Structures*, 2017. DOI: 10.1111/ffe.12583.

5. 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*, 2017, no. 1, pp. 33-56.

6. 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, vol. 120, pp. 137-145.

7. 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*, 2017, no. 33, pp. 25-33.

8. 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, no. 33, pp. 25-32.

9. Malikova L. Multi-parameter fracture criteria for the estimation of crack propagation direction applied to a mixed-mode geometry. *Engineering fracture mechanics*, 2015, no. 143, pp. 32-46.

10. Malikova L., Vesely, V. Influence of the elastic mismatch on crack propagation in a silicate-based composite. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 2017, vol. 91, pp. 25-30.

11. 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, vol. 72, pp. 11-26.

12. 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, no. 75, pp. 1-48.

13. 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.

14. Sih G.C. Strain-energy factor applied to mixed mode crack problems. *Int. J. Fracture*, 1974, vol. 10, pp. 305-321.

15. Li Q.M. Strain energy density failure criterion. *International Journal of Solids and Structures*, 2001, vol. 38, pp. 6997-7013.

16. 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, pp. 1-9. DOI: 10.1111/ffe.12665.

17. Wulfinghoff S., Fassin M., Reese S. A damage growth criterion for anisotropic damage models motivated from micromechanics. *International Journal of Solids and Structures*, 2017, vol. 121, pp. 21-32.

18. 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, vol. 79, pp. 70-76.

19. 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, vol. 86, pp. 217-224.
20. Mirsayar M.M. Mixed mode fracture analysis using extended maximum tangential strain criterion. *Materials and Design*, 2015, vol. 86, pp. 941-947.
21. Seitl S., Malikova L. Williams expansion-based approximation of the stress field in an Al 2024 body with a crack from optical measurements. *Frattura ed Integrita Strutturale*, 2017, no. 41, pp. 323-331.
22. 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, vol. 100-101, pp. 11-28.
23. Stepanova L., Roslyakov P. Complete Williams asymptotic expansion of the stress field near the crack tip: Analytical solutions, interference-optic methods and numerical experiments. *AIP Conference Proceedings*, 2016, vol. 1785, 030029.
24. Stepanova L.V., Roslyakov P.S. Complete asymptotic expansion m. williams near the crack tips of collinear cracks of equal lengths in an infinite plane medium. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2015, no. 4, pp. 188-225.
25. Hello G., Tahar M.B., Roelandt 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, vol. 49, pp. 556-566.
26. 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, vol. 8, no. 2, pp. 168-181.
27. Stepanova L.V., Adylina E.M., 2014. Stress-strain state in the vicinity of a crack tip under mixed loading. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2014, vol. 55(5), pp. 885-895.
28. Krepl O., Klusak J. The influence of non-singular terms on the precision of stress description near a sharp material inclusion tip. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 2017, vol. 90, pp. 85-99.
29. Stepanova L.V. Eigenspectra and orders of stress singularity at a mode I crack tip for a power-law medium. *Comptes Rendus – Mecanique*, 2008, vol. 336, no. 1-2, pp. 232-237.
30. Stepanova L.V. Eigenvalue of the antiplane shear crack problem for a power-law material. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2008, vol. 49, no. 1, pp. 142-147.
31. Ayatollahi M.R., Moazzami M. Digital image correlation method for calculating coefficients of Williams expansion in compact tension specimen. *Optics and Lasers in Engineering*, 2017, vol. 90, pp. 26-33.
32. Stepanova L.V., Fedina M.Ye. Self-similar solution of a tensile crack problem in a coupled formulation. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 2008, vol. 72, no. 3, pp. 360-368.
33. Stepanova L.V. Eigenvalue analysis for a crack in power-law material. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2009, vol. 49, no. 8, pp.1332-1347.
34. Malikova L., Klusak J., Kersner Z. Assessment of Crack Stability in a Quasi-brittle Particle Composite. *Procedia Engineering*, 2017, vol. 190, pp. 49-53.
35. Stepanova L.V., Yakovleva E.M. Mixed-mode loading of the cracked plate under plane stress conditions. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2014, no. 3, pp. 129-162. DOI:10.15593/perm.mech/2014.3.08.
36. 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, vol. 33, pp. 7983-7991
37. Cui C.B., Beom H.G. Molecular dynamics simulation of edge cracks in copper and aluminium single crystals. *Materials Science and Engineering A*, 2014, vol. 609, pp. 102-109. DOI: 10.1016/j.msea.2014.04.101
38. 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, vol. 47, pp. 503-509.
39. Gao Y.-J., Deng Q.-Q., Huang L.Ye, Wen Z.C., Luo Zhi-R. Atomistic modeling for mechanism of crack cleavage extension on nano-scale. *Computational Materials Science*, 2017, vol. 130, pp. 64-75.
40. Cui C.B., Lee G.H., Beom H.G. Mixed-mode fracture toughness evaluation of a copper single crystal using atomistic simulations. *Computational Materials Science*, 2017, vol. 136, pp. 216 – 222.
41. Andric P., Curtin W.A. New theory for Mode I crack-tip dislocation emission. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 2017, vol. 106, pp. 315-337.
42. Hardy R.J. Formulas for determining local properties in molecular-dynamics simulations: shock waves. *Journal Chemical Physics*, 1982, vol. 76, pp. 622-628.

43. 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. Calculation of stress in atomistic simulation. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2004, vol. 12, is. 4, pp. S319–S332.
44. Tadmor E.B., Miller R.E. Modeling Materials. Continuum, Atomistic and Multiscaling Techniques. *Cambridge: Cambridge University Press*, 2011, 789 p.
45. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A., Voter A.F., Kress J.D. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations. *Physical Review B*, 2001, vol. 63, 224106-1-224106-16.
46. Mishin Y., Farkas D., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and *ab initio* calculations. *Physical Review B*, 1999, vol. 59, no. 5, pp. 3393–3407.
47. Ding J., Wang L.-S., Song K., Liu B., Huang X. Molecular Dynamics Simulation of Crack Propagation in Single-Crystal Aluminum Plate with Central Cracks. *Journal of Nanomaterials*, 2017, 5181206. DOI: 10.1155/2017/5181206.
48. Chandra S., Kumar N.N., Samal M.K., Chavan V.M., Patel, R.J. Molecular dynamics simulation of crack growth behavior in Al in the presence of vacancies. *Computational Materials Science*, 2016, vol. 117, pp. 518-526.
49. Curtin W.A. What can atomistic modeling contribute to the understanding of fracture. *14th International Conference on Fracture (ICF 14), June 18-23, 2017, Rhodes, Greece*.
50. Daw M.S., Baskes M.I. Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals. *Physical Review Letters*, 1983, vol. 50, pp. 1285-1288.
51. Hoover W.G., Holian B.L. Kinetic moments method for the canonical ensemble distribution. *Physics Letters A*, 1996, vol. 211, no. 5, pp. 253–257. DOI:10.1016/0375-9601(95)00973-6.
52. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2009, vol. 18(1), 015012.
53. Stukowski A. Visualisation and Analysis Strategies for Atomic Simulations. In: Introduction to Atomistic Simulation Methods Eds. Weinberger C.R., Tucker G.J. *Berlin: Springer*, 2016, pp. 317-336.
54. Xu S., Xiong L., Deng Q., McDowell D.L. Mesh refinement schemes for the concurrent atomistic-continuum method. *International Journal of Solids and Structure*, 2016, vol. 90, pp. 144-152.
55. Li S., Urat S. An atomistic-to-continuum molecular dynamics: Theory, algorithm, and applications. *Computational Methods of Applied Mechanical Engineering*, 2016, vol. 306, pp. 452-478.
56. Liew K.M., Yan J.-W., Zhang L.-W. Atomistic Finite Element Method and Coupling With Atomistic-Continuum Method. *Mechanical Behaviors of Carbon Nanotubes. Theoretical and Numerical Approaches. Elsevier*, 2017, pp. 249-259.
57. Volegov P.S., Gribov D.S., Trusov P.V. Damage and fracture: Review of Experimental Studies. *Physical Mesomechanics Journal*. 2016, no. 3, pp. 319-331.
58. Volegov P.S., Gribov D.S., Trusov P.V. Damage and Fracture: Classical continuum Theories. *Physical Mesomechanics Journal*, 2017, no. 2, pp. 157-173.
59. Volegov P.S., Gribov D.S., Trusov P.V. Damage and Fracture: Crystal Plasticity Models. *Physical Mesomechanics Journal*, 2017, no. 2, pp. 174-184.