А.М. КРИВЦОВ

ДЕФОРМИРОВАНИЕ и разрушение твердых тел с микроструктурой



Кривцов А.М.

Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой



УДК 539.4 ББК 30.121 К 82

Кривцов А. М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. — 304 с. — ISBN 978-5-9221-0803-4.

В монографии изложены новейшие достижения в области аналитического и компьютерного моделирования механических процессов в конденсированном веществе с микроструктурой. Подробно обсуждаются как методы компьютерного моделирования, так и теоретические основы описания процессов деформирования и разрушения. Подходы, рассматриваемые в книге, особенно важны для описания процессов, при которых происходит нарушение сплошности материала, а также при переходе на масштабные уровни, на которых существенным оказывается учет атомарного строения вещества, в частности, для описания наноструктур.

Монография содержит как оригинальные результаты автора, так и необходимые сведения учебного характера из соответствующих разделов механики. Книга основана на материалах, опубликованных автором в последние годы в российских и зарубежных издательствах.

Для научных сотрудников, преподавателей, аспирантов и студентов вузов, обучающихся по физическим и математическим специальностям.

ISBN 978-5-9221-0803-4

Оглавление

Часть І

7

Введение

Incid I	
Компьютерное моделирование деформирования и разрушени твердых тел с микроструктурой	я
Глава 1. Техника моделирования	19
1.1. Уравнения движения	19
1.2. Более сложные модели, используемые в методе частиц	22
1.3. Интегрирование уравнений движения	24
1.4. Потенциалы взаимодействия	28
1.5. Диссипация	41
1.6. Нахождение ряда макроскопических характеристик простых	
кристаллических решеток	42
1.7. Равновесное состояние кристаллической решетки	54
1.8. Определение параметров моделирования	57
Глава 2. Компьютерное моделирование неупругого деформи-	
рования	04
2.1. Система из четырех взаимодеиствующих частиц	04
2.2. Ступенчатый характер диаграммы нагружения	07
2.3. Ударное деформирование	69
2.4. Гермическая коррозия	70
2.5. Пробитие преград деформируемым ударником	71
2.6. Разрушение шара под действием сферической волны растяже- 	72
	79
2.7. Заключительные замечания	10
Глава 3. Возбуждение хаотической составляющей скоростей	
частиц в результате прохождения ударной волны	79
3.1. Расчетная модель	80
3.2. Результаты	82
3.3. Обсуждение	94
3.4. Выводы	95

4 Оглавление	
Глава 4. Влияние хаотической составляющей движения ча	1 -
стиц на откольную прочность	96
4.1. Расчетная модель	96
4.2. Результаты	98
4.3. Зависимость прочности от начальной девиации скоростей частиц	111
4.4. Обсуждение	112
4.5. Выводы	113
Глава 5. Трехмерные эффекты при компьютерном моделиро)-
вании откольного разрушения	115
5.1. Моделирование с относительно небольшим числом частиц	115
5.2. Моделирование больших трехмерных систем	118
5.3. Заключение	121
Глава 6. Аморфный материал Леннарда-Джонса	123
6.1. Обозначения	123
6.2. Измерение напряжений	124
6.3. Единицы измерения	124
6.4. Создание аморфного материала	125
6.5. Одноосное деформирование	128
6.6. Одноосное нагружение	133
6.7. Заключение	135
Глава 7. Поликристаллические компьютерные материалы	136
7.1. Существующие методы	137
7.2. Создание материала из монокристаллических зерен	138
7.3. Алгоритм последовательного заполнения	140
7.4. Квазистатические эксперименты с поликристаллическими мате-	
риалами	145
Глава 8. Динамические эксперименты с поликристаллически	1-
ми материалами	148
8.1. Компьютерные эксперименты по откольному разрушению	148
8.2. Результаты экспериментов	152
8.3. Выводы	153
Глава 9. Моделирование пластических эффектов при распро)- 154
0.1. Мотолико мололикорования	154
9.1. методика моделирования	154
9.2. Моделирование откольного разрушения	100
9.3. Оосуждение и заключительные замечания	101

Оглавление	
Глава 10. Моделирование изменения внутренней структур и напряженного состояния в материале при сильном тер	ы)-
мическом воздействии	165
10.1. Макроскопическая постановка задачи	166
10.2. Микроскопическая постановка задачи	167
10.3. Изменение внутренней структуры материала при термическом воздействии	170
10.4. Влияние скорости отвода тепла на внутреннюю структуру мате-	
риала	173
10.5. Определение напряжений на микроуровне	174
10.6. Средние остаточные напряжения	176
10.7. Микронапряжения	179
10.8. Заключение	183

Часть II

Математическое моделирование деформирования тел с кристаллической структурой

Глава 11. Линейное деформирование простой кристаллической	й
решетки	192
11.1. Уравнения динамики частиц кристаллической решетки	192
11.2. Соотношения упругости	194
11.3. Внутренняя энергия кристалла	196
Глава 12. Линейное деформирование сложной кристалличе	-
ской решетки	198
12.1. Обозначения	198
12.2. Уравнения динамики	202
12.3. Соотношения упругости	205
12.4. Переход к уравнениям сплошной среды	211
Глава 13. Нелинейное деформирование простой кристалличе	-
ской решетки	215
13.1. Обозначения	215
13.2. Уравнение статики в форме Пиола	218
13.3. Уравнение статики в форме Коши	219
13.4. Различные формы тензоров напряжений	221
13.5. Связь тензора напряжений с деформацией сплошной среды	222
13.6. Линейная теория	223
13.7. Физически линейный материал	225
13.8. Физически линейный материал при малых деформациях	228

6 Оглавление	
Глава 14. Поликристаллические упаковки — выделение изе	D-
тропной части нелинейных соотношений упругости	230
14.1. Обозначения и определения	230
14.2. Представление определяющих уравнений в виде ряда	231
14.3. Изотропные абсолютно симметричные тензоры	234
14.4. Представление свертки $K_n(\varepsilon)$ через степенные инварианты тен-	
sopa ε	235
14.5. Производящая функция	236
14.6. Представление свертки $K_n(\varepsilon)$ через главные инварианты тен-	
зора ϵ	238
14.7. Итоги	239
Глава 15. Учет хаотической составляющей движения частиц	241
15.1. Уравнения движения	242
15.2. Разделение движений	243
15.3. Осреднение уравнений движения	244
15.4. Осредненные энергетические характеристики	245
15.5. Баланс энергии	246
15.6. Связь микроскопических и макроскопических величин	248
15.7. Вириальное преобразование	249
15.8. Определяющие уравнения для давления и тепловой энергии	250
15.9. Адиабатическое приближение	252
15.10. Первое приближение по тепловому параметру	254
15.11. Уточнение уравнения состояния для случая сильного растяже-	
ния	255
15.12. Второе приближение по тепловому параметру	257
15.13. Линеаризация уравнения движения для случая малых деформа-	
ций	258
15.14. Дополнение: вывод макроскопических уравнений баланса	261
15.15. Дополнение: поток энергии	264
Глава 16. Влияние масштабного фактора на механически	ıe
свойства модели. Приложение к механике наноразмерны	IX.
объектов	267
16.1. Определение модулей упругости	268
16.2. Энергия деформирования	272
16.3. Учет атомов второй координационной сферы	274
16.4. Обсуждение	278

введение

Существуют две противоположные концепции описания окружающего нас мира — концепции непрерывности и дискретности. С одной стороны, большинство объектов, с которыми мы сталкиваемся, представляются нам состоящими из сплошного материала. для описания деформирования которого прекрасно подходит концепция непрерывности, континуальности. С другой стороны, хорошо известно, что каждое вещество обладает своей внутренней структурой, которая не может не сказываться на его свойствах. Причем эта структура проявляется на разных масштабных уровнях, начиная от атомарного, где любое вещество, несомненно, дискретно, до уровня, на котором отдельные атомы уже неразличимы, однако их большие группы (например зерна материала) создают неоднородности внутри вещества, которые могут рассматриваться как с континуальных, так и с лискретных позиций (и то и другое оказывается лишь приближением, идеализацией). Если для описания чисто упругого деформирования различия между этими двумя концепциями не очень велики и могут быть, в принципе, преодолены, то для неупругого деформирования и, тем более, разрушения, ситуация оказывается значительно более сложной. Действительно, разрушение, фактически, состоит в нарушении континуальности вещества. Однако и неупругое деформирование, как правило, сопровождается изменением внутренней структуры вешества. которое затрудняет описание этих процессов в рамках континуального представления. Еще одна проблема, с которой столкнулась континуальная механика, состоит в стремительном уменьшении размеров объектов, требующих описания в рамках механики деформируемого твердого тела. Бурное развитие в последние десятилетия нанотехнологий¹⁾ привело к необходимости оценивать упругие и прочностные характеристики объектов, содержащих всего несколько слоев атомов. Возникает естественный вопрос — может ли макроскопическая

¹) Приставка «нано» означает 10⁻⁹. Атомарные структуры имеют масштаб нанометров. Нанотехнологии — технологии, позволяющие создавать и эксплуатировать объекты нанометрового масштабного уровня.

континуальная механика применяться для описания таких, явно дискретных объектов?

Данная книга призвана помочь в решении подобных проблем, предлагая подходы, позволяющие перекинуть мост между дискретностью микромира и континуальностью макромира. Разумеется, проблема преодоления пропасти, разделяющей эти два мира, огромна, и она не может быть решена в рамках одной книги, да и на ее решение человечеству, видимо, потребуется еще многие десятки, а то и сотни лет. Однако в области описания деформирования и разрушения твердых тел многое возможно уже и сейчас. Стремительный прогресс в области вычислительной техники позволяет напрямую моделировать дискретные системы, содержащие настолько большое количество элементов, что такие системы могут рассматриваться как с микро- так и с макроскопических позиций. Это позволяет эффективно использовать компьютерное моделирование для описания сильного деформирования и разрушения твердых тел, чему посвящена первая часть книги. С другой стороны, в рамках упругого и термоупругого деформирования переход от "микро" к "макро" может быть осуществлен аналитически, чему посвящена вторая часть данной книги. Разумеется, компьютерное моделирование невозможно без соответствующей теоретической базы, поэтому первая часть использует результаты, полученные во второй части, однако для удобства читателя она написана так, что может рассматриваться независимо, если принимать без вывода ряд теоретических положений, используемых при постановке и анализе компьютерных экспериментов.

Автор многим обязан своему Учителю — Павлу Андреевичу Жилину, под влиянием которого формировалось научное мировозэрение автора. Многие идеи, изложенные в этой книге, появились благодаря взаимодействию автора с замечательными учеными, с которыми автору посчастливилось сотрудничать, из которых особенно хотелось бы поблагодарить Э.М. Галимова, А.В. Забродина, Е.А. Иванову, Д.А. Индейцева, Н.Ф. Морозова, В.П. Мясникова, А.Л. Фрадкова, а также М. Верчигроха и А. Кастелланоса. Автор благодарен И.И. Блехману и В.А. Пальмову за научную поддержку и ценные советы. Автор благодарен Ю.И. Мещерякову за полезные обсуждения и неоценимую возможность использовать полученные его группой экспериментальные данные. Автор благодарен Н.В. Кривцовой за расчеты параметров потенциалов взаимодействия и помощь в оформлении работы. Автор благодарен И. В. Волковцу и В.А. Цаллину, участвовавших в разработке компьютерных

программ, при помощи которых был получен ряд результатов, представленных в этой книге. Часть расчетов проводилась с использованием MBC (многопроцессорных вычислительных систем), разрабатываемых группой А. В. Забродина и MBC Межведомственного суперкомпьютерного центра PAH. Ряд исследований, приведенных в монографии, проводился при поддержке РФФИ (гранты 02-01-00514a и 05-01-00094a), гранта Президента Российской федерации МД-180.2003.01, программы фундаментальных исследований Президиума PAH №17 и гранта Минобразования России Е02-4.0-33; публикация монографии выполнена при поддержке РФФИ, грант 05-01-14028д.

Метод динамики частиц. Для аналитического и численного описания процессов, происходящих в телах с микроструктурой, удобно воспользоваться методом динамики частии, состоящим в представлении тела как совокупности взаимодействующих частиц (материальных точек или твердых тел), движущихся согласно классическим 1) уравнениям динамики под действием заданных законов взаимодействия между частицами. Одним из наиболее хорошо разработанных вариантов этого метода является метод молекулярной динамики, на протяжении последних десятилетий интенсивно использующийся для исследования физико-химических свойств материалов. В классической молекулярной динамике в качестве частии выступают атомы и молекулы, составляющие материал. В настоящее время потенциалы межатомного взаимодействия для важнейших материалов достаточно хорошо известны, что позволяет моделировать динамику молекулярных соединений с высокой степенью точности. В связи с открытием принципиально новых механических и физических свойств у материалов, имеющих структурные элементы нанометрового масштаба, чрезвычайно повысился интерес к моделированию материалов на микроскопическом масштабном уровне. Метод молекулярной динамики, при сегодняшнем развитии вычислительной техники, позволяет рассматривать объемы материала размером до кубического микрометра, что соответствует примерно миллиарду частиц (куб 1000×1000×1000 частиц). Таким образом, практически любые наноструктуры могут быть смоделированы с чрезвычайно высокой степенью точности на современных многопроцессорных вычислительных системах. Поэтому данный метод является важнейшим теоретическим инструментом для разработки нанотехнологий в механике материалов.

Существуют квантово-механические обобщения метода частиц, но они выходят за рамки данной книги.

Для описания больших объемов материала, а тем более, макроскопических объектов, уже невозможно придерживаться молекулярной концепции, и частицы должны представлять собой элементы более крупного масштабного уровня (мезоуровня), такие, как, например, зерна материала. Такой подход пачал интенсивно развиваться в последние годы в механике как альтернатива континуальному описанию материалов при сильном деформировании и разрушении. Подобный метод часто, по традиции, также называют молекулярной динамикой, хотя более правильно говорить о динамике мезочастиц.

Несомненное преимущество метода динамики частиц по сравнению с методами, основанными на концепции сплошной среды, заключается в том, что он требует значительно меньше априорных предположений о свойствах материала. Действительно, использование только простейшего потенциала взаимодействия (например, типа Леннарда-Джонса) и незначительной диссипации позволяет моделировать такие сложнейшие эффекты, как пластичность, образование трецин, разрушение, температурное изменение свойств материала, фазовые переходы. Для описания каждого из этих эффектов в рамках сплошной среды требуется огдельная теория, в то время как при моделировании методом динамики частиц эти эффекты получаются автоматически, в результате интегрирования уравнений движения. В частности, необратимость механических процессов достигается за счет перехода механической энергии длинноволновых движений материала в тепловую энергию хаотического движения частиц

Потенциал взаимодействия в динамике частиц играет такую же роль, что и определяющие уравнения в механике сплошной среды. Однако структура потенциала неизмеримо проще, чем у определяюцих уравнений, так как он представляет собой скалярную функцию расстояния, в то время как определяющие уравнения представляют собой операторы, в которые входят тензорные характеристики напряженного состояния и деформирования, а также термодинамические величины. Конкретный вид потенциала взаимодействия частиц определяется из сравнения механических свойств компьютерного и реального материалов. Для простейших характеристик, таких как, например, упругие модули, это сравнение может быть проведено аналитически. В остальных же случаях соответстви устанавливается на основе тестовых компьютерных экспериментов.

Сложности в описании процессов сильного деформирования и разрушения в рамках механики сплошной среды связаны в значительной степени еще и с тем, что на атомарном уровне структура материала

дискретна, с введением модели сплошной среды эта дискретность теряется. Однако, для численного расчета неизбежно введение новой дискретности, диктуемой численным методом (метод сеток, конечных элементов и т. д.) Метод динамики частиц дает уникальную возможность устранить промежуточное континуальное звено и совместить дискретность физическую с дискретностью, необходимой для численного расчета, что естественным образом может повысить и быстродействие, и точность вычислений.

Ограниченное применение метода динамики частиц в механике разрушения до настоящего времени связано с тем, что этот метод требует значительных компьютерных ресурсов. Однако рост производительности вычислительной техники, и, прежде всего многопроцессорных вычислительных систем [50], делает возможным в настоящее время эффективно применять метод частиц к моделированию механических свойств материалов. Метод динамики частиц обладает тем преимуществом, что, в силу ограниченности радиуса взаимодействия между частицами, он допускает почти полное распараллеливание процессов, происходящих в различных областях пространства. Это позволяет эффективно применять данный метод на многопроцессорных вычислительных системах, полностью реализуя их возможности по увеличению быстродействия и управлению большими объемами данных.

В основу описания деформирования и разрушения сред с микроструктурой в данной монографии будет положен метод частид. При этом он будет пониматься в расширенном смысле: не только как метод компьютерного моделирования (первая часть монографии), но и как метод аналитического исследования вещества (вторая часть). Как будет показано в дальнейшем, концепция представления материала в виде совокупности взаимодействующих частиц, движущихся по законам классической области, позволяя установить связь между микро- и макроскопическими представлениями вещества. Более того, эта концепция часто позволяет дать наглядную микроскопическую трактовку макроскопическим понятиям, физическая интерпретация которых может вызывать затруднения при чисто макроскопическом описании.

Краткий литературный обзор. Исследование сред с микроструктурой в значительной степени началось с анализа динамики кристаллических решеток. Основополагающими в этой области считаются работы М. Борна и др. [12], [13], [14]. В них, в частности,

получены линейные соотношения упругости для идеального кристалла на основе развитого Борном метода длинных волн. Впоследствии механика кристаллических решеток исследовалась многими авторами [40, 66, 67, 84, 92, 93, 101, 166] и др. Методика получения макроскопических уравнений в большинстве указанных работ близка к методике Борна [14]. Достаточно полный обзор механики идеальных кристаллов имеется в монографии Г. Лейбфрида "Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов" [92]. Обзор различных теорий кристаллических решеток, а также сравнение их с экспериментальными данными содержится в работах [85, 128, 145, 150]. В частности, в обзорной работе [145] анализируется связь параметров потенциалов взаимодействия с термодинамическими характеристиками атомарных и молекулярных систем. Ангармонические эффекты в кристаллах. применительно к исследованию их термодинамических свойств, исследуются в монографии Г. Лейбфрида [93]. В работах Л. И. Слепяна [138, 139, 140] получены аналитические решения задач деформирования для кристаллических решеток с трещинами, аналитическое и компьютерное исследование этих задач продолжено в работах Н. Ф. Морозова и М. В. Паукшто [118, 119, 120], Р. В. Гольдштейна и Г. А. Шаталова [32, 33, 35]. Колебательные процессы в бесконечной кристаллической решетке подробно рассмотрены в монографиях А. М. Косевича [66, 67]. В монографии И. А. Кунина [84] механика сред с микроструктурой рассматривается с позиций квазиконтинуума, что позволяет использовать континуальные уравнения для сколь угодно коротких волн в среде.

Метод динамики частиц, как метод численного моделирования сред с микроструктурой, исторически начал развиваться на двух полюсах масштабной лестницы — в описании микромира (метод молекулярной динамики) и сверхмакромира (звездные и галактические системы). В основе метода лежало представление вещества совокупностью взаимодействующих материальных точек, в качестве которых могли выступать как атомы в молекулярной физике, так и звезды в астрофизике. Возможность использования сходного метода для столь разных систем связана с тем, что и те и другие системы в рамках класической механики описываются аналогичными уравнениями, различие состоит только в масштабе и виде потенциалов взаимодействия. Первые работы в этих двух областях относятся примерно к одному и тому же времени — началу 60-х годов, когда появились первые достаточно быстродействующие компьютеры. Разрыв между этими двумя областями был огромен и начал только немного

сокращаться в последнее время благодаря росту мощности вычислительных систем. Количество используемых в моделировании частиц увеличилось настолько, что стало возможным подниматься с микроуровня на мезоуровень и даже макроуровень.

Оставляя вопросы, связанные с астрофизикой, за рамками данного обзора, остановимся вкратце на истории развития метода молекулярной динамики (МД), по возможности придерживаясь работ, по своей направленности более близких к вопросам механики деформируемого твердого тела. Первая статья, посвященная МД, была написана Б. Алдером и Т. Вейнрайтом в 1957 г. [160]. В этой работе исследовалась фазовая диаграмма системы жестких сфер. Видимо первая работа, в которой рассматривался непрерывный потенциал взаимодействия и использовалась разностная схема для решения уравнений движения, была опубликована в 1960 г. Дж. Гибсоном, А. Голандом, М. Милграмом и Г. Виньярдом [211]. В работе исследовалось возникновение дефектов кристаллической структуры под действием радиоактивного излучения в системе из 500 атомов. В 1964 г. была опубликована работа А. Рахмана [290], в которой исследовались свойства жидкого аргона, описываемого потенциалом Леннарда-Джонса. В 1967 г. Л. Верле рассчитал фазовую диаграмму аргона при том же потенциале взаимодействия, предложив при этом алгоритм численного интегрирования, получивший впоследствии его имя (алгоритм Верде) [315, 316]. Репринты первых ключевых работ по МД опубликованы в сборниках [188, 189].

Впервые моделирование плоских ударных волн с использованием непрерывного потенциала опубликовано в 1966 г. в работе [310], где исследовалось распространение упругих волн в одномерной среде (рассматривался трехмерный кристалл, но фиксация атомов в соседних плоскостях, фактически, сводила задачу к одномерной). Несколько позже в трудах симпозиума IUTAM были опубликованы работы по моделированию ударных волн в двумерных [311] и трехмерных кристаллах [194]. В работе [194] была впервые применена методика «подвижного окна», следящего за фронтом ударной волны. Еще через несколько лет была опубликована подробная статья [284] по моделированию ударной волны в трехмерном кристалле. По мере роста мощности вычислительных систем стало возможно более детальное исследование процессов, сопровождающих распространение ударных волн. Так Б. Л. Холиан и Г. Страуб провели исследование структуры фронта ударной волны в одномерном [222] и трехмерном кристаллах [223], показав невозможность пластических

эффектов в одномерном случае (распад фронта на цепочку солитонов) и аналогичное поведение фронта в трехмерном случае при отсутствии теплового движения. Только наличие достаточно высокого уровня теплового движения частиц приводило к исчезновению солитонов и переходу их энергии в пластическую деформацию кристалла. Чуть раньше (в 1978 г.) советские исследователи В. Ю. Клименко и А. Н. Дремин опубликовали работу по моделированию ударных волн в жидкости [63, 64], опередив тем самым американских исследователей [224, 225, 233]. К тому же времени относятся работы М. А. Могилевского [270]. Многие ранние работы российских авторов, использовавших метод молекулярной динамики для моделирования физико-химических процессов представлены в сборнике [147]. С использованием многопроцессорных вычислительных систем группа исследователей из Лос Аламосской даборатории проведа многочисленные исследования ударных процессов методом динамики частиц с постоянно увеличивающимися объемами рассматриваемых систем, из которых особенно выделяются работы Б. Л. Холиана и др. [226, 228, 232, 241, 295, 305, 307]. Отметим также работы В. Хувера и др. [233, 235, 236, 237, 238] по теории МД-моделирования, работы Ф. Абрахама, Х. Гао и др. [156, 157, 158, 201, 202, 207, 208, 216, 217] по моделированию роста трещин. Метод динамики частиц успешно применяется к решению широкого спектра задач, включая моделирование жидких кристаллов [162, 168, 176]; моделирование нанообъектов [102, 180, 192, 259, 298, 299, 300, 313]; физику поверхностей [196, 198, 301, 302, 321] и др. [172, 191, 197, 202, 205, 232, 272, 296, 306].

Советским исследователям из-за отсутствия столь быстродействующей техники было сложно конкурировать с американскими коллегами по объему вычислений, тем не менее на качественном уровне удалось достичь значительных результатов. В последнее время, благодаря появлению в России быстродействующих многопроцессорных вычислительных систем, в частности, разрабатываемых под руководством А.В. Забродина в Институте прикладной механики им. М.В. Келдыша [49, 50], у российских ученых появилась возможность вступить в конкуренцию и на количественном уровне.

Отметим работы следующих советских и российских исследователей в области компьютерного моделирования методом МД и методом динамики частиц: С. И. Анисимов, В. В. Жаховский и др. [2, 163, 325, 326], Е. Н. Бродская и А. И. Русанов [15, 183, 184], И.Ф. Головнев, В. М. Фомин и др. [10, 11, 26, 27, 28, 29, 30, 31], Р. В. Гольдштейн, А. В. Ченцов [34], Д. И. Жуховицкий [48], В. Ю. Клименко и А. Н. Дре-

мин [63, 64], В.А. Лагунов и А.Б. Синани [87, 88, 89], М.А. Мазо и др. [98], А.И. Мелькер и др. [102, 104, 106, 108, 109, 111, 112, 263, 304], Н. Ф. Морозов и М. В. Паукшто [118, 119, 120], Г. Э. Норман и др. [130], В. Л. Попов и др. [131, 134], С. Г. Псахье и др. [52, 53, 135, 136, 137], А.И. Слуцкер и др. [141, 142], В.Г. Чудинов и др. [153, 154] и ряда других авторов [20, 68, 123, 124, 146]. Остановимся чуть подробнее на некоторых работах из числа перечисленных выше. В работах С.И. Анисимова, В.В. Жаховского и др. методом молекулярной динамики исследована структура ударной волны в газе [325], жилкости [163] и твердом теле [326]. В работах И.Ф. Головнева, В.М. Фомина и др. предложен пропагаторный метод интегрирования уравнений динамики частиц [26, 28], исследовано распространение ударных волн и процесса детонации в одномерном кристалле [29, 31, 149], изучены задачи о соударениях сферических кластеров [10, 11]. В работе [89] В.А. Лагуновым и А.Б. Синани методом молекулярной динамики исследованы задачи о растяжении кристаллов, моделирующие эксперименты по одноосному нагружению. В работах А.И. Мелькера и др. с позиций молекулярной динамики исследуются процессы зарождения разрушения [103, 105, 106, 117]; изучаются деформирование и самоорганизация полимеров [107, 110, 111, 112]; исследуется механические свойства фуллеренов и нанотрубок [65, 102, 264]. В работах Н. Ф. Морозова и М. В. Паукшто [118, 119, 120] проведено сравнительное численное и аналитическое исследование задач деформирования кристаллических решеток с трещинами. В статье Р.В. Гольдштейна и А.В. Ченцова [34] предложена дискретная модель углеродной нанотрубки и проведено ее аналитическое и компьютерное исследование.

Подробная информация о работах в области компьютерного моделирования методом динамики частиц содержится в обзорных статьях [171, 206, 228, 277, 282, 285, 289, 297, 312, 314] и монографиях [161, 188, 218, 221, 235, 294]. Отметим также обзорные статьи Б. М. Смирнова и др. [143, 144, 145].

Для моделирования нелинейных процессов в сплошных средах применяется также семейство методов, в которых частицы используются как численный прием для интегрирования континуальных уравнений диналики сплошной среды, что отличает их от метода динамики частиц, рассматриваемого в данной монографии. Это метод частиц в ячейках М. Эванса и Ф. Харлоу [200, 151], его дальнейтее развитие — метод свободных точек В. Ф. Дьяченко [39, 195], метод крупных частиц О. М. Белоцерковского и Ю. М. Давыдова [7, 36]. К этой же группе относится метод гидродинамики гладких частиц [265, 317]

и другие методы. В перечисленных методах за основу берутся континуальные уравнения сплошной среды, чаше всего это уравнения гидро- и газодинамики, а частицы играют роль дискретных элементов, позволяющих свести уравнения в частных производных к разностной системе обыкновенных дифференциальных уравнений. По своей сути эти методы являются континуальными, дискретность в них чисто вычислительная. Метод динамики частиц и метод молекулярной динамики, рассматриваемые в данной монографии, отличаются от перечисленных методов тем, что в них за основу берутся уравнения движения самих частиц (обыкновенные дифференциальные уравнения), определяемые балансом количества движения и потенциалом взаимодействия между частицами, т.е. данные методы являются истинно дискретными. Разумеется, в результате длинноволнового приближения и осреднений, из уравнений движения частиц могут быть приближенно получены соответствующие им уравнения сплошной среды (этому вопросу, в значительной степени, посвящена вторая часть данной монографии), что позволяет определить параметры моделирования через параметры моделируемой макроскопической задачи. Однако, исходными для метода динамики частиц, рассматриваемого в данной монографии, являются микроскопические, а не макроскопические уравнения. Отметим, однако, что, как было показано В. Хувером [237], при определенном выборе параметров моделирования, метод гидродинамики гладких частиц (континуальный) и метод молекулярной динамики (дискретный) могут давать идентичные траектории частиц. С другой стороны, сравнение метода гидродинамики гладких частиц и сеточного метода [25, 23], широко применяемого для решения залач газовой динамики, показывает совпадение результатов расчетов [317]. Все это свидетельствует о глубинном родстве перечисленных методов и возможной эквивалентности микро- и макроскопических полхолов.

Используемое в монографии описание механики сплошной среды опирается на работы П.А. Жилина, А.И. Лурье, В.А. Пальмова, К. Трусделла [46, 47, 97, 132, 148]. Используется язык прямого тензорного исчисления [38, 45, 69, 86]. В сжатой форме, но достаточно полно, основы прямого тензорного исчисления изложены в книгах А.И. Лурье [96, 97] и П.А. Жилина [42, 45, 47]. Методика использования прямого тензорного исчисления при решении задач механики деформируемого твердого тела отражена в монографии В.А. Пальмова [132].

Часть I

Компьютерное моделирование деформирования и разрушения твердых тел с микроструктурой

Бурное развитие вычислительной техники позволило на новом уровне вернуться к проблеме описания сред с микроструктурой, дополняя компьютерным моделированием решение проблем, недоступных для аналитического решения. Компьютерное моделирование становится важным звеном, занимающим промежуточное положение между теорией и реальным экспериментом. Основываясь на теоретических моделях, компьютерный эксперимент осуществляется в результате численного расчета, где сложность модели может сколь уголно увеличиваться по мере развития вычислительных средств, добиваясь все более точного соответствия условиям экспериментальных исследований. Таким образом, с одной стороны, повышаются возможности теоретических исследований, а, с другой стороны, появляется возможность многократно дублировать дорогостоящие экспериментальные исследования. Не имея возможности существовать независимо от аналитической теории, создающей расчетную модель, и эксперимента, обеспечивающего соответствие между моделью и реальностью, компьютерное моделирование оказывается важным звеном, объединяюшим теорию и эксперимент.

В данной ситуации большие перспективы могут быть связаны с использованием метода динамики частии, который в последние десятилетия широко применялся в различных областях химии и физики, однако относительно мало использовался для моделирования механического поведения твердых тел. Являясь типичным методом компьютерного моделирования, по мере наращивания количественных возможностей вычислительной техники, он позволяет получать качественно новые результаты за счет количественной сложности компьютерной модели. Как принципиально дискретный метод, он не имеет недостатков континуальных моделей, проявляющихся при нарушении сплошности вещества или в результате дискретности его внутренней структуры. Далее будут изложены основные положения метода динамики частиц и рассмотрены различные его приложения к описанию процессов деформирования и разрушения твердых тел с микроструктурой.

Глава 1

ТЕХНИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

1.1. Уравнения движения

Метод динамики частиц основывается на рассмотрении совокупности материальных точек (частиц), взаимодействующих как между собой, так и с внешними силовыми полями. Уравнения движения частиц могут быть записаны в виде [77]

$$m\ddot{\mathbf{r}}_{k} = \sum_{n=1}^{N} \Phi(r_{kn}) \, \mathbf{r}_{kn} + \sum_{n=1}^{N} \Psi(r_{kn}, v_{kn}) \, \mathbf{r}_{kn} + \varphi(\mathbf{r}_{k}) + \psi(\mathbf{r}_{k}, \mathbf{v}_{k}), \quad (1.1)$$

где \mathbf{r}_k и \mathbf{v}_k — векторы положения и скорости k-й частицы,

$$\mathbf{r}_{kn} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n, \quad \mathbf{v}_{kn} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{v}_k - \mathbf{v}_n, \quad r_{kn} \stackrel{\text{def}}{=} |\mathbf{r}_{kn}|, \quad v_{kn} \stackrel{\text{def}}{=} |\mathbf{v}_{kn}|, \quad (1.2)$$

m— масса частицы, скалярные функции $\varPhi(r)$ и $\varPsi(r,v)$ описывают консервативную и неконсервативную составляющие взаимодействия между частицами, векторные функции $\varphi(\mathbf{r})$ и $\psi(\mathbf{r},\mathbf{v})$ описывают внешнее консервативное и неконсервативное силовое поле. В уравнениях (1.1) учитывается только парное взаимодействие между частицами. Рассмотрим подробнее силовые факторы. Консервативная составляющая взаимодействия $\varPhi(r)$ определяется следующим образом:

$$\Phi(r) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{r} f(r), \quad f(r) \stackrel{\text{def}}{=} -\Pi'(r), \quad (1.3)$$

где f(r) — скалярная сила взаимодействия между частицами, $\Pi(r)$ потенциал взаимодействия. Величина $\Phi(r)$ является важнейшим силовым фактором, во многих задачах по моделированию все остальные силовые факторы в уравнениях (1.1) отбрасываются, и рассматривается чисто консервативная система взаимодействующих частиц.

Неконсервативная составляющая взаимодействия $\Psi(r, v)$ предназначена для описания внутренней диссипации в материале, во многих задачах она может отсутствовать. Внешние силовые поля $\varphi(\mathbf{r})$ и $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ обычно используются для двух целей: для задания внешних массовых силовых воздействий (гравитационного, электромагнитного) и для задания силовых граничных условий. В первом случае указанные силы распределены во всем объеме пространства, где проводится расчет, во втором случае они локализованы вблизи некоторых поверхностей, часто являющихся границами области расчета. Кроме того, некопсервативное воздействие $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ часто применяется для отвода энергии из системы посредством внешней диссипации, простейпим вариантом которой являются силы вязкого трения

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = -B\mathbf{v}, \quad B > 0.$$
 (1.4)

Данное воздействие также используется для поддержания определенного уровня теплового движения в системе, в этом случае коэффициент *B* в формуле (1.4) является знакопеременным и зависит от уровня тепловой энергии всей системы [278].

В качестве примера рассмотрим следующий вид силовых факторов для уравнений движения частиц (1.1):

$$\begin{split} \Phi(r) &= \gamma \, \frac{m^2}{a^2} \, \frac{1}{r} \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{13} - \left(\frac{a}{r} \right)^2 \right], \quad \Psi(r,v) = -\beta \gamma \, \frac{m^2}{a^2} \left(\frac{a}{r} \right)^{13} \frac{\dot{r}}{r^2}, \\ \varphi(\mathbf{r}) &= -\gamma \, \frac{mM}{r^3} \, \mathbf{r}, \quad \psi(\mathbf{r},\mathbf{v}) = 0. \end{split}$$

$$(1.5)$$

Данный вид взаимодействия использовался в работе [22] для описания движения облака гравитирующих частиц в космическом пространстве. Функция $\Phi(r)$ состоит из двух слагаемых: первое, близкодействующее, описывает отгалкивание частиц при их столкновениях; вгорое, дальнодействующее, описывает гравитационное притяжение частиц; a — равновесное расстояние между частицами, γ — гравитационная константа. Функция $\Psi(r, v)$ описывает потери энергии при столкновениях частиц; вид ее выбран таким, чтобы при удалении частиц она изменялась подобно отгалкиванощей компоненте $\Phi(r); \beta$ — коэффициент диссипации. Функция $\varphi(r)$ описывает гравитационное взаимодействие частиц с некоторым большим телом (например Солицем), на движение которого частицы не могут влиять в силу его массивности; M — масса большого тела. Функция $\varphi(r)$ в работе [22] отсутствовала.

Моделирование методом частиц с математической точки зрения представляет собой решение задачи Коши для уравнений (1.1). Начальные условия включают в себя координаты и скорости каждой



Рис. 1.1. Виды начальных условий

частицы. Генерация начальных условий является отдельной и весьма нетривиальной задачей, так как начальное расположение частиц и их скорости существенно влияют на свойства полученного компьютерного материала. Схематично различные виды начальных условий представлены на рис. 1.1. Задание начальных условий происходит на двух масштабных уровнях, которые условно можно назвать макрои микроскопическим. На макроскопическом уровне задаются внешняя форма объектов моделирования (см. рис. 1.1) и их макроскопические скорости. На микроуровне задается вид упаковки частиц (структура материала) и скорости хаотического движения (тепловое движение). Скорость каждой частицы в начальный момент времени складывается из макроскопической скорости, мало изменяющейся от частицы к частице, и случайной компоненты, получаемой при помощи генератора случайных чисел. Случайная компонента характеризуется заданным значением дисперсии или среднеквадратического отклонения, определяющим интенсивность хаотического (теплового) движения.

1.2. Более сложные модели, используемые в методе частиц

Уравнения (1.1) являются достаточно общими, и с успехом могут быть использованы для решения многих классов задач, таких как молелирование плотноупакованных кристаллических структур, молелирование леформирования и разрушения вещества на мезоуровне. решение залач космической механики. Олнако их использование может быть затруднено при описании некоторых классов задач, решаемых методом динамики частиц. Одной из проблем такого рода является описание молекулярных структур с направленными связями. Таковыми являются ковалентные кристаллы (например кристаллы графита, алмаза), практически все органические молекулы. Причина состоит в том, что при парном силовом взаимодействии, используемом в уравнениях (1.1), взаимодействие оказывается чисто центральным, а значит все направления взаимодействия оказываются равнозначными, что затрудняет возникновение направленных связей. При этом частицы стремятся сформировать структуры с наибольшей возможной плотностью упаковки. Структуры же с направленными связями отличаются, напротив, низкой плотностью упаковки.

Существуют различные способы решения данной проблемы. Наиболее распространенный подход состоит в использовании многочастичных потенциалов взаимодействия [309, 181, 199] — потенциалов, зависящих от относительных положений нескольких частиц, окружающих данную. Иными словами, подобные потенциалы зависят от углов между связями, что позволяет сделать устойчивыми структуры с низкой плотностью заполнения. Однако, обычно форма подобных потенциалов оказывается весьма сложной, а физический смысл входящих в них констант — туманным.

Альтернативный подход состоит во введении в рассмотрение вращательных степеней свободы и учете моментного вклада в межатомное взаимодействие [55, 56, 58]. При этом взаимодействие остается парным, но, за счет наличия моментного взаимодействия, силы взаимодействия не обязаны быть центральными. Наряду с продольной силой взаимодействия возникает поперечная, которая и поддерживает направленность связей. Подобный подход сближает описание молекулярных систем с описанием моментных континуальных сред [1, 41, 46, 43], что позволяет дать ясную физическую интерпретацию параметрам взаимодействия.

Сказанное выше, однако, не означает, что структуры с направленными связями, в принципе, не могут быть описаны с помощью уравнений (1.1), т. е. при использовании только парного силового взаимодействия. В ряде работ параметры парного силового взаимодействия с успехом подбираются так. что они делают устойчивыми ковалентные углеродные кристаллы [34, 65, 102]. Однако при этом приходится выбирать разный закон взаимодействия между ближними и дальними атомами, что затрудняет описание перестроек кристаллической структуры. Последняя проблема, в принципе, также может быть решена посредством введения потенциалов взаимодействия, имеющих несколько минимумов (соответствующих характерным расстояниям между атомами в кристалле). Кроме того, и упомянутый выше моментный подход может быть реализован с помощью уравнений (1.1). если каждый атом описывать группой (кластером) частиц. Тогда взаимодействие между такими кластерами будет моментным, хотя оно и представляет собой лишь сумму силовых взаимодействий между частицами, принадлежащими разным кластерам.

Еще один класс задач, в котором может оказаться недостаточной модель (1.1), относится к описанию различных гранулированных сред. При их рассмотрении часто нельзя пренебрегать размерами частиц (гранул), что выражается в нецентральности взаимодействия. Эти проблемы относительно слабо выражены при динамическом поведении гранулированных сред, однако они становятся принципиальными при изучении поведения этих сред вблизи равновесных конфигураций. Наличие касательных сил межлу частицами приводит, опять же. к снижению плотности упаковки частиц. А структуры с низкой плотностью упаковки, как упоминалось выше, встречают трудности при описании с помощью уравнений (1.1). Выход здесь, с одной стороны, состоит в дополнительном учете касательных сил (обычно сил вязкого и сухого трения, иногда учитываются и упругие силы) [212, 260, 308]. Это, фактически, эквивалентно использованию моментного подхода, описанного выше. С другой стороны, гранулы могут моделироваться как кластеры, состоящие из частиц, описываемых уравнениями (1.1) [213, 253]. Оба подхода имеют свои достоинства и недостатки, и наиболее конструктивный вариант состоит, видимо, в параллельном использовании двух подходов с последующим совершенствованием обеих моделей на основе сравнения и анализа результатов моделирования.

В данной монографии мы ограничимся классами задач, в которых достаточно будет подхода, основанного на уравнениях (1.1), т. е. останемся в рамках парного силового взаимодействия. Как будет видно из дальнейшего, при этом удается решить огромное количество задач из различных областей механики деформирования и разрушения твердых тел. При этом мы немного коснемся и вопросов моделирования гранулированных сред при помощи кластеров — в главах, посвященных моделированию поликристаллических тел.

1.3. Интегрирование уравнений движения

Существует множество способов численного интегрирования уравнений движения (1.1). Специфика метода частиц состоит в необходимости интегрирования очень большого числа уравнений, что налагает определенные требования экономии компьютерной памяти. Кроме того, при расчетах основное время уходит на вычисление силы, действующей на данную частицу — правая часть уравнений (1.1). Связано это с существенной нелинейностью силы взаимолействия и необходимостью суммирования большого числа слагаемых (прежле всего сил взаимодействия с соседними частицами). Указанное обстоятельство снижает эффективность методов, требующих на каждом шаге многократного вычисления правой части уравнений (1.1). С этим, в частности, связано то, что метод Рунге–Кутта редко применяется в методе частиц. Одним из наиболее простых и распространенных методов является алгоритм Верле [315], согласно которому вычисление положения частицы осуществляется по ее предыдущим двум положениям:

$$\mathbf{r}(t + \tau) = 2\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t - \tau) + \mathbf{w}(t)\tau^2, \qquad (1.6)$$

где τ — шаг интегрирования, $\mathbf{w}(t)$ — ускорение частицы, получаемое подстановкой рассчитанных значений $\mathbf{r}(t)$ в правую часть уравнений (1.1). Данная схема не требует вычисления скоростей и удобна, если в уравнениях (1.1) отсутствуют неконсервативные силы. При получении формулы (1.6) отброшены слагаемые порядка $O(\tau^4)$. При необходимости, скорость может быть вычислена по формуле

$$\mathbf{v}(t) = \frac{1}{2\tau} \big(\mathbf{r}(t+\tau) - \mathbf{r}(t-\tau) \big). \tag{1.7}$$

Метод центральных разностей, видимо, впервые примененный в мо-

лекулярной динамике Виньярдом [211], определяется уравнениями

$$\mathbf{v}\left(t+\frac{1}{2}\tau\right) = \mathbf{v}\left(t-\frac{1}{2}\tau\right) + \mathbf{w}(t)\tau,$$

$$\mathbf{r}(t+\tau) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}\left(t+\frac{1}{2}\tau\right)\tau,$$

(1.8)

и эквивалентен алгоритму Верле в том смысле, что исключение скоростей из (1.8) приводит к формуле (1.6). В отличие от алгоритма Верле, в методе Виньярда на каждом шаге определяются и координаты и скорости частиц. При этом скорости частиц определяются для промежуточных моментов времени. Однако, если назначение неконсервативных сил в (1.1) состоит только во внесении малой диссипации в уравнения движения, то этим расхождением в первом приближении можно пренебречь. При необходимости скорости в момент времени *t* могут быть вычислены по формуле

$$\mathbf{v}(t) = \frac{1}{2} \left(\mathbf{v} \left(t + \frac{1}{2} \tau \right) + \mathbf{v} \left(t - \frac{1}{2} \tau \right) \right). \tag{1.9}$$

Вычисление $\mathbf{v}(t)$ требуется также для определения полной энергии системы. Существует ряд модификаций метода Верле и центральных разностей, однако большинство из них при формально различной схеме интегрирования даст в точности одинаковые траектории частиц.

Более точного расчета позволяют добиться методы типа предиктор-корректор. Наиболее часто используемый алгоритм Нордзика [280] для метода предиктор-корректор состоит в следующем.

- По значениям координат и их производных до степени *n* включительно определяются аналогичные величины в момент времени *t* + *τ* на основе разложения Тейлора. Величина *n* называется порядком метода (*n* ≥ 2).
- Определяются ускорения в момент времени t + τ подстановкой предсказанных значений координат и скоростей в правую часть уравнений (1.1). Разность между ускорениями, вычисленными по формуле (1.1), и предсказанными называется функцией уточнения и используется для последующей корректировки.
- Координаты и их производные корректируются добавлением слагаемых, пропорциональных функции уточнения. Коэффициенты пропорциональности различны для каждой производной и подбираются из соображений минимизации ошибки интегрирования.

Соответствующие формулы имеют следующий вид. Вводятся переменные, пропорциональные производным вектора положения

$$\mathbf{u}_k(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{k!} \mathbf{r}^{(k)}(t) \tau^k \,. \tag{1.10}$$

Прогнозируемые значения переменных на следующем шаге вычисляются по формулам

$$\mathbf{u}_{k}^{p}(t+\tau) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{s=k}^{n} C_{s}^{k} \mathbf{u}_{s}(t), \quad C_{s}^{k} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{s!}{k!(s-k)!}.$$
 (1.11)

Функция уточнения ζ задается формулой

$$\boldsymbol{\zeta} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \mathbf{w}(t+\tau) \tau^2 - \mathbf{u}_2^p(t+\tau) , \qquad (1.12)$$

где $\mathbf{w}(t+\tau)$ определяется подстановкой $\mathbf{r}(t+\tau) = \mathbf{u}_0^p(t+\tau)$ и $\mathbf{v}(t+\tau) = \mathbf{u}_1^p(t+\tau)/\tau$ в правую часть уравнений (1.1). И, окончательно, новые значения переменных $\mathbf{u}_k(t+\tau)$ рассчитываются по формулам

$$\mathbf{u}_{k}(t+\tau) = \mathbf{u}_{k}^{p}(t+\tau) + c_{k}\boldsymbol{\zeta}, \qquad (1.13)$$

где c_k — корректирующие коэффициенты. Для расчета методом частиц обычно применяются коэффициенты, предложенные Гиром [209] — они приведены в табл. 1.1.

Таблица 1.1

Коэффициенты Гира для метода Нордзика. Коэффициент c_0^* следует использовать вместо α_0 , если в правую часть (1.1) явно входят скорости

n	c_0	c_0^*	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5
2	0	0	1	1			
3	1/6	1/6	5/6	1	1/3		
4	19/120	19/90	3/4	1	1/2	1/12	
5	3/20	3/16	251/360	1	11/18	1/6	1/60

Методы предиктор-корректор позволяют получить значительно более высокую точность при малых шагах интегрирования, чем метод Верле и родственные ему методы. Однако, для достаточно больших шагов интегрирования, которые часто применяются в методе частиц,

метод Верле может оказаться точнее, чем метод Нордзика порядка 3. 4 и 5 [161]. При этом метод Нордзика требует бо́льшего объема вычислений, поэтому выполняется медленнее. Кроме того, недостатком метода Нордзика является необходимость хранения значительного числа данных в памяти — для метода *n*-го порядка требуется запоминание n+2 векторных величин для каждой частицы, в то время как метод Верле требует хранения всего двух или трех векторных переменных на частицу (три векторные переменные требуются, если в правой части (1.1) имеются слагаемые Ψ). Таким образом, использование метода Нордзика предпочтительно для получения особо точных результатов на относительно небольших интервалах времени и при небольшом количестве частиц. Для интегрирования больших систем на длительных промежутках времени предпочтительнее использование метода Верле или Виньярда. При этом, для контроля точности расчетов, ряд тестовых задач может рассчитываться методом Нордзика. Кроме того, использование методов Нордзика может оказаться предпочтительным в случае, когда неконсервативные силы существенным образом входят в уравнения движения [161], а также если для частиц используется модель твердого тела. Достоинства и нелостатки различных численных алгоритмов для метода частии подробно обсуждаются в [177].

При расчете методом частиц бо́льшая часть компьютерного времени уходит на вычисление сил взаимодействия между частицами. Для ускорения расчета потенциал взаимодействия обычно обрезается на некотором заданном расстоянии a_{cut}. Тогда, если расстояние между частицами превосходит a_{cut}, то считается, что взаимодействие между частицами пренебрежимо мало и оно не учитывается в расчетах. Однако при большом количестве частиц даже вычисление расстояния между ними потребует слишком большого времени, так как число необходимых операций пропорционально квадрату числа частиц. Поэтому для расчетов, производимых в данной работе, пространство разбивается на кубические ячейки с ребром a_{cut} (рис. 1.2). Для частиц, находящихся в некоторой ячейке, рассматривается взаимодействие только с частицами из пограничных с ней ячеек. Таким образом, удается добиться, что число операций оказывается пропорциональным числу частиц. Данный метод допускает эффективное распараллеливание при использовании многопроцессорных вычислительных систем. Вся область пространства разделяется между процессорами (рис. 1.2), на каждом шаге интегрирования процессор проводит вычисление внутри отведенной ему области с захватом граничных



Рис. 1.2. Реализация расчета: разделение области расчета между процессорами и разбиение области, отведенной для каждого процессора, на ячейки

ячеек из соседних областей, а затем происходит обмен информацией о частицах, находящихся в пограничных ячейках. Все расчеты, приводимые в данной работе, проводились с помощью оригинальных компьютерных программ, разработанных автором и его учениками.

1.4. Потенциалы взаимодействия

В литературе используется большое количество различных потенциалов взаимодействия. Ниже мы рассмотрим ряд наиболее часто встречающихся потенциалов и кратко проанализируем их свойства, достоинства и недостатки. Будут введены безразмерные параметры, позволяющие эффективно оценивать свойства потенциалов, сравнивать их друг с другом, а также связывать параметры потенциалов с макроскопическими свойствами моделируемого объекта. Мы ограничимся рассмотрением только парных потенциалов, достаточно полный обзор многочастичных потенциалов имеется, например, в работе [199]. **Определения.** Рассмотрим произвольный парный потенциал $\Pi(r)$. Соответствующая ему сила взаимодействия f(r) определяется как

$$f(r) \stackrel{\text{def}}{=} -\Pi'(r) \,. \tag{1.14}$$

Обозначим σ, a и b расстояния, на которых обращается в ноль, соответственно, потенциал и его первая и вторая производные:

$$\Pi(\sigma) \equiv 0, \quad \Pi'(a) \equiv -f(a) \equiv 0, \quad \Pi''(b) \equiv -f'(b) \equiv 0.$$
 (1.15)

Ниже будем рассматривать только потенциалы, для которых уравнения (1.15) имеют единственное решение, причем $\sigma < a < b$. Это выполняется для всех простейших потенциалов взаимодействия, таких как потенциал Леннарда-Джонса, Ми, Морзе и др. Примерный вид подобного потенциала и соответствующей ему силы изображен на рис. 1.3.



Рис. 1.3. Потенциал и сила взаимодействия

Основное свойство потенциала состоит в том, что при приближении (r < a) частицы отталкиваются, при удалении (r > a) — притягиваются, причем при значительном удалении (r > 2a) потенциал и спла взаимодействия стремятся к нулю. Расстояние *a* является равновесным расстоянием между частицами, расстояние *b* является критическим, при котором наступает разрыв межатомной связи. Отметим, что сказанное строго верно только для двухатомной молекулы и для кристалла, в котором учитывается взаимодействие только ближайших соседей. При учете влияния атомов следующих координационных сфер равновесное и критическое расстояния изменяются, но для потенциалов, достаточно быстро убывающих с расстоянием, эти изменения являются малыми по сравнению с *a* и *b*. Введем безразмерный параметр ε_{a} — предельную деформацию связи (относительное