

УДК 539.3

DOI: 10.32326/1814-9146-2023-85-4-491-499

**МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ И АНАЛИЗ  
ТРАЕКТОРИИ НАКЛОННОЙ ТРЕЩИНЫ В ТРУБЕ  
С ПОМОЩЬЮ РАСШИРЕННОГО МЕТОДА КОНЕЧНЫХ  
ЭЛЕМЕНТОВ И МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ\***

© 2023 г.

**Белова О.Н., Степанова Л.В.**

*Самарский национальный исследовательский университет  
имени академика С.П. Королева, Самара, Российская Федерация*

stepanova.lv@ssau.ru

*Поступила в редакцию 03.09.2023*

Проведено сравнительное сопоставление результатов вычислительных имитационных экспериментов по определению траекторий распространения наклонной трещины в линейно упругой среде, выполненных с помощью двух принципиально различных подходов: дискретного и континуального. Целью исследования является построение траектории продвижения наклонной трещины в трубе, находящейся под действием осевой растягивающей нагрузки, посредством расширенного метода конечных элементов (континуальный подход) и с помощью метода молекулярной динамики (дискретный, молекулярно-атомистический подход). Выполнено компьютерное имитационное моделирование осевого растяжения трубы со сквозной наклонной трещиной с применением расширенного метода конечных элементов полнофункционального расчетного комплекса SIMULIA Abaqus. Параллельно с конечно-элементным анализом проведено молекулярно-динамическое моделирование растяжения наноскопической трубки со сквозной наклонной трещиной в программном пакете LAMMPS для нескольких материалов (монокристаллическая медь и монокристаллический алюминий с гранецентрированной кристаллической решеткой) с имеющимися в открытом коде LAMMPS потенциалами внедренного атома. Размеры макроскопической и наноскопической труб и длины трещин выбраны с учетом геометрического подобия образцов. Получены траектории распространения наклонной трещины в трубе, находящейся в условиях осевого растяжения. Расчеты проведены для нескольких характерных значений углов наклона трещины: 30, 45, 60 и 75° к оси трубы. Обнаружено, что траектории распространения трещин, полученные в рамках континуальной теории и атомистической симуляции, аналогичны друг другу. Установлено, что для различных углов наклона трещины сохраняется подобие траекторий распространения трещины в трубе на различных масштабных уровнях – макро- и наноскопическом.

*Ключевые слова:* метод молекулярной динамики, расширенный метод конечных элементов, конечно-элементный анализ, траектория трещины, поле напряжений, смешанное нагружение.

---

\* Выполнено при поддержке РФФ (проект №21-11-00346).

## Введение

В настоящее время метод молекулярной динамики (МД), будучи наиболее адаптируемым вычислительным методом для моделирования материалов на атомном/молекулярном уровнях, нашел свое широкое применение для моделирования многих физических, механических, биологических, химических явлений и процессов на атомарном уровне [1–7]. Среди методов атомистического моделирования моделирование, основанное на методе МД, является наиболее подходящим методом для исследования процессов разрушения, поскольку динамика атомов теоретически отслеживается путем решения ньютоновского уравнения движения. В частности, классическое моделирование МД является мощным инструментом для моделирования материалов в наноразмерном масштабе благодаря его относительно низкой вычислительной стоимости за счет использования эмпирических силовых полей (моделей межатомного взаимодействия) [1–7]. Особенно большой интерес вызывает моделирование нанотрубок, изготовленных из различных материалов, находящихся под воздействием сложных термомеханических нагрузок [2–4]. Несмотря на значительное количество публикаций, посвященных конструированию и поведению нанотрубок при действии различных силовых и температурных факторов [8–11], число работ, анализирующих трубки с дефектами, весьма ограничено [12]. В последнее время публикуются исследования, сопоставляющие континуальный и дискретный подходы [13–18], однако публикации, посвященные сравнению атомистического подхода и методов, основанных на классической механике сплошных сред, для конфигурации, рассмотренной в настоящей статье, отсутствуют. В силу указанной причины настоящая статья ставит своей целью отыскание траектории распространения наклонной трещины в нанотрубке при действии на последнюю осевой растягивающей нагрузки. Вторая задача настоящей статьи заключается в сопоставлении траектории роста трещины, полученной методом конечных элементов, с результатами молекулярно-динамического имитационного расчета, то есть в сравнении двух принципиально различных подходов моделирования – континуального и атомистического.

## Характерные детали и особенности конечно-элементного расчета

Моделирование роста наклонной трещины в трубе проводится с помощью двух различных подходов: расширенного метода конечных элементов (XFEM), реализованного в расчетном комплексе SIMULIA Abaqus, и метода молекулярной динамики [1], реализованного в программном пакете Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS). Для конечно-элементного моделирования в качестве образца выбрана стальная гладкая труба. Коэффициент Пуассона  $\nu = 0,3$  и модуль Юнга  $E = 200$  ГПа в расчетах заданы в соответствии с выбранным материалом, плотность материала равна  $7800$  кг/м<sup>3</sup>. Размеры модели заданы в соответствии с ГОСТ 633-80 [19]. Условный диаметр трубы  $d = 102$  мм, номинальная толщина стенки составляла  $h = 6,5$  мм, а длина  $L$  задана равной  $1000$  мм. Длина трещины  $a = 40$  мм. Для моделирования выбран критерий максимального главного напряжения для описания разрушения и задана материальная константа  $\sigma_f = 150$  МПа. В расчетном комплексе Abaqus проведено моделирование распространения наклонной трещины в трубе под действием растягивающей осевой нагрузки. Растягивающая нагрузка  $P$  приложена к обоим торцам трубы и равна  $10$  МПа. Построенная конечно-элементная модель (КЭ-модель) содержала  $144800$  элементов. Схема приложе-

ния растягивающей нагрузки приведена на рис. 1а. Типичная КЭ-сетка показана на рис. 1б, в.

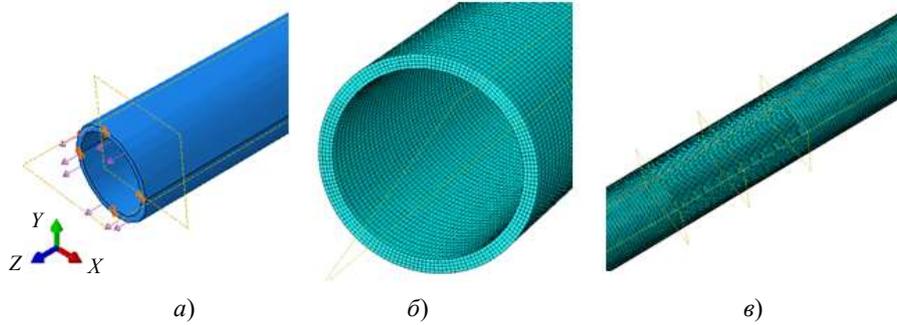


Рис. 1. Схема приложения нагрузок к трубе (а), типичные КЭ-сетки по толщине (б) и по длине трубы (в)

Расчеты проводились для нескольких характерных значений углов наклона трещины к оси трубы: 30, 45, 60 и 75°. Ниже приведены и описаны результаты КЭ-расчетов для 45°. Результаты моделирования стальной трубы со сквозной наклонной трещиной под действием растягивающей нагрузки с помощью расширенного метода конечных элементов показаны на рис. 2, 3.

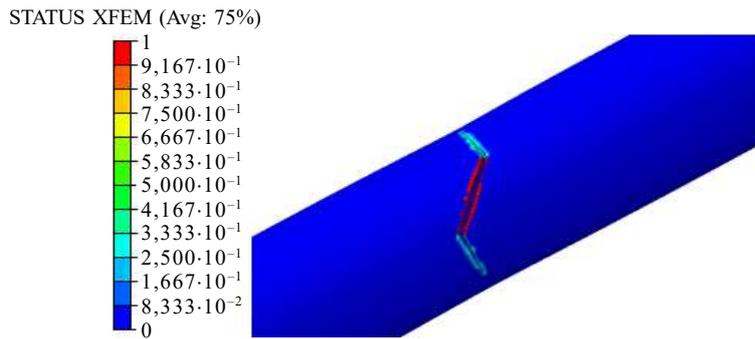
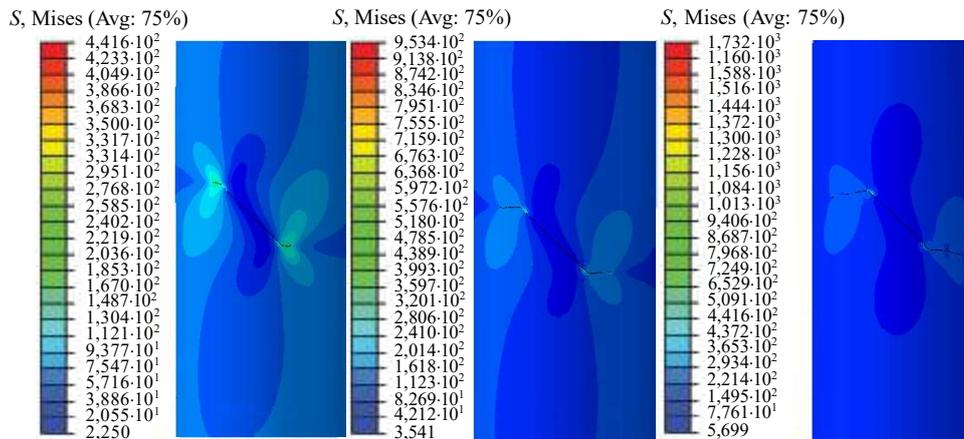


Рис. 2. Результаты КЭ-моделирования распространения наклонной трещины в трубе



Step-1. Increment 20: Time 5.888E-03 час, Step-1. Increment 50: Time 8.452E-03 час, Step-1. Increment 80: Time 1.019E-02 час

Рис. 3. Распределения интенсивности напряжений по Мизесу с течением времени

### Характерные детали и особенности молекулярно-динамического расчета

С помощью пакета LAMMPS – инструмента, реализующего метод молекулярной динамики, выполнено моделирование одноосного растяжения наноскопической трубки с наклонной трещиной. Трубка в основной серии расчетов имела следующие размеры: внешний радиус трубки равен  $54,225 \text{ \AA}$ , внутренний –  $43,38 \text{ \AA}$ , длина трубки составляла  $361,5 \text{ \AA}$ . Размер трубки подбирался для максимального соответствия ее размеров модели трубы в проведенном ранее конечно-элементном расчете. В вычислениях был использован потенциал внедренного атома для материалов с гранецентрированной кубической кристаллической решеткой. В расчетах использовался NVT-канонический ансамбль и термостат Нозе – Гувера для обеспечения постоянства температуры. Временной шаг моделирования составлял 1 фс, общее время моделирования составляло 30 пс.

Граничные условия задачи устанавливались периодическими во всех направлениях. Чтобы исключить влияние соседних образцов вдоль осей  $x_1$  и  $x_2$ , внешний диаметр трубки был задан меньше размера ячейки моделирования на  $4 \text{ \AA}$  по этим направлениям. Моделируемая система содержала 58900 атомов. Трещина задана путем определения двух регионов в виде призм (с целью моделирования наклонной трещины) и исключения взаимодействия атомов из первой области с атомами из второй.

В приведенном расчете угол наклона трещины составлял  $45^\circ$ . В течение 20 пс проводилась релаксация системы. Температура задана равной  $0,1 \text{ К}$  с целью исключения эффектов неупругого деформирования трубы.

В течение 30 пс к трубке прикладывалась растягивающая нагрузка вдоль ее оси. Геометрия трехмерной молекулярно-динамической модели трубки с наклонной трещиной приведена на рис. 4. Красным и розовым цветами отмечены области, между атомами которых исключено взаимодействие, соответственно между этими регионами и инициирована трещина.

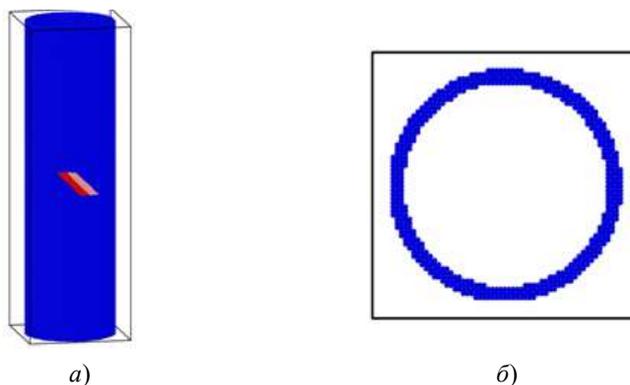


Рис. 4. Геометрия трубки с наклонной трещиной в LAMMPS: вид сбоку (а), вид сверху (б)

Траектория распространения трещины с течением времени, полученная при атомистическом моделировании, показана на рис. 5. Сравнение путей продвижения наклонной трещины, наблюдаемых в конечно-элементном (см. рис. 3) и молекулярно-динамическом (см. рис. 5) моделировании, показало их подобие.

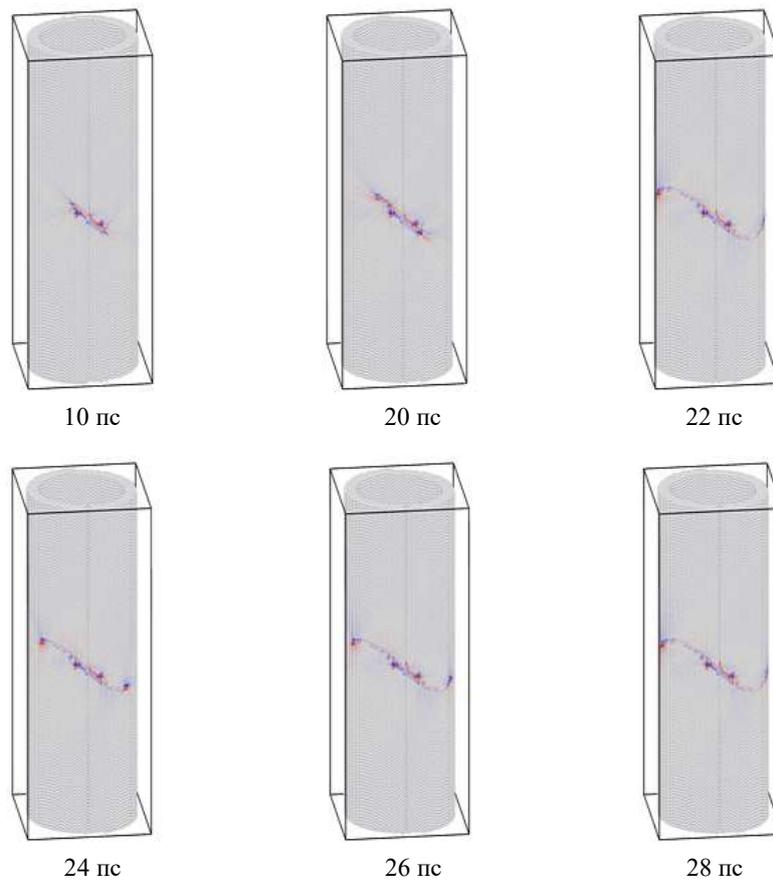


Рис. 5. Траектория роста наклонной трещины в трубке с течением времени

### Заключение

В проведенном вычислительном имитационном эксперименте были рассмотрены два концептуально различных подхода для моделирования осевого нагружения трубы с наклонной трещиной. В рамках первого (континуального) подхода использовалась техника расширенного метода конечных элементов и его реализация в расчетном комплексе SIMULIA ABAQUS. Второй подход является дискретным и основан на методе молекулярной динамики. Сравнение траекторий продвижения трещины, полученных двумя различными техниками (см. рис. 2, 3 и рис. 5), обнаружило их подобие и качественное сходство. Таким образом, в настоящем исследовании выполнено компьютерное имитационное моделирование, базирующееся на атомистически-молекулярном моделировании деформирования трубки с наклонным сквозным дефектом, подверженной действию осевой растягивающей нагрузки. Проведено моделирование трубы, находящейся под действием растягивающей нагрузки, с помощью расширенного метода конечных элементов, реализованного в КЭ-комплексе SIMULIA ABAQUS. Сопоставлены траектории распространения трещин в каждом из рассмотренных случаев. Показано, что траектория роста трещины, наблюдаемая в атомистическом моделировании, практически совпадает с траекторией трещины, полученной с помощью технологии

расширенного метода конечных элементов (XFEM). Полученное решение может быть полезным при создании параллельных объединенных атомистически-континуальных моделей деформирования и разрушения тел с дефектами [19–24].

#### Список литературы

1. Степанова Л.В., Бронников С.А., Белова О.Н. Оценка направления роста трещины в условиях смешанного нагружения (нормальный отрыв и поперечный сдвиг): обобщенные критерии классической механики разрушения и атомистическое моделирование смешанного нагружения (метод молекулярной динамики). *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. 2017. Т. 4. С. 189–213. DOI: 10.15593/perm.mech/2017.4.13.
2. Mishra S., Kundalwal S.I. Comparative analysis of hydrogen sorption in large-sized single-walled carbon nanotubes and multi-walled carbon nanotubes: A molecular dynamics study. *Materials Today. Proceeding*. 2023. DOI: 10.1016/j.matpr.2023.06.423.
3. Brandao W.H.S., Sousa J.M.De, Aguirra A.L., Galvao D.S., Ribeiro Jr L.A.J., Fonseca A.F. First-principles and reactive molecular dynamics study of the elastic properties of pentahectite-based nanotubes. *Mechanics of Materials*. 2023. Vol. 183. Article No 104694. DOI: 10.1016/j.mechmat.2023.104694.
4. Cui K., Liang K., Jiang T., Zhang J., Lau D., Chang J. Understanding the role of carbon nanotubes in low-carbon concrete: From experiment to molecular dynamics. *Cement and Concrete Composite*. 2023. Vol. 142. Article No 105189. DOI: 10.1016/j.cemconcomp.2023.105189.
5. Stepanova L.V., Belova O.N. Coefficients of the Williams power expansion of the near crack tip stress field in continuum linear elastic fracture mechanics at the nanoscale. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. 2022. Vol. 119. Article No 103298. DOI: 10.1016/j.tafmec.2022.103298.
6. Stepanova L.V., Belova O.N. Stress intensity factors, T-stresses and higher order coefficients of the Williams series expansion and their evaluation through molecular dynamics simulations. *Mechanics of Advanced Materials and Structures*. 2022. Vol. 30. Iss. 19. P. 3862–3884. DOI: 10.1080/15376494.2022.2084800.
7. Степанова Л.В., Белова О.Н. Идентификация коэффициентов интенсивности напряжений, T-напряжений и коэффициентов регулярных слагаемых высокого порядка в разложении Уильямса с помощью молекулярно-динамического моделирования. *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. 2023. №2. С. 47–77. DOI: 10.15593/perm.mech/2023.2.06.
8. Zhang Y., Xian Y., Li J., Ding S., Liu S., Xia R. Atomistic investigation on the mechanical properties of 3D nanoporous metallic glasses under uniaxial tension and compression. *Materials Today Communications*. 2021. Vol. 27. Article No 102460. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2021.102460>.
9. Zhang C., Yang B., Wang C., Liu J., Feng W., Fang X., Chen S. Temperature-dependent brittle-ductile transition of  $\alpha$ -graphene nanotubes under uniaxial tension. *Computational Materials Science*. 2021. Vol. 187. Article No 110083. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110083>.
10. Sharma H., Owhal A., Gautam D., Shrivastava S., Rathore J.S., Belgamwar S.U., Rao V.K.P. Thermoatomic analysis of monovacancy defected single-walled boron nitride nanotube under quasi-static strain: Insight from molecular dynamics. *Materials Chemistry and Physics*. 2023. Vol. 294. Article No 127020. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2022.127020>.
11. Babu P.N., Dixit S., Pal S. Atomistic simulation of crack propagation in CNT reinforced nanocrystalline aluminum under uniaxial tensile loading. *Philosophical Magazine*. 2021. Vol. 101. Iss. 17. P. 1942–1964. DOI: 10.1080/14786435.2021.1948132.
12. Bedi D., Sharma S., Tiwari S.K. Effects of chirality and defects on tensile behavior of carbon nanotubes and graphene: Insights from molecular dynamics. *Diamond and Related Materials*. 2022. Vol. 121. Article No 108769. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2021.108769>.
13. Huang K., Wu J., Yin Y., Xu W. Atomistic-continuum theory of graphene fracture for opening mode crack. *International Journal of Solids and Structures*. 2023. Vol. 268. Article No 112172. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2023.112172>.

14. Wang J., Ye X., Yang X., Liu M., Li X. The applicability and the low limit of the classical fracture theory at nanoscale: The fracture of graphene. *Engineering Fracture Mechanics*. 2023. Vol. 284. Article No 109282. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2023.109282>.
15. Borst R. Fracture and damage in quasi-brittle materials: A comparison of approaches. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. 2022. Vol. 122. Article No 103652. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2023.109282>.
16. Sohali T., Roy S. An investigation of the validity of LEFM at the nanoscale in amorphous materials using the atomistic J-integral including entropic effect. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. 2023. Vol. 125. Article No 103913. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2023.103913>.
17. Xu G.Q., Demkowicz M.J. Computing critical energy release rate for fracture in atomistic simulations. *Computational Materials Science*. 2020. Vol. 181. Article No 109738. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109738>.
18. Мушанкова К.А., Степанова Л.В. Молекулярно-динамическое моделирование полей напряжений в пластине с центральной трещиной из материалов с гранецентрированной кубической решеткой. *Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия*. 2021. Т. 27. №4. С. 68–82. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2021-27-4-68-82>.
19. ГОСТ 633-80. Трубы насосно-компрессорные и муфты к ним: Технические условия. М.: Стандартинформ, 1983. 41 с.
20. Diaz A., Gu B., Li Y., Plimpton S.J., McDowell D.L., Chen Y. A parallel algorithm for the concurrent atomistic-continuum methodology. *Journal of Computational Physics*. 2022. Vol. 463. Article No 111140. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2022.111140>.
21. Urata S., Hirobe S., Oguni K., Li S. Atomistic to continuum simulations of fracture and damage evolutions in oxide glass and glass-ceramic materials: A critical review. *Journal of Non-Crystalline Solids: X*. 2022. Vol. 15. Article No 100120. <https://doi.org/10.1016/j.nocx.2022.100102>.
22. Sohail T., Roy S. An investigation of the validity of LEFM at the nanoscale in amorphous materials using atomistic J-integral including entropic effect. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. 2023. Vol. 125. Article No 103913. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2023.103913>.
23. Nair K.A., Ghost S. Crack tip enhanced phase-field model for crack evolution in crystalline Ti6Al from concurrent crystal plasticity FE-molecular dynamics simulations. *European Journal of Mechanics-A/Solids*. 2023. Vol. 100. Article No 104983. <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2023.104983>.
24. Venkatesan K.R., Koo B., Khafagy K.H., Chattopadhyay A. Multiscale modeling of carbon nanotube-reinforced polymer with coarse-grain molecular dynamics informed morphology. *Composites Science and Technology*. 2022. Vol. 223. Article No 109412. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2022.109412>.

#### References

1. Stepanova L.V., Bronnikov S.A., Belova O.N. Otsenka napravleniya rosta treshchiny v usloviyakh smeshannogo nagruzheniya (normalnyy otryv i poperechnyy sdvig): obobshchennyye kriterii klassicheskoy mekhaniki razrusheniya i atomisticheskoe modelirovanie smeshannogo nagruzheniya (metod molekulyarnoy dinamiki) [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)]. *Vestnik Permskogo natsionalnogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Mekhanika [PNRPU Mechanics Bulletin]*. 2017. Vol. 4. P. 189–213 (In Russian).
2. Mishra S., Kundalwal S.I. Comparative analysis of hydrogen sorption in large-sized single-walled carbon nanotubes and multi-walled carbon nanotubes: A molecular dynamics study. *Materials Today. Proceeding*. 2023. DOI: [10.1016/j.matpr.2023.06.423](https://doi.org/10.1016/j.matpr.2023.06.423).
3. Brandao W.H.S., Sousa J.M.De, Aguirra A.L., Galvao D.S., Ribeiro Jr L.A.J., Fonseca A.F. First-principles and reactive molecular dynamics study of the elastic properties of pentahexoctite-based nanotubes. *Mech. Mater.* 2023. Vol. 183. Article No 104694. DOI: [10.1016/j.mechmat.2023.104694](https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2023.104694).
4. Cui K., Liang K., Jiang T., Zhang J., Lau D., Chang J. Understanding the role of carbon nanotubes in low-carbon concrete: From experiment to molecular dynamics. *Cem. Concr. Compos.* 2023. Vol. 142. Article No 105189. DOI: [10.1016/j.cemconcomp.2023.105189](https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2023.105189).

5. Stepanova L.V., Belova O.N. Coefficients of the Williams power expansion of the near crack tip stress field in continuum linear elastic fracture mechanics at the nanoscale. *Theor. Appl. Fract. Mech.* 2022. Vol. 119. Article No 103298. DOI: 10.1016/j.tafmec.2022.103298.
6. Stepanova L.V., Belova O.N. Stress intensity factors, T-stresses and higher order coefficients of the Williams series expansion and their evaluation through molecular dynamics simulations. *Mech. Adv. Mater. Struct.* 2022. Vol. 30. Iss. 19. P. 3862–3884. DOI: 10.1080/15376494.2022.2084800.
7. Stepanova L.V., Belova O.N. Identifikatsiya koeffitsientov intensivnosti napryazheniy, T-napryazheniy i koeffitsientov regulyarnykh slagaemykh vysokogo poryadka v razlozhenii Uilyamsa s pomoshchyu molekulyarno-dinamicheskogo modelirovaniya [Identification of stress intensity factors, T-stresses and higher-order coefficients of regular terms in the Williams series expansion through molecular dynamics simulations]. *Vestnik Permskogo natsionalnogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Mekhanika [PNRPU Mechanics Bulletin]*. 2023. No 2. P. 47–77 (In Russian).
8. Zhang Y., Xian Y., Li J., Ding S., Liu S., Xia R. Atomistic investigation on the mechanical properties of 3D nanoporous metallic glasses under uniaxial tension and compression. *Mater. Today Commun.* 2021. Vol. 27. Article No 102460. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2021.102460>.
9. Zhang C., Yang B., Wang C., Liu J., Feng W., Fang X., Chen S. Temperature-dependent brittle-ductile transition of  $\alpha$ -graphene nanotubes under uniaxial tension. *Comput. Mater. Sci.* 2021. Vol. 187. Article No 110083. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110083>.
10. Sharma H., Owhal A., Gautam D., Shrivastava S., Rathore J.S., Belgamwar S.U., Rao V.K.P. Thermoatomic analysis of monovacancy defected single-walled boron nitride nanotube under quasi-static strain: Insight from molecular dynamics. *Mater. Chem. Phys.* 2023. Vol. 294. Article No 127020. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2022.127020>.
11. Babu P.N., Dixit S., Pal S. Atomistic simulation of crack propagation in CNT reinforced nanocrystalline aluminum under uniaxial tensile loading. *Philos. Mag.* 2021. Vol. 101. Iss. 17. P. 1942–1964. DOI: 10.1080/14786435.2021.1948132.
12. Bedi D., Sharma S., Tiwari S.K. Effects of chirality and defects on tensile behavior of carbon nanotubes and graphene: Insights from molecular dynamics. *Diam. Relat. Mater.* 2022. Vol. 121. Article No 108769. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2021.108769>.
13. Huang K., Wu J., Yin Y., Xu W. Atomistic-continuum theory of graphene fracture for opening mode crack. *Int. J. Solids and Struct.* 2023. Vol. 268. Article No 112172. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2023.112172>.
14. Wang J., Ye X., Yang X., Liu M., Li X. The applicability and the low limit of the classical fracture theory at nanoscale: The fracture of graphene. *Eng. Fract. Mech.* 2023. Vol. 284. Article No 109282. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2023.109282>.
15. Borst R. Fracture and damage in quasi-brittle materials: A comparison of approaches. *Theor. Appl. Fract. Mech.* 2022. Vol. 122. Article No 103652. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2023.109282>.
16. Sohali T., Roy S. An investigation of the validity of LEFM at the nanoscale in amorphous materials using the atomistic J-integral including entropic effect. *Theor. Appl. Fract. Mech.* 2023. Vol. 125. Article No 103913. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2023.103913>.
17. Xu G.Q., Demkowicz M.J. Computing critical energy release rate for fracture in atomistic simulations. *Comput. Mater. Sci.* 2020. Vol. 181. Article No 109738. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109738>.
18. Mushankova K.A., Stepanova L.V. Molekulyarno-dinamicheskoe modelirovanie poley napryazheniy v plastine s tsentralnoy treshchinoy iz materialov s granetsentrirovannoy kubicheskoy reshetkoy [Molecular dynamic modeling of stress fields in plates with a central crack made of materials with a face-centered cubic lattice]. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya [Vestnik of Samara University. Natural Science Series]*. 2021. Vol. 27. No 4. P. 68–82. DOI: <http://doi.org/10.18287/2541-7525-2021-27-4-68-82> (In Russian).
19. GOST 633-80. *Truby nasosno-kompresornye i mufy k nim. Tekhnicheskie usloviya [GOST 633-80. Tubing Pipes and Couplings for them. Specifications]*. Moscow. Standartinform Publ. 1983. 41 p. (In Russian).

20. Diaz A., Gu B., Li Y., Plimpton S.J., McDowell D.L., Chen Y. A parallel algorithm for the concurrent atomistic-continuum methodology. *J. Comput. Phys.* 2022. Vol. 463. Article No 111140. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2022.111140>.

21. Urata S., Hirobe S., Oguni K., Li S. Atomistic to continuum simulations of fracture and damage evolutions in oxide glass and glass-ceramic materials: A critical review. *J. Non Cryst. Solids: X.* 2022. Vol. 15. Article No 100120. <https://doi.org/10.1016/j.nocx.2022.100120>.

22. Sohail T., Roy S. An investigation of the validity of LEFM at the nanoscale in amorphous materials using atomistic J-integral including entropic effect. *Theor. Appl. Fract. Mech.* 2023. Vol. 125. Article No 103913. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2023.103913>.

23. Nair K.A., Ghost S. Crack tip enhanced phase-field model for crack evolution in crystalline Ti6Al from concurrent crystal plasticity FE-molecular dynamics simulations. *Eur. J. Mech. A Solids.* 2023. Vol. 100. Article No 104983. <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2023.104983>.

24. Venkatesan K.R., Koo B., Khafagy K.H., Chattopadhyay A. Multiscale modeling of carbon nanotube-reinforced polymer with coarse-grain molecular dynamics informed morphology. *Compos. Sci. Technol.* 2022. Vol. 223. Article No 109412. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2022.109412>.

## **MODELLING THE CRACK PROPAGATION AND ANALYSIS OF THE INCLINED CRACK PATH IN THE PIPE WITH THE EXTENDED FINITE ELEMENT METHOD AND MOLECULAR DYNAMICS METHOD\***

**Belova O.N., Stepanova L.V.**

*Samara University, Samara, Russian Federation*

[stepanova.lv@ssau.ru](mailto:stepanova.lv@ssau.ru)

*Received by the Editor 2023/09/03*

The article is devoted to a comparative analysis of the results of computational simulation experiments aimed at determining the inclined crack propagation paths a linearly elastic medium, performed using two fundamentally different approaches, namely discrete atomistic approach and continuum mechanics approach. The aim of the study is to construct paths of an inclined crack in a pipe under the uniaxial tensile loading by means of an extended finite element method (continuum approach) and using the molecular dynamics method (discrete, molecular atomistic approach). Computer simulations of uniaxial tension of a pipe with a through-the-thickness inclined crack were performed using the extended finite element method of the multi-functional computational software SIMULIA Abaqus. In parallel with the finite element analysis, a molecular dynamic simulation of the uniaxial tension of a nanoscopic tube with a through-the-thickness inclined crack in the LAMMPS software package for several materials (monocrystalline copper and monocrystalline aluminum with a face-centered crystal lattice) with the embedded atom potentials available in the LAMMPS open code was carried out. The sizes of macroscopic and nanoscopic pipes and crack lengths are selected taking into account the geometric similarity of the samples. Hereupon, the paths of the propagation of an inclined crack in a pipe under axial stretching conditions are obtained. Computations were carried out for several characteristic values of the crack inclination angles: 30, 45, 60 and 75° to the pipe axis. It is found that the crack propagation paths obtained within the framework of the continuum mechanics approach and atomistic simulations are similar to each other. It is established that for different angles of the crack location, the similarity of the crack growth trajectories in the pipe is preserved at various scale length levels: macroscopic and nanoscopic scales.

*Keywords:* molecular dynamics method, extended finite element method, finite element analysis, crack path, stress field, mixed mode loading.

---

\* The research was supported by the Russian Science Foundation (grant No 21-11-00346).