

# 磨粒磨损中微观切削过程分子动力学模拟<sup>\*</sup>

杨晓京 陈子辰 樊瑜瑾 李浙昆

**【摘要】** 针对磨粒磨损中微观切削过程,研究了分子动力学模拟的基本原理、磨粒微观切削过程的分子动力学模拟模型和数值模拟算法。为研究摩擦表面上的微观动态行为与变化,认识磨粒磨损机理,提供了一种基于微观数值模拟的途径和方法。

**关键词:** 磨粒磨损 微切削 分子动力学 计算机模拟

**中图分类号:** TH117.1 **文献标识码:** A

## Molecular Dynamics Simulation of Micro Cutting Process of Abrasive Wear

Yang Xiaojing<sup>1</sup> Chen Zichen<sup>1</sup> Fan Yujin<sup>2</sup> Li Zhekun<sup>2</sup>

(1. Zhejiang University 2. Kunming University of Science and Technology)

### Abstract

In order to analyze a micro cutting process of abrasive wear by means of molecular dynamics simulation, the principle, model and solving algorithm of molecular dynamics simulation of micro cutting process were discussed. The method can be adopted to research micro dynamic behavior and changing of friction surface and to show mechanism of abrasive wear.

**Key words** Abrasive wear, Micro cutting, Molecular dynamics, Computer simulation

### 引言

由外界硬颗粒或者摩擦副表面上的硬突起物引起的磨粒磨损是最普遍的磨损形式之一。磨粒对被磨材料表面的切削是磨粒磨损的主要作用机制。对磨粒磨损切削过程的研究由宏观尺度进入微观尺度有两个方面的意义:摩擦副的磨粒磨损发生在摩擦表面的微观局部,研究摩擦表面上的微观动态行为与变化是认识磨粒磨损机理的重要途径;随着微机电系统技术的迅速发展,特征尺寸在纳米级(1 nm~1 μm)、微米级(1 μm~1 mm)或毫米级(1~10 mm)范围的这类微型机械系统中,有必要研究微构件之间的接触面或运动副间微小微粒造成的磨粒磨损。

因此,对磨粒微观切削过程中的现象和切削机理的研究是十分必要的。然而,在对磨粒切削过程的

研究中,大多数通过简单公式计算磨损量或通过磨损实验对表面进行观察分析,难以反映出变化过程和变化状态。而且,对微观切削过程采用建立在传统连续介质力学基础上的切削理论来解释具有局限性。微观切削发生在微小区域,该区域只包含数个或数百个原子层。切削已转为切断原子键的结合,将可能产生新的物理现象,如微尺度效应。在微尺度下,机械的、力学的、热的特性有可能发生变化<sup>[1]</sup>。因此,需要寻求新的研究方法。

分子动力学方法是一种描述微观现象的有效方法,它是从统计物理学中衍生出来的一种计算机模拟技术。分子动力学模拟具有沟通宏观特性与微观结构的作用,对于许多在理论分析中和实验观察上都难以理解的现象可以作出一定的微观解释。因此,利用分子动力学模拟方法从微观分析的角度研究磨

收稿日期:2006-01-10

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金资助项目(项目编号:50065001)

杨晓京 浙江大学现代制造工程研究所 博士生,310027 杭州市

陈子辰 浙江大学现代制造工程研究所 教授 博士生导师

樊瑜瑾 昆明理工大学机电工程学院 教授,650224 昆明市

李浙昆 昆明理工大学机电工程学院 教授

粒的微观切削过程,从微细尺度的角度来揭示磨粒磨损的过程与机理。

## 1 分子动力学模拟的基本原理

分子动力学模拟的基本原理是:建立一个粒子系统来模拟所研究的微观现象,系统中各粒子之间的相互作用一般可根据经典牛顿力学规律来研究,必要时可结合量子力学知识。对该粒子系统,建立粒子动力学方程组,通过数值求解得到在各个时刻每个粒子的坐标和速度,并把它们存储下来,这些坐标和速度数据给定了系统在各个特定时刻的微观状态。根据需要将这些数据取出来作适当的平均便可求得各种宏观性质<sup>[2]</sup>。

对于粒子数为  $n$  的物理系统,其力学描述的哈密顿形式可以写为

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (i=1,2,\dots,n) \quad (1)$$

$$p_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (i=1,2,\dots,n) \quad (2)$$

其中  $H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + U \quad (3)$

式中  $H$ ——哈密顿函数  $U$ ——系统总势能

$q_i$ ——第  $i$  个粒子的广义坐标

$p_i$ ——第  $i$  个粒子的广义动量

$m_i$ ——第  $i$  个粒子的质量

该系统力学描述的牛顿形式则为

$$\ddot{r}_i = \frac{F_i(r_i)}{m_i} \quad (i=1,2,\dots,n) \quad (4)$$

$$F_i = -\nabla_i U(r_i) \quad (5)$$

式中  $F_i$ ——第  $i$  个粒子所受的合力

$r_i$ ——第  $i$  个粒子的位置坐标

$\nabla_i$ ——算子

可以看出,分子动力学模拟的关键问题是粒子间作用力的计算,即粒子间作用势的确定,而核心问题是求解牛顿运动方程组。

对于粒子间作用势的确定,理论的方法是根据量子力学知识,精确求解薛定鄂方程。对于一般复杂系统,求解是非常困难的。因此通常通过实验拟合或半经验法得到粒子间作用势,根据对粒子间作用势不同的简化处理方法,分子动力学模拟方法有多体分子动力学、可变电荷分子动力学、紧束分子动力学、密度泛函分子动力学以及混合分子动力学等。

若采用对势函数  $u_{ij}(r_{ij})$ ,即

$$U(r_i) = \sum_{i \neq j} u_{ij}(r_{ij}) \quad (6)$$

则式(5)的力计算公式变为

$$r_{ij} = r_j - r_i \quad (7)$$

$$F_i = \sum_j F_i(r_{ij}) \quad (8)$$

$$F_{ij} = -F_{ji} = \frac{\partial u_{ij}(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \quad (9)$$

式中  $F_{ij}$ ——粒子  $j$  对粒子  $i$  的作用力

$r_{ij}$ ——粒子  $j$  和粒子  $i$  之间的距离

假设各个粒子质量相等,式(4)的牛顿运动方程形式变为

$$\frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = \frac{1}{m} \sum_j F_i(r_{ij}) \quad (10)$$

式中  $m$ ——粒子的质量

牛顿运动方程组的求解通过数值方法实现,对式(10)的二阶微分算符使用离散化格式,即

$$r^{(2)}(t) = h^{-2} [r(t+h) - 2r(t) + r(t-h)] + o(h^2) \quad (11)$$

得到显式中心差分方法

$$\frac{1}{h^2} [r_i(t+h) - 2r_i(t) + r_i(t-h)] = \frac{1}{m} F_i(t) \quad (12)$$

式(12)提供了一个方法,根据粒子在前两步即  $t$  和  $t-h$  时刻的位置及  $t$  时刻的作用力,得出粒子在  $t+h$  时刻的位置,对  $t+h$  时刻的粒子位置求解,得

$$r_i(t+h) = 2r_i(t) - r_i(t-h) + F_i(t)h^2/m \quad (13)$$

令  $t_n = nh$ ,  $r_i^n = r_i(t_n)$ ,  $F_i^n = F_i(t_n)$ ,式(13)可改写成更能显示算法的形式

$$r_i^{n+1} = 2r_i^n - r_i^{n-1} + F_i^n h^2/m \quad (14)$$

从位置  $r_{i0}$  和  $r_{i1}$  出发,随后的所有位置都由式(14)这个递推关系决定。换句话说, $n+1$  时刻的粒子位置由此时刻之前的 2 个时刻的位置外推或预报出来。

按照近似格式,可计算速度

$$\frac{dr(t)}{dt} = \frac{1}{2h} [r(t+h) - r(t-h)] + o(h^2) \quad (15)$$

$$v_i^n = (r_i^{n+1} - r_i^{n-1}) / (2h) \quad (16)$$

式(14)、(16)连同初始位置就构成了分子动力学模拟算法<sup>[3]</sup>。

## 2 磨粒微观切削过程分子动力学模拟

根据分子动力学模拟的基本原理,磨粒微观切削过程的分子动力学模拟方法是:①建立磨粒微观切削的分子动力学模型。②计算磨粒原子与被磨面材料原子之间的作用力。③建立运动方程。④通过数值求解运动方程即可得到磨粒原子相对被磨面材料原子的位移和速度。⑤模拟出不同时刻原子的运动轨迹,根据运动轨迹和原子间作用力可分析磨粒的滑动过程、应力与应变的关系等,对磨粒微观切削机理作出合理解释。

## 2.1 模型建立

以一定数量的被磨材料原子与磨粒原子,建立微切削的分子动力学模型,模型由边界原子、牛顿原子和外围原子组成,如图1所示。边界原子保持固定,牛顿原子在切削过程中由牛顿运动方程组描述其状态,外围原子也是由牛顿运动方程组计算,但在计算时需要进行修正。

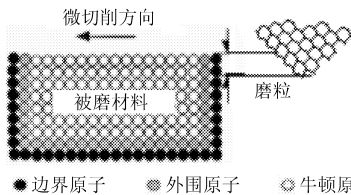


图1 磨粒微切削的分子动力学模拟模型

Fig. 1 Molecular dynamics simulation model of micro cutting

## 2.2 分子间作用力的计算

如前所述,分子间作用力的计算是分子动力学模拟的关键,实际应用中多采用经验势求导方法计算得出。在金属原子的模拟中,Morse势函数是较常用的势函数,其表达式为

$$u(r_{ij}) =$$

$$D[\exp(-2a(r_{ij}-r_0)) - 2\exp(-a(r_{ij}-r_0))] \quad (17)$$

式中  $u$ ——势能  $D$ ——结合能系数

$a$ ——势能曲线梯度系数

$r_0$ ——分子间作用力为零时的原子间距

势函数确定后,如果仅考虑切削过程中磨粒原子与被磨材料原子之间相互作用力,则可以通过式(9)求出原子间作用力。而作用在第  $i$  个原子上的总原子力等于其周围所有其他原子对该原子作用力的合力,即按式(8)求出。

对于微观切削,第  $i$  个被磨材料原子所受的总原子力  $F_{wi}$  为

$$F_{wi} = \sum_{j \neq i}^{N_t} F_{wtij} + \sum_{j \neq i}^{N_w} F_{wvij} =$$

$$\sum_{j \neq i}^{N_t} \left( -\frac{\partial u(r_{wtij})}{\partial r_{wtij}} \right) + \sum_{j \neq i}^{N_w} \left( -\frac{\partial u(r_{wvij})}{\partial r_{wvij}} \right) \quad (18)$$

式中  $N_t$ ——磨粒原子数

$N_w$ ——被磨材料原子数

$F_{wtij}$ ——第  $i$  个被磨材料原子与第  $j$  个磨粒原子间的作用力

$F_{wvij}$ ——第  $i$  个被磨材料原子与第  $j$  个被磨材料原子间的作用力

$r_{wtij}$ ——第  $i$  个被磨材料原子与第  $j$  个磨粒原子间的距离

$r_{wvij}$ ——第  $i$  个被磨材料原子与第  $j$  个被磨材料原子间的距离

同理,第  $i$  个磨粒原子所受的总原子力  $F_{ti}$  为

$$F_{ti} = \sum_{j \neq i}^{N_w} F_{twij} + \sum_{j \neq i}^{N_t} F_{ttij} = \sum_{j \neq i}^{N_w} \left( -\frac{\partial u(r_{twij})}{\partial r_{twij}} \right) + \sum_{j \neq i}^{N_t} \left( -\frac{\partial u(r_{ttij})}{\partial r_{ttij}} \right) \quad (19)$$

式中  $F_{twij}$ ——第  $i$  个磨粒原子与第  $j$  个被磨材料原子间的作用力

$F_{ttij}$ ——第  $i$  个磨粒原子与第  $j$  个磨粒原子间的作用力

$r_{twij}$ ——第  $i$  个磨粒原子与第  $j$  个被磨材料原子间的距离

$r_{ttij}$ ——第  $i$  个磨粒原子与第  $j$  个磨粒原子间的距离

被磨材料原子运动方程的表达式为

$$m_{wi} \frac{d^2 r_{wi}(t)}{dt^2} = F_{wi}(r_{wvij}, r_{wtij}) \quad (i=1, 2, \dots, N_w) \quad (20)$$

式中  $m_{wi}$ ——被磨材料原子质量

$r_{wi}$ ——被磨材料原子位置

磨粒原子运动方程的表达式为

$$m_{ti} \frac{d^2 r_{ti}(t)}{dt^2} = F_{ti}(r_{twij}, r_{ttij}) \quad (i=1, 2, \dots, N_t) \quad (21)$$

式中  $m_{ti}$ ——磨粒原子质量

$r_{ti}$ ——磨粒原子位置

## 2.3 求解运动方程数值算法

对于 Verlet 算法,具体步骤为:

(1) 确定被磨材料原子和磨粒原子初始位置

$r_{wi}, r_{ti}$ 。

(2) 规定被磨材料原子和磨粒原子初始速度

$v_{wi}, v_{ti}$ 。

(3) 计算第  $n$  时间步的力  $F_i^n$ 。

(4) 计算第  $n+1$  时间步上的被磨材料原子和磨粒原子的位置  $r_{wi}^{n+1}, r_{ti}^{n+1}$ 。

(5) 计算第  $n+1$  时间步上的力  $F_{wi}^{n+1}, F_{ti}^{n+1}$ 。

(6) 计算第  $n+1$  时间步上的被磨材料原子和磨粒原子的速度  $v_{wi}^{n+1}, v_{ti}^{n+1}$ 。

## 2.4 分子动力学模拟实现

在上述模型和算法基础上,可编制分子动力学模拟程序,得到计算结果后,可以对原子位移、工件与磨粒的应力等进行定量计算和定性分析,并可绘制原子位置图或应力图,以便对磨粒微观切削过程的现象进行分析,研究磨粒的压入和滑动过程。例如,图2是运用分子动力学模拟得到的磨粒磨损

观切削过程不同时刻的原子图。由图可对磨粒微切削滑动过程进行分析。被磨材料表面与磨粒接触处成了滑移区,并产生了以原子团为单位的磨屑。磨粒下面的原子层被压缩,从而使晶格受压变形并随磨粒移动向前扩展,被磨材料表面中堆积的原子在磨粒的前方向上运动形成了磨屑。另一些原子则在磨粒滑过以后,由于磨粒原子作用力的减小,在内部原子斥力的作用下产生弹性恢复,形成磨痕。

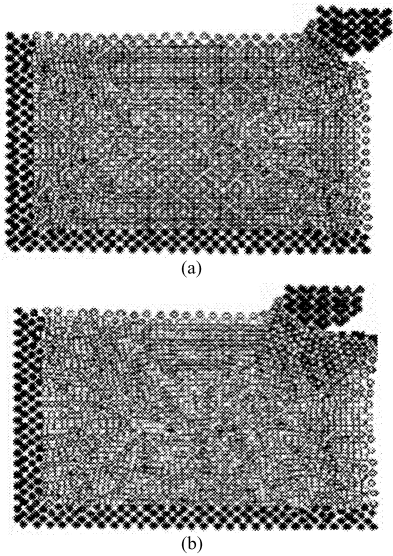


图2 不同时刻的分子动力学模拟图

Fig.2 Molecular dynamics simulation plots showing various stages  
(a)  $t=10$  ps (b)  $t=30$  ps

## 2.5 实际应用中应考虑的问题

以上研究了在理想状态下,运用分子动力学,对单个磨粒的微观切削作用进行数值模拟的方法,从微观尺度来分析摩擦表面上的微观动态行为与变

化,认识磨粒磨损机理。然而,在磨粒磨损中,磨粒的数量、大小、形状和运动状态受很多因素的影响,经常无法确定。而这些特征参数对摩擦表面有着较大的影响。因此,在实际应用中,可通过下述方法与前述的有关计算方程和算法建立联系:

(1) 磨粒的大小。建立磨粒原子数量与磨粒大小的关系  $N_i = D/r$ 。

(2) 磨粒形状。在求解运动方程数值算法中,坐标系中规定了磨粒原子初始位置  $r_{ii}$ ,由磨粒形状决定了各个磨粒原子的初始位置,并假设在切削过程中保持刚性,各个磨粒原子的相对位置保持不变。

(3) 磨粒的运动状态。在求解运动方程数值算法中,要给定各个磨粒原子的初始速度,各个磨粒原子以相同的初始速度  $v_{ii}$  开始运动,通过计算磨粒在运动方向的分量可确定。

(4) 颗粒的数量。如果进一步考虑多个磨粒的作用,则分别计算单个磨粒对被磨材料原子的作用,进行叠加。

## 3 结束语

根据分子动力学模拟的基本原理,建立磨粒微切削的分子动力学模型。通过计算磨粒原子与被磨面材料原子之间的作用力,建立运动方程。然后通过数值方法求解运动方程即可得到磨粒原子相对被磨面材料原子的位移和速度。最后模拟出不同时刻原子的运动轨迹,根据运动轨迹和原子间作用力可分析磨粒的微观切削滑动过程。为研究磨粒磨损的微观动态行为与变化,认识磨粒磨损机理,提供了一种新方法。

## 参 考 文 献

- 1 唐祯安,王立鼎. 关于微尺度理论[J]. 光学精密工程, 2001,9(6):493~498.
- 2 温诗铸. 纳米摩擦学[M]. 北京:清华大学出版社,1996.
- 3 Heermann D W. 理论物理学中的计算机模拟方法[M]. 秦克成,译. 北京:北京大学出版社,1996.