

基于分子动力学与响应面优化 Fe_xC_y 微观力学性能研究

卫立新¹, 高 玲², 吕世宁³, 高有山^{3*}

(1. 山西工程技术学院机械工程系, 山西 阳泉 045000; 2. 北京科技大学材料科学与工程学院, 北京 100083;
3. 太原科技大学机械工程学院, 山西 太原 030024)

摘 要: 探究了不同碳钢材料在不同温度下的力学性能响应状况, 采用分子动力学建立仿真模型, 通过三因素多水平正交试验和响应面法建立回归模型, 研究 C 含量、空位比以及温度对杨氏模量 E 和屈服强度 Q 的影响。在相同的 C 含量和空位比条件下, 利用 Matlab 的随机函数建立了 50 个模型, 每种试验条件进行 50 次仿真。统计杨氏模量和屈服极限的中位数作为反应材料力学性能的关键参数, 建立响应面回归模型。通过随机选取 10 组仿真试验验证, 成功地探究了不同因素对碳钢力学性能的影响规律, 得到了材料力学参数的可靠数学模型, 并对材料成分组成进行了优化设计。

关键词: 分子动力学; 影响面分析; 杨氏模量; 屈服强度

中图分类号: TF76, TF044

文献标志码: A

文章编号: 1004-7638(2025)01-0184-08

DOI: 10.7513/j.issn.1004-7638.2025.01.026

开放科学 (资源服务) 标识码 (OSID):



听
语
音
与
作
者
互
动
聊
科
研

Fe_xC_y micro-mechanical properties based on response surface methodology and molecular dynamics

WEI Lixin¹, GAO Ling², LÜ Shining³, GAO Youshan^{3*}

(1. Department of Mechanical Engineering, Shanxi Institute of Technology, Yangquan 045000, Shanxi, China; 2. School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China; 3. School of Mechanical Engineering, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, Shanxi, China)

Abstract: This research is to investigate the mechanical properties of different carbon steel materials at different temperatures. The simulation model was established by using molecular dynamics, and the regression model was established by the three-factor multi-level orthogonal test and response surface method to study the effects of C content, vacancy ratio and temperature on Young's modulus and yield strength. Under the same C content and vacancy ratio conditions, 50 models were established by using the random function of Matlab, and each test condition was simulated 50 times. The median of Young's modulus and yield limit were used as key parameters of the mechanical properties of the reaction materials, and the response surface regression model was established. By randomly selecting 10 groups of simulation experiments, this study successfully explored the influence of different factors on the mechanical properties of carbon steels, obtaining a reliable mathematical model of materials mechanical parameters, and optimizing the composition of materials.

Key words: molecular dynamics, response surface analysis, Young's modulus, yield strength

收稿日期: 2023-12-29

基金项目: 山西省自然科学基金 (20210302123217); 山西省专利推广实施资助专项 (20171064); 山西省研究生实践创新项目 (2023SJ257)

作者简介: 卫立新, 1998 年出生, 男, 山西曲沃人, 硕士, 从事冶金物化方面的基础研究工作, E-mail: 1872738559@qq.com;

* 通讯作者: 高有山, 1974 年出生, 男, 山西太原人, 博士, 教授, 主要从事工程机械电液传动与控制技术的教学科研工作, E-mail: 2003011@tyust.edu.cn。

0 引言

低碳钢被广泛地应用于航天发射架、冶金机械、核产业、内燃机等工作环境处于高温环境中的机械结构中。C 含量、制造过程中产生的空位比在不同的温度下会有不同的力学性能。因此需要研究温度对低碳钢力学性能的影响。传统方法通过材料试制再进行试验的方法会造成大量人力物力的浪费,而分子动力学可以通过仿真计算节约成本,缩短材料研发时间,从而为学者们预测材料的力学性能提供了一种新的方法。李翔^[1]利用分子动力学研究了 α -Fe 塑性变形行为;韦昭昭^[2]通过分子动力学探究了 Fe 合金马氏体相变晶体学特征;袁玉全^[3]用分子动力学模拟了 Fe 拉伸与疲劳裂纹扩展,对其机理进行了一定的研究;王云天^[4]的研究表明温度升高单晶铁的成核阈值会随之降低。同时,研究表明空位率与 C 含量^[5]会影响低碳钢的力学性能。

传统的多因素多水平试验会造成试验次数多,试验难度大的问题。为减少试验次数可以利用正交试验设计,加快试验进展。此前,响应面法多用于化学、医药、生物以及机械设计等领域,近年来开始应用于材料的力学性能预测研究。曲晨驰^[6]为改善 Al-Cu-Sc 合金的导电性以及力学性能,利用响应面法优化了材料的 Cu、Sc 含量;胡静^[7]建立了 ECC 基体的二次多项式回归模型并且对材料配比进行了优化。响应面法对多因素影响分析具有较好的拟合效果。

因此,笔者首先对三种因素多水平试验利用响应面法进行试验设计,再利用 Matlab 建立多个随机模型,利用分子动力学研究 Fe-C 合金 C 含量、空位比、温度对杨氏模量、屈服极限的影响并进行统计,利用响应面法建立三因素双目标的数学模型。然后随机选取 10 组组合条件对所建立的数学模型进行验证,对影响低碳钢材料力学性能的因素进行了探究。最后通过所建立的数学模型对材料配比进行了优化。

1 仿真模型与模拟试验方法

1.1 仿真模型设置

采用分子动力学方法对 FeC 合金在原子尺度下进行单轴拉伸仿真,FeC 体系采用开源大规模原子/分子并行模拟器 LAMMPS,模拟时首先进行了能量最小化,然后在 NPT 体系内进行了 10 ps 的弛豫,最后在微正则体系 NVE 体系下进行拉伸,采用速度标定法进行控温。初始模型的尺寸为

18.6186 nm×18.6186 nm×1.1457 6 nm,共有 34 000 个原子,Fe 原子晶胞排布方式为 BCC,C 原子与空位随机分布在 Fe 基中。通过改变盒子 Y 方向上的尺寸,以恒定的应变率 $\varepsilon_{yy} = 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 进行 Y 轴拉伸,Y 方向的应变可以用公式(1)表示为。

$$\varepsilon_{yy} = \frac{l_y - l_{y0}}{l_{y0}} \quad (1)$$

仿真时间步设置为 0.001 ps,三个方向均设置为周期边界,仿真步数为 30 000。利用 Windows 批量化处理程序“*.dat”脚本实现批量化仿真,通过 Ovito 进行可视化处理,对应力-应变数据采用 lammps 自带的输出“fix print”函数,再使用 Matlab 进行批量化处理。

HEPBURN^[8]对 Fe-C 原子间相互作用进行了研究,经过 Sebastien Garruchet 的修改得到了 Fe-C 嵌入原子势(EAM)来描述 Fe-C 合金内部的原子间相互作用力。文中研究是基于其提出的 eam.fs 原子势函数进行的。

1.2 模拟试验方法

响应面法的基本思想是基于数学回归思想,通过对设计空间中不同点的拟合,用回归模型代替复杂模型。研究采用 Design-Expert 中的 optimal 设计方法进行更为灵活的试验设计。低碳钢的含碳量(C 原子数)大约在 1%~2.2%,空位率大约在 1%~5%,低碳钢力学性能温度范围设定为 300~900 K,根据叶天舟^[9]研究,低合金钢在超过 900 K 温度后力学性能迅速劣化,不适宜再作为主要的支撑材料。所有因素的水平分级均采用均匀化设置,温度水平设置为 4 水平,C 含量与空位比水平设置为 5。因素水平设计以及对应的数值如表 1 所示。

表 1 因素水平设计
Table 1 Design of factors and levels

水平等级	影响因素		
	温度 T/K	含 C 量 R/%	空位比 V/%
-2	300	1	1
-1	500	1.3	2
0	700	1.6	3
1	900	1.9	4
2		2.2	5

根据表 2 中 20 组试验情况进行仿真,因微观力学性能与局部原子、空位分布也有关系,因此为减少这种随机关系对材料力学参数统计的影响,每种情况进行 50 次仿真,取各自杨氏弹性模量 E 以及屈服强度 Q (后文均以 E 指代杨氏弹性模量、 Q 指代屈服强度)的中位数作为该情况下的材料参数。

表2 响应面试验设计

Table 2 Experimental design of response surface method

编号	温度 T/K	含C量 $R/\%$	空位比 $V/\%$	编号	温度 T/K	含C量 $C/\%$	空位比 $V/\%$
1	500	1	3	11	300	1.6	2
2	900	1	2	12	700	1.3	2
3	900	1.6	3	13	900	2.2	5
4	500	1	3	14	900	1.6	1
5	500	1.6	5	15	300	1	5
6	500	1.6	5	16	900	1.6	3
7	700	2.2	1	17	900	1	5
8	300	2.2	2	18	300	2.2	4
9	900	2.2	3	19	700	1.3	2
10	700	2.2	1	20	300	1.6	2

2 仿真结果与分析

2.1 分子动力学仿真分析

以 300 K1R1V(300 K: 300 K 的温度, 1R: 含碳量 1%, 1V: 空位比 1%) 的单轴拉伸模型为例, 如图 1 所示, 对拉伸过程中晶胞类型进行分析。可以发现单轴拉伸时晶粒产生明显的位错, 从 10 ps 到 20 ps 变化显著, 直至 30 ps 时由于原子间距过大, 已经很难保持 BCC 晶胞结构, 几乎完全被其他(非典型晶胞结构)替代。

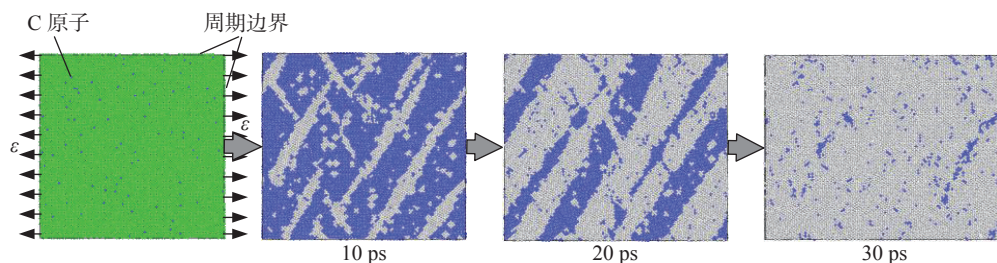


图1 仿真模型

Fig. 1 Simulation model

从 300 ~ 700 K 低碳钢微观拉伸过程中, 材料有明显的线弹性阶段。在 300 K 中, 经过线弹性阶段后有明显的应变软化过程, 之后再发生塑性断裂; 同时随着温度的升高, 应变软化效应逐渐消失, 在高温 900 K 下低碳钢不再具有明显的线弹性阶段, 并且随着温度的升高材料的屈服应力有下降的趋势, 应力应变如图 2 所示。

按照 1.2 中提及的参数取值方法, 将分子动力学性能结果统计至表 3 中。

2.2 响应面模型建立

利用 Design-Expert 软件对 E 、 Q 建立温度 T 、含碳量 R 以及空位比 V 三变量之间的多种拟合模型分析, 分别对 linear、2FI、square、cubic 进行显著性分析, 通过对模型显著性检测、失拟项检测和相关性检测的数据进行对比, 选择最优的模型进行试验数据分析, 结果如表 4 所示。

一般认为 $P < 0.01$ 为非常显著, $0.01 \leq P \leq 0.05$ 为显著, $P > 0.05$ 为不显著。由表 4 可知, 弹性模量模型中两因素多项式和平方多项式的 R^2 均在 0.99

以上, 线性多项式和两因素多项式为极显著, 综合判断 E 值拟合使用两因素多项式模型; 屈服强度的线性多项式和平方多项式为显著, 同时平方多项式 R^2 校正值在所有模型中最大, 为 0.997 0, R^2 预测值为 0.984 7, 接近 1, 因此选择平方多项式模型作为屈服强度回归模型。根据表 3 对 E 、 Q 建立温度 T 、含碳量 R 以及空位比 V 三变量的响应面回归模型, 见式 (2)、(3)。

$$E(T, R, V) = 266.11093 - 0.274192T + 14.1449R - 4.38164V - 0.018139TR + 0.017048TV + 1.61867RV \quad (2)$$

$$Q(T, R, V) = 19.07829 - 0.015987T - 0.861465R - 0.969765V - 0.000179TR + 0.000285TV + 0.172086RV + 8.50425 \times 10^{-6}T^2 + 0.098446R^2 + 0.064218V^2 \quad (3)$$

为了验证式 (2)(3) 的可靠性, 对其进行方差以及可信度检验分析, 杨氏模量回归模型方差的分析结果如表 5 所示, 屈服极限回归模型方差分析结果如表 6 所示。

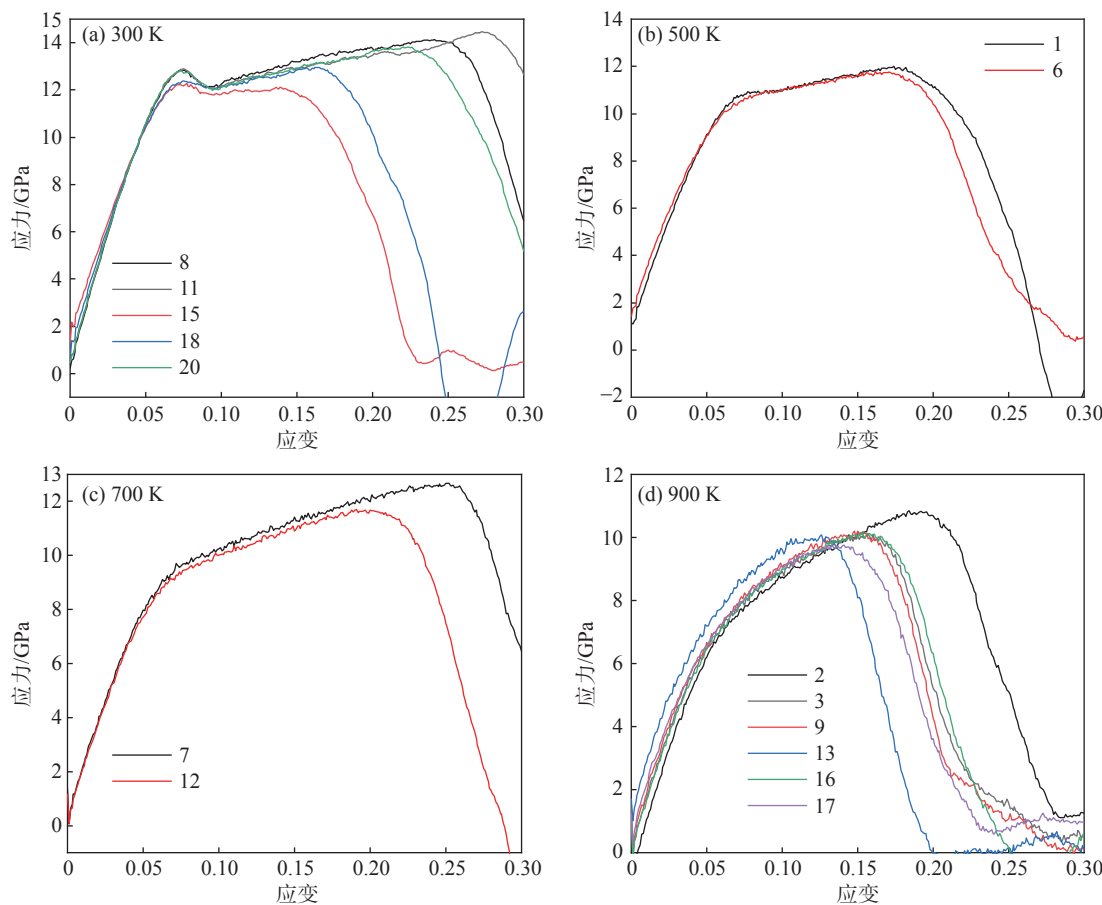


图 2 应力应变曲线
Fig. 2 Stress-strain curves

表 3 分子动力学性能平均值
Table 3 Average molecular dynamics properties

编号	E/GPa	Q/GPa	编号	E/GPa	Q/GPa
1	152.616	10.961 7	11	205.276	12.875 5
2	42.670 6	9.933 2	12	90.412	10.060 7
3	56.319	9.442 5	13	88.473 5	9.722 8
4	152.616	10.961 7	14	36.443 3	9.791 1
5	168.574	10.848 8	15	205.762	12.266 4
6	168.574	10.848 8	16	56.319	9.442 5
7	86.301 3	10.022 2	17	81.235 7	9.508 3
8	213.773	12.835 4	18	220.891	12.408 9
9	58.739	9.434 3	19	90.412	10.060 7
10	86.301 3	10.022 2	20	205.276	12.875 5

模型 $E(T,R,V)$ 与 $Q(T,R,V)$ 的 P 值均小于 0.000 1, 说明两个模型建立极显著。 $E(T,R,V)$ 的 F 值为 1 275.1, $Q(T,R,V)$ 的 F 值为 709.77, 模型只有 0.01% 的可能性是由于噪音产生的结果。大部分因素对模型的影响因素较为显著, 因此模型建立良好。从方差分析可以得出 T 、 R 、 V 对杨氏模量以及屈服强度的影响均为显著, 含碳量 R 相较于另两个变量显著性较差。两因素的交互影响对杨氏模量的影响:

温度与含碳量以及温度与空位率影响较为显著, 而含碳量与空位率的影响并不显著。两因素交互影响对屈服极限的影响: 温度与空位率以及空位率与含碳量的影响为显著; 温度与含碳量的影响并不显著, 模型可信度检验分析如表 7 所示。

表 4 杨氏模量和屈服强度多种模型综合分析结果
Table 4 Results of comprehensive analysis of Young's modulus and yield strength models

	模型	P	R^2	
		顺序 P 值	校正值	预测值
E	线性	<0.000 1	0.986 8	0.979 9
	两因素	<0.000 1	0.997 5	0.995 6
	平方	0.047 1	0.998 5	0.993 6
	三次		1.000 0	
Q	线性	<0.000 1	0.988 7	0.863 5
	两因素	0.294 7	0.905 3	0.776 6
	平方	<0.000 1	0.997 0	0.984 7
	三次		1.000 0	

表5 杨氏模量回归模型方差分析

Table 5 Variance analysis of Young's modulus of compressive strength regression model

	平方和	自由度	均方值	F值	P值	是否显著
$E(T, R, V)$	78 703.48	6	13 117.25	1 275.1	< 0.000 1	显著
T	68 447.57	1	68 447.57	6 653.63	< 0.000 1	显著
R	246.39	1	246.39	23.95	0.000 3	显著
V	2 374.5	1	2 374.5	230.82	< 0.000 1	显著
TR	73.67	1	73.67	7.16	0.019	显著
TV	535.98	1	535.98	52.1	< 0.000 1	显著
RV	20.23	1	20.23	1.97	0.184 3	
残差	133.73	13	10.29			
总变异值	78 837.22	19				

根据模型的可信度检验分析可知, 相关系数分别为 0.998 3、0.997 0; 调整系数分别为 0.997 5、0.997 0; 信噪比分别为 100.539 3、72.335 9, 远大于 4, 说明回归模型可靠性较高。

2.3 响应面分析

由图3可以看出, 杨氏模量随着温度的升高而逐渐降低, 降低的速度逐渐变快。杨氏模量随着空位率的增大而逐渐变大, 这是由于空位率造成了低碳钢晶体内部位错的产生, 而位错阻止了拉伸。随着含碳量的增大, 杨氏模量逐渐变大, 但是变化趋

势并不明显, 含碳量对低碳钢的杨氏模量影响并不显著。

表6 屈服极限回归模型方差分析

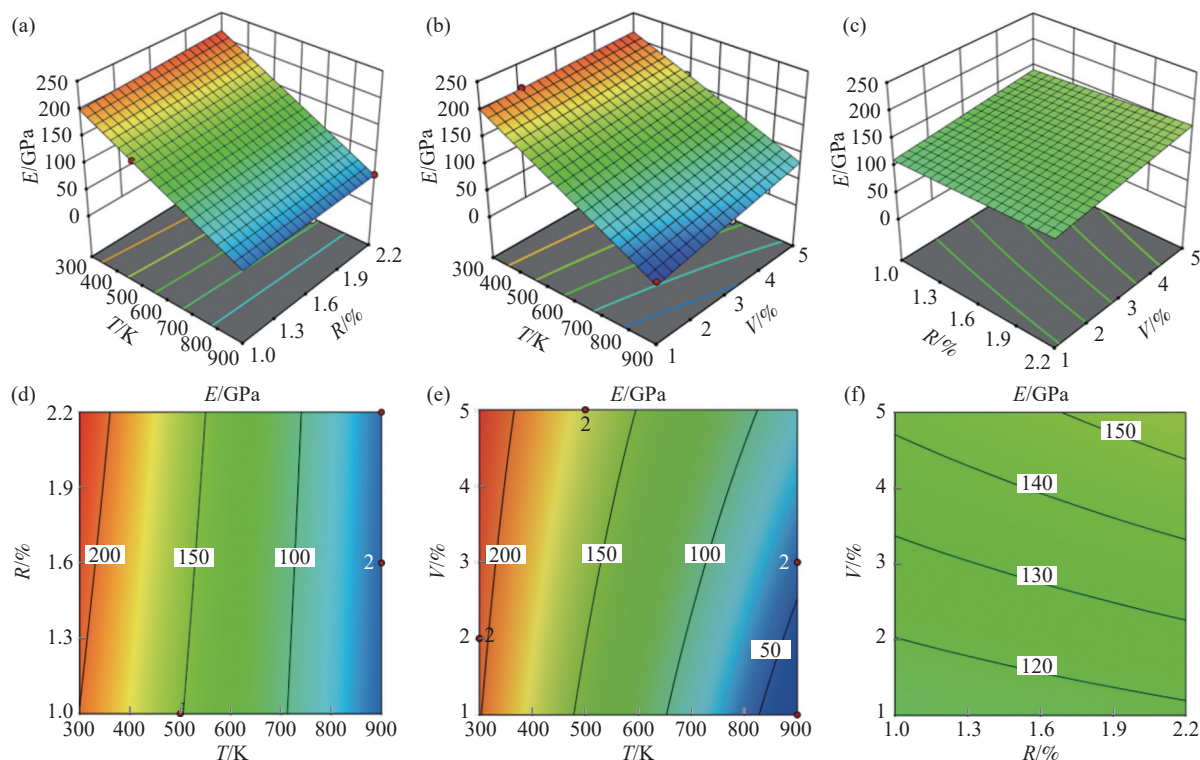
Table 6 Variance analysis of yield limit of compressive strength regression model

	平方和	自由度	均方值	F值	P值	是否显著
$Q(T, R, V)$	29.82	9	3.31	709.77	< 0.000 1	显著
T	26.93	1	26.93	5 769.72	< 0.000 1	显著
R	0.058 8	1	0.058 8	12.61	0.005 3	显著
V	0.465 2	1	0.465 2	99.65	< 0.000 1	显著
TR	0.006 9	1	0.006 9	1.47	0.253 4	
TV	0.137 8	1	0.137 8	29.51	0.000 3	显著
RV	0.158 9	1	0.158 9	34.03	0.000 2	显著
T^2	1.87	1	1.87	401.02	< 0.000 1	显著
R^2	0.005	1	0.005	1.08	0.323 4	
V^2	0.142 1	1	0.142 1	30.43	0.000 3	显著
残差	0.046 7	10	0.004 7			
总变异值	29.87	19				

表7 模型可信度检验分析

Table 7 Reliability test and analysis of the model

模型	标准差	相关系数	调整系数	变异系数/%	信噪比
$E(T, R, V)$	3.21	0.998 3	0.997 5	2.6	100.539 3
$Q(T, R, V)$	0.068 3	0.998 4	0.997 0	0.637 6	72.335 9



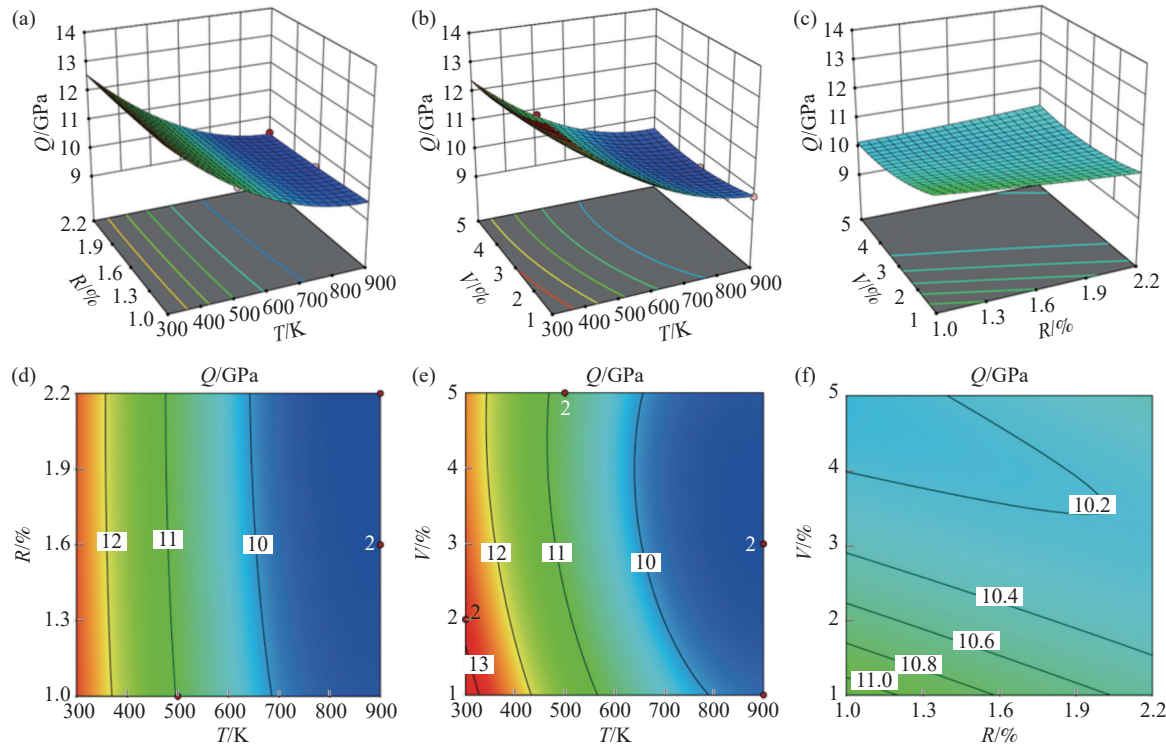
(a)(d) 温度、含碳量与杨氏模量的关系; (b)(e) 温度、空位比与杨氏模量的关系; (c)(f) 含碳量、空位比与杨氏模量的关系

图3 杨氏模量响应曲面及等高线图

Fig. 3 Young's modulus response surfaces and contour maps

从图 4 可以得出, 屈服强度随着温度的升高而逐渐降低, 变化速度逐渐减慢。随着空位率的增加, 由于局部缺陷的增加, 屈服强度逐渐减小, 这种减小

的趋势同样是逐渐变缓。含碳量的增加使得屈服强度减小, 碳含量的增加使得单晶碳钢更易进入屈服阶段。



(a)(d) 温度、含碳量和屈服强度的关系; (b)(e) 温度、空位比与屈服强度的关系; (c)(f) 含碳量、空位比与屈服强度的关系

图 4 屈服强度响应曲面及等高线
Fig. 4 Yield strength response surfaces and contours

3 模型验证及优化

3.1 模型验证

为了对第 2-2 节得到的响应面模型进行验证, 证明模型的可行性, 现对变量梯度范围内进行随机组合。另组合十组仿真试验, 每次试验条件同样进行 50 次仿真, 按照与上述内容相同的方式对杨氏模量以及屈服强度进行计算。因正交试验未对 C 含量为 1.9% 的条件进行, 因此选取 5 组 C 含量为 1.9% 的试验, 另 5 组随机选取。选取的条件以及结果见表 8。

根据式(2)(3)分别计算得与表 7 对应情况下的模型预测值, 将预测值与仿真试验值绘制到图 5 中。图 5(a) 表示弹性模量的模型预测值与仿真值, 图 5(b) 表示屈服强度的预测值与仿真值。

从图 5 可以看出, 弹性模量 E 和屈服强度 Q 的模型预测值与仿真值大部分十分接近, 只有温度为 700 K、含碳量为 1.9%、空位率 3% 的情况下, 仿真值与模型计算结果出入较大。由图 5 可以看出, 弹

性模量的预测结果有 9 个值, 几乎完全重合, 屈服强度的预测值与仿真值结果大部分也较为吻合。为更好地统计误差, 对仿真得到的数值与模型预测的数值进行误差分析, 其结果记录在表 9 中。

表 8 验证不同温度 T 、含碳量 R 以及空位率 V 下的仿真试验结果

Table 8 Verification of the simulation results under different temperatures T , carbon contents R and vacancy rates V

编号	组合			E/GPa	Q/GPa
	温度 T/K	含碳量 $R/\%$	空位率 $V/\%$		
1	300	1.9	1	205.184 7	13.085 1
2	500	1.9	2	156.972 6	11.180 3
3	500	1.9	4	166.524 2	11.039 9
4	700	1.9	3	99.766 2	10.348 9
5	900	1.9	5	85.770 2	9.707 0
6	300	1	1	192.181 4	13.241 2
7	500	1.3	4	160.205 8	10.918 5
8	500	2.2	3	164.008 0	11.129 5
9	700	1.6	1	85.368 5	10.006 5
10	900	1	2	42.670 6	9.933 2

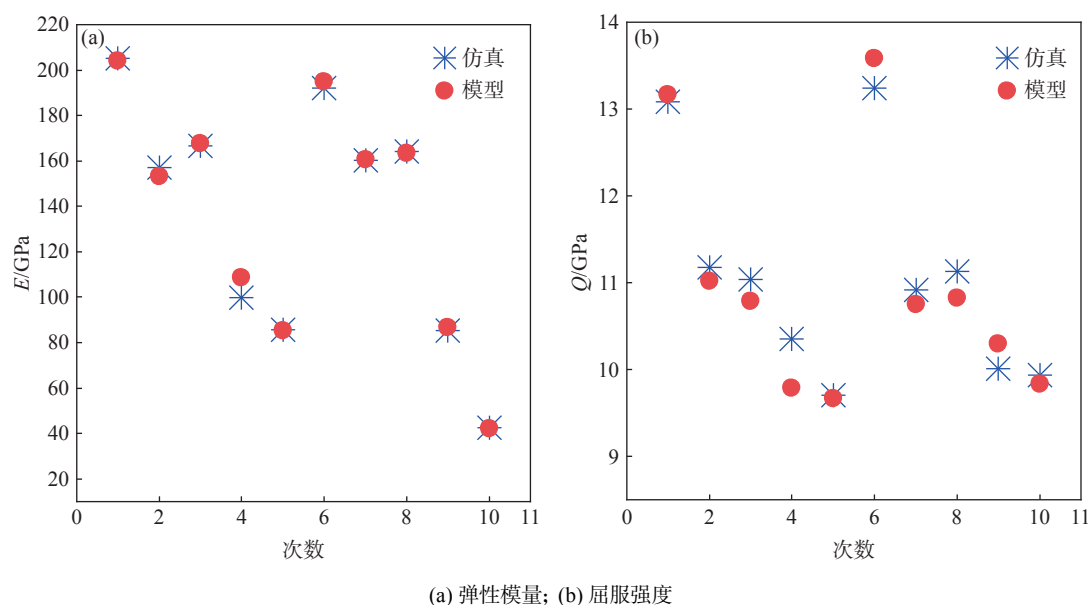


图 5 模型预测值与仿真值

Fig. 5 The values of prediction and simulation

表 9 仿真值与预测值误差
Table 9 The errors of simulation and prediction values

编号	E		Q	
	绝对误差/GPa	相对误差/%	绝对误差/GPa	相对误差/%
1	0.99	0.48	0.09	0.66
2	3.88	2.47	0.16	1.47
3	1.01	0.60	0.25	2.30
4	9.04	9.06	0.57	5.46
5	0.39	0.45	0.04	0.43
6	2.73	1.42	0.34	2.58
7	0.39	0.24	0.16	1.50
8	0.72	0.44	0.30	2.72
9	1.27	1.48	0.29	2.90
10	0.35	0.83	0.10	1.05

由表 9 可知,除第 4 次仿真结果与预测值杨氏模量相差较大外,最大的相对误差为 9.06%,大部分相对误差保持在 5% 以内;屈服强度最大的相对误差为 5.46%,其余相对误差在 5% 以内。预测值与仿真值满足工程误差范围,验证了模型对于工程应用的有效性,与常温 Q235 钢相比较^[10],由于其仿真建模忽略了晶界影响,弹性模量略低,屈服强度远高于宏观材料。

3.2 元素组成响应面优化

采用 Design-Expert 对低碳钢中元素比进行优化,低碳钢作为承载部件的主要材料,需要有足够的

强度和抵抗变形的能力。在复杂载荷环境中,尤其是高温载荷下,材料的力学性能可能会出现迅速劣化。因此对低碳钢的元素组成进行优化时,优化标准是在高温下获得高屈服强度和高弹性模量。

根据上述优化条件,最终 Design-Expert 的优化结果是,在高温载荷 750、800、850、900 K 下,含碳量 R 、空位率 V 分别为 2.2、5。而高空位率在常温情况下力学性能极差,因此应在优化目标中添加空位率取值范围规定为 1% ~ 2%,并将预测结果与仿真结果记录在表 10 中。

表 10 优化结果预测值与仿真值
Table 10 Optimized results of the predicted values and simulation values

T/K	R/%	V/%	E			Q		
			预测/GPa	仿真/GPa	相对误差/%	预测/GPa	仿真/GPa	相对误差/%
750	1.018	1.004	71.108	70.349	1.067	10.442	10.220	2.126
800	1.004	1.120	58.572	59.145	0.978	10.266	10.153	1.101
850	1.063	1.499	49.431	50.017	1.185	9.996	10.092	0.960
900	1.000	2.000	42.317	42.671	0.837	9.829	9.933	1.058

所建立的杨氏模量模型预测值和仿真值最大误差为 1.185%,所建立的屈服强度模量模型预测值和仿真值最大误差为 2.126%,满足工程需求。为确保常温至高温载荷下均具有较好的力学性能,含碳量不应超过 1.1%,随着温度载荷的升高,优化结果空位率增高。

4 结论

采用响应面法对仿真试验组合进行了设计, 依据仿真数据建立了温度 T 、含碳量 R 、空位率 V 与碳钢弹性模量 E 、屈服强度 Q 之间的响应面回归模型。根据模型分析, 得出温度 T 、含碳量 R 、空位率 V 对单晶碳钢的力学性能显著。

1) 随着温度 T 升高, 由于原子越来越活跃, 原子间开始出现相互远离的趋势, 弹性模量 E 、屈服强度 Q 减小。随着含碳量 R 的增加, 碳钢弹性模量增大, 屈服强度减小, 单晶碳钢韧性变差。由于空位率 V 的增加导致晶体内部位错增加, 当晶体拉伸时, 位错阻止晶体变形, 因此弹性模量增大, 而由于局部缺陷增加, 使得屈服强度降低, 单晶碳钢刚度增加。

2) 随机组成 10 组仿真模型对所提数学模型进行验证, 模型拟合程度较高。根据模型进一步优化材料元素组成, 得到的预测值与仿真试验值之间最大误差小于 5%。当材料处于 900 K 载荷, 时空位率为 2%、含碳量为 1% 的单晶碳钢力学性能最佳。不同温度载荷下所得到的最佳力学性能材料配比有所不同, 适当提高 C 含量和空位率可以改善高温情况下的材料力学性能。

3) 研究结果可以用于预测不同碳钢材料在不同条件下的力学性能, 为材料选择和设计提供指导。在特定的工程应用中, 可以根据所需的力学性能要求选择合适的碳钢材料或确定最佳的使用条件, 这将有助于更准确地预测和优化材料的力学性能, 为工程设计和材料科学研究提供有力工具。

参考文献

- [1] LI X, YIN Y H, ZHANG Y Z. Molecular dynamics Simulation of the effects of point defect type and concentration on plastic deformation behavior of α -Fe[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2022, 51(8): 2881-2891.
(李翔, 尹益辉, 张元章. 点缺陷类型和浓度对 α -Fe 塑性变形行为影响的分子动力学模拟[J]. 稀有金属材料与工程, 2022, 51(8): 2881-2891.)
- [2] WEI Z H, MA X, KE C B, *et al.* Molecular dynamics simulation of migration behavior of FCC-BCC atomic terrace-step phase boundary in iron-based alloy[J]. Acta Physica Sinica, 2020, 69(13): 242-254.
(韦昭召, 马晓, 柯常波, 等. Fe 合金 FCC-BCC 原子尺度台阶型马氏体相界面迁移行为的分子动力学模拟研究[J]. 物理学报, 2020, 69(13): 242-254.)
- [3] YUAN Y Q, ZENG X G, HU Y F. Molecular dynamics simulation for crack propagation of α -Fe under uniaxial tension and fatigue loading[J]. Journal of Xinyang Normal University(Natural Science Edition), 2016, 29(1): 31-37.
(袁玉全, 曾祥国, 胡燕飞. 分子动力学模拟 α -Fe 拉伸与疲劳裂纹扩展机理[J]. 信阳师范学院学报(自然科学版), 2016, 29(1): 31-37.)
- [4] WANG Y T, ZENG X G, YANG X. Molecular dynamics simulation of effect of temperature on void nucleation and growth of single crystal iron at a high strain rate[J]. Acta Physica Sinica, 2019, 68(24): 235-251.
(王云天, 曾祥国, 杨鑫. 高应变率下温度对单晶铁中孔洞成核与生长影响的分子动力学研究[J]. 物理学报, 2019, 68(24): 235-251.)
- [5] CHENG Z X, WANG H, LIU G R. Fatigue crack propagation in carbon steel using RVE based model[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2021, 258(12): 108050.
- [6] QU C C, LIU K R, HAN Q, *et al.* Optimization of Cu and Sc content in Al-Cu-Sc aluminum alloy conductor materials by response surface method[J]. Rare Metals and Cemented Carbides, 2021, 49(04): 43-49.
(曲晨驰, 刘奎仁, 韩庆, 等. 响应面法优化 Al-Cu-Sc 铝合金导体材料 Cu、Sc 元素的含量[J]. 稀有金属与硬质合金, 2021, 49(04): 43-49.)
- [7] HU J, ZHANG P L, WU L, *et al.* Study on mechanical properties of cementitious matrix based on response surface method and optimization of the fitting ratio[J]. Materials Reports, 2022, 36(S2): 173-177.
(胡静, 张品乐, 吴磊, 等. 基于响应面法的 ECC 基体力学性能研究与配合比优化[J]. 材料导报, 2022, 36(S2): 173-177.)
- [8] HEPBURN D J, ACKLAND G J. Metallic-covalent interatomic potential for carbon in iron[J]. Physical Review B, 2008, 78(16): 165115.
- [9] YE T Z, YAO H, WU Y W, *et al.* Molecular dynamics study on tensile mechanical properties of FeCrAl alloy[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2023, 52(2): 777-784.
(叶天舟, 姚欢, 巫英伟, 等. FeCrAl 合金拉伸力学性能分子动力学研究[J]. 稀有金属材料与工程, 2023, 52(2): 777-784.)
- [10] Standard for design of steel structures GB 50017-2017[S]. Beijing: China Architecture and Construction Press, 2017.
(钢结构设计标准: GB50017-2017[S]. 北京: 中国建筑工业出版社, 2017.)