ВЫПУСКНАЯ
КВАЛИФИКАЦИОННАЯ
РАБОТА

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана»
(МГТУ им. Н.Э. Баумана)

ФАКУЛЬТЕТ Аэрокосмический факультет

КАФЕДРА ФН-11

РАСЧЕТНО-ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

К ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЕ

НА ТЕМУ:

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ ЖАРОСТОЙКИХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Студент АК3-81 — 15.06.2016 — Р. Б. Ягубов
(Группа) (Подпись, дата) (И.О.Фамилия)

Руководитель ВКР — Ю.И. Димитриенко
(Подпись, дата) (И.О.Фамилия)
15.06.2016

Нормоконтролер — С.С. Кудрявцева
(Подпись, дата) (И.О.Фамилия)
15.06.2016

2016 г.

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана»
(МГТУ им. Н.Э.Баумана)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой ФН-11
(Индекс)
_____ Ю.И. Димитриенко
(И.О.Фамилия)
« 08 » февраля 2016 г.

З А Д А Н И Е
на выполнение выпускной квалификационной работы магистра

Студент группы АК3-81

Ягубов Роман Борисович
(фамилия, имя, отчество)

Тема квалификационной работы численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики

Источник тематики (НИР кафедры, заказ организаций и т.п.)
НИР кафедры, выполняемые по заказу Минобрнауки и промышленных предприятий (АО "ВПК"НПО Машиностроения")

Тема квалификационной работы утверждена распоряжением по факультету АК № 15 от « 4 » декабря 2015 г.

Часть 1. Теоретическая.
Разработать математическую модель жаростойкого интерметаллида алюминид никеля и на основе метода молекулярной динамики составить алгоритм нахождения упругих свойств сплава (механического напряжения, вызываемого действующей силой в зависимости от упругой деформации, вызванной механическим напряжением).

Часть 2. Вычислительная часть.
Разработать алгоритм численного моделирования упругих свойств для жаростойких интерметаллидных материалов (на примере сплава алюминия и никеля) на основе метода молекулярной динамики.

Часть 3. Научно-исследовательская часть.
Провести исследование зависимости упругих свойств (механического напряжения, вызываемого действующей силой в зависимости от упругой деформации, вызванной

механическим напряжением) при малых деформациях для жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики. Сравнить с известными теоретическими данными.

Оформление квалификационной работы:

Расчетно-пояснительная записка на 98 листах формата А4.

Перечень графического (иллюстративного) материала (чертежи, плакаты, слайды и т.п.)
Слайды: Концептуальная и математич. пост. зад.; метод МД, Взаимод., интеграл. Верле, Упругие свойства, результаты, выводы.

Дата выдачи задания « 08 » февраля 2016 г.

В соответствии с учебным планом выпускную квалификационную работу выполнить в полном объеме в срок до « 11 » июня 2016 г.

Руководитель квалификационной работы _____ Ю.И. Димитриенко
(Подпись, дата) (И.О.Фамилия)
15.06.2016

Студент _____ Ягубов Р. Б.
(Подпись, дата) (И.О.Фамилия)
15.06.2016

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана»
(МГТУ им. Н.Э. Баумана)

ФАКУЛЬТЕТ Аэрокосмический

КАФЕДРА ФН-11

ГРУППА АК3-81

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой ФН-11
(Индекс)
_____ Ю.И. Димитриенко
(И.О.Фамилия)
« _08__ » _февраля_ 2016 г.

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы

студента: Ягубова Романа Борисовича
(фамилия, имя, отчество)

Тема квалификационной работы численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики

№ п/п	Наименование этапов выпускной квалификационной работы	Сроки выполнения этапов		Отметка о выполнении	
		план	факт	Должность	ФИО, подпись
1.	Задание на выполнение работы. Формулирование проблемы, цели и задач работы	08.02.2016 Планируемая дата		Руководитель ВКР	Ю.И. Димитриенко
2.	1 часть Теоретическая	08.03.2016 Планируемая дата		Руководитель ВКР	Ю.И. Димитриенко
3.	Утверждение окончательных формулировок решаемой проблемы, цели работы и перечня задач	28.04.2016 Планируемая дата		Заведующий кафедрой	Ю.И. Димитриенко
4.	2 часть Вычислительная	28.05.2016 Планируемая дата		Руководитель ВКР	Ю.И. Димитриенко
5.	3 часть Научно-исследовательская часть	28.05.2016 Планируемая дата		Руководитель ВКР	Ю.И. Димитриенко
6.	1-я редакция работы	30.05.2016 Планируемая дата		Руководитель ВКР	Ю.И. Димитриенко
7.	Подготовка доклада и презентации	09.06.2016			
8.	Заключение руководителя	09.02.2016 Планируемая дата		Руководитель ВКР	Ю.И. Димитриенко
9.	Допуск работы к защите на ГЭК (нормоконтроль)	17.06.2016 Планируемая дата		Нормоконт-ролер	С.С. Кудрявцева
10.	Внешняя рецензия	Планируемая дата			
11.	Защита работы на ГЭК	21.06.2016 Планируемая дата			

Студент _____ (подпись, дата) 15.06.2016

Руководитель работы _____ (подпись, дата) 15.06.2016

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана»
(МГТУ им. Н.Э. Баумана)

НАПРАВЛЕНИЕ НА ЗАЩИТУ
выполнения выпускной квалификационной работы

Председателю
Государственной Экзаменационной Комиссии №____

факультета Аэрокосмический МГТУ им. Н.Э. Баумана

Направляется студент _____Ягубов Роман Борисович_____ группы АК3-81____

на защиту выпускной квалификационной работы на тему численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики

Декан факультета _____ РП Семенычеву
«16» 06 20 16 г.

Справка об успеваемости

Студент ____Ягубов Р. Б._____ за время пребывания в МГТУ им. Н.Э. Баумана с 2012 г. по 2016 г. полностью выполнил учебный план со следующими оценками: отлично 20 %, хорошо – 69 %, удовлетворительно – 11 %.

Инспектор деканата _____

Заключение руководителя выпускной квалификационной работы

Студент в результате исследования путём компьютерного моделирования подтвердил, что при малых деформациях зависимость механического напряжения от упругой деформации для жаростойкого интерметаллида на основе метода молекулярной динамики при использовании потенциала Леннард-Джонса и алгоритма численного интегрирования Верле оказалась линейной, что подтверждается теоретическими выкладками — закон Гука.

Квалификационная работа заслуживает оценки «отлично»

Руководитель _____Димитриенко Юрий Иванович_____
«15» 06 20 16 г.

Заключение кафедры о выпускной квалификационной работе

Выпускная квалификационная работа просмотрена и студент Ягубов Р. Б. может быть допущен к защите этой работы в Государственной Экзаменационной Комиссии.

Зав. кафедрой ~~ФН-11~~ _____Димитриенко Юрий Иванович_____

«15» 06 20 16 г.

Отзыв руководителя
на выпускную квалификационную работу Ягубова Р.Б.
«Численное моделирование упругих свойств
жаростойких интерметаллидных материалов
на основе метода молекулярной динамики»

Целью работы Ягубова Р.Б. является исследование зависимости упругих свойств (механического напряжения, вызываемого действующей силой в зависимости от упругой деформации, вызванной механическим напряжением) при малых деформациях для жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики.

За время работы им была изучена литература по методам молекулярной динамики по двум направлениям, виды взаимодействия частиц и интегрирование уравнений движений материальной точки.

В ходе работы Ягубов Р.Б. на основе теоретических данных и заданных начальных условий написал программу на языке программирования JavaScript совместно с версткой HTML и оформлением CSS.

В результате исследования путём компьютерного моделирования подтвердил, что при малых деформациях зависимость механического напряжения от упругой деформации для жаростойкого интерметаллида на основе метода молекулярной динамики при использовании потенциала Леннард-Джонса и алгоритма численного интегрирования Верле оказалась линейной, что подтверждается теоретическими выкладками — закон Гука.

За время работы Ягубов Р.Б. проявил себя специалистом, способным самостоятельно разбираться в математических постановках и осуществлять моделирование на современной вычислительной техники.

Квалификационная работа заслуживает оценки «отлично», а ее автор — присвоения квалификации бакалавра по направлению «Математика и компьютерные науки».

Научный руководитель, д.ф.-м.н., проф. _____ Димитриенко Ю.И.

Министерство образования и науки Российской Федерации Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионально образования «Московский государственный технический университет имени Николая Эрнестовича Баумана (национальный исследовательский университет)»

Факультет «Аэрокосмический»
Кафедра «Вычислительная математика»

Выпускная квалификационная работа

по дисциплине:
«НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ РАБОТА СТУДЕНТОВ»
по теме:
«ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ ЖАРОСТОЙКИХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ»

Научный руководитель:
Зав. каф. ФН-11, д.ф.-м.н., проф.
Димитриенко Юрий Иванович
_____« 15 » июня 2016 г.

Выполнил:
Студент 4-го курса, гр. **АК3-81**
Ягубов Роман Борисович
_____« 15 » июня 2016 г.

г. Москва
2016

АННОТАЦИЯ

Выпускная квалификационная работа Ягубова Романа Борисовича, студента 4-го курса Аэрокосмического факультета 3-ей группы на тему «Численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики» содержит 99 страницы текста, рисунков —39, таблиц —16, формул —28, использованных источников —32.

Целью выпускной квалификационной работы является исследование зависимости упругих свойств (механического напряжения, вызываемого действующей силой в зависимости от упругой деформации, вызванной механическим напряжением) при малых деформациях для жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики.

Общая характеристика работы

Структурно выпускная работа состоит из двух глав.

Первая глава — теоретическая часть —освещает метод молекулярной динамики, наряду с различными вариантами расчёта сил между атомов вещества и вариантами интегрирования уравнений.

Вторая глава — практическая часть — содержит промежуточные и конечные результаты программы, написанной на основе алгоритма в теоретической части для различного количества атомов вещества.

Вывод по результатам работы

При малых деформациях зависимость механического напряжения от упругой деформации для жаростойкого интерметаллида AlNi на основе метода молекулярной динамики при использовании потенциала Леннард-Джонса и алгоритма численного интегрирования Верле оказалась линейной, что подтверждается теоретическими выкладками — закон Гука.

Автор выпускной квалификационной работы: Ягубов Роман Борисович.

Научный руководитель:д.ф.-м.н., проф. Димитриенко Ю.И.

Выпускная квалификационная работа выполнена под научным руководством и при непосредственном участии д.ф.-м.н., проф. Димитриенко Юрия Ивановича (заведующий кафедрой «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э.Баумана).

Научно-исследовательская работа кафедры выполнена по заказу Минобрнауки и промышленных предприятий (АО «Военно-промышленная корпорация «Научно-производственное объединение машиностроения»).

СОДЕРЖАНИЕ

АННОТАЦИЯ.....2
ВВЕДЕНИЕ.....7
ИСТОРИЯ.....7
АКТУАЛЬНОСТЬ.....8
КОНЦЕПЦИЯ.....8
ПЕРСПЕКТИВЫ.....9
КОНЦЕПТУАЛЬНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ.....11
ЦЕЛЬ РАБОТЫ.....11
ПРОМЕЖУТОЧНЫЕ ЗАДАЧИ.....11
ДОПУЩЕНИЯ.....12
МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ.....14
НАЧАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ.....14
УРАВНЕНИЯ.....14
ВАРЬИРУЕМЫЕ УСЛОВИЯ.....15
ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ.....17
1. ТЕОРИТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ.....18
1.1. МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ.....18
ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ.....19
ОГРАНИЧЕНИЯ МЕТОДА.....20
1.2. МЕЖАТОМНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ.....20
ПОТЕНЦИАЛ ЛЕННАРДА-ДЖОНСА.....21
ХАРАКТЕРНЫЙ ВИД ПОТЕНЦИАЛА.....22
АЛЬТЕРНАТИВНАЯ ФОРМА ЗАПИСИ.....22
ГРАНИЦЫ ПРИМЕНЕНИЯ.....23
1.3. ИНТЕГРИРОВАНИЕ ВЕРЛЕ.....23
ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ.....23
ОСНОВНОЙ АЛГОРИТМ.....23
1.4. УПРУГИЕ СВОЙСТВА.....25
МОДУЛЬ УПРУГОСТИ.....26

МЕХАНИЧЕСКОЕ НАПРЯЖЕНИЕ 27
УПРУГАЯ ДЕФОРМАЦИЯ 28
1.5. АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ 28
НАЧАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ 28
ВЫЧИСЛЯЕМ НАЧАЛЬНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ 29
ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МД 34
УЧЁТ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ 36
РАСЧЁТ НОВЫХ КООРДИНАТ 37
ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМА ВЕРЛЕ 39
РАСЧЁТ РЕЗУЛЬТАТОВ 40
2. ПРАКТИЧЕСКАЯЧАСТЬ 43
2.1. НАЧАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ 43
ДЛЯ 8-МИ ЧАСТИЦ 44
ДЛЯ 64-Х ЧАСТИЦ 44
ДЛЯ 216-ТИ ЧАСТИЦ 45
ДЛЯ 512-ТИ ЧАСТИЦ 45
ДЛЯ 1000-ЧИ ЧАСТИЦ 46
2.2. ПРОМЕЖУТОЧНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ 47
ДЛЯ 8-МИ ЧАСТИЦ 47
ДЛЯ 64-Х ЧАСТИЦ 47
ДЛЯ 216-ТИ ЧАСТИЦ 47
ДЛЯ 512-ТИ ЧАСТИЦ 48
ДЛЯ 1000-ЧИ ЧАСТИЦ 48
2.3. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ 48
ДЛЯ 8-МИ ЧАСТИЦ 49
ДЛЯ 64-Х ЧАСТИЦ 50
ДЛЯ 216-ТИ ЧАСТИЦ 51
ДЛЯ 512-ТИ ЧАСТИЦ 52
ДЛЯ 1000-ЧИ ЧАСТИЦ 53
КОМПЛЕКСНОЕ СРАВНЕНИЕ 54
2.4. ГРАФИЧЕСКОЕ СРАВНЕНИЕ 55
ДЛЯ 8-Х ЧАСТИЦ 55
ДЛЯ 64-Х ЧАСТИЦ 56

ДЛЯ 216-ТИ ЧАСТИЦ 57
ДЛЯ 512-ТИ ЧАСТИЦ 58
ДЛЯ 1000-ЧИ ЧАСТИЦ 59
КОМПЛЕКСНОЕ СРАВНЕНИЕ 60
2.5. РАЗРЫВ СВЯЗЕЙ 61
ДЛЯ 8-Х ЧАСТИЦ 61
ДЛЯ 64-Х ЧАСТИЦ 62
ДЛЯ 216-ТИ ЧАСТИЦ 63
ДЛЯ 512-ТИ ЧАСТИЦ 64
ДЛЯ 1000-ЧИ ЧАСТИЦ 65
ЗАКЛЮЧЕНИЕ 66
СПИСОКИСТОЧНИКОВ 67
ПРИЛОЖЕНИЕ 1 70

ВВЕДЕНИЕ

Нарушение целостности материалов при деформировании[1] создаёт глобальные проблемы в описании упругих[2] свойств (Рисунок 1) в рамках классической механики сплошной среды. Но, с другой стороны, развитие современных технологий позволяет изучать структуры деформированных тел. Причём не только наблюдать под микроскопом за элементами внутренней структуры твёрдых тел, но оказывать влияние на эту структуру на микроуровне[3] в области нанотехнологий[4].

Рисунок 1— виды деформаций.

ИСТОРИЯ

Лишь к 1957 году появилась первая работа, посвящённая методу исследования материалов на уровне структуры. Её авторами были Alder и Waingwright. Работа была основана на исследовании фазовой диаграммы[5] системы твёрдых сфер.

В 1960 году вышла статья «Dynamics of radiation damage». Это был первым пример моделирования[6] подобных структур. В указанной статье

---

[1] изменение взаимного положения частиц тела, связанное с их перемещением относительно друг друга.
[2] свойство твёрдых материалов возвращаться в изначальную форму при упругой деформации.
[3] степень детализации описания объектов, характерной особенностью которой является рассмотрение физических процессов, протекающих в непрерывном пространстве (сплошных средах) и непрерывном времени.
[4] область фундаментальной и прикладной науки и техники, имеющая дело с совокупностью теоретического обоснования, практических методов исследования, анализа и синтеза, а также методов производства и применения продуктов с заданной атомной структурой путём контролируемого манипулирования отдельными атомами и молекулами.
[5] графическое отображение равновесного состояния бесконечной физико-химической системы при условиях, отвечающих координатам рассматриваемой точки на диаграмме.
[6] исследование объектов познания на их моделях; построение и изучение моделей реально существующих объектов, процессов или явлений с целью получения объяснений этих явлений, а также для предсказания явлений, интересующих исследователя.

уравнения движения интегрировались с помощью конечных разностей, один шаг занимал около минуты. К примеру, результаты данной работы были получены с помощью компьютера вычисляющего сто и более шагов в секунду.

В 1964 году Aneesur Rahman в статье «Correlation in the motion of atoms in liquid argon» изучил свойства жидкого аргона на основе потенциала Леннард-Джонса. На тот момент ему удалось смоделировать 864 частицы.

В 1967 году Loup Verlet смоделировал корреляционные функции, чтобы проверить теорию жидкого состояния. Предложив новый метод численного интегрирования уравнений движений частиц.

(Allen M.P., 1987)

АКТУАЛЬНОСТЬ

Бурное развитие вычислительной техники позволяет вернуться к проблеме описания сред на новом уровне. Моделирование твёрдых тел[1] становится важным связующим элементом между теоретическими выкладками и реальным экспериментом.

(Шокин Ю.И., 1997)

Появляются возможности визуализировать модели многократно на основе численных данных, получаемых благодаря численным результатам. За последние несколько десятилетий наиболее разработанным вариантом для подобных исследований является метод молекулярной динамики.

(Кривцов А.М., 2002)

КОНЦЕПЦИЯ[2]

Метод молекулярной динамики состоит в представлении тела совокупностью взаимодействующих частиц (Рисунок 2), движения которых

---

[1] это одно из четырёх агрегатных состояний вещества, отличающееся от других агрегатных состояний (жидкости, газов, плазмы) стабильностью формы и характером теплового движения атомов, совершающих малые колебания около положений равновесия.

[2] определённый способ понимания, трактовки каких-либо явлений, основная точка зрения, руководящая идея для их освещения

описывается законами классической механики. К настоящему времени большинство различных взаимодействий между частицами известны, что позволяет визуализировать[1] модели с высокой степенью точности. Сами силы[2] взаимодействия описываются через потенциалы. Исходя из значений сил, находится ускорение каждой частицы. Потом получают новые координаты и скорости этих частиц путём интегрирования уравнений движения. (Кривцов А.М., 2002)

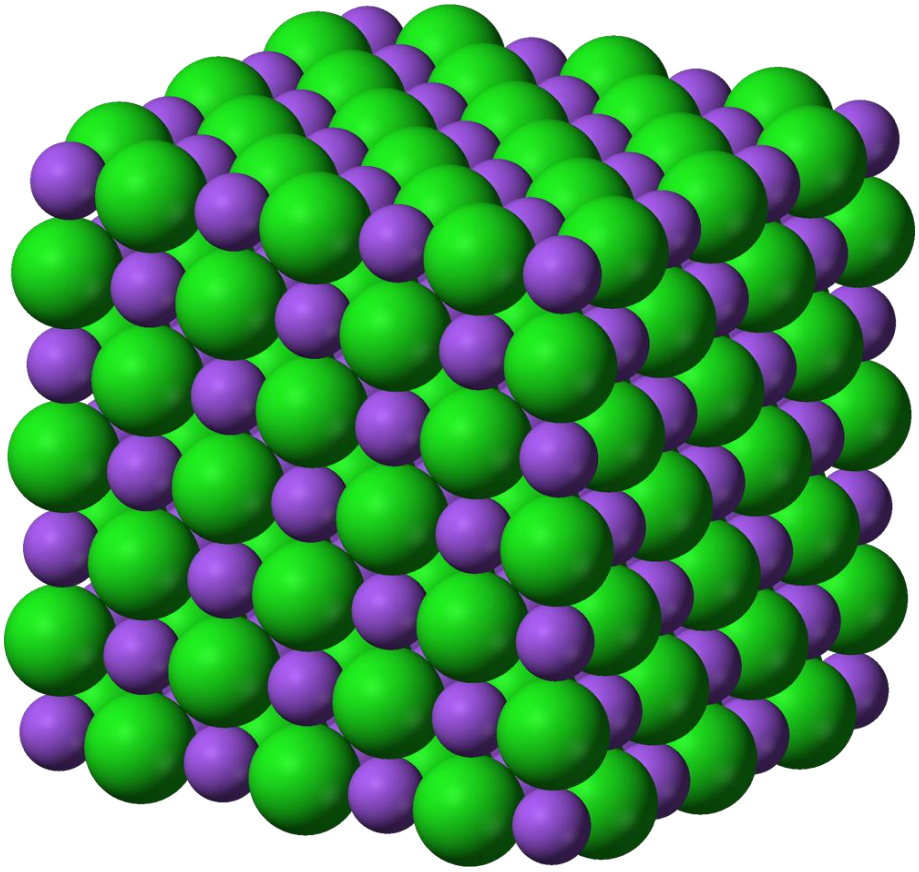

Рисунок 2 — тело, состоящее из атомов двух веществ.

ПЕРСПЕКТИВЫ

К настоящему времени самые современные вычислительные ресурсы позволяют рассматривать до миллиарда частиц[3]. Данная работа исследована с точностью до тысячи частиц. Огромное преимущество метода в том, что лишь

[1] общее название приёмов представления числовой информации или физического явления в виде, удобном для зрительного наблюдения и анализа.
[2] векторная физическая величина, являющаяся мерой воздействия на данное тело других тел, а также полей.
[3] термин, который часто употребляется в физике для обозначения объектов, которые в контексте исследований можно считать неделимыми и точечными.

один потенциал способен смоделировать пластичность[1], разрушение, фазовые переходы[2] и многое другое. Тем самым, не требуя огромного количества предположений о свойствах материала в рамках механики сплошной среды.

(Кривцов А.М., 2002)

Короче говоря, потенциал взаимодействия играет самую важную роль в моделировании и сравним с определяющими уравнениями из механики сплошной среды[3]. Вычислительные технологии растут и будут продолжать развиваться, а значит моделирование будет становиться точнее и быстрее.

(Шокин Ю.И., 1997)

---

[1] способность материала получать остаточные деформации без разрушения и сохранять их после снятия нагрузки.

[2] переход вещества из одной термодинамической фазы в другую при изменении внешних условий.

[3] раздел механики, физики сплошных сред и физики конденсированного состояния, посвящённый движению газообразных, жидких и деформируемых твёрдых тел, а также силовым взаимодействиям в таких телах.

КОНЦЕПТУАЛЬНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В данном разделе кратко сформулирована цель работы и ключевые промежуточные задачи, способствующие получению результата исследования.

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Численно сравнить изменение упругих свойств жаростойких интерметаллидных[1](Рисунок 3 и Рисунок 4) материалов на основе метода молекулярной динамики.

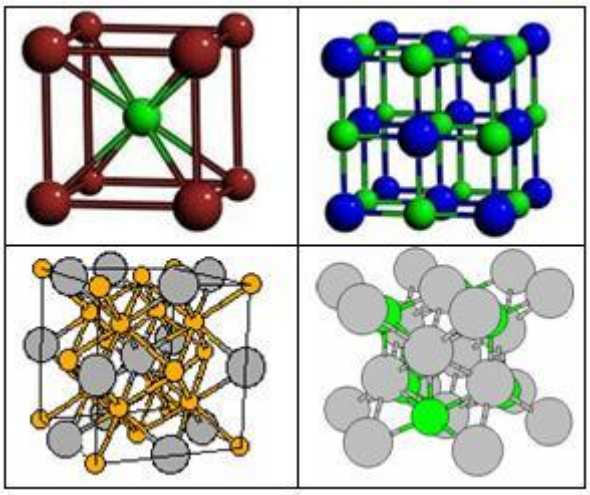

Рисунок 3— двухкомпонентный интерметаллид.

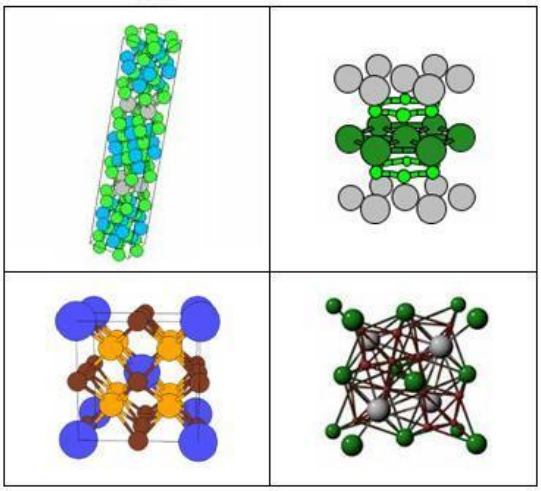

Рисунок 4— трёхкомпонентный интерметаллид.

ПРОМЕЖУТОЧНЫЕ ЗАДАЧИ

1. Определить начальное положение атомов сплава в зависимости от их количества с помощью известных химических соотношений и простейших математических преобразований.
2. Определить конечное положение атомов сплава после приложения внешней силы к некоторым из них, учитывая межатомное взаимодействие с помощью метода молекулярной динамики.

[1] химическое соединение двух или более металлов.

3. Вычислить численные значения для упругих свойств таких, как механическое напряжение и упругая деформация, для жаростойких интерметаллидных материалов при различном значении внешней силы, действующей на одну из сторон материала.
4. Построить графическое сравнение механического напряжения, вызываемого в образце действующей силой в зависимости от упругой деформации образца, вызванной механическим напряжением (Рисунок 5).
5. Сделать вывод.

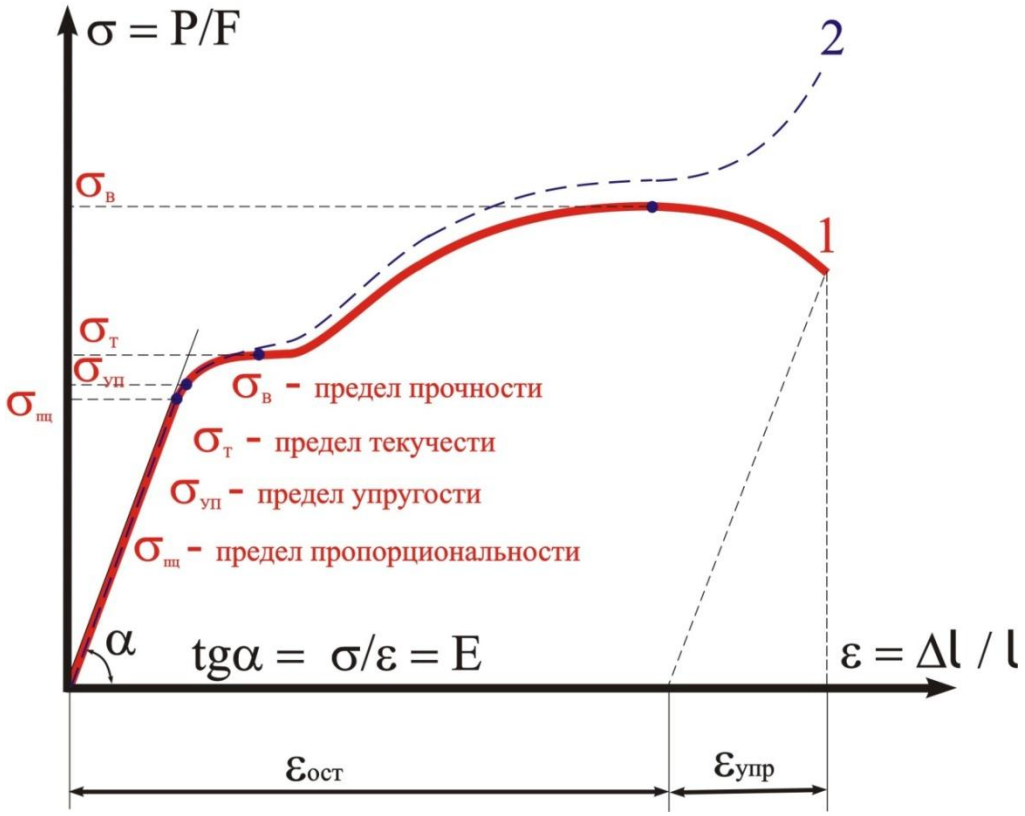

Рисунок 5— модуль упругости.

ДОПУЩЕНИЯ

1. Атомы сплава образуют кристаллы примитивной простой кубической сингонии (кристаллическая решётка в форме куба).

2. Предполагается, что при сближении атомы отталкиваются, а при отдалении притягиваются. Возможны слипания атомов из-за высокой плотности твёрдых материалов.
3. Температура и атмосферное давление среды постоянные и не учитываются при взаимодействии атомов.
4. Силы тяжести и трения также не учитываются.
5. Площадь боковой стенки считается как неразрывная поверхность.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Данная глава представляет из себя математическую формулировку поставленной задачи (Рисунок 6) с помощью системы уравнений.

Приведены лишь основные уравнения и зависимости. Огромная часть вспомогательных формул и соотношений описаны в теоретической части работы.

НАЧАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ

Задается количество атомов материала и их радиусы, а также плотности входящих металлов в твёрдое тело. По данным начальным условиям вычисляются начальные положения каждой частицы.

$$\langle N|R_i|\rho_i\rangle \rightarrow R_0 = \{\overrightarrow{r_1}; \overrightarrow{r_2}; \dots; \overrightarrow{r_N}\}, \qquad (1)$$

где N − количество атомов в системе[шт];

R_i − радиусы атомов, входящих в состав тела[м];

ρ_i − плотности металлов, входящих в состав тела[$\frac{кг}{м^3}$];

R_0 − совокупность положений всех атомов[−];

$\overrightarrow{r_N}$ − координаты -го атома[м].

УРАВНЕНИЯ

Зная начальные условия, последовательно применяем определяющие уравнения с целью получения результата.

$$\begin{cases} \vec{F}(r_{ij}) = \dfrac{dU(r_{ij})}{\vec{d}r_{ij}} = \dfrac{dU(r_{ij})}{dr_{ij}} \cdot \dfrac{\overrightarrow{r_{ij}}}{r_{ij}} \\ m_i \ddot{\overrightarrow{r_i}} = \sum_{j=1}^{N} \vec{F}(r_{ij}) + \overrightarrow{F_0^i} \\ \overrightarrow{r_i}(t+dt) = \overrightarrow{r_i}(t) + \dot{\overrightarrow{r_i}}(t)dt + \ddot{\overrightarrow{r_i}}(t)\dfrac{dt^2}{2} + O(dt^3) \\ \sigma = \dfrac{F_0}{S}, \quad \varepsilon = \dfrac{l - l_0}{l_0}, \end{cases} \qquad (2)$$

где $\vec{F}$ −сила, действующая на -йатом со стороны j-го[Н];

r_{ij} −расстояние между i-м и j-м атомами [м];

U −потенциал, описывающий взаимодействие атомов[Дж];

$\overrightarrow{r_{ij}}$ −вектор между координатами-го и j-го атомами[м];

m_i −масса -го атома[кг];

$\ddot{\vec{r}}_i,\ \dot{\vec{r}}_i,\ \vec{r}_i$ −ускорение, скорость и координаты-го атома[$\frac{\text{м}}{\text{с}^2}, \frac{\text{м}}{\text{с}}$, м];

t, dt −текущее время системы и шаг времени[с];

σ −напряжение, вызываемое в образце действующей силой[Па];

F_0 −приложенная сила на одну из сторон твёрдого тела[Н];

F_0^i −внешняя приложенная сила на i-й атом стенки тела[Н];

S −площадь поверхности к которой приложена сила [м^2];

ε −упругая деформация образца, вызванная напряжением[−][1];

l −максимальная ширина образца[м];

l_0 −начальная длина образца[м].

ВАРЬИРУЕМЫЕ УСЛОВИЯ

Здесь описываются переменные, которые изменяются в процессе выполнения вычислений без изменения начальных условий, чтобы получить несколько результатов для последующего сравнения.

$$\langle F_0[\text{Н}]\rangle \rightarrow \{\sigma[\text{Па}]; l[\text{м}]\} \qquad (3)$$

[1]безразмерная величина.

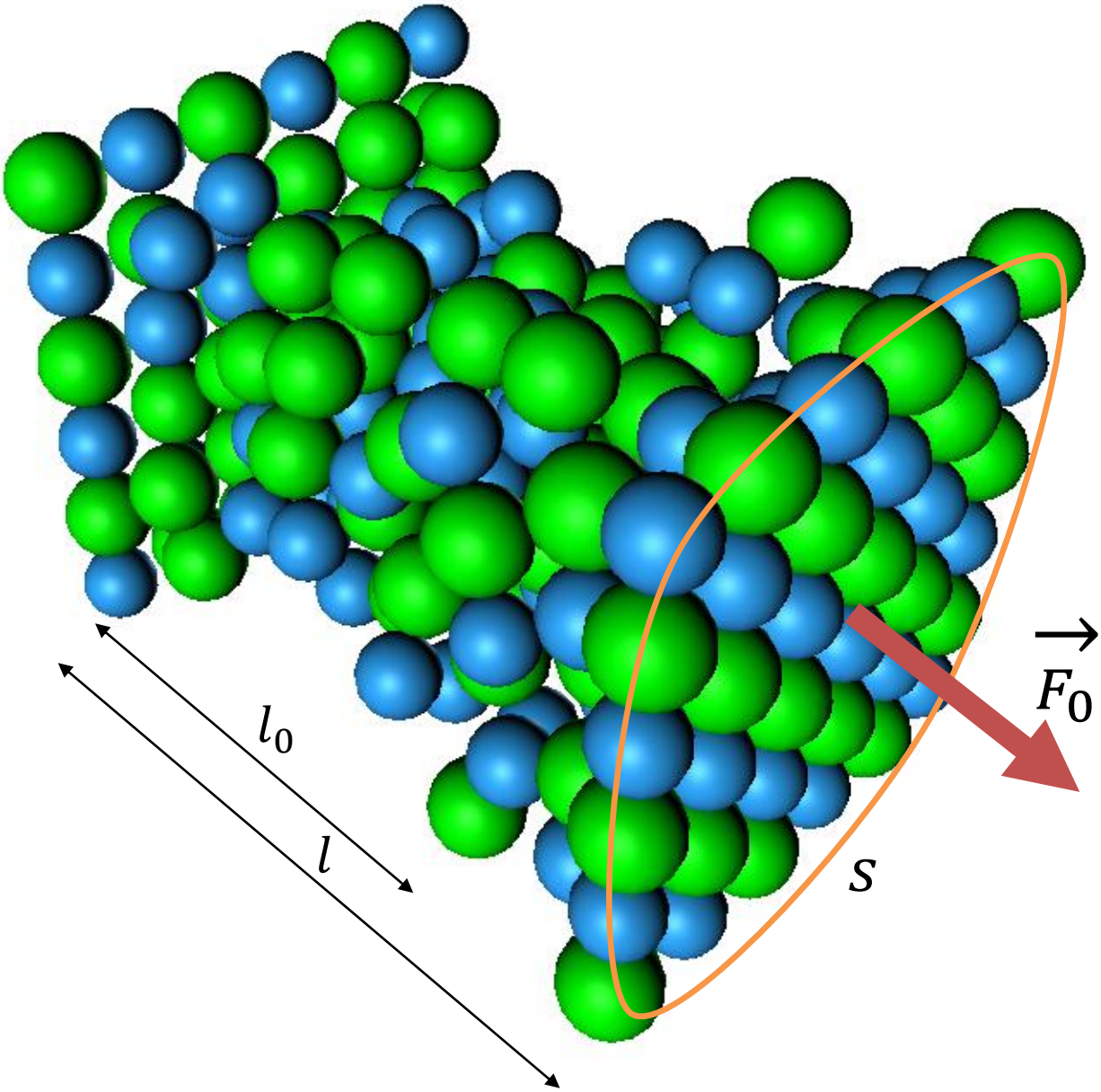

Рисунок 6— модель исследования.

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Данный раздел посвящён поэтапному изучению теоретической информации с целью составления алгоритма, приводящего к результатам исследования выпускной квалификационной работы.

Раздел делится на две части: теоретическую и практическую.

Первая часть — теоретическая часть — освещает метод молекулярной динамики наряду с различными вариантами расчёта сил между атомов вещества и вариантами интегрирования уравнений. То есть, разбираем по этапам, что из себя представляет метод молекулярной динамики, как и для чего его применяют. Повествуется о видах межатомного взаимодействия, которые описываются потенциалом, в основном, зависящем от расстояния между атомов. Выводится оптимальный способ интегрирования уравнений движения, совершенней конечных разностей в виду неустойчивости подобной схемы. В итоге выводится подробный алгоритм, приводящий от начальных условий к конечному результату, на основе которого пишется программа, в виду неспособности человека к столь многоразовым трудоёмким вычислениям.

Вторая часть — практическая часть — содержит промежуточные и конечные результаты программы, написанной на основе алгоритма в теоретической части для различного количества атомов вещества. Современные вычислительные мощности компьютера автора позволяют исследовать до тысячи частиц на более-менее приличной скорости вычислений. Поэтому, результаты получены для кубического твёрдого тела со стороной кратной двум атомам из-за подобного строения кристаллической решётки материала, для которого были выполнены расчеты.

Код программы приведён в приложении и состоит из совокупности трёх веб-ориентированных языков программирования JavaScript, HTML, CSS. Программные коды используемых библиотек не приведены, но их не составит труда найти в интернете, чтобы воспользоваться программой.

1. ТЕОРИТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Данная глава посвящена поэтапному изучению литературы с целью составления конечного алгоритма для получения результатов исследования.

1.1. МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Одним из «прогнозирующих» методов, реализуемых на компьютере, является метод молекулярной динамики (метод МД). Его широко применяют в физике и химии для моделирования структуры и её изменений, например, для органических молекул: белков[1], ДНК[2] и жидких кристаллов[3]. С помощью метода МД можно проследить динамику молекулярных систем. Метод позволяет моделировать твёрдые, жидкие и газообразные вещества с различными начальными условиями (Рисунок 7).

(Комолкин А.В., 2004)

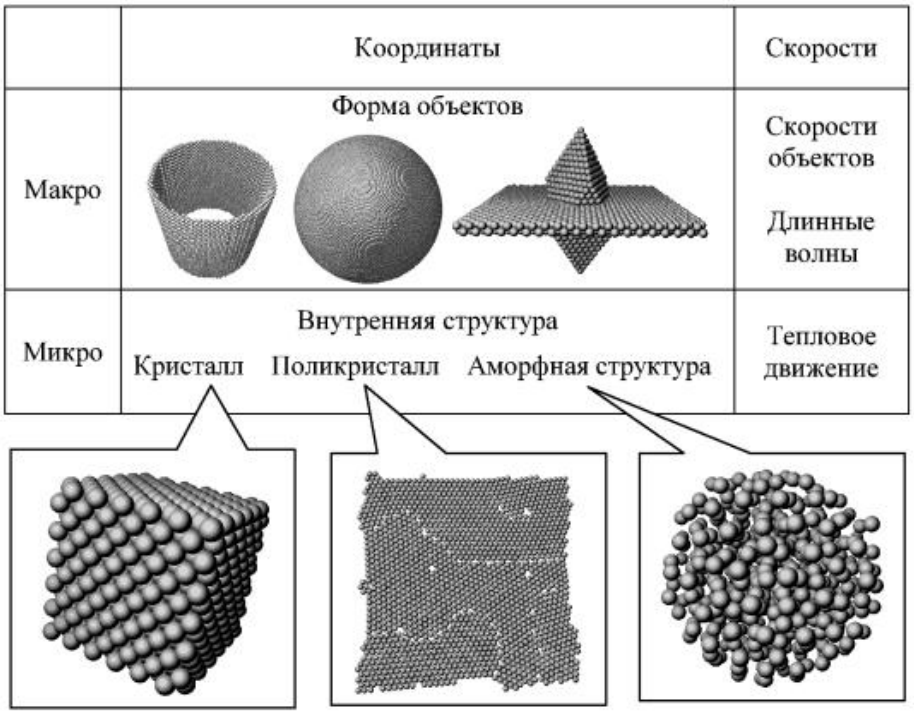

Рисунок 7— виды начальных условий.

[1] высокомолекулярные органические вещества, состоящие из альфа-аминокислот, соединённых в цепочку пептидной связью.
[2] макромолекула (одна из трёх основных, две другие — РНК и белки), обеспечивающая хранение, передачу из поколения в поколение и реализацию генетической программы развития и функционирования живых организмов.
[3] это фазовое состояние, в которое переходят некоторые вещества при определенных условиях.

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

1. Для описания движения атомов применяют классическую механику, получая уравнение движения.

(Вихрев В.В., 2007)

$$m_i\ddot{\vec{r}_i} = \sum_{j=1}^{N}\vec{F}(r_{ij}), \qquad (4)$$

где $\vec{F}$ −сила, действующая на -йатом со стороны j-го[Н];

r_{ij} −расстояние между i-м и j-м атомами[м];

m_i −масса -го атома[кг];

$\ddot{\vec{r}_i}$, −ускорение -го атома[$\frac{м}{с^2}$].

(Товбин Ю.К., 1996)

2. Силы межатомного взаимодействия можно представить через потенциальные силы.

$$\vec{F}(r_{ij}) = \frac{dU(r_{ij})}{\vec{d}r_{ij}} = \frac{dU(r_{ij})}{dr_{ij}} \cdot \frac{\overrightarrow{r_{ij}}}{r_{ij}}, \qquad (5)$$

где $\vec{F}$ −сила, действующая на -йатом со стороны j-го[Н];

r_{ij} −расстояние между i-м и j-м атомами[м];

U −потенциал, описывающий взаимодействие атомов[Дж];

$\overrightarrow{r_{ij}}$ −вектор между координатами -го и j-го атомами[м].

(Komolkin A.V., 1994)

3. Знание траекторий движения частиц системы с высокой точностью на больших промежутках времени не является необходимым для получения результатов макроскопического характера.

(Романович Б.В., 2015)

4. Наборы значений, получаемые в ходе расчетов, распределены в соответствии с некоторой функцией, описывающей эти зависимости.

(Бродская В.А., 1999)

ОГРАНИЧЕНИЯ МЕТОДА

1. Метод МД можно применить, если длина волны Де Бройля атома намного меньше, чем расстояние между атомов.
2. Метод МД не применим, если система состоит из лёгких атомов.
3. Метод МД предполагает, что время, на котором рассматривается поведение система больше, чем время релаксации физических величин, используемых в системе.

1.2. МЕЖАТОМНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Межатомное взаимодействие — это электромагнитное взаимодействие электронов и ядра[1] одного атома с электронами[2] и ядром другого атома. Взаимодействие между атомов зависит от расстояния между атомами и электронных оболочек (Рисунок 8) атомов. Мерой[3] межатомного взаимодействия является энергия взаимодействия атомов. Энергия взаимодействия атомов лежит в широком диапазоне и обычно описывается потенциалами.

(Белащенко К.Д., 2001)

Среди множества различных потенциалов было решено взять самый простой и популярный, в виду отсутствия опыта в подобном моделировании. Выбор был сделан в пользу потенциала Леннарда-Джонса.

(Харрисон У., 1972)

---

[1] шарообразная сердцевина.
[2] стабильная, отрицательно заряженная стабильная, отрицательно заряженная элементарная частица элементарная частица.
[3] средство измерений в виде какого-либо тела, вещества или устройства, предназначенное для воспроизведения и хранения физической величины одного или нескольких заданных размеров, значения которых выражены в установленных единицах и известны с необходимой точностью.

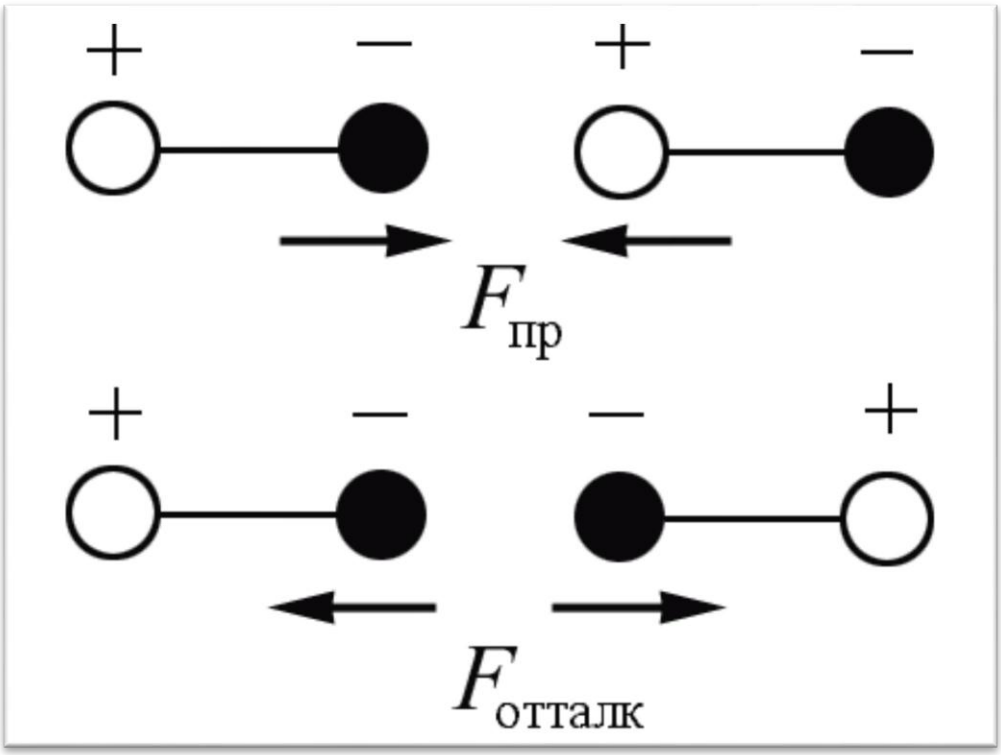

Рисунок 8— взаимодействие молекул.

ПОТЕНЦИАЛ ЛЕННАРДА-ДЖОНСА

Это простая модель парного взаимодействия неполярных молекул, описывающая зависимость энергии взаимодействия двух частиц от расстояния между ними. Зависимость достаточно реалистично передаёт свойства реального взаимодействия сферических неполярных[1] молекул и поэтому широко используется в расчётах и при компьютерной визуализации. Потенциал был предложен Леннард-Джонсом в 1924 году. (Lennard-Jones, 1924)

$$U(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right], \qquad (6)$$

где U −потенциал взаимодействия[Дж];

r −расстояние между частицами[м];

ε −глубина потенциальной ямы[Дж];

σ −расстояние, при котором потенциал обнуляется[м].

(Фёдоров А.С., 2006)

[1] соединения, молекулы которых не обладают электрическим дипольным моментом

ХАРАКТЕРНЫЙ ВИД ПОТЕНЦИАЛА

График зависимости потенциала от расстояния показан ниже (Рисунок 9). Его минимальное значение лежит в точке $r_{min} = \sigma\sqrt[6]{2}$. Кратко говоря, график нам демонстрирует, что на малых расстояниях частицы отталкиваются, а на больших притягиваются.

(Васильева И.А., 2004)

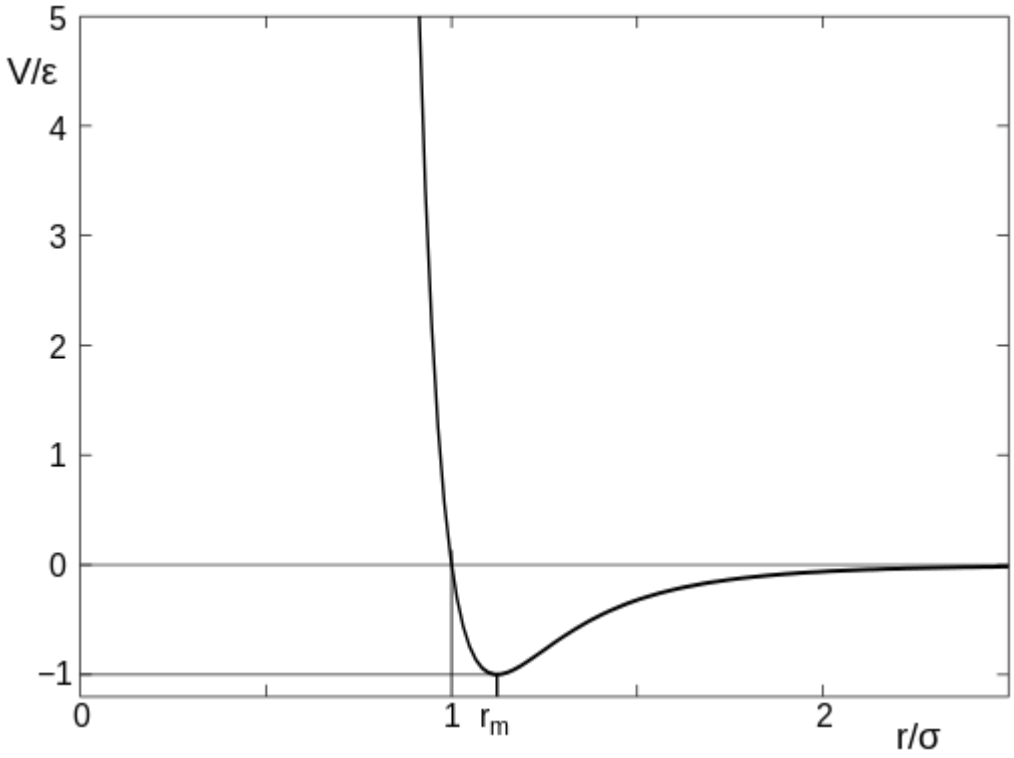

Рисунок 9— характерный вид потенциала.

АЛЬТЕРНАТИВНАЯ ФОРМА ЗАПИСИ

Для программирования первоначальная форма записи потенциала не приемлема, поэтому воспользуемся альтернативной формулой. (Lennard-Jones, 1924)

$$U(r) = \varepsilon\left[\left(\frac{r_{min}}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{r_{min}}{r}\right)^{6}\right], \qquad (7)$$

где U −потенциал взаимодействия[Дж];

r −расстояние между частицами[м];

ε −глубина потенциальной ямы [Дж];

r_{min} −точка минимума потенциала[м].

. (Hoover W.G., 1998)

ГРАНИЦЫ ПРИМЕНЕНИЯ

Потенциал можно использовать при моделировании жидкостей и твердых тел. Однако при очень больших плотностях взаимодействие частиц перестаёт быть парным. Поэтому приходится учитывать ещё и тройные взаимодействия, что приводит к увеличению количества вычислений в несколько раз, поэтому обычно используют некий парный потенциал с отличимыми значениями ε и σ.

(Teller B.M., 1943)

1.3. ИНТЕГРИРОВАНИЕ ВЕРЛЕ

Это метод, который используется для интегрирования уравнений движения материальной точки. Чаще всего его применяют в методе молекулярной динамики и компьютерных играх. Алгоритм получил своё название в честь Лу Верле после публикации в 1967 году.

(Фёдоров А.С., 2006)

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Основная суть алгоритма состоит в том, что новые положения частиц можно найти, зная их текущие и предыдущие положения, то есть без использования скоростей или разностных схем, которые часто неустойчивые. В виду этого метод получается очень эффективным и не накладывает никаких ограничений.

(СКТ-МФТИ)

ОСНОВНОЙ АЛГОРИТМ

Ещё раз напомним, что алгоритм позволяет вычислить положение точки по прошлому положению и текущему ускорению, без использования скорости

точки (Рисунок 10). Чтобы получить формулу, нужно выполнить следующие операции с положением материальной точки[1].

(Ercolessi, 1997)

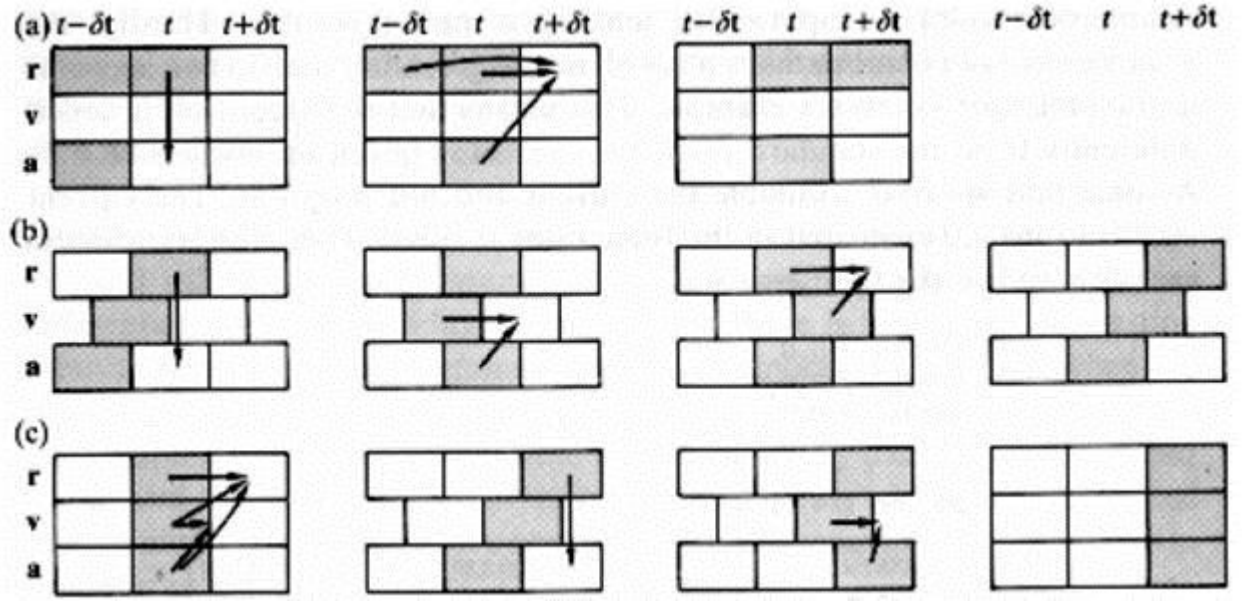

Рисунок 10— интегрирования уравнений движения, алгоритм Верле.

Местоположение точки имеет обозначение $\vec{x}(t)$.Запишем разложение вектора местоположения точки в ряд Тейлора[2] в следующий и предыдущий момент времени: $(t+\Delta t)$ и$(t-\Delta t)$.

(Аксенова Е.В., 2009)

$$\vec{x}(t-\Delta t)=\vec{x}(t)-\vec{v}(t)\Delta t+\frac{\vec{a}(t)\Delta t^2}{2}-\frac{\vec{b}(t)\Delta t^3}{6}+O(\Delta t^4),\ \ (8)$$

$$\vec{x}(t+\Delta t)=\vec{x}(t)+\vec{v}(t)\Delta t+\frac{\vec{a}(t)\Delta t^2}{2}+\frac{\vec{b}(t)\Delta t^3}{6}+O(\Delta t^4),\ \ (9)$$

где $\vec{x}(t-\Delta t)$ −предыдущее положение точки[м];

$\vec{x}(t+\Delta t)$ −следующее положение точки[м];

$\vec{x}(t)$ −текущее положение точки[м];

$\vec{v}(t)$ −текущая скорость точки[$\frac{\text{м}}{\text{с}}$];

$\vec{a}(t)$ −текущее ускорение точки[$\frac{\text{м}}{\text{с}^2}$];

$\vec{b}(t)$ −текущий рывок[3] точки[$\frac{\text{м}}{\text{с}^3}$];

---

[1] простейшая физическая модель в механике — обладающее массой тело, размерами, формой, вращением и внутренней структурой которого можно пренебречь в условиях исследуемой задачи.
[2] разложение функции в бесконечную сумму степенных функций.
[3] векторная физическая величина, характеризующая темп (скорость) изменения ускорения тела.

$O(\Delta t^4)$ −малые приращения функции[м];

t −текущее время системы[с];

Δt −шаг времени[с].

Сложив уравнения, получим:

$$\vec{x}(t-\Delta t)+\vec{x}(t+\Delta t)=2\vec{x}(t)+\vec{a}(t)\Delta t^2+O(\Delta t^4), \qquad (10)$$

Выразим то, что нужно найти — следующее положение точки, получим:

$$\vec{x}(t+\Delta t)=2\vec{x}(t)-\vec{x}(t-\Delta t)+\vec{a}(t)\Delta t^2+O(\Delta t^4), \qquad (11)$$

где $\vec{x}(t-\Delta t)$ −предыдущее положение точки[м];

$\vec{x}(t+\Delta t)$ −следующее положение точки[м];

$\vec{x}(t)$ −текущее положение точки[м];

$\vec{a}(t)$ −текущее ускорение точки[$\frac{\text{м}}{\text{с}^2}$];

$O(\Delta t^4)$ −малые приращения функции[м];

t −текущее время системы[с];

Δt −шаг времени[с].

В итоге получили уравнение, которое способно вычислить будущее положение точки, без знания скорости, лишь основываясь на предыдущем положении и ускорении самой точки.

(Забродин А.В., 2000)

1.4. УПРУГИЕ СВОЙСТВА

Это набор свойств твёрдых материалов, которые способны возвращаться в начальную форму при упругой деформации. Но, чтобы деформировать твёрдое тело, надо приложить силу. При этом, если силу убрать, материал должен возвратиться к исходному состоянию. Следует понимать, что это идеальный случай, а в реальности при любой самой незначительной деформации, материал не вернётся к первоначальному состоянию.

(Капитонов А.М., 2015)

В основном упругость измеряют двумя параметрами: модуль упругости[1] и предел упругости[2]. В рамках данной работы будет исследован материал с помощью первого параметра, второй будет косвенно затронут. То есть, будет обнаружено при насколько малых деформациях, материал сможет вернуться к исходному состоянию, подтверждая закон Гука[3].

(Димитриенко Ю.И., 2009)

МОДУЛЬ УПРУГОСТИ

Это название нескольких физических величин, которые характеризуют способность твёрдого тела упруго деформироваться при действии на него некоторой силы.

(Прохоров А.М., 1974)

В общем случае модуль упругости равен производной зависимости напряжения от деформации и выглядит (Рисунок 11— виды деформаций.Рисунок 11):

$$E \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d\sigma}{d\varepsilon}, \qquad (12)$$

где E −модуль упругости [Па];

σ −напряжение, вызываемое в образце действующей силой[Па];

ε −упругая деформация образца[%].

[1]модуль упругости показывает механическое напряжение (количество силы на единицу площади), которое необходимо приложить для достижения определённого уровня деформации.

[2] максимальное напряжение, вне которого материал больше не ведёт себя как упругий, а будет иметь место деформация материала.

[3] утверждение, согласно которому деформация, возникающая в упругом теле (пружине, стержне, консоли, балке и т. п.), пропорциональна приложенной к этому телу силе.

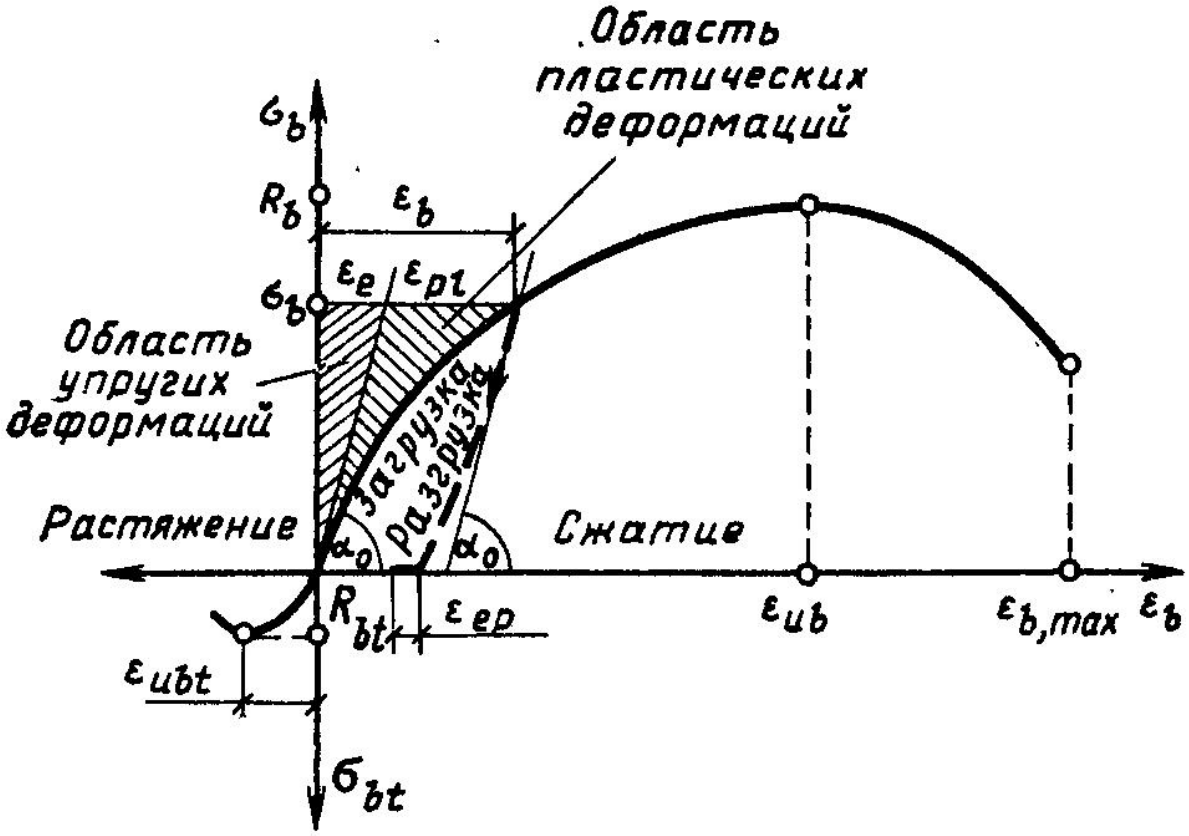

Рисунок 11— виды деформаций.

МЕХАНИЧЕСКОЕ НАПРЯЖЕНИЕ

Это значение внутренних сил, возникающих в теле при деформации под влиянием различных факторов. Механическое напряжение в точке тела определяется как отношение внутренней силы к единице площади приложения данной силы. Напряжения являются результатом взаимодействия атомов тела. Внешние силы стремятся изменить взаимное расположение атомов, а возникающие при этом напряжения препятствуют перемещению атомов внутри тела.

(Капитонов А.М., 2015)

Формула представляет следующий вид:

$$Q = \frac{F}{S}, \qquad (13)$$

гдеQ −механическое напряжение [Па];

F −сила, возникающая в теле при деформации[Н];

S −площадь поверхности, к торой приложена сила [м^2].

УПРУГАЯ ДЕФОРМАЦИЯ

Деформация, исчезающая после прекращения действий на тело внешних сил. При этом тело в идеальном случае в последствии принимает первоначальные размеры и форму. Упругая деформация равна отношению изменения размера образца после деформации к его первоначальному размеру.

Уравнение выглядит:

$$\varepsilon = \frac{l - l_0}{l_0}, \qquad (14)$$

где ε −упругая деформация[%];

l −размеры тела после приложения внешних сил[м, м^2, м^3];

l_0 −размеры тела без приложения внешних сил[м, м^2, м^3].

1.5. АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ

Данная глава посвящена пошаговому алгоритму, реализованному в программе с целью получения результатов. Данная задача заключается в численном моделировании свойств упругости и нахождении их зависимости на примере сплава из двух и более металлов. Причём, оговаривается, что сплав будет закреплён с одной стороны, а с другой к нему будет приложена сила.

НАЧАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ

Первоначально начальные условия задавались размерами, но это вызывало много проблем, ведь приходилось считать количество молекул через число Авогадро, встречающееся в простейших химических соотношениях. Из-за огромного размера этого числа, точность вычислений ограничивалась средствами программирования, помимо этого пользователь вводил себя в заблуждение, так как не знал какие размеры задавать. Атомы очень маленькие, поэтому задав даже небольшой размер, можно было загрузить компьютер на полную и он бы просто не справился с задачей. В итоге решено было

исследовать на материале кубической формы, который задаётся количеством молекул, что намного привычный для метода молекулярной динамики.

(Коровин Н.В., 1998)

Для начала зададим количество атомов нашего твёрдого тела, причём не общее количество, а количество на стороне куба (только внутри программы), чтобы вновь исключить возможность пользователю задавать неподходящие начальные условия.

Помимо этого зададим радиусы атомов и их плотности. В данном случае эти значения известны первоначально и будут приведены конкретно в практической части.

$$\langle N|R_i|\rho_i,\rho\rangle \qquad (15)$$

где $N -$ количество атомов в системе[шт];

$R_i -$ радиусы атомов, входящих в состав тела [м];

$\rho_i -$ плотности металлов, входящих в состав тела $[\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}]$.

ВЫЧИСЛЯЕМ НАЧАЛЬНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

В данном случае нужно было взять интерметаллид. Был взят двухсоставной алюминид никеля (AlNi), который привёл в качестве примера научный руководитель. Далее алгоритм будет описан, опираясь на два вещества, для трёх и более расписывается аналогично. Кстати, что же это за интерметаллид, как он выглядит, отдельные вещества и сам сплав (Рисунок 12, Рисунок 13, Рисунок 14).

Рисунок 12— никель.

Рисунок 13— алюминий.

Рисунок 14— сплав алюминия и никеля в виде порошка.

Итак, данный сплав образуется при соединении одинакового количества молей вещества (исходя из уравнения реакции), поэтому количество молекул каждого вещества будет равное.

$$\langle Ni + Al \xrightarrow{1638°C} NiAl \rangle \rightarrow \begin{cases} N_{Ni} + N_{Al} = N \\ N_{Ni} = N_{Al} \end{cases} \qquad (16)$$

где Ni – никель, металл[–];

Al – алюминий, металл[–];

$NiAl$ – алюминид никеля или алюминийникель[–];

N_{Ni} – количество атомов никеля в системе[шт];

N_{Al} – количество атомов алюминия в системе[шт];

N –общее количество атомов в системе[шт].

Итак, данные атомы образуют кристаллическую решётку, но какую? Для этого углубимся в теорию, откуда выяснится, что алюминийникель образует кристаллы кубической сингонии[1].

(Никольский Б.П., 1966)

В кубической сингонии существует три вида решёток Браве[2]: примитивная, объёмно-центрированная и гранецентрированная (Рисунок 15, Рисунок 16, Рисунок 17). Воспользуемся самой простой из них, она единственная подходит под данный сплав, ведь эта молекула состоит из одного атома алюминия и одного атома никеля, а значит данные атомы соединены

[1] одна из семи сингоний.
[2] понятие для характеристики кристаллической решётки относительно сдвигов.

разноименно внутри элементарной ячейки[1]. Подобное заполнение возможно только в ячейке вида простой кубической сингонии (Рисунок 15). Хотя понятно, что рёбра могут находиться не под прямым углом, однако остановимся на простейшем случае, ведь предполагается, что данный сплав это ровный кусок кубической формы.

(Кузнецов М.В., 2010)

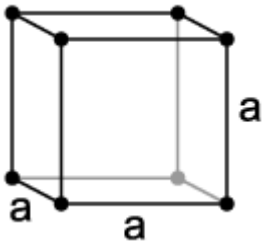

Рисунок 15—простая решётка Браве.

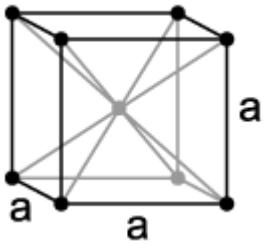

Рисунок 16 — объёмно-центрированная решётка Браве.

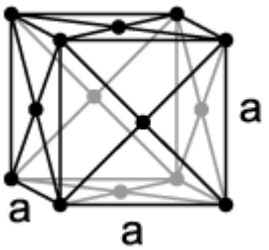

Рисунок 17 — гранецентрированная решётка Браве.

Теперь найдём объём данного вещества и за счёт элементарных математических и физических соотношений получим расстояние между атомами. Кстати, классификацию элементарных частиц вещества представлю ниже (Рисунок 18).

И разумеется, атомы[2] имеют шарообразную форму, так как состоят из ядра[3]. А значит объём атома можно найти, как объём сферы. Из элементарной физики и математики получим следующие соотношения.

$$\begin{cases} \rho_{Al} = \frac{m_{Al}}{V_{Al}} \\ \rho_{Ni} = \frac{m_{Ni}}{V_{Ni}} \end{cases} \Lambda \begin{cases} V_{Al}^{i} = \frac{4}{3}\pi R_{Al}^{3} \\ V_{Ni}^{i} = \frac{4}{3}\pi R_{Al}^{3} \end{cases} \Lambda \begin{cases} V_{Al} = \sum_{i=1}^{N_{Al}} V_{Al}^{i} \\ V_{Ni} = \sum_{i=1}^{N_{Ni}} V_{Ni}^{i} \end{cases} \qquad (17)$$

где π −число пи, $\pi = 3{,}1415926535 \ldots [\frac{кг}{м^3}]$;

ρ_{Al} − плотность алюминия, $\rho_{Al} = 2700[\frac{кг}{м^3}]$;

[1] в геометрии, физике твёрдого тела и минералогии, в частности при обсуждении кристаллической решётки, минимальная ячейка, отвечающая единичной решёточной точке структуры с трансляционной симметрией в 2D, 3D или других размерностях.

[2] частица вещества микроскопических размеров и массы, наименьшая часть химического элемента, являющаяся носителем его свойств.

[3] шарообразная сердцевина.

ρ_{Ni} – плотность никеля $\rho_{Ni} = 8900[\frac{кг}{м^3}]$;

m_{Al} – масса алюминия [кг];

m_{Ni} – масса никеля [кг];

V_{Al}^{i} – объём атома алюминия [м^3];

V_{Ni}^{i} – объём атома никеля [м^3];

R_{Al} – радиус атома алюминия, $R_{Al} = 143 \cdot 10^{-12}$[м];

R_{Ni} – радиус атома никеля, $R_{Ni} = 124 \cdot 10^{-12}$[м];

V_{Al} – объём алюминия [м^3];

V_{Ni} – объём никеля [м^3];

N_{Ni} – количество атомов никеля в системе[шт];

N_{Al} – количество атомов алюминия в системе[шт].

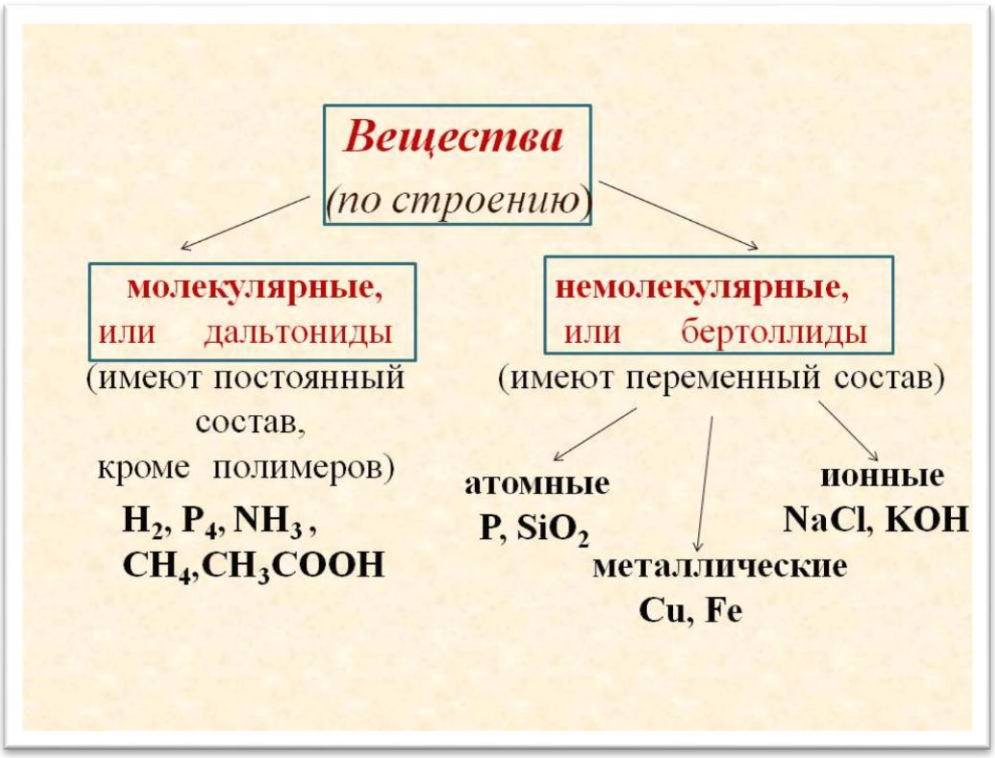

Рисунок 18 — краткий обзор различных семейств элементарных и составных частиц, и теории, описывающие их взаимодействия.

Отсюда можем получить объём твёрдого тела.

$$V = N_{Al}V_{Al}^{i} + N_{Ni}V_{Ni}^{i} = \frac{N}{2} \cdot \frac{4}{3}\pi R_{Al}^{3} + \frac{N}{2} \cdot \frac{4}{3}\pi R_{Ni}^{3} = \frac{2}{3}\pi N\left(R_{Al}^{3} + R_{Ni}^{3}\right) \qquad (18)$$

где π – число пи, π = 3,1415926535 … $[\frac{кг}{м^3}]$;

R_{Al} – радиус атома алюминия, $R_{Al} = 143 \cdot 10^{-12}$[м];

R_{Ni} – радиус атома никеля, $R_{Ni} = 124 \cdot 10^{-12}$[м];

N_{Ni} – количество атомов никеля в системе[шт];

N_{Al} – количество атомов алюминия в системе[шт];

V_{Al}^{i} – объём атома алюминия [м^3];

V_{Ni}^{i} – объём атома никеля [м^3];

V – объём твёрдого тела [м^3].

Зная объём, можно найти сторону куба. А ведь в данном случае кристаллическая решетка кубическая, значит любая сторона куба имеет одинаковое количество атомов. Зная количество частиц на стороне, не сложно получить расстояние между ними равное количеству отрезков, на которые делят наши атомы сторону куба. Если две частицы, то один отрезок между ними, если три — то два отрезка и так далее. То есть, N частиц делят сторону куба на $N - 1$отрезков. Но так же стоит учесть, что данные частицы, это не точки, а шарики, которые имеют радиусы, а значит данная сторона куба на самом деле будет больше на значение, равное сумме радиусов двух атомов, находящихся на концах. Учтём это и уменьшим значение стороны на радиусы соответствующих частиц, стоящих на концах.

$$\begin{cases} V = L_0^3,\ N = n^3 \\ l_0 = L_0 - (R_{Al} + R_{Ni}) = \sqrt[3]{V} - (R_{Al} + R_{Ni}) \\ r_0 = \dfrac{l_0}{n-1} = \dfrac{\sqrt[3]{\frac{2}{3}\pi N\left(R_{Al}^3 + R_{Ni}^3\right)} - (R_{Al} + R_{Ni})}{\sqrt[3]{N} - 1} \end{cases} \qquad (19)$$

где π – число пи, π = 3,1415926535 … [$\frac{кг}{м^3}$];

L_0 – длина стороны твёрдого тела [м];

n – количество частиц вдоль стороны твёрдого тела[шт];

l_0 –расстояние между центрами крайних атомов[м];

r_0 –расстояние между соседними частицами[м];

R_{Al} – радиус атома алюминия, $R_{Al} = 143 \cdot 10^{-12}$[м];

R_{Ni} – радиус атома никеля, $R_{Ni} = 124 \cdot 10^{-12}$[м];

V – объём твёрдого тела [м^3];

N −общее количество атомов в системе[шт].

Теперь получаем координаты атомов, зная их количество вдоль каждой стороны и расстояние.

$$\begin{cases} x_p = r_0 i \\ y_p = r_0 j \\ z_p = r_0 k \end{cases} \rightarrow \begin{cases} p = i + jn + kn^2 \\ \overrightarrow{r_p} = \left(x_p;\ y_p;\ z_p\right) \\ R_0 = \{\overrightarrow{r_0}; \overrightarrow{r_1}; \dots; \overrightarrow{r_p}\} \end{cases} \qquad (20)$$

где p −номер частицы,$p = \overline{0, N-1}$ [−];

N −общее количество атомов в системе[шт];

$x_p,\ y_p,\ z_p$ −координаты pчастицыпо осям[м];

$i,\ j,\ k$ −локальные номера частиц, $i,\ j,\ k = \overline{0, n-1}$ [−];

n − количество частиц вдоль стороны твёрдого тела [шт];

r_0 −первоначальное расстояние между соседними частицами[м];

r_p − координаты pчастицы[м; м; м];

R_0 − первоначальный набор координат всех частиц[−].

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МД

С начальными условиями определились, теперь можно перейти к основному алгоритму, который поможет найти ускорения частиц. Кстати, предполагается, что начальная скорость кристалла равна нулю, но ничего не мешает считать иначе и задать её на шаге интегрирования уравнений движений.

Итак, по второму закону Ньютона можно найти ускорение материальной точки, зная силу, однако в данном случае сила задаётся через потенциал в равна производной потенциала по координате. Найдём нашу силу для каждой частицы по потенциалу Леннарда-Джонса.

(Голубев Ю.Ф., 2000)

$$\begin{cases} m_i\ddot{\vec{r_i}} = \sum_{j=1}^{N}\vec{F}(r_{ij}) \\ \vec{F}(r_{ij})=\frac{dU(r_{ij})}{\vec{d}r_{ij}}=\frac{dU(r_{ij})}{dr_{ij}}\cdot\frac{\overrightarrow{r_{ij}}}{r_{ij}} \\ U(r_{ij})=\varepsilon\left[\left(\frac{r_{min}}{r_{ij}}\right)^{12}-2\left(\frac{r_{min}}{r_{ij}}\right)^{6}\right] \\ r_{ij}=\sqrt{(x_j-x_i)^2+(y_j-y_i)^2+(z_j-z_i)^2} \\ \overrightarrow{r_{ij}}=(x_j-x_i\,;\,y_j-y_i\,;\,y_j-y_i) \end{cases} \qquad (21)$$

где U −потенциал взаимодействия [Дж];

ε −глубина потенциальной ямы, подбирается [Дж];

r_{min} −точка минимума потенциала, $r_{min} = r_0$[м];

r_0 − первоначальное расстояние между соседними частицами [м];

$\vec{F}$ −сила, действующая на -йатом со стороны j-го [Н];

r_{ij} −расстояние между i-м и j-м атомами [м];

m_i −масса -го атома [кг];

$\ddot{\vec{r_i}}$, −ускорение -го атома [$\frac{м}{с^2}$];

x_p, y_p, z_p − координаты pчастицыпо осям [м];

$\overrightarrow{r_{ij}}$ −вектор между координатами -го и j-го атомами [м].

Найдём производную данного потенциала. Сначала был проверен метод конечных разностей, но данный метод оказался не очень устойчивым, поэтому в итоге была найдена производная явной функции с помощью математического сервиса (WolframAlpha). Затем выразили ускорение для каждой частицы.

$$\begin{cases} \frac{dU(r_{ij})}{dr_{ij}} = -\varepsilon\frac{12r_{min}^6(r_{min}^6-r_{ij})}{{r_{ij}}^{13}} \\ \overrightarrow{a_i} = \ddot{\vec{r_i}} = \frac{\sum_{j=1}^{N}\vec{F}(r_{ij})}{m_i} = -12\varepsilon r_{min}^6\frac{\sum_{j=1}^{N}\frac{(r_{min}^6-r_{ij})}{{r_{ij}}^{13}}}{m_i}\cdot\frac{\overrightarrow{r_{ij}}}{r_{ij}} \end{cases} \qquad (22)$$

где U −потенциал взаимодействия [Дж];

ε −глубина потенциальной ямы, подбирается [Дж];

r_{min} −точка минимума потенциала, $r_{min} = r_0$[м];

r_0 − первоначальное расстояние между соседними частицами [м];

$\vec{F}$ −сила, действующая на -йатом со стороны j-го [Н];

r_{ij} −расстояние между i-м и j-м атомами [м];

m_i −масса -го атома [кг];

$\overrightarrow{a_i}$, $\ddot{\vec{r}}_i$, −ускорение -го атома [$\frac{м}{с^2}$];

$\overrightarrow{r_{ij}}$ −вектор между координатами -го и j-го атомами [м].

Несложно заметить, что производная потенциала равна нулю или не существует в двух точках: $r_{ij} = r_min$и $r_{ij} = 0$. Именно поэтому атомы колеблются внутри этого промежутка. Если расстояние межу частицами будет нулевым, то это будет одна частица, что противоречит строению вещества, поэтому зададим точку минимума, равную первоначальному расстоянию между частицами, чтобы атомы нашего тела колебались внутри своего объёма.

УЧЁТ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ

Граничных условия в задаче два, это закрепление левой стенки и приложение силы к правой. С первым вопросом разберёмся в этом пункте, со вторым — в следующем.

Итак, нужно приложить силу к правой стенке. Зачем? Чтобы деформировать тело и посмотреть на сколько его можно растянуть, при этом идеально, чтобы тело вернулось в исходное состояние если прекратить прикладывать силу (абсолютная упругость).

Как известно, если не прикладывать силу, то атомы будут колебаться в одинаковых приделах, но при этом их положение всегда не устойчиво и рано или поздно вещество начнёт разрушаться, то есть терять атом за атомом. Подобное явление вызывает неустойчивость при программировании, особенно при больших временных шагах.

(Двойрин Г.Б., 2008)

Вновь вспомним про уже найденное ускорение частиц. Так, как мы прикладываем силу, то можем найти ускорение, которое придаёт эта сила. А

значит общее ускорение будет равно сумме ускорений, ведь масса одной и той же частицы одинаковая или просто выразим через второй закон Ньютона.

$$\begin{cases} \sum \overrightarrow{F^p} = m_p \overrightarrow{a_p} \\ \sum \overrightarrow{F^p} = \sum \overrightarrow{F_U^q} + \frac{\overrightarrow{F_0}}{n^2} \end{cases} \rightarrow \overrightarrow{a_p} = \ddot{\overrightarrow{r_p}} = \frac{\sum \overrightarrow{F^p}}{m_p} = \frac{\sum \overrightarrow{F_U^q} + \frac{\overrightarrow{F_0}}{n^2}}{m_p} \qquad (23)$$

гдеp −номер атома правой стенки, $p = i + jn + kn^2$[−];

i − локальный номер частиц на правой стенке, $i = n - 1$ [−];

$j,\ k$ − локальные номера частиц, $j,\ k = \overline{0, n-1}$ [−];

n − количество частиц вдоль стороны твёрдого тела[−];

$\overrightarrow{F^p}$ −сила действующая на частицу[Н];

$\overrightarrow{F_0}$ −сила, приложенная к правой стенке [Н];

$\overrightarrow{F_U^j}$ −сила, действующая на -йатом со стороны q-го [Н];

m_p −масса -го атома [кг];

$\overrightarrow{a_p},\ \ddot{\overrightarrow{r_p}},$ −ускорение -го атома [$\frac{м}{с^2}$].

На первый взгляд, можно не понять нумерацию, но именно так в программировании привязывают частицы. В данном случае нумерация атомов по оси xидёт поi. Данная ость была взята как принято, слева направо и соответствует ширине материала. В итоге получим, что начало оси, это атомы на левой стенке, взято за нуль, конец — на правой и взят за $n - 1$.

Кратко, выше были добавлены внешние силы на атомы правой стенки и получили полные ускорения для всех частиц системы. При этом, внешняя сила была равномерно распределена по атомам правой стенки.

РАСЧЁТ НОВЫХ КООРДИНАТ

Приближаемся к завершающей части алгоритма, но перед этим нужно закрепить правую стенку. Сделаем эту реализацию проще всего — не будем просто вычислять новые координаты атомов для стенки, пусть они будут статичными.

Итак, чтобы вычислить координаты, воспользуемся уравнением движения разложенным в ряд Тейлора.

(Сукачева Т.Г., 2008)

$$\vec{r}(t+\Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\vec{a}(t)\Delta t^2}{2} + \frac{\vec{b}(t)\Delta t^3}{6} + O(\Delta t^4) \quad (24)$$

где $\vec{r}(t+\Delta t)$ −следующее положение точки [м];

$\vec{r}(t)$ −текущее положение точки [м];

$\vec{v}(t)$ −текущая скорость точки, $\vec{v}(t) = 0[\frac{\text{м}}{\text{с}}]$;

$\vec{a}(t)$ −текущее ускорение точки$[\frac{\text{м}}{\text{с}^2}]$;

$\vec{b}(t)$ −текущий рывок[1] точки, $\vec{b}(t) = 0[\frac{\text{м}}{\text{с}^3}]$;

$O(\Delta t^4)$ −малые приращения функции, $O(\Delta t^4) = 0$[м];

t −текущее время системы[с];

Δt −шаг времени [с].

Причём считая, что начальные скорости равны нулю. Ускорения уже найдены, а более меньшие приращения (вектор рывка и далее) возьмём за нуль, ведь только начинаем вычислять первую итерацию.

$$\vec{r}_p(t+\Delta t) = \overrightarrow{r_p}(t) + \frac{\vec{a}_p(t)\Delta t^2}{2} \quad (25)$$

где p −номер атомов, кроме левой стенки, $p = i + jn + kn^2$[−];

i − локальный номер частиц, кроме левой стенки, $i = \overline{1, n-1}$ [−];

$j,\ k$ − локальные номера частиц, $j,\ k = \overline{0, n-1}$ [−];

n − количество частиц вдоль стороны твёрдого тела [шт];

$\overrightarrow{r_p}(t+\Delta t)$ −следующее положение точки [м];

$\overrightarrow{r_p}(t)$ −текущее положение точки [м];

$\overrightarrow{a_p}(t)$ −текущее ускорение точки$[\frac{\text{м}}{\text{с}^2}]$;

t −текущее время системы[с];

Δt −шаг времени [с].

[1] векторная физическая величина, характеризующая темп (скорость) изменения ускорения тела.

В итоге получили новые координаты частицсучётом граничных условий. Вычислений оказалось немного, потому что остальные параметры при начальных условиях равнялись нулю. Но при последующих шагах появится скорость, вектор рывка и другие переменные. Чтобы не тратить вычислительные ресурсы и оптимизировать скорость программы, воспользуемся алгоритмов Верле, описанным ниже.

ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМА ВЕРЛЕ

Итак, известно, что алгоритм Верле позволяет вычислить новые координаты частиц по текущему ускорению и предыдущему положению, как описано выше. Но его недостаток в том, что алгоритм не самостартующий, поэтому приходится использовать другой алгоритм, чтобы получить в первый раз новые положения частиц, что было сделано выше.

(Фёдоров А.С., 2006)

Итак, на данный момент мы знаем текущее ускорение и положение частиц, а также первоначальное положение частиц, значит имеем право применить интегрирование Верле.

$$\begin{cases} \vec{r}_p(t-\Delta t) = \vec{r}_p(t) \\ \overrightarrow{r_p}(t) = \overrightarrow{r_p}(t+\Delta t) \\ \vec{r}_p(t+\Delta t) = 2\vec{r}_p(t) - \overrightarrow{r_p}(t-\Delta t) + \overrightarrow{a_p}(t)\Delta t^2 \end{cases}, \qquad (26)$$

где p −номер атомов, кроме левой стенки, $p = i + jn + kn^2[-]$;

i − локальный номер частиц, кроме левой стенки, $i = \overline{1, n-1}$ $[-]$;

$j,\ k$ − локальные номера частиц, $j,\ k = \overline{0, n-1}$ $[-]$;

n − количество частиц вдоль стороны твёрдого тела [шт];

$\overrightarrow{r_p}(t-\Delta t)$ −предыдущее положение точки[м];

$\overrightarrow{r_p}(t+\Delta t)$ −следующее положение точки [м];

$\overrightarrow{r_p}(t)$ −текущее положение точки [м];

$\vec{a}_p(t)$ −текущее ускорение точки $[\frac{\text{м}}{\text{с}^2}]$;

t −текущее время системы[с];

Δt −шаг времени[с].

В итоге получаем новые координаты частиц раз за разом, вычисляя только ускорение из потенциала для частиц. Данный способ работает быстрей, чем если расписывать скорость через конечные разности, а главное устойчивей, хотя стоит понимать, что уравнения движения это ряд производных, малые значения которых не учитываются, но они конечно могут повлиять на результат и сделать моделирование более близким к реальности.

РАСЧЁТ РЕЗУЛЬТАТОВ

Добрались, наконец, до финишной прямой. Теперь надо рассчитать упругие свойства, а именно: механическое напряжение и деформацию. С первым проблем не возникнет, найдём напряжение равное отношению приложенной силы к площади поверхности действия этой силы.

$$\begin{cases} S = L_0^2 = \sqrt[3]{V^2} = \sqrt[3]{\frac{2}{3}\pi N\left(R_{Al}^3 + R_{Ni}^3\right)}^{\,2} \\ \sigma = \frac{F_0}{S} = \frac{F_0}{\sqrt[3]{\frac{2}{3}\pi N\left(R_{Al}^3 + R_{Ni}^3\right)}^{\,2}} \end{cases} \qquad (27)$$

где π − число пи, $\pi = 3{,}1415926535 \ldots [\frac{кг}{м^3}]$;

L_0 −начальная длина стороны твёрдого тела [м];

R_{Al} − радиус атома алюминия, $R_{Al} = 143 \cdot 10^{-12}$[м];

R_{Ni} − радиус атома никеля, $R_{Ni} = 124 \cdot 10^{-12}$[м];

V − объём твёрдого тела [$м^3$];

N −общее количество атомов в системе[шт];

S −площадь поверхности, к которой приложена сила [$м^2$];

σ −напряжение, вызываемое в образце действующей силой[Па];

F_0 −приложенная сила на одну из сторон твёрдого тела [Н].

Далее нужно определить удлинение тела. Его будем искать, используя расстояние между крайними частицами по оси x, при этом понимая, что оно равно расстоянию между крайними стенками. Ведь координаты с течением

времени меняются, следовательно частицы начинают перемещаться то назад, то вперёд. Будем брать максимальное расстояние, при колебаниях.

Нужно четко понимать, что атомы всегда движутся, а значит дождаться статического состояния системы не получится. Значит, ограничим максимальное время колебаний системы. Спустя несколько колебаний возьмём наибольшее расстояние, точнее длину до которой тело растянется.

Найдём сразу упругую деформацию твёрдого тела при данной силе.

$$\begin{cases} L_0 = \sqrt[3]{V} = \sqrt[3]{\frac{2}{3}\pi N\left(R_{Al}^3 + R_{Ni}^3\right)} \\ l = max_{t\to+\infty}\left|r_p^t - r_q^t\right| = max_{t\to+\infty}\left|x_p^t - x_q^t\right| \\ L = l + (R_{Al} + R_{Ni}) \\ \varepsilon = \frac{L-L_0}{L_0} = \frac{L}{L_0} - 1 = \frac{max_{t\to+\infty}\left|x_p^t - x_q^t\right| + (R_{Al}+R_{Ni})}{\sqrt[3]{\frac{2}{3}\pi N\left(R_{Al}^3+R_{Ni}^3\right)}} - 1 \end{cases}, \qquad (28)$$

где π – число пи, $\pi = 3{,}1415926535 \ldots [\frac{кг}{м^3}]$;

L_0 – начальная длина стороны твёрдого тела [м];

R_{Al} – радиус атома алюминия, $R_{Al} = 143 \cdot 10^{-12}$[м];

R_{Ni} – радиус атома никеля, $R_{Ni} = 124 \cdot 10^{-12}$[м];

V – объём твёрдого тела [$м^3$];

N –общее количество атомов в системе[шт];

l –максимальная расстояние между крайними частицами [м];

L – максимальная длина стороны твёрдого тела[м];

t –время системы[с];

ε –упругая деформация[%];

p –номер атомов правой стенки, $p = i + jn + kn^2$[–];

i – локальный номер частиц, кроме левой стенки, $i = n - 1$ [–];

q –номер атомовлевой стенки, $p = i_2 + jn + kn^2$[–];

i_2 – локальный номер частиц левой стенки, $i_2 = 0$ [–];

$j,\ k$ – локальные номера частиц, $j,\ k = \overline{0, n-1}$ [–];

n – количество частиц вдоль стороны твёрдого тела[–].

Таким образом, получаем значения двух параметров упругости для данного твёрдого тела. Чтобы найти зависимость, надо повторить данный алгоритм для нескольких различных значений сил. В программе установлены ограничения до двадцати повторений (не более) поиска значений параметров упругости. В практической части будут продемонстрированы результаты исследования для различного количества атомов и, возможно, шагов времени.

2. ПРАКТИЧЕСКАЯЧАСТЬ

Данная глава посвящена результатам исследовательской работы. Показаны численные значения параметров упругих свойств и их сравнение на графиках, а так же визуализация состояния системы. Всё сделано максимально наглядно и точно для различного количества частиц.

(Брюс, 2009)

Из-за неточностей могут быть ошибки в единицах измерения, так как было совсем не удобно задавать радиусы таких маленьких размеров (10^{-12}и менее), как и работать с такими числами, ведь у вычислительной техники есть порог точности, который зачастую создаёт погрешность результатов.

(Майкл, 2012)

2.1. НАЧАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ

В данном разделе будут находиться значения начальных условий для системы и их модели в начальный момент времени (Таблица 1, Таблица 2, Таблица 3, Таблица 4, Таблица 5и Рисунок 19,Рисунок 20,Рисунок 21, Рисунок 22, Рисунок 23). Для параметра потенциала ε, возьмём $\varepsilon = 0.001$ [Дж], полученное экспериментальным путём.

ДЛЯ 8-МИ ЧАСТИЦ

Таблица 1— начальные условия для 8-ми частиц.

$\boldsymbol{N}$[шт]	$\boldsymbol{r_o}[10^{-10}$м]	$\boldsymbol{\varepsilon}$[Дж]	$\boldsymbol{S}[10^{-20}$м^2]	$\boldsymbol{L_0}[10^{-10}$м]	$\boldsymbol{dt}$[с]
8	1.656	0.001	18.712	4.326	1

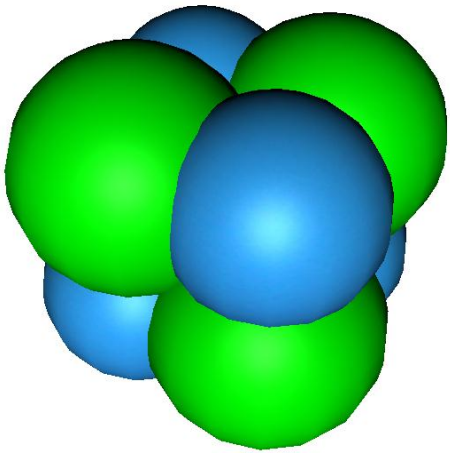

Рисунок 19— начальные условия для 8-ми частиц.

ДЛЯ 64-Х ЧАСТИЦ

Таблица 2— начальные условия для 64-х частиц.

$\boldsymbol{N}$[шт]	$\boldsymbol{r_o}[10^{-10}$м]	$\boldsymbol{\varepsilon}$[Дж]	$\boldsymbol{S}[10^{-20}$м^2]	$\boldsymbol{L_0}[10^{-10}$м]	$\boldsymbol{dt}$[с]
64	1.994	0.001	74.847	8.651	1

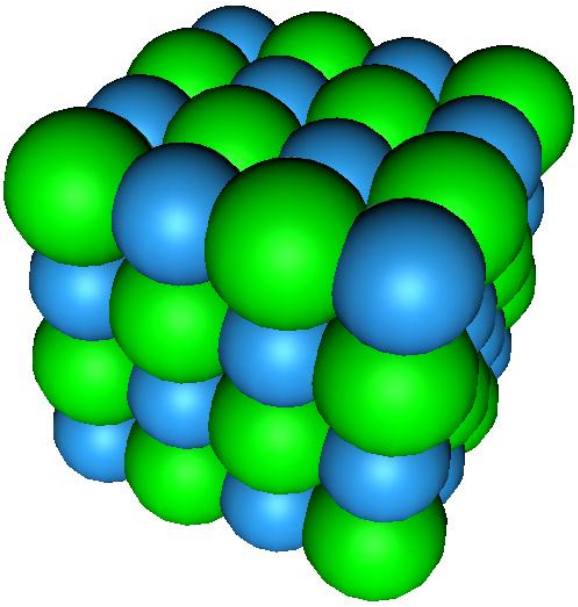

Рисунок 20— начальные условия для 64-х частиц.

ДЛЯ 216-ТИ ЧАСТИЦ

Таблица 3— начальные условия для 216-ти частиц.

$\boldsymbol{N}$[шт]	$\boldsymbol{r_o}[10^{-10}$м]	$\boldsymbol{\varepsilon}$[Дж]	$\boldsymbol{S}[10^{-20}$м^2]	$\boldsymbol{L_0}[10^{-10}$м]	$\boldsymbol{dt}$[с]
216	2.061	0.001	168.405	12.977	1

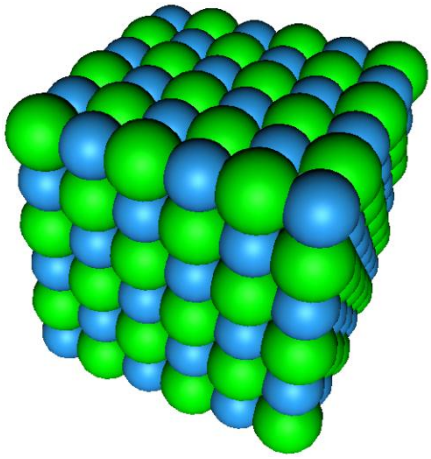

Рисунок 21— начальные условия для 216-ти частиц.

ДЛЯ 512-ТИ ЧАСТИЦ

Таблица 4— начальные условия для 512-ти частиц.

$\boldsymbol{N}$[шт]	$\boldsymbol{r_o}[10^{-10}$м]	$\boldsymbol{\varepsilon}$[Дж]	$\boldsymbol{S}[10^{-20}$м^2]	$\boldsymbol{L_0}[10^{-10}$м]	$\boldsymbol{dt}$[с]
512	2.090	0.001	299.387	17.303	1

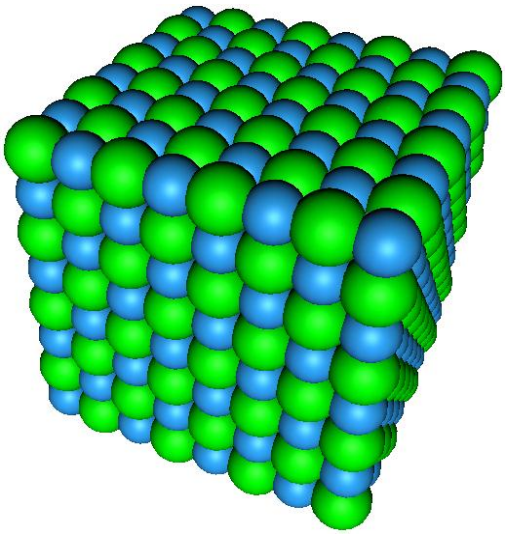

Рисунок 22— начальные условия для 512-ти частиц.

ДЛЯ 1000-ЧИ ЧАСТИЦ

Таблица 5— начальные условия для 1000-чи частиц.

$\boldsymbol{N}$[шт]	$\boldsymbol{r_o}[10^{-10}$м]	$\boldsymbol{\varepsilon}$[Дж]	$\boldsymbol{S}[10^{-20}$м$^2]$	$\boldsymbol{L_0}[10^{-10}$м]	$\boldsymbol{dt}$[с]
1000	2.107	0.001	467.793	21.629	1

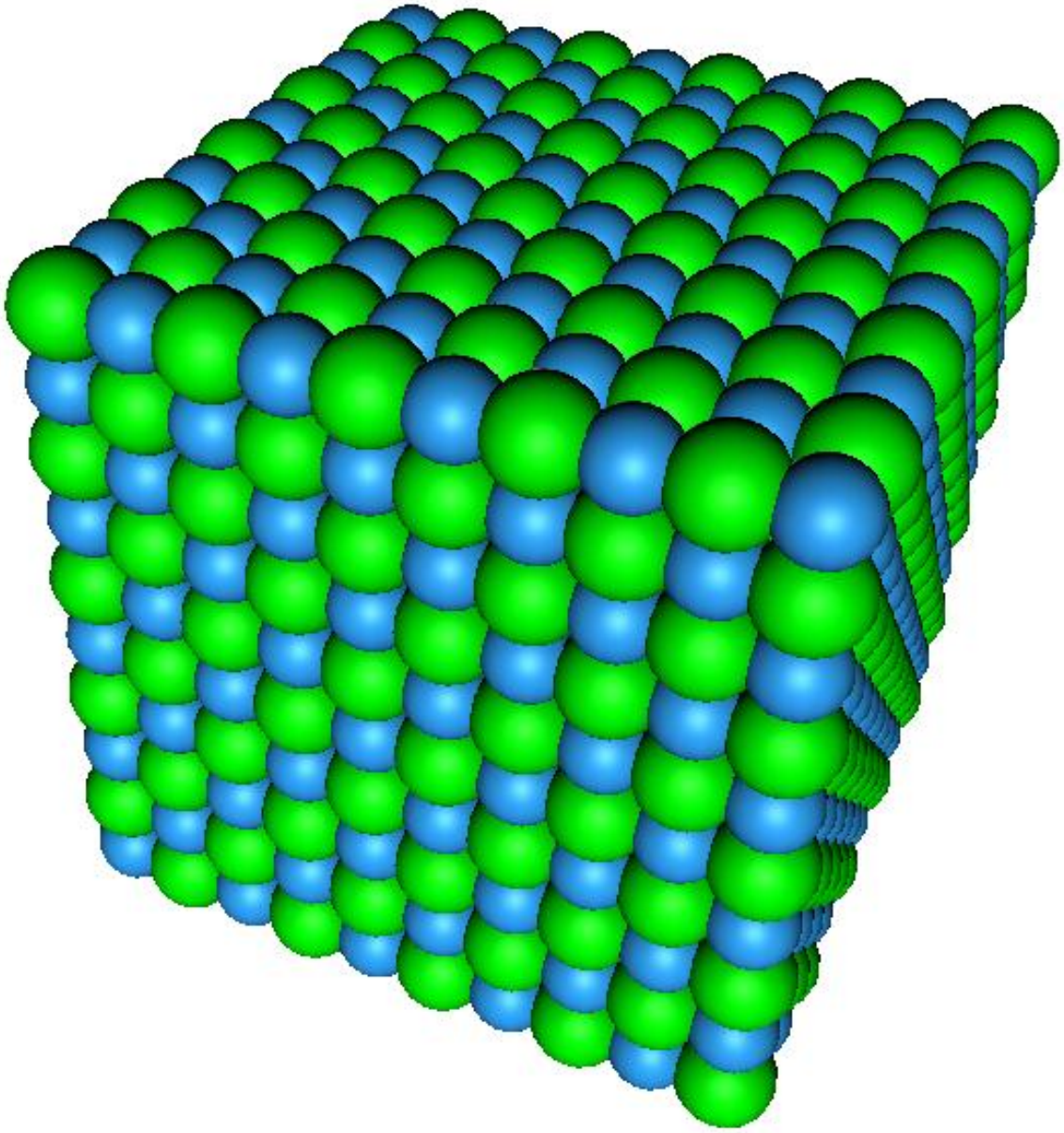

Рисунок 23— начальные условия для 1000-чи частиц.

2.2. ПРОМЕЖУТОЧНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

В данном раздели будут находиться промежуточные вычисления, которые требуются, чтобы получить окончательные результаты (Таблица 6, Таблица 7, Таблица 8, Таблица 9, Таблица 10).

ДЛЯ 8-МИ ЧАСТИЦ

Таблица 6— промежуточные вычисления для 8-ми частиц.

$\boldsymbol{t}$[с]	148	152	157	163	170
$\boldsymbol{F}[10^{-4}\text{Н}]$	1.550	1.600	1.650	1.700	1.750
$\boldsymbol{L}[10^{-10}\text{м}]$	4.400	4.408	4.417	4.427	4.438

ДЛЯ 64-Х ЧАСТИЦ

Таблица 7— промежуточные вычисления для 64-х частиц.

$\boldsymbol{t}$[с]	398	404	410	417	426
$\boldsymbol{F}[10^{-4}\text{Н}]$	1.925	1.950	1.975	2.000	2.025
$\boldsymbol{L}[10^{-10}\text{м}]$	8.857	8.873	8.891	8.909	8.928

ДЛЯ 216-ТИ ЧАСТИЦ

Таблица 8— промежуточные вычисления для 216-ти частиц.

$\boldsymbol{t}$[с]	175	182	190	199	212
$\boldsymbol{F}[10^{-4}\text{Н}]$	20.265	20.530	20.795	21.060	21.325
$\boldsymbol{L}[10^{-10}\text{м}]$	13.056	13.064	13.072	13.081	13.091

ДЛЯ 512-ТИ ЧАСТИЦ

Таблица 9— промежуточные вычисления для 512-ти частиц.

$\boldsymbol{t}$[с]	196	206	218	230	246
$\boldsymbol{F}[10^{-4}\text{Н}]$	21.400	21.800	22.200	22.600	23.000
$\boldsymbol{L}[10^{-10}\text{м}]$	17.404	17.419	17.435	17.454	17.475

ДЛЯ 1000-ЧИ ЧАСТИЦ

Таблица 10— промежуточные вычисления для 1000-чи частиц.

$\boldsymbol{t}$[с]	204	222	242	266	302
$\boldsymbol{F}[10^{-4}\text{Н}]$	21.65	22.30	22.95	23.60	24.25
$\boldsymbol{L}[10^{-10}\text{м}]$	21.731	21.757	21.789	21.827	21.878

2.3. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В данном разделе находится результат работы, который требовался к поставленной задаче. Однако, тема работы очень интересная, поэтому, чтобы быть уверенным в правильности полученных данных, пришлось визуализировать программу. Поэтому, прилагаются графические результаты моделирования деформированного твёрдого тела для различных начальных условий (Таблица 11, Таблица 12, Таблица 13, Таблица 14, Таблица 15, Таблица 16и Рисунок 24, Рисунок 25, Рисунок 26, Рисунок 27, Рисунок 28).

ДЛЯ 8-МИ ЧАСТИЦ

Таблица 11— численные результаты для 8-ми частиц.

$\boldsymbol{\sigma}[10^{14}\text{Па}]$	0.276	0.534	0.802	1.069	1.336
$\boldsymbol{\varepsilon}[\%]$	0.177	0.368	0.576	0.805	1.060
$\boldsymbol{E}[10^{16}\text{Па}]$	1.512	1.453	1.392	1.328	1.260

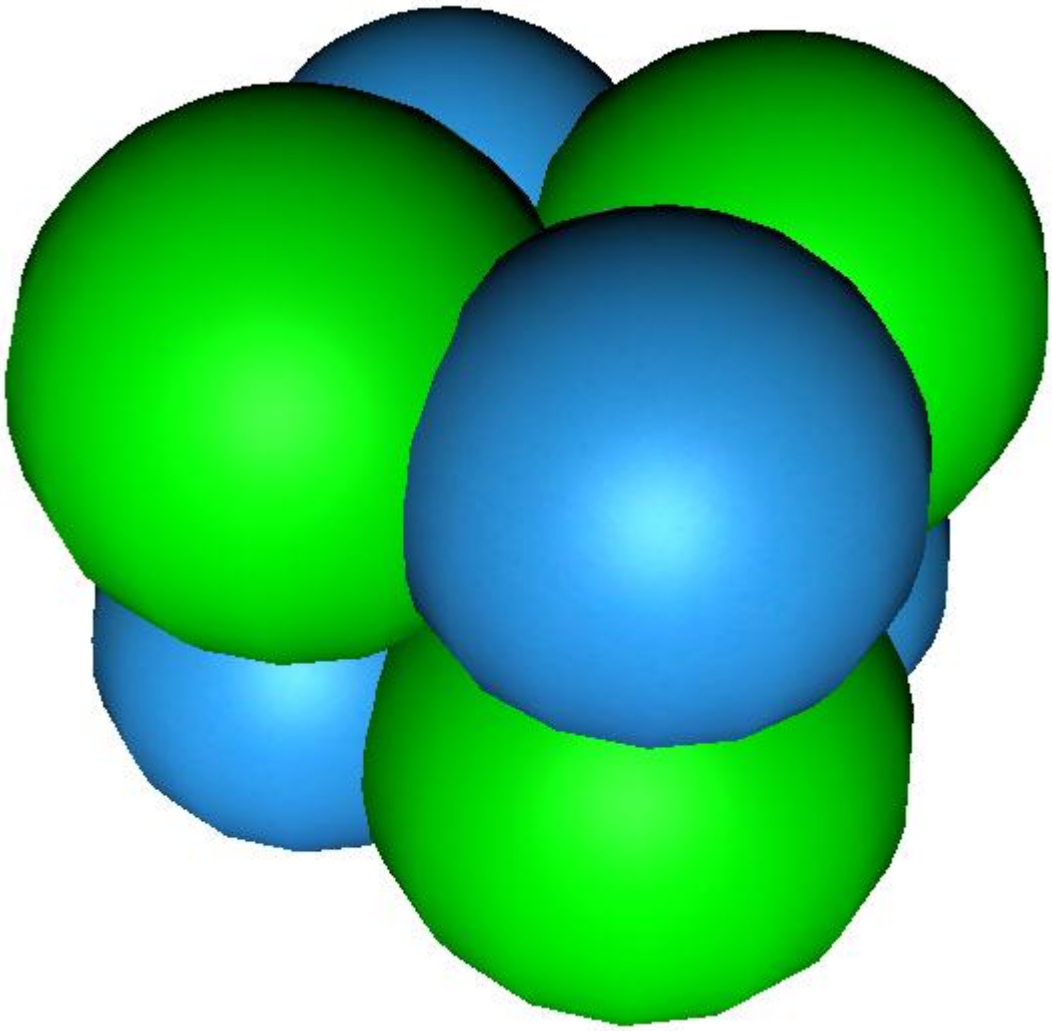

Рисунок 24— деформированное состояние для 8-ми частиц.

ДЛЯ 64-Х ЧАСТИЦ

Таблица 12— численные результаты для 64-х частиц.

$\boldsymbol{\sigma}[10^{14}\text{Па}]$	0.033	0.067	0.100	0.134	0.167
$\boldsymbol{\varepsilon}[\%]$	0.184	0.375	0.575	0.784	1.004
$\boldsymbol{E}[10^{16}\text{Па}]$	0.182	0.178	0.174	0.170	0.166

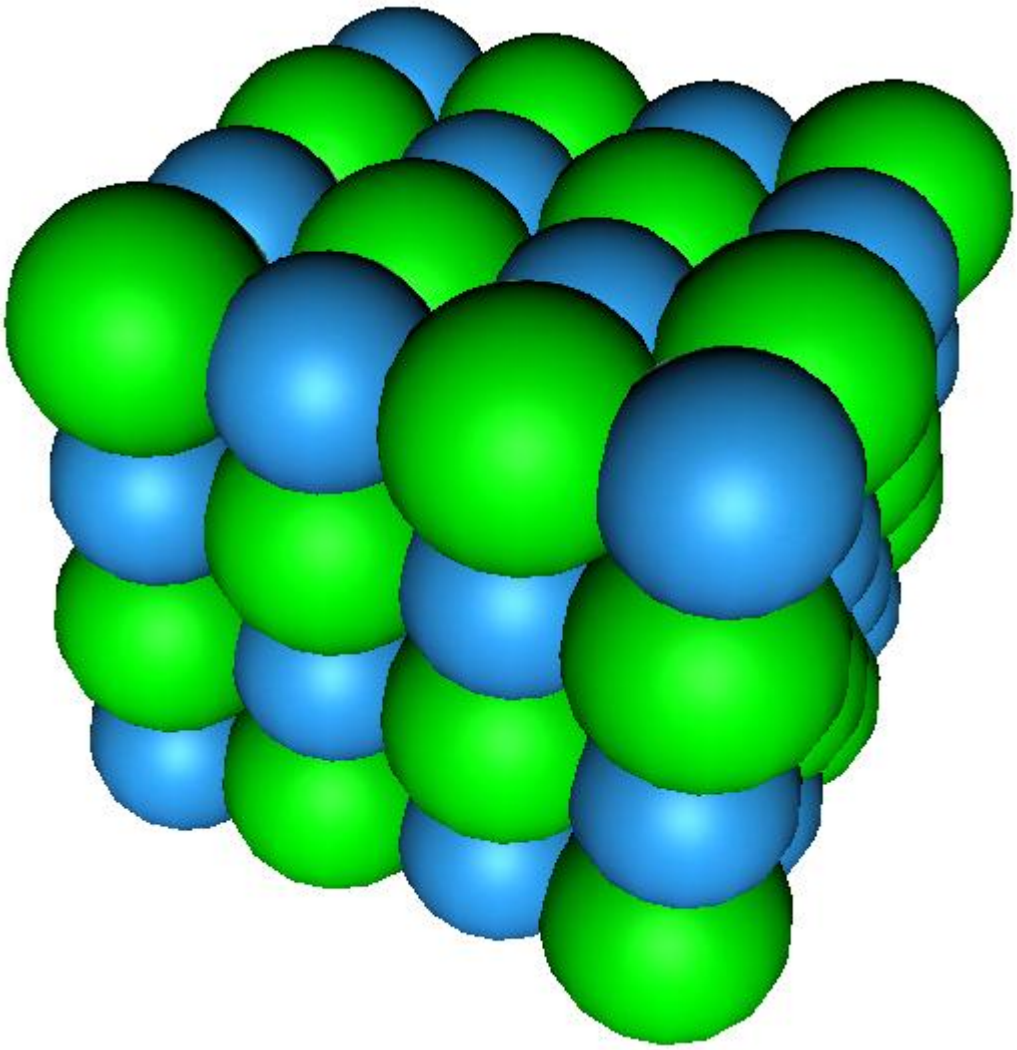

Рисунок 25— деформированное состояние для 64-х частиц.

ДЛЯ 216-ТИ ЧАСТИЦ

Таблица 13— численные результаты для 216-ти частиц.

$\boldsymbol{\sigma}[10^{14}\text{Па}]$	0.157	0.315	0.472	0.629	0.787
$\boldsymbol{\varepsilon}[\%]$	0.057	0.117	0.182	0.252	0.329
$\boldsymbol{E}[10^{16}\text{Па}]$	2.785	2.690	2.594	2.495	2.391

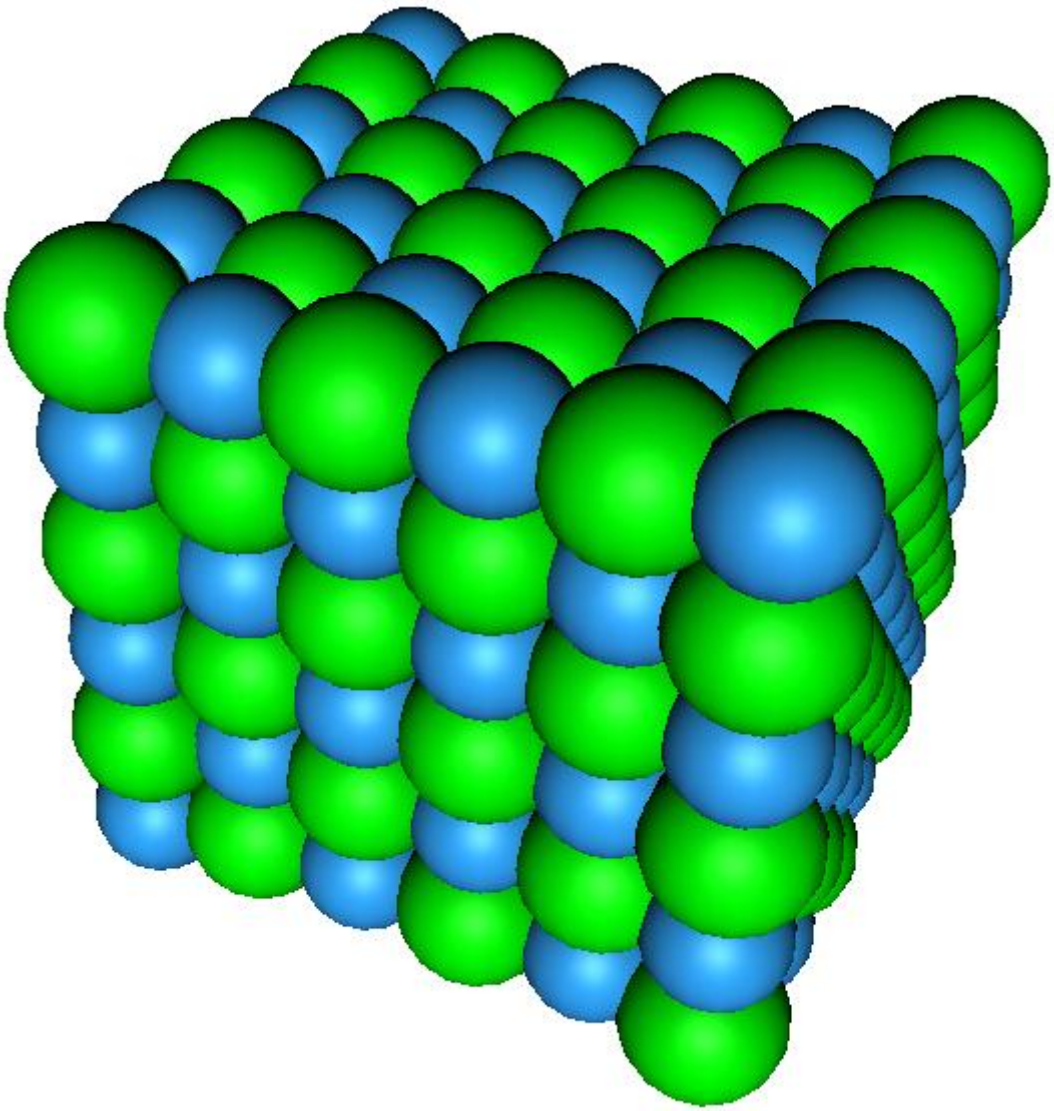

Рисунок 26— деформированное состояние для 216-ти частиц.

ДЛЯ 512-ТИ ЧАСТИЦ

Таблица 14— численные результаты для 512-ти частиц.

$\boldsymbol{\sigma}[10^{14}\text{Па}]$	0.134	0.267	0.401	0.534	0.668
$\boldsymbol{\varepsilon}[\%]$	0.077	0.163	0.259	0.366	0.488
$\boldsymbol{E}[10^{16}\text{Па}]$	1.724	1.637	1.550	1.461	1.370

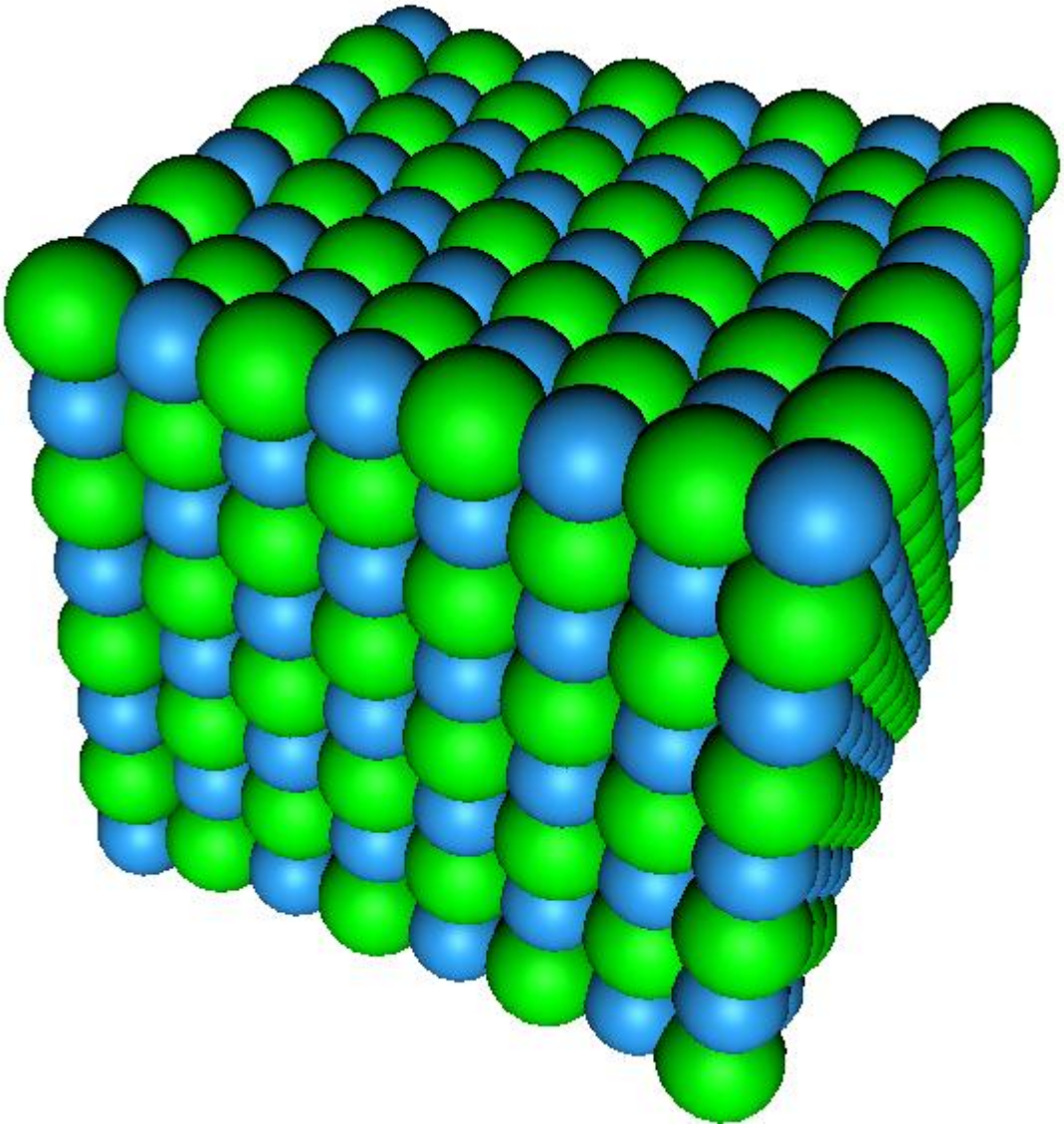

Рисунок 27— деформированное состояние для 512-ти частиц.

ДЛЯ 1000-ЧИ ЧАСТИЦ

Таблица 15— численные результаты для 1000-чи частиц.

$\boldsymbol{\sigma}[10^{14}\text{Па}]$	0.139	0.278	0.417	0.556	0.695
$\boldsymbol{\varepsilon}[\%]$	0.103	0.225	0.370	0.549	0.782
$\boldsymbol{E}[10^{16}\text{Па}]$	1.350	1.238	1.127	1.013	0.888

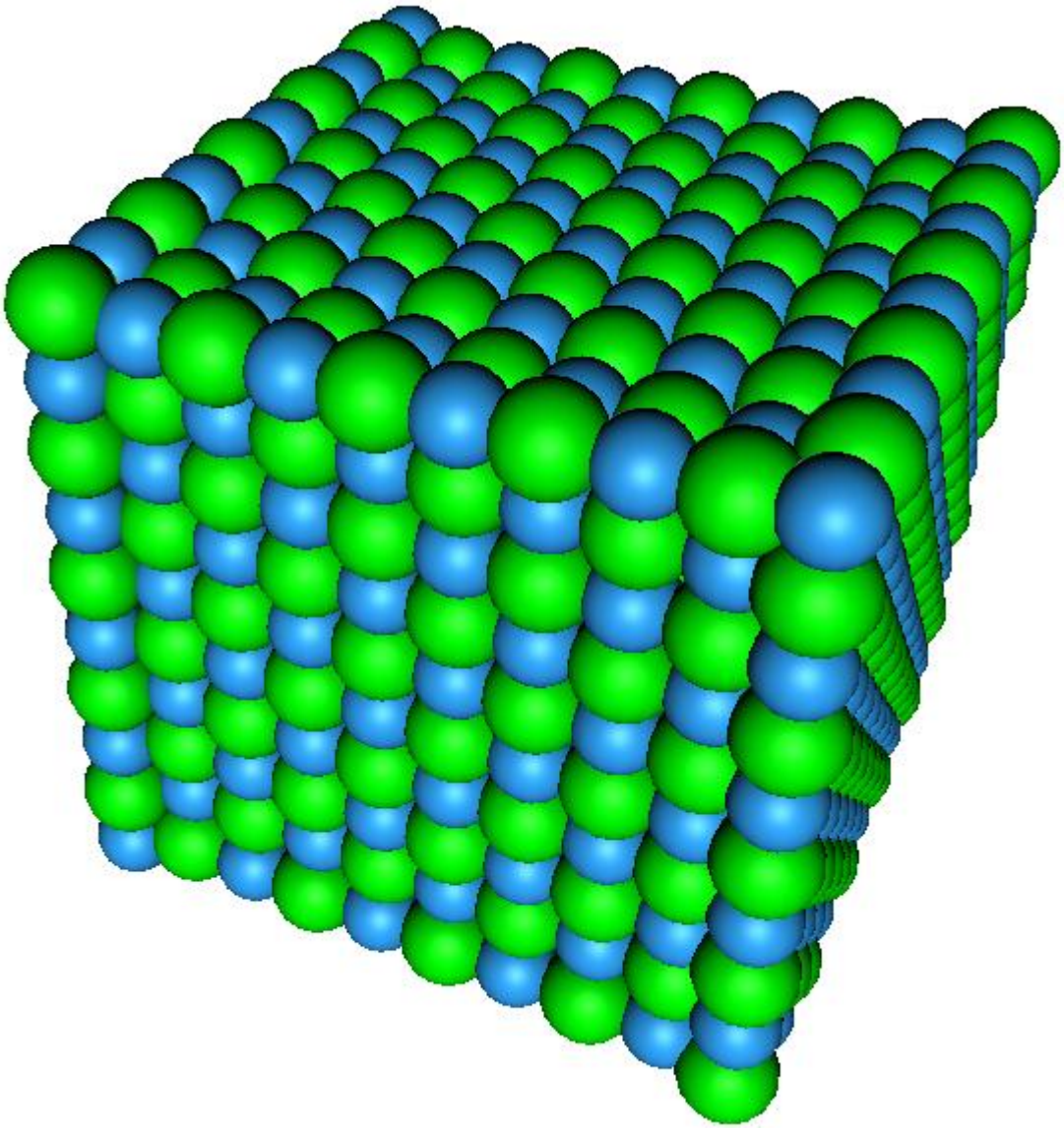

Рисунок 28— деформированное состояние для 1000-чи частиц.

КОМПЛЕКСНОЕ СРАВНЕНИЕ

Таблица 16— численное комплексное сравнение.

$\boldsymbol{\sigma}$[ТПа]	0.42754	0.85508	1.28262	1.71016	2.13770
8 частиц					
$\boldsymbol{\varepsilon}$[%]	0.03816	0.07851	0.11867	0.15947	0.20092
$\boldsymbol{E}[10^2$ТПа]	10.97436	10.89137	10.80788	10.72387	10.63934
64 частицы					
$\boldsymbol{\varepsilon}$[%]	0.02984	0.06490	0.10505	0.15030	0.20086
$\boldsymbol{E}[10^2$ТПа]	14.32740	13.17491	12.20987	11.37827	10.64281
216 частиц					
$\boldsymbol{\varepsilon}$[%]	0.03132	0.06703	0.10716	0.15172	0.20091
$\boldsymbol{E}[10^2$ТПа]	13.65130	12.75634	11.96963	11.27152	10.64021
512 частиц					
$\boldsymbol{\varepsilon}$[%]	0.03134	0.06696	0.10697	0.15152	0.20087
$\boldsymbol{E}[10^2$ТПа]	13.64185	12.76961	11.99087	11.28677.	10.64242
1000 частиц					
$\boldsymbol{\varepsilon}$[%]	0.03120	0.06665	0.10658	0.15121	0.20091
$\boldsymbol{E}[10^2$ТПа]	13.70247	12.82927	12.03480	11.30951	10.64033

2.4. ГРАФИЧЕСКОЕ СРАВНЕНИЕ

Этот раздел посвящён сравнению двух параметров упругих свойств с целью обнаружения зависимости, подтверждающей закон Гука при малых деформациях твёрдого тела (Рисунок 29, Рисунок 30, Рисунок 31, Рисунок 32, Рисунок 33,Рисунок 34).

ДЛЯ 8-Х ЧАСТИЦ

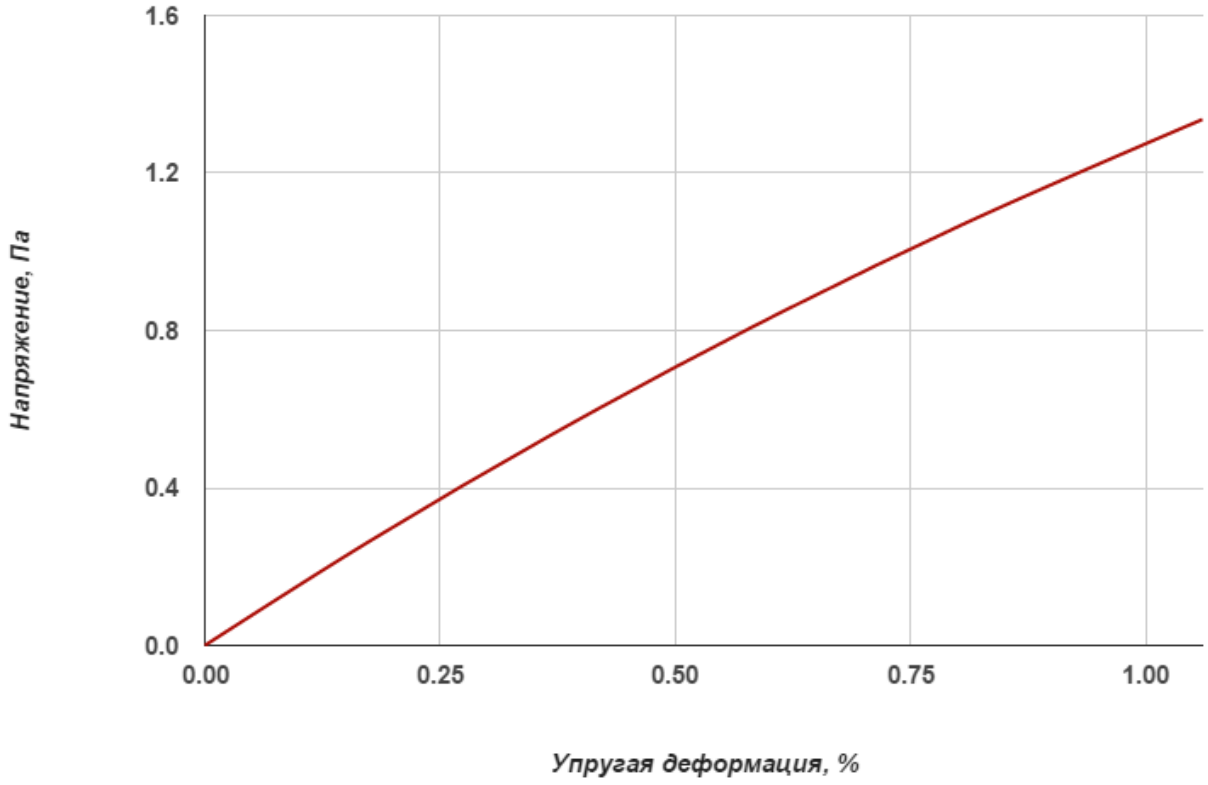

Рисунок 29— графическое сравнение для 8-ми частиц.

ДЛЯ 64-Х ЧАСТИЦ

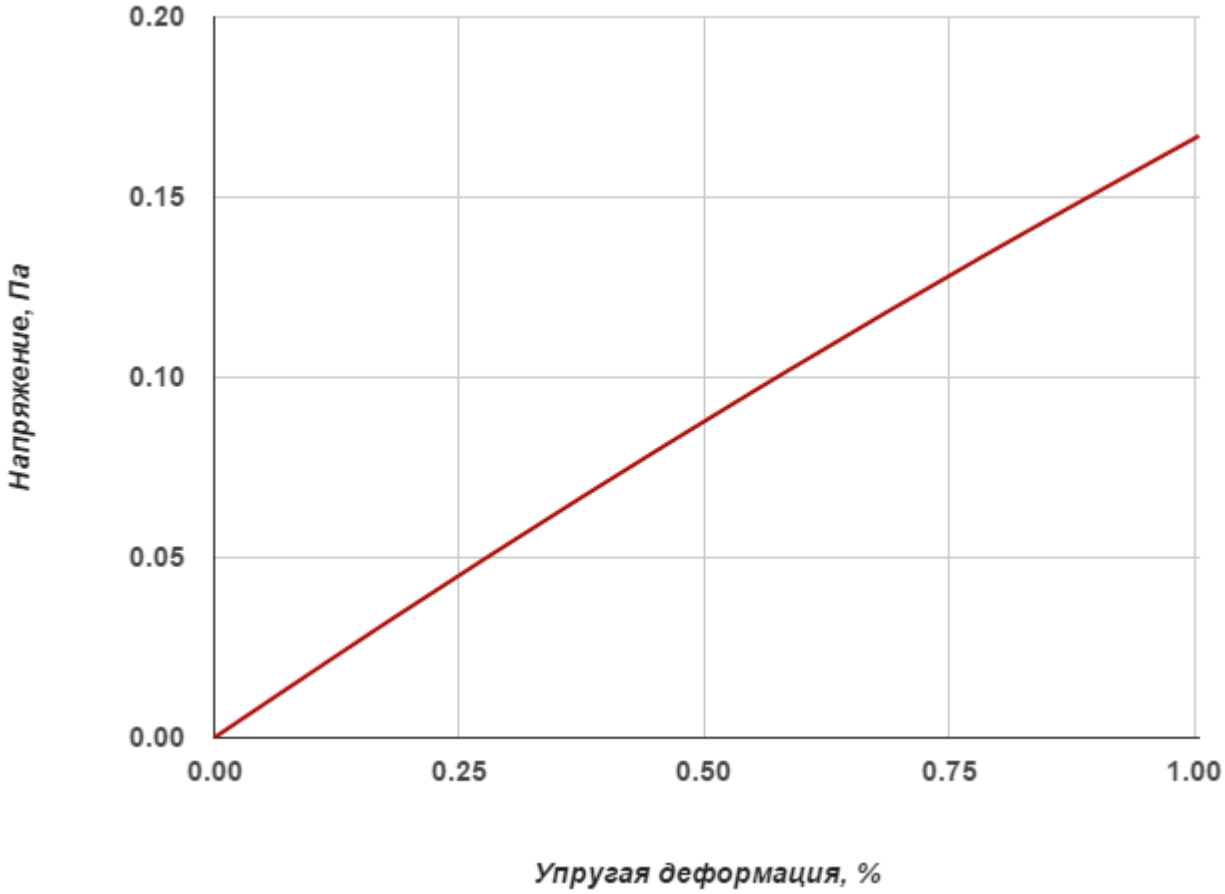

Рисунок 30— графическое сравнение для 64-х частиц.

ДЛЯ 216-ТИ ЧАСТИЦ

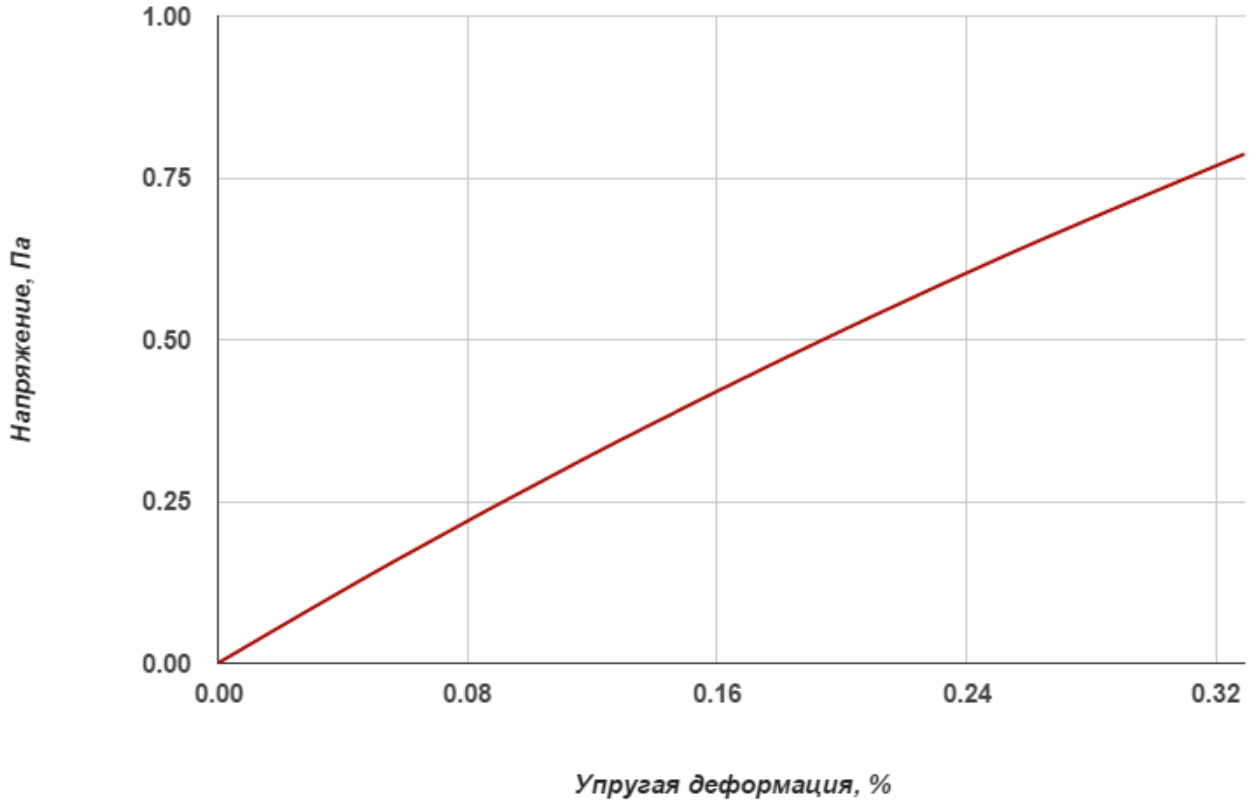

Рисунок 31 — графическое сравнение для 216-ти частиц.

ДЛЯ 512-ТИ ЧАСТИЦ

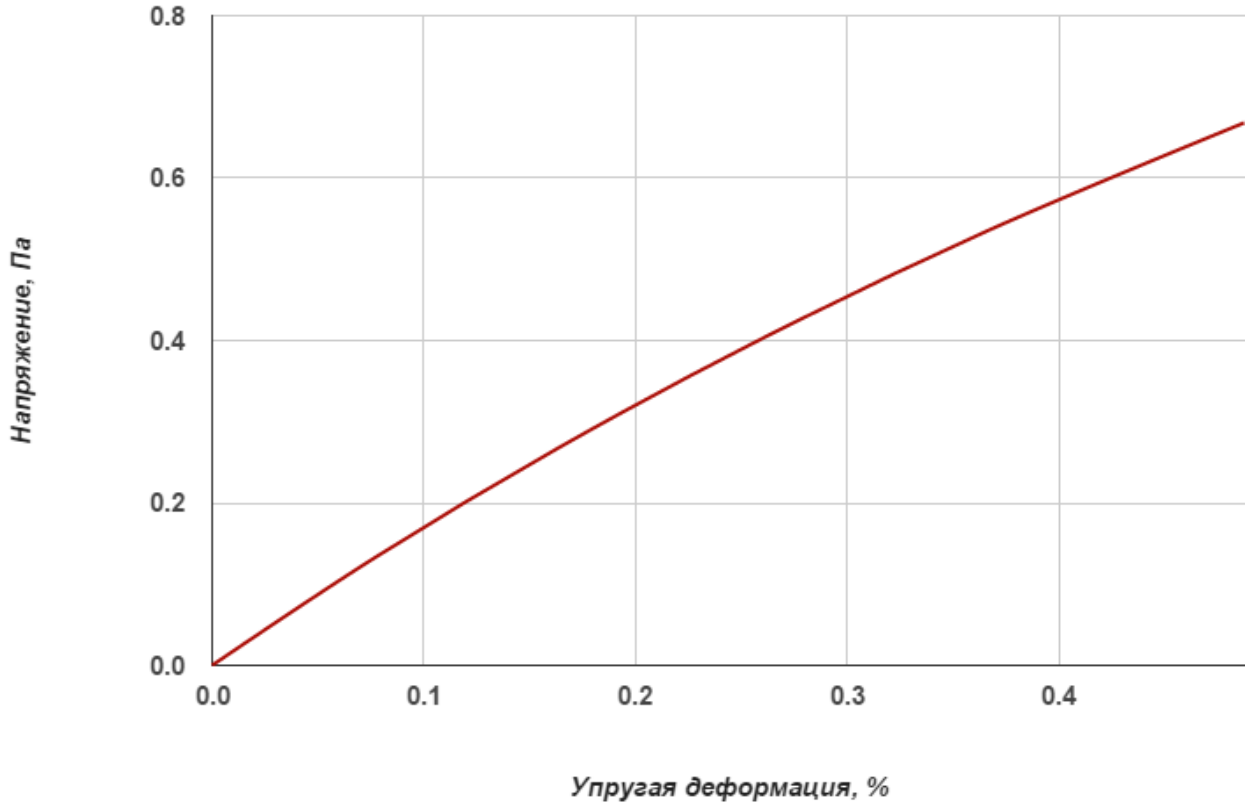

Рисунок 32— графическое сравнение для 512-ти частиц.

ДЛЯ 1000-ЧИ ЧАСТИЦ

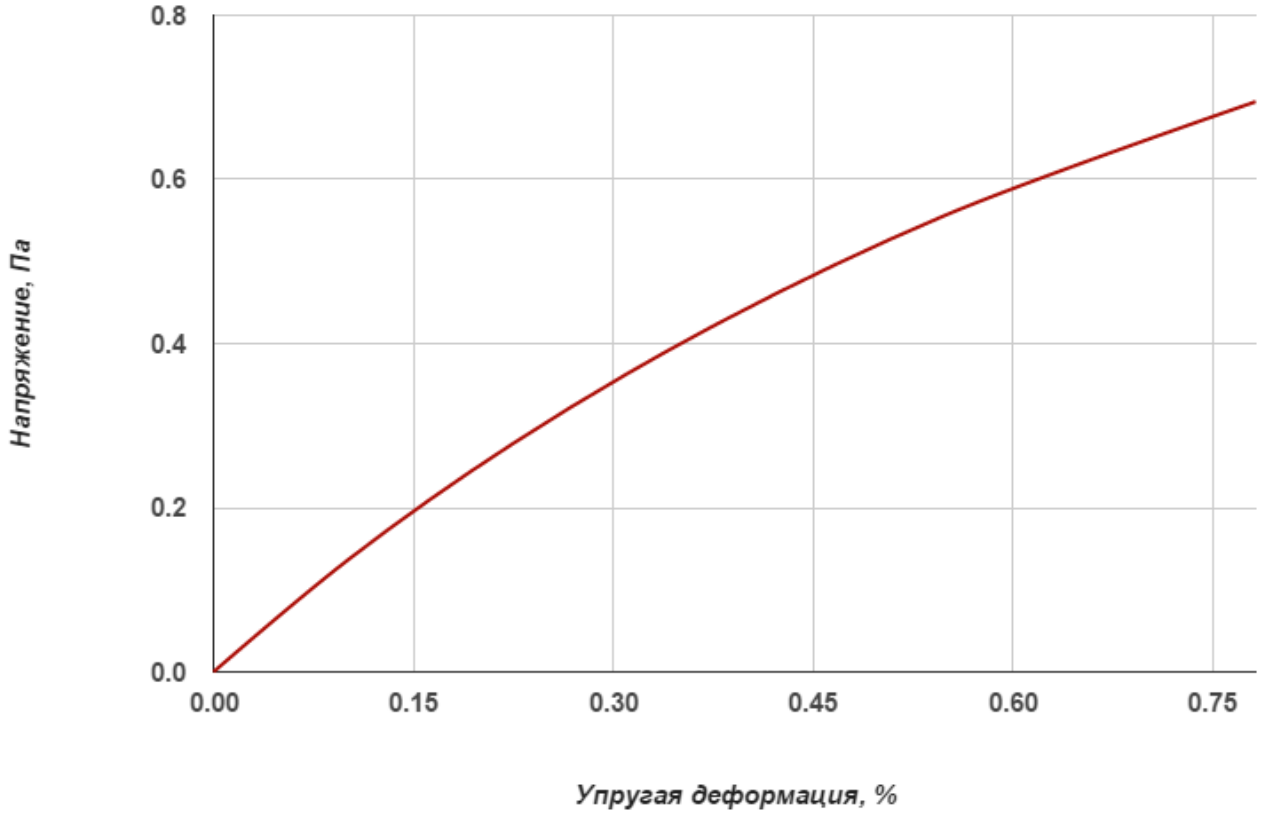

Рисунок 33— графическое сравнение для 1000-чи частиц.

КОМПЛЕКСНОЕ СРАВНЕНИЕ

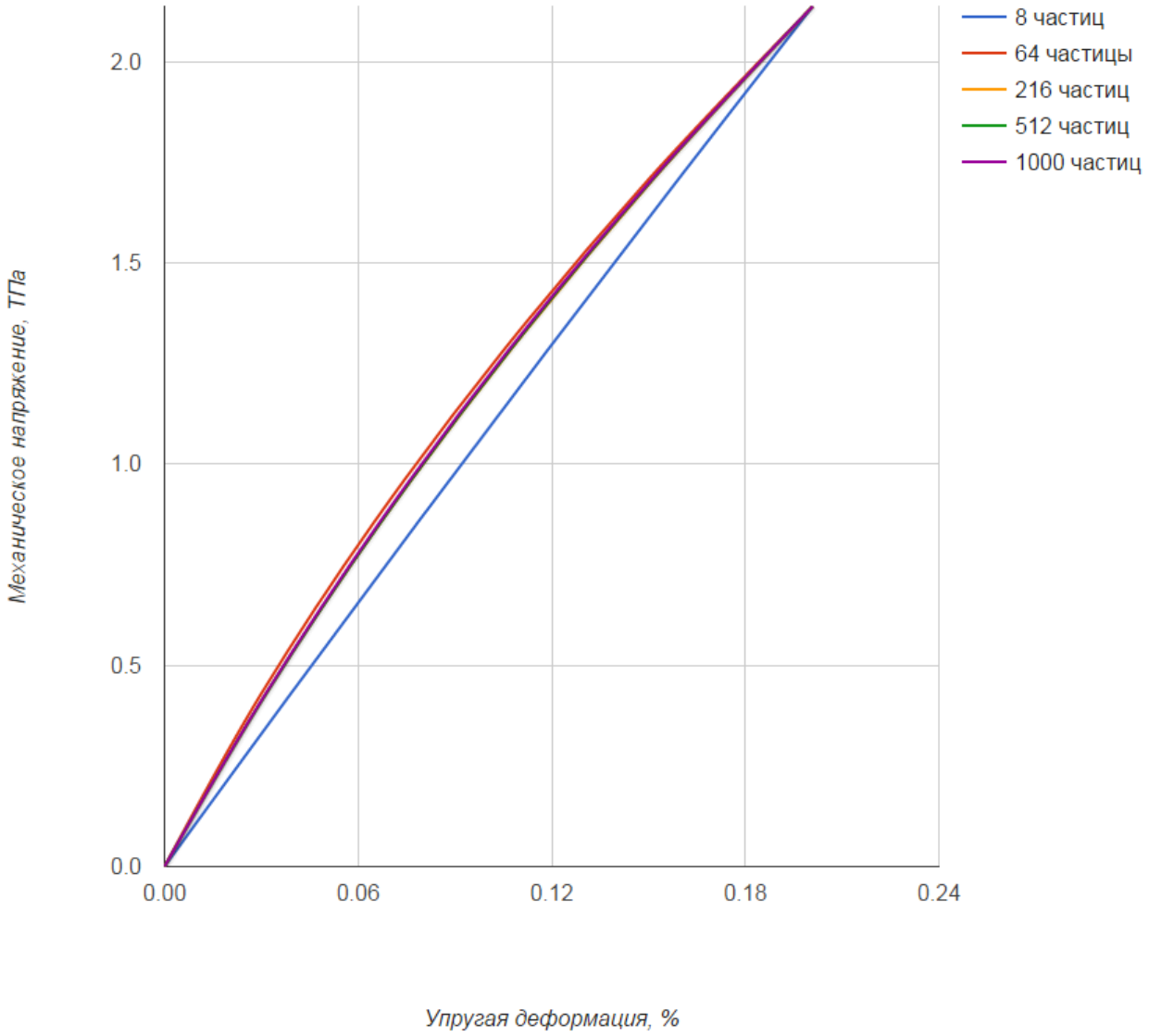

Рисунок 34— графическое комплексное сравнение.

2.5. РАЗРЫВ СВЯЗЕЙ

Этот раздел посвящён визуализации состояний для разного количества атомов, при котором внешняя сила способна разорвать внутренние связи между частицами (Рисунок 35, Рисунок 36, Рисунок 37, Рисунок 38, Рисунок 39).

ДЛЯ 8-Х ЧАСТИЦ

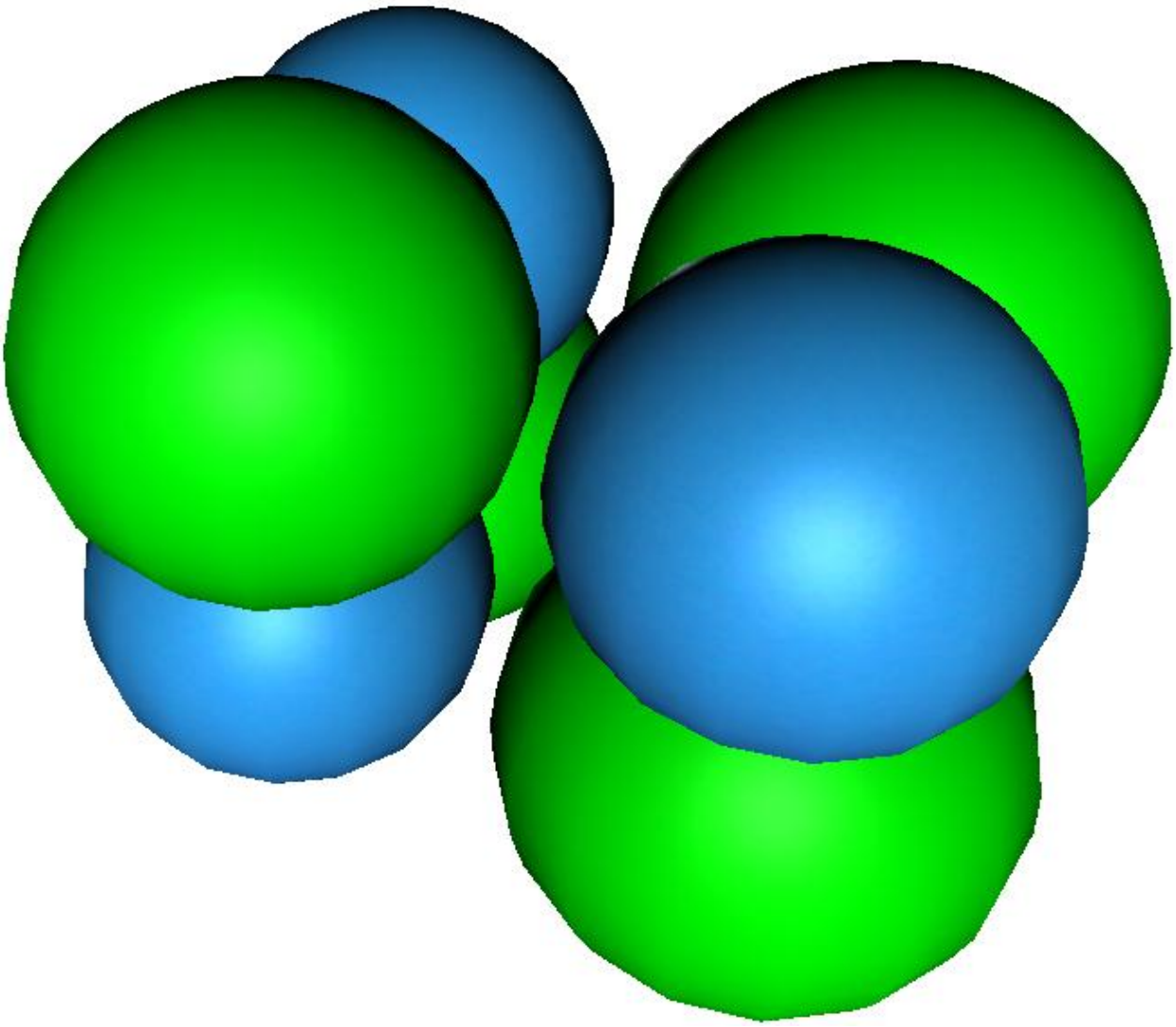

Рисунок 35 — разрыв связей для 8-ми частиц.

ДЛЯ 64-Х ЧАСТИЦ

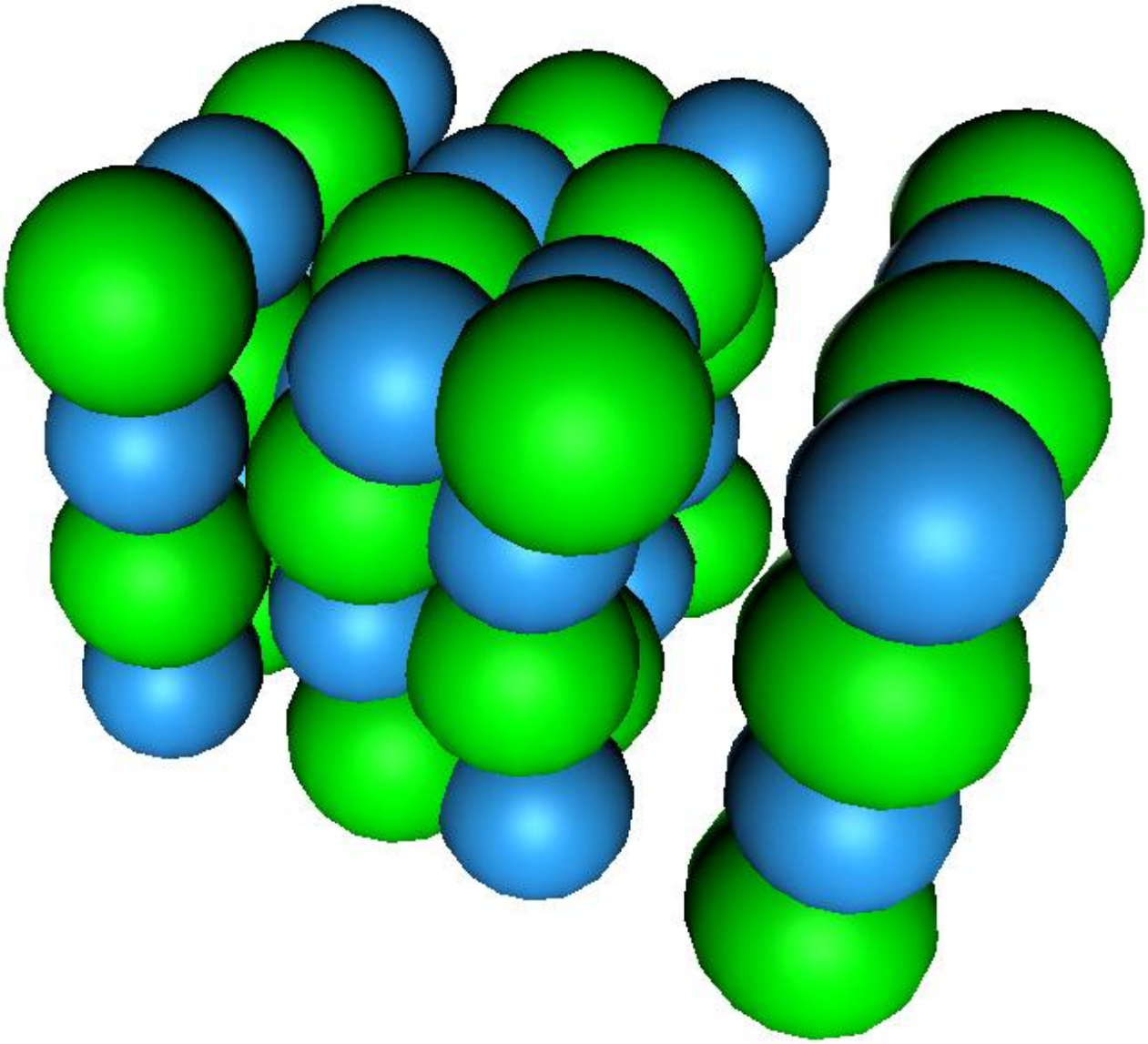

Рисунок 36 — разрыв связей для 64-х частиц.

ДЛЯ 216-ТИ ЧАСТИЦ

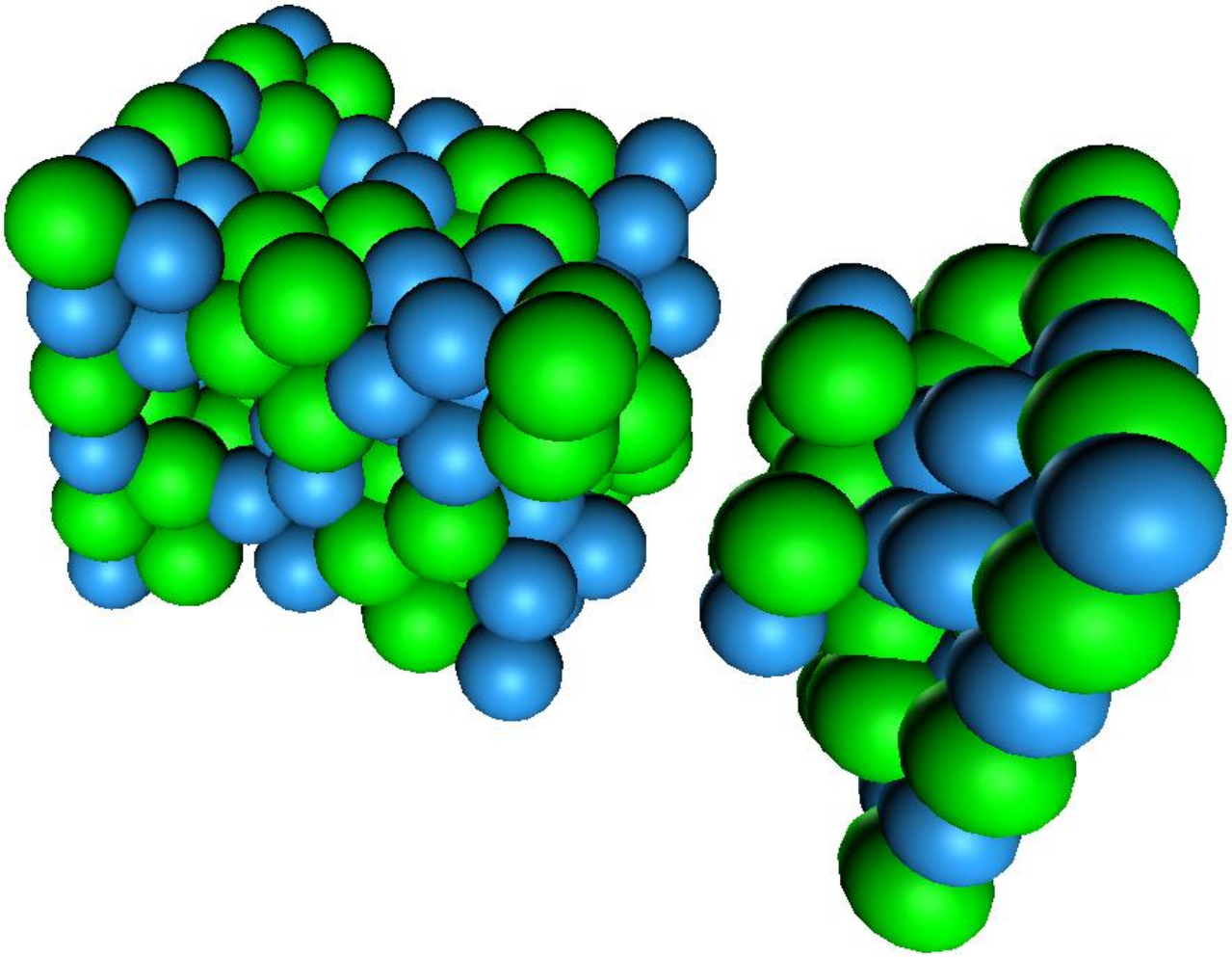

Рисунок 37 — разрыв связей для 216-и частиц.

ДЛЯ 512-ТИ ЧАСТИЦ

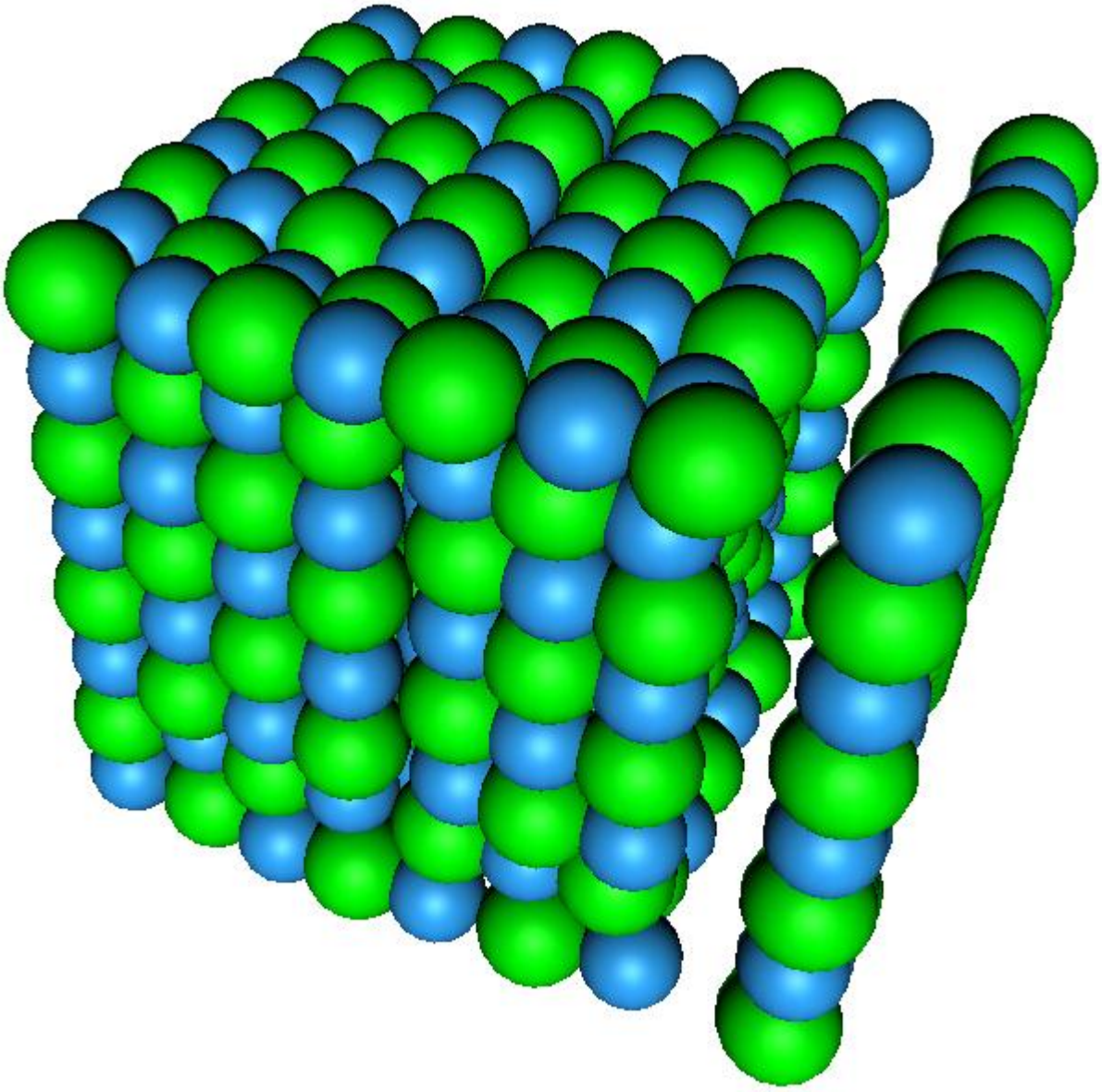

Рисунок 38 — разрыв связей для 512-и частиц.

ДЛЯ 1000-ЧИ ЧАСТИЦ

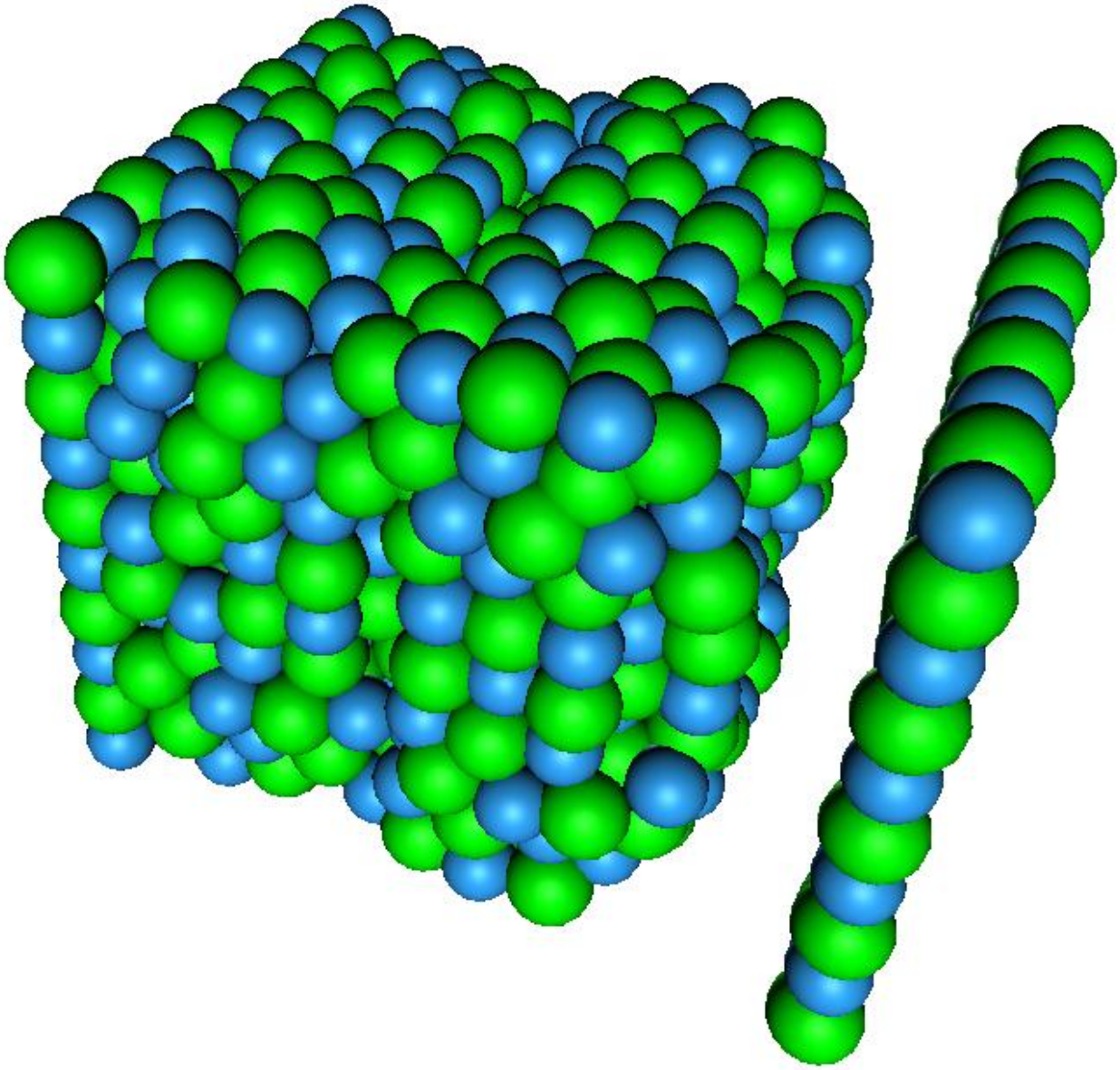

Рисунок 39 — разрыв связей для 1000-чи частиц.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При малых деформациях зависимость механического напряжения от упругой деформации для жаростойкого интерметаллида AlNi на основе метода молекулярной динамики при использовании потенциала Леннард-Джонса и алгоритма численного интегрирования Верле оказалась линейная, что подтверждается теоретическими выкладками — закон Гука.

Моделирование при увеличении количества частиц начинает переходить от линейной зависимости кэкспоненциальной. Данная погрешность, вызвана малой точностью вычислений. При шаге времени, рекомендуемому теоретическими выкладками(10^{-15} с вместо 10^{-1} с), свои результаты смог бы получить только через несколько лет.

Выводы:

1. Метод молекулярной динамики с математической точки зрения огромных сложностей не вызывает. Алгоритм довольно прост, что делает данный метод весьма привлекательным при наличии огромных вычислительных ресурсов.
2. Из-за огромного количества конфигураций системы, взаимодействий частиц, появляются огромные трудности сопоставления полученных результатов исследования к реальным данным.
3. Моделирование различных реальных систем представляет собой одно из перспективных направлений в ближайшем будущем, ввиду стремительного развития компьютерных технологий.

Результаты могут отражать в какой-то мере действительность только в том случае, если они совпадают с экспериментальными данными, полученными в нашей действительности. Нужно понимать, что результаты компьютерного моделирования являются гипотезой[1]. Однако, это не просто догадка, а предположение, построенное вычислительной техникой на основе заданных исходных данных, соответствующих реальности.

[1]предположение или догадка; утверждение, предполагающее доказательство, в отличие от аксиом, постулатов, не требующих доказательств.

СПИСОКИСТОЧНИКОВ

1. **Allen M.P. Tildesley A.K.** Computer Simulation of Liquids [Книга]. - [б.м.] : Oxford, 1987.
2. **Ercolessi Furio** The Verlet algorithm [В Интернете] // Department of Physics, University of Udine, Italy. - 9 Октябрь 1997 г.. - http://www.fisica.uniud.it/~ercolessi/md/md/node21.html.
3. **Hoover W.G.** Isomorphism linking smooth particles and embedded atoms. [Журнал]. - [б.м.] : Physica A, 1998 г.. - 3 : Т. 260.
4. **Komolkin A.V. Laaksonen A., Maliniak A.** Molecular dynamics simulation of nematic liquid crystal [Журнал]. - [б.м.] : J. Chemical Physics, 1994 г.. - 5 : Т. 101.
5. **Lennard-Jones J.E.** On the Determination of Molecular Fields [Книга]. - [б.м.] : Proc. Roy. Soc., 1924.
6. **Teller B.M. Axilord E.** Interaction of the van der Waals' type between three atoms [Книга]. - [б.м.] : J. Chem. Phys., 1943.
7. **WolframAlpha** WolframAlpha [В Интернете] // WolframAlpha. - 27 Май 2016 г.. - http://www.wolframalpha.com/input/?i=((a%2Fx)%5E12-2(a%2Fx)%5E6)%27.
8. **Аксенова Е.В. Кшевецкий М.С.** Вычислительные методы исследования молекулярной динамики. - Санкт-Петербург : [б.н.], 2009 г..
9. **Белащенко К.Д.** Компьютерное моделирования некристаллических веществ методом молекулярной динамики [Журнал]. - Москва : Соросовский образовательный журнал, 2001 г.. - 8 : Т. 7.
10. **Бродская В.А. Пиотровская Е.М.** Метод молекулярной динамики в физической коллоидной химии. [Книга]. - Санкт-Петербург : [б.н.], 1999.
11. **Брюс Эккель** Философия Java [Книга]. - Санкт-Петербург : ПИТЕР, 2009.

12. **Васильева И.А. Волков Д.П., Заричняк Ю.П.** Теплофизические свойства веществ [Книга]. - Санкт-Петербург : Санкт-Петербургский государственный университет, 2004.
13. **Вихрев В.В.** Расширенная классическая механика для описания [Книга]. - Москва : Институт ядерного синтеза РНЦ «Курчатовский институт», 2007.
14. **Голубев Ю.Ф.** Основы теоретической механики [Книга]. - Москва : МГУ, 2000.
15. **Двойрин Г.Б.** [Конференция] // Почему атомы вечно колеблются?. - Санкт-Петербург : [б.н.], 2008.
16. **Димитриенко Ю.И. Соколов А.П.** Об упругих свойствах композиционных материалов [Журнал]. - Москва : Математическое моделирование, 2009 г.. - 4 : Т. 21.
17. **Забродин А.В.** Супер ЭВМ МВС-100 и опыт их использования при решении задач механики и физики. [Журнал]. - [б.м.] : Математическое моделирование, 2000 г.. - 5 : Т. 12.
18. **Капитонов А.М. Редькин В.Е.** Физико-механические свойства композиционных материалов. [Книга]. - [б.м.] : Институт инженерной физики и радиоэлектроники, 2015.
19. **Комолкин А.В. Эльц Е.Э.** Молекулярная динамика: от модели к визуализации [Журнал]. - Санкт-Петербург : Компьютерные инструменты в образовании, 2004 г.. - 3.
20. **Коровин Н.В.** Общая химия [Книга]. - Москва : [б.н.], 1998.
21. **Кривцов А.М. Кривцова Н.В.** Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела [Журнал]. - [б.м.] : Дальневосточный математический журнал ДВО РАН, 2002 г.. - 2 : Т. 3.
22. **Кузнецов М.В.** Современные методы исследования поверхности твёрдых тел: фотоэлектронная, спектроскопия и дифракция, стм-микроскопия [Книга]. - Екатеринбург : Институт химии твёрдого тела УрО РАН, 2010.
23. **Майкл Моррисон** Изучаем JavaScript [Книга]. - Москва : ПИТЕР, 2012.

24. **Никольский Б.П.** Справочник химика [Книга]. - Москва : Л.: Химия, 1966. - 2-е изд. : Т. 1 : стр. 1072.
25. **Прохоров А.М.** Модули упругости [Раздел книги] // Большая Советская энциклопедия. - Москва : Сов. энциклопедия, 1974. - Т. XVI.
26. **Романович Б.В.** Коллективные свойства низкочастотных колебаний [Книга]. - Новосибирск : Институт неорганической химии им. А.В. Николаева со РАН, 2015.
27. **СКТ-МФТИ** Лекция 8: Молекулярная динамика. - [б.м.] : НОЦ.
28. **Сукачева Т.Г. Ласунский А.В.** Степенные ряды. Ряды Тейлора [Методические указания]. - В. Новгород : Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, 2008 г..
29. **Товбин Ю.К.** Метод молекулярной динамики в физической химии [Книга]. - [б.м.] : Наука, 1996.
30. **Фёдоров А.С. Сорокин П.Б. , Аврамов П.В., Овчинников С.Г.** Моделирование свойств, электронной структуры ряда углеродных и неуглеродных нанокластеров и их взаимодействия с легкими элементами [Книга]. - Новосибирск : СО РАН, 2006.
31. **Харрисон У.** Теория межатомного взаимодействия в твердого тела [Журнал]. - [б.м.] : Успехи физических наук, 1972 г.. - 2 : Т. 108.
32. **Шокин Ю.И. Федотов А. М.** Информационные технологии INTERNET* [Журнал]. - Новосибирск : Институт вычислительных технологий СО РАН, 1997 г.. - 3 : Т. 2.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

КОД ПРОГРАММЫ

```
<!DOCTYPE html>
<!-- HTML (Start[1]) -->
<!-- Автор: Ягубов Роман Борисович (МГТУ, АК3-81) -->
<!-- Версия: 07.06.2016 13:21 -->
<!-- Сайт: Yagubov.RU; Почта: Roman@Yagubov.RU; Телефон: +7 (985) 417-76-
29 -->
<!-- Название: Численное моделирование упругих свойств жаростойких
интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики -->
<!-- Оригинал: http://yagubov.ru/files/EduWork/vip/program.htm или
http://yagubov.ru/index/0-5 -->
<!-- Head (Start[1]) -->
<head>
<!-- Кодировка символов -->
<meta charset="utf-8" />
<!-- Название веб-страницы -->
<title>Выпускная квалификационная работа АК3-81 Ягубов Р.Б. в 2016
(программа)</<?'title'?>>
<!-- Оформление веб-страницы (Start[1]) -->
<style type="text/css">
<!--Стили страницы -->
body { text-align: center; color: white; background-color: rgba(255,255,255,0.85)}
canvas { width: 100%; height: 100%}
html { overflow: hidden}
<!--Стили таблиц -->
.rs-table td a { text-decoration:underline}
```

```
.rs-table tr.table-money td { color:red; font-weight:800%; text-shadow:0 0 20px
rgba(255,0,0,0.9)}
.rs-table { padding:10px 0px 0px 0px; font-family:"Trebuchet MS",sans-serif; font-
size:101%; font-weight:bold; line-height:1.4em; font-style:normal; border-
collapse:separate; width:100%}
.rs-table thead th,
.rs-table tfoot th { padding:10px; color:#fff; text-shadow:1px 1px 1px #000;
border:2px solid #333; border-bottom:2px solid #000; background-color:#000;
background:rgb(255,100,100)}
.rs-table thead th { border-top-left-radius:10px; border-top-right-radius:10px; text-
transform: uppercase}
.rs-table tfoot th { border-bottom-left-radius:10px; border-bottom-right-radius:10px}
.rs-table thead th:empty,
.rs-table tbody th:empty,
.rs-table tfoot th:empty { background:transparent; border:none}
.rs-table tbody th { color:#fff; text-shadow:1px 1px 1px #000; background-
color:#000; border:2px solid #333; border-right:2px solid #000; padding:0px 10px;
background:rgb(255,100,100)}
.rs-table tbody td { padding:10px; text-align:center; border:2px solid #333; border-
radius:1px; color:#666; text-shadow:1px 1px 1px #fff;
background:rgb(255,255,255)}
.rs-table tfoot td { color:#000; font-size:113%; text-align:center; padding:10px 0px;
text-shadow:1px 1px 1px #444}
.tfoot-blue tr th { color:#fff; background-color:#000; border:2px solid #333; border-
right:2px solid #000; padding:10px; margin: 1px; background:rgb(255,255,0)}
th.left { border-top-left-radius:15px; border-bottom-left-radius:15px}
th.right { border-top-right-radius:15px; border-bottom-right-radius:15px}
</style>
<!-- Оформление веб-страницы (End[0])-->
</<?'head'?>>
```

```
<!-- Head (End[0]) -->

<!-- Body (Start[1]) -->
<body>

<!--Вывод условий (Start[1]) -->
<div id="block-vivod" style="position:fixed; left:25px; top:0; color:black;">
<table class="rs-table">
<thead><tr><td></td><th onclick="view('block-vivod');view('a-block-vivod');" >
<a style="color:white;" href="javascript:void(0);">Условия</a>
</th><td></td></tr></thead>
<tbody id="dano"></tbody>
</table>
</div>
<!-- Вывод условий (End[0]) -->

<!-- Вывод расчётов (Start[1]) -->
<div id="block-ex" style="display:none; position:fixed; right:5px; bottom:5px;
color:black;">
<table class="rs-table">
<thead><tr><td></td><th onclick="view('block-ex');view('a-block-ex');">
<a style="color:white;" href="javascript:void(0);">Расчёты</a>
</th><td></td></tr></thead>
<tbody>
<tr><th class="left">Time</th><td id="Time" ></td><th
class="right">Число<br/>итераций</th></tr>
<tr><th class="left">F</th><td id="F" ></td><th
class="right">Текущая<br/>сила</th></tr>
<tr><th class="left">A</th><td id="sum_a" ></td><th
class="right">Текущее<br/>ускорение</th></tr>
```

```
<tr><th class="left">L</th><td id="L" ></td><th
class="right">Текущая<br/>ширина</th></tr>
<tr><th class="left">L_min</th><td id="L_min" ></td><th
class="right">Максимальное<br/>сжатие</th></tr>
<tr><th class="left">L_max</th><td id="L_max" ></td><th
class="right">Максимальное<br/>удлинение</th></tr>
</tbody>
</table>
</div>
<!--Вывод расчётов (End[0]) -->

<!--Вывод сравнения (Start[1]) -->
<div id="block-result" style="display:none; position:fixed; left:10px; bottom:5px;">
<table class="rs-table">
<thead><tr><td></td><th onclick="view('block-result');view('a-block-result');"
colspan="11">
<a style="color:white;" href="javascript:void(0);">СРАВНЕНИЕ</a>
</th>
<td></td></tr></thead>
<tbody>
<tr id="clock_[]"></tr>
<tr id="F_[]"></tr>
<tr id="sigma_[]"></tr>
<tr id="L_max_[]"></tr>
<tr id="epsilon_[]"></tr>
<tr id="E_[]"></tr>
<!--График (Start[1]) -->
<tr><th></th><td colspan="6" id="block-graf-2">Идётрасчётточек...</td></tr>
</tbody>
<tfoot id="block-graf">
```

```
<tr>
<th></th>
<th colspan="11">График</th>
</tr>
</tfoot>
<!--График (End[0]) -->
</table>
</div>
<!-- Вывод сравнения (End[0]) -->


<!-- Вывод результата (Start[1]) -->
<div id="block-dop" style="display:none; position:fixed; left:10px; bottom:5px;">
<table class="rs-table">
<thead><tr><td></td><th onclick="view('block-dop');view('a-block-dop');"
colspan="5">
<a style="color:white;" href="javascript:void(0);">РЕЗУЛЬТАТЫ</a>
</th>
<td></td></tr></thead>
<tbody>
<tr id="clock2_[]"></tr>
<tr id="F2_[]"></tr>
<tr id="sigma2_[]"></tr>
<tr id="L_max2_[]"></tr>
<tr id="epsilon2_[]"></tr>
<tr id="E2_[]"></tr>
</tbody>
</table>
</div>
<!-- Вывод результата (End[0]) -->
```

```
<!--Автор (Start[1]) -->
<div id="block-autor" style="position:fixed; right:5px; top:0; color:black;">
<table class="rs-table">
<thead><tr><th onclick="view('block-autor');view('a-block-autor');">
<a style="color:white;" href="javascript:void(0);">Выпускная квалификационная
работа</a>
</th></tr></thead>
<tbody>
<tr><td>Численное моделирование упругих свойств<br/>жаростойких
интерметаллидных материалов<br/>на основе метода
молекулярной динамики.</td></tr>
</tbody>
<tfoot><tr><th>© Ягубов Роман Борисович, 2016.</th></tr></tfoot>
</table>
</div>
<!-- Автор (End[0]) -->

<!-- Верхнее меню (Start[1]) -->
<div id="block-menu" style="position:fixed; left:35%; top:-5px;">
<table class="rs-table">
<tfoot class="tfoot-blue">
<tr>
<th style="display:none;" id="a-block-vivod" onclick="view('block-vivod');view('a-
block-vivod');"><a style="color:black;text-decoration: none;letter-spacing: 3px;"
href="javascript:void(0);">УСЛОВИЯ</a></th>
<th style="display:inline;" id="a-block-ex" onclick="view('block-ex');view('a-block-
ex');"><a style="color:black;text-decoration: none;letter-spacing: 3px;"
href="javascript:void(0);">РАСЧЁТЫ</a></th>
```

```
<th style="display:none;" id="a-block-result" onclick="view('block-result');view('a-block-result');"><a style="color:black;text-decoration: none;letter-spacing: 3px;" href="javascript:void(0);">СРАВНЕНИЕ</a></th>
<th style="display:none;" id="a-block-dop" onclick="view('block-dop');view('a-block-dop');"><a style="color:black;text-decoration: none;letter-spacing: 3px;" href="javascript:void(0);">РЕЗУЛЬТАТЫ</a></th>
<th style="display:none;" id="a-block-autor" onclick="view('block-autor');view('a-block-autor');"><a style="color:black;text-decoration: none;letter-spacing: 3px;" href="javascript:void(0);">АВТОР</a></th>
</tr>
</tfoot>
</table>
</div>
<!--Верхнее меню (End[0]) -->

<!--Дополнительные библиотеки JavaScript (Start[1])-->
<script src="http://yagubov.ru/files/EduWork/vip/source/three.min.js"></script>
<script
src="http://yagubov.ru/files/EduWork/vip/source/TrackballControls.js"></script>
<script src="http://yagubov.ru/files/EduWork/vip/source/stats.min.js"></script>
<script src="http://yagubov.ru/files/EduWork/vip/source/Detector.js"></script>
<!--Дополнительные библиотеки JavaScript (End[0]) -->

<!-- Построение графика упругости -->
<script type="text/javascript"
src="http://yagubov.ru/files/EduWork/vip/source/loader.js"></script>

<!--Код программы (Start[1]) -->
<script>
```

```
//Спойлер (Start[1])
function view(n) {
style = document.getElementById(n).style;
 style.display = (style.display == 'none') ?'inline' : 'none';
}
//Спойлер (End[0])

//Основная часть программы (Start[1])

//Раскрашиваем атомы (Start[1])
if ( ! Detector.webgl ) Detector.addGetWebGLMessage();
var bitmapNi = new Image();
 bitmapNi.src = '/files/EduWork/vip/source/textureNi.jpg';
 bitmapNi.onerror = function () {
console.error("Error loading: " + bitmapNi.src);
 }
var bitmapAl = new Image();
 bitmapAl.src = '/files/EduWork/vip/source/textureAl.png';
 bitmapAl.onerror = function () {
console.error("Error loading: " + bitmapAl.src);
 }
 THREE.ImageUtils.crossOrigin = '*';
var textureNi = THREE.ImageUtils.loadTexture(bitmapNi.src);
var textureAl = THREE.ImageUtils.loadTexture(bitmapAl.src);
var materialNi = new THREE.MeshPhongMaterial( { map: textureNi } );
var materialAl = new THREE.MeshPhongMaterial( { map: textureAl } );
//Раскрашиваем атомы (End[0])

 //Проблема программы в единицах измерения параметров.
```

//К сожалению задатеть в СИ все переменные не удалось, так как радиусы атомов в таком случае очень маленькие.

//Соответственно, чтобы найти объём, нужно это число возвести в куб, а в потенциале взаимодействия в 12-ю степень.

//Так как, число меньшее единице при возведении в степень начинает уменьшаться, то язык программирования перестаёт справляться с числами порядка -200 степени.

//Поэтому постараюсь вручную проследить, что в каких единицах измерения.

```
//Константы для материала (Start[1])
var pi = 3.1415926535; //Число Пи {default:3.1415926535}
var R_Al = 1.43; //Радиус атома Al [10^-10 м] {default:1.43}
var R_Ni = 1.24; //Радиус атома Ni [10^-10 м] {default:1.24}
var p_Al = 2.7; //Плотность Al [10^3 кг/м^3] {default:2.7}
var p_Ni = 8.9; //Плотность Ni [10^3 кг/м^3] {default:8.9}
//Константы для материала (End[0])

//Константы, не влияющие на результаты вычисления, но влияют на размерность переменных (Start[1])
var esigma = 1e+6; //Нормирование механического напряжения {default:1e+4}
var eepsilon = 1e+2; //Нормирование максимальных удлинений {default:1e+2}
var fixed = 3; //Количество знаков после запятой {default:3}
var time = 0; //Число итераций {default:0}
//Константы, не влияющие на результаты вычисления (End[0])

//Системные константы (Start[1])
var fl = true; //Чередование атомов {default:true}
var number = 5; //Количество различных сил для правой стенки {default:5}
var inumber = 1; //Текущая сила и её соответствующие {default:1}
var mas = []; //Массив значений координат атомов {default:[]}
```

var F = [number]; //Массив значений сил, действующий на стенку {default:[number]}

var sigma = [number]; //Массив значений механического напряжения {default:[number]}

var L_max = [number]; //Массив значений максимальных удлинений {default:[number]}

var epsilon = [number] //Массив значений упругой деформации {default:[number]}

var clock = [number] //Массив значений времени расчёта {default:[number]}

var geometryNi = new THREE.SphereGeometry(R_Ni, 16, 16); //Визуализация атома Ni

var geometryAl = new THREE.SphereGeometry(R_Al, 16, 16); //Визуализация атома Al

//Системные константы (End[0])

//Варьируемые переменные (Start[1])

var N = 6; //Количество атомов вдоль каждой оси координат {default:6}

var D = 1e-3; //Энергия межатомного взаимодействия [Дж] {default:1e-3}

var dt = 1e-0; //Единица времени, влияет на точность вычислений [с] {default:1e-0}

var dtime = 1*dt; //Минимальное время ожидания для растяжения [с] {default:1*dt}

F[0] = F[1] = 6e-2; //Начальное значение силы, действующий на стенку [Н] {default:2.1e-3}

var dF = 3.2e-3; //Шаг силы, действующей на стенку (Арифметический) [Н] {default:5e-6}

var qF = 2; //Шаг силы, действующей на стенку (Геометрический) {default:2}

var change_F = true; //Арифметическая или Геометрическая прогрессия увеличения силы {default:true}

```
var Lo_max = 55; //Максимальное разрешённое удлинение в % [10^-2]
{default:55}
//Варьируемые переменные (End[0])

//Расчётные переменные для материала (Start[1])
var V_Al = 4*pi*R_Al*R_Al*R_Al/3; //Объём атома Al [10^-30 м^3]
{default:4*pi*R_Al*R_Al*R_Al/3}
var V_Ni = 4*pi*R_Ni*R_Ni*R_Ni/3; //Объём атома Ni [10^-30 м^3]
{default:4*pi*R_Ni*R_Ni*R_Ni/3}
var M_Al = p_Al*V_Al; //Масса атома Al [10^-27 кг] {default:p_Al*V_Al}
var M_Ni = p_Ni*V_Ni; //Масса атома Ni [10^-27 кг] {default:p_Ni*V_Ni}
var V_AlNi = (V_Ni+V_Al)*Math.pow(N,3)/2; //Объём металла AlNi [10^-30 м^3]
{default:(V_Ni+V_Al)*Math.pow(N,3)/2}
//Расчётные переменные для материала (End[0])

//Расчётные переменные для потенциала взаимодействия атомов (Start[1])
var Lo = Math.pow(V_AlNi,1/3); //Длина стороны куба [10^-10 м]
{default:Math.pow(V_AlNi,1/3)}
var Xo = Lo-(R_Al+R_Ni); // Расстояние между центрами крайних атомов [10^-
10 м] {default:Lo-(R_Al+R_Ni)}
var n = Xo/(N-1); //Расстояние между атомов (Математика) [10^-10 м]
{default:Xo/(N-1)}
//Расчётные переменные для потенциала взаимодействия атомов (End[0])

//Вспомагательные переменные (Start[1])
var So = Lo*Lo; //Площадь стенки (приложения силы) [10^-20 м]
{default:Lo*Lo}
var L_min = Lo; //Максимальное сжатие [10^-10 м] {default:Lo}
var L = Lo; //Текущее положение крайней стенки [10^-10 м] {default:Lo}
number++ //Увеличиваем количество сил, добавляя нулевую
```

```
 //Вспомогательные переменные (End[0])

 //Заполнение массивов (Start[1])

//Заполняем значения сил (Start[1])
if (change_F) for (var i = 2; i < number + 1; i++) F[i] = F[0] + (i-
1)*dF;//Арифметическая прогрессия
else for (var i = 2; i < number + 1; i++) F[i] = F[i-1]*qF;//Геометрическая
прогрессия
//Заполняем значения сил (End[0])

for (var i = 0; i < number + 1; i++) clock[i] = dtime;
//Заполняемвремяпоумолчанию
for (var i = 0; i < number + 1; i++) L_max[i] = Lo; //Заполняем максимальное
растяжение
//Заполнение массивов (End[0])

//Вывод дано (Start[1])
document.getElementById('dano').innerHTML =
'<tr><th class="left">e</th><td>' + esigma.toString() + '</td><th
class="right">Точность</br>вычислений</th></tr>' +
'<tr><th class="left">N</th><td>' + parseInt(N*N*N).toString() + '</td><th
class="right">Количество</br>частиц</th></tr>' +
'<tr><th class="left">dr</th><td>' + n.toFixed(fixed).toString() + '</td><th
class="right">Межатомное</br>расстояние</th></tr>' +
'<tr><th class="left">D</th><td>' + D.toFixed(fixed).toString() + '</td><th
class="right">Энергия</br>связи</th></tr>' +
'<tr><th class="left">So</th><td>' + So.toFixed(fixed).toString() + '</td><th
class="right">Площадь силы<br/>приложения</th></tr>' +
```

```
'<tr><th class="left">Lo</th><td>' + Lo.toFixed(fixed).toString() + '</td><th
class="right">Начальная<br/>ширина</th></tr>' +
'<tr><th class="left">dt</th><td>' + dt.toString() + '</td><th
class="right">Шаг<br/>времени</th></tr>' +
'<tr><th class="left">dF</th><td>' + (number-1).toString() + '</td><th
class="right">Количество<br/>сил</th></tr>';
//Вывод дано (End[0])

//Начальные условия для атомов Al и Ni (Start[1])
function Atom(sphere, fl) {
 this.sphere = sphere;
 sphere.positionSTART = {x: 0, y: 0, z: 0}; //начальные координаты
 sphere.positionNEXT = {x: 0, y: 0, z: 0}; //текущиекоординаты
this.velocity = {x: 0, y: 0, z: 0}; //начальные скорости
 this.acceleration = {x: 0, y: 0, z: 0}; //начальное ускорение
 this.weight = (fl)?M_Ni:M_Al; // Чередование массы атомов
 }
//Начальные условия для атомов Al и Ni (End[0])

// Создание объектов (Start[1])
var createObjects = function() {

// Заполняем атомы в пространстве (Start[1])
for (var k = 0; k < N; k++) {
for (var i = 0; i < N; i++) {
for (var j = 0; j < N; j++) {
var sphere;
//Чередование атомов, начиная с AL
sphere = (fl)?new THREE.Mesh(geometryAl, materialAl):new
THREE.Mesh(geometryNi, materialNi);
```

```
fl = !fl;

//Вычисляем начальные координаты атомов (Start[1])
sphere.position.x = n*i;
 sphere.position.y = n*j;
 sphere.position.z = n*k;
//Вычисляем начальные координаты атомов (End[0])

sphere.position.needsUpdate = true;
var atom = new Atom(sphere);
mas.push(atom);
scene.add(atom.sphere);
}
 if (N % 2 == 0) fl = !fl;//Чередование атомов
 }
 if (N % 2 == 0) fl = !fl;//Чередование атомов
 }
// Заполняем атомы в пространстве (End[0])

// Заполняем обозначения в таблице сравнения (Start[1])
document.getElementById('F_[]').innerHTML = '<th class="left">F</th>';
document.getElementById('sigma_[]').innerHTML = '<th class="left">σ</th>';
document.getElementById('L_max_[]').innerHTML = '<th class="left">L</th>';
document.getElementById('epsilon_[]').innerHTML = '<th class="left">ε</th>';
document.getElementById('E_[]').innerHTML = '<th class="left">E</th>';
document.getElementById('clock_[]').innerHTML = '<th class="left">t</th>';
// Заполняем обозначения в таблице сравнения (End[0])

// Заполняем обозначения в таблице результатов (Start[1])
document.getElementById('F2_[]').innerHTML = '<th class="left">F</th>';
```

```
document.getElementById('L_max2_[]').innerHTML = '<th class="left">L</th>';
document.getElementById('clock2_[]').innerHTML = '<th class="left">t</th>';
// Заполняем обозначения в таблице результатов (End[0])

 }
// Создание объектов (End[0])

// Функция обновления объектов (Start[1])
 var updateObjects = function() {

// Перебор координат первого атома (Start[1])
for (var k = 0; k < N; k++) {
for (var i = 0; i < N; i++) {
for (var j = 0; j < N; j++) {

// Перебор координат второго атома (Start[1])
for (var k2 = 0; k2 < N; k2++) {
for (var i2 = 0; i2 < N; i2++) {
for (var j2 = 0; j2 < N; j2++) {
var position1 = mas[k*N*N+i*N+j].sphere.position;
var position2 = mas[k2*N*N+i2*N+j2].sphere.position;
var object = mas[k*N*N+i*N+j];
//Направления векторов
var dx = position1.x - position2.x;
var dy = position1.y - position2.y;
var dz = position1.z - position2.z;
//Расчётрасстояниямеждуцентрамиатомов
var dr = Math.sqrt(dx*dx+dy*dy+dz*dz);  //[10^-10 м]
//dU является силой взаимодействия, производная от потенциала, для
ускорений
```

```
var dU = D*(-12)*Math.pow(n,6)*(Math.pow(dr,6)-
Math.pow(n,6))/Math.pow(dr,13); //[10^10 Н]
//Получаем полное ускорение
var a = dU/object.weight;//[10^37 м/с^2]

//Фиксируем бесконечные значения (Start[1])
if (isFinite(a)) {
//Раскладываем полное ускорение на вектор
object.acceleration.x += a*dx/dr;
object.acceleration.y += a*dy/dr;
object.acceleration.z += a*dz/dr;
}
//Фиксируем бесконечные значения (End[0])

 }
 }
 }
// Перебор координат второго атома (End[0])

 }
 }
 }
// Перебор координат первого атома (End[0])

// Условие для силы, если она есть (Start[1])
 if (F[0]!=0) {
var sum_a = 0; //суммарное ускорение {default:0}

// Перебор координат атомов стенки (Start[1])
for (var k = 0; k < N; k++) {
```

```
for (var j = 0; j < N; j++) {
//Учитываем силу F, действующую на стенку (F=ma)
 //Равномерно распределяем силу на каждую частицу
mas[k*N*N+(N-1)*N+j].acceleration.x += F[inumber]/N/N/mas[k*N*N+(N-
1)*N+j].weight;
//Вычисляем суммарное ускорение
 sum_a += mas[k*N*N+(N-1)*N+j].acceleration.x;
}
 }
// Перебор координат атомов стенки (End[0])

// Перебор координат атомов стенки (Start[1])
for (var k = 0; k < N; k++) {
for (var j = 0; j < N; j++) {
 //Присваиваем стенке среднее ускорение
mas[k*N*N+(N-1)*N+j].acceleration.x = sum_a/N/N;
//Жестко закрепляем правую стенку по двум осям.
mas[k*N*N+(N-1)*N+j].acceleration.x=0;
mas[k*N*N+(N-1)*N+j].acceleration.x=0;
}
 }
// Перебор координат атомов стенки (End[0])

}
// Условие для силы, если она есть (End[0])



//Определяем новые скорости и координаты атомов (Start[1])
for (var k = 0; k < N; k++) {
for (var i = (F[0]==0)?0:1; i < N; i++) {
```

```
for (var j = 0; j < N; j++) {
var object = mas[k*N*N+i*N+j];

//Условия расчётов (Start[1])
if (time == 0) {

//Алгоритм для первого подсчёта координат (Start[1])
//Запоминаем начальные координаты атомов
object.sphere.positionSTART.x = object.sphere.position.x;
object.sphere.positionSTART.y = object.sphere.position.y;
object.sphere.positionSTART.z = object.sphere.position.z;
//Высчитываем новые координаты с помощью неравномерного движения
материальной точки
object.sphere.positionNEXT.x = object.sphere.position.x + dt*object.velocity.x +
(dt*dt/2)*object.acceleration.x;
object.sphere.positionNEXT.y = object.sphere.position.y + dt*object.velocity.y +
(dt*dt/2)*object.acceleration.y;
object.sphere.positionNEXT.z = object.sphere.position.z + dt*object.velocity.z +
(dt*dt/2)*object.acceleration.z;
//Алгоритм для первого подсчёта координат (End[0])

}
else
{

//Интегрирование Верле (алгоритм не самостартующий) (Start[1])
object.sphere.positionNEXT.x = 2*object.sphere.positionNEXT.x -
object.sphere.position.x + (dt*dt)*object.acceleration.x;
object.sphere.positionNEXT.y = 2*object.sphere.positionNEXT.y -
object.sphere.position.y + (dt*dt)*object.acceleration.y;
```

```
object.sphere.positionNEXT.z = 2*object.sphere.positionNEXT.z -
object.sphere.position.z + (dt*dt)*object.acceleration.z;
//Интегрирование Верле (алгоритм не самостартующий) (End[0])

}
//Условия расчётов (End[0])
//Отображаем текущее положение всех атомов
object.sphere.position.x = object.sphere.positionNEXT.x;
object.sphere.position.y = object.sphere.positionNEXT.y;
object.sphere.position.z = object.sphere.positionNEXT.z;
//Запоминаем текущее положение крайней правой стенки
L = object.sphere.position.x;
}
 }
 }
//Определяем новые скорости и координаты атомов (End[0])

time += dt; //Текущее время системы от начального положения атомов
{default:dt}
document.getElementById('Time').innerHTML =
time.toFixed(parseInt(fixed/2)).toString(); //Вывод текущего времени системы

//Условие работы при наличии силы на стенку (Start[1])
if (F[0] != 0) {

//Условие возврата (Start[1])
if ( (sum_a < 0) && (L_max[inumber] > L_max[inumber-1]) && (time > dtime) ) {

//Возврат к начальному состоянию системы (Start[1])
for (var k = 0; k < N; k++) {
```

```
for (var i = (F[0]==0)?0:1; i < N; i++) {
for (var j = 0; j < N; j++) {
var object = mas[k*N*N+i*N+j];
//Возврат скоростей атомов к начальному состоянию
object.acceleration.x = 0;
object.acceleration.y = 0;
object.acceleration.z = 0;
//Возврат скоростей атомов к начальному состоянию
object.velocity.x = 0;
object.velocity.y = 0;
object.velocity.z = 0;
//Обнуление положений атомов в буфере
object.sphere.positionNEXT.x = 0;
object.sphere.positionNEXT.y = 0;
object.sphere.positionNEXT.z = 0;

//Кроме последней итерации, для сохранения визуализации (Start[1])
if (inumber < number) {
//Возврат положений атомов к начальному состоянию
object.sphere.position.x = object.sphere.positionSTART.x;
object.sphere.position.y = object.sphere.positionSTART.y;
object.sphere.position.z = object.sphere.positionSTART.z;
}
//Кроме последней итерации, для сохранения визуализации (End[0])

}
}
}
//Возврат к начальному состоянию системы (End[0])
clock[inumber] = time;
```

```
time = 0; //Начинаем отсчёт времени сначала {default:0}

//Условие по максимальной длине (Start[1])
if (eepsilon*(L_max[inumber]-Lo)/Lo < Lo_max)
{

//Вычисляем данные для результата (Start[1])
sigma[inumber] = esigma*F[inumber]/So; // [10^20 * 10^-6 = 10^14 Па]
{default:esigma*F[inumber]/So}
epsilon[inumber] = eepsilon*(L_max[inumber]-Lo)/Lo; // в % [10^-2]
{default:eepsilon*(L_max[inumber]-Lo)/Lo}

//Нормирование графика в начало координат (Start[1])
if (inumber == 1) {
sigma[0] = sigma[1];
epsilon[0] = epsilon[1];
}
//Нормирование графика в начало координат (End[0])

sigma[inumber] = sigma[inumber] - sigma[0]; // корректировка графика
epsilon[inumber] = epsilon[inumber] - epsilon[0] // корректировка графика
//Вычисляем данные для результата (End[0])

//Нормирование вычислений (Start[1])
if (inumber != 1) {
//Сохранение вычислений для предыдущего состояния с выводом на экран
(Start[1])
document.getElementById('clock_[]').innerHTML += "<td>" +
clock[inumber].toFixed(parseInt(fixed/2)).toString() + "</td>"; // [c]
```

```
document.getElementById('F_[]').innerHTML += "<td>" +
(esigma/eepsilon*F[inumber]).toFixed(fixed).toString() + "</td>"; // [10^-4 Н]
document.getElementById('sigma_[]').innerHTML += "<td>" +
sigma[inumber].toFixed(fixed).toString() + "</td>"; // [10^14 Па]
document.getElementById('L_max_[]').innerHTML += "<td>" +
L_max[inumber].toFixed(fixed).toString() + "</td>"; // [10^-10 м]
document.getElementById('epsilon_[]').innerHTML += "<td>" +
epsilon[inumber].toFixed(fixed).toString() + "</td>"; // в % [10^-2]
document.getElementById('E_[]').innerHTML += "<td>" +
(sigma[inumber]/epsilon[inumber]).toFixed(fixed).toString() + "</td>"; // [10^16 Па]
//Сохранение вычислений для предыдущего состояния с выводом на экран
(End[0])

//Сохранение вычислений для предыдущего состояния с выводом на экран
(Start[1])
document.getElementById('clock2_[]').innerHTML += "<td>" +
clock[inumber].toFixed(parseInt(fixed/2)).toString() + "</td>";
document.getElementById('F2_[]').innerHTML += "<td>" +
(esigma/eepsilon*F[inumber]).toFixed(fixed).toString() + "</td>";
document.getElementById('L_max2_[]').innerHTML += "<td>" +
L_max[inumber].toFixed(fixed).toString() + "</td>";
//Сохранение вычислений для предыдущего состояния с выводом на экран
(End[0])
}
//Нормирование вычислений (End[0])

//Красим фон
renderer.setClearColor( 0xffffff, 0.85 ); //Цвет фона

if (inumber < number) inumber++; //Переходим к следующей силе
```

```
}
//Условие по максимальной длине (End[0])

//Показываем блок результатов (Start[1])
if (inumber == 3) {
document.getElementById('block-result').style.display = 'inline';
document.getElementById('a-block-result').style.display = 'none';
document.getElementById('block-ex').style.display = 'inline';
document.getElementById('a-block-ex').style.display = 'none';
document.getElementById('a-block-result').style.display = 'none';
document.getElementById('a-block-dop').style.display = 'inline';
}
//Показываем блок результатов (End[0])

}
//Условие возврата (End[0])

//Вывод варьируемых вычислений (Start[1])
document.getElementById('sum_a').innerHTML = sum_a.toFixed(fixed).toString();
document.getElementById('L').innerHTML =
(L+R_Ni+R_Al).toFixed(fixed).toString();
if (L+R_Ni+R_Al < L_min) L_min=L+R_Ni+R_Al; //Поиск максимального
сжатия
document.getElementById('L_min').innerHTML = L_min.toFixed(fixed).toString();
if (L+R_Ni+R_Al > L_max[inumber]) L_max[inumber]=L+R_Ni+R_Al; //Поиск
максимального удлинения
document.getElementById('L_max').innerHTML =
L_max[inumber].toFixed(fixed).toString();
document.getElementById('F').innerHTML =
(esigma/eepsilon*F[inumber]).toFixed(fixed).toString();
```

```
//Вывод варьируемых вычислений (End[0])

}
//Условие работы при наличии силы на стенку (End[0])

//Построение графика упругости после всех расчётов (Start[1])
if ((((L_max[number] > L_max[number-1]) && (epsilon[number] > epsilon[number-
1])) || ( (eepsilon*(L_max[inumber]-Lo)/Lo > Lo_max) && (inumber > 1) ) || (L >
3/2*Lo) || (L < 1/3*Lo)) && (F[0]!=0)) {

// Заполняем обозначения в таблицах (Start[1])
if (fl) {

// Заполняем обозначения в таблице сравнения (Start[1])
document.getElementById('clock_[]').innerHTML +=
'<th>Время</br>системы</th>';
document.getElementById('F_[]').innerHTML +=
'<th>Сила</br>приложения</th>';
document.getElementById('sigma_[]').innerHTML +=
'<th>Механическое</br>напряжение</th>';
document.getElementById('L_max_[]').innerHTML +=
'<th>Максимальное</br>удлинение</th>';
document.getElementById('epsilon_[]').innerHTML +=
'<th>Упругая</br>деформация</th>';
document.getElementById('E_[]').innerHTML +=
'<th>Модуль</br>упругости</th>';
// Заполняем обозначения в таблице сравнения (End[0])

// Заполняем обозначения в таблице результатов (Start[1])
```

```
document.getElementById('clock2_[]').innerHTML += '<th
class="right">Время</br>системы</th>';
document.getElementById('F2_[]').innerHTML += '<th
class="right">Сила</br>приложения</th>';
document.getElementById('L_max2_[]').innerHTML += '<th
class="right">Максимальное</br>удлинение</th>';
// Заполняем обозначения в таблице результатов (End[0])

fl = !fl;
}
// Заполняем обозначения в таблицах (End[0])

//Закрываем лишние блоки (Start[1])
document.getElementById('block-ex').style.display = 'none';
document.getElementById('block-result').style.display = 'inline';
document.getElementById('block-vivod').style.display = 'none';
document.getElementById('block-autor').style.display = 'none';
//Закрываем лишние блоки (End[0])

//Показываем блоки меню (Start[1])
document.getElementById('a-block-ex').style.display = 'inline';
document.getElementById('a-block-result').style.display = 'none';
document.getElementById('a-block-vivod').style.display = 'inline';
document.getElementById('a-block-autor').style.display = 'inline';
//Показываем блоки меню (End[0])

//Закрываем лишние блоки в результатах (Start[1])
document.getElementById('clock_[]').style.display = 'none';
document.getElementById('F_[]').style.display = 'none';
document.getElementById('L_max_[]').style.display = 'none';
```

```
//Закрываем лишние блоки в результатах (End[0])

renderer.setClearColor( 0xffffff, 1.0 ); //Красим фон в белый цвет для документа

// Центрируем результаты (Start[1])
document.getElementById('block-result').style.bottom =
0.2*document.body.clientHeight - 150 +'px';
document.getElementById('block-result').style.left =
0.225*document.body.clientWidth +'px';
// Центрируем результаты (End[0])

google.charts.load('current', {packages: ['corechart', 'line']});
google.charts.setOnLoadCallback(drawTrendlines);

//Построение графика (Start[1])
function drawTrendlines() {

//Входные данные для графика (Start[1])
var data = new google.visualization.DataTable();
data.addColumn('number', 'Упругая деформация');
data.addColumn('number', 'Напряжение');
data.addRows([
//[0, 0], //Начальная точка без деформации
 [parseFloat(epsilon[1]),parseFloat(sigma[1])],
[parseFloat(epsilon[2]),parseFloat(sigma[2])],
 [parseFloat(epsilon[3]),parseFloat(sigma[3])],
 [parseFloat(epsilon[4]),parseFloat(sigma[4])],
 [parseFloat(epsilon[5]),parseFloat(sigma[5])],
 [parseFloat(epsilon[6]),parseFloat(sigma[6])],
 [parseFloat(epsilon[7]),parseFloat(sigma[7])],
```

```
 [parseFloat(epsilon[8]),parseFloat(sigma[8])],
 [parseFloat(epsilon[9]),parseFloat(sigma[9])],
 [parseFloat(epsilon[10]),parseFloat(sigma[10])],
 [parseFloat(epsilon[11]),parseFloat(sigma[11])],
 [parseFloat(epsilon[12]),parseFloat(sigma[12])],
 [parseFloat(epsilon[13]),parseFloat(sigma[13])],
 [parseFloat(epsilon[14]),parseFloat(sigma[14])],
 [parseFloat(epsilon[15]),parseFloat(sigma[15])],
 [parseFloat(epsilon[16]),parseFloat(sigma[16])],
 [parseFloat(epsilon[17]),parseFloat(sigma[17])],
 [parseFloat(epsilon[18]),parseFloat(sigma[18])],
 [parseFloat(epsilon[19]),parseFloat(sigma[19])],
 [parseFloat(epsilon[20]),parseFloat(sigma[20])],
]);
//Входные данные для графика (End[0])

//Настройки отображения графика (Start[1])
var options = {
curveType: 'function', //сглаживаниеграфика
 'legend':'none',
hAxis: {
 title: 'Упругая деформация, %' //{default:Упругая деформация, %}
 },
vAxis: {
 title: 'Напряжение, Па' //{default:Напряжение, Па}
},
colors: ['#AB0D06', '#007329'],
width: 0.5*document.body.clientWidth, //{default:0.75*document.body.clientWidth}
height: 0.6*document.body.clientHeight
//{default:0.75*document.body.clientHeight}
```

```
};
//Настройки отображения графика (End[0])

//Вывод графика (Start[1])
var chart = new google.visualization.LineChart(document.getElementById('block-
graf-2'));
chart.draw(data, options);
//Вывод графика (End[0])

}
//Построение графика (End[0])

}
//Построение графика упругости после всех расчётов (End[0])

}
// Функция обновления объектов (End[0])

//Основная часть программы (End[0])

//Техническаяреализация (Start[1])
var scene = new THREE.Scene();
var camera = new THREE.PerspectiveCamera(60, window.innerWidth /
window.innerHeight, 1, 1000);

controls = new THREE.TrackballControls( camera );
 controls.rotateSpeed = 1.0;
 controls.zoomSpeed = 1.2;
 controls.panSpeed = 0.8;
 controls.noZoom = false;
```

```
 controls.noPan = false;
 controls.staticMoving = true;
 controls.dynamicDampingFactor = 0.3;
 controls.keys = [ 65, 83, 68 ];
controls.addEventListener( 'change', render );

var renderer = window.WebGLRenderingContext ? new THREE.WebGLRenderer() :
new THREE.CanvasRenderer();
renderer.setSize(window.innerWidth, window.innerHeight); //Размер окна
renderer.setClearColor( 0xffffff, 1.00 ); //Цветфона
document.body.appendChild(renderer.domElement);

var pointLight = new THREE.PointLight(0xFFFFFF);
pointLight.position.set(100, 100, 250);
scene.add(pointLight);

var pointLight = new THREE.PointLight(0xFFFFFF);
pointLight.position.set(-100, -100, -250);
scene.add(pointLight);

stats = new Stats();
 stats.domElement.style.position = 'absolute';
 stats.domElement.style.top = '0px';
 stats.domElement.style.zIndex = 100;
document.body.appendChild( stats.domElement );

createObjects();

 //Позиция камеры (Start[1])
 camera.position.z = 6*N*n/(R_Ni+R_Al);
```

```
 camera.position.x = 3*N*n/(R_Ni+R_Al);
 camera.position.y = 5*N*n/(R_Ni+R_Al);
stats.update();
 //Позиция камеры (End[0])

//Обновление изображения (Start[1])
var render = function () {
updateObjects();
renderer.render(scene, camera);
stats.update();
requestAnimationFrame(render);
controls.update();
 };
 //Обновление изображения (End[0])

render();
 //Техническая реализация (End[0])

</script>
<!-- Код программы (End[0]) -->

<!-- uCoz Копирайт (хостинг) -->
$POWERED_BY$
</body>
<!-- Body (End[0]) -->

<!-- Спасибо Антону Лоскутову за помощь с визуализацией; Контакты:
vk.com/antonloskutov -->
<!-- HTML (End[0]) -->
```

1 СЛАЙД — ТИТУЛЬНЫЙ ЛИСТ.

Приветствую вас, меня зовут Ягубов Роман Борисович, я студент 4-го курса Аэрокосмического факультета 3-й группы. Темой моей выпускной квалификационной работы является «Численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики».

2 СЛАЙД — ВВЕДЕНИЕ

Прежде всего стоит сказать, что бурное развитие современных вычислительных технологий позволяет исследовать различные материалы на более глубоком уровне, а также изучать их структуры при нарушении целостности и деформировании.

3 СЛАЙД — КОНЦЕПТУАЛЬНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Целью моей работы являлось численное моделирование изменения упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики, которая была разделена на следующие задачи.

1. Определение начального положения атомов сплава.
2. Определение конечного положения атомов сплава при деформации, вызванной внешней силой.
3. Вычисление численного значения механического напряжения и упругой деформации для различного количества атомов и различного значения внешней силы, приводящей к малым деформациям твёрдого тела.
4. Построение графического сравнения данных величин.

В данной работе был взят сплав алюминия и никеля. Изображения данных металлов, а также их сплав представлены на этом слайде.

4-5 СЛАЙД — МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Зададим количество атомов каждого металла в сплаве, их радиусы и плотности известны из справочных материалов. После проведения реакции выясним какую элементарную ячейку образует интерметаллид. Получим кристаллическую решётку и найдём координаты каждой частицы.

В данной работе был взят сплав AlNi, он образовал элементарную ячейку кристаллической решётки в форме куба. Одну стенку данного сплава

жёстко закрепили, к другой приложили внешнюю силу, чтобы незначительно деформировать тело.

Применив следующую систему уравнений, мы сможем найти силы взаимодействия между атомов, ускорения атомов, уравнение движения атомов, механическое напряжение и упругую деформацию материала.

6 СЛАЙД — МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Коротко пройдёмся по основному алгоритму данной работы.

Начнём с самого главного — с метода, на котором основана цель работы — метода молекулярной динамики. Метод позволяет исследовать материал на молекулярном уровне, представляя его как множество упорядоченных частиц.

Основное правило гласит, что для описания движения атомов применяют классическую механику. То есть, зная силы действующие на частицу и её массу, можно найти ускорение данной частицы.

Второе положение нам повествует, что силы взаимодействия между атомов могут быть найдены через потенциал.

7 СЛАЙД — МЕЖАТОМНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Сам же потенциал как раз описывает взаимодействия между частицами. Большинство потенциалов зависят от расстояния между частицами и моделируют взаимодействие, при котором частицы, приближающиеся близко друг к другу, отталкиваются, а частицы отдаляющиеся — притягиваются. В итоге получается, что система всегда находится в состоянии колебаний.

Мною был взят потенциал ЛЕННАРДА-ДЖОНСА, который способен моделировать деформацию веществ в твердом состоянии и довольно прост в вычислениях, в виду присутствия малого количества неизвестных параметров.

8 СЛАЙД — ИНТЕГРИРОВАНИЕ ВЕРЛЕ

Осталось определись следующее положение частиц с течением времени, но уравнение движения при разложении в ряд Тейлора имеет скорость, для вычисления которой придется воспользоваться явной разностной схемой, которая часто бывает неустойчивой, и может привести к непредвиденным результатам.

На помощь приходит замечательный алгоритм Лу Верле, который позволяет найти новое положение частицы, зная лишь ускорение и прошлое положение. Алгоритм выводится простым сложением уравнений движения, расписанных в ряд Тейлора для будущего и предыдущего положения частиц.

9 СЛАЙД — УПРУГИЕ СВОЙСТВА

Применяя все предыдущие уравнения, учитывая действие внешней силы, получаем колеблющуюся систему частиц, для которой определяем механическое напряжение и упругую деформацию, вызванную данным механическим напряжением.

10 СЛАЙД — ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА

Создав одинаковое механическое напряжение, получим результаты упругой деформации для разного количества частиц, из которых состоит наше твёрдое тело.

11 СЛАЙД — ГРАФИЧЕСКОЕ СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Построив график, заметим что при увеличении количества частиц кривая приближается к прямой. Чтобы получить результаты с более высокой точностью, требуется огромное количество времени и более мощные современные вычислительные системы.

12 СЛАЙД — ВЫВОДЫ

В результате исследования путѐм компьютерного моделирования подтвердилось, что при малых деформациях зависимость механического напряжения от упругой деформации для жаростойкого интерметаллида на основе метода молекулярной динамики при использовании потенциала Леннард-Джонса и алгоритма численного интегрирования Верле оказалась линейной, что подтверждается теоретическими выкладками — закон Гука.

КОНЕЦ

Не смотря на возможные ошибки, выражаю благодарность своему научному руководителю Димитриенко Юрию Ивановичу за столь интересную для меня тему выпускной квалификационной работы бакалавра.

Спасибо за внимание! Я готов ответить на ваши вопросы!

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионально образования
«Московский государственный технический университет имени Николая Эрнестовича Баумана (национальный исследовательский университет)»
Факультет «Аэрокосмический»
Кафедра «Вычислительная математика»

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

на тему:

«Численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики»

Научный руководитель:
Зав. каф. ФН-11, д.ф.-м.н., проф.
Димитриенко Юрий Иванович

Выполнил:
Студент 4-го курса, гр. **АК3-81**
Ягубов Роман Борисович

г. Москва
2016

ВВЕДЕНИЕ

Нарушение целостности материалов при деформировании создаёт глобальные проблемы в описании упругих свойств в рамках классической механики сплошной среды. Но, с другой стороны, развитие современных технологий позволяет изучать структуры деформированных тел. Причём не только наблюдать под микроскопом за элементами внутренней структуры твёрдых тел, но оказывать влияние на эту структуру на микроуровне в области нанотехнологий .

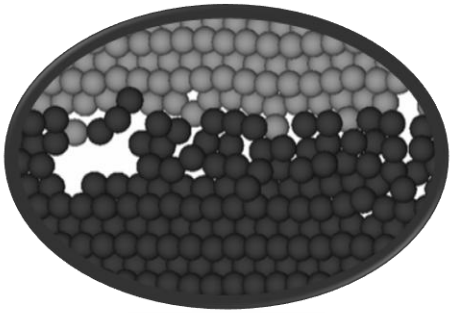

***Рис. 1**: Деформированная структура.*

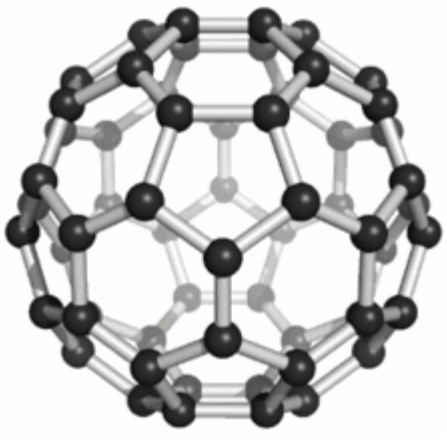

***Рис. 2**: Наноструктура.*

Бурное развитие вычислительной техники нам позволяет вернуться к проблеме описания сред на новом уровне. Моделирование твёрдых тел, становиться важным связующим элементом между теоретическими выкладками и реальным экспериментом.

Появляются возможности визуализировать модели многократно на основе численных данных, получаемых на основе численных результатов. За последние несколько десятилетий наиболее разработанным вариантом для подобных исследований является метод молекулярной динамики.

КОНЦЕПТУАЛЬНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

***Рис. 3**: Никель, алюминий и их сплав в виде порошка.*

Численно смоделировать изменение упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики.

1. Определить начальное положение атомов сплава в зависимости от их количества с помощью известных химических соотношений и простейших математических преобразований.
2. Определить конечное положение атомов сплава после приложения внешней силы к некоторым из них, учитывая межатомное взаимодействие с помощью метода молекулярной динамики.
3. Вычислить численные значения для упругих свойств таких, как механическое напряжение и упругая деформация, для жаростойких интерметаллидных материалов при различном значении внешней силы, действующей на одну из сторон материала.
4. Построить графическое сравнение механического напряжения, вызываемого в образце действующей силой в зависимости от упругой деформации образца, вызванной механическим напряжением.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

- **Начальные условия**

$$\langle N|R_i|\rho_i\rangle \rightarrow R_0 = \{\vec{r_1}; \vec{r_2}; \dots; \vec{r_N}\}$$

- **Система уравнений**

$$\begin{cases} \vec{F}(r_{ij}) = \dfrac{dU(r_{ij})}{\vec{d}r_{ij}} = \dfrac{dU(r_{ij})}{dr_{ij}} \cdot \dfrac{\overrightarrow{r_{ij}}}{r_{ij}} \\ m_i \ddot{\vec{r_i}} = \sum_{j=1}^{N} \vec{F}(r_{ij}) + \overrightarrow{F_0^i} \\ \vec{r_i}(t+dt) = \vec{r_i}(t) + \dot{\vec{r_i}}(t)dt + \ddot{\vec{r_i}}(t)\dfrac{dt^2}{2} + O(dt^3) \\ \sigma = \dfrac{F_0}{S}, \quad \varepsilon = \dfrac{l - l_0}{l_0}, \end{cases}$$

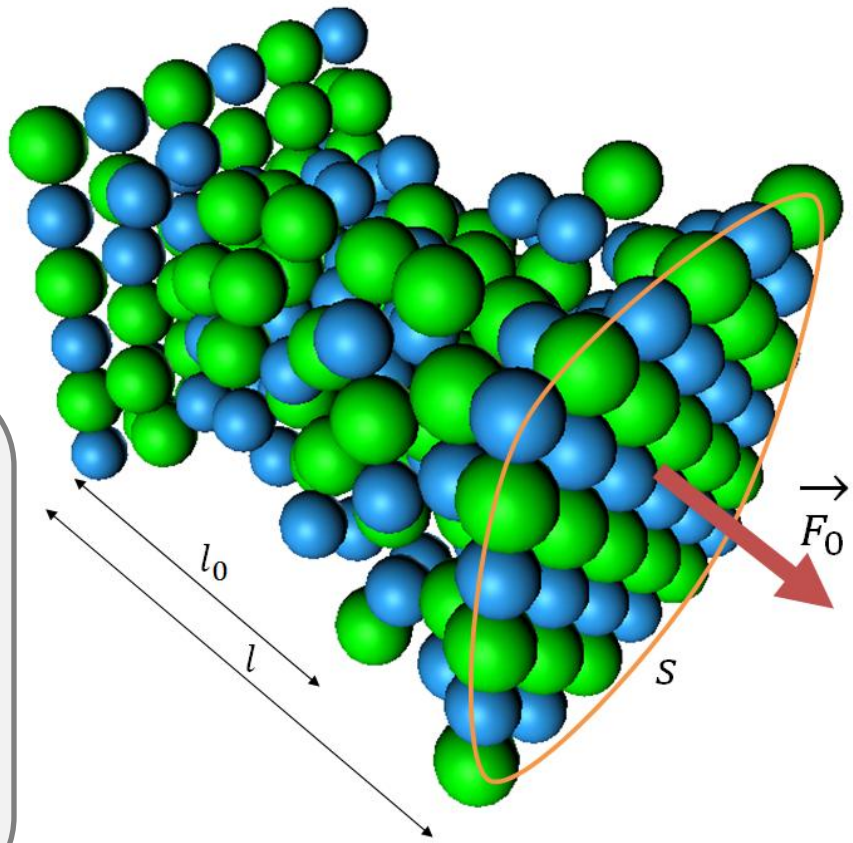

***Рис. 4**: Графическое представление поставленной задачи.*

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

- **Пояснение переменных**

где $\vec{F}$ – сила, действующая на i-й атом со стороны j-го [Н];

r_{ij} – расстояние между i-м и j-м атомами [м];

U – потенциал, описывающий взаимодействие атомов [Дж];

$\overrightarrow{r_{ij}}$ – вектор, между координатами i-го и j-го атомами [м];

m_i – масса i-го атома [кг];

$\ddot{\vec{r}}_i$, $\dot{\vec{r}}_i$, $\vec{r}_i$ – ускорение, скорость и координаты i-го атома [$\frac{м}{с^2}$, $\frac{м}{с}$, м];

t, dt – текущее время системы и шаг времени [с];

σ – напряжение, вызываемое в образце действующей силой [Па];

$\vec{\sigma}_0$ – приложенная сила на одну из сторон твёрдого тела [Н];

$\vec{\sigma}_0^i$ – внешняя приложенная сила на i-й атом стенки тела [Н];

S – площадь поверхности к которой приложена сила [м^2];

ε – упругая деформация образца, вызванная напряжением [–][1];

l – максимальная ширина образца [м];

l_0 – начальная длина образца [м].

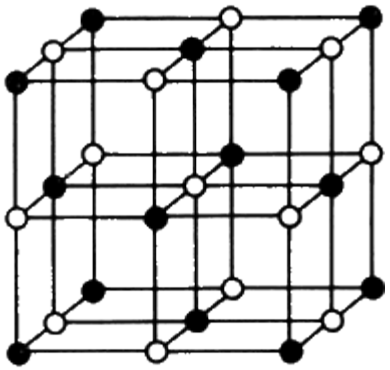

***Рис. 5**: Модель кристаллической решётки исследуемого материала.*

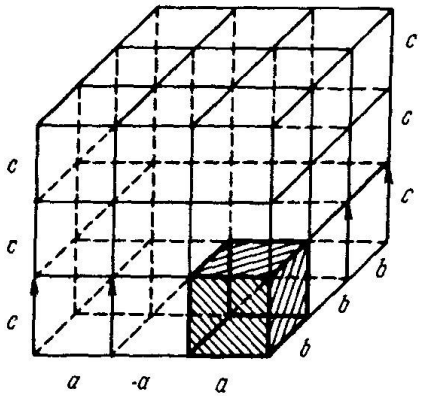

***Рис. 6**: Элементарная ячейка.*

МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Одним из «прогнозирующих» методов, реализуемый на компьютере, является молекулярной динамики (метод МД). Его широко применяют в физике и химии для моделирования структуры и её изменений. Например, для органических молекул: белков , ДНК и жидких кристаллов .

С помощью метода МД можно проследить динамику молекулярных систем. Метод позволяет моделировать твёрдые, жидкие и газообразные вещества с различными начальными условиями.

- **Основные положения**

1. Для описания движения атомов применяют классическую механику, получая уравнение движения.
2. Силы межатомного взаимодействия можно представить в через потенциальные силы.
3. Знание траекторий движения частиц системы с высокой точностью на больших промежутках времени не является необходимым для получения результатов макроскопического характера.
4. Наборы значений, получаемые в ходе расчетов, распределены в соответствии с некоторой функцией, описывающей эти зависимости.

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = \sum_{j=1}^{N} \vec{F}(r_{ij})$$

где $\vec{F}$ – сила, действующая на i-й атом со стороны j-го [Н];

r_{ij} – расстояние между i-м и j-м атомами [м];

m_i – масса i-го атома [кг];

$\ddot{\vec{r}}_i$ – ускорение i-го атома [$\frac{м}{с^2}$].

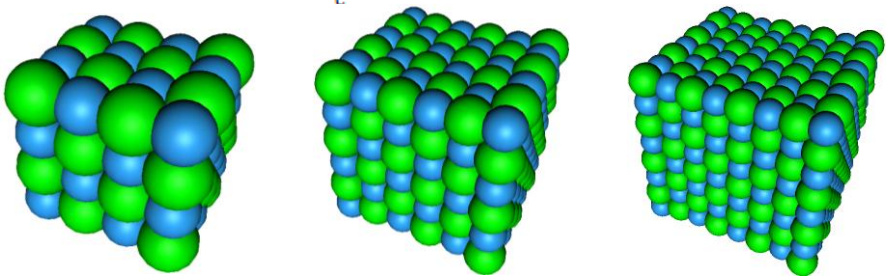

***Рис. 7**: Пример кристаллических решёток.*

$$\vec{F}(r_{ij}) = \frac{dU(r_{ij})}{d\vec{r}_{ij}} = \frac{dU(r_{ij})}{dr_{ij}} \cdot \frac{\overrightarrow{r_{ij}}}{r_{ij}}$$

где $\vec{F}$ – сила, действующая на i-й атом со стороны j-го [Н];

r_{ij} – расстояние между i-м и j-м атомами [м];

U – потенциал, описывающий взаимодействие атомов [Дж];

$\overrightarrow{r_{ij}}$ – вектор между координатами i-го и j-го атомами [м].

МЕЖАТОМНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Межатомное взаимодействие — это электромагнитное взаимодействие электронов и ядра одного атома с электронами и ядром другого атома. Взаимодействие между атомов зависит от расстояния между атомами и электронных оболочек атомов. Мерой межатомного взаимодействия является энергия взаимодействия атомов. Энергия взаимодействия атомов лежит в широком диапазоне и обычно описывается потенциалами.

- **ПОТЕНЦИАЛ ЛЕННАРДА-ДЖОНСА**

Это простая модель парного взаимодействия неполярных молекул, описывающая зависимость энергии взаимодействия двух частиц от расстояния между ними. Зависимость достаточно реалистично передаёт свойства реального взаимодействия сферических неполярных молекул и поэтому широко используется в расчётах и при компьютерной визуализации.

$$U(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$$

где U – потенциал взаимодействия [Дж];

r – расстояние между частицами [м];

ε – глубина потенциальной ямы [Дж];

σ – расстояние, при котором потенциал обнуляется [м].

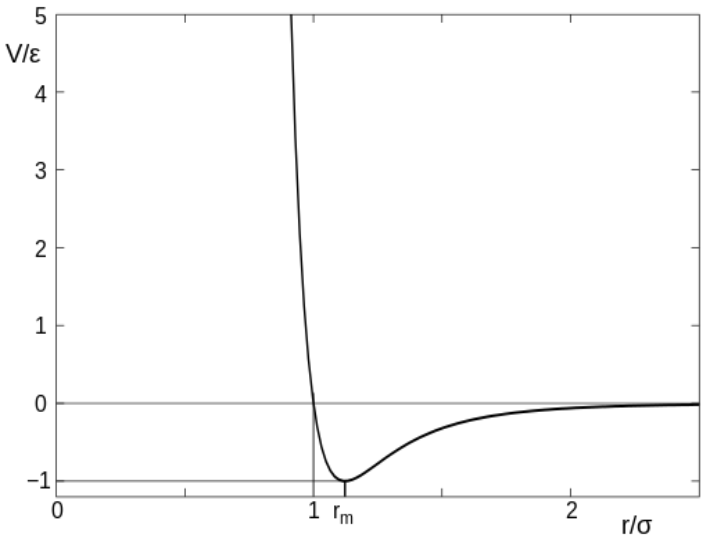

Рис. 8: Характерный вид потенциала.

ИНТЕГРИРОВАНИЕ ВЕРЛЕ

Это метод, который используется для интегрирования уравнений движения материальной точки. Чаще всего применяют в методе молекулярной динамики и компьютерных играх. Алгоритм получил своё название в честь Лу Верле, после публикации в 1967 году.

- **ОСНОВНОЙ АЛГОРИТМ**

$$\vec{x}(t+\Delta t) = 2\vec{x}(t) - \vec{x}(t-\Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4)$$

где $\vec{x}(t-\Delta t)$ – предыдущее положение точки [м];

$\vec{x}(t+\Delta t)$ – следующее положение точки [м];

$\vec{x}(t)$ – текущее положение точки [м];

$\vec{a}(t)$ – текущее ускорение точки $[\frac{м}{с^2}]$;

$O(\Delta t^4)$ – малые приращения функции [м];

t – текущее время системы [с] ;

Δt – шаг времени [с].

- **ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ**

Основная суть алгоритма состоит в том, что новые положения частиц можно найти, зная текущие и предыдущие положения их, то есть без использования скоростей или разностных схем, которые часто неустойчивые. В виду этого метод получается очень эффективным и не накладывает никаких ограничений.

УПРУГИЕ СВОЙСТВА

Это набор свойств твёрдых материалов, которые способны возвращаться в начальную форму при упругой деформации.

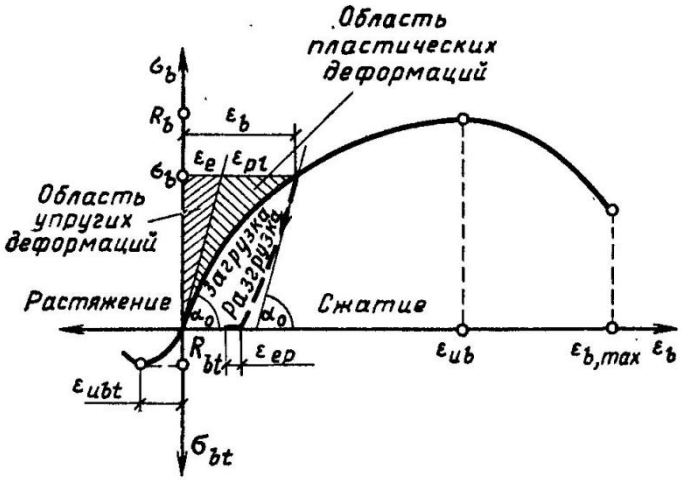

Рис. 9: Виды деформаций.

- **МОДУЛЬ УПРУГОСТИ**

$$E \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d\sigma}{d\varepsilon}$$

где E – модуль упругости [Па];

σ – напряжение, вызываемое в образце действующей силой [Па];

ε – упругая деформация образца [%].

- **МЕХАНИЧЕСКОЕ НАПРЯЖЕНИЕ**

$$Q = \frac{F}{S}$$

где Q – механическое напряжение [Па];

F – сила, возникающая в теле при деформации [Н];

S – площадь поверхности, к торой приложена сила [м^2].

- **УПРУГАЯ ДЕФОРМАЦИЯ**

$$\varepsilon = \frac{l - l_0}{l_0}$$

где ε – упругая деформация [%];

l – размеры тела после приложения внешних сил [м, м^2, м^3];

l_0 – размеры тела без приложения внешних сил [м, м^2, м^3].

ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА

Таб. 1: Численные результаты для 8,64,216,512,1000 частиц.

N	б, ТПа	0.42754	0.85508	1.28262	1.71016	2.13770
8	ε, %	0.03816	0.07851	0.11867	0.15947	0.20092
64		0.02984	0.06490	0.10505	0.15030	0.20086
216		0.03132	0.06703	0.10716	0.15172	0.20091
512		0.03134	0.06696	0.10697	0.15152	0.20087
1000		0.03120	0.06665	0.10658	0.15121	0.20091

ГРАФИЧЕСКОЕ СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

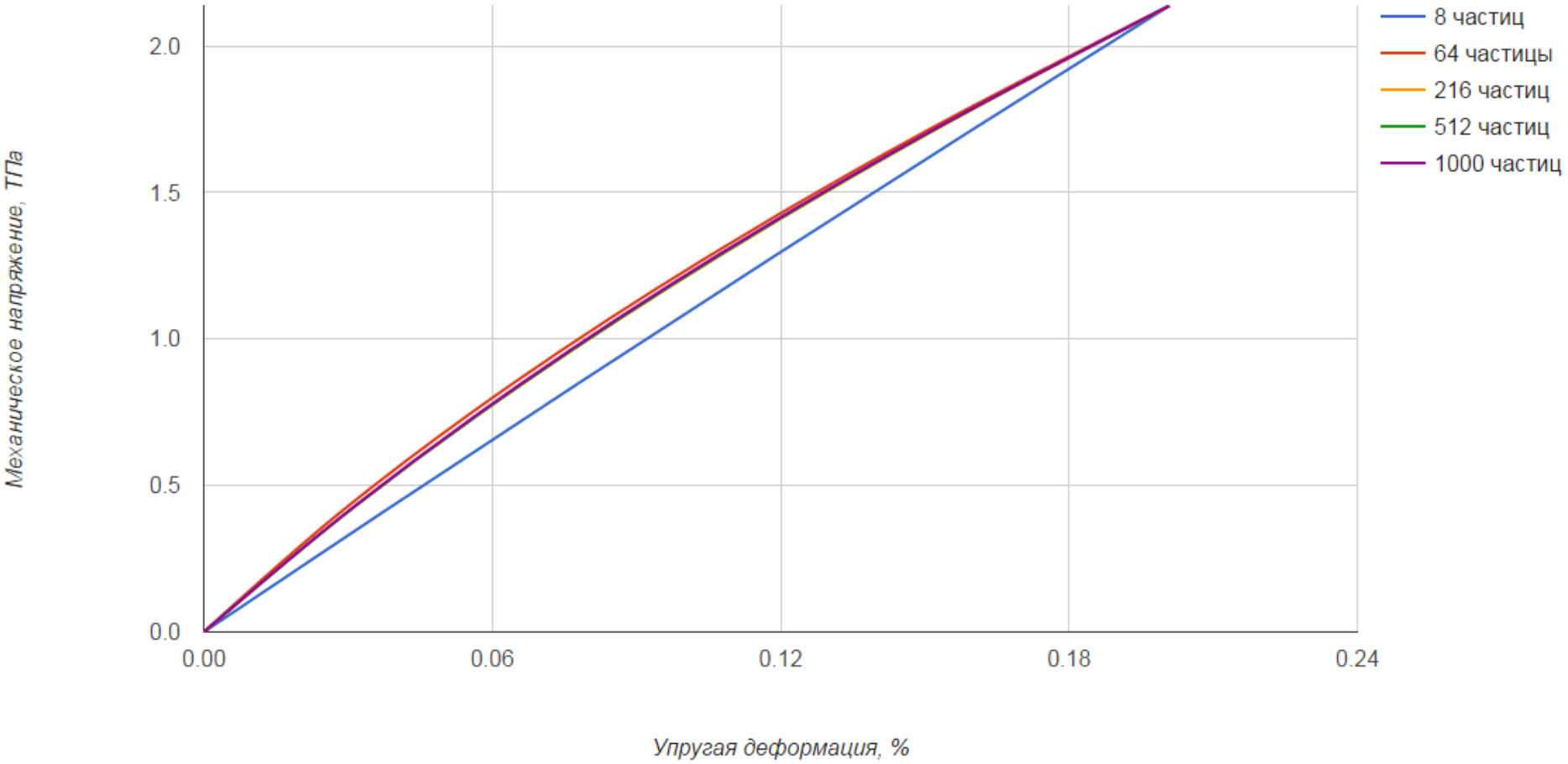

***Рис. 10**: Графическое сравнение для 8,64,216,512,1000 частиц.*

ВЫВОДЫ

При малых деформациях зависимость механического напряжения от упругой деформации для жаростойкого интерметаллида AlNi на основе метода молекулярной динамики при использовании потенциала Леннард-Джонса и алгоритма численного интегрирования Верле оказалась линейной, что подтверждается теоретическими выкладками — закон Гука.

1. Метод молекулярной динамики с математической точки зрения огромных сложностей не вызывает. Алгоритм довольно прост, что делает данный метод весьма привлекательным при наличии огромных вычислительных ресурсов.
2. Из-за огромного количество конфигураций системы, взаимодействий частиц, появляются огромные трудности сопоставления полученных результатов исследования к реальным данным.
3. Моделирование различных реальных систем представляет собой одно из перспективных направлений в ближайшем будущем, ввиду стремительного развития компьютерных технологий.

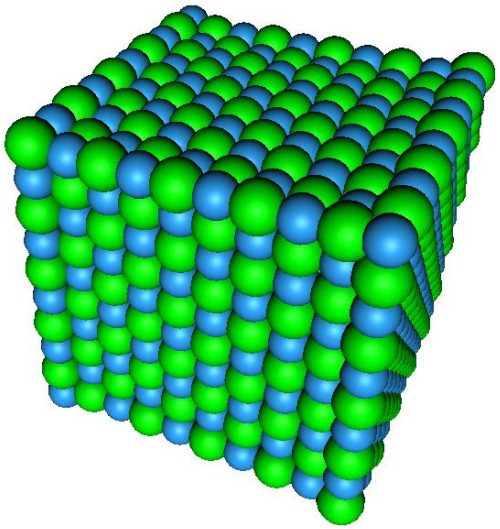

***Рис. 11**: Кристалл 10x10.*

Результаты могут отражать в какой-то мере действительность только в том случае, если они совпадают с экспериментальными данными, полученными в нашей действительности. Нужно понимать, что результаты компьютерного моделирования являются гипотезой . Однако, это не просто догадка, а предположение, построенное вычислительной техникой на основе заданных исходных данных, соответствующих реальности.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана»
(МГТУ им. Н.Э. Баумана)

ФАКУЛЬТЕТ Аэрокосмический факультет

КАФЕДРА ФН-11

РАСЧЕТНО-ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

К ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЕ

НА ТЕМУ:

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ ЖАРОСТОЙКИХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Студент АК3-81 _____ **15.06.2016** Р. Б. Ягубов
(Группа) (Подпись, дата) (И.О.Фамилия)

Руководитель ВКР _____ **15.06.2016** Ю.И. Димитриенко
(Подпись, дата) (И.О.Фамилия)

Нормоконтролер _____ **15.06.2016** С.С. Кудрявцева
(Подпись, дата) (И.О.Фамилия)

2016 г.

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана»
(МГТУ им. Н.Э.Баумана)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой ФН-11
(Индекс)
_____ Ю.И. Димитриенко
(И.О.Фамилия)
« 08 » февраля 2016 г.

З А Д А Н И Е
на выполнение выпускной квалификационной работы магистра

Студент группы АКЗ-81

Ягубов Роман Борисович
(фамилия, имя, отчество)

Тема квалификационной работы численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики.

Источник тематики (НИР кафедры, заказ организаций и т.п.)
НИР кафедры, выполняемые по заказу Минобрнауки и промышленных предприятий (АО "ВПК"НПО Машиностроения").

Тема квалификационной работы утверждена распоряжением по факультету АК № 15 от « 4 » декабря 2015 г.

Часть 1. Теоретическая.
Разработать математическую модель жаростойкого интерметаллида алюминид никеля и на основе метода молекулярной динамики составить алгоритм нахождения упругих свойств сплава (механического напряжения, вызываемого действующей силой в зависимости от упругой деформации, вызванной механическим напряжением).

Часть 2. Вычислительная часть.
Разработать алгоритм численного моделирования упругих свойств для жаростойких интерметаллидных материалов (на примере сплава алюминия и никеля) на основе метода молекулярной динамики.

Часть 3. Научно-исследовательская часть.
Провести исследование зависимости упругих свойств (механического напряжения, вызываемого действующей силой в зависимости от упругой деформации, вызванной

механическим напряжением) при малых деформациях для жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики. Сравнить с известными теоретическими данными.

Оформление квалификационной работы:

Расчетно-пояснительная записка на 99 листах формата А4.

Перечень графического (иллюстративного) материала (чертежи, плакаты, слайды и т.п.)
12 слайдов: титульный лист, введение, концептуальная постановка задачи, математическая постановка задачи(2), метод молекулярной динамики, межатомное взаимодействие, интегрирование Верле, упругие свойства, численные результаты эксперимента, графическое сравнение результатов, выводы.

Дата выдачи задания « 08 » февраля 2016 г.

В соответствии с учебным планом выпускную квалификационную работу выполнить в полном объеме в срок до « 11 » июня 2016 г.

Руководитель квалификационной работы _____**08.02.2016** Ю.И. Димитриенко
(Подпись, дата) (И.О.Фамилия)

Студент _____**08.02.2016** Ягубов Р. Б.
(Подпись, дата) (И.О.Фамилия)

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана»
(МГТУ им. Н.Э. Баумана)

ФАКУЛЬТЕТ Аэрокосмический

КАФЕДРА ФН-11

ГРУППА АК3-81

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой ФН-11
(Индекс)

_____ Ю.И. Димитриенко
(И.О.Фамилия)

« 08 » февраля 2016 г.

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы

студента: Ягубова Романа Борисовича
(фамилия, имя, отчество)

Тема квалификационной работы численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики

№ п/п	Наименование этапов выпускной квалификационной работы	Сроки выполнения этапов		Отметка о выполнении	
		план	факт	Должность	ФИО, подпись
1.	Задание на выполнение работы. Формулирование проблемы, цели и задач работы	*08.02.2016* *Планируемая дата*		Руководитель ВКР	Ю.И. Димитриенко
2.	1 часть Теоретическая	*08.03.2016* *Планируемая дата*		Руководитель ВКР	Ю.И. Димитриенко
3.	Утверждение окончательных формулировок решаемой проблемы, цели работы и перечня задач	*28.04.2016* *Планируемая дата*		Заведующий кафедрой	Ю.И. Димитриенко
4.	2 часть Вычислительная	*28.05.2016* *Планируемая дата*		Руководитель ВКР	Ю.И. Димитриенко
5.	3 часть Научно-исследовательская часть	*28.05.2016* *Планируемая дата*		Руководитель ВКР	Ю.И. Димитриенко
6.	1-я редакция работы	*30.05.2016* *Планируемая дата*		Руководитель ВКР	Ю.И. Димитриенко
7.	Подготовка доклада и презентации	*09.06.2016*			
8.	Заключение руководителя	*09.02.2016* *Планируемая дата*		Руководитель ВКР	Ю.И. Димитриенко
9.	Допуск работы к защите на ГЭК (нормоконтроль)	*15.06.2016* *Планируемая дата*		Нормоконт-ролер	С.С. Кудрявцева
10.	Внешняя рецензия	_____ *Планируемая дата*			
11.	Защита работы на ГЭК	*21.06.2016* *Планируемая дата*			

Студент _____**21.06.2016**
(подпись, дата)

Руководитель работы _____**21.06.2016**
(подпись, дата)

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана»
(МГТУ им. Н.Э. Баумана)

НАПРАВЛЕНИЕ НА ЗАЩИТУ
выполнения выпускной квалификационной работы

Председателю
Государственной Экзаменационной Комиссии №____

факультета Аэрокосмический МГТУ им. Н.Э. Баумана

Направляется студент Ягубов Роман Борисович группы АКЗ-81 на защиту выпускной квалификационной работы на тему численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики.

Декан факультета _____ *Белов Александр Иванович*

« 16 » июня 2016 г.

Справка об успеваемости

Студент Ягубов Р. Б. за время пребывания в МГТУ им. Н.Э. Баумана с 2012 г. по 2016 г. полностью выполнил учебный план со следующими оценками: отлично – 20 %, хорошо – 69%, удовлетворительно – 11 %.

Инспектор деканата _____ *Симоньянц Ростислав Петрович*

Заключение руководителя выпускной квалификационной работы

Студент в результате исследования путём компьютерного моделирования подтвердил, что при малых деформациях зависимость механического напряжения от упругой деформации для жаростойкого интерметаллида на основе метода молекулярной динамики при использовании потенциала Леннард-Джонса и алгоритма численного интегрирования Верле оказалась линейной, что подтверждается теоретическими выкладками — закон Гука.

Квалификационная работа заслуживает оценки «отлично»

Руководитель Димитриенко Юрий Иванович

« 15» июня 2016 г.

Заключение кафедры о выпускной квалификационной работе

Выпускная квалификационная работа просмотрена и студент Ягубов Р. Б. может быть допущен к защите этой работы в Государственной Экзаменационной Комиссии.

Зав. кафедрой **ФН-11** Димитриенко Юрий Иванович

« 15» июня 2016 г.

Отзыв руководителя
на выпускную квалификационную работу Ягубова Р.Б.
«Численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики»

Целью работы Ягубова Р.Б. является исследование зависимости упругих свойств (механического напряжения, вызываемого действующей силой в зависимости от упругой деформации, вызванной механическим напряжением) при малых деформациях для жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики.

За время работы им была изучена литература по методам молекулярной динамики по двум направлениям, виды взаимодействия частиц и интегрирование уравнений движений материальной точки.

В ходе работы Ягубов Р.Б. на основе теоретических данных и заданных начальных условий написал программу на языке программирования JavaScript совместно с версткой HTML и оформлением CSS.

В результате исследования путём компьютерного моделирования подтвердил, что при малых деформациях зависимость механического напряжения от упругой деформации для жаростойкого интерметаллида на основе метода молекулярной динамики при использовании потенциала Леннард-Джонса и алгоритма численного интегрирования Верле оказалась линейной, что подтверждается теоретическими выкладками — закон Гука.

За время работы Ягубов Р.Б. проявил себя специалистом, способным самостоятельно разбираться в математических постановках и осуществлять моделирование на современной вычислительной техники.

Квалификационная работа заслуживает оценки «отлично», а ее автор — присвоения квалификации бакалавра по направлению «Математика и компьютерные науки».

Научный руководитель, д.ф.-м.н., проф. _____ Димитриенко Ю.И.

ВЫПИСКА

из протокола заседания кафедры «Вычислительная математика и математическая физика» ФН-11

№10 от 01 июня 2016

Слушали: о представлении квалификационной работы Ягубова Романа Борисовича (руководитель Димитриенко Юрий Иванович) «Численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики» к защите на заседание ГЭК по направлению 02.03.01 «Математика и компьютерные науки»

В результате рассмотрения работы установлено, что:

1) работа оригинальна, представленные в ней результаты являются новыми, оригинальными и достоверными, имеют научную и практическую значимость;
2) список литературы актуален и содержит ссылок32шт.;
3) содержит ссылки на публикации отечественных и зарубежных специалистов с 2005 г. в количестве 11 шт.;
4) ссылки на публикации до 2005 г. обоснованы и содержаться в списке литературы в количестве 21 шт.;
5) самоцитирование обосновано и составляет 0 шт.

Постановили: рекомендовать квалификационную работу Ягубова Романа Борисовича(руководитель Димитриенко Юрий Иванович) «Численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики»к защите на заседании ГЭК по направлению 02.03.01 «Математика и компьютерные науки»

Зав. кафедрой ФН-11 Ю. И.Димитриенко

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана»
(МГТУ им. Н.Э. Баумана)

А К Т
проверки на объем заимствования и возможности размещения в ЭБС "Банк ВКР"

Студент группы АК3-81 Ягубов Роман Борисович
Тема ВКР Численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики.

Экспертная комиссия кафедры ФН-11 по проверке выпускных квалификационных работ бакалавров на объем заимствования, в том числе содержательного, в составе: председателя - заведующего кафедрой ФН-11, проф. Ю.И. Димитриенко, эксперта от кафедры ФН-11 МГТУ им. Н. Э. Баумана - доц. И.К. Краснова, эксперта от АО "ВПК "НПО Машиностроения" - проф., В.П. Котенева, в период с «01» июня 2016 г. по «14» июня 2016 г. провела экспертизу материалов **выпускной квалификационной работы бакалавра Ягубова Р.Б.** объемом 98 страниц текста, 39 рисунков, 16 таблиц, библиография – 32 наименований на объем заимствования, в том числе содержательного, на наличие неправомочных заимствований, и на предмет возможности или невозможности размещения в Электронно-библиотечной системе (ЭБС) «Банк ВКР» МГТУ им. Н. Э. Баумана.

Комиссия установила:

сведения, содержащиеся в рассматриваемых материалах, **находятся в компетенции МГТУ им. Н.Э. Баумана;**

сведения, содержащиеся в рассматриваемых материалах: новый алгоритм численного решения задачи моделирования упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики, имеющей, как фундаментальное научное, так и прикладное значение, который может быть использован для выполнения проектных работ по авиационно-ракетной тематике, и который в настоящее время не опубликован в открытой печати, **имеют действительную или потенциальную коммерческую ценность** в силу неизвестности их третьим лицам, в соответствии с решением правообладателя и поэтому **не могут быть размещены в ЭБС «Банк ВКР»** МГТУ им. Н. Э. Баумана (никакая их часть).

Объем заимствования текста не превышает цифры, установленной "Положением о нормоконтроле, размещений текстов в электронно-библиотечной системе и проверке на объем заимствования выпускных квалификационных работ, бакалавров, специалистов, магистров МГТУ им.Н.Э. Баумана", что с учетом корректного заимствования соответствует требованиям и условиям допуска **к защите** ВКР бакалавров.

Заключение:

Студент допущен к защите ВКР в Государственной Экзаменационной Комиссии.

Председатель экспертной комиссии:
Заведующий кафедрой _____ _____ Ю.И. Димитриенко
(Подпись)

Члены комиссии:

_____ _____ И.К. Краснов
(Подпись)

_____ _____ В.П. Котенев
(Подпись)

Согласен: _____ _____ Р.Б. Ягубов
(Подпись)

УТВЕРЖДАЮ

Руководитель НУК
«Фундаментальные науки»
_____ Гладышев В.О.
«____» _____ 2016 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ
о возможности открытого опубликования

выпускной квалификационной работы бакалавра студента Ягубова Романа Борисовича на тему «Численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики»

Экспертная комиссия в составе: председателя – заведующего кафедрой ФН2, д.т.н., профессора Кувыркина Г.Н., представителя РСП – заведующего кафедрой ФН11, д.ф.-м.н., профессора Димитриенко Ю.И., члена комиссии: доцента кафедры ФН11, к.ф.-м.н. Захарова А.А., утвержденная приказом № 02.01-03/1259 дсп от 22 июля 2015 г., в период с 16 мая 2016 г. по 25 мая 2016 г. провела экспертизу материалов выпускной квалификационной работы бакалавра студента Ягубова Р.Б. на тему «Численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики» на предмет отсутствия в них сведений, составляющих государственную тайну, и возможности их открытого опубликования.

Руководствуясь: Законом РФ «О государственной тайне», «Перечнем сведений, отнесенных к государственной тайне», утвержденным Указом Президента РФ от 30.11.1995 №1203 с последующими изменениями и дополнениями, Правилами отнесения сведений, составляющих государственную тайну, к различным степеням секретности, утвержденными постановлением Правительства РФ от 04.09.1994 №870, а также Перечнем сведений, подлежащих засекречиванию Минобрнауки России, утвержденным приказом Минобрнауки России от 10.11.2014 №36с, комиссия установила:

Сведения, содержащиеся в рассматриваемых материалах, находятся в компетенции МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Сведения, содержащиеся в рассматриваемых материалах части 1 «Теоретическая»; части 2 «Вычислительная»; не подпадают под действие Перечня сведений, составляющих государственную тайну (статья 5 Закона РФ «О государственной тайне»), не относятся к Перечню сведений, отнесенных к государственной тайне, утвержденному Указом Президента РФ от 30.11.1995 №1203 и не подлежат засекречиванию.

Сведения, содержащиеся в рассматриваемых материалах части 3. «Исследовательская», находятся также в компетенции МГТУ им. Н.Э. Баумана и АО «ВПК «НПО Машиностроения».

На основании письма от АО «ВПК «НПО Машиностроения» от 10 июня 2016 г. исх. № **135 /120** данные материалы, полученные при прохождении преддипломной практики, **не рекомендуется размещать в открытом доступе.**

На основании вышеизложенного, выпускная квалификационная работа бакалавра студента Ягубова Р.Б. на тему «Численное моделирование упругих свойств жаростойких интерметаллидных материалов на основе метода молекулярной динамики» не может быть опубликована в открытой печати.

Председатель комиссии	_____	Кувыркин Г.Н.
Представитель РСП	_____	Димитриенко Ю.И.
Члены комиссии:	_____	Захаров А.А.