



Министерство образования и науки Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального 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. АКЗ-81

Ягубов Роман Борисович

г.

Москва



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. 2: Наноструктура.

Бурное развитие вычислительной техники нам позволяет вернуться к проблеме описания сред на новом уровне. Моделирование твёрдых тел, становится 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.

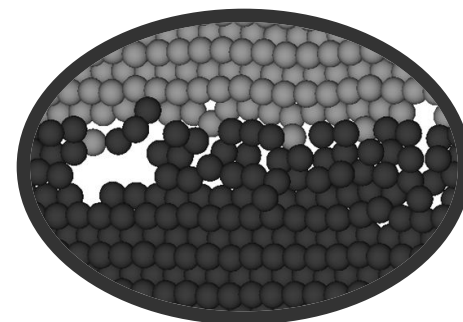


Рис. 1: Деформированная структура.



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

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

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = \sum_{j=1}^N \vec{F}(r_{ij}) + \vec{F}_0^l$$

$$\vec{r}_i(t+dt) = \vec{r}_i(t) + \dot{\vec{r}}_i(t)dt + \ddot{\vec{r}}_i(t)\frac{dt^2}{2} + O(dt^3)$$

$$\sigma = \frac{F_0}{S}, \quad \varepsilon = \frac{l-l_0}{l_0}$$

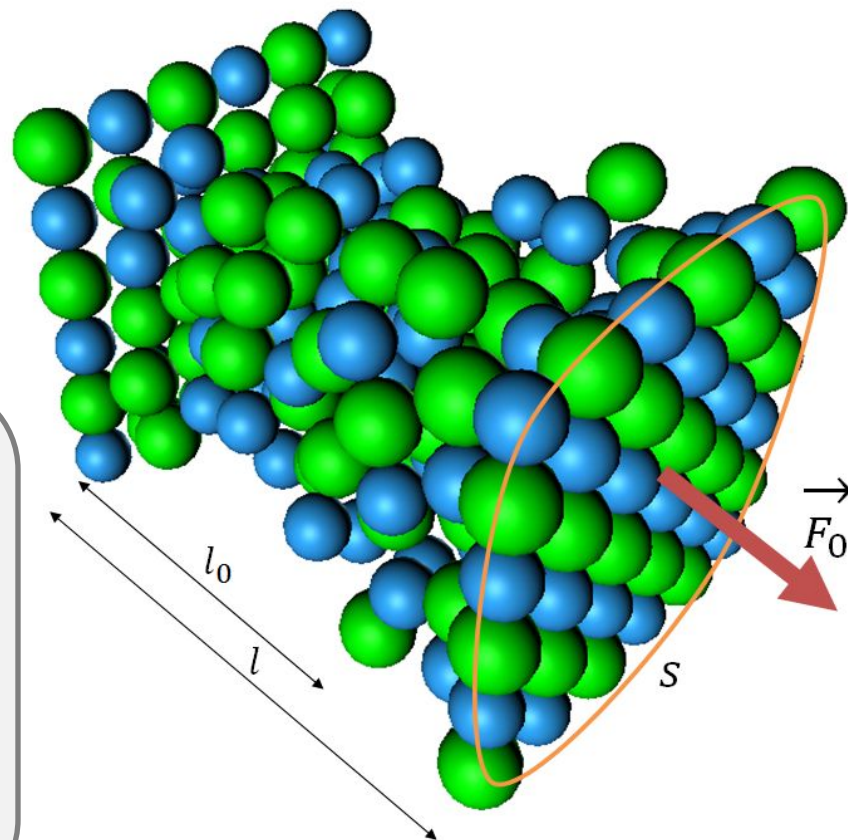


Рис. 4: Графическое представление поставленной задачи.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

• Пояснение

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];

\vec{r}_{ij} – вектор, между координатами i -го и j -го атомами [м];

m_i – масса i -го атома [кг];

$\ddot{r}_i, \dot{r}_i, \vec{r}_i$ – 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];

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 [м²];

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

l – максимальная ширина образца [м];

l_0 – начальная длина образца [м].

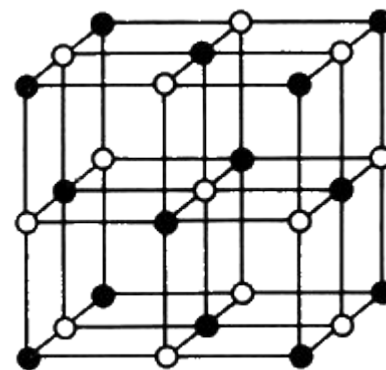


Рис. 5: Модель кристаллической решётки исследуемого материала.

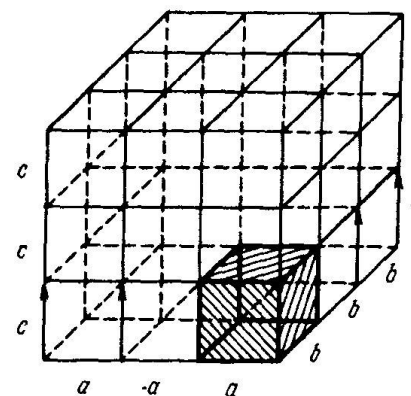


Рис. 6: Элементарная ячейка.



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 виде потенциальных сил.
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 [$\frac{м}{с^2}$].

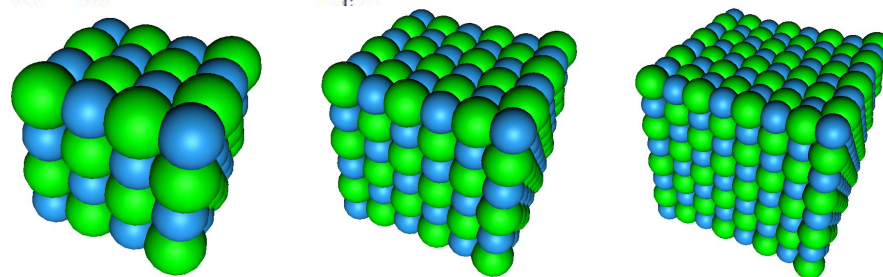


Рис. 7: Пример кристаллических решёток.

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

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];

\vec{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 атомами 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].

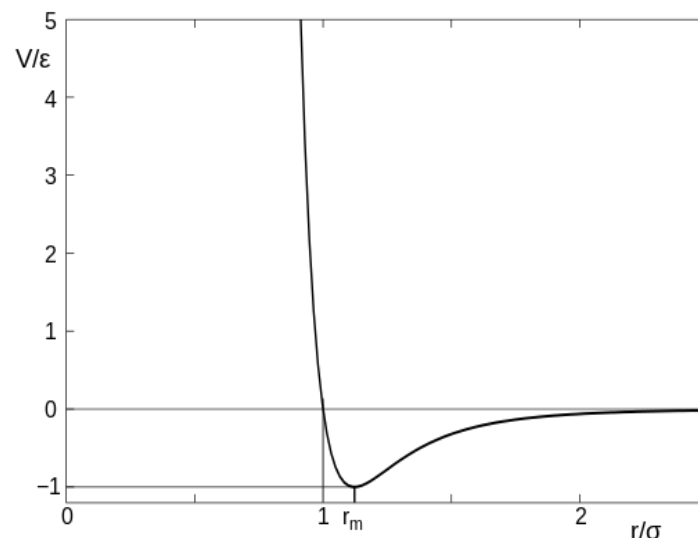


Рис. 8: Характерный вид потенциала.



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.

• 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 которой приложена сила [м²].

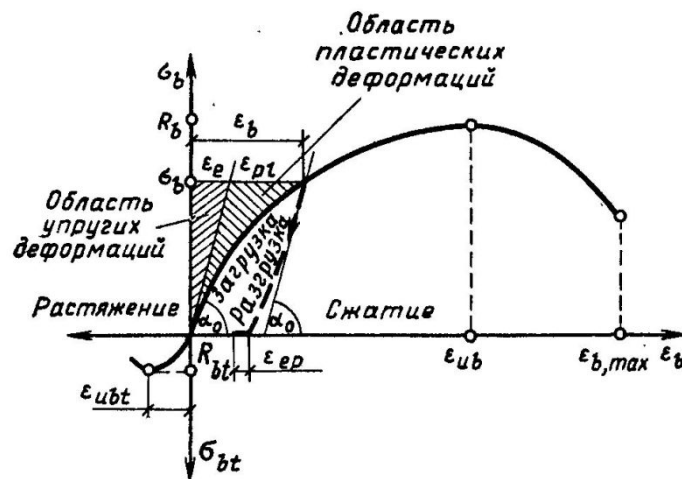


Рис. 9: Виды деформаций.

• УПРУГАЯ ДЕФОРМАЦИЯ

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

где ε – упругая деформация [%];

l – размеры тела после приложения внешних сил [м, м², м³];

l_0 – размеры тела без приложения внешних сил [м, м², м³].



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

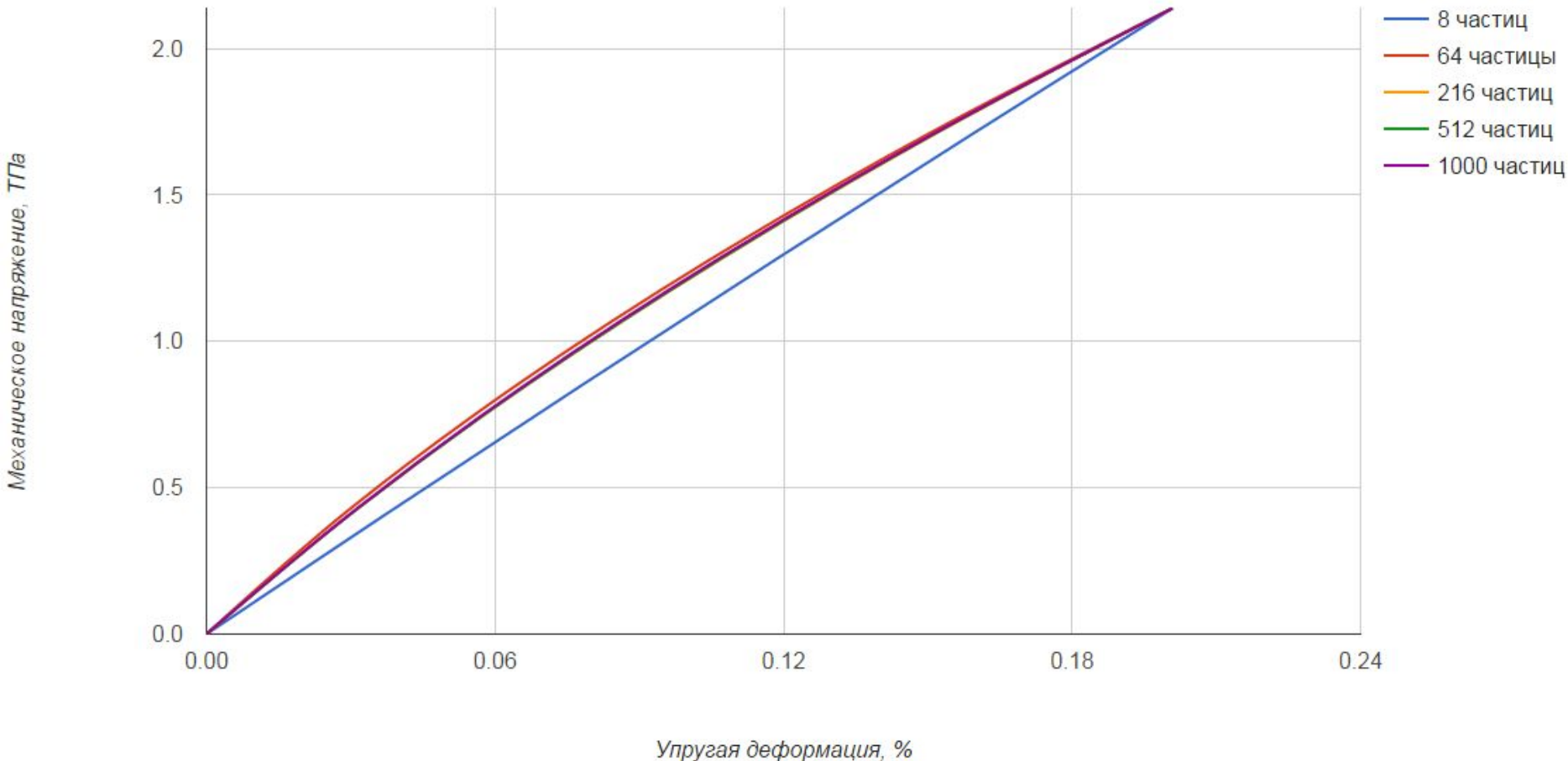


Рис. 10: Графическое сравнение для 8,64,216,512,1000 частиц.



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 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

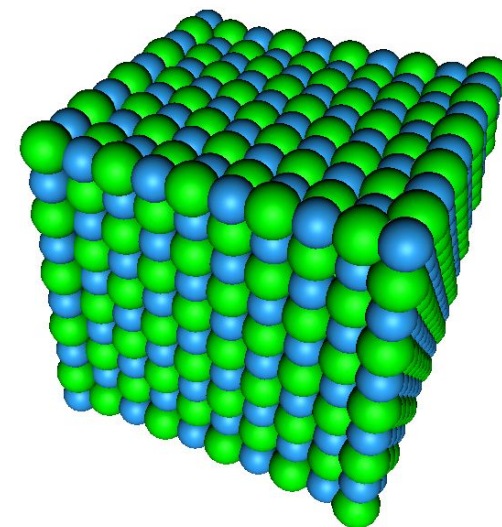


Рис. 11: Кристалл 10x10.

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