

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Физико-механический институт
Высшая школа теоретической механики и математической физики

Работа допущена к защите
директор ВШТМиМФ,
д. ф.-м. н., чл.-корр. РАН
_____ А. М. Кривцов
« ____ » _____ 2024г.

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА
ИССЛЕДОВАНИЕ УПРУГИХ МОДУЛЕЙ АМОРФНОГО
МАТЕРИАЛА**

По направлению 01.03.03 «Механика и математическое моделирование»
по образовательной программе
01.03.03 Механика и математическое моделирование сред с
микроструктурой

Выполнил

студент гр.3630103/60101

С.С. Хватов

Руководитель

Старший преподаватель

С.А. Щербинин

ВШТМиМФ, к.ф.-м.н.

Консультант,

ассистент ВШТМиМФ

А.Д. Ершов

Санкт-Петербург

2024

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО**

Физико-механический институт

Высшая школа теоретической механики и математической физики

УТВЕРЖДАЮ

Директор ВШТМиМФ

А. М. Кривцов

«__» _____ 20__ г.

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

студенту Хватову Степану Сергеевичу гр. 5030103/00302

1. Тема работы: Исследование упругих модулей
2. Срок сдачи студентом законченной работы: 10.06.2024
3. Исходные данные по работе: актуальные научные публикации по теме работы, параметры исследуемых материалов
4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов): Реализация математической модели аморфного материала, проведение численных экспериментов, анализ полученных данных
5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): не предусмотрено
6. Консультанты по работе: Ершов А.Д. – ассистент ВШТМиМФ
7. Дата выдачи задания 28.02.2024

Руководитель ВКР _____ Щербинин С.А. – старший преподаватель ВШТМиМФ,
к.ф.-м.н.

Задание принял к исполнению 28.02.2024

Студент _____ Хватов С.С.

РЕФЕРАТ

30 страниц, 8 рисунков, 3 таблица

МЕТОД ДИНАМИКИ ЧАСТИЦ, УПРУГИЕ МОДУЛИ, АМОРФНЫЕ
МАТЕРИАЛЫ, КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ,
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ИЗОТРОПНОСТЬ
АМОРФНОГО ТЕЛА, КРУЧЕНИЕ

Тема выпускной квалификационной работы: «Исследование упругих модулей аморфного материала».

В данной работе была рассмотрена структура аморфного материала, смоделированная с помощью метода динамики частиц, с задаваемыми параметрами, а также изучение изотропности аморфного материала. Работа состоит из нескольких частей: реализация модели аморфного материала, проведение экспериментов по кручению по разным осям образца, анализ полученных данных.

THE ABSTRACT

30 pages, 8 pictures, 3 table

KEY WORDS: PARTICLE DYNAMICS, ELASTIC MODULES, AMORPHIC

MATERIALS, COMPUTER MATHEMATIC SIMULATION, ISOTROPY AMORPHIC MATERIALS, TORSION.

Topic of the final qualifying work: «Investigation of elastic moduli of amorphous material».

In this paper we considered the structure of amorphous material modeled by means of the particle dynamics method with set parameters, as well as the study of isotropy of amorphous material. The work consists of several parts: implementation of the amorphous material model, torsion experiments on different axes of the sample, and analysis of the dataset

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
Глава 1. МЕТОД ДИНАМИКИ ЧАСТИЦ.....	8
1.1. Общая теория	8
1.2. Формулировка проблемы.....	10
Глава 2. РАСЧЕТНАЯ МОДЕЛЬ	12
2.1. Уравнение движения	12
2.2. Численная схема	12
2.3. Потенциал взаимодействия	14
2.4 Структура материала.....	15
2.5 Расчет упругих характеристик.	19
Глава 3. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ.....	25
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	32
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	34

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы математическое моделирование всё чаще используется для симуляции и изучения различных физических процессов. Примеры его применения включают моделирование откольных разрушений, процессов добычи нефти и газа, движения сыпучих материалов и многое другое. Одним из наиболее популярных методов моделирования является метод динамики частиц. Этот метод обладает широким спектром применения: от описания процессов на молекулярном уровне до явлений звёздного масштаба. В последние годы метод динамики частиц стал часто применяться для описания материалов на мезоуровне, где частицы уже не связаны с молекулярной структурой вещества [6]. В этой связи возникает вопрос о выборе различных параметров, задаваемых в модели. Поскольку частицы на этом уровне могут не иметь прямого соответствия физическим объектам, установление параметров для достижения желаемых свойств модели становится сложной задачей, особенно для материалов со случайной упаковкой, где аналитическое нахождение искомых зависимостей порой невозможно.

Аморфные материалы обладают рядом уникальных свойств, которые делают их привлекательными для применения. Эти материалы обладают высокой прочностью и твердостью, термической стабильностью, высокой проводимостью и другими преимуществами, что делает их полезными в использовании.

Аморфный материал широко применяются в различных сферах производства: в электронике, строительстве, медицине, энергетике, химической и космических промышленности. Например, Аморфный кремний используется в тонкопленочных транзисторах для ЖК-дисплеев и сенсорных экранов, благодаря его способности образовывать однородные тонкие пленки. Также он применяется в тонкопленочных солнечных батареях, где он используется для преобразования солнечной энергии в электрическую. А аморфные материалы, такие как кремнеземное стекло, являются основным

материалом для производства оптоволоконных кабелей. В ядерных реакторах аморфные материалы используются в качестве защитных и изоляционных материалов, благодаря их устойчивости к радиационному повреждению, а в энергетической промышленности аморфные материалы применяются для теплоизоляции трубопроводов и оборудования, благодаря их изотропным тепловым свойствам.

В том числе аморфные материалы используются в нефтегазодобыче. Например, в скважинах аморфные силикатные и фосфатные стекла находят применение в качестве материалов с высокими термостойкими и изоляционными свойствами [3]. Изотропные тепловые характеристики этих стекол позволяют обеспечить равномерное распределение тепловой энергии, что способствует эффективной теплоизоляции. Это качество особенно важно в условиях бурения на больших глубинах, где температура может значительно повышаться. Также, благодаря изотропным свойствам, аморфные металлические покрытия, часто называемые металлическими стеклами, применяются для защиты бурового оборудования и труб от коррозии, что обеспечивает равномерную защиту и значительно увеличивает срок службы. В прокладывании трубопровода аморфные тела играют такую же большую роль. Для снижения силы трения и предотвращения отложений используется такой аморфный материал, как стеклоэмаль, которая обеспечивает гладкую поверхность. Аморфные пористые материалы используются в качестве катализаторов и фильтров в процессах переработки нефти и газа. Их изотропные пористые структуры обеспечивают равномерное распределение активных центров и эффективную фильтрацию.

Как говорилось ранее, аморфные тела обладают такой чертой, как изотропность. Это понятие означает, что они относительно независимы от оптических, механических и других физических свойств и направления, в котором на них воздействуют внешние силы. Это означает, что независимо от того, в каком направлении мы измеряем механические, оптические или тепловые свойства материала, мы получим одинаковые результаты. Для

изотропных материалов характерны равномерные распределения свойств, такой как модули упругости.

Глава 1. МЕТОД ДИНАМИКИ ЧАСТИЦ

1.1. Общая теория

Метод динамики частиц является важным и широко используемым инструментом для моделирования и исследования поведения материалов на различных масштабах. Основная идея метода заключается в представлении материала в виде совокупности взаимодействующих объектов, таких как материальные точки или твердые тела, для которых записываются классические уравнения динамики Ньютона. Взаимодействие между частицами описывается через потенциалы, которые обеспечивают отталкивание при сближении и притяжение при удалении. Этот метод позволяет детально изучать микроскопическое поведение системы и исследовать её макроскопические свойства[15].

Одним из наиболее развитых методов в области динамики частиц является метод молекулярной динамики, который, развиваясь на протяжении последних десятилетий, активно применяется для изучения физико-химических свойств различных материалов. В классической молекулярной динамике моделируемые частицы, представляя собой атомы и молекулы, составляют исследуемый материал [11]. В настоящее время потенциалы межатомного взаимодействия для большинства ключевых материалов, будучи хорошо изученными, позволяют моделировать динамику молекулярных систем с высокой точностью. Открыв принципиально новые механические и физические свойства материалов, структурные элементы которых находятся в нанометровом диапазоне, учёные значительно усилили интерес к моделированию материалов на микроскопическом уровне.

Для проведения таких исследований, когда объем материала достаточно велик, как, например, при изучении макроскопических объектов, применение молекулярной концепции становится невозможным [12]. В таких случаях частицы должны представлять собой элементы более крупного масштаба, такие как зерна материала. Этот подход, развиваясь в области механики, активно используется в качестве альтернативы или дополнения к

континуальному описанию материалов при их сильном деформировании и разрушении, а также при изучении гранулированных и сыпучих сред. На этом масштабном уровне взаимодействия частиц обычно подразделяются на продольные (центральные) и касательные составляющие, причем наряду с упругими взаимодействиями часто учитываются и непотенциальные силы, особенно значимые в касательном направлении. Существует несколько модификаций этого подхода, отличающихся в основном по области применения. Одним из самых распространенных методов является метод дискретных элементов, также известный как «крупнозернистая» молекулярная динамика или динамика мезочастиц. Этот метод, объединяя элементы молекулярной и макроскопической динамики, позволяет эффективно моделировать и исследовать поведение материалов на мезоуровне, обеспечивая более глубокое понимание их физико-механических свойств.

Преимущество метода частиц перед методами, основанными на сплошной среде, заключается в том, что он требует меньше начальных предположений о свойствах материала. При использовании данного метода взаимодействия описываются посредством потенциалов. Существует огромное количество потенциалов, однако даже использование простейшего потенциала взаимодействия, например потенциала Леннарда-Джонса, и небольшой диссипации, позволяет моделировать сложные явления, такие как пластичность, образование трещин, изменение свойств материала при изменении температуры и фазовые переходы. В сплошной среде для каждого из этих явлений требуется отдельная теория, в то время как в методе частиц они возникают автоматически при решении уравнений движения. Необратимость механических процессов в этом методе достигается за счет превращения механической энергии длинноволновых движений в тепловую энергию хаотического движения частиц.

В динамике частиц потенциал взаимодействия играет аналогичную определяющим уравнениям в механике сплошной среды роль. Однако его

структура гораздо более проста: это функция, зависящая только от расстояния между частицами. В отличие от определяющих уравнений, которые содержат сложные тензорные характеристики напряжения, деформации и термодинамические параметры. Конкретный вид потенциала взаимодействия определяется путем сопоставления механических свойств материала, полученных в результате компьютерного моделирования, с реальными данными. Для некоторых простых характеристик, таких как упругие модули, это сравнение может быть выполнено аналитически. В остальных случаях соответствие устанавливается на основе результатов компьютерных экспериментов.

1.2. Формулировка проблемы

Для многих регулярных двухмерных и трехмерных решеток аналитически были выведены соотношения между упругими характеристиками моделируемых материалов и параметрами, задаваемыми в методе динамики частиц [1]. Однако регулярные упаковки частиц не подходят для описания аморфных тел из-за отсутствия у последних дальнего порядка. В аморфных материалах частицы упорядочены только в пределах ближайших соседей. В связи с этим, в данной работе рассматривается проблема нахождения зависимости между упругими модулями, характеризующими аморфный материал, и параметрами, задаваемыми в процессе математического моделирования. Также в данной работе была поставлена задача проверить свойства изотропности аморфного тела.

Цель:

Исследовать упругие модули аморфного материала путем моделирования методом динамики частиц и проверить свойства изотропности. Для достижения этой цели были поставлены следующие задачи:

1. Создание модели аморфного материала с использованием метода динамики частиц.

2. Проведение серии численных экспериментов по кручению образца и вычисление упругих модулей.

3. Анализ полученных результатов.

Глава 2. РАСЧЕТНАЯ МОДЕЛЬ

2.1. Уравнение движения

В данной работе изучалось движение частиц и взаимодействие между собой.

$$m\ddot{\underline{r}}_j = \sum_{i \neq j} F_{ij}(\underline{r}_{ij}) + \mu \dot{\underline{r}}_j \quad (1)$$

На формуле 1 представлено уравнение движения для j -ой частицы. Здесь $F_{ij}(\underline{r}_{ij})$ – сила, действующая на j -ую частицу со стороны i -ой, \underline{r}_j – радиус-вектор j -ой частицы, \underline{r}_{ij} – радиус-вектор, соединяющий i -ую и j -ую частицы. Также была введена вязкость μ для того, чтобы загасить возникающие колебания в образце.

Уравнение (1) учитывает только взаимодействия между парами частиц. Математически рассматривая, моделирование методом частиц сводится к решению задачи Коши для уравнения (1). В начальные условия входят координаты каждой частицы и её скорости.

2.2. Численная схема

Для интегрирования уравнения движения можно использовать большое количество вариаций методов интегрирования. Требуется интегрирование большого количества уравнений, что свойственно методу динамики частиц.

Метод Верле, является численным методом для решения обыкновенных дифференциальных уравнений, широко используемым в молекулярной динамике и других областях, где необходимо моделировать динамику частиц [13]. Этот метод является одним из методов Рунге-Кутты, который обладает хорошей устойчивостью и точностью. Основная идея метода Верле заключается в том, чтобы обновлять положение и скорость частицы на каждом временном шаге, используя значения скоростей и ускорений в половинных временных шагах. Преимущество метода Верле в том, что он является

симплексным и вычислительно эффективным, что делает его привлекательным для применения в системах с большим числом частиц.

Данный алгоритм способен вычислять следующее местоположение частицы по предыдущему без использования скорости.

$$x_{i+1} = 2x_i - x_{i-1} + a\Delta t \quad (2)$$

где $a = \frac{F}{m}$ – ускорение частички

Для того чтобы проследить эволюцию системы, необходимо провести интегрирование уравнений движения, т. е. на основе начальных данных (скоростей и координат частиц) получить их траектории в любой необходимый последующий момент времени. Существует достаточно много различных методов интегрирования уравнений движения. Все они основаны на методе конечных разностей, где время изменяется дискретно с некоторым шагом Δt .

Для численного интегрирования уравнения движения использовался описанный выше метод:

$$\begin{aligned} v_{i+\frac{1}{2}} &= v_{i-\frac{1}{2}} + \frac{F}{m}\Delta t \\ x_{i+1} &= x_i + v_{i+\frac{1}{2}}\Delta t \end{aligned} \quad (3)$$

Для сходимости метода необходимо выполнение условия:

$$\Delta t < \frac{1}{20}T \quad (4)$$

где T – период колебаний, соответствующей силе F .

Благодаря выбору данного Δt , метод Верле обеспечивает достаточно точное численное решение, не слишком усложняя вычисления и не слишком сильно замедляя процесс моделирования [6].

2.3. Потенциал взаимодействия

В качестве потенциала взаимодействия в данной работе рассматривается потенциальная энергия взаимодействия между частицами:

$$F(\mathbf{r}) = -C \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{a}) \quad (5)$$

$$\Pi(\mathbf{r}) = \frac{C \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{a})^2}{2}, \quad (6)$$

Данный потенциал аналогичен модели пружины, где энергия растяжения пружины пропорциональна квадрату смещения от равновесного состояния. Потенциал взаимодействия пружины имеет большое количество преимуществ, особенно в контексте моделирования систем с упругими взаимодействиями:

1. Данный потенциал имеет простую аналитическую форму, тем самым упрощает вычисления и реализацию и численных методах.
2. Пружинный потенциал может быть использован для моделирования различных упругих взаимодействий, таких как упругие деформации, возвратные силы и колебания. Это дает ему гибридность и универсальность.
3. Этот потенциал могут легко масштабироваться для учета различных уровней деформации и размеров системы, что позволяет исследовать поведение материалов на различных масштабах

4. Использование пружинного потенциала обычно требует меньших вычислительных ресурсов по сравнению с более сложными моделями взаимодействия, что делает его привлекательным для моделирования систем с большим числом частиц.

Именно поэтому пружинный потенциал является мощным и удобным инструментом для моделирования упругих взаимодействий в различных системах.

Потенциал имеет 2 размерных параметра: C – жесткость потенциала, a – длина связи. Жесткость данного потенциала будет иметь вид.

Тогда частота колебаний и период соответственно будут равны:

$$\omega = \sqrt{\frac{C}{m}} \quad (7)$$

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi \sqrt{\frac{m}{C}} \quad (8)$$

2.4 Структура материала

Аморфные вещества характеризуются отсутствием регулярного порядка в расположении атомов и молекул по всему объему. В таких материалах нет кристаллической решетки, и наблюдается лишь ближний порядок в размещении молекул. Это означает, что в локальной области атомы могут быть упорядочены, но на большом расстоянии порядок в расположении атомов отсутствует. Примером аморфного вещества является кварцевое стекло, структура которого значительно отличается от структуры кристаллического кварца.

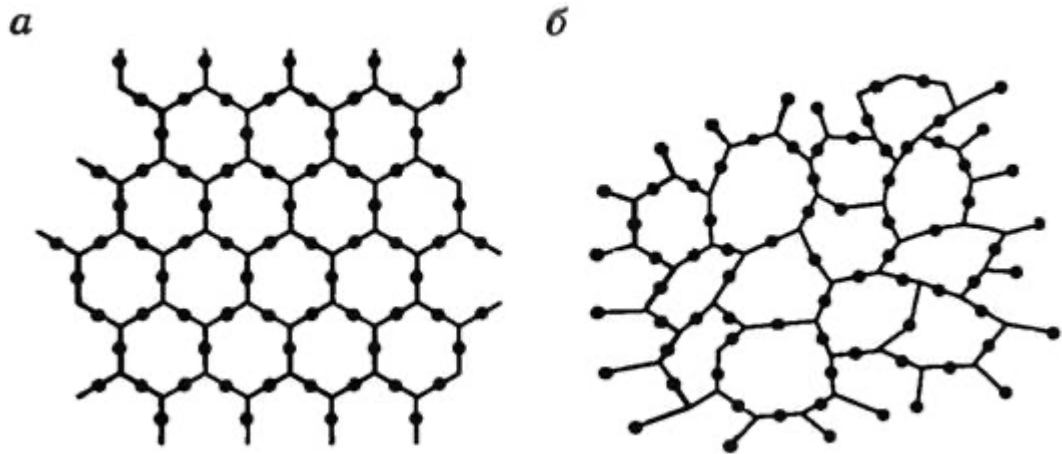


Рис.1. Плоская схема расположения молекул кварца (а) и кварцевого стекла (б)

На рисунке 1 представлена схема молекулярного расположения в кварце (а) и кварцевом стекле (б). В кристаллическом кварце атомы расположены в строгом, периодическом порядке, образуя кристаллическую решетку, которая повторяется по всему объему материала. Это придает кварцу его характерные физические свойства, такие как высокая прочность и твердость. В аморфном кварцевом стекле отсутствует такая долгопериодическая упорядоченность. Атомы размещены случайным образом, что приводит к другим механическим и оптическим свойствам. В физике конденсированных сред, таких как кристаллы и аморфные вещества, различают два типа структурной организации атомов: ближний и дальний порядок [1].

Ближний порядок (или короткодействующий порядок) описывает упорядоченность атомов в пределах нескольких ближайших соседей. Это означает, что каждый атом имеет определённое окружение в ближайшей окрестности, и это окружение остается стабильным. В аморфных телах ближний порядок может существовать, даже если отсутствует дальний порядок. Атомы расположены таким образом, что каждый атом окружен соседями на фиксированных расстояниях, однако общая структура не повторяется периодически [5].

Дальний порядок (или дальнедействующий порядок) описывает регулярную, периодическую структуру, которая простирается на большие расстояния. Это упорядоченность, которая продолжается по всему объему материала, что характерно для кристаллических твердых тел.

Для создания модели аморфного материала необходимо обеспечить случайное расположение частиц, нарушающее дальний порядок. Для этого был реализован следующий алгоритм [2]:

1. Частицы первоначально располагаются в узлах кубической решетки. Эта начальная конфигурация является упорядоченной и не представляет собой аморфное состояние.

2. Для обеспечения случайности упаковки и нарушения дальнего порядка частицы смещаются из своих исходных положений в узлах кубической решетки. Смещение производится случайным образом, чтобы каждая частица получила произвольное отклонение от своего начального положения.

Таким образом, создается структура, приближенная к реальной аморфной структуре, где порядок наблюдается только на ближних расстояниях (рисунок 2).

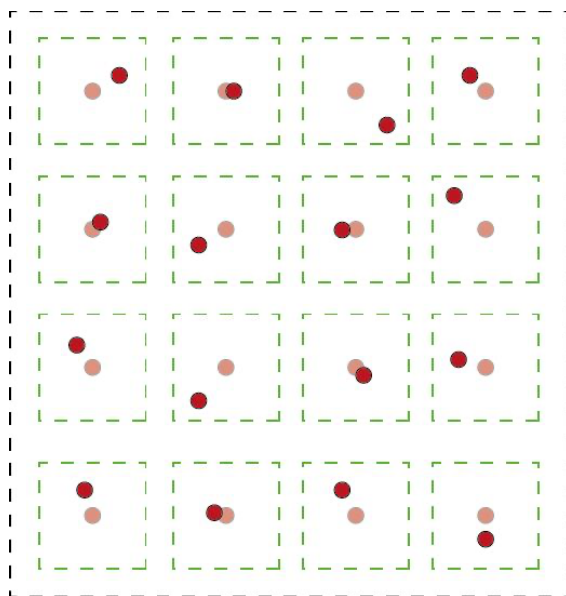


Рис.2. Структура моделируемого материала

После создания начальной структуры модели необходимо установить связи между частицами. Связь между двумя частицами считается существующей, если расстояние между ними не превышает определенного радиуса обрезания r_{cut} .

Данная связь определяется в начальный момент времени так, чтобы состояние образца не было напряженным. В потенциале для данной пары частиц равновесное расстояние a принимается равным начальному расстоянию между ними. Таким образом, в начальный момент времени образец находится в ненапряженном состоянии. Для корректировки минимального расстояния между частицами, а также шага времени при численном интегрировании, необходимо ограничить перемещение частиц. Длина связи для каждой пары частиц своя.

Радиус обрезания определяется по формуле $r_{cut} = \alpha L$, где L - характеристический размер образца, α - коэффициент, задающий максимальное расстояние, на котором частицы считаются связанными. Этот радиус выбирается таким образом, чтобы учитывать ближний порядок, характерный для аморфных материалов (рисунок 3).

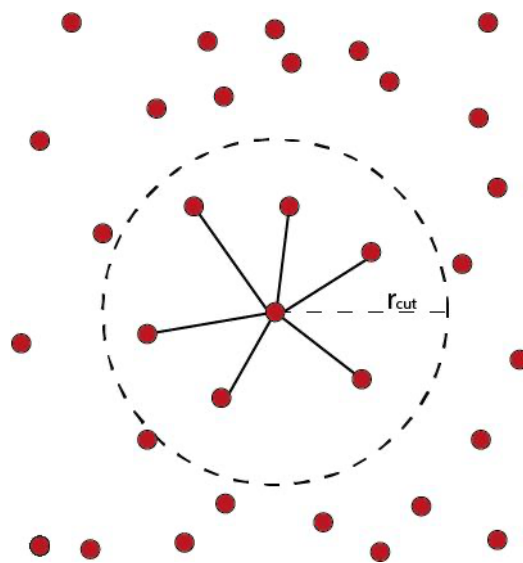


Рис.3. Определение наличия связи между частицами

2.5 Расчет упругих характеристик.

Упругие свойства материалов описываются различными модулями упругости, которые характеризуют их реакцию на внешние нагрузки и деформации. При малых деформациях, когда выполняется закон Гука, наблюдается линейная зависимость между напряжениями и деформациями. Основными модулями упругости являются модуль сдвига G [4].

Модуль сдвига является одним из ключевых параметров, характеризующих способность материала сопротивляться изменению формы при постоянном объеме. Это важно для описания материалов, подверженных деформациям сдвига, таким как кручение. Модуль сдвига при кручении равен отношению касательного напряжения к деформации сдвига. При кручении в материале возникают касательные напряжения, действующие по двум взаимно перпендикулярным площадкам. Это напряженное состояние можно представить, например, в валу, подвергнутом крутящему моменту. В этом случае модуль сдвига G определяет, насколько материал сопротивляется скручиванию [7].

В случае однородного изотропного тела модули упругости должны быть одинаковы по всем направлениям.

Модуль сдвига G при кручении аморфного тела вычисляется на основе напряжений и деформаций, возникающих в материале под действием крутящего момента. Для точного определения модуля сдвига нужно выполнить следующие шаги:

Рассматривается модель аморфного тела, к которому прикладывается постоянный крутящийся момент M_z . После чего измеряется угол закручивания, возникающий под действием крутящего момента.

Касательное напряжение можно вычислить по формуле (9)

$$\tau = \frac{M_z \cdot r}{I_p} \quad (9)$$

Как ранее упоминалось, модуль сдвига G определяется как отношение касательного напряжения τ к деформации сдвига γ :

$$G = \frac{\tau}{\gamma} \quad (10)$$

Деформация сдвига γ связана с углом скручивания φ через радиус r и длину L :

$$\gamma = \frac{r \cdot \varphi}{L} \quad (11)$$

Тогда модуль сдвига будет принимать окончательную форму:

$$G = \frac{M_z \cdot L}{\varphi \cdot I_p} \quad (12)$$

где φ – угол закручивания, M_z – крутящий момент, I_p – полярный момент инерции поперечного сечения, L – длина образца

Вычисление полярного момента инерции:

$$I_p = \sum_i m_i r_i^2$$

где r_i - расстояние атома i от оси вращения

2.6 Постановка эксперимента:

К верхней поверхности образца прикладывается равномерная нагрузка по оси z и производится кручение. Вертикальные стенки остаются свободными. После чего мы поворачиваем модель по каждой из осей. Математическая постановка будет выглядеть следующим образом:

Запишем систему уравнений с граничными условиями:

Уравнение равновесия:

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = 0$$

Линейно-упругий материал:

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}$$

Граничные условия:

$$\varphi|_{y=-L} = 0$$

$$\varphi|_{y=L} = \text{const}$$

(13)

где $\underline{\underline{\tau}}$ – вектор касательной, $\underline{\underline{\sigma}}$ – тензор напряжений.

В начале моделирования происходит процесс инициализации системы по описанному выше алгоритму.

Далее применяются различные виды деформаций к атомам в системе. В данном эксперименте основное внимание уделяется кручению по разным осям. Для этого к образцу прикладывается крутящий момент, и моделируется

его воздействие на структуру атомов. После применения кручения модель поворачивается по каждой из осей. Это позволяет проверить, изменяются ли упругие модули при выборе различных направлений, что является ключевым для определения изотропности материала.

В процессе моделирования вычисляются моменты инерции системы. Это важно для понимания распределения масс и их влияния на деформацию при кручении. Также рассчитывается сопротивление поперечного сечения образца, что помогает оценить устойчивость материала к деформациям.

Проводятся несколько итераций для моделирования движения атомов. В каждой итерации обновляются положения атомов, их скорости и ускорения. Вычисляется кинетическая энергия атомов на каждом шаге моделирования. Это позволяет оценить, как энергия распределяется по системе и как она изменяется при различных деформациях.

Для вычисления модуля упругости по формуле (12) необходимо посчитать момент, действующий в системе. Для этого необходимо вычислить крутящий момент в срединном слое, так как в нем граничные условия оказывают наименьшее влияние, согласно принципу Сен-Венана.

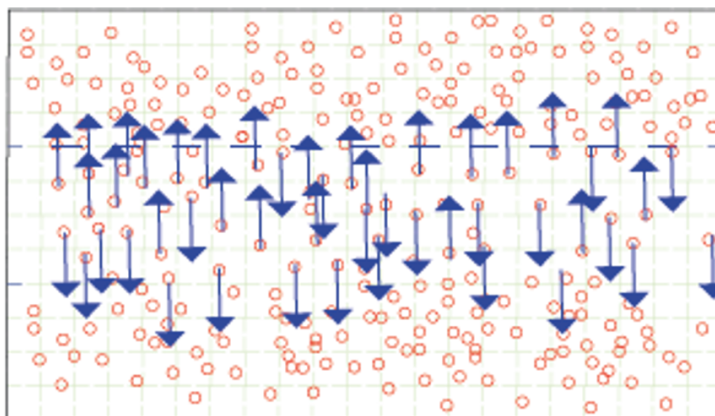


Рис.4. Силы, влияющие на частицы в среднем слое

Выбор срединного слоя объясняется применением принципа Сен-Венана, который утверждает, что влияние граничных условий значительно уменьшается по мере удаления от места приложения нагрузки. Согласно этому принципу, напряженное состояние на значительном расстоянии от точки приложения нагрузки не зависит от характера нагрузки, а определяется главным вектором и главным моментом нагрузки. Это позволяет заменить одни граничные условия другими, более удобными для статических расчетов, при условии сохранения значений равнодействующей силы и главного момента. Принцип Сен-Венана таким образом упрощает анализ сложных систем, позволяя применять различные модели нагрузок без изменения ключевых параметров

Тогда крутящий момент будет находиться по формуле (14):

$$M_z = F_z x + F_x z \quad (14)$$

Ниже представлена схематическое изображение эксперимента, который мы проводили для изучения влияния кручения на упругие модули:

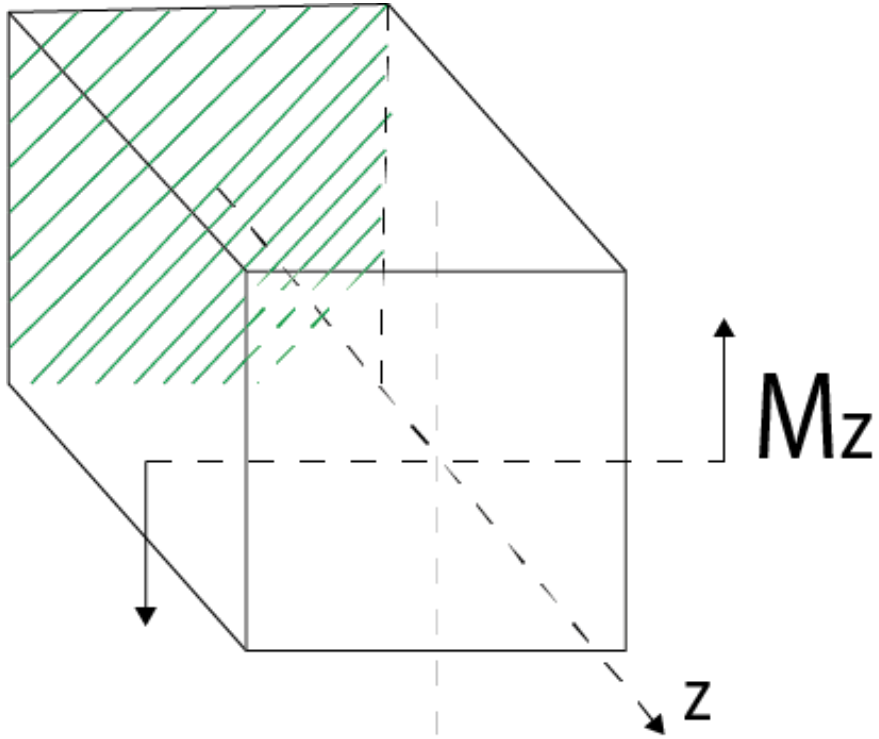


Рис.5. Кручение материала

Глава 3. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Упругие свойства изотропного тела определяются упругими постоянными, которые в свою очередь являются независимыми величинами. А если исследуемый материал является изотропным, то упругие модули такие как модуль сдвига G будут принимать в различных направлениях одинаковые значения [10].

Было проведено 60 экспериментов, прокручивая по каждой из осей модель при каждой реализации.

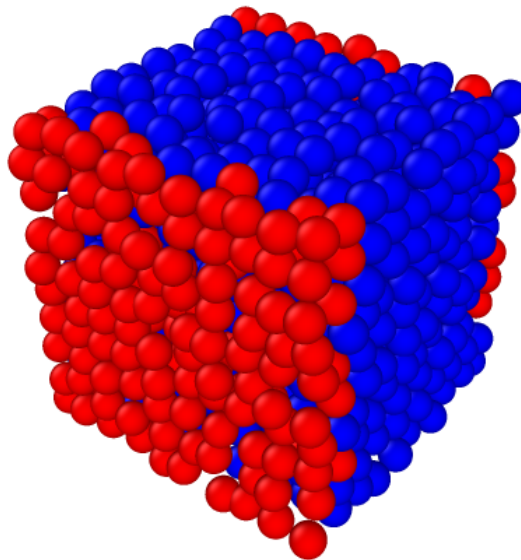


Рис.6 Структурная модель аморфного тела.

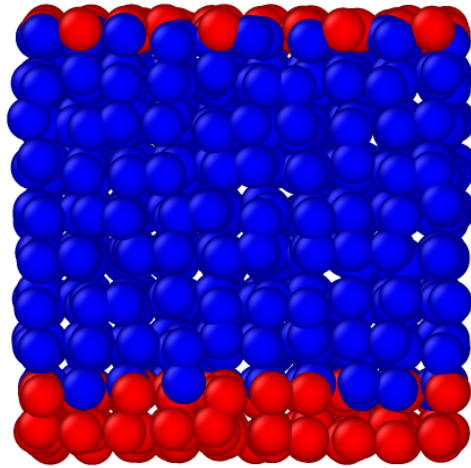


Рис.7 Структурная модель тела(вид сверху)

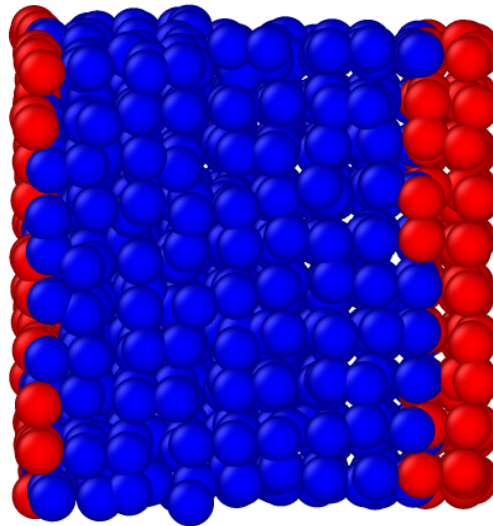


Рис.8 Структурная модель тела(при повороте)

На рисунках 6, 7 и 8 изображена модель аморфного материала, красным цветом частицы, к которым прикладывались граничные условия.

После проведения первых экспериментов были получены значения модулей Сдвига по разным направлениям. Оказалось, что они не совпадают по направлениям, несмотря на идентичную структуру модели. Погрешность составляет более 30%. Это означает, что в каждой отдельной реализации получаемый образец является полностью анизотропным без какой-либо симметрии.

Далее была выдвинута гипотеза: при усреднении по реализациям,

полученные упругие модули могут удовлетворять поставленным требованиям.

В аморфных материалах отсутствует дальний порядок, характерный для кристаллических материалов. Однако они сохраняют ближний порядок, что означает, что на малых расстояниях атомы расположены упорядоченно. Ближний порядок оказывает значительное влияние на локальные механические свойства материала, включая модуль сдвига. Например, плотность упаковки атомов и силы межатомного взаимодействия в пределах ближнего порядка определяют, как материал реагирует на деформацию.

В аморфных материалах присутствуют локальные неоднородности, которые могут приводить к вариациям модуля сдвига в разных участках материала.

После проведения большой серии экспериментов были получены значения упругих модулей, далее усреднив их значения по реализациям было получено соотношение с точностью до одного процента. Далее были проведены эксперименты с кручением модели при повороте модели. В итоге получилось, что при кручении максимальное отклонение модулей сдвига чуть меньше 2%. Это означает, что моделируемый материал полностью изотропный. Ниже представлена таблица со средними значениями упругих модулей при кручении тела по разным осям и средняя ошибка по реализациям:

	$\langle G_x \rangle$	$\langle G_y \rangle$	$\langle G_z \rangle$	$\langle \Delta G \rangle$
Поворот по X	472,27			1,5423
Поворот по Y		459,77		0,9763
Поворот по Z			464,73	1,2785

Таблица 1. Средние значения упругих модулей при кручении

Пример расчета погрешности:

Рассмотрим средние значения модуля сдвига по направлениям:

$$\langle G_x \rangle = 469,72$$

$$\langle G_y \rangle = 474,35$$

$$\langle G_z \rangle = 464,64$$

Среднее значение по осредненным реализациям рассчитывается как сумма всех осредненных значений, полученных из каждой реализации, деленная на количество этих осредненных значений.

$$\langle G \rangle = \frac{\sum G_i}{3}$$

Результируя и подставляя полученные значения, получаем:

$$\langle G \rangle = \frac{\sum G_i}{3} = \frac{469,72 + 474,35 + 464,64}{3}$$

$$\langle G \rangle = 469,57$$

После чего считаем отклонения среднего значения от осредненных по реализациям значений:

$$\Delta \langle G_x \rangle = \frac{|\langle G_x \rangle - \langle G \rangle|}{\langle G \rangle} * 100\%$$

$$\Delta \langle G_y \rangle = \frac{|\langle G_y \rangle - \langle G \rangle|}{\langle G \rangle} * 100\%$$

$$\Delta \langle G_z \rangle = \frac{|\langle G_z \rangle - \langle G \rangle|}{\langle G \rangle} * 100\%$$

Подставляя полученные значения, получим:

$$\Delta \langle G_x \rangle = \frac{|469,72 - 469,57|}{469,57} * 100\%$$

$$\Delta \langle G_x \rangle = \frac{|474,35 - 469,57|}{469,57} * 100\%$$

$$\Delta \langle G_x \rangle = \frac{|464,64 - 469,57|}{469,57} * 100\%$$

Получаем:

$$\Delta \langle G_x \rangle = 0,0319$$

$$\Delta \langle G_y \rangle = 1,0179$$

$$\Delta \langle G_z \rangle = 1,0498$$

Изучая полученные данные, можно сделать вывод, что самое большое отклонение от осредненных по реализациям равно 1,0498, то есть по направлению оси Z.

Аналогично рассчитывались погрешности и для других экспериментов при кручении модели по их реализациям.

Ниже представлена таблица погрешностей модулей сдвига при кручении со средними значениями по направлениям при разных экспериментах.

	$\Delta \langle G_x \rangle$	$\Delta \langle G_y \rangle$	$\Delta \langle G_z \rangle$
Поворот по X	0,0319	1,0179	1,0498
Поворот по Y	2,0427	1,4356	0,0746
Поворот по Z	0,9313	0,0421	0,5327

Таблица 2. Значения погрешностей осредненных значений по направлениям

Также в данной работе были сравнены результаты, получившиеся при эксперименте, с результатами, которые были получены в работе по сравнению упругих модулей аморфного материала, полученных путем моделирования методом динамики частиц при одноосном чистом сдвиге:

	$\langle G_{tortion} \rangle$	$\langle G_{shear} \rangle$	$\Delta \langle G \rangle$
X	472,27	453,43	4,1549
Y	459,77	475,29	3,2653
Z	464,73	454,11	2,3386

Таблица 3. Сравнение результатов двух разных экспериментов

Максимальное полученное отклонение составляет чуть более 4%. Это показывает, что при двух разных экспериментах результаты модуля сдвига практически идентичны, что означает изотропность аморфного материала в созданной модели.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе работы была изучена изотропность аморфного материала. Для этого был написан комплекс программ на языке Python, в котором была реализована модель аморфного материала, которая в дальнейшем использовалась для расчетов и получения экспериментальных значений. Было установлено, что при деформации аморфного материала упругие модули не изменяются при выборе направления.

Плюсами данной модели можно отметить довольно простое задание структуры. С помощью проведения численных экспериментов по кручению были найдены модули сдвига по разным направлениям. Мы получили удовлетворяющий нас результат только при проведении серии расчетов и усреднении значений по реализациям, подставив которые в формулу модуля сдвига. Это произошло из-за ближнего порядка аморфного вещества. Эти модули практически не изменяются при повороте модели, что и означает изотропность материала. Модель, использовавшаяся в данном исследовании, довольно проста, поэтому она не совершенна и способна к модернизации, к примеру добавления тепловых эффектов.

Кроме того, в будущем можно провести дополнительные исследования для проверки влияния различных факторов на изотропность аморфного материала, таких как влияние различных видов деформаций или воздействия внешних полей. Также возможным направлением дальнейших исследований является улучшение точности расчетов за счет использования более сложных математических моделей и методов численного анализа. Включение этих улучшений позволит получить более точные и надежные данные, которые могут быть применены в практических задачах инженерии и материаловедения.

В заключение, проделанная работа показала, что предложенная модель является действенным инструментом для изучения механических свойств

аморфных материалов, и дальнейшее её развитие и совершенствование может внести значительный вклад в понимание и применение этих материалов в различных областях науки и техники.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Воробьев С.А. Определение эффективных механических характеристик материалов со случайной упаковкой. — 2017
2. Вьюгин В.В. «Математические основы теории машинного обучения и прогнозирования» М.: 2013. — 387 с.
3. Капитонов, А. М. К20 Физические свойства горных пород западной части Сибирской платформы : монография / А. М. Капитонов, В. Г. Васильев. – Красноярск : Сиб. федер. ун-т, 2011. – 424 с. ISBN 978-5-7638-2142-0
4. Кривцов А.М. Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов : учебное пособие. — СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009. — 126 с.
5. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. — М.: ФИЗМАЛИТ, 2007. — 304 с. — ISBN 978-5-9221-0803-4.
6. Кривцов А. М., Кривцова Н. В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела — Дальневосточный математический журнал. 2002. Т. 3. № 2. С. 254–276.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика, т.VII. Теория упругости. — Наука, 1987.
8. Лившиц В.Я., Теннисон Д.Г., Гукасян С.Б., Костанян А.К. — ФХС. 1982. Т. 8. № 6. С. 688–696
9. Фейнман Р., Лейтон. Р, Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Т. 1. М: Мир, 1967.
10. Фридман Я. Б., Механические свойства металлов, 2 изд., М., 1952.
11. Ercolessi F.A Molecular dynamics primer. Spring College in Computational Physics. ICTP. June 1997.
12. Hoover.Wm. G. Molecular Dynamics. Springer-Verlag Berlin Heideiberg 1986.36
13. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical

properties of Lennard-Jones molecules. Phys. Rev. 1967. V. 159. P. 98

14. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. II. Equilibrium correlation functions. Phys. Rev. 1967. V. 165. P. 201.

15. Wm. G. Hoover. Molecular Dynamics. Springer-Verlag Berlin Heideiberg 1986