

НИКИТИНА НАТАЛЬЯ АЛЕКСАНДРОВНА

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА СТОХАСТИЧЕСКИХ ИСПЫТАНИЙ ДЛЯ
АВТОМАТИЗАЦИИ РАСЧЕТОВ НАНОСТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ
В МЕТАЛЛАХ**

Автореферат

диссертации на соискание академической степени магистра техники и
технологий
по специальности 6N0703 – Информационные системы

Республика Казахстан
Усть-Каменогорск
2011

Работа выполнена в Восточно-Казахстанском государственном техническом университете им. Д. Серикбаева

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук,
Денисова Н.Ф.

Официальный оппонент: кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры ММ и КТ ВКГУ им. С.
Аманжолова, Попова Г.В.

Защита состоится 26 января 2011г. в 14.00 часов на заседании государственной аттестационной комиссии по адресу: 070004, г. Усть-Каменогорск, ул. Серикбаева 19, аудитория ГЗ-322

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Восточно-Казахстанского государственного технического университета им. Д. Серикбаева по адресу: г. Усть-Каменогорск, ул. Серикбаева 19.

Автореферат разослан «26» декабря 2010 г.

Секретарь ГАК

Денисова Н.Ф.

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность работы.

В настоящее время всевозрастающее применение в промышленности приобретает новый класс материалов, называемых интерметаллидами. Интерметаллиды имеют сложную кристаллическую структуру, которая определяет их уникальные физико-механические свойства (высокая жаропрочность, низкая плотность, низкая возгораемость в кислороде, высокая износостойкость). Особую роль в создании материалов с заданными свойствами играют диффузионные процессы, протекающие в условиях высоких температур и скоростей реакции. Исследование диффузионных процессов на микроскопическом (атомарном) уровне в реальных экспериментах не всегда возможно и эффективно, т.к. требует значительных затрат времени, средств и трудовых ресурсов. Решением данной проблемы является компьютерное моделирование структурно-энергетических изменений в металлах.

Компьютерное моделирование позволяет исследовать на атомном уровне динамику как быстропотекающих, так и длительных по времени процессов. Компьютерное моделирование является дополнением к известным экспериментальным и теоретическим методам исследования, зачастую выступая в роли связующего звена между ними. Компьютерная модель может служить как средством апробации теоретических представлений, так и, наоборот, объяснять или прогнозировать явления, ранее не освещенные теорией и экспериментом в полной мере.

Объект исследования - компьютерное моделирование структурно-энергетических перестроек в металлах и сплавах.

Предмет исследования - построение компьютерной модели на основе метода стохастических испытаний.

Целью работы является построение компьютерной модели на основе метода Монте-Карло, позволяющей моделировать структурно-энергетические изменения в металлах и сплавах. Для достижения поставленной цели сформулированы следующие **задачи**:

- описание динамики диффузионных процессов в металлах и сплавах;
- обзор методов компьютерного моделирования, используемых в физике твердого тела;
- разработка и формализация математической модели;
- разработка алгоритма и приложения на основе метода стохастических испытаний;
- анализ и интерпретация полученных результатов.

Научная новизна и положения, выносимые на защиту:

- метод стохастических испытаний, используемый для моделирования структурно-энергетических изменений в металлах и сплавах;
- алгоритм на основе метода Монте-Карло для моделирования структурно-энергетических изменений в металлах и сплавах;
- прикладное решение на основе разработанного алгоритма.

Практическая значимость данной работы заключается в определении температуры активации и продолжительности эксперимента, процентного соотношения металлов с помощью приложения, разработанного на основе метода стохастических испытаний, для получения материалов с заданными свойствами. Использование компьютерной модели на начальных этапах реальных экспериментов позволит снизить временные, финансовые и трудозатраты. Кроме того, данная модель может использоваться практиками-материаловедами для изучения диффузионных процессов в металлах.

Апробация работы. Результаты работы докладывались и обсуждались на I Всероссийской конференции молодых ученых с международным участием «Актуальные проблемы науки и техники», г. Уфа, 2009 г.; VIII Всероссийской НПК студентов, аспирантов и молодых ученых с международным участием «Молодежь и современные информационные технологии», г. Томск, 2010 г.; X Республиканской научно-технической конференции студентов, магистрантов, аспирантов и молодых ученых «Творчество молодых - инновационному развитию Казахстана», г. Усть-Каменогорск, 2010 г.

Публикации. В результате научных исследований опубликованы три статьи:

1. Методы моделирования диффузионных процессов на микроскопическом уровне, Сборник трудов I Всероссийской конференции молодых ученых «Актуальные проблемы науки и техники», 2009 г., Уфимский государственный нефтяной технический университет, г. Уфа.

2. Стохастическое моделирование как средство изучения наноструктурных изменений в металлах, Сборник трудов VIII Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов молодых ученых «Молодежь и современные информационные технологии», 2010 г., Томский политехнический университет, г. Томск.

3. Применение метода Монте-Карло к исследованию структурно-энергетических перестроек атомов в металлах, Сборник трудов X Республиканской научно-технической конференции студентов, магистрантов, аспирантов и молодых преподавателей «Творчество молодых - инновационному развитию Казахстана», 2010 г., ВКГТУ им. Д. Серикбаева, г. Усть-Каменогорск.

Структура и объем диссертации. Магистерская диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка использованной литературы и приложений.

Объем диссертации составляет 70 листов, общее количество рисунков – 20, таблиц – 5, приложений – 2, количество использованных источников – 18.

Ключевые слова: метод компьютерного моделирования, диффузионный процесс, вакансия, атом, никель, алюминий, метод Монте-Карло, метод анализа иерархий, энергия, вероятность, визуализатор, коэффициент диффузии, компьютерный эксперимент, физика твердого тела, металл.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дается общая характеристика работы и обосновывается ее актуальность.

В первом разделе «Анализ методов компьютерного моделирования, используемых в физике твердого тела» дается краткая характеристика диффузионных процессов и точечных дефектов кристаллов, рассматриваются основные этапы компьютерного моделирования, приводится обзор существующих методов компьютерного моделирования в физике твердого тела (рисунок 1).



Рисунок 1. Схема представления уровней математического моделирования

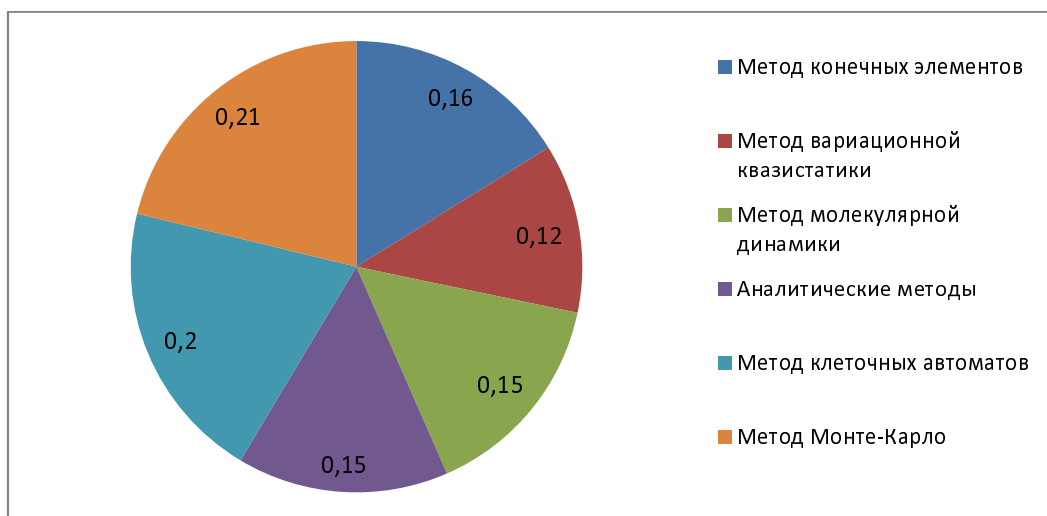


Рисунок 2. Результат выбора метода компьютерного моделирования

На основе метода анализа иерархий осуществляется выбор метода моделирования структурно-энергетических изменений в металлах. Результаты вычислений представлены на рисунке 2. Исходя из результатов анализа, формулируется цель и задачи работы, обосновывается их научная новизна и практическая значимость.

Во второй главе «Моделирование структурно-энергетических изменений в металлах на основе метода Монте-Карло» дается общее описание метода Монте-Карло и его применение в задачах физики твердого тела, приводятся основные формулы, используемые в построении математической модели.

Моделируемая система содержит атомы сортов А и В, которые находятся в узлах жесткой гексагональной кристаллической решетки. На систему накладываются периодические граничные условия, учитывается только вакансионный механизм диффузии. Энергии парных связей атомов $\varphi_{\alpha\beta}^i$ зависят от радиуса координационной сферы и сортности рассматриваемых атомов (α, β могут принимать значения А, В и V). Энергии связи $\varphi_{\alpha V}^i$ и $\varphi_{\beta V}^i$ полагаются равными нулю, поскольку энергия вакансия–атом обычно на порядок меньше чем между атомами.

Вероятность Q того, что один из атомов, расположенных вблизи вакантного узла, в момент времени t_k займет его место:

$$Q = \exp\left(-\frac{E^V}{kT}\right) \quad (1),$$

где T – температура отжига сплава, E^V – энергия активации прыжка вакансии, k – постоянная Больцмана.

Вероятность Q может быть также записана через вероятности p_{kl} перескока k -го атома, расположенного на l -ой координационной сфере:

$$Q = \sum_{k=1}^6 \sum_{l=1}^n p_{kl} \quad (2)$$

Предполагаемая величина высвобождаемой (затрачиваемой) энергии E_{kl} рассчитывается для каждого атома, окружающего вакансию:

$$E_i = -(N_{AA}\varphi_{AA} + N_{BB}\varphi_{BB} + N_{AB}\varphi_{AB}) \quad (3),$$

где $\varphi_{AA}, \varphi_{BB}, \varphi_{AB}$ - энергии взаимодействия пар атомов АА, ВВ, АВ;
 N_{AA}, N_{BB}, N_{AB} - числа пар атомов АА, ВВ, АВ.

$$N_{AA} = \frac{1}{2}(zN_A - N_{AB}) \quad (4),$$

$$N_{BB} = \frac{1}{2}(zN_B - N_{AB}) \quad (5),$$

где z - координационное число.

Из всех E_{kl} выбирается максимальное значение E_{max} и далее вычисляются следующие промежуточные величины:

$$D_{kl} = E_{kl} + (E_{max} - (1 - b)E_l) \quad (6),$$

где $k = \overline{1,6}, l = \overline{1,n}$.

Здесь величина $0 < b < 1$ характеризует влияние температуры на элементарный акт процесса упорядочения:

$$b = 1 - \exp(-\chi T) \quad (7),$$

где $\chi > 0$ - эмпирическая константа модели.

Вероятности p_{kl} определяются в виде:

$$p_{kl} = \frac{Q(E_{max} - (1 - b)D_{kl})}{A} \quad (8)$$

Константа нормировки, обеспечивающая выполнение условия (2):

$$A = \sum_{k=1}^6 \sum_{l=1}^n (E_{max} - (1 - b)D_{kl}) \quad (9)$$

Для описания межатомных взаимодействий использовались парные потенциальные функции Морза:

$$\varphi_{KL}(r) = D_{KL}\beta_{KL} \exp(-\alpha_{KL}r)[\beta_{KL} \exp(-\alpha_{KL}r) - 2] \quad (10),$$

где $\alpha_{KL}, \beta_{KL}, D_{KL}$ - параметры, определяющие взаимодействие пары атомов сорта K и L ; r - расстояние между атомами.

Алгоритм для моделирования структурно-энергетических изменений в металлах представлен на рисунке 3.

В третьей главе «Описание программной реализации прикладного решения» описывается назначение и цель создания прикладного решения, а также основные функциональные возможности приложения.

В приложении задаются исходные параметры модели - размерность решетки, концентрация вакансий, процент атомов никеля в алюминии, температура и продолжительность эксперимента.

После окончания эксперимента строятся визуализаторы атомных смещений, атомного пути и коэффициентов диффузии (рисунок 4).

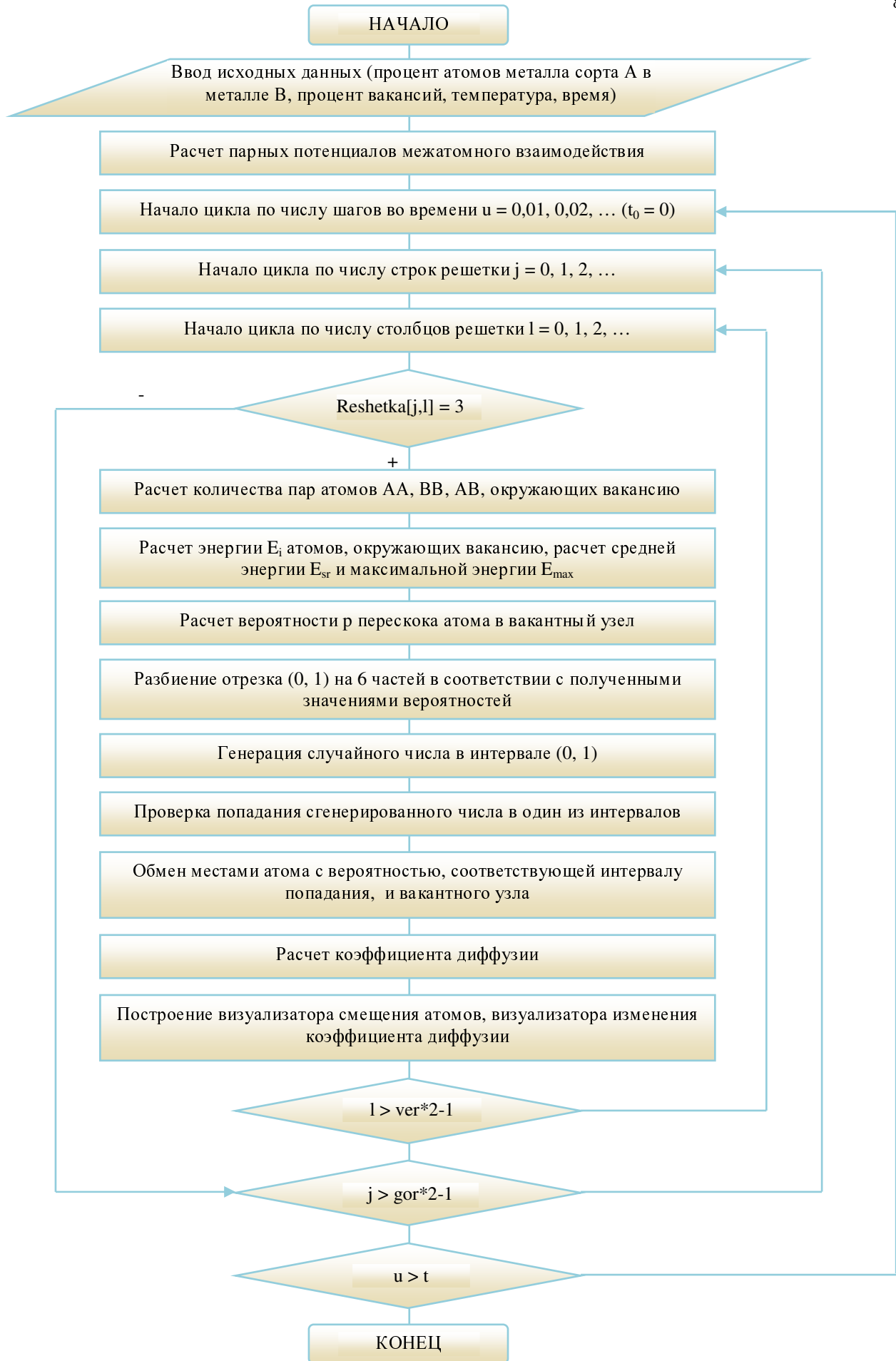


Рисунок 3. Блок-схема алгоритма моделирования структурно-энергетических перестроек атомов в металлах

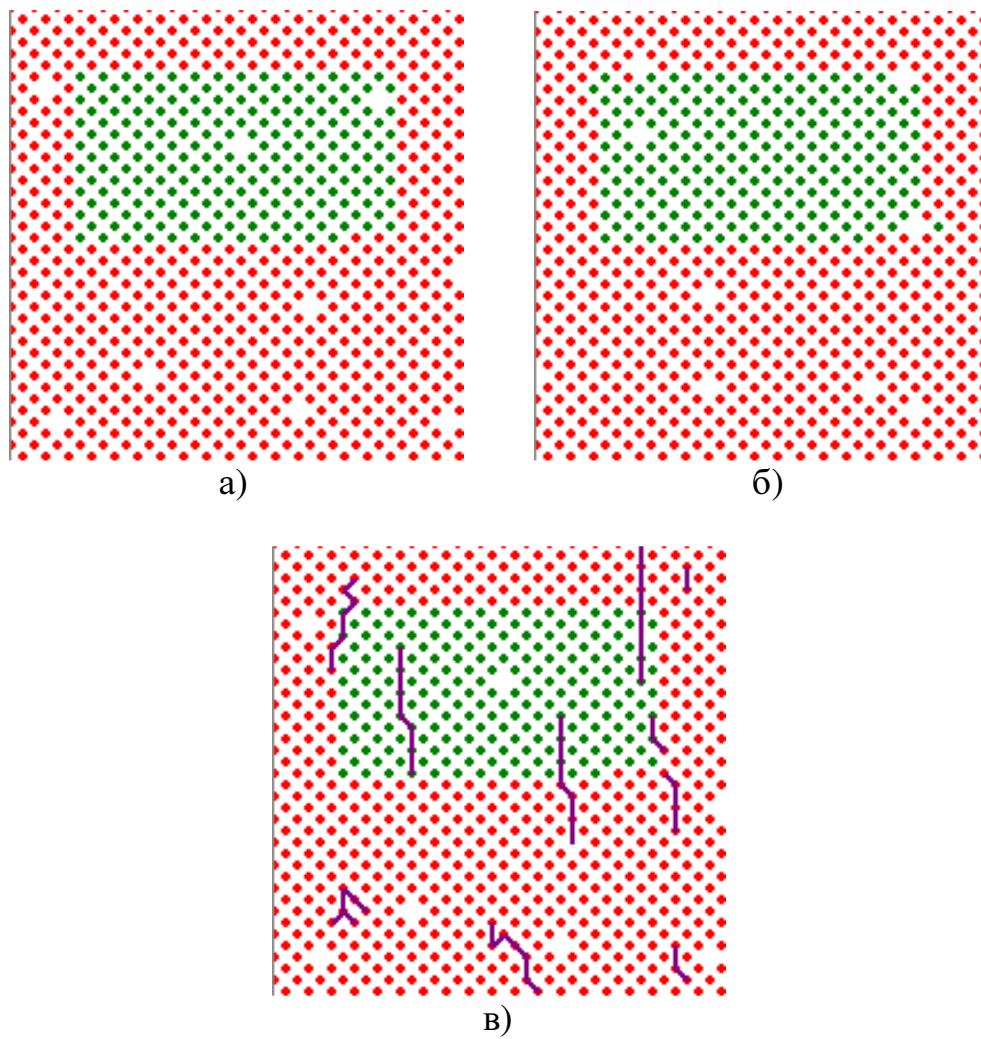


Рисунок 4. Визуализатор атомных смещений: а) начальное состояние решетки; б) состояние решетки через 5 пс; в) визуализатор атомного пути.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Компьютерные модели проще и удобнее исследовать в силу их возможности проводить так называемые вычислительные эксперименты, в тех случаях, когда реальные эксперименты затруднены из-за финансовых или физических препятствий или могут дать непредсказуемый результат. Логичность и формализованность компьютерных моделей позволяет выявить основные факторы, определяющие свойства изучаемого объекта-оригинала (или целого класса объектов), в частности, исследовать отклик моделируемой физической системы на изменения ее параметров и начальных условий.

Компьютерное моделирование заключается в проведении серии вычислительных экспериментов на компьютере, целью которых является анализ, интерпретация и сопоставление результатов моделирования с реальным поведением изучаемого объекта и, при необходимости, последующее уточнение модели.

В результате решения поставленных задач достигнуты следующие результаты:

- описана динамика диффузионных процессов в металлах и сплавах;
- проанализированы методы компьютерного моделирования, использующиеся в физике твердого тела;
- разработана и формализована математическая модель;
- разработан алгоритм и приложение на основе метода стохастических испытаний.

В работе использован метод анализа иерархий для выбора метода моделирования. Для разработки прикладного решения использовалась среда разработки Borland Delphi.

Таким образом, построена компьютерная модель на основе метода Монте-Карло, позволяющая моделировать структурно-энергетические изменения в металлах и сплавах. Разработанное приложение может использоваться для определения процентного соотношения металлов, температуры активации и продолжительности реальных экспериментов при получении материалов с заданными свойствами. Кроме того, приложение может использоваться в практических целях для изучения диффузионных процессов в металлах.

АННОТАЦИЯ

Тема диссертации - использование метода стохастических испытаний для автоматизации расчетов наноструктурных изменений в металлах.

Ключевые слова: метод компьютерного моделирования, диффузионный процесс, вакансия, атом, никель, алюминий, метод Монте-Карло, метод анализа иерархий, энергия, вероятность, визуализатор, коэффициент диффузии, компьютерный эксперимент, физика твердого тела, металл.

Целью диссертационной работы является построение компьютерной модели на основе метода Монте-Карло, позволяющей моделировать структурно-энергетические изменения в металлах и сплавах. Для достижения поставленной цели были выделены следующие задачи:

- описание динамики диффузионных процессов в металлах и сплавах;
- обзор методов компьютерного моделирования, используемых в физике твердого тела;
- разработка и формализация математической модели;
- разработка алгоритма и приложения на основе метода стохастических испытаний;
- анализ и интерпретация полученных результатов.

Объект исследования - компьютерное моделирование структурно-энергетических перестроек в металлах и сплавах.

Предметом исследования является построение компьютерной модели на основе метода стохастических испытаний.

В диссертации представлено краткое описание диффузионных процессов и точечных дефектов кристаллов, рассмотрены основные этапы компьютерного моделирования, проанализированы методы компьютерного моделирования, используемые в физике твердого тела. Разработана и формализована математическая модель на основе метода Монте-Карло. Для реализации модели использовалась среда разработки Borland Delphi.

Научная новизна и положения, выносимые на защиту:

- метод стохастических испытаний, используемый для моделирования структурно-энергетических изменений в металлах и сплавах;
- алгоритм на основе метода Монте-Карло для моделирования структурно-энергетических изменений в металлах и сплавах;
- прикладное решение на основе разработанного алгоритма.

Практическая значимость данной работы заключается в определении температуры активации и продолжительности эксперимента, процентного соотношения металлов с помощью приложения, разработанного на основе метода стохастических испытаний, для получения материалов с заданными свойствами. Использование компьютерной модели на начальных этапах реальных экспериментов позволит снизить временные, финансовые и трудозатраты. Кроме того, данная модель может использоваться практиками-материаловедами для изучения диффузионных процессов в металлах.

Магистерская диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка использованной литературы и приложений. Объем диссертации составляет 70 листов, общее количество рисунков – 20, таблиц – 5, приложений – 2, количество использованных источников – 18.

ABSTRACT

The theme of the dissertation is the usage of the stochastic research method for automation of calculating nanostructure changes in metals.

Keywords: method of computer simulation, diffusion process, a vacancy, the atom, nickel, aluminum, Monte-Carlo method, method of analysis of hierarchies, the energy, the probability, the visualizer, the diffusion coefficient, a computer experiment, solid state physics, metal.

The aim of the dissertational work is building a computer model that is based on Monte-Carlo method and enables modeling structural-and-energetical changes in metals and alloys. In order to achieve the aim the following objectives were determined:

- describing the dynamics of diffusion processes in metals and alloys;
- reviewing computer modeling methods used in solid-state physics;
- developing and formalization of the mathematical model;
- algorithmization and developing software based on stochastic research method;
- analysis and interpretation of the achieved results.

The object of the research is computer modeling of structural-and-energetical alterations in metals and alloys.

The subject of the research is building a computer model based on stochastic research method.

In the dissertation a short description of diffusion processes and crystals' point defects is presented, the main stages of computer modeling are observed, computer modeling methods used in solid-state physics are analyzed. A mathematical model based on Monte-Carlo method is developed and formalized. Borland Delphi development environment was used for model realization.

Scientific novelty and the provisions submitted for approval:

- stochastic research method for modeling structural-and-energetical changes in metals and alloys;
- algorithm based on Monte-Carlo method for modeling structural-and-energetical changes in metals and alloys;
- application based on the developed algorithm.

Practical significance of the work being considered is determining the activation temperature and experiment length, as well as the percentage ratio of metals with the help of the application developed on the basis of stochastic research method for obtaining materials with predetermined properties. The usage of the computer model at initial stages of real experiments will enable decrease of time consumption, financial expenses and labor costs. Besides, the model can be used by material engineers and scientists while studying diffusion processes in metals.

The Master's dissertation consists of Introduction, three chapters, Conclusions, References and Appendices. The dissertation comprises 70 pages, 20 figures, 5 tables, 2 appendix, and 18 references.

ТҮЙІНДЕМЕ

Диссертацияның тақырыбы – металлдардағы нанокұрылымды өзгерістердің есептеулерінің автоматтандыруы үшін стохасткалық сынауларды қолдану әдістері.

Негізгі сөздер: компьютер пішіндеуін әдіс, диффузиялық процесс, бос орын, атом, никел, алюминий, Монте-Карлоның әдісі, иерархий саралау әдісі, энергия, ықтималдық, визуализатор, диффузияның коэффициенті, компьютер тәжірибесі, қатты затты физика, металл.

Диссертациялық жұмыстың мақсаты Монте-Карлоның әдісінің металлдар және балқымалардағы құрылым-энергетикалық өзгерістерді пішіндеуге мүмкіндік беретін негізінде компьютер үлгісінің құрастыруы болып табылады.

Қойылған мақсаттың табыстары үшін келесі есептерді ерекшеленді:

- металлдар және балқымалардағы диффузиялық процесстердің динамикасының сипаттамасы;
- қатты затты физика қолданылатын компьютер пішіндеулерінің әдістерінің шолуы;
- өңдеу және математикалық үлгінің формализациясы;
- стохасткалық сынауларды әдістің негізінде алгоритмді жасау және қосымшаның өңдеуі;
- алған нәтижелердің талдау және интерпретациясы.

Зерттеудің объекті - металлдар және балқымалардағы құрылым-энергетикалық қайта құруларын компьютер пішіндеуі.

Зерттеулер зат стохасткалық сынауларды әдістің негізінде компьютер үлгісінің құрастыруы болып табылады.

Диссертацияларда диффузиялық процесстер және кристаллдардың нүктелік міндерінің қысқаша сипаттамасы елестеткен, компьютер пішіндеуінің негізгі кезеңдері қарап шыққан, компьютер пішіндеуінің қатты затты физика қолданылатын әдістері талқылаған. Монте-Карлоның әдісінің негізінде математикалық үлгі жасалып формалданылған. Borland Delphi-нің өңдеуін ортаның қолдан үлгісінің іске асырулары үшін.

Ғылыми жаңалық және қорғау шығарылатын жағдайлар:

- стохасткалық сынауларды металлдар және балқымалардағы құрылым-энергетикалық өзгерістердің пішіндеуі үшін қолданылатын әдіс
- металлдар және балқымалардағы құрылым-энергетикалық өзгерістердің пішіндеуі үшін монте-карлоның әдісінің негізінде алгоритм;
- игерілген алгоритмын негізде қолданбалы шешім.

Осы жұмысты жаттығу маңыздылығы тап қалған қасиеттері бар материалдардың алуы үшін игерілген қосымшасы көмегімен ұтымды температура және тәжірибенің ұзақтығы, металлдардың процентті байланысының анықтауында болады. Нақты тәжірибелердің бастапқы кезеңдеріне қолдану компьютер үлгісі қолдану уақытша, қаржы және еңбек шығындары азайтуға мүмкіндік береді. Бұдан басқа, осы үлгі металлдардағы диффузиялық процесстердің зерттеуі үшін тәжірибелермен қолданыла алады.

Магистрлік диссертация кіріспеден, 3 тараудан, қорытындыдан, 18 пайдаланған әдебиеттің атауыдан құрылған тізіміден тұрады. Суреттердің саны – 20, кестелердің саны – 5. Жалпы көлемі 70 бет.