

АНАЛИЗ МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

ЛИ ШУЦЗЯ, ЖАНЬ СЮЙТУН

Международный инженерный институт Шеньянского политехнического университета
и Томского политехнического университета

E-mail: azhi0226@mail.ru

Аннотация: С быстрым развитием науки и техники прогресс исследований нанометаллических материалов в области новых материалов все больше привлекает всеобщее внимание профессиональных ученых и общественности. Исходя из этого, предлагается имитационный анализ нанометаллических материалов на основе компьютерных технологий, в том числе создание моделей конечных элементов, численное моделирование уравнений молекулярной динамики под нанометаллическими материалами. Из результатов сравнения экспериментов видно, что с увеличением количества экспериментальных материалов точность также увеличивается, но моделирование нанометаллических материалов на основе компьютерных технологий, разработанное в этой статье, имеет более значительные преимущества, чем традиционный дизайн, а точность результатов значительно выше, чем традиционный дизайн.

Ключевые слова: Компьютерные технологии; Нанометаллические материалы; Имитационный анализ

1. Анализ моделирования нанометаллических материалов на основе компьютерных технологий

Под нанометаллическим материалом понимается как минимум одно измерение в трехмерном пространстве в пределах диапазона наноструктур, и стоит отметить, что наноразмерность, о которой мы обычно говорим, относится к диапазону от 1 до 100 нм. Металлические наночастицы, смоделированные с помощью компьютерных технологий, обладают особыми свойствами, такими как малый размер, высокая поверхностная энергия и т.д., а их свойства, такие как реакционная способность и каталитический скрининг, относительно очевидны.

1.1. Создание моделей конечных элементов

Основные зерна в нанометаллических материалах конкретно проявляются в нерегулярном порядке во всем кристалле материала, размер и форма зерна заданы единообразно, а для макрополикристаллов направление движения зерна выбирается случайным образом. Для нанополукристаллических металлических материалов они имеют одинаковое направление на макроуровне, поэтому в их моделирующем анализе можно в определенной степени игнорировать единство и ориентацию гранул и кристаллических границ, и считается, что компоненты гранул и кристаллических границ состоят из каждого однонаправленного материала. Работа по анализу моделирования в этой статье в основном является этапом предварительного исследования, а также предполагает, что зерна имеют единый размер и конкретную форму и имеют определенные периодические законы. Если твердый нанометаллический материал представляет собой макроструктуру, образованную неограниченным накоплением таких ячеек в ограниченном пространстве по определенному закону действия. Построены три модели равновесного состояния границ кристаллов нанометаллов, в то время как зернистая часть считается линейно-эластичным материалом с одинаковой ориентацией. Анализ модели и взятие значения должны быть подобны модулю упругости обычных зерных. Многовильчатая кристаллическая граница на самом деле представляет собой структуру, похожую на микропустоту, и его модельная структура имеет нулевое значение. В соответствии со структурными моделями и соответствующими параметрами вышеуказанных нанометаллических материалов трехмерная сетка конечных элементов, необходимая для программного обеспечения *fer1p* системы, автоматически генерируется с помощью источника конечных элементов. В стандартную ячейку входят в основном зернистая ячейка, пять граничных ячеек, шесть поровых ячеек.

1.2. Цифровое моделирование уравнений молекулярной динамики в нанометаллических материалах

В молекулярной материалологии алгоритм Verlet, включенный в концепцию Verlet, должен быть самым распространенным и самым ранним методом расчета происхождения. Формула:

$$n(t + \varphi) = n(t) + \varphi(t) + \frac{1}{2} \varphi^2(t) \quad (1)$$

$$n(t - \varphi) = n(t) - \varphi(t) + \frac{1}{2} \varphi^2(t) \quad (2)$$

Сложив два приведенных выше уравнения, получаем формулу:

$$n(t + \varphi) = 2n(t) - n(t - \varphi) + \varphi^2(t) \quad (3)$$

где n – количество движений, t – момент движения наномолекулы, φ – конкретный момент, $t - \varphi$ – текущий момент, $t + \varphi$ – следующий момент. Основная идея заключается в том, чтобы разложить положения зерен нанометаллических материалов в ряд Taylor, используя конкретные положения и скорости в момент t , а также конкретные положения момента t и момента $t - \varphi$ для вычисления точных положений в момент $t + \varphi$.

Наиболее важные характерные технологии алгоритма Verlet позволяют выполнять отдельные процессы решения с помощью простых физических и математических вычислительных знаний, используя более удобные и менее технические зависимости от профессионалов. Но у него есть свои недостатки. В процессе расчета, чтобы получить максимальную точность результатов расчета, интегральный шаг обычно относительно мал, а объем расчета относительно велик, что очень легко вызвать ошибок. С другой стороны, в уравнении движения материала нет опции скорости, и для получения оптимальных параметров скорости и импульса текущего момента зависимость от данных о перемещении следующего момента будет относительно большой.

Самое важное заключается в том, что для данных о перемещениях в момент, когда они только начинаются, требуется только одно требование и что для данных о перемещениях в другие моменты по-прежнему требуется отдельный перечень условий, связанных с определенными диапазонами.

2. Методологический эксперимент и анализ эффекта

Чтобы более четко и конкретно увидеть практический эффект применения этого метода моделирования и анализа нанометаллических материалов, необходимо сравнить его с традиционным методом анализа моделирования нанометаллических материалов, а также сравнить точность его результатов.

2.1. Подготовка к эксперименту

Для обеспечения точности испытаний оба метода анализа моделирования нанометаллических материалов были помещены в одну и ту же среду для проведения испытаний на точность. Параметры испытаний приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Параметры испытаний

Параметр	Величина
Предел текучести σ_t , ГПа	0,040
Относительная равномерная деформация ε_p , %	10,8
Относительная деформация после разрыва ε , %	17,4
Предел прочности σ_b , ГПа	0,453
Характеристики растяжения	Без площадки текучести

2.2. Анализ результатов экспериментов

В ходе испытаний одновременно в одних и тех же условиях с помощью двух различных методов анализа моделирования нанометаллических материалов анализируются изменения их точности. Сравнительная схема экспериментального эффекта показана на рисунке 1. Из результатов сравнения экспериментов видно, что с увеличением количества экспериментальных материалов точность также увеличивается, но моделирование нанометаллических материалов на основе компьютерных технологий, разработанное в этой статье, имеет более значительные преимущества, чем традиционный дизайн, а точность результатов значительно выше, чем традиционный дизайн.

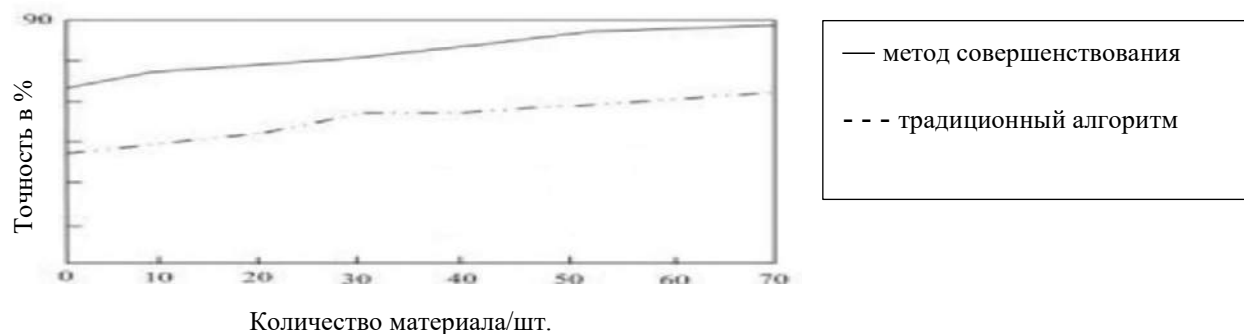


Рисунок 1. Сравнение результатов эксперимента

3. Заключение

В этой статье анализируется моделирование нанометаллических материалов на основе компьютерных технологий, опираясь на растущее развитие и зрелость компьютерных технологий, и реализуется дизайн этой статьи в соответствии с рядом экспериментальными характеристиками моделирования нанометаллических материалов. Эксперимент показал, что метод, разработанный в этой статье, обладает чрезвычайно высокой эффективностью.