

## Моделирование и анализ свойств материалов методами компьютерного материаловедения

Студент группы 10405521 Карачун А.С.  
Научный руководитель - Корнеева Е.К.  
Белорусский национальный технический университет

Материалы являются основой всех изделий, которые мы используем в повседневной жизни. Они могут иметь различные свойства в зависимости от их состава, структуры и температуры. В области материаловедения ключевыми задачами являются моделирование свойств материалов с помощью компьютерных программ и анализ структуры и свойств материалов с использованием различных методов. Эти задачи позволяют исследовать поведение материалов в различных условиях и разрабатывать новые материалы с желаемыми свойствами, а также улучшать уже существующие материалы и создавать более качественные и надежные изделия в различных отраслях промышленности.

В данной работе мы рассмотрели, как моделирование и анализ свойств материалов помогают создавать качественные изделия и какие методы используются для этого.

Один из методов – компьютерное материаловедение. Компьютерное материаловедение стало самостоятельным разделом общего материаловедения, неотъемлемой частью технологии и инженерии новых материалов. Поскольку материал как макроскопическая система представляет собой сложную иерархическую конфигурацию подсистем, обычно невозможно в рамках одной модели учесть все детали каждой подсистемы. В связи с этим модели также строят по принципу иерархии, подразделяя их в соответствии с масштабным фактором на модели макро-, мезо-, микро-, нано - и электронного уровней. Каждая модель более высокого масштабного уровня учитывает свойства более глубоких подсистем обобщенно, в интегральной форме.

Модели самого глубокого уровня (электронного) являются первопринципными, поскольку связаны с решением фундаментальных уравнений квантовой механики. В моделях наноуровня, или атомистических, рассматриваются взаимодействия отдельных атомов по законам классической механики. Для моделей более высоких масштабных уровней «строительные кирпичики» – это соответственно элементы микро-, мезо- и макроструктуры.

Первопринципные модели в расчете на одну частицу требуют наиболее трудоемких вычислений, поэтому даже на современных суперкомпьютерах не удается просчитать из первых принципов системы, содержащие более десятков-сотен атомов. Атомистические модели более высоких масштабных уровней сталкиваются с ограниченными возможностями компьютерной техники, когда число частиц слишком велико или необходимы слишком длительные итерационные процедуры. Таким образом, компьютерное моделирование применяется на том или ином иерархическом уровне в соответствии с поставленными задачами и возможностями компьютерной техники. На рисунке 1 представлен пример мультимасштабного моделирования процесса зарождения и развития трещины [1].

Моделирование свойств материалов – это процесс, в котором используются компьютерные программы для создания математических моделей материалов и определения их свойств. Это позволяет исследовать поведение материалов в различных условиях и определить, как они будут реагировать на воздействие внешних факторов, таких как напряжение, температура и т. д.

Для моделирования свойств материалов используются различные методы, такие как метод конечных элементов (finite element method, FEM), метод конечных объемов (finite volume method, FVM), метод конечных разностей (finite difference method, FDM) и т. д. Каждый

из этих методов имеет свои преимущества и недостатки, и выбор метода зависит от конкретной задачи.

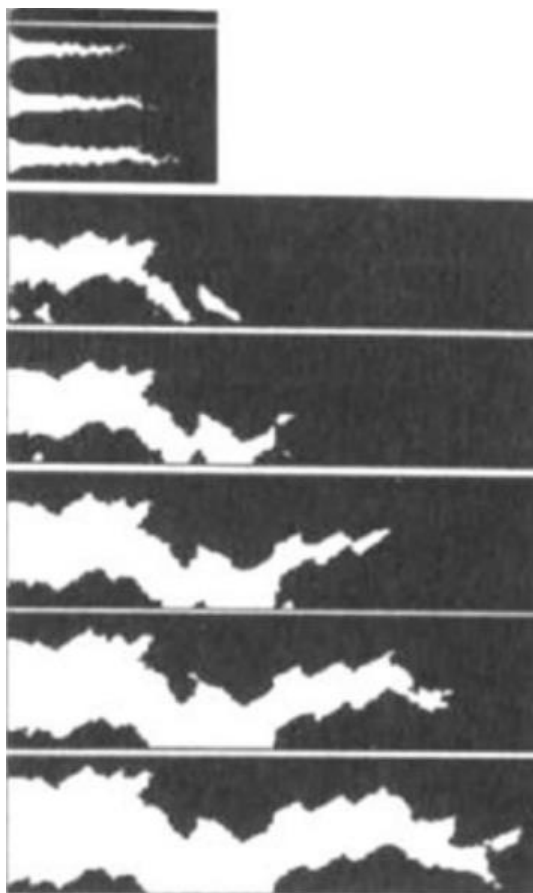


Рисунок 1 – Распространение трещины в модели двумерного кристалла Леннарда-Джонса с числом атомов 2 027 776

В процессе моделирования свойств материалов необходимо определить материальные свойства, например, модуль Юнга, коэффициент Пуассона, прочность и т. д. Эти свойства зависят от химического состава материала, его структуры и температуры. Для определения этих свойств часто используются экспериментальные методы, такие как испытания на растяжение, сжатие или изгиб, и анализ результатов этих испытаний.

Анализ свойств материалов – это процесс изучения свойств материалов на микро- и наноуровнях. Он включает в себя изучение структуры материалов, их химического состава и физических свойств. Для анализа свойств материалов используются различные методы такие, как рентгеновская дифрактометрия, электронная микроскопия, спектроскопия и т. д. Эти методы позволяют получать информацию о структуре материалов на микро- и наноуровнях, исследовать их поверхность и определять химический состав.

Моделирование и анализ свойств материалов помогают экономить время и ресурсы, которые могут потребоваться при проведении экспериментов на физических образцах материалов. Это позволяет снизить затраты на исследования и улучшить эффективность процесса разработки новых материалов и изделий.

В различных отраслях промышленности, таких как автомобильная, авиационная, строительная, энергетическая и т. п., моделирование и анализ свойств материалов используются для создания более легких, прочных, надежных и эффективных изделий. Например, в автомобильной промышленности моделирование и анализ свойств материалов помогают создавать

более легкие и прочные автомобили, что позволяет снизить расход топлива и уменьшить пагубное воздействие на окружающую среду.

В заключение, необходимо отметить, что моделирование и анализ свойств материалов играют важную роль в разработке новых материалов и создании более качественных и надежных изделий в различных отраслях промышленности. Они позволяют исследовать поведение материалов в различных условиях и определить, как они будут реагировать на воздействие внешних факторов, таких как напряжение, температура и прочее. Это, в свою очередь, позволяет снизить затраты на исследования и улучшить эффективность процесса разработки новых материалов и изделий.

#### **Список использованных источников**

1. Компьютерное моделирование в материаловедении [Электронный ресурс] / Портал студенческих и научных материалов – Режим доступа: <https://ozlib.com> – Дата доступа: 13. 04. 2023.