



ISSN 2519-8106

Науковий журнал | Scientific journal

Математичне моделювання

№ 1(38) 2018



Mathematical modeling

ISSN 2519-8106

Міністерство
освіти і науки України

Дніпровський державний
технічний університет

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

Науковий журнал

Заснований в січні 1994 р.

Видається 2 рази на рік

1 (38) 2018

Кам'янське
ДДТУ
2018

ЗМІСТ

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ПРИРОДНИЧИХ НАУКАХ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ

Пишнограєв Ю.М., Штанько Г.І. Моделювання конвективної теплопровідності двошарового середовища при неоднорідних граничних умовах.....	7
Косолап А.І., Кодола Г.М. Ефективний метод оптимізації в задачах лінійного розк- рою матеріалів.....	12
Поліський Ю.Д. Реалізація деяких проблемних операцій у системах залишкових класів	22
Biliaiev M.M., Kirichenko P.S., Lemesh M.V. Numerical simulation of biological waste- water treatment in aeration tank.....	28
Бабенко М.В., Волошин Р.В., Кривошеєв Г.А. Обґрунтування вибору чисельного методу для вирішення завдання плавлення, комбінованого алюмовміського розкислю- вача циліндричної форми, з обважнювачем, в захисній оболонці.....	35

МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ В ТЕХНОЛОГІЇ КОНСТРУКЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ

Авер'янов В.С., Шматко Д.З., Сасов О.О., Кочнева О.В. Математична модель ви- значення концентрації чадного газу в вихлопних газах автомобілів.....	41
Самохвал В.М., Штода М.М., Марченко К.К. Аналіз математичних моделей опору деформуванню для умов високошвидкісних блоків дровових станів.....	46
Гасило Ю.А., Левчук К.О., Романюк Р.Я. Математичне моделювання траси гідрот- ранспорту за допомогою параболічних сплайнів.....	55
Середа Б.П., Белоконь К.В., Белоконь Ю.О., Кругляк І.В. Модель механізму ката- літичних реакцій глибокого окислення оксиду вуглецю.....	62
Коротка Л.І. Аналіз нейромережевих моделей в задачах оптимізації технології енер- гоконденсованих систем.....	69
Біляєв М.М., Русакова Т.І. Математичне моделювання процесу розсіювання викидів від постійно діючого стаціонарного джерела забруднення.....	77
Sereda B.P., Palekhova I.V., Kruglyak I.V. Using the method of mathematical modeling for obtaining multicomponent titanium shs-coatings.....	83
Зінченко В.Ю., Іванов В.І., Чепрасов О.І., Каюков Ю.М. До оптимізації управління тепловою роботою полумєневих термічних печей камерного типу під час нагрівання масивних зливків.....	88
Лантух О.С., Молчанов Л.С., Синегін Є.В. Методика фізичного моделювання спли- вання ансамблю неметалевих включень у сталерозливному ковщі.....	95

Похвалітій А.А., Сігарьов Є.М., Чубін К.І., Полстасв В.П., Похваліта О.В. Математична модель формування газометалевого потоку у сталевипускному каналі конвертера	100
Kruglyak I.V., Kruglyak D.O., Sereda D.B. The formation of aluminotitanized coatings on copper alloys under self-propagating high-temperature synthesis.....	106
Крикент І.В. Визначення силового впливу змінного струму на метал у ванні установки ківш-піч.....	111
Романюк О.Д. Основні підходи оптимізації мас зубчастих коліс механічної передачі...	118
Клочко О.Ю. Математичне моделювання металографічного зображення за допомогою рішення граничних задач для рівняння Лапласу.....	124
Beigyl O.A., Sereda D.B. Physico-chemical modeling of obtaining in the conditions of self propagating high-temperature synthesis corrosion resistant coatings.....	134
Гасило Ю.А., Івченко П.С., Камель Г.І., Дудніков О.В. Моделювання складу порошкового дроту для наплавлення ріжучих кромок живильника з оптимальною твердістю....	138
Чернета О.Г., Сухомлин В.І., Волощук Р.Г. Математичне моделювання ступені зносу поверхневого шару деталей в залежності від режимів навантаження.....	144
Вернигора В.Д. Математична модель процесу мийки шліфувального шламу.....	150
Бялік Г.А., Адамчук С.І., Наумик В.В., Мохнач Р.Е. Фізичне моделювання впливу неметалевих краплень на руйнацію сталі.....	156
Євфимко К.Д., Мочалов О.О., Шаповал Н.О., КовальС.С. Розрахунок розподілу густини міжатомного потенціалу у структурній одиниці речовини	160

МАТЕМАТИЧНІ МЕТОДИ В СУСПІЛЬНИХ І ГУМАНІТАРНИХ НАУКАХ

Юдіна С.В., Ганзюк С.М., Боровець І.С. Застосування економіко-математичного моделювання для визначення залежності фінансових результатів банку від економічного зростання.....	165
Мещанінов С.К. Математична модель електронної системи контролю психофізіологічного стану машиніста локомотивного складу.....	170
Мещанінов С.К. Модель системи електронного біометричного контролю надійністю функціонування людино-машинної системи.....	175
Мещанінов С.К. Модель побудови адекватного математичного опису процесу перетворення сигналу в електронній системі.....	180
Abstracts. Mathematical modelling in natural sciences and information technologies.....	187
Abstracts. Modelling and optimization in material construction technology.....	193
Abstracts. Mathematical methods in social and humanitarian sciences.....	218

УДК 53.092+519

К.Д. Євфимко, старший викладач кафедри фізики, evfimko.k@gmail.com

О.О. Мочалов, д.т.н., професор, oleksandr.mochalov@nuos.edu.ua

Н.О. Шаповал, к.т.н., доцент, shapoval.natalia2014@gmail.com

С.С. Коваль, к.ф.-м.н., доцент, sergiy.koval@nuos.edu.ua

Національний університет кораблебудування імені адмірала Макарова

РОЗРАХУНОК РОЗПОДІЛУ ГУСТИНИ МІЖАТОМНОГО ПОТЕНЦІАЛУ У СТРУКТУРНІЙ ОДИНИЦІ РЕЧОВИНИ

Запропоновано методику обчислення об'ємної густини потенціалу міжатомної взаємодії в структурній одиниці кристалічного твердого тіла, яка дозволяє використовувати рівняння Шредінгера для обчислення густини частинок, потоку частинок і дослідження фізичних властивостей речовини.

Ключові слова: математична модель, структурна одиниця, густина частинок, рівняння Шредінгера.

The method of calculating the interatomic interaction potential volume density in the crystalline structural solid unit is proposed. It allows the Schrödinger equation to be used to calculate the particle density, the particle flux, and the physical properties of matter.

Keywords: mathematical model, structural solid unit, particle density, Schrödinger equation.

Постановка проблеми

Теоретичне дослідження фізичних властивостей речовини на нано і мікрорівні є актуальним завданням сучасної науки: в даний час можливості обчислювальної техніки дозволяють розробляти нові методи дослідження фізичних властивостей твердих тіл на мікрорівні, а також безпосередньо дослідити міжатомну взаємодію.

Аналіз останніх досліджень і публікацій

Одним з таких методів є метод структурних одиниць, який можна використовувати для дослідження і прогнозування фізичних властивостей матеріалів [1—6]. При дослідженні теплофізичних властивостей матеріалів за допомогою методу структурних одиниць необхідно враховувати розподіл потенціалу міжатомної взаємодії в об'ємі структурної одиниці.

Формулювання мети дослідження

Мета даної роботи — розробити методику розрахунку розподілу потенціалу в структурній одиниці та коефіцієнта жорсткості міжатомних зв'язків атомів, що входять в структурну одиницю будь-якої речовини.

Виклад основного матеріалу

Методика обчислення об'ємної густини потенціалу. В якості найпростішої структури будемо розглядати кубічну структурну одиницю, атоми якої розташовані в вузлах кристалічної решітки з параметрами $a \times b \times c$. Сили міжатомної взаємодії і коефіцієнт жорсткості міжатомних зв'язків пов'язані з міжатомним потенціалом співвідношеннями: [7]

$$\begin{aligned} \frac{d\Pi(\Delta r)}{d\Delta r} &= -F(\Delta r) = k(\Delta r)\Delta r; \\ \frac{dF(\Delta r)}{d\Delta r} &= \frac{dk(\Delta r)}{d\Delta r} \Delta r + k(\Delta r), \end{aligned} \quad (1)$$

де $\Pi(\Delta r) = D(e^{-2a\Delta r} - 2e^{-a\Delta r})$; $k(\Delta r)$ — коефіцієнт жорсткості міжатомних зв'язків; Δr — зміна міжатомних відстаней; a, D — сталі, що характеризують фізичні властивості речовини.

Розіб'ємо об'єм структурної одиниці на елементарні об'єми $\Delta V = \Delta a \cdot \Delta b \cdot \Delta c$, де $\Delta a = \frac{a}{n}$; $\Delta b = \frac{b}{m}$; $\Delta c = \frac{c}{l}$, тоді координати вершин ΔV запишуться так $x = \Delta a \cdot i$, $i = 0, 1, 2 \dots n$, $y = \Delta b \cdot j$, $j = 0, 1, 2 \dots m$, $z = \Delta c \cdot k$, $k = 0, 1, 2 \dots l$. Будемо вважати, що результуючі значення міжатомного потенціалу в кожній точці об'єму структурної одиниці $P(x, y, z)$ є суперпозиція всіх потенціалів атомів входять в структурну одиницю.

Помістимо систему координат (x,y,z) (x, y, z) в місцезнаходження першого атома (див. рис. 1, рис. 2).

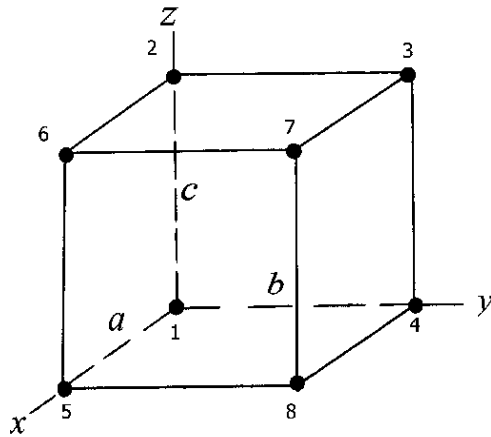


Рис 1. Схема розташування атомів в СО

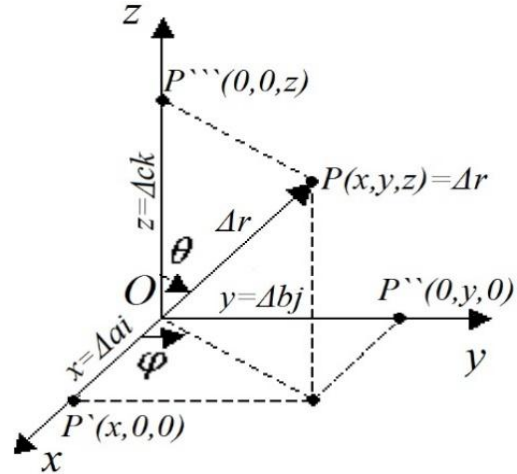


Рис 2. Декартова, сферична і циліндрична с.к.

Рівняння взаємозв'язку координат точок простору $P(x,y,z)$ з урахуванням рис. 2 запишуться так:

$$\begin{aligned} & \frac{x}{a} = \frac{y}{b} = \frac{z}{c} = \frac{\Delta r}{\Delta r} = 1; \\ & \frac{x}{a} = \frac{y}{b} = \frac{z}{c} = \frac{\Delta r}{\Delta r} = 1; \\ & \frac{x}{a} = \frac{y}{b} = \frac{z}{c} = \frac{\Delta r}{\Delta r} = 1; \\ & \frac{x}{a} = \frac{y}{b} = \frac{z}{c} = \frac{\Delta r}{\Delta r} = 1; \end{aligned}$$

де

Поточне значення координати точки
Координати атомів в структурну одиниці:

Величина радіусу вектора для атома структурної одиниці, проведеного з його местонаходження в точку з координатами

(4)

де

Задавши значення координат точки, використовуючи вирази (2), (3), підставляємо їх в (4), знаходимо. Підставивши значення в потенціал міжатомної взаємодії знайдемо внесок потенціалу в результуючий потенціал в точці

(5)

Локальна щільність потенціалу в елементарному об'ємі знаходиться зі співвідношення:

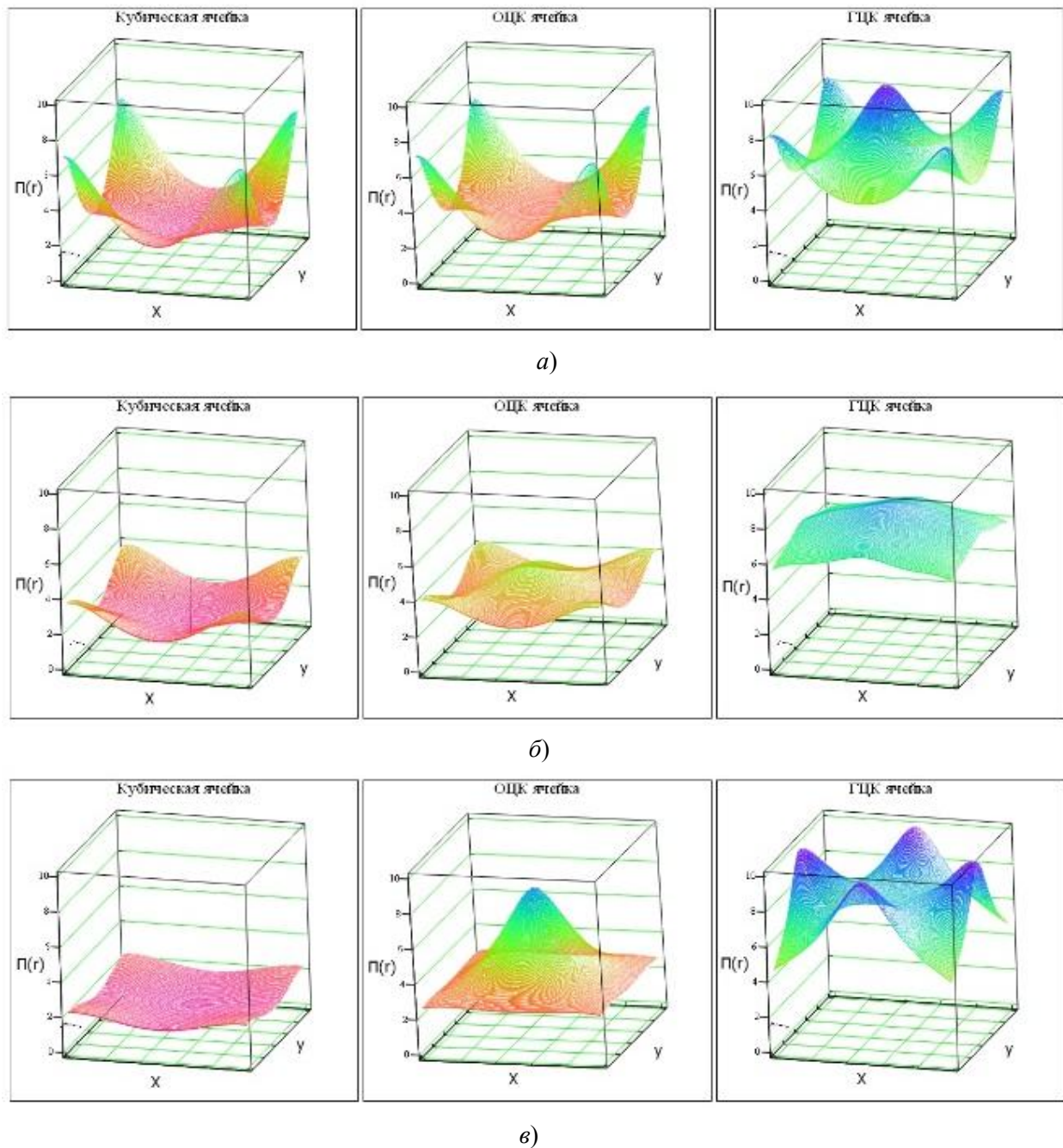


Рис. 3. Розподіл міжатомного потенціалу в площині (x, y) : а) на грані структурної одиниці, б) в перерізі структурної одиниці, в) в центрі структурної одиниці

Інтегральна щільність потенціалу в структурній одиниці об'ємом $V_{cm.ed.} = a \cdot b \cdot c$

$$\Pi_{c.m.e.} = \Delta \Pi \cdot N = \Delta \Pi \frac{V_{cm}}{\Delta V}. \quad (7)$$

Більш складні варіанти структурної одиниці в разі гранецентрованої і об'ємно центрованої структури так само можливо розрахувати за допомогою запропонованої моделі, додавши відповідні атоми на межі або в центр структурної одиниці. На рис. 3 наведено розподіл міжатомного потенціалу у перерізах ОЦК, ГЦК та кубічної структурних одиниць, розрахований за допомогою пропонуваної моделі.

При зовнішніх впливах на структурну одиницю: підведення тепла, деформація під дією зовнішньої сили, об'єм V_{cm} буде змінюватись зі зміною міжатомних відстаней по осях

координат: $a + \delta_x, b + \delta_y, c + \delta_z$, де $\delta_x, \delta_y, \delta_z$ — зміна міжатомних відстаней — це необхідно враховувати при дослідженні впливу зовнішніх впливів на структурну одиницю.

Знаючи локальний розподіл потенціалу (6) і використовуючи вирази (1), вирішивши диференціальне рівняння

$$2aD(e^{-2a\Delta r} - e^{-a\Delta r}) = \frac{dk(\Delta r)}{d\Delta r} \Delta r + K(\Delta r) \quad (8)$$

отримаємо функціональну залежність $K(\Delta r)$. Це дає можливість обчислити локальні коефіцієнти жорсткості в елементах структурної одиниці.

Знаючи локальні значення потенціалу і коефіцієнта жорсткості зв'язку можна вирішити задачу з розподілом вільних електронів в міжатомному просторі. Стійка рівновага вільних електронів буде в тих точках $P(x, y, z)$, де потенціал приймає максимальне значення по модулю (враховуючи, що він негативний).

Значення коефіцієнта жорсткості за напрямками координат можна представити у вигляді матриць

$$k_{ij} = \begin{vmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{1m} \\ k_{i21} & k_{i22} & k_{2m} \\ k_{31} & k_{32} & k_{3m} \\ k_{n1} & k_{n2} & k_{nm} \end{vmatrix}; \quad k_{ik} = \begin{vmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{1l} \\ k_{i21} & k_{i22} & k_{2l} \\ k_{31} & k_{32} & k_{3l} \\ k_{n1} & k_{n2} & k_{nl} \end{vmatrix}; \quad k_{jk} = \begin{vmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{1l} \\ k_{i21} & k_{i22} & k_{2l} \\ k_{31} & k_{32} & k_{3l} \\ k_{m1} & k_{m2} & k_{ml} \end{vmatrix}. \quad (9)$$

Аналогічним чином записується локальний потенціал $\Delta\Pi_{ij}, \Delta\Pi_{ik}, \Delta\Pi_{jk}$.

Вирази (9) дають можливість розрахувати сили, що виникають при деформації структурної одиниці за напрямками x, y, z , x, y, z , їх взаємозв'язок і потік електронів через ΔV , при впливі на структурну одиницю за допомогою електричного поля. Для цього необхідно скористатися рівнянням Шредінгера:

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{d^2\psi}{dz^2} \right) + \Delta\Pi(x, y, z)\psi, \quad (10)$$

де i — уявна одиниця; m — маса електрона; $\psi(x, y, z, t)$ — хвильова функція; $\Delta\Pi(x, y, z)$ — потенціал міжатомної взаємодії в області (x, y, z) простору структурної одиниці; $\hbar$ — стала Планка.

З огляду на те що хвильові функції комплексно зв'язані, рівняння (10) можна переписати так:

$$\frac{d\psi^*}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{d^2\psi^*}{dx^2} + \frac{d^2\psi^*}{dy^2} + \frac{d^2\psi^*}{dz^2} \right) + \frac{1}{\hbar} \Delta\Pi(x, y, z)\psi^*. \quad (11)$$

Введемо позначення для потоку ймовірності проходження електронів через поперечний переріз об'єму ΔV :

$$q = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi^* \left(\frac{d\psi}{dx} + \frac{d\psi}{dy} + \frac{d\psi}{dz} \right) - \psi \left(\frac{d\psi^*}{dx} + \frac{d\psi^*}{dy} + \frac{d\psi^*}{dz} \right) \right]. \quad (12)$$

Скористаємося законом збереження ймовірності, який можна трактувати як закон збереження числа частинок, що знаходяться в даному квантовому стані, тоді густину частинок (електронів) в кожній точці структурної одиниці можна виразити через хвильову функцію ψ .

$$W_{\Delta V} = N_{\Delta V} |\psi|^2. \quad (13)$$

Інтегруючи вираз (13) визначимо число часток в об'ємі ΔV

$$N_{\Sigma} = N_{\Delta V} \int_0^{\Delta V} |\psi|^2 dV. \quad (14)$$

Потік числа частинок через поверхню, обмежену цим об'ємом, дорівнюватиме убутку ймовірності перебування частинок в цьому об'ємі.

$$\frac{dW_{\Delta V}}{dt} = -N_{\Delta V} \oint_S q ds. \quad (15)$$

Висновки

Використання запропонованої методики обчислення об'ємної густини потенціалу міжатомної взаємодії в структурній одиниці дозволяє використовувати рівняння Шредінгера для обчислення густини частинок, потоку частинок в часі в даній точці структурної одиниці.

Знаючи величину потенціалу $\Delta P(x, y, z)$ в даній точці і використовуючи наведені вирази можливо дослідити фізичні властивості речовини, що складається з даних структурних одиниць, з огляду на те, що під частками (в широкому сенсі) можна мати на увазі: електрони, фонони, фотони. Відповідно, електрони характеризують електропровідність, фонони — поширення тепла в структурній одиниці (тобто теплопровідність), фотони — поширення світла. Зміна інтегрального значення потенціалу міжатомної взаємодії $\Delta P(x, y, z)$ характеризує деформацію структурної одиниці. Локальний розподіл потенціалу і локальний коефіцієнт жорсткості k_{ij}, k_{ik}, k_{jk} , дозволяє пояснити протікання височастотних струмів в поверхневому шарі металу, явище дифузії в металах і так далі.

Список використаної літератури

1. Мочалов А.А., Гайша А.А., Евфимко К.Д. Исследования температурных характеристик твердого тела на микроуровне с помощью метода структурных единиц // Журнал нано- та електронної фізики Том 6 № 4, 04040(4с) (2014)
2. Мочалов А.А., Евфимко К.Д., Шаповал Н.А. Исследование особенностей теплопроводности структурной единицы твердого тела // Математичне моделювання – № 2. – 2013. – С. 29–32.
3. Мочалов А.А., Гайша А.А. Методика расчета коэффициента жесткости межатомных связей на основе экспериментальной кривой напряжения // Журнал нано- та електронної фізики Том 1 № 1, 0101(1) (2012)
4. Мочалов А.А., Гайша А.А., Евфимко К.Д. Динамика деформации структурной единицы твердого тела от внешнего воздействия // Журнал нано- та електронної фізики Том 1 № 1, 2009 С. 70–79
5. Мочалов А.А., Евфимко К.Д., Гайша А.А. Исследование зависимости параметров потенциала Морзе от температуры и давления для металлов // Металл и литье Украины. – 2009. – № 11/12. – С. 64–66. Киев. ФТИМС
6. Мочалов А.А., Евфимко К.Д., Гайша А.А. Теоретико-экспериментальный подход в исследовании параметров вещества // Металл и литье Украины. – 2010. – № 4. – С. 45–47. – Киев. ФТИМС.
7. Мочалов А.А. Курс физики т. 1 – Николаев: НУК, 2008. – 566 с.

Наукове видання

Математичне моделювання

Науковий журнал

№ 1 (38) 2018

Технічне редагування, коректування, макетування:
Кравець Л.Ю.

Здано до набору 29.03.2018.

Підписано до друку 30.03.2018.

Формат 60×84 1/8.

Ум.-друк. акр. 25,8. Обл. вид. арк. 13,88.

Тираж 100 прим. Замовлення №

Віддруковано у редакційно-видавничому відділі ДДТУ з готового оригінал-макету. Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи до державного реєстру видавців серія ДК № 5399 від 26.07.2017.

Адреса редакції:

51918, Дніпропетровська обл., м. Кам'янське,
вул. Дніпробудівська, 2, корпус 5, каб.17а,

E-mail: matmod@dstu.dp.ua