

Краевая научно-практическая конференция учебно-исследовательских и
проектных работ учащихся 6-11 классов
«Прикладные и фундаментальные вопросы математики»

Математическое моделирование

**Математическое моделирование распространения звука в
среде с дефектами**

Никулин Александр, Целищев Вячеслав,
11 кл., МБОУ «Лицей №1» г. Перми,

Волегов Павел Сергеевич,
к.ф.-м.н., доцент ПНИПУ

Пермь. 2013.

Введение

Процесс постепенного накопления материалом повреждений под действием переменных (часто циклических) нагрузок, приводящий к изменению его свойств, образованию трещин, их развитию и последующему разрушению материала называется **усталостью** материала.

Важное свойство, которое меняется из-за усталости материала – это его прочность. Уменьшение прочности материала может привести к небезопасному использованию продуктов, изготовленных из него. Например, в ходе многочисленных полетов крылья самолета повреждаются из-за усталости материала, что может привести к их разрушению. При воздействии периодических порывов ветра на строение, прочность опорных деталей уменьшается и они разрушаются, что приводит к падению строения.

На микроуровне усталость материала обусловлена формированием и развитием дефектов кристаллической решетки. Кристаллическая решетка – это совокупность математических линий, проведенных через положения равновесия атомов вещества (которые называют узлами кристаллической решетки). Тела, имеющие кристаллическую решетку, называются кристаллическими. Дефектом кристаллической решетки называют нарушение строгой периодичности в расположении атомов. Различают несколько видов дефектов: точечные дефекты (вакансия, замещение, внедрение), дислокации (винтовая и линейная), границы зерен в поликристалле и т.д.

- Вакансия – дефект кристаллической решетки, который представляет собой отсутствие одного атома в узле кристаллической решетки.
- Замещение – дефект кристаллической решетки, который представляет собой расположение одного атома в узле кристаллической решетки вместо другого.

- Внедрение – дефект кристаллической решетки, который представляет собой нахождение атома не в узле кристаллической решетки, а между узлами.
- Линейная – дислокация, которая представляет собой совокупность вакансий, соизмерима с размером кристалла только в одном направлении.

В ходе циклических деформаций количество дефектов растет, образуются ансамбли дефектов, в том числе микротрещины; наличие микротрещин снижает прочность материала.

Во избежание разрушения материала в процессе эксплуатации перед началом использования необходимо проверить материал на наличие микроповреждений. Сложность проверки заключается в том, что они образуются не только на поверхности, но и внутри материала. Поэтому для проверки материала изнутри используется метод ультразвуковой дефектоскопии, который является наиболее распространенным методом неразрушающего контроля и основанный на исследовании процесса распространения ультразвуковых колебаний с частотой 0,5 – 25 МГц в контролируемых изделиях с помощью специального оборудования — ультразвукового дефектоскопа. Этот метод был предложен С. Я. Соколовым в 1928 году. Принцип метода заключается в том, что при прохождении звуковой волны через среду с дефектами волновая картина и положение фронта меняются, такие волны возбуждают с помощью специальных приборов и затем регистрируют их после прохождения через материал.

Целью настоящей работы является определение изменения звуковой волны при прохождении через среду с дефектами, в отличие от прохождения среды без дефектов, и как вид дефекта и направление звуковой волны влияют на ее изменение.

Задачами данной исследовательской работы являются:

- 1) Рассмотрение трехмерной модели кристаллической решетки.

- 2) Применение законов классической механики для описания межатомных взаимодействий в данной кристаллической решетке.
- 3) Нахождение сил, с которыми атомы действуют друг на друга.
- 4) Нахождение расстояния между ними в зависимости от различных условий.
- 5) Создание программы, реализующей графическое представление прохождения звуковой волны через среду с дефектами.
- 6) Накопление и систематизация данных полученных в результате исследования.
- 7) Анализ накопленных данных и формирование результатов.
- 8) Предоставление выводов, в связи с проделанной работой.

Так как используется система из взаимодействующих атомов, то есть элементов системы, и мы можем выявить связи, то есть отношения, между данными элементами, то будем использовать структурную модель.

Глава 1. Концептуальная постановка задачи

Объектом исследования является кристаллическое тело, которое будем представлять в виде системы атомов, находящихся в кубической кристаллической решетке.

- В качестве связей между атомами выступают пружинки с различными упругими свойствами. Сила упругости которых выражается законом Гука, так как считаем, что возникают только те деформации, при которых не достигается предел пропорциональности.
- Каждый атом может взаимодействовать только с ближайшими соседями.
- Будем рассматривать следующие дефекты кристаллической решетки: дислокации (краевая), точечные дефекты (вакансия, атомы замещения и внедрения).
- Массы атомов неизменны ходе исследования, все атомы имеют одинаковую массу, за исключением рассмотрения среды с точечными дефектами.
- Пренебрегаем силой тяжести, так как она много меньше сил взаимодействия между атомами из-за малой массы атомов.
- Система отсчета инерциальная, для описания движения атомов применим второй закон Ньютона;
- Регистрация звуковой волны происходит со стороны образца, которая противоположна стороне ее инициации.

Глава 2. Математическая постановка задачи

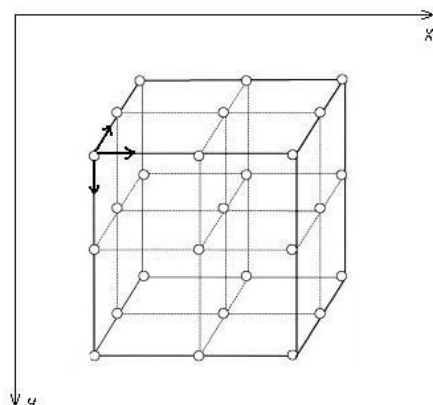


Рис. 1

Запишем второй закон Ньютона для каждого атома:

1) Для внутренних атомов в кристаллической решетке:

$$\vec{F}_{i+1jk} + \vec{F}_{i-1jk} + \vec{F}_{ij+1k} + \vec{F}_{ij-1k} + \vec{F}_{ijk+1} + \vec{F}_{ijk-1} = m\vec{a}_{ijk}. \quad (1)$$

2) Для атомов в углах кристаллической решетки:

$$\vec{F}_{121} + \vec{F}_{211} + \vec{F}_{112} = m\vec{a}_{111}, \quad (2)$$

аналогично для остальных углов.

3) Для атомов на ребре кристаллической решетки:

$$\vec{F}_{111} + \vec{F}_{311} + \vec{F}_{221} + \vec{F}_{212} = m\vec{a}_{211}, \quad (3)$$

$$\vec{F}_{i-111} + \vec{F}_{i+111} + \vec{F}_{i21} + \vec{F}_{i12} = m\vec{a}_{i11}, \quad (4)$$

...

$$\vec{F}_{n-211} + \vec{F}_{n11} + \vec{F}_{n-121} + \vec{F}_{n-112} = m\vec{a}_{n-111}, \quad (5)$$

аналогично для остальных ребер.

4) Для атомов на грани кристаллической решетки:

$$\vec{F}_{211} + \vec{F}_{231} + \vec{F}_{121} + \vec{F}_{321} + \vec{F}_{222} = m\vec{a}_{221}, \quad (6)$$

...

$$\vec{F}_{ij-11} + \vec{F}_{ij+11} + \vec{F}_{i-1j1} + \vec{F}_{i+111} + \vec{F}_{ij2} = m\vec{a}_{ij1}, \quad (7)$$

...

$$\vec{F}_{n-2n-11} + \vec{F}_{nn-11} + \vec{F}_{n-1n1} + \vec{F}_{n-1n-21} + \vec{F}_{n-1n-12} = m\vec{a}_{n-1n-11}, \quad (8)$$

аналогично для остальных граней.

В проекции на x :

1) Для внутренних атомов в кристаллической решетке:

$$F_{i+1jkx} + F_{i-1jkx} + F_{ij+1kx} + F_{ij-1kx} + F_{ijk+1x} + F_{ijk-1x} = ma_{ijkx} \quad (9)$$

2) Для атомов в углах кристаллической решетки:

$$F_{121x} + F_{211x} + F_{112x} = ma_{111x}, \quad (10)$$

аналогично для остальных углов.

3) Для атомов на ребре кристаллической решетки:

$$F_{111x} + F_{311x} + F_{221x} + F_{212x} = ma_{211x}, \quad (11)$$

$$F_{i-111x} + F_{i+111x} + F_{i21x} + F_{i12x} = ma_{i11x}, \quad (12)$$

...

$$F_{n-211x} + F_{n11x} + F_{n-121x} + F_{n-112x} = ma_{n-111x}, \quad (12)$$

аналогично для остальных ребер.

4) Для атомов на грани кристаллической решетки:

$$F_{211x} + F_{231x} + F_{121x} + F_{321x} + F_{222x} = ma_{221x}, \quad (14)$$

...

$$F_{ij-11x} + F_{ij+11x} + F_{i-1j1x} + F_{i+111x} + F_{ij2x} = ma_{ij1x}, \quad (15)$$

...

$$F_{n-2n-11x} + F_{nn-11x} + F_{n-1n1x} + F_{n-1n-21x} + F_{n-1n-12x} = ma_{n-1n-11x}, \quad (16)$$

аналогично для остальных граней.

Аналогично для осей y и x .

Согласно принятой гипотезе, что в качестве связей между атомами выступают пружинки с различными упругими свойствами. Сила упругости которых выражается законом Гука, так как считаем, что возникают только те деформации, при которых не достигается предел пропорциональности, подставим соответствующие выражения для сил взаимодействия:

1) Для внутренних атомов в кристаллической решетке:

$$k((x_{ijk} - x_{i-1jk}) - l_0) + k((x_{i+1jk} - x_{ijk}) - l_0) = ma_{ijkx} \quad (17)$$

2) Для атомов в углах кристаллической решетки:

$$k((x_{211} - x_{111}) - l_0) = ma_{111x}, \quad (18)$$

аналогично для остальных углов.

3) Для атомов на ребре кристаллической решетки:

$$k((x_{311} - x_{211}) - l_0) + k((x_{211} - x_{111}) - l_0) = ma_{211x}, \quad (19)$$

...

$$k((x_{i+211} - x_{i+111}) - l_0) + k((x_{i+111} - x_{i11}) - l_0) = ma_{i+111x}, \quad (20)$$

...

$$k((x_{n-211} - x_{n-111}) - l_0) + k((x_{n-111} - x_{n11}) - l_0) = ma_{n-111x}, \quad (21)$$

аналогично для остальных ребер.

4) Для атомов на грани кристаллической решетки:

$$k((x_{221} - x_{121}) - l_0) + k((x_{321} - x_{221}) - l_0) = ma_{221x}, \quad (22)$$

...

$$k((x_{ij1} - x_{i-1j1}) - l_0) + k((x_{i+1j1} - x_{ij1}) - l_0) = ma_{ij1x}, \quad (23)$$

...

$$k((x_{n-1n-11} - x_{n-2n-11}) - l_0) + k((x_{nn-21} - x_{n-1n-11}) - l_0) = ma_{n-1n-1x}, \quad (24)$$

аналогично для остальных граней.

