

УДК 378.147.88

**ВОЗМОЖНОСТИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
ПРИ ИЗУЧЕНИИ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА****Маркидонов А. В.^{1,2}, Лубяной Д. А.¹**¹Филиал КузГТУ в г. Новокузнецке²Новокузнецкий филиал (институт)

ФГБОУ ВО «Кемеровский государственный университет»

Аннотация: В предлагаемой статье рассматривается возможность использования компьютерного моделирования для описания кристаллической структуры твердых тел и использование полученных результатов в учебном процессе. Приведен обзор свободно распространяемого программного обеспечения, предназначенного для моделирования и визуализации результатов экспериментов.

Ключевые слова: моделирование, визуализация, эксперимент, кристалл, образование.

Annotation: The proposed article discusses the possibility of using computer simulation to describe the crystal structure of solids and the use of the results obtained in the educational process. An overview of free software for modeling and visualization of experimental results is given.

Key words: modeling, visualization, experiment, crystal, education.

Современным трендом высшего образования является использование информационных технологий в учебном процессе. Применение технических средств обучения позволяет не только расширить демонстрационные возможности при подаче материала, но и активизировать мыслительную деятельность обучающихся. Изучение физики твердого тела, являющегося разделом общей физики, изучаемой в высших учебных заведениях, может быть усовершенствовано при помощи постановки компьютерных экспериментов. Применяемая для этого вычислительная техника позволяет смоделировать протекание реальных процессов в тех случаях, когда проведение натурального эксперимента не целесообразно с финансовой или временной точки зрения.

Целью представленной работы является рассмотрение возможностей компьютерного моделирования при изучении физики твердого тела, оценки его места в учебном процессе, и описание программной реализации компьютерных экспериментов.

В настоящее время компьютерный эксперимент широко используется в задачах, требующих большого количества численных расчетов или которые не могут быть решены простыми аналитическими методами. Данный метод исследования является общепризнанным и быстро развивающимся, широкому распространению которого способствует увеличение вычислительных мощностей ЭВМ и усложнение изучаемых процессов и явлений.

Нередко выполнение исследование свойств и структуры материалов связано с целым рядом трудностей. Например, затруднения могут вызвать как осуществление контроля над условиями выполняемого эксперимента, так и непосредственное измерение различных оцениваемых характеристик. В результате чего возможна неоднозначная трактовка полученных в ходе эксперимента результатов. Поэтому в некоторых случаях исследователи могут отдавать предпочтение компьютерному эксперименту.

Компьютерный эксперимент представляет собой метод вычисления, в котором рассматриваемые физические процессы моделируются в соответствии с заданной последовательностью физических механизмов. При этом его можно рассматривать как связующее

звено между реальным экспериментом и имеющейся на данном научном этапе теорией, опираясь на которую компьютерный эксперимент осуществляется в виде математических вычислений. По мере увеличения вычислительных мощностей сложность используемых моделей может возрастать, приближаясь к результатам, получаемым в ходе реального эксперимента. Кроме того, исследование, выполняемое средствами ЭВМ, позволяет многократно повторять эксперименты, которые продублировать в реальности не представляется возможным по экономическим или временным соображениям, а также с его помощью можно значительно увеличить возможности теоретических исследований. Тем не менее, нужно признать, что без теоретической основы, базирующейся на математических представлениях об исследуемом явлении, и без результатов, полученных в ходе реальных экспериментов, с которыми сопоставляются результаты моделирования, компьютерный эксперимент не имеет смысла.

По сравнению с реальным экспериментом компьютерный имеет ряд достоинств, которые заключаются в следующем. Во-первых, граничные условия модели и вводимые извне переменные полностью определяются исследователем до начала постановки эксперимента, что позволяет исключить влияние на получаемый результат случайных факторов или же, наоборот, изучить влияние отдельно взятого фактора. Во-вторых, получение результатов эксперимента не предполагает дополнительное внешнее воздействие, которое способно внести свой вклад в получаемые итоговые значения.

При осуществлении моделирования материалов средствами ЭВМ различают три основных подхода, различающихся выбором масштабного уровня: макроскопический, мезоскопический и микроскопический.

В случае использования микроскопического подхода при компьютерном моделировании рассматривается система взаимодействующих друг с другом (а в некоторых случаях и с окружающей средой) частиц. Данный подход имеет смысл тогда, когда исследуемое явление во многом определяется такими элементарными событиями как динамика совокупности взаимодействующих атомов или их движением по отдельности. Моделируемые при этом временные масштабы изучаемых процессов гораздо меньше, чем у макроскопических процессов, а пространственные масштабы сопоставимы с межатомными расстояниями.

Проведение исследования с помощью компьютерного эксперимента предполагает выполнение следующей последовательности действий:

- Определение физической модели, являющейся объектом исследования. Кроме системы взаимодействующих частиц, физическими моделями могут являться дислокации, зерна, трещины и так далее;
- Выбор параметров рассматриваемой физической модели, и определение пределов, в которых они могут изменяться;
- Выбор математического аппарата для формализации выбранной модели;
- Формализация модели и выбор критериев, позволяющих проверить достоверность получаемых численных результатов;
- Аппроксимация уравнений, определение параметров аппроксимации и составление расчетных программ для ЭВМ;
- Проведение численного эксперимента и получение результатов;
- Статистическая обработка полученных результатов;
- Проверка соответствия результатов физическим критериям модели;
- Сравнение полученных численных значений параметров модели с результатами реальных экспериментов.

При проведении компьютерного эксперимента необходимо выдерживать определенный баланс. Физическая модель должна быть создана таким образом, чтобы были воспроизведены все ключевые физические особенности исследуемого процесса или явления, но при этом она должна быть достаточно простой, так как в противном случае выполнить численные расчеты будет невозможно. Выбор математического аппарата модели зависит от метода, применяемого при проведении компьютерного эксперимента.

В настоящее время для проведения компьютерного эксперимента можно использовать специализированные программные продукты, разработанные различными группами исследователей. В частности, широкой популярностью пользуются некоммерческие пакеты программ с открытыми исходными кодами, такие как LAMMPS [1], NAMD [2] и XMD [3].

Пакет LAMMPS написан группой сотрудников Сандийских национальных лабораторий (США) под руководством Стива Плимптона. LAMMPS может моделировать совокупности частиц в жидком, твердом или газообразном состояниях. С его помощью можно создавать различные структуры: атомные системы, металлы, полимеры, гранулярные материалы, органические молекулы и т.д. LAMMPS может моделировать системы с небольшим количеством частиц, и системы, в которых количество частиц равно миллиону или миллиардам.

Пакет NAMD разработан в Илинойском университете (США) и предназначен для высокопроизводительного моделирования крупных биомолекулярных систем с использованием технологии параллельных вычислений. Также как и LAMMPS программа NAMD не имеет графического интерфейса. Для демонстрации результатов моделирования используется программа VMD, разработанная в том же университете.

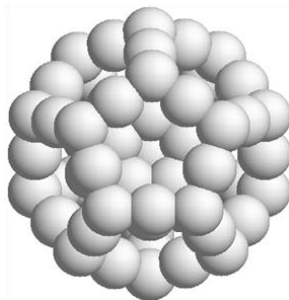
Пакет молекулярно-динамического моделирования XMD создан Джоном Рифкиным в университете штата Коннектикут (США) и распространяется по лицензии GPL. Данный пакет предназначен для моделирования металлов, сплавов, керамики и может использоваться как для вычислений на однопроцессорных компьютерах, так и на параллельных кластерах. Очевидным преимуществом XMD является широкий набор поддерживаемых потенциалов, сравнительная простота использования, открытость исходных кодов, возможность создавать специфические кристаллические решетки, и использование обычных текстовых файлов для ввода команд и вывода результатов. Пакет XMD изначально был адаптирован под среду UNIX и MS-DOS. Поэтому для работы в среде Windows используется интерфейс командной строки CLI. Особенностью XMD является то, что ему требуется текстовый файл (скрипт), в котором пользователь, с помощью специальных команд, описывает моделируемую структуру вещества и физические условия проведения эксперимента. Контролируемые в ходе моделирования, показатели также могут быть записаны в отдельный файл.

Среди описанных выше программ субъективно XMD значительно проще в освоении. Успешное овладение основами работы в данном пакете позволит сформировать необходимые навыки для выполнения компьютерных экспериментов с использованием более сложных программных продуктов. В связи с вышесказанным именно пакет XMD был выбран для выполнения практических заданий учащимися.

Необходимо отметить, что пакет XMD является консольным приложением и лишен графического окна. Для отображения моделируемых структур может использоваться программа RasMol [4], разработанная Роджером Сэйлом в начале 90-х годов на кафедре биомолекулярных структур Эдинбургского университета (Великобритания) и предназначенная для получения пространственных изображений биологических макромолекул, в первую очередь белков и нуклеиновых кислот. RasMol является программой с открытым кодом и распространяется по лицензии GPL. Данную программу отличает простота и логичность структуры пользовательского интерфейса. Исходными данными для RasMol являются координаты ато-

мов, содержащиеся в файле формата *.pdb. Формат PDB был установлен Брукхавенской национальной лабораторией в США в 1971 г. для архивирования структур молекул, а у его истоков стоят кристаллографы Эдгар Майер, Герсон Коэн и Хелен Берман.

Для демонстрации и изучения различных физических процессов, протекающих в кристаллах, были разработаны практические задания, для выполнения которых предполагается использование компьютеров. Данные задания включают в себя не только классические задачи («Изучение процесса плавления и кристаллизации», «Расчет равновесного параметра кристаллической решетки», «Расчет линейного коэффициента теплового расширения» и т.д.), но и более современные задачи, решению которых посвящены работы учеников научной школы заслуженного деятеля науки РФ, доктора физико-математических наук, профессора Старостенкова М.Д [5-9]. Наблюдения за поведением учащихся показали, что предлагаемые задания выполняются с интересом, а возможности визуализации исследуемых процессов позволяют более точно представить картину физических явлений (см. рис.1).



*Рисунок 1. Квазикристалл из додекаэдров,
демонстрируемый с помощью RasMol.*

Список литературы:

1. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Электронный ресурс]. – URL: <http://lammps.sandia.gov/>.
2. NAMD – Scalable Molecular Dynamics [Электронный ресурс]. – URL: <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>.
3. XMD – Molecular Dynamics for Metals and Ceramics [Электронный ресурс]. – URL: <http://xmd.sourceforge.net/>.
4. RasMol – Molecular Graphics Visualisation Tool [Электронный ресурс]. – URL: <http://www.rasmol.org/>.
5. Медведев Н. Н., Старостенков М. Д., Маркидонов А. В., Захаров П. В. Волны, возникающие при рекомбинации пар Френкеля в двумерных модельных решетках металлов и их влияние на дрейф агрегатов точечных дефектов // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2009. Т.6. №2. С.8-13.
6. Маркидонов А. В., Старостенков М. Д., Потеекаев А. И., Медведев Н. Н., Неверова Т. И., Барчук А. А. Поведение краудионов и их комплексов в слабоустойчивом состоянии материалов // *Известия ВУЗов. Физика*. 2011. Т.54. №11. С.61-67.
7. Маркидонов А. В., Старостенков М. Д., Павловская Е. П., Яшин А. В., Медведев Н. Н., Захаров П. В. Структурная трансформация вакансионных пор в деформированном кристалле под воздействием ударных волн // *Фундаментальные проблемы современного*

материаловедения. 2013. Т.10. №4. С.563-571.

8. Яшин А. В., Чаплыгина А. А., Старостенков М. Д., Маркидонов А. В., Сеница Н. В., Мясниченко В. С., Сосков А. А. Структурная перестройка в нановолокне CuAu I при одноосной деформации растяжения в направлении $\langle 001 \rangle$ // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2013. Т.10. №1. С. 93-97.

9. Маркидонов А. В., Старостенков М. Д., Смирнова М. В., Коваленко В. В., Захаров П. В. Влияние ударных послекаскадных волн на динамику краевой дислокации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т.11. №4. С.461-469.