

этой зоны стабильна. Среднее значение с рассеивание для каждой из трех выборок составляет следующие величины:  $53,6 \pm 19\text{HV}$ ;  $51,0 \pm 14\text{HV}$ ;  $45,55 \pm 10,2\text{HV}$ . Причем данные значения получены на участках длиной 1мм, а на любом из коротких участков выборки длиной 0,3...0,4 мм рассеивание размеров не превышает  $\pm 6,1\text{HV}$ . Данная зависимость характерна для каждой из трех выборок и может быть принятой постоянной для любого из направлений.

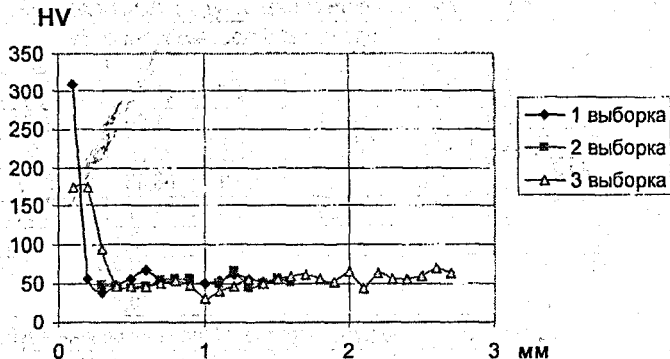


Рисунок 2- График изменения микротвердости в зоне эмаливо-дентинной границы

### ВЫВОДЫ

- Проведенные испытания по определению микротвердости дентина показали следующие:
1. Для получения достоверности результатов исследования с вероятностью  $P(t)=0$ , необходимо проводить испытания не менее чем на двух образцах.
  2. Величина нагрузки на индентор (алмазную пирамиду) должна составлять 1Н ( $1,47\text{Н}$ ), что обеспечивает минимальное рассеивание размеров в пределах твердости дентина  $20...80\text{HV}$ .
  3. Выборка должна составлять не менее 3-х замеров в одной плоскости.
  4. Рассеивание твердости дентина за зоной эмаль-дентин можно принимать постоянным как в горизонтальном, так и в вертикальном сечениях зуба.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Орловский А.Б. Критерии выбора материалов для реставрации.- Киев: Кристар, 2001.- 100 с.
2. Материаловедение / Под ред. Ю.М.Соломенцева. - М.: Высшая школа, 2005.
3. Ящерицин П.И., Махаринский Е.И. Планирование эксперимента в машиностроении (справочное пособие).- Мн.: Выш. шк., 1985.-286с.

УДК 519.876.5

Бычук Т.Н.

Научный руководитель: доц. Дереченник С.С.

### МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ КАК ЧАСТНЫЙ СЛУЧАЙ МЕТОДА ЧАСТИЦ

Развитие технологий, позволяющих изучать микроструктуру тел, привело к накоплению фактов, свидетельствующих о чрезвычайно высокой роли внутренней структуры материала в процессах, обеспечивающих его функциональное назначение. Возросший в последнее десятилетие интерес к механическим свойствам нанообъектов требует еще

более серьезного внимания к влиянию внутренней структуры материала на его механическое поведение. Особую актуальность приобретает развитие аналитических и компьютерных моделей, которые могли бы адекватно описать механические свойства подобных сред и веществ [1].

Большие перспективы связывают с использованием метода частиц – представление тела совокупностью взаимодействующих частиц, описываемых законами классической механики. Целью такого метода является понимание свойств молекулярных связей в терминах структуры исследуемого соединения и микроскопических взаимодействий между молекулами вещества. Преимущество метода частиц по сравнению с методами, основанными на концепции сплошной среды, заключается в том, что он требует значительно меньше априорных предположений о свойствах материала [1]. Задавая потенциал межмолекулярного взаимодействия, можно моделировать такие эффекты, как пластичность, образование трещин, разрушение, температурное изменение свойств материала, фазовые переходы. Для описания каждого из этих эффектов в рамках сплошной среды требуются отдельные вычисления, в то время как при моделировании методом частиц эти эффекты получаются автоматически, в результате интегрирования уравнений движения. В частности, необратимость механических процессов достигается за счет перехода механической энергии длинноволновых движений материала в тепловую энергию хаотического движения частиц.

Можно выделить два наиболее важных метода техники моделирования – метод молекулярной динамики (МД) и метод Монте-Карло. Известен также ряд гибридных методов, которые сочетают особенности обоих названных.

Определив на начальном этапе моделирования предполагаемые взаимодействия между молекулами изучаемого вещества, с помощью метода МД получают точные предсказания объемных свойств вещества [2] (понятие точности результатов зависит, в основном, от возможностей компьютерной техники, используемой для моделирования).

Моделированием МД можно получить также такие свойства вещества, которые сложно определить экспериментально, например, связь между коэффициентом распространения и скоростной функцией автокорреляции.

Моделирование МД действует как мост между теорией и экспериментом (рисунок 1), т.е. с его помощью можно, моделируя рассматриваемое вещество, проверить теорию, а, сравнивая результаты моделирования с экспериментальными результатами – проверить модель. Моделирование МД также можно представить как связь микроскопического и макроскопического уровней представления вещества (рисунок 2).

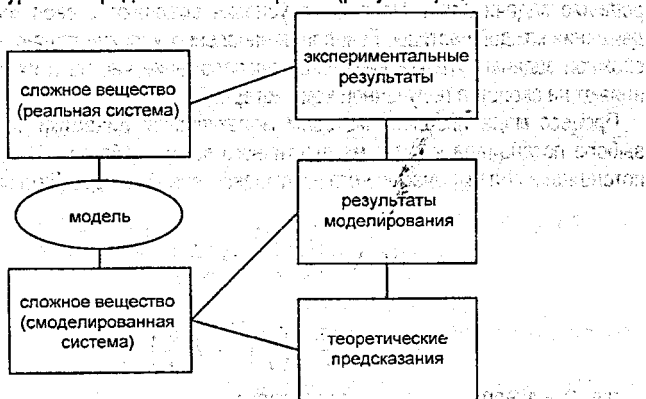


Рисунок 1. Моделирование МД как связь между теорией и экспериментом [2]

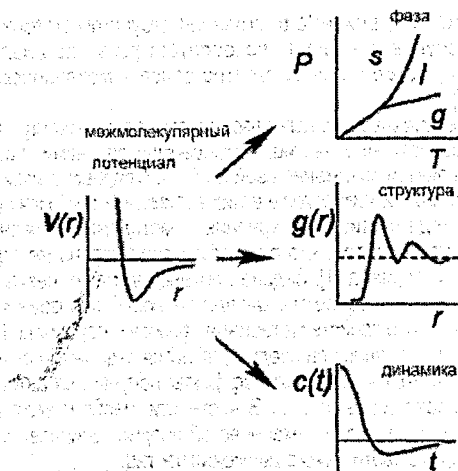


Рисунок 2. Моделирование МД как связь микроскопического и макроscopicкого уровней вещества [2]

Моделирование молекулярной динамики [3] состоит из численного решения уравнений движения классической механики, которые для простой атомной системы описываются как:

$$m_i \cdot \ddot{r}_i = f_i, \quad (1)$$

где  $m_i$  – масса  $i$ -й частицы,

$f_i$  и  $r_i$  – сила, действующая на  $i$ -ю частицу вещества и расстояние действия силы.

$$f_i = - \frac{\partial}{\partial r_i} U, \quad (2)$$

где  $U$  – потенциальная энергия.

С математической точки зрения решение системы уравнений представляет собой решение задачи Коши. Начальные условия включают в себя координаты и скорости движения каждой частицы. Генерация начальных условий является отдельной и весьма сложной задачей, так как начальное расположение частиц и их скорости существенно влияют на свойства полученной компьютерной модели.

Процесс моделирования методом молекулярной динамики основан на правильном выборе потенциала и силы межчастичного взаимодействия. Чаще всего используется потенциал и сила межчастичного взаимодействия Леннарда-Джонса:

$$\Pi(r) = D \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{a}{r} \right)^6 \right], \quad (3)$$

$$F(r) = \frac{12D}{a} \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{13} - 2 \left( \frac{a}{r} \right)^7 \right], \quad (4)$$

где  $D$  – энергия связи,  $a$  – длина связи.

Данный потенциал весьма точно описывает свойства ряда веществ, а также силы взаимодействия Ван-дер-Ваальса. К его достоинствам также относится и вычислительная простота, не требующая иррациональных и трансцендентных функций. Потенциал Леннарда-Джонса используется, когда имеет место исследование физических закономерностей, а не получение точных количественных результатов. К его недостаткам можно отнести тот факт, что он является двухпараметрическим. Фактически, он позволяет удовлетворить значению только одного параметра, например, модулю упругости или пределу точности в статике [4], скорости распространения продольных волн или откольной скорости в динамике. Тем не менее, данный потенциал вполне подходит для упаковки веществ аморфной структуры.

Для более детального исследования могут использоваться и другие формы представления потенциальной энергии – например, потенциал и сила взаимодействия, которые являются четырехпараметрическими. Его недостаток – зависимость потенциала от  $m$  и  $n$ , риск неправильности выбора этих параметров и сложность вычислений с ростом их значений.

$$\Pi(r) = \frac{D}{n-m} \left[ m \left( \frac{a}{r} \right)^n - n \left( \frac{a}{r} \right)^m \right], \quad (5)$$

$$F(r) = \frac{nm}{n-m} \cdot \frac{D}{a} \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{n+1} - \left( \frac{a}{r} \right)^{m+1} \right]. \quad (6)$$

По параметрическим характеристикам между потенциалом Леннарда-Джонса и потенциалом Ми находится трехпараметрический потенциал Морзе (7, 8), который позволяет удовлетворять значению двух независимых макроскопических характеристик (например, модулю упругости и пределу прочности в статике, скорости распространения продольных волн и откольной скорости в динамике). К его достоинствам можно отнести также более быстрое затухание на расстоянии, что удобно при взаимодействии ближайших частиц. Но, по сравнению с потенциалом Леннарда-Джонса, при определении потенциала Морзе необходимо вычислять экспоненту, что ведет к существенному замедлению моделирования.

$$\Pi(r) = D \left( e^{-2\alpha(r-a)} - 2e^{-\alpha(r-a)} \right), \quad (7)$$

$$F(r) = 2\alpha D \left( e^{-2\alpha(r-a)} - 2e^{-\alpha(r-a)} \right). \quad (8)$$

Существует также ряд других потенциалов, которые отличаются степенью дальности действия: сплайновые потенциалы, модифицированный потенциал и др. Их достоинство – ускорение численных расчетов за счет уменьшения радиуса, а недостаток – учет взаимодействия лишь тех частиц, которые вошли в ограниченный радиус.

Таким образом, для моделирования структуры материалов методом молекулярной динамики следует выполнить следующие этапы:

- выбрать потенциал межчастичного взаимодействия;
- определить внешнюю форму исследуемого объекта (куб, шар и т.д.);
- задать желаемый тип структуры вещества (кристалл, поликристалл, аморфное вещество);
- сгенерировать начальные условия (координаты и начальные скорости частиц в трехмерном пространстве);
- вычислять эволюцию структурных параметров моделируемой системы во времени.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Krivtsov A.M. Molecular Dynamics Simulation of Impact Fracture in Polycrystalline Materials // *Mechanica*. – 2003. – № 38. – С. 61–70.
2. Allen M. Introduction to Molecular Dynamics Simulation [Electronic resource]. – 2004. – P. 1–28. – Mode of access: <http://www.fz-juelich.de/nic-series/volume23>
3. Kristiansen K., Wouterse A., Philipse A. Simulation of random packing of binary sphere mixtures by mechanical contraction / *Physica*. – 2005. – № 358. – С. 249–262.
4. Волошин В.П., Медведев Н.Н. Исследование препика структурного фактора. Анализ неоднородных упаковок Леннард-Джонсовских атомов // *Журнал структурной химии*. – 2005. – Том 46, №1. – С. 96–100

УДК 519.233.3

**Дмитриева А.В.**

**Научный руководитель: доц. Дереченник С.С.**

### КРИТЕРИЙ СОГЛАСИЯ ПИРСОНА И МЕТОДЫ ГРУППИРОВАНИЯ ДАННЫХ

Цель данной работы – исследовать эффективность критериев согласия типа хи-квадрат ( $\chi^2$ ) Пирсона при разбиении области определения случайной величины на интервалы равной длины.

При использовании критериев согласия типа  $\chi^2$  область определения разбивается на

$k$  интервалов граничными точками:  $x_0 < x_1 < \dots < x_{k-1} < x_k$ .

Статистика  $\chi^2$  Пирсона вычисляется в соответствии с соотношением [1]:

$$\chi^2 = N \sum_{i=1}^k \frac{(n_i / N - P_i(\theta))^2}{P_i(\theta)}, \quad (1)$$

где  $n_i$  – количество наблюдений, попавших в интервал;

$P_i(\theta) = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x, \theta) dx$  – вероятность попадания наблюдения в  $i$ -й интервал;

$n = \sum_{i=1}^k n_i$  – количество всех наблюдений;

$\sum_{i=1}^k P_i(\theta) = 1$  – суммарная вероятность.

Статистические свойства критериев типа  $\chi^2$  зависят от того, каким именно образом область определения случайной величины разбивается на интервалы, а также от числа интервалов группирования. При практическом использовании критериев выбирают либо интервалы равной длины, либо интервалы равной вероятности (равной частоты), либо асимптотически оптимальные интервалы (в этом случае минимизируются потери в информации Фишера).

Рекомендуемое в различных источниках количество интервалов группирования, используемое при вычислении оценок параметров, построении гистограмм, а также при проверке статистических гипотез с помощью критерия Пирсона, колеблется в очень широких пределах. Большинство из рекомендуемых формул для оценки числа интервалов