

Чтобы зарядить телефон в разработанной программной модели надо нажать соответствующую кнопку «Зарядка телефона». После этого индикатор батареи переходит в режим отображения процесса зарядки телефона. Телефоном можно пользоваться и во время зарядки.

Для того чтобы отклонить звонок, надо нажать на красную кнопку.

Навигация пользователя в системе меню сопровождается вибрацией телефона, подтверждающей сделанный пользователем выбор.

Реализация данного подхода не может быть не востребована, т.к. делает возможным диалог технологии и людей с нарушениями восприятия алфавитно-цифровой информации. Следует отметить, что данный подход применим не только к средствам мобильной связи, но может с успехом использоваться в любом компьютеризированном устройстве, имеющем графический пользовательский интерфейс.

### ЛИТЕРАТУРА

Раскин Дж. Интерфейс: новые направления в проектировании компьютерных систем. - СПб.: Символ-Плюс, 2003. 272 стр.

Прэтт У. Цифровая обработка изображений. Т. 1. - М.: "Мир", 1982. - 310 стр.

Tamponi E. Communication between Xorg, Xgl, and an OpenGL client, through libGL and the GLX Protocol. 2006. <http://principe.homelinux.net>

УДК 519.876.5: 544.77.022

*Бычук Т.Н.*

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

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОТНОУПАКОВАННЫХ АМОРФНЫХ СТРУКТУР С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Цель данной работы – исследовать свойства однородности (аморфности) неупорядоченных упаковок монодисперсных частиц, получаемых при изотропном сжатии менее плотных структур с применением техники молекулярной динамики.

Метод молекулярной динамики, как частный случай метода частиц, важен тем, что позволяет исследовать влияние внутренней структуры материала на его механические свойства. С его помощью можно также определить изменение свойств вещества, вызванное изменением его объема, например, при изотропном сжатии. Техника молекулярной динамики при моделировании макроскопического поведения материала позволяет получить упаковку с анизотропными либо изотропными механическими свойствами, дело стоит лишь за выбором потенциала и силы межатомного взаимодействия.

Моделирование методом молекулярной динамики – процедура, в которой используются случайные числа (случайные величины), и чтобы использовать такие входные данные, необходимо определить распределения вероятностей. В зависимости от решаемой задачи применяют непрерывное или дискретное распределение. К первому относятся: нормальное, логнормальное и экспоненциальное распределения, гамма-распределение и бета-распределение, распределение Пирсона и распределение Вейбулла, распределение Джонсона и треугольное распределение. Из дискретных распределений часто применяют равномерное, геометрическое и биномиальное распределения, а также используют распределение Бернулли и распределение Пуассона [1].

В данной работе при генерации начальных координат частиц было выбрано распределение Джонсона, т.к. оно дает возможность получить ряд равновероятных значений, что, в свою очередь, сокращает время на их перерасчет:

$$F(x) = \begin{cases} \Phi \left[ \alpha_1 + \alpha_2 \ln \left( \frac{x-a}{b-x} \right) \right], & \text{если } a < x < b, \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases} \quad (1)$$

где  $\Phi(\bullet)$  – функция нормального распределения случайной величины.

Одним из главных достоинств техники молекулярной динамики при моделировании макроскопического поведения материала является возможность получения упаковки с анизотропными либо изотропными механическими свойствами – дело стоит лишь за выбором потенциала и силы межатомного взаимодействия.

Потенциал взаимодействия в динамике частиц играет такую же роль, что и определяющие уравнения в механике сплошной среды. Однако структура потенциала неизмеримо проще, чем у определяющих уравнений, так как он представляет собой скалярную функцию расстояния, в то время как определяющие уравнения представляют собой операторы, в которые входят тензорные характеристики напряженного состояния и деформирования, а также термодинамические величины [2]. Конкретный вид потенциала взаимодействия частиц определяется из сравнения механических свойств компьютерного и реального материалов.

При моделировании методом молекулярной динамики возможно использование различных потенциалов взаимодействия, в данной работе использован потенциал (и сила межчастичного взаимодействия) Леннарда-Джонса, который весьма точно описывает свойства ряда материалов и имеет приемлемую вычислительную сложность:

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

где  $D$  – энергия связи ( $D=1$ ),  
 $a$  – длина связи ( $a=10$ ).

Зависимость потенциала от межчастичного расстояния приведена на рисунке 1.

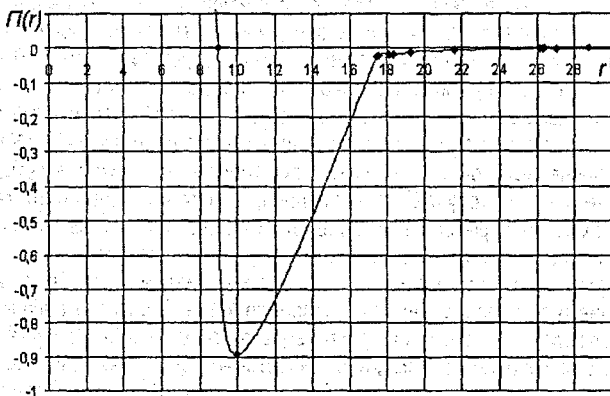
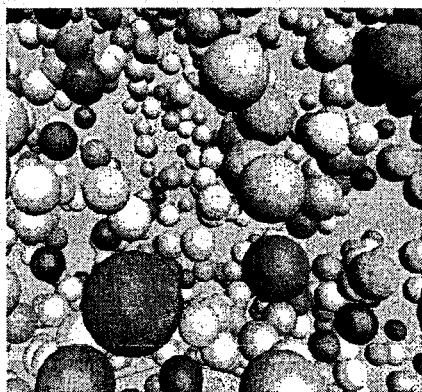


Рисунок 1. Зависимость потенциала Леннарда-Джонса от межчастичного расстояния

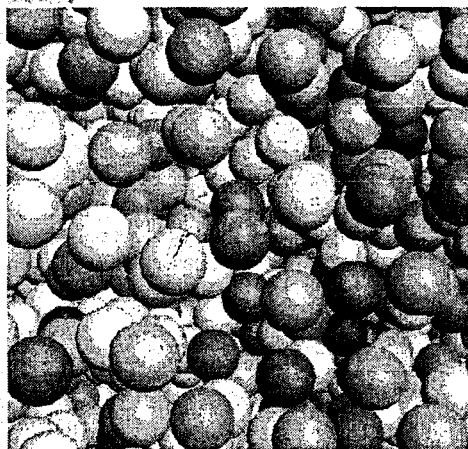
Для реализации метода молекулярной динамики в процессе упаковки многочастичной модели с начальной аморфной структурой использован алгоритм изотропного сжатия.

К сожалению, конечная плотность структуры ограничена состоянием равновесия частиц, т.к. далее появляются огромные силы отталкивания между частицами, которые приводят к высоким скоростям их движения. Эта особенность существенно увеличивает время изотропного сжатия. Изображение начальной упаковки полидисперсной модели вещества представлено на рисунке 2, а конечной упаковки – на рисунке 3.

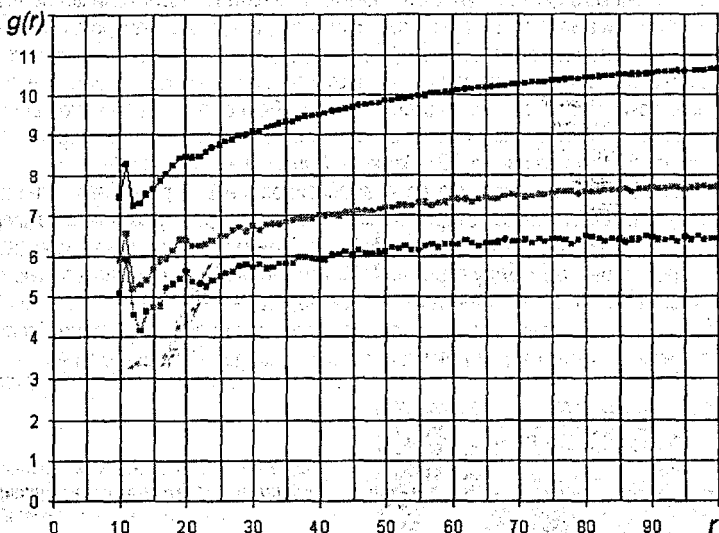
После завершения процесса упаковки анализировалась структурная однородность полученных упаковок, масштаб которой может в несколько раз превышать размеры атомов (частиц) [4]. Природа таких неоднородностей может быть различна и вызываться, например, противоречием между стремлением атомов организовать локальную структуру и невозможностью распространить ее на все пространство. Стандартным инструментом исследования однородности вещества является радиальная функция распределения, результаты расчета которой для исследованных моделей приведены на рисунке 4.



*Рисунок 2. Изображение монодисперсной модели материала (начальная упаковка)*



*Рисунок 3. Изображение монодисперсной модели материала (упаковка после изотропного сжатия)*



**Рисунок 4. Радиальная функция распределения для многочастичной аморфной структуры с количеством атомов 500, 1000 и 5000 (снизу вверх)**

Таким образом, путем компьютерного моделирования многочастичной системы и ее анализа посредством радиальной функции распределения показано, что алгоритм изотропного сжатия структуры с использованием потенциала Леннарда-Джонса позволяет получать изотропные упаковки частиц – т.е. модели однородно неупорядоченных (аморфных) монодисперсных материалов.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Лоу А., Кельтон В. Имитационное моделирование. Классика CS. – С.-Пб.: Питер, 2004. – 847 с.
2. Krivtsov A.M. Molecular Dynamics Simulation of Impact Fracture in Polycrystalline Materials // *Mechanica*. – 2003. – № 38. – С. 61–70.
3. Волошин В.П., Медведев Н.Н. Исследование препика структурного фактора. Анализ неоднородных упаковок Леннарда-Джонсовских атомов // *Журнал структурной химии*. – 2005. – Том 46, №1. – С. 96-100.
4. Дереченник С.С., Разумейчик В.С., Тур В.В. Закономерности топологической неупорядоченности в плоских сечениях и объемах дисперсных систем // *Вестник Брестского государственного технического университета. Строительство и архитектура*. – 2005. – № 2 (32). – С. 18-25.
5. Ртищева М.В. Дереченник С.С., Разумейчик В.С. Анализ топологических характеристик неупорядоченных монодисперсных структур / *Проблемы проектирования и производства РЭС: Сб. материалов IV Международной НТК (25-26 мая 2006, г. Новополоцк)*. – Т.2. – Новополоцк: ПГУ, 2006. – С. 214-217.