УДК 004.942

А.О. ГАМАЮНОВА, НТУ «ХПІ», Харків, Україна
О.О. ВОДКА, канд. техн. наук, ст. викл., НТУ «ХПІ», Харків, Україна

Розробка комп'ютерної системи для моделювання мікроструктури матеріалу за допомогою розбиття Вороного

Одним із широко використовуваних методів для розрахунку фізичних властивостей матеріалу є усереднення окремих властивостей кристалів з функцією розподілу орієнтацій(ФРО). Тим не менш, обмеження в застосуванні процедур усереднення для реальних матеріалів досі невідомо. Кількість зерен не впливає на математичне визначення в ФРО, тим не менш, інтуїтивно ясно, що процедура усереднення передбачає «велику» кількість зерен. У даній роботі пропонується змоделювати мікроструктуру зерна відповідно до підходу Вороного і тривимірних випадкових поворотів.

Для побудови мікроструктури зерен було використано бібліотеку Voro++. Вона складається з декількох C ++ класів, які можуть бути побудовані як статична бібліотека. Утилітою командного рядка (gnuplot) можна використовувати більшість можливостей коду. Voro++ є бібліотекою для проведення тривимірних розрахунків тесселяції Вороного. Відмінною особливістю бібліотеки є те, що вона виконує обчислення на основі зерен, обчислення зерна Вороного для кожної частки окремо. Це особливо добре підходить для додатків, які покладаються на особливості зерен Вороного (об'єм, центр ваги, число граней).

Оскільки Voro++ є бібліотекою з відкритим вихідним кодом, то можна змінити деякі з методів так, щоб після побудови зерен данні про них записувались у вигляді APDL коду, для проведення подальших розрахунків в програмному комплексі ANSYS. На рис 1 зображено приклад змодельованих зерен в додатку gnuplot.

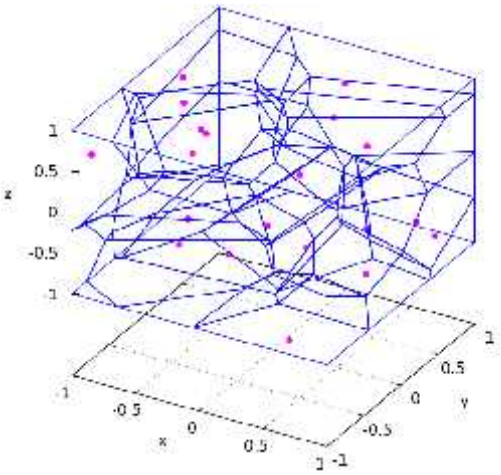

Рис. 1 – Отримані зерна