

Дюльдина Э. В., Гельчинский Б. Р.

**СРЕДСТВА ВИЗУАЛИЗАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ КОМПЬЮТЕРНОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ В ПРЕПОДАВАНИИ ИНЖЕНЕРНЫХ
ДИСЦИПЛИН В ВУЗЕ**

Эльвира Владимировна Дюльдина

кандидат технических наук, профессор

e.dyuldina@mail.ru

ФГБОУ ВО Магнитогорский государственный технический университет

им. Г.И. Носова, Россия, г. Магнитогорск,

Борис Рафаилович Гельчинский

доктор физико-математических наук, профессор

brg47@list.ru

ФГБУН Институт металлургии УрО РАН, Россия, г. Екатеринбург

**FACILITIES OF VISUALIZING THE RESULTS OF COMPUTER MOD-
ELING IN TEACHING ENGINEERING DISCIPLINES IN THE UNIVER-
SITY**

Elvira Vladimirovna Dyuldina

Nosov Magnitogorsk State Technical University, Russia, Magnitogorsk,

Boris Rafailovich Gelchinski

Institute of Metallurgy, UB of the Russian Academy of Sciences,

Russia, Ekaterinburg

Аннотация. Представлены результаты использования программного обеспечения для визуализации процессов изучаемых в прикладных инженерных дисциплинах. На примере подготовки на разных уровнях обучения студентов по направлению 150400 «Металлургия» рассмотрено задание по расчету структурных свойств десятикомпонентного расплава производственного шлага методом молекулярно-динамического моделирования. Для рас-

плава были рассчитаны свойства ближнего порядка: парциальные парные корреляционные функции оксидов с разным содержанием в шлаке, расстояния между атомами в зависимости от их сорта и др. Выполнен поиск и рассчитано число ближайших соседей для нескольких пар металлов, металл – кислород. Показано сложное строение шлака, в том числе образование различных структурных элементов, таких как цепочки кремния.

Annotation. *The results of using software for visualizing the processes studied in applied engineering disciplines are presented. On the example of training at different levels of training of students in the direction 150400 Metallurgy, a task is considered for calculating the structural properties of a ten-component melt of industrial slag by the method of molecular dynamic modeling. For the melt, the properties of short-range order were calculated: the partial pair correlation functions of oxides with different contents in the slag, the distances between atoms depending on their grade, etc. The number of nearest neighbors for several metal pairs, metal-oxygen, was calculated and calculated. The complex structure of the slag is shown, including the formation of various structural elements, such as silicon chains.*

Ключевые слова: *визуализация, преподавание, молекулярная динамика, десятикомпонентный расплав шлака, атомная структура, ближний порядок.*

Keywords: *visualization, teaching, molecular dynamics, molten slag, atomic structure, short-range order.*

Реальные вещества и процессы, особенно на микроуровне, предстают перед нами как мир моделей. Образование есть процесс усвоения широко известных и универсальных моделей природных процессов и систем. Однако обучение не должно ограничиваться только их изучением. Оно должно дать возможность студентам научиться понимать, строить и управлять моделями самостоятельно в зависимости от поставленной цели.

Чтобы успешно работать на современных промышленных предприятиях, таких как электропечь или конвертор для непрерывной разливки стали, необходимо глубокое понимание закономерностей процессов, протекающих в этих агрегатах. Это особенно касается студентов-металлургов, которым необходима качественная инженерная подготовка.

Опыт ведения образовательной деятельности для студентов-металлургов показывает, что при подготовке бакалавров в ходе преподавания прикладных дисциплин требуется более глубокая проработка курсов физики, химии, информатики, компьютерного моделирования. При подготовке магистров, аспирантов и специалистов, проходящих переподготовку, задача усложняется. Работа на современном производстве требует не только хорошего знания компьютерных технологий и специальных пакетов прикладных программ, но и глубокое понимание сути и механизмов технологических процессов, протекающих в металлургических агрегатах. Это повышает эффективность научно-исследовательской и профессиональной деятельности.

Для изучения процессов с участием расплавов важно знать их строение, т.е. природу сил взаимодействия атомов и ионов, образующих жидкость и энергию межчастичного взаимодействия. Прогресс в вычислительной технике позволил перейти к моделированию систем, состоящих из многих частиц. Поскольку структура, которой обладает жидкость, реализуется множеством состояний, можно, располагая достаточными вычислительными средствами, непосредственно воспроизвести этот процесс, рассматривая такое число молекул (атомов), чтобы получить средние значения по времени и по фазовому пространству. Студентов необходимо предварительно ознакомить с методом классической молекулярной динамики, где моделируется движение частиц по траекториям в процессе их взаимодействия друг с другом. В настоящее время существует много работ по моделированию однокомпонентных жидкостей, а также ряд исследований двойных систем, обзор которых приведен в [1, 2].

Многочисленные технологические процессы производства черных металлов основаны на активном взаимодействии металла с жидкими шлаками. Поэтому как характер этого взаимодействия, так и строение самого шлака, издавна интересуют металлургов. Для них представляет интерес прогнозное определение свойств доменного или сталеплавильного шлака. Знание структуры шлака в жидкой фазе может существенно помочь в решении некоторых проблем, стоящих перед металлургами. Например, получать данные по некоторым важнейшим свойствам шлаков, таким как вязкость, поверхностное натяжение, электропроводность и другие свойства в зависимости от химического состава. Для успешного решения этой задачи необходима информация о зависимости физико-химических свойств и структуры получающегося шлака от химического состава шлакообразующей смеси. Эти данные могут быть получены из экспериментальных исследований, однако для разработки более эффективных технологических процессов зачастую необходимо знать фундаментальные закономерности, лежащие в их основе. Такую информацию может дать микроскопическая теория расплавов и современные методы компьютерного моделирования.

Одним из эффективных способов позволяющих наглядно представлять структурообразование в микрообъектах является визуализация сложных процессов с использованием специализированных программных средств. Сначала проводится исследование структуры и некоторых свойств исследуемого производственного шлака. Моделирование проводится с помощью метода классической молекулярной динамики, а анализ с помощью программ позволяющих произвести визуализацию полученной структур, например, CrystalMaker.

В курсе «Термодинамика и кинетика металлургических процессов» студенты имеют возможность самостоятельно формировать параметры моделирования, наблюдать за процессом моделирования, анализировать графическую информацию, отражающую изменение физических величин, описывающих взаимодействие, и, тем самым, добиваться более глубокого понимания

теоретического материала. Для магистрантов первого года обучения идет адаптация пакета программного обеспечения, предназначенного для моделирования и визуализации атомной структуры жидкостей различной природы.

В качестве примера приведем задание по расчету структурных свойств десятикомпонентного расплава производственного шлака методом молекулярно-динамического моделирования. Проведено молекулярно-динамическое моделирование расплава шлакообразующей смеси, состоящего из 10 ионов (Si, Ca, Al, Mg, Mn, K, Na, Fe, F, O), составляющих 9 компонентов ($\text{SiO}_2 - \text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{MgO} - \text{MnO} - \text{CaF}_2 - \text{Na}_2\text{O} - \text{K}_2\text{O} - \text{FeO}$), проведено обсуждение результатов и сопоставление с литературными экспериментальными и расчетными данными. Для расплава были рассчитаны свойства ближнего порядка: парциальные парные корреляционные функции оксидов с разным содержанием в шлаке, расстояния между атомами в зависимости от их сорта и др. Выполнен поиск и рассчитано число ближайших соседей для нескольких пар металлов, металл – кислород. Показано сложное строение шлака, в том числе образование различных структурных элементов, таких как цепочки кремния. После адаптации выходного файла содержащего координаты 2002 частиц была проведена визуализация полученной структуры с помощью программы CrystalMaker (рис.1). На рисунке 1 (справа) приведён список элементов, имеющих в модели, каждый обозначен своим цветом.

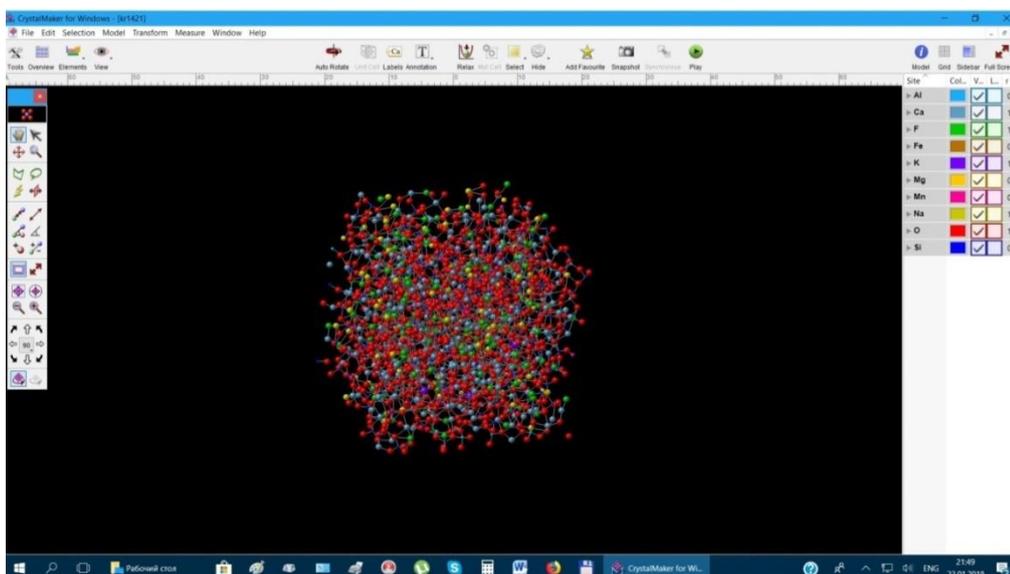


Рисунок 1 – Ячейка 10-компонентного шлака, содержащая 2002 атома

На рисунке видна не только объемная модель, но и система управления пакетом (вверху и слева). Можно изменить визуальное представление объемной модели данной системы атомов, например, рассмотреть какие полиэдры (тетраэдры) могут образоваться в шлаке (рис.2) или выделить из модели систему атомов заданного сорта в виде кластера произвольной формы. На рис. 3 представлен кластер, состоявший только из атомов Si и кислорода.

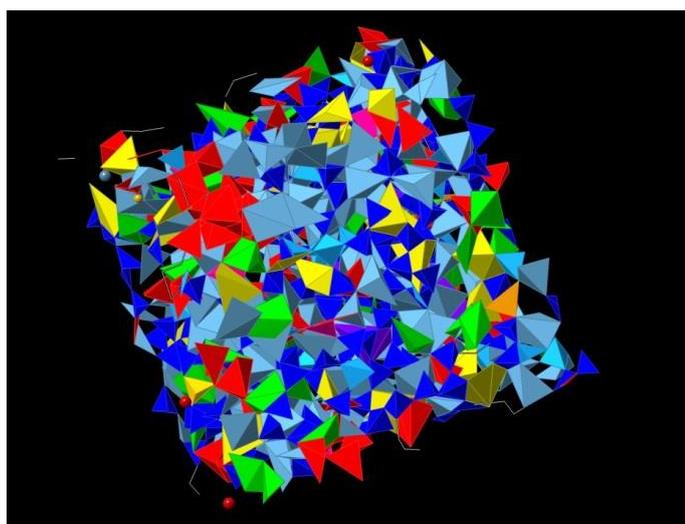


Рисунок 2 – Тетраэдрическая структура шлака, содержащего 2002 атомов

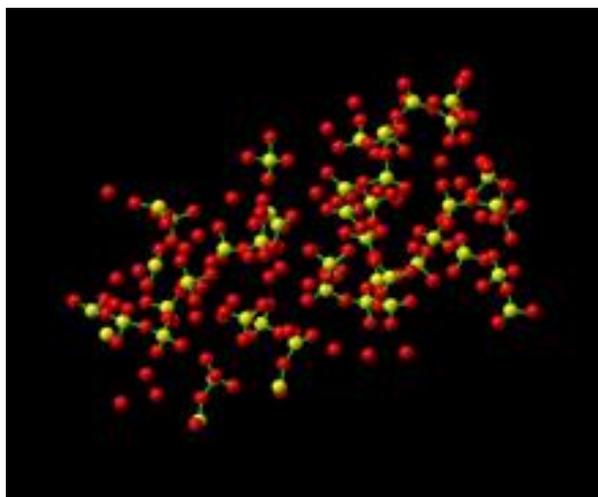


Рисунок 3 – Выделенный кластер из атомов Si и кислорода

Система управления в пакете позволяет воспользоваться множеством опций, например, вращать или смещать по экрану систему атомов, выделять отдельные атомы или их группы, скрывать атомы какого-либо элемента, определять расстояние между любыми атомами системы, выделять кластер,

образующийся вокруг того или иного атома на заданном расстоянии. На рис. 4 и рис.5 представлены распределения атомов-соседей вокруг выбранного атома Si и атома Na, соответственно, в расплаве ШОС8. Из представленной модельной картины, ясно, что вокруг атомов Na соседи расположены достаточно равномерно, в то время как соседи кремния располагаются по всему объему шлака в виде кластеров или в виде вытянутых цепочек. Можно заметить, что в окружении кремния располагается четыре и более атомов кислорода. Это подтверждает теорию образования сложных кремнекислородных комплексов в расплавах.

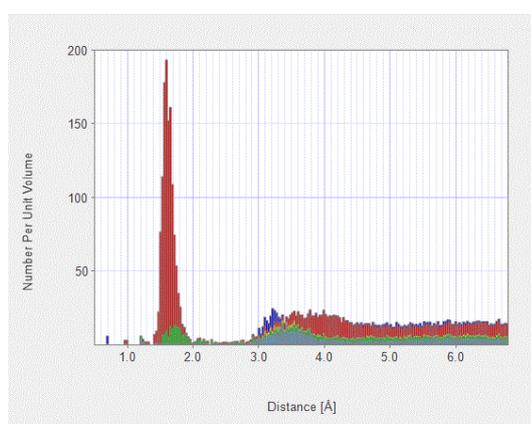


Рисунок 4 – Распределение атомов-соседей вокруг выбранного атома Si

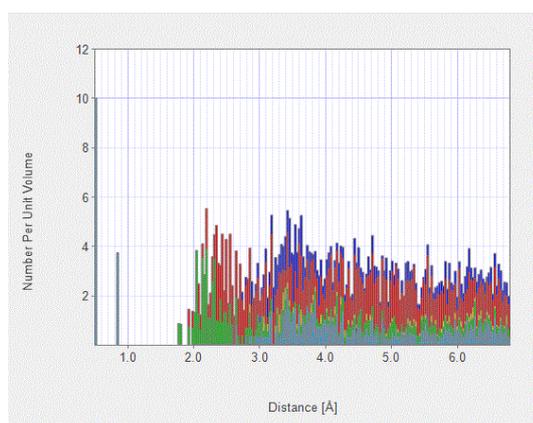


Рисунок 5 – Распределение атомов-соседей вокруг выбранного атома Na

Из представленной модельной картины, ясно, что вокруг атомов Na соседи расположены достаточно равномерно, в то время как соседи кремния располагаются по всему объему шлака в виде кластеров или в виде вытянутых цепочек. Представленная работа выполняет двойную функцию – обучение студентов работе с мощным пакетом визуализации результатов компью-

терного моделирования на микроскопическом (атомном) уровне, а также дает возможность проводить самостоятельно научный анализ результатов моделирования и глубже понять строение и природу металлургических расплавов.

Список литературы

1. Белащенко Д. К. Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ: научное издание / Д. К. Белащенко - Москва: МИСИС, 2005. – 408 с.
2. Физико-химические исследования оксидов и шлаковых систем / Б. Р. Гельчинский [и др.]; Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2016. — 136 с.

УДК [371.671:004]:371.315

Корчажкина О. М.

УКРУПНЕНИЕ ДИДАКТИЧЕСКИХ ЕДИНИЦ КАК РЕАЛИЗАЦИЯ МОДУЛЬНОГО ПРИНЦИПА ПОСТРОЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО УЧЕБНИКА

Ольга Максимовна Корчажкина

кандидат технических наук, старший научный сотрудник

olgakotax@gmail.com

*Институт кибернетики и образовательной информатики Федерального
исследовательского центра «Информатика и управление» Российской
академии наук, Россия, г. Москва*