



Рисунок 3 – График изменения скорости открытия клапана за время импульса

Принимая движение клапана равноускоренным, получим:

$$\begin{aligned} a &= F / m, \\ V_0 &= a\tau_y, \\ V_0 &= a\tau_n, \\ h - x &= V_0\tau_0 + a\tau_0^2, \end{aligned} \quad (14)$$

где F – силы, действующие на клапан, Н;
 m – масса подвижных частей клапана, кг;
 x – ход торможения клапана, м;
 $\tau_0 = (\tau_k + \tau_n + \Delta\tau)$ – время открытия выпускного отверстия, с;
 $\Delta\tau$ – запас времени для гашения инерции клапана, с.

Время торможения клапана определяется из условия обеспечения долговечности клапана, т.е. динамические силы должны быть меньше допустимого уров-

ня. Другими словами, ускорения не должны превышать критических значений $|a_k|$:

$$|a_T| = \frac{V_k}{\tau_T} < |a_k|, \quad (15)$$

где a_T – ускорения, возникающие при торможении клапана, м/с².

На основании уравнений (12)–(15) можно оценить режим работы воздушного клапана и подобрать подходящую конструкцию и параметры его. В сочетании с уравнениями (5), (10) и (11) они позволяют определить оптимальные конструктивно-технологические параметры воздушно-импульсной головки.

В заключение необходимо отметить, что за счет оптимального сочетания параметров можно довести коэффициент использования полной внутренней энергии газа до 10% и более, что в 2 раза превышает КПД газозрывной формовки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Матвеев И.В., Исагулов А.З., Дайкер А.А. Динамические и импульсные процессы и машины для уплотнения литейных форм. Алматы: Наука, 2001. 345 с.
2. Пат. РК 20207; Устройство для газового уплотнения литейной формы /А.З. Исагулов, В.Ю. Куликов, Д.А. Исагулова. Заявлено 17.11.2008.
3. Пат. РК 19805; Дефлектор газового потока /А.З. Исагулов, Е.В. Максимов, Д.А. Исагулова. Заявлено 15.08.2008.
4. Пат. РК 18515; Способ уплотнения дисперсных сред /А.З. Исагулов, С.Б. Кузембаев, Д.А. Исагулова. Заявлено 15.06.2007.

ӘОЖ 519.63

Корреляциялық функцияларды молекулалық динамика әдісімен және радиал үлестірім функциясын есептеу

А.З. ИСАҒҰЛОВ, т.ғ.д., профессор, ИжОӘЖ проректоры,
 Г.С. ШАЙХОВА, т.ғ.к., ЖМ кафедрасының аға оқытушысы,
 Г.Ш. МАХМЕТОВА, ЖМ кафедрасының аға оқытушысы,
 Ж.Ж. ШАЙХОВА, РЭТ-09-1 тобының студенті,
 Қарағанды мемлекеттік техникалық университеті

Балқытпалардың құрылымын модельдеу бойынша машиналық экспериментті сипаттау үшін, сондай-ақ кластерлік құрылымдар геометриясын құру үшін, олардың жүзеге асырылуын нақты алгоритмге қарастыру қажет. Бұл процедураны іске асыру үшін, кубтық пішінді және Ω көлемді білдіретін, «базальк» ұяшыққа орналастырылған, N бөлшектер жүйесі алынады [1]. Сонымен бірге барлық бөлшектер координаталары компьютерге енгізіледі. [2, 4] жұмыста көрсетілгендей, «базальк ұяшықтың» мағынасы түсінікті болады, өйткені қазіргі заманғы компьютерлер бөлшектердің көп санын пайдалана алмайды (Авогадро санына жуықталған) және бұдан басқа нақты макрокопиялық жүйені ұдайы өндіру үшін бөлшектердің шектелген саны үшін аса елеулі, беттік эффектілерді болдырмау қажет. Берілген шартқа Борн-Карман циклдік шекаралық шарттарын ендірумен қол жеткізіледі, яғни базальк ұяшық меншікті ескертпелермен қоршалады, және де әрбір осындай ескертпе базальк тордың микрокүйін дәл қайталайды.

Есептеу практикасында базальк ұяшықтың пішінін таңдауды қабылданатын циклдік шарттар балқытпаны кристалл күйінде зерделеу үшін тиесілі жүйеге сәйкес келетін, жетілген торды құрайтындай түрде жүзеге асыру ыңғайлы болып көрінеді. Кристаллографиядан белгілі болатындай, нақтылы барлық металдар жақтары центрленген кубтық торда кристалданады, ол үшін бөлшектердің $N = 4n^3$ санын таңдау табиғи болады ($n = 1, 2, 3, 4, \dots$, онда $N = 4, 32, 108, 256, 500, 864$ және т.с.с.).

Егер потенциалдық функция $V(R)$ тиімді ион-иондық өзара әрекеттесуді сипаттаса және үзілістері болмаса, онда сәйкес жұптық функцияны $\varphi(R)$ беруге немесе табылған кванттық потенциалдарды келесі формулаға интерполяциялауға болады:

$$\varphi(\vec{R}) = \vec{R} \frac{dV}{dR}$$

Онда толық потенциалдық энергия U және толық вириал $\varphi(R)$ сәйкес жұптық мүшелердің қосындылары болып табылады:

$$U = \sum_{i < j}^N V_{ij},$$

$$\varphi(R) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N R_{ij} \frac{dV}{dR_{ij}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N R_{ij} \frac{dV}{dR_{ij}}.$$

Шекаралық шарттарға байланысты енгізілетін үзілу радиусына сәйкес, базальк ұяшық бөлшектерінің өз араларында және шектес ұяшық-ескертпелер бөлшектерімен өзара әрекеттесуі аса үлкен үлесті береді.

Осы максимум радиустан үлкен ара қашықтықта тұратын бөлшектердің өзара әрекеттесуінен үлестер жуықталып есептеледі.

Молекулалық динамика әдісін іске асыру үшін, өзара әрекеттесуге қатысатын бөлшектерге бастапқы координаталар мен жылдамдықтар беріледі. Олардың кейінгі қозғалысы Ньютонның классикалық теңдеулерін сандық интегралдаумен іске асырылады. Тепе-тең

қасиеттері де, кинетикалық қасиеттері де, мысалы, тасымалдау қасиеттері есептеледі. Қозғалыс теңдеуін интегралдаудың уақыттық интервалдарының ақырлығымен себептелген, оның елеусіз флуктуацияларын санамағанда, жүйенің толық энергиясы тұрақты болып қалады. Жүйе температурасы кинетикалық энергия бойынша есептеледі, оның өзгерісіне бөлшектер жылдамдықтарын өзгертумен қол жеткізіледі. Молекулалық динамика әдісінде температура флуктуациясын минимумға дейін келтіру үшін, сол жүйені Монте-Карло әдісімен модельдеуге қарағанда, бөлшектердің көп санын алады. Монте-Карло әдісінен ерекшелігінде, молекулалық динамиканың ықтималдық элементтерінің болмайтынын атап кету керек, бөлшектердің тек бастапқы координаталары мен жылдамдықтары ғана ықтималды құрылады.

Алайда, машина жадысының шектелгендігі мұндай эксперименттерді жүргізу шарттарын өте қатаң шеңберге қоятынын көрсету керек. Мысалға, сұйық аргон сияқты жүйені Монте-Карло әдісімен типтік есептеу, құрамында 108 және одан артық бөлшек бар модельдің 300 000 пішін үйлесімінің тізбегін генерациялауды талап етеді. Сонымен бірге балама молекула-динамикалық есептеу 10^{-14} секундтан 1500 уақыттық интервал үшін 864 бөлшек қозғалысының теңдеулерін интегралдауды талап етер еді. Сонымен бірге өзара әрекеттесудің максимум радиусы 9 \AA^0 ретті болу керек [2].

Машиналық экспериментте бөлшек аралық өзара әрекеттесу потенциалы не аналитикалық түрде (бұл өте сирек), не кестелер түрінде (бұл туралы 1-бөлімде айтылған) беріледі. Кесте түрінде берілетін потенциалдар, машиналық эксперимент әдісінде кесекті-тегіс полиномдармен жуықталады.

Молекулалық динамика әдісінің алгоритмін және кейбір құрылымдық және кинетикалық функциялардың есептеулерін аса толық сипаттаймыз. Циклдік шекаралық шарттарға байланысты машиналық эксперименттің бөлшек аралық өзара әрекеттесу потенциалына шектеу қойылады, атап айтқанда оның әрекетінің максимум жарамды радиусы негізгі ұяшық қырының ұзындығының жартысынан жоғары бола алмайды:

$$R_{\max} = \frac{L}{2} - E,$$

мұнда L — қырдың ұзындығы,

E — зерттелетін модель бөлшектерінің өлшемдеріне сәйкес таңдалатын, қандай да бір аз шама, оның мәні $0,5 \text{ \AA}$ аспайды. [3, 5] жұмыста көрсетілгендей, шектеу бөлшектердің өз араларында өзара әрекеттесуін жою қажеттілігімен ұсынылған.

Базальк ұяшықтың өлшемі ондағы бөлшектердің санына да, зерттелетін жүйенің бастапқы геометриялық құрылымына да тәуелді болады. Сонымен бірге бөлшектер саны шешілетін есептің типімен анықталады және бұдан басқа ол негізінде есептеуіш техниканың мүмкіндіктерімен шектелген. Сұйық металл құрылымын модельдеу үшін бастапқы құрылым ретінде ҚЦК торын алу ыңғайлы болады. Әрбір бөлшекке

компьютердің кездейсоқ сандарының генераторымен құрылатын, $-0,5$ -тен $+0,5$ дейінгі интервалда жатқан ерікті сан сәйкестікке қойылады. Бұл сан берілген бөлшектің жылдамдығы болып табылады. Гидродинамикалық қозғалыстың пайда болуын болдырмау үшін жүйенің толық импульсін есептеу жүзеге асырылады. Бөлшектер санына бөлінген, гидродинамикалық жылдамдықты құраушылар, бөлшектер жылдамдықтарының сәйкес құраушыларынан кемітіледі. Аналитикалық түрде бұл процедура келесі түрде болады:

$$V_x = \sum_{i=1}^N v_{ix} = v_{1x} + v_{2x} + v_{3x} + \dots + v_{Nx}$$

$$V_y = \sum_{i=1}^N v_{iy} = v_{1y} + v_{2y} + v_{3y} + \dots + v_{Ny}$$

$$V_z = \sum_{i=1}^N v_{iz} = v_{1z} + v_{2z} + v_{3z} + \dots + v_{Nz}$$

V_x, V_y, V_z – гидродинамикалық жылдамдықты құраушылар; ал V_{ix}, V_{iy}, V_{iz} негізгі ұяшықтың i -ші бөлшегінің жылдамдығын құраушылар, N – соңғының бөлшектерінің саны. Онда жаңа бастапқы жылдамдықтар v_x, v_y, v_z мына формулалар бойынша анықталады:

$$v'_{ix} = v_{ix} - \frac{V_x}{N}$$

$$v'_{iy} = v_{iy} - \frac{V_y}{N}$$

$$v'_{iz} = v_{iz} - \frac{V_z}{N}$$

Бастапқы үдеулер a_{ix}, a_{iy}, a_{iz} нөлге тең деп жорамалданады.

Әдетте модельде барлық шамалар зерделенетін микропроцестердің масштабын есепке алатын бірліктермен беріледі. Сонымен, R ара қашықтығы әдетте Бор радиустарымен R_B не болмаса жұптық потенциалдық функцияның бірінші нөлін анықтайтын, σ параметрі арқылы өрнектеледі, яғни $R = R^*/R_B$. Жұлдызша берілген шаманың макромасштабы бірліктерде (мысалға, Θ Ж жүйесінде) өрнектелгенін білдіреді. Егер m – бір бөлшектің массасы – бірлік үшін қабылданса, ал энергия бірлігі үшін энергияның атомдық бірліктері E (потенциалдық шұңқырдың тереңдігі) қабылданса, онда уақыт t , жылдамдық v_i сәйкесінше келесі бірліктермен өрнектеледі:

$$t = t^* \left(\frac{E}{m} \right)^{1/2} / \sigma,$$

$$v_i = v_i^* / (E/m)^{1/2},$$

$$V(R) = V^*(R) / E.$$

Ньютон қозғалысының классикалық теңдеулері әр түрлі әдістермен интегралданады. Егер жүйе бөлшектерінің бастапқы координаталарын x_i, y_i, z_i деп белгілесек, онда Эйлер алгоритмі n нөмірі бар әрбір қадамда келесі процедураны білдіреді. Алдымен бөлшектің орны есептеледі:

$$x_i^{(n+1)} = x_i^{(n)} + 2 * \Delta t * v_{ix}^n,$$

$$y_i^{(n+1)} = y_i^{(n)} + 2 * \Delta t * v_{iy}^n,$$

$$z_i^{(n+1)} = z_i^{(n)} + 2 * \Delta t * v_{iz}^n,$$

Δt – интегралдаудың уақыттық қадамы.

Екіншіден, үдеу шамасы келесі формулалар бойынша есептеледі:

$$a_{ix}^{(n+1)} = \frac{F_{ix}^{(n+1)}}{m},$$

$$a_{iy}^{(n+1)} = \frac{F_{iy}^{(n+1)}}{m},$$

$$a_{iz}^{(n+1)} = \frac{F_{iz}^{(n+1)}}{m},$$

мұнда F_{ix}, F_{iy}, F_{iz} – уақыт бойынша $n + 1$ -ші қадамда жүйенің қалған $N - 1$ бөлшектері жағынан i -ші бөлшекке әсер ететін, X, Y, Z осі бойынша күшті құраушылар, сонымен бірге F_{ix}, F_{iy}, F_{iz} күштері мынаған тең:

$$F_i^{(n+1)} = - \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{R_i^{(n+1)} - R_j^{(n+1)}}{R_{ij}^{(n+1)}} \cdot \frac{dV(R_{ij}^{(n+1)})}{dR}.$$

Мұнда $\vec{R}_i = iR_{ix} + jR_{iy} + kR_{iz}$,

$$\vec{R}_j = iR_{jx} + jR_{jy} + kR_{jz},$$

$$R_{ij} = \sqrt{(R_{ix} - R_{jx})^2 + (R_{iy} - R_{jy})^2 + (R_{iz} - R_{jz})^2},$$

$$\vec{R}_{ij} = i(R_{ix} - R_{jx}) + j(R_{iy} - R_{jy}) + k(R_{iz} - R_{jz}).$$

Осы формулалар бойынша координаталар және табылған үдеу бойынша жылдамдық пен координатаның, атап айтқанда, координаталар үшін жаңа мәні есептеледі:

$$\bar{x}_i^{(n+1)} = x_i^{(n+1)} + \frac{1}{2} * \Delta t (v_{ix}^{(n+4)} + v_{ix}^{(n+1)}),$$

$$\bar{y}_i^{(n+1)} = y_i^{(n+1)} + \frac{1}{2} * \Delta t (v_{iy}^{(n+4)} + v_{iy}^{(n+1)}),$$

$$\bar{z}_i^{(n+1)} = z_i^{(n+1)} + \frac{1}{2} * \Delta t (v_{iz}^{(n+4)} + v_{iz}^{(n+1)}).$$

Егер i – бөлшектер координатасы $x_i > L, y_i > L, z_i > L$ болса, онда жаңа координата енгізіледі:

$$x'_i = x_i - L,$$

$$y'_i = y_i - L,$$

$$z'_i = z_i - L.$$

ал егер, керісінше, $x_i < 0$ болса, онда

$$x'_i = x_i + L,$$

$$y'_i = y_i + L,$$

$$z'_i = z_i + L.$$

Берілген процедурамен жүйе бөлшектерінің координаталарын түзету жүзеге асырылады.

Мұнда бөлшектің i үдеуінің белгілі өзара әрекеттесу радиусына түсетін барлық бөлшектермен өзара әрекеттесуден алғанда есептелетінін атап кету керек.

Осы есепке алынып, үдеулер матрицасы құрылады:

$$\vec{a}_1 = 0 + \vec{a}_{12} + \vec{a}_{13} + \dots + \vec{a}_{1j} + \dots + \vec{a}_{1N},$$

$$\vec{a}_2 = \vec{a}_{12} + 0 + \vec{a}_{23} + \dots + \vec{a}_{2j} + \dots + \vec{a}_{2N},$$

$$\vec{a}_i = \vec{a}_{i1} + \vec{a}_{i2} + \vec{a}_{i3} + \dots + 0 + \dots + \vec{a}_{iN},$$

$$\bar{a}_N = \bar{a}_{N1} + \bar{a}_{N2} + \bar{a}_{N3} + \dots + \bar{a}_{Ni} + 0.$$

Үдеулерді есептеп шығарудың көрсетілген матрицаның тек жоғарғы жартысын ғана есептеуді талап ететіні анық.

Бұл зерттеулер тек технологиялық мақсаттар үшін ғана емес, сонымен бірге теориялық көзқарастан да, сондай-ақ нанотехнологияда да маңызды.

Металлургиялық процестерде олардың аққыштығы мен химиялық активтілігін есептеуіш материалтану әдістерімен теориялық негіздеу үшін металл балқытпалардың кластерлік табиғатын ашу.

ӘДЕБИЕТТЕР ТІЗІМІ

1. Smith W. Theory and computational Science Division // S.E.R.C. Daresbury Laboratory, Daresbury, UK, Marcy 26. 2003. P. 25
2. Mori H., Hostino., Watabe M. A new bridge function scheme in the modified hypernetted chain approximation for liquid alloys // J.Phys.Condens. Mater. 1991. V.3, №48. P. 9791-9795.
3. Azez K.A., Agarwal P.C., Kachava S.M. Compressibility of liquid metals // Acta Phys.Hung. – 1991. – V.70, №1-2. – P.15-19
4. Сулейменов Т., Исагулов А.З., Шаихова Г.С., Бажиков К.Е., Касымова Л.Ж. Об алгоритме построения полиэдров Вороного // Труды междунар. научно-практич. конференции «Актуальные проблемы горно-металлургического комплекса Казахстана». Караганда, 2007. С. 425-427.
5. Сулейменов Т., Исагулов А.З., Абиьгазин Б.И., Атамбаев Ж.Н., Шаихова Г.С. Реализация метода молекулярной динамики для определения функции радиального распределения / КартГТУ // Журнал «Труды университета». 2008, №1(49). С. 4-7.

ӘОЖ 621.7.08

Металл кесуші білдектердің бағыттауыш тетіктері беттерінің өлшемдерін қою жүйесі

К.Т. ШЕРОВ, МТ кафедрасының профессоры, т.ғ.д.,
Қарағанды мемлекеттік техникалық университеті

Кілт сөздер: білдектер бағыттауыштары, бақылау сызғышы, өлшеу дәлдігі, функционалдық байланысты беттер, қыру, қалыптастыру.

Металл кесуші білдектер машинажасауда қазіргі заманғы машиналарды, аспаптарды, кесуші құралдарды және т.б. бұйымдарды жасап шығаруға арналған технологиялық жабдықтардың негізгі түрі болып табылады.

Сондықтан да білдекжасау өндірісін машинажасаудың маңызды және күрделі салаларының бірі деп қарастыруға болады.

Білдекжасау өндірісінде құралкүймешікпен тұғырдың функционалдық байланысты беттерін (ФББ) өңдеу аса күрделі процесс. ФББ беттеріне жанасуы біруақытта бірнеше беттер бойынша жүзеге асатын, ал жанасу дәлдігі түйісу нормаларымен белгіленетін жылжитын және жылжымайтын қосылулардың беттерін жатқызуға болады [1].

Мұндай беттерді аяқтаушы өңдеу қыру болып табылады. Бұл процесс жұмысшының көп күш және уақытын талап етеді. Әрине ФББ-нің дәлдігін, сапасын және тазалығын жақсарту едәуір дәрежеде қыруды ұйымдастыру бойынша қол жеткізілген жетістіктерге тәуелді болады.

Металл кесуші білдектердің бағыттауыштары жылжитын және аз жылжитын қосылуларға ие болады. ФББ-ге ие жылжитын қосылуларға құралкүймешікпен тұғырдың қосылуы, артқы бабка мен тұғырдың қосылуы және құралкүймешіктің жоғарғы және төменгі күймешелерінің қосылулары жатады. Аз жылжитын қосылуларға, яғни баптау, бақылау және т.б. жағдайларда қатысты түрде орын ауысуға ие болатын қосылуларды жатқызуға болады. Мұндай қосылуға артқы

бабка корпусы мен тақтасының қосылуы мысал бола алады. Түйісу ауданындағы айырмашылықтар қалыптастыру жұмыстарын орындау кезінде ескерілуі керек.

Қазіргі уақытта білдекжасау өндірісінде ФББ-нің қабысушы жазықтықтарын өңдеу еңбексыйымдылығы шамасының айырмашылығына назар аудармайды. Ережеге сай барлық қабысушы беттер бойынша қалыптастыру біруақытта орындалады. Қалыптастыру жұмыстарының мұндай технологиясы ФББ-нің арасындағы өлшемдерді қоюға және сұлбаларға негізделген болады.

Артқы бабканың корпусы мен тақтасының қабысуы үш жазықтық бойынша қамтамасыз етіледі. Корпус және тақтаның қосылатын беттерінің бағыттаушы ойыстығы мен бағыттаушы дөңестігінің түрлері мен өлшемдері 1 және 2-суреттерде көрсетілген. Бұл түрлер мен өлшемдер НТ-250И білдегі тетіктерінің жұмысшы сызбаларынан алынған.

1 және 2 – суреттерде берілген сызбалардың талдауы, ондағы өлшемдерді қою схемасының проблемалық болып табылатындығын көрсетті. 1 – суретте берілген 18-0,25 мм өлшем Р корпусының жазықтығынан қосылуының бағыттаушы ойыстығының көлбеу жазықтығына дейінгі арақашықтықты көрсетеді. 18-0,25 мм өлшемді өлшеу кезінде қиылысушы сызықтың орнын белгілеу аса күрделі.