

ЗАВИСИМОСТЬ КОНЦЕНТРАЦИИ ВАКАНСИЙ В КРИСТАЛЛАХ (U,Pu)O₂ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Попов И.А.*, Некрасов К.А.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: ivanvaran11@yandex.ru

THE TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE VACANCY CONCENTRATION IN (U, Pu)O₂ CRYSTALS. A MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Popov I.A., Nekrasov K.A.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Annotation. Determining the concentration of vacancies in molecular dynamics simulation is a non-trivial task, since it can be difficult to distinguish them from ion density fluctuations. In the present work, the ion density distribution on a grid was used to detect the vacancies. The nodes of the grid coincided with the lattice sites and the interstitial positions, and the particle coordinates were averaged with respect to time.

Определение концентрации вакансий при молекулярно-динамическом моделировании является нетривиальной задачей, поскольку их может быть трудно отличить от флуктуаций плотности ионов. В настоящей работе для регистрации вакансий использовали распределение плотности ионов на сетку, узлы которой совпадали с узлами кристаллической решетки и междуузельными позициями [1], усредняя координаты частиц по времени.

Для изучения разупорядочения катионной подрешетки требовались сотни миллионов шагов молекулярной динамики, в течение которых эта подрешетка поворачивалась относительно исходного положения (при том, что коррекция вращения применялась на каждом шаге). Соответственно, вращали и сетку, которая использовалась для регистрации вакансий.

В первом приближении, поворот катионной подрешетки компенсировали, считая его твердотельным вращением (при этом не учитывалась диффузия катионов). Поворот описывали вектором $\vec{\alpha}$, направление и модуль которого совпадали с осью вращения и углом поворота катионной подрешетки вокруг этой оси. Окончательно компоненты вектора $\vec{\alpha}$ уточняли симплекс-методом Нелдера и Мида [2].

Если $\dot{\omega}(t)$ - угловая частота твердотельного вращения катионной подрешетки, зависящая от времени, то интеграл её момента может быть записан в форме

$$\int \dot{\omega} dt = \sum_{\text{по катионам}} \int \vec{r}_i(t) \times m_i \dot{\vec{v}}_i(t) dt = \sum_{\text{по катионам}} \int \vec{r}_i(t) \times m_i (\dot{\omega}(t) \times \vec{r}_i(t)) dt, \quad (1)$$

после чего с использованием правила $\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b} \cdot (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$ и с учетом того, что $\int \dot{\omega}(t) dt = \dot{\alpha}$, приближенно представлен в виде

$$\sum_{\text{по катионам}} m_i \cdot (\langle \dot{r}_i \rangle \times (\dot{r}_i(t) - \dot{r}_i(0))) = \sum_{\text{по катионам}} m_i \cdot (\dot{\alpha} \cdot \langle \dot{r}_i^2 \rangle - \langle \dot{r}_i \rangle \cdot (\langle \dot{r}_i \rangle \cdot \dot{\alpha})). \quad (2)$$

Соотношение (2) представляет собой систему трёх линейных уравнений, которую использовали для получения вектора $\dot{\alpha}$.

При временах эволюции модельной системы порядка 1 мкс требовалось уточнение угла поворота с учётом диффузионного перемещения катионов, не являвшегося твердотельным вращением. Для этого использовали метод Нелдера-Мида [2]. В качестве целевого параметра выступала средняя плотность атомов в узлах сетки, в идеальном случае равная единице. Переменными метода были три угла, на которые необходимо повернуть сетку, чтобы она совпала с кристаллической решеткой.

Результаты работы получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России 1.4539.2017/8.9.

1. Хокни Р., Иствуд Дж., Численное моделирование методом частиц, Мир (1987).
2. Nelder J.A., Mead R., Computer Journal, 7, 308—313 (1965).

МОДЕЛЬ УПРАВЛЕНИЯ УРОВНЕМ КАЧЕСТВА ПРОГРАММНЫХ ПРОДУКТОВ

Данилин А.О., Петрухнова Г.В.

Воронежский государственный технический университет, г. Воронеж, Россия
E-mail: gvpetruhnova@mail.ru

MODEL OF MANAGING THE LEVEL OF QUALITY OF SOFTWARE PRODUCTS

Danlin A.O., Petrukhnova G.V.

Voronezh state technical university, Voronezh, Russia

Annotation. The article considers the questions reveal the quality of software products based on international standards. Discusses the model of managing the level of software quality.

Управление качеством программных продуктов при разработке программного обеспечения (ПО) актуально. Снижение качества ПО влечёт за собой истощение трудозатрат, экономических и стратегических ресурсов, снижение привлекательности продукта на рынке и повышение рискованности проекта.