



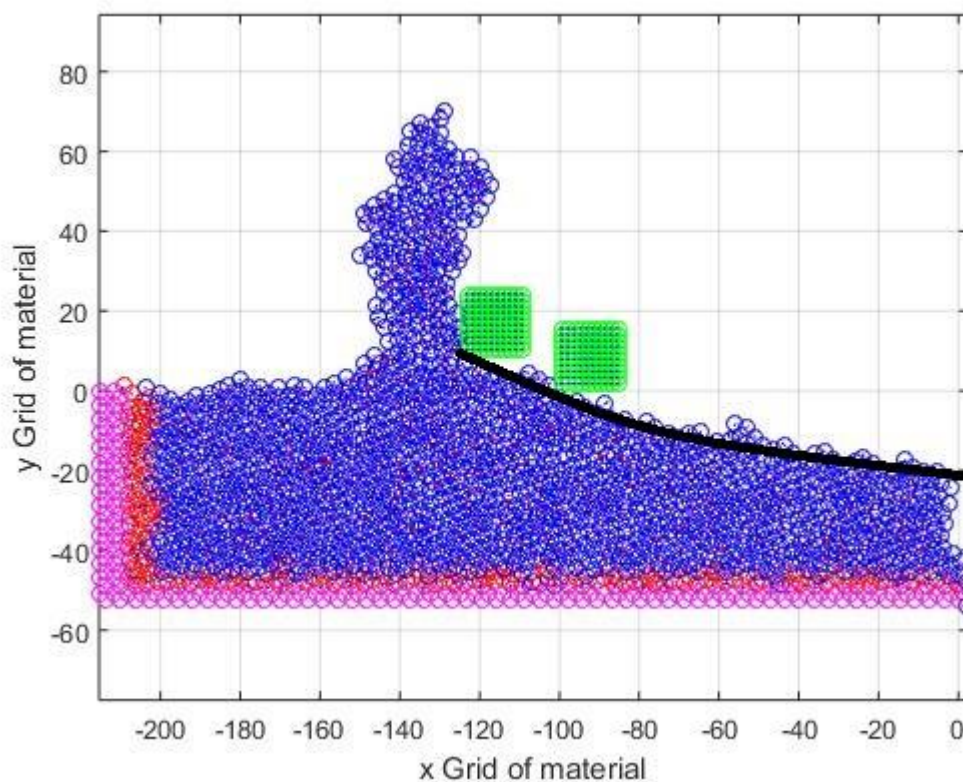
ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΩΝ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Προσομοίωση της δράσης των κόκκων λειαντικού τροχού σε μικροσκοπικό επίπεδο με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής



ΧΑΜΗΛΟΘΩΡΗΣ ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ

ΑΜ:02110010

Επιβλέπων : Μαρκόπουλος Άγγελος , Λέκτορας Ε.Μ.Π.

Αθήνα, 2015

Πρόλογος

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου, κ. Άγγελο Μαρκόπουλο για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε, αναθέτοντάς μου αυτή την εργασία, καθώς και για τις βάσεις και τα κεντρίσματα που μου έδωσε μέσω των διδασκόμενων μαθημάτων κατά την κανονική περίοδο φοίτησης μου στο ΕΜΠ, δίνοντας μου έτσι την αφορμή να ασχοληθώ με το συγκεκριμένο αντικείμενο διπλωματικής.

Θερμές ευχαριστίες θα ήθελα να απευθύνω στον υποψήφιο διδάκτορα Νικόλαο Κάρκαλο για την αμέριστη βοήθεια και τις καίριες παρατηρήσεις του σε όλη τη διάρκεια εκπόνησης της παρούσας διπλωματικής, τόσο στο υπολογιστικό μέρος όσο και κατά τη συγγραφή της.

Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου για την αμέριστη συμπαράσταση και τις προϋποθέσεις που μου παρείχε κατά τη φοίτηση μου στη σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών του Ε.Μ.Π.



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΩΝ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ

**Προσομοίωση της δράσης των κόκκων λειαντικού τροχού σε
μικροσκοπικό επίπεδο με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής.**

Διπλωματική εργασία
του
Βασίλειου Χαμηλοθώρη

Περίληψη

Στην παρούσα διπλωματική εργασία γίνεται περιγραφή της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής για χρήση της στην προσομοίωση της λείανσης χαλκού στη νανοκλίμακα και αξιολόγηση της ποιότητας των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων συγκριτικά με άλλες μελέτες και πειράματα.

Στο Κεφάλαιο 1, πραγματοποιείται μία σύντομη εισαγωγή στα χαρακτηριστικά της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής.

Στο Κεφάλαιο 2, γίνεται μία σύντομη βιβλιογραφική ανασκόπηση της εφαρμογής της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής στην προσομοίωση της λείανσης.

Στο Κεφάλαιο 3, γίνεται μία αναφορά στη θεωρία της Μοριακής Δυναμικής, παρουσιάζεται δηλαδή μια ενδελεχής μελέτη των ειδών των ατόμων που παίρνουν μέρος στη προσομοίωση, των δυναμικών ενέργειας και των μεθόδων ολοκλήρωσης που μπορούν να χρησιμοποιηθούν.

Το Κεφάλαιο 4 περιγράφεται η ανάπτυξη κώδικα στη Matlab, καθώς και των προσθηκών και τροποποιήσεων που έγιναν σε αυτόν για να πετύχουμε την αποτελεσματική προσομοίωση λείανσης χαλκού με δύο κόκκους από διαμάντι ως κοπτικά εργαλεία.

Στο Κεφάλαιο 5 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για διαφορετικές συνθήκες κοπής και η μελέτη της επίδρασης των παραμέτρων κοπής στις δυνάμεις κοπής στο σχηματισμό αποβλίττου. Μελετάται η εξέλιξη της διαδικασίας αποβολής υλικού, οι αναπτυσσόμενες θερμοκρασίες και δυνάμεις για διαφορετικά βάθη κοπής, και συγκεκριμένες μεταβολές της ταχύτητας και της γεωμετρίας του κοπτικού εργαλείου.

Τέλος, στο Κεφάλαιο 6 εξάγονται κάποια γενικά συμπεράσματα με βάση τις προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν και παρατίθενται κάποιες βελτιώσεις που θα μπορούσαν να επιτευχθούν για περαιτέρω μελέτη και έρευνα.



**NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS
SCHOOL OF MECHANICAL ENGINEERING
SECTION OF MANUFACTURING TECHNOLOGY**

**Simulation of the action of abrasive grains of a grinding wheel at
microscopic level, via Molecular Dynamics method.**

Diploma Thesis
of
Vasileios Chamilothis

Abstract

In the present thesis, a description of the method of Molecular Dynamics for copper nano-grinding simulations at the nanoscale is presented and quality assessment of the results of the simulations compared to other studies and experiments is performed.

In Chapter 1, a brief introduction of the characteristics of the Molecular Dynamics method is conducted.

In Chapter 2, a brief literature review of the implementation of the Molecular Dynamics simulation of the grinding process is presented.

In Chapter 3, a description of the theory of Molecular Dynamics and its characteristics, showing a thorough study of the kinds of atoms who take part in the simulation, of the potential energy and of the integration methods that can be used is conducted.

In Chapter 4, the development of a code in Matlab is described, and the additions and amendments made to it in order to achieve an effective copper nano-grinding simulation with two diamond abrasive grains are presented.

In Chapter 5, the results of simulations for different cutting conditions and the study of the influence of cutting parameters on cutting forces and chip formation are presented. The development of the material removal process, the temperatures and forces for different cutting depths, and specific changes in the speed and geometry of the cutting tool is studied.

Finally, in Chapter 6 some general conclusions based on the simulations carried out are presented and some improvements that could be achieved for further study and research are proposed.

Περιεχόμενα

Πρόλογος.....	3
Περίληψη	4
Abstract.....	5
Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή.....	10
Κεφάλαιο 2: Σύντομη Βιβλιογραφική Ανασκόπηση Εφαρμογών Μοριακής Δυναμικής στις Κατεργασίες Νανοκλίμακας.....	18
2.1 Συνοπτική περιγραφή διάφορων ερευνητικών περιπτώσεων.....	18
2.2 Συνοπτικός πίνακας διάφορων ερευνητικών περιπτώσεων.....	24
Κεφάλαιο 3: Θεωρία Μοριακής Δυναμικής.....	27
3.1 Εισαγωγή.....	27
3.2 Είδη Ατόμων.....	30
3.2.1 Νευτώνεια Άτομα.....	30
3.2.2 Άτομα Θερμοστάτες.....	31
3.2.3 Συνοριακά Άτομα.....	32
3.3 Συναρτήσεις Δυναμικού Ενέργειας.....	34
3.3.1 Δυναμικό Morse.....	39
3.3.2 Δυναμικό Lennard– Jones.....	40
3.3.3 Δυναμικό Born-Meyer.....	40
3.3.4 Δυναμικό Πολλαπλών Ατόμων (Embedded-AtomPotential).....	40
3.3.5 Δυναμικό Bolding – Anderson.....	41
3.4 Υπολογισμοί Τροχιών με χρήση Αριθμητικής Ολοκλήρωσης.....	42
3.4.1 Μέθοδος Βατραχοδρασκελισμών (Leapfrog-Type Method).....	44
3.4.2 Μέθοδος Verlet.....	46
3.4.3 Μέθοδοι Πρόβλεψης Διόρθωσης.....	47
3.5 Συναρτήσεις Επανακαθορισμού Ταχυτήτων.....	52

3.5.1 Συνάρτηση Επιθυμητής Θερμοκρασίας.....	53
3.5.2 Επαναπροσδιορισμός ταχυτήτων.....	53
3.6 Μέθοδοι υπολογισμών αλληλεπιδράσεων.....	54
3.6.1 Όλα τα ζεύγη (all-pairs method).....	54
3.6.2 Υποδιαίρεση κυττάρων(cell subdivision).....	55
3.6.3 Κατάλογος γειτόνων (neighbor-list method)	56
Κεφάλαιο 4: Βασική Ανάλυση του Κώδικα Προσομοίωσης.....	58
4.1 Εισαγωγή.....	58
4.2 Γενική Δομή του Αλγόριθμου.....	58
4.3 Περιγραφή του Κώδικα Προσομοίωσης MD.....	62
Κεφάλαιο 5: Αποτελέσματα και Ανάλυση Προσομοιώσεων.....	72
5.1 Εισαγωγή.....	72
5.2 Πρώτη Σειρά Προσομοιώσεων.....	73
5.2.1 Προσομοίωση 1a.....	73
5.2.2 Προσομοίωση 1b.....	77
5.2.3 Προσομοίωση 1c.....	82
5.2.4 Παρατηρήσεις.....	86
5.3 Δεύτερη Σειρά Προσομοιώσεων.....	87
5.3.1 Προσομοίωση 2a.....	87
5.3.2 Προσομοίωση 2b.....	92
5.3.3 Προσομοίωση 2c.....	97
5.3.4 Παρατηρήσεις.....	102
5.4 Τρίτη Σειρά Προσομοιώσεων.....	103
5.4.1 Προσομοίωση 3a.....	103
5.4.2 Προσομοίωση 3b.....	107
5.4.3 Παρατηρήσεις.....	112
5.5 Τέταρτη Σειρά Προσομοιώσεων.....	113

5.5.1 Προσομοίωση 4a.....	113
5.5.2 Προσομοίωση 4b.....	117
5.5.3 Παρατηρήσεις.....	122
5.6 Πέμπτη Σειρά Προσομοιώσεων.....	123
5.6.1 Προσομοίωση 5a.....	123
5.6.2 Προσομοίωση 5b.....	128
5.6.3 Παρατηρήσεις.....	133
5.7 Σύγκριση Αποτελεσμάτων Προσομοιώσεων.....	134
5.7.1 Σύγκριση Αποτελεσμάτων των Προσομοιώσεων 1 και 2.....	134
5.7.2 Σύγκριση Αποτελεσμάτων των Προσομοιώσεων 3 και 2b.....	137
5.7.3 Σύγκριση Αποτελεσμάτων των Προσομοιώσεων 4 και 3a.....	139
5.7.4 Σύγκριση Αποτελεσμάτων της Προσομοίωσης 5.....	142
Κεφάλαιο 6: Συμπεράσματα και προτάσεις για περαιτέρω μελέτη....	145
6.1 Συμπεράσματα	145
6.2 Προτάσεις για περαιτέρω μελέτη.....	147
Βιβλιογραφία.....	148

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

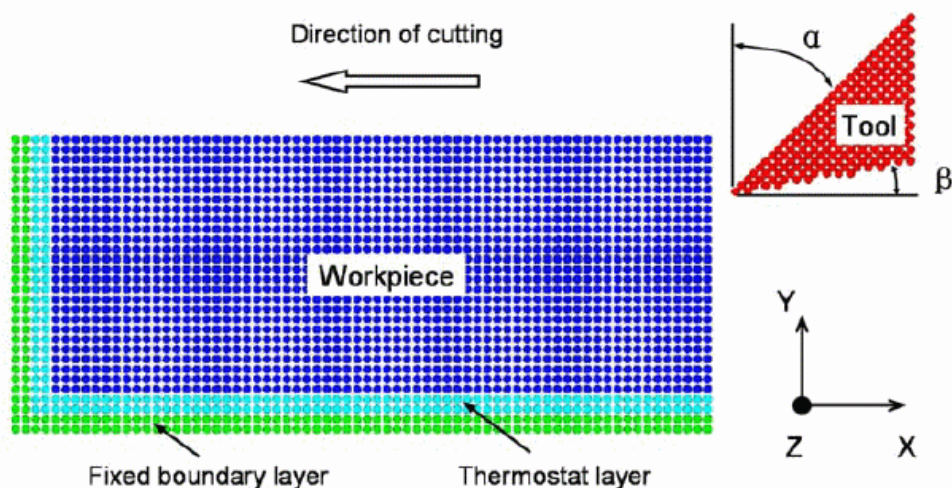
Οι κατεργασίες των υλικών αποτελούν τις τελευταίες δεκαετίες έναν πολύ σημαντικό τομέα της τεχνολογίας, καθώς μέσω αυτών μπορεί να κατασκευαστεί πληθώρα αντικειμένων και εξαρτημάτων. Ιδίως τα τελευταία χρόνια, οι βελτιώσεις που παρουσιάζονται είναι πολύ αξιόλογες και οι δυνατότητες που εμφανίζονται είναι απεριόριστες. Τα παραπάνω συνοδεύονται από τις συνεχείς προσπάθειες για αύξηση της αποδοτικότητας των κατεργασιών και μείωση του κόστους κατασκευής σε όλους τους τομείς.

Αυτό που τα τελευταία χρόνια έχει προκύψει στον τομέα των κατεργασιών ως ανάγκη είναι η κατασκευή όλο και μικρότερων αντικειμένων, κυρίως στους τομείς της αεροπορίας, της αεροδιαστημικής, των ιατρικών εξαρτημάτων, των συστημάτων επικοινωνίας, κλπ.. Αυτό σημαίνει μετάβαση από τη μακροκλίμακα στη μεσοκλίμακα και τη μικροκλίμακα, κάτι που συνεπάγεται την ανάγκη ανάπτυξης αρκετών καινούριων θεωριών, τη μελέτη καινούριων φαινομένων και τη χρήση καινούριων εργαλειομηχανών και εργαλείων, πέρα από τα συμβατικά. Ήδη η πρόοδος στην κατασκευή αντικειμένων της τάξης των μm είναι πολύ μεγάλη.

Πλέον, εμφανίζεται στο προσκήνιο η έννοια της νανοτεχνολογίας και η ανάγκη κατασκευής αντικειμένων ακόμη μικρότερων διαστάσεων, που φτάνουν ακόμη και μέχρι την τάξη των nm. Αυτό συνεπάγεται μελέτη σε ατομική κλίμακα και απομάκρυνση από τη θεωρία του συνεχούς μέσου, η οποία μπορούσε να χρησιμοποιηθεί μέχρι και στη μικροκλίμακα. Πλέον, υπάρχει η ανάγκη της εύρεσης της αλληλεπίδρασης ανάμεσα σε ζεύγη ατόμων και η χρήση της κβαντομηχανικής για τη μελέτη των φαινομένων στην κλίμακα αυτή.

Οι κατεργασίες λίαν υψηλής ακριβείας που έχουν εμφανιστεί με κοπτικά εργαλεία από διαμάντι μπορούν να αφαιρέσουν υλικό στην κλίμακα των ημιστάτων ατόμων του συστήματος και εξαγωγή των επιθυμητών μεγεθών. Με τον τρόπο αυτό έχουμε μία εικόνα για την εξέλιξη του φαινομένου της νανοκοπής και για τα φαινόμενα που περιμένουμε να αναπτυχθούν στην κλίμακα αυτή.

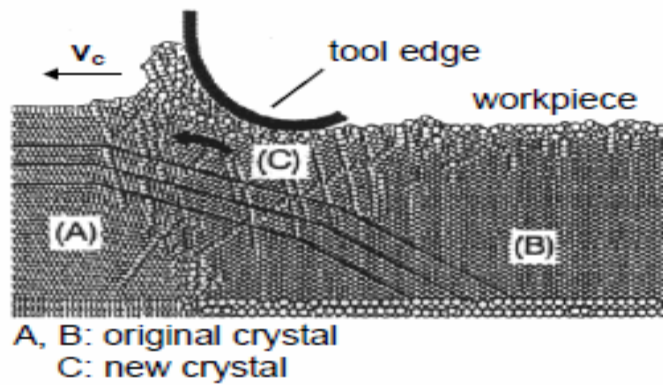
Η προσομοίωση με τη μέθοδο Μοριακής Δυναμικής (MD) χρησιμοποιώντας ατομικά μοντέλα έχει γίνει ιδιαίτερα ελκυστική, ώστε να αποκτηθεί μια βαθύτερη κατανόηση της μικροσκοπικής συμπεριφοράς των υλικών και της δομής και έχει εφαρμοστεί για να μελετηθούν διάφορες καταστάσεις των υλικών καλύπτοντας αέρια, υγρά και στερεά.



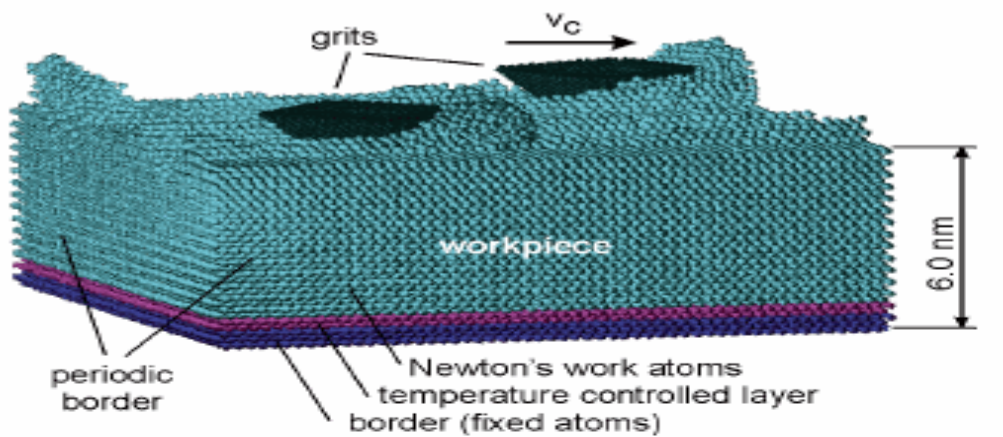
Εικόνα 1.1: Σχηματικό μοντέλο προσομοίωσης για τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής[59]

Η πιο καθολική προσομοίωση υλικού σε MD, λαμβάνοντας υπόψη τη μικροδομή, τις σταθερές πλέγματος, τον προσανατολισμό, τα χημικά στοιχεία και τις ατομικές αλληλεπιδράσεις, επιτρέπει να προχωρήσουμε πέρα από τις ιδανικές, μόνο-κρυσταλλικές δομές ή τις ομοιογενείς ιδιότητες των υλικών και να περιγράψουμε πολυ-κρυσταλλα, ελαττωματικές δομές, περιορισμένα μοντέλα τεμαχίου και μη λείες επιφάνειες (Εικόνα 1.2). Αρχικά σε ατομικό επίπεδο MD παρέχεται μια

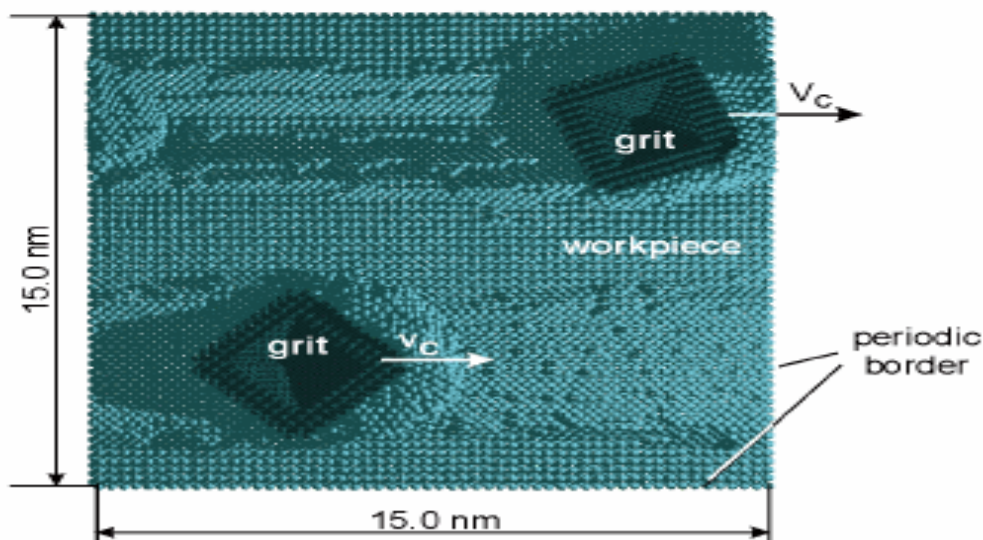
αρκετά λεπτομερής και συνεπής περιγραφή της μικρο-μηχανικής και θερμικής κατάστασης του πρότυπου υλικού για να καταστεί δυνατή η διερεύνηση της δυναμικής της επαφής κόκκου / τεμαχίου. Οι πρώτες πρωτοποριακές εφαρμογές σε MD κοπή και σε MD προσομοίωση αφάιρησης υλικού δημοσιεύτηκαν μεταξύ του 1989 και του 1991 .



Εικόνα 1.2: Κρυσταλλικός προσανατολισμός και παραμόρφωση κατά τη διάρκεια της διέλευσης των κόκκων σε 2D MD .[28]



a) - side view – 360 000 time steps, 144 ps



b) - top view - 360 000 time steps, 144 ps

Εικόνα 1.3: Λείανση με 2 κόκκους .[92]

Η 3D μοντελοποίηση απαιτείται για τη σωστή αναπαράσταση της ανισότροπης μικροδομής του υλικού .(Εικόνα 1.3). Η 3D μοντελοποίηση με ένα μικρό πλάτος επιτρέπει τη σωστή 3D δομή, αλλά μοιάζει περισσότερο σαν ορθογωνική κοπή παρά σαν λείανση , και τεχνητές μετατοπίσεις σε περιοδικές οριακές συνθήκες (PBC) μπορεί να συμβούν για ορισμένους κρυσταλλικούς προσανατολισμούς. Η ανάλυση της προσομοίωσης της διαδικασίας επιτρέπει τον υπολογισμό των δυνάμεων των κόκκων, της θερμοκρασίας και της κατανομής των τάσεων, καθώς και της προκύπτουσας ροής της ενέργειας . Οι αναλύσεις της τοπικής τοπογραφίας του κατεργαζόμενου τεμαχίου , των μηχανισμών παραμόρφωσης και της ακεραιότητας της επιφάνειας μπορούν άμεσα να προσδιοριστούν από διαγράμματα για τα άτομα.

Στη βιβλιογραφία, τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων αναφέρονται χρησιμοποιώντας μοντέλα 3D και 2D μοντέλα. Αφού η 3D μοντελοποίηση είναι απαραίτητη για τη σωστή αναπαράσταση της ανισότροπης μικροδομής του υλικού, οι 2D συνθήκες οδηγούν σε σημαντική απώλεια της ποιότητας της αναπαράστασης του υλικού.

Εκτός από την κρυσταλλική δομή, οι συναρτήσεις δυναμικού αποτελούν κεντρικά στοιχεία της προσομοίωσης MD. Περιγράφουν την αλληλεπίδραση μεταξύ των ατόμων, καθορίζουν τις προκύπτοντες κρυσταλλικές δομές, την αντοχή του υλικού και την ενέργεια παραμόρφωσης. Συχνά χρησιμοποιούνται οι λεγόμενες συναρτήσεις ζεύγων δυναμικού, οι οποίες αποδίδουν με ακρίβεια τα σπάνια αέρια. Για τα μέταλλα πρέπει να επιλέγονται συναρτήσεις δυναμικού πολλών σωμάτων, όπως το δυναμικό EAM. Η αναπαράσταση των κόκκων συχνά έχει απλοποιηθεί σε σχήμα πυραμίδας, ή σε κέλυφος ατόμων με αιχμηρές ή στρογγυλεμένες γωνίες, που δεν έχουν δυναμική, και η εστίαση είναι συχνά στην επίδραση που υπάρχει στο τεμάχιο. Για την περαιτέρω αναγκαία αλληλεπίδραση κόκκων / τεμαχίου, εφαρμόζονται συνήθως ζεύγη δυναμικού, υποθέτοντας είτε πλήρη σύνδεση είτε αδύναμη τριβή ή απώθηση, λόγω των μη-αντιδρώντων ή κορεσμένων (π.χ. οξειδωμένων) επιφανειών.

Τα μοντέλα που χρησιμοποιούνται και οι αναλύσεις πολλών προσομοιώσεων στη διαδικασία MD φαίνεται να είναι ανεπαρκείς σε τουλάχιστον έναν ή περισσότερους όρους σχετικά με το μέγεθος του μοντέλου, την αναπαράσταση του υλικού, τις ρεαλιστικές παραμέτρους διεργασίας και τον χρόνο κατεργασίας. Συχνά η προσομοίωση της κατεργασίας περιορίζεται στα αρχικά στάδια του σχηματισμού του αποβλίττου και καλύπτει μόνο λίγα νανόμετρα του μήκους της κατεργασίας και λίγα πικο δευτερόλεπτα(ps) του χρόνου της διαδικασίας (ως επί το πλείστον <15 nm και <20 ps). Σε MD, η δυνατότητα μεταβολής του βάθους κοπής εξαρτάται άμεσα από το μέγεθος του μοντέλου, και συχνά περιορίζεται σε μερικά νανόμετρα, αλλά όχι από την ταχύτητα κατεργασίας.

Μέσω διεξοδικής ανάλυσης του σχηματισμού του αποβλίττου, της ελαστικής και πλαστικής απόκρισης του τεμαχίου και των άλλων ποσοτήτων της MDπροσομοίωσης αποκαλύφθηκαν σαφή και συνεπή αποτελέσματα. Τα αποτελέσματα δείχνουν, ότι η ευαισθησία των αποτελεσμάτων προσομοίωσης στην ταχύτητα κατεργασίας είναι λιγότερο

ισχυρή από ό, τι παρατηρήθηκε σε πειραματικές έρευνες. Ένας πιθανός λόγος για αυτό το αποτέλεσμα είναι, ότι οι εφαρμοζόμενες οριακές συνθήκες και οι ρυθμίσεις στο μοντέλο έχουν μια ισχυρή επίδραση σχετικά με την δυναμική του μοντέλου της κατεργασίας. Ωστόσο, σημαντικές αλλαγές στο μέγεθος της ταχύτητας κατεργασίας οδήγησαν σε σημαντικές αλλαγές στο σχήμα του αποβλίττου και στον μηχανισμό του σχηματισμού του. Περαιτέρω ποσότητες επηρεάστηκαν, λόγω του εντοπισμού της παραμόρφωσης σε υψηλές ταχύτητες. Το βάθος κοπής και η ακτίνα καμπυλότητας της κοπτικής ακμής έχουν μια πιο άμεση επίδραση στα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

Σε γενικές γραμμές τα αποτελέσματα της προσομοίωσης στην Εικόνα 1.2 αντιπροσωπεύουν μια πρόσφατη MD προσομοίωση της λείανσης, με περισσότερα από 100 000 άτομα, θεωρώντας ένα δυναμικό EAM με δύο λειαντικούς κόκκους οι οποίοι κόβουν ένα τεμάχιο εργασίας σε όλο το μήκος του με ταχύτητα 100 m / s. Τα περιοδικά σύνορα (PBC) στο οριζόντιο επίπεδο οδηγούν στην ολοκλήρωση του σχηματισμού αύλακας στην κατεύθυνση κοπής. Με την επανάληψη της πλήρους κοπής, σε σχέση με την κατεύθυνση που μετατοπίζονται οι λειαντικοί κόκκοι, η κατεργασία ολόκληρης της επιφάνειας μπορεί τώρα να πραγματοποιηθεί. Αυτό παρέχει τη βάση για τον υπολογισμό της 3D επιφανειακής τραχύτητας και τις αναλύσεις των παραμενουσών τάσεων μιας εντελώς κατεργασμένης επιφάνειας σε ταχύτητες κατεργασίας που προσεγγίζουν τις ταχύτητες που έχουν παρατηρηθεί σε πειράματα.

Μέχρι σήμερα, ο αριθμός των MD- προσομοιώσεων της λείανσης είναι μάλλον περιορισμένος, και περισσότερη δουλειά με MD-μοντέλα έχει δημοσιευθεί στις μικρο-κοπές παρά στην λείανση. Αυτό είναι πιο πιθανό να οφείλεται σε δυσκολίες στην ανάπτυξη κατάλληλων μοντέλων σε όρους μικρο-τοπογραφίας και λόγω της τεράστιας υπολογιστικής δύναμης, που είναι απαραίτητη ακόμα και για τις πιο μικρές 3D μοντελοποιήσεις. Όσον αφορά τους υπολογισμούς Μοριακής Δυναμικής, η πρόκληση δεν περιορίζεται στη μεγιστοποίηση της διαθέσιμης υπολογιστικής ισχύος ή την κατανομή του χρόνου της CPU, αλλά επεκτείνεται και στην αποτελεσματική διαχείριση δεδομένων και την ανάλυση των δεδομένων. Από το 1998 το μέγεθος των μεγαλύτερων MD-μοντέλων που αναφέρθηκαν αυξήθηκε σε 100 εκατομμύρια (10^8) άτομα. 100 εκατομμύρια άτομα αντιστοιχούν σε ένα ισόπλευρο κύβο με FCC δομή και

μήκος πλευράς περίπου 100 nm. Μέχρι στιγμής, η μοντελοποίηση και ανάλυση των διαδικασιών με χρήση MD προσομοίωσης έχει περιοριστεί σε απλή ή με λίγους κόκκους προσομοιώσεις της λείανσης σε ένα τεμάχιο(Εικόνα 1.2). Μεταξύ των αναλυόμενων μοντέλων, τα μεγαλύτερα περιέχουν 64 000 έως 120 000 άτομα .

Οι μελλοντικές τάσεις στην MD διαδικασία μοντελοποίησης και προσομοίωσης εστιάζουν σαφώς σε μεγαλύτερα 3D μοντέλα, καλύτερη αναπαράσταση υλικού και μεγαλύτερο χρόνο της προσομοίωσης της διαδικασίας. Συναρτήσεις δυναμικού πολλών σωμάτων για την καλύτερη αναπαράσταση του μετάλλου έχουν ήδη εφαρμοστεί και ο αριθμός τους αυξάνεται συνεχώς.

Το πιο σημαντικό όμως στοιχείο στην MD προσομοίωση λείανσης ή κοπής είναι ότι δεν λαμβάνονται υπόψη τα υγρά κοπής. Ως εκ τούτου, το περιβάλλον του τεμαχίου θεωρείται ως υψηλό κενό χωρίς συναγωγή θερμότητας. Η επέκταση των μοντέλων MD μέσω της μοριακής δυναμικής ρευστών , προσφέρει μια ευκαιρία για την πραγματοποίηση ενός πλήρους ενεργειακού ισοζυγίου και για τη διερεύνηση των επιπτώσεων της προσρόφησης και της αναρρόφησης των στρωμάτων ρευστών και τη συμβολή τους στην τριβολογία της επαφής κοπτικού εργαλείου και τεμαχίου, μελετώντας περιπτώσεις πέρα από τη ξηρή κατεργασία σε υψηλό κενό .

Το σίγουρο είναι ότι η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής είναι μία πολλά υποσχόμενη μέθοδο, η οποία με την πάροδο των χρόνων θα ανοίξει καινούριους ορίζοντες στον τομέα των κατεργασιών. Εφ' όσον αναπτυχθούν οι κατάλληλες συνθήκες για την εύρεση των καινούριων παραμέτρων και βρεθούν τρόποι ενσωμάτωσης καινούριων υλικών στη χρήση της μεθόδου, με μελέτη όλο και περισσότερων παραμέτρων κοπής, μετάβαση στις τρεις διαστάσεις σε μεγαλύτερο βαθμό και χρήση ρεαλιστικότερων συνθηκών κοπής, οι προσομοιώσεις θα μπορέσουν να γίνουν πολύ πιο αξιόλογες και η πρόοδος θα είναι όλο και μεγαλύτερη. Με τον τρόπο αυτό, θα κατανοούνται συνεχώς όλο και περισσότερα χαρακτηριστικά που αφορούν την κλίμακα αυτή, με στόχο να γίνει εφικτή

κάποτε η πλήρης γνώση των παραμέτρων του νανόκοσμου όσον αφορά στις κατεργασίες, όπως επίσης και η μαζική παραγωγή αντικειμένων τόσο μικρών διαστάσεων, που εμφανίζονται πλέον ως απαραίτητα σε πλήθος εφαρμογών.

Κεφάλαιο 2

Σύντομη βιβλιογραφική ανασκόπηση εφαρμογής της Μοριακής Δυναμικής στις κατεργασίες ναοκλίμακας

2.1 Συνοπτική περιγραφή διάφορων ερευνητικών περιπτώσεων

Οι **Belak et al.** [20-23] στο Lawrence Livermore National Laboratories (LLNL) στις Ηνωμένες Πολιτείες διεξήγαν σημαντικές μελέτες στην προσομοίωση κοπής σε ναοκλίμακα για υλικό τεμαχίου χαλκού και κοπτικό εργαλείο από διαμάντι μέσω της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής. Στα [20,21,23] μελέτησαν τη ναοκοπή του χαλκού τόσο στις δύο όσο και στις τρεις διαστάσεις, χρησιμοποιώντας το embedded – atom δυναμικό, για ταχύτητα κοπής 100 m / sec και για διάφορες τιμές γωνίας αποβλήτου και βάθους κοπής. Τα άτομα του άνθρακα στο κοπτικό εργαλείο από διαμάντι παρέμεναν ακίνητα (δηλαδή το υλικό θεωρούνταν εξαιρετικά σκληρό). Αυτό μπορεί να εξηγηθεί, αν σκεφτούμε ότι η σκληρότητα του χαλκού είναι πολύ μικρή συγκριτικά με τη σκληρότητα του διαμαντιού. Στο [22] επίσης μελέτησαν την κοπή του πυριτίου χρησιμοποιώντας κοπτικό εργαλείο από διαμάντι σε ταχύτητα κοπής 540 m/sec, με το εργαλείο σε αυτή την περίπτωση να μπορεί να παραμορφωθεί και να αλληλεπιδράσει με το τεμάχιο. Βρέθηκε ότι ένα πλήθος ατόμων από το τεμάχιο είχε μεταφερθεί στο εργαλείο [2].

Αυτό οδήγησε άλλους ερευνητές, κυρίως από την Ιαπωνία, να εξερευνήσουν και να επεκτείνουν τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής για χρήση στην προσομοίωση κοπής σε ναοκλίμακα. Δύο ομάδες από την Ιαπωνία, η μία υπό την καθοδήγηση του Ikawa, στο Osaka University, και η άλλη από τον **Inamura** στο Nagoya Institute of Technology, έχουν δραστηριοποιηθεί ενεργά στο συγκεκριμένο τομέα. Η δουλειά του Ikawa και των συναδέλφων του ήταν κυρίως επικεντρωμένη στη δισδιάστατη κοπή χαλκού σε ναοκλίμακα με κοπτικό εργαλείο από διαμάντι. Οι περισσότερες από τις δοκιμές τους πραγματοποιήθηκαν για ταχύτητα κοπής 200 m / sec, ενώ κάποιες πραγματοποιήθηκαν και σε ταχύτητα 20 m / sec, για λόγους σύγκρισης. Μελέτησαν την επίδραση του ελάχιστου βάθους

κοπής και του λόγου του ελάχιστου βάθους κοπής προς την ακτίνα καμπυλότητας στο μηχανισμό σχηματισμού αποβλήτου, την παραμόρφωση επιφανείας και την ειδική ενέργεια κοπής.[24-28] Οι Inamura et al. [29-31] χρησιμοποίησαν πάλι χαλκό στις προσομοιώσεις τους και κοπτικό εργαλείο από διαμάντι. Το διαφορετικό ήταν ότι χρησιμοποίησαν μικρότερο αριθμό ατόμων για το τεμάχιο, κάτι που θα έπρεπε να οδηγήσει σε μικρότερους χρόνους υπολογισμού, αλλά σε δυσκολότερη ερμηνεία των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης. Επιπλέον, οι Inamura et al. [32] παρουσίασαν ένα μοντέλο για μετασχηματισμό από το ατομικό μοντέλο και τη νανοκοπή σε ένα ισοδύναμο συνεχές μοντέλο, που σχετίζεται με τις συμβατικές κατεργασίες κοπής [2].

Οι **Maekawa & Itoh** μελέτησαν το ρόλο της τριβής ανάμεσα στο χαλκό και κοπτικό εργαλείο από διαμάντι σε προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής σε δύο διαστάσεις. Τα δυναμικά Morse και Born-Meyer χρησιμοποιήθηκαν για την εύρεση των αλληλεπιδράσεων ανάμεσα στα άτομα [53].

Οι **Kim & Moon** μελέτησαν το μηχανισμό κοπής χαλκού και αλουμινίου στη νανοκλίμακα στις δύο διαστάσεις, χρησιμοποιώντας τη Μοριακή Δυναμική και το δυναμικό Morse. Επίσης, ερεύνησαν τη διαφορετική συμπεριφορά των δύο υλικών για διάφορα βάθη κοπής και διαφορετικές ταχύτητες κοπής [54].

Επίσης, αναφέρουμε τους **Zhang & Tanaka**, οι οποίοι δημιούργησαν δισδιάστατο μοντέλο για προσομοίωση κοπής σε νανοκλίμακα μέσω της Μοριακής Δυναμικής, για μελέτη κυρίως της αναπτυσσόμενης τριβής ανάμεσα στο τεμάχιο και το κοπτικό εργαλείο [55].

Σημαντικές προσπάθειες στην προσομοίωση νανοκοπής με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής έχουν γίνει από τον Komanduri και τους συνεργάτες του. Οι **Komanduri et al.** χρησιμοποίησαν το δυναμικό Morse για την προσομοίωση κοπής λίαν υψηλής ακριβείας, χρησιμοποιώντας ως υλικό χαλκό. Επιπλέον, μελέτησαν την επίδραση της μορφής του κοπτικού εργαλείου στα αποτελέσματα της νανοκοπής [57]. Επίσης, μελέτησαν τις επιδράσεις της κατεύθυνσης των κρυστάλλων, της διεύθυνσης κοπής και της γωνίας αποβλήτου στην προσομοίωση κοπής σε νανοκλίμακα σε υλικό αλουμίνιο, χρησιμοποιώντας πάλι το δυναμικό Morse (Εικόνες 3.3-3.4) [58]. Στο [56] ασχολήθηκαν επίσης πολύ νωρίς με τις μεγάλες αρνητικές

γωνίες αποβλίττου για την προσομοίωση της κατεργασίας της λείανσης. Ακόμη, οι ίδιοι στο [63] καθώς και οι **Fang & Wu** [64], ασχολήθηκαν με μεγάλες αρνητικές γωνίες αποβλήτου για την προσομοίωση κατεργασίας σκληρομέτρησης (indentation), σε τεμάχιο αλουμινίου και σε τεμάχιο πολλαπλών στρωμάτων αλουμινίου και νικελίου αντίστοιχα, με μονοκρυσταλλικό διαμάντι ως κοπτικό εργαλείο.

Ο **Shimada** χρησιμοποίησε τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής για την προσομοίωση κοπής χαλκού σε νανοκλίμακα στις δύο διαστάσεις για να μελετήσει το μηχανισμό σχηματισμού αποβλίττου, τις δυνάμεις κοπής και την ειδική ενέργεια κοπής [19].

Οι **Pei et al.** προσομοίωσαν την κοπή χαλκού σε νανοκλίμακα στις δύο διαστάσεις, μελετώντας την επίδραση των διαφόρων παραμέτρων κοπής στις δυνάμεις κοπής. Επιπλέον, χρησιμοποίησαν δύο διαφορετικές συναρτήσεις δυναμικού, το Morse potential και το Embedded – Atom Model για να κατανοήσουν την επίδραση των διαφορετικών συναρτήσεων στη μεταβολή των δυνάμεων κοπής [59].

Ενώ οι πολύ αρνητικές γωνίες κοπής ($>-15^\circ$) χρησιμοποιούνται σπάνια στις κοπές, χρησιμοποιούνται κατά κανόνα στη λείανση. Ο **Hahn** εισήγαγε την υπόθεση του κόκκου στίλβωσης στη λείανση, σύμφωνα με την οποία κάποιοι κόκκοι εκτριβής (abrasive grains) μπορεί απλώς να τρίβουν την κατεργαζόμενη επιφάνεια, προκαλώντας αύξηση των δυνάμεων τριβής στην επιφάνεια ελευθερίας, αλλά καμία δύναμη κοπής στην επιφάνεια κοπής του εργαλείου, ενώ άλλοι κόκκοι εκτριβής συμμετέχουν στη διαδικασία διαμόρφωσης του αποβλήτου [61]. Σύμφωνα με τον Hahn, αν η διαδικασία είναι παρόμοια με το φρεζάρισμα αλλά σε μικροκλίμακα, δε θα ήταν διαφορετικός ο λόγος δυνάμεων στο φρεζάρισμα από ότι στην κοπή. Όμως, στην κοπή μετάλλων με θετική γωνία κοπής του εργαλείου, η δύναμη πρόωσης είναι σχεδόν η μισή σε σχέση με τη δύναμη κοπής, ενώ στη λείανση η δύναμη πρόωσης είναι διπλάσια της δύναμης κοπής. Ως εκ τούτου, η μελέτη των κατεργασιών με πολύ αρνητικές γωνίες κοπής εργαλείου διευκολύνει κατά πολύ την προσομοίωση της διαδικασίας λείανσης.

Οι **Ye et al.** χρησιμοποίησαν το δυναμικό embedded - atom για την προσομοίωση κοπής χαλκού σε νανοκλίμακα με μεγάλες αρνητικές τιμές της γωνίας αποβλήτου. Βέβαια, στις δικές τους προσπάθειες προσομοίωσης χρησιμοποιήθηκαν κοπτικά εργαλεία από χαλκό, αντί για τα εργαλεία από διαμάντι, που κανονικά χρησιμοποιούνται. Αυτό που μελέτησαν ήταν η επίδραση των διαφορετικών ταχυτήτων κοπής στο μηχανισμό σχηματισμού του αποβλίττου και την ποιότητα της κατεργασμένης επιφανείας [62].

Ακόμη, οι **Inasaki et al** [18] ερεύνησαν την ακεραιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας, κατά τη διάρκεια νανοκατεργασιών λείανσης και το μηχανισμό δημιουργίας αποβλήτου, με τη βοήθεια της Μοριακής Δυναμικής. Στη μελέτη αυτή περιγράφονται διαδικασίες δημιουργίας ρωγμών (crack initiation) και μετατοπίσεων υλικού (dislocations) και αναλύονται διεξοδικά η σκληρότητα της υπό κατεργασία επιφάνειας, καθώς και οι παραμένουσες τάσεις στο τεμάχιο. Εδώ γίνεται για πρώτη φορά προσομοίωση δημιουργίας ρωγμών με τη βοήθεια της Μοριακής δυναμικής. Τα αποτελέσματά τους αλλά και η έρευνά τους γενικότερα θεωρούνται θεμελιώδη για οποιαδήποτε μελέτη Μοριακής Δυναμικής λειαντικών κατεργασιών σε νανοκλίμακα (indentation, scratching, grinding, sliding).

Οι **Lin & Wang** [65] καθώς και οι **Ye et al** [66] εκπόνησαν πολλές αξιόλογες μελέτες που ασχολούνται με τη λείανση νανοκλίμακας σε μέταλλα με διαφορετικούς τρόπους (μία από αυτές παρουσιάζεται αναλυτικά σε επόμενη ενότητα), ενώ οι **Murali et al** [67] πραγματοποίησαν προσομοιώσεις MD σε νανοκατεργασίες με λειαντικούς κόκκους (abrasive grains). Οι **Molinari & Junge** [68] προσομοίασαν εκτριβή αλουμινίου σε νανοκλίμακα (απόξεση νανοκλίμακας, nano-scratching) με αδαμάντινο κόκκο, ως εργαλείο, και οι **Noreyan et al** [69] μελέτησαν επίσης την ίδια νανοκατεργασία, δουλεύοντας με ημιαγώγιμα υλικά, όπως το πυρίτιο.

Η κοπή χαλκού από διαμάντι είναι η πιο συνηθισμένη εφαρμογή της MD στις νανοκατεργασίες. Οι **Zhuetal** [70] πραγματοποίησαν τρισδιάστατη προσομοίωση MD ώστε να διερευνήσουν τη νανοκοπή χαλκού με χρήση εργαλείου διαμαντιού. Μελετήθηκε, μεταξύ άλλων, η επίδραση της θερμοκρασίας του κύριου όγκου του υλικού στη δύναμη κοπής και στον παραγόμενο όγκο αποβλίττου.

Ένα κρίσιμο χαρακτηριστικό, το οποίο προσομοιώθηκε από τους **Ye et al**[81], και δεν είχε ληφθεί υπόψη σε προηγούμενες προσομοιώσεις [77,31,32,58,63], ήταν η χαλάρωση του υλικού κατεργασίας μετά την πάροδο της κοπής. Αυτό επιτρέπει στην περισσευούμενη ενέργεια που παράγεται στην κατεργασμένη περιοχή να διαχυθεί μέσω αγωγής στον κύριο όγκο του υλικού και είναι κρίσιμο για την επαναφορά των παραμορφώσεων. Υπερβολικές θερμοκρασίες στο υλικό κατεργασίας βρέθηκαν επίσης από τον **Rentsch** [82].

Η συμπίεση του υλικού κάτω από το κοπτικό εργαλείο και η δημιουργία αποβλήτου στις προσομοιώσεις, συμφωνούν με τα αποτελέσματα των **Komanduri et al** [58]. Επίσης η διεξαγωγή προσομοίωσης κοπής στην επιφάνεια χαλκού (111), δείχνει απουσία μετατοπίσεων στο υπόστρωμα, όπως και στους **Komanduri et al** [58]. Μιας και η επιφάνεια (111) είναι ένα φυσικό επίπεδο αποκοπής, η επιφάνεια κοπής είναι αρκετά επίπεδη και χωρίς παραμορφώσεις. Η εξάρτηση του συντελεστή τριβής μ με την κρυσταλλική γεωμετρία παρατηρήθηκε σε προσομοιώσεις που έγιναν από τους **Komanduri, Chandrasekaran & Raff** [63]. Συγκεκριμένα βρήκαν τιμές $\mu > 1$ για εργαλεία με θετικές γωνίες αποβλήτου, και $\mu < 1$ για εργαλείο με αρνητική γωνία αποβλήτου -45ο [58].

Οι υπολογισθείσες δυνάμεις και το $\mu < 1$ συμφωνούν με τα αποτελέσματα των **Zhang&Tanaka** [56] για ένα ολισθαίνον τραχύ διαμάντι σε επιφάνεια χαλκού (001). Οι **Fang&Weng** [77] βρήκαν μείωση του μ με τη γωνία του αποβλήτου για εργαλείο σημειακής επαφής σε τρισδιάστατες προσομοιώσεις MD, αποτέλεσμα αναμενόμενο με βάση τη μηχανική συνεχούς μέσου. Επιπλέον διαπιστώθηκε ότι με τη βοήθεια της μεθόδου πολλών σωματιδίων (EAM), μπορούν να αναπαραχθούν αποτελέσματα σε συμφωνία με τις προηγούμενες προσεγγίσεις δυναμικού Morse. [77, 58, 63, 56]. Αυτό καταδεικνύει ότι τα αποτελέσματα των μελετητών είναι σχετικά ανεπηρέαστα από τη συνάρτηση διατομικής δυναμικής ενέργειας που χρησιμοποιήθηκε.

Οι **Lin, Yu&Wang** [65] διεξήγαγαν προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής με σκοπό να ερευνήσουν βασικά χαρακτηριστικά της κατεργασίας της

λείανσης με κόκκους εκτριβής. Ειδικότερα ασχολήθηκαν ιδιαίτερα με την απορρόφηση ενέργειας, την ανάλυση των δυνάμεων που αναπτύσσονται κατά την καταπόνηση του υλικού, τις παραμένουσες τάσεις του ατομικού πλέγματος του υπό κατεργασία τεμαχίου και τη θερμοκρασία σε ατομικό επίπεδο (όπως και τη διάχυση θερμότητας εντός του).

Οι **Lin, Yu&Wang**[65]ερεύνησαν εντατικά διάφορα προβλήματα που παρουσιάζονται κατά τη διάρκεια προσομοιώσεων MD λείανσης, όπως τα φυσικά και μηχανικά χαρακτηριστικά της λειαντικής διεργασίας, το μηχανισμό αποβολής υλικού και τη διαμόρφωση της υπό κατεργασία επιφάνειας στη μικροσκοπική ζώνη κοντά στο σημείο δράσης ενός κόκκου λείανσης

Οι **Maekawa&Itoh** [53] ερεύνησαν επίσης το ρόλο της τριβής στις νανκοπές χρησιμοποιώντας προσομοίωση MD με βάση τη μέθοδο Nose-Hoover. Οι προσομοιώσεις MD διεξήχθησαν με εργαλείο που προσομοιάζει το διαμάντι και χαλκό ως υλικό κατεργασίας. Χρησιμοποιήθηκαν συναρτήσεις δυναμικού Morse με διάφορα μεγέθη ενέργειας συνοχής ώστε να προσεγγισθεί κατάλληλα η τριβή στη διεπιφάνεια αποβλίττου-εργαλείου καθώς και στα υλικά του εργαλείου και της κατεργασίας. Η χρήση εργαλείου παρόμοιου με διαμάντι (αντί κανονικού διαμαντιού), η επιλογή του χαλκού ως υλικό κατεργασίας και του εργαλείου διαμαντιού, όπου η φθορά του εργαλείου είναι αμελητέα , και η επιλογή δυναμικών τύπου Morse είναι μερικά από τα μειονεκτήματα της έρευνας σε αυτό τον τομέα.

Ο **Loladze** [51] επιβεβαίωσε το φαινόμενο διεξάγοντας ελέγχους του ζεύγους διάχυσης (καθαρός σίδηρος και διαμάντι) σε διαφορετικές θερμοκρασίες. Η μελέτη του φαινομένου μέσω προσομοίωσης MD επιτρέποντας αλληλεπιδράσεις μεταξύ του υλικού κατεργασίας σιδήρου και του εργαλείου διαμαντιού στη διεπιφάνεια αποβλίττου – εργαλείου, και χρησιμοποιώντας το πραγματικό δυναμικό του διαμαντιού, συμβάλλουν στην κατανόηση της διαδικασίας της φθοράς. Μια τέτοια έρευνα προϋποθέτει την αντιμετώπιση σύνθετων δυναμικών διαμαντιού, λαμβάνοντας υπόψη τη φάση μετασχηματισμού από κυβικό διαμάντι σε γραφίτη.

2.2 Συνοπτικός πίνακας των διάφορων ερευνητικών περιπτώσεων

Ερευνητές	Ερευνητικό Αντικείμενο
Belak et al[20,21,23]	Μελέτη κοπής χαλκού με εργαλείο ακίνητο και πυριτίου με παραμορφώσιμο εργαλείο από διαμάντι.
Ikawa[24-28]	Μελέτη της επίδρασης του ελάχιστου βάθους κοπής και του λόγου του ελάχιστου βάθους κοπής προς την ακτίνα καμπυλότητας στο μηχανισμό σχηματισμού αποβλήτου, την παραμόρφωση επιφανείας και την ειδική ενέργεια κοπής. Δισδιάστατη κοπή χαλκού από διαμάντι
Inamura[29-32]	Παρουσίαση μοντέλου για μετασχηματισμό από το ατομικό μοντέλο σε ένα ισοδύναμο συνεχές μοντέλο. Προσομοίωση κοπής χαλκού με κοπτικό εργαλείο από διαμάντι
Maekawa&Ito h [53]	Μελέτη του ρόλου της τριβής ανάμεσα σε χαλκό και κοπτικό εργαλείο από διαμάντι σε προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής σε δύο διαστάσεις
Kim& Moon[54]	Μελέτη του μηχανισμού κοπής χαλκού και αλουμινίου στη νανοκλίμακα στις δύο διαστάσεις με το δυναμικό Morse. Έρευνα της διαφορετικής συμπεριφοράς των δύο υλικών για διάφορα βάθη κοπής και διαφορετικές ταχύτητες κοπής
Zhang& Tanaka[55]	Δημιουργία δισδιάστατου μοντέλου για προσομοίωση κοπής σε νανοκλίμακα μέσω της Μοριακής Δυναμικής και μελέτη κυρίως της αναπτυσσόμενης τριβής ανάμεσα στο τεμάχιο και το κοπτικό εργαλείο
Komanduri[57]	Μελέτη της επίδρασης της μορφής του κοπτικού εργαλείου στα αποτελέσματα της νανοκοπής και των επιδράσεων της κατεύθυνσης των κρυστάλλων, της διεύθυνσης κοπής και της γωνίας αποβλήτου στην προσομοίωση κοπής σε νανοκλίμακα σε υλικό αλουμίνιο με δυναμικό Morse.
Shimada[19]	Προσομοίωση κοπής χαλκού σε νανοκλίμακα στις δύο διαστάσεις για τη μελέτη του μηχανισμού σχηματισμού αποβλήτου, τις δυνάμεις κοπής και την ειδική ενέργεια κοπής
Pei, Lu, Fang&Wu [59]	Προσομοίωση της κοπής χαλκού σε νανοκλίμακα στις δύο διαστάσεις και μελέτη της επίδρασης των διαφόρων παραμέτρων στις δυνάμεις κοπής με χρησιμοποίηση δύο διαφορετικών συναρτήσεων δυναμικού.

Hahn [61]	Εισαγωγή της υπόθεσης του κόκκου στίλβωσης στη λείανση.
Ye et al. [62]	Χρησιμοποίηση του δυναμικού embedded - atom για την προσομοίωση κοπής χαλκού με μεγάλες αρνητικές τιμές της γωνίας αποβλήτου. Χρησιμοποίηση κοπτικών εργαλείων από χαλκό, αντί διαμαντιού. Μελέτη της επίδρασης των διαφορετικών ταχυτήτων κοπής στο μηχανισμό σχηματισμού του αποβλίττου και στην ποιότητα της κατεργασμένης επιφανείας.
Komanduri et al [56]	Έρευνα σε μεγάλες αρνητικές γωνίες αποβλήτου για την προσομοίωση κατεργασίας σκληρομέτρησης (indentation), σε τεμάχιο αλουμινίου και σε τεμάχιο πολλαπλών στρωμάτων αλουμινίου και νικελίου αντίστοιχα, με μονοκρυσταλλικό διαμάντι ως κοπτικό εργαλείο.
Inasaki et al [18]	Μελέτη της ακεραιότητας της κατεργασμένης επιφάνειας, κατά τη διάρκεια νανοκατεργασιών λείανσης και του μηχανισμού δημιουργίας αποβλίττου, με τη βοήθεια της Μοριακής Δυναμικής. Περιγραφή διαδικασιών δημιουργίας ρωγμών (crack initiation) και μετατοπίσεων υλικού (dislocations) και ανάλυση της σκληρότητας της υπό κατεργασία επιφάνειας και των παραμένουσων τάσεων στο τεμάχιο.
Murali et al [67]	Πραγματοποίηση προσομοιώσεων MD σε νανοκατεργασίες με λειαντικούς κόκκους (abrasive grains)
Molinari & Junge [68]	Προσομοίωση εκτριβής αλουμινίου σε νανοκλίμακα (απόξεση νανοκλίμακας, nano-scratching) με αδαμάντινο κόκκο, ως εργαλείο
Noreyan et al [69]	Προσομοίωση εκτριβής αλουμινίου σε νανοκλίμακα (απόξεση νανοκλίμακας, nano-scratching) με αδαμάντινο κόκκο, ως εργαλείο, δουλεύοντας με ημιαγώγιμα υλικά, όπως το πυρίτιο
LinandWang [65]	Μελέτη της απορρόφησης της ενέργειας, των δυνάμεων κατά την καταπόνηση του υλικού, των παραμενουσών τάσεων του πλέγματος του υπό κατεργασία τεμαχίου και της θερμοκρασίας του ατομικού χώρου. Μελέτη του μηχανισμού αποβολής υλικού και της διαμόρφωσης της υπό κατεργασία επιφάνειας στη μικροσκοπική ζώνη κοντά στο σημείο ενέργειας ενός κόκκου λείανσης.
Zhu et al [70]	Τρισδιάστατη προσομοίωση MD για τη διερεύνηση της νανοκοπής χαλκού με χρήση εργαλείου διαμαντιού. Μελέτη της επίδρασης της θερμοκρασίας του κύριου όγκου του υλικού στη δύναμη κοπής και στον παραγόμενο όγκο αποβλίττου.
Ye et al.[81]	Μελέτη της χαλάρωσης του υλικού κατεργασίας μετά την πάροδο της κοπής

Κεφάλαιο3

Η θεωρία της Μοριακής Δυναμικής

3.1 Εισαγωγή

Η ουσία της μεθόδου προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής είναι η αριθμητική επίλυση των εξισώσεων κίνησης του Νεύτωνα, για ένα σύνολο ατόμων. Οι εξισώσεις αυτές ολοκληρώνονται με αριθμητικές τεχνικές σε εξαιρετικά μικρά χρονικά διαστήματα (2-3 femtoseconds), και οι στατιστικοί μέσοι ισορροπίας υπολογίζονται ως χρονικοί μέσοι στο διάστημα παρατήρησης. Βασικά, απαιτείται η γνώση της ηλεκτρονιακής θεμελιώδους κατάστασης σε κάθε γεωμετρία συστήματος, έτσι ώστε να έχουμε μια σωστή περιγραφή των διατομικών δυνάμεων. Όπως συνάγεται από τα παραπάνω, η Μοριακή Δυναμική είναι μια ντετερμινιστική τεχνική: δεδομένου ενός συνόλου συντεταγμένων και ταχυτήτων των ατόμων καθώς και του τύπου των αλληλεπιδράσεων μεταξύ τους, η μετέπειτα χρονική εξέλιξη του συστήματος είναι ουσιαστικά προδιαγεγραμμένη. Το μόνο σημείο όπου κάποιος παράγοντας τυχαιότητας υπεισέρχεται σε αυτή τη μέθοδο, είναι στην εκλογή της αρχικής κατανομής ταχυτήτων και θέσεων των ατόμων. Για να καταστήσουμε πρακτικά εφαρμόσιμες τις ατομιστικές μελέτες προσομοίωσης, απαιτείται ένα κλασσικό ή ημι-κλασσικό δυναμικό, από το οποίο μπορούν να υπολογιστούν οι διατομικές δυνάμεις. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω μιας κατάλληλης εμπειρικής συνάρτησης ενέργειας δυναμικού, η οποία ικανοποιεί διάφορα αυστηρά κριτήρια για τις ιδιότητες του υλικού, στις οποίες συμπεριλαμβάνονται η σταθερά πλέγματος, η ενέργεια εξάχνωσης, η συμπίεστικότητα, οι σταθερές ελαστικότητας, η εξίσωση φάσης και η σταθερότητα του ίδιου του κρυστάλλου.

Η προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής παίζει έναν εξαιρετικά σημαντικό ρόλο στην ανάλυση της συμπεριφοράς των υλικών σε ατομικό επίπεδο, η οποία δε μπορεί να επιτευχθεί με άλλες θεωρητικές μεθόδους ή πειράματα. Αποτελεί μια μεθοδολογία εξέτασης των στατιστικών ιδιοτήτων συστημάτων συμπυκνωμένης ύλης. Η πρόβλεψη της συμπεριφοράς των υλικών, βασιζόμενη σε μια ανάλυση ατομικού επιπέδου, παρέχει χρήσιμες και ακριβείς πληροφορίες για μια πληθώρα εφαρμογών, που αφορούν στην επιστήμη των υλικών, την τριβολογία και τις κατεργασίες.

Στην προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής, οι διατομικές δυνάμεις δεσμών (ελκυστικές και απωστικές) ορίζονται μέσω μιας κατάλληλης εμπειρικής συνάρτησης ενέργειας δυναμικού. Η βάση όλων των μεθόδων μοριακής προσομοίωσης είναι ο καθορισμός μιας συνάρτησης δυναμικού, μέσω της οποίας γίνεται ο υπολογισμός της δυναμικής ενέργειας του συστήματος προσομοίωσης, σαν συνάρτηση των συντεταγμένων των ατόμων που το απαρτίζουν. Με γνωστή τη συνάρτηση αυτή, υπολογίζεται η δύναμη που ασκείται σε καθένα από τα άτομα. Για τα μέταλλα, χρησιμοποιούνται συχνά τα δυναμικά ζεύγους σωμάτων (*pairwise potentials*), όπως τα δυναμικά Morse ή Lennard-Jones. Οι προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής μπορούν να συσχετιστούν με τη δυναμική απόκριση ενός μη-γραμμικού συστήματος ελατηρίου-μάζας (άτομα ή θετικά ιόντα), υπό την εφαρμογή κάποιου φορτίου, ή συνθηκών ταχύτητας ή μετατόπισης. Από την άποψη αυτή, η Μοριακή Δυναμική είναι παρόμοια με άλλες αναλύσεις που εκπονούν οι μηχανικοί σε καθημερινή βάση, όπως η ανάλυση των ταλαντώσεων ενός μηχανικού συστήματος, το οποίο αποτελείται από μια σειρά αταλάντευτων μαζών και αβαρών ελατηρίων και η απόκρισή του υπό γνωστό εξωτερικό φορτίο.

Στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, παρόλο που τα άτομα ταλαντώνονται γύρω από τις θέσεις ελάχιστης ενέργειας, οι ίδιες οι θέσεις ελάχιστης ενέργειας μετακινούνται, καθώς εξελίσσεται η κοπή. Υπάρχουν δύο προσεγγίσεις που περιγράφουν την κίνηση των ατόμων. Σύμφωνα με την πρώτη προσέγγιση, η οποία είναι γνωστή ως «προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής», το αντικείμενο εξέτασης, δηλαδή η θέση κάθε ατόμου, προσδιορίζεται με επίλυση των εξισώσεων κίνησης του Νεύτωνα με μεγάλο χρόνο διακριτικής ικανότητας (μικρότερο από την περίοδο της ταλάντωσης των ατόμων, η οποία είναι της τάξης των 1×10^{-15} s ή 1 fs). Η μέθοδος αυτή όμως είναι αρκετά επίπονη, υπολογιστικά. Για παράδειγμα, ένα φυσικό φαινόμενο που διαρκεί για 1s, πρέπει να προσομοιωθεί σε χρονικά βήματα του 1×10^{-15} s, δηλαδή απαιτούνται 1×10^{15} χρονικές διαβαθμίσεις, για την κίνηση ενός ατόμου διάρκειας 1s. Σύμφωνα με τη δεύτερη προσέγγιση, η οποία ονομάζεται «Ανάλυση Μοριακής Στατικής», ακολουθούνται μόνο οι θέσεις στις οποίες η προκύπτουσα δύναμη πάνω σε κάθε άτομο είναι μηδενική. Βέβαια, στην περίπτωση αυτή τα άτομα ακολουθούν τις θέσεις ελάχιστης δυναμικής ενέργειας. Είναι στην πραγματικότητα μια ψευδο-στατική μέθοδος. Στην προσομοίωση αυτή, μόνο μερικές εκατοντάδες άτομα μπορούν να ληφθούν υπόψη και ως εκ

τούτου, καταλήγουμε σε σημαντικά μικρότερο υπολογιστικό χρόνο. Όμως, η ερμηνεία και η ανάλυση των δεδομένων με τη μέθοδο αυτή είναι πιο πολύπλοκη.

Όταν ο αριθμός των ατόμων που λαμβάνονται υπόψη στο μοριακό μοντέλο μιας διεργασίας γίνεται μεγάλος, οι μέθοδοι κβαντικής μηχανικής γίνονται δυσεπίλυτες. Στις περιπτώσεις αυτές, πρέπει να χρησιμοποιηθεί η προσέγγιση της κλασσικής ή ψευδο-κλασσικής τροχιάς. Στις μεθόδους αυτές, ο πυρήνας θεωρούμε ότι κινείται κλασσικά σε αδιαβατική επιφάνεια δυναμικής ενέργειας.

Αν οι αρχικές στάθμες του συστήματος θεωρηθούν κβαντισμένες, η διαδικασία ονομάζεται ψευδο-κλασσική. Στη συμβατική προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής, δε γίνεται προσπάθεια να επιλυθεί η πολύπλοκη εξίσωση του Schrödinger για την εύρεση του δυναμικού του συστήματος. Οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων μοντελοποιούνται βάσει του εμπειρικού δυναμικού. Το πρόβλημα της προσομοίωσης οποιασδήποτε μοριακής διεργασίας, είτε πρόκειται για χημική αντίδραση, είτε για φυσική διαδικασία, όπως η κατεργασία, περιλαμβάνει τέσσερα βασικά τμήματα, δηλαδή:

- (α) τη διατύπωση και την ολοκλήρωση των κλασσικών εξισώσεων της κίνησης, για τα άτομα που συνιστούν το σύστημα που μας ενδιαφέρει
- (β) την επιλογή του μοριακού μοντέλου,
- (γ) την ανάπτυξη μιας συνάρτησης δυναμικής ενέργειας επαρκούς ακρίβειας και
- (δ) την προσομοίωση των πειραματικών συνθηκών.

Πρέπει να δοθεί ιδιαίτερη σημασία σε καθένα από αυτά τα βήματα, ώστε τα αποτελέσματα που θα προκύψουν από τις προσομοιώσεις να είναι χρήσιμα, για την ερμηνεία και την πρόβλεψη των πειραματικών δεδομένων. [20-32]

3.2 Είδη Ατόμων

3.2.1 Νευτώνια Άτομα

Στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, η αριθμητική ολοκλήρωση των κλασσικών εξισώσεων του Νεύτωνα για την κίνηση, πραγματοποιείται σε ένα σύνολο ατόμων (Νευτώνια άτομα). Έτσι ισχύει

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \frac{d(m\mathbf{v}_i)}{dt} = \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = \mathbf{F}_i$$

όπου m είναι η μάζα του ατόμου και \mathbf{r}_i , \mathbf{v}_i , \mathbf{p}_i και \mathbf{F}_i είναι η θέση, η ταχύτητα, ορμή και η δύναμη που ασκείται στο άτομο i , αντίστοιχα. Το αποτέλεσμα της προσομοίωσης είναι οι τροχιές των ατόμων, καθώς και οι ταχύτητές τους. Η δύναμη \mathbf{F}_i σε ένα άτομο i , είναι η κλίση της συνάρτησης δυναμικού (ΣΔ) ως προς τη θέση του ατόμου i , π.χ.

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_i V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_a})$$

όπου

V = συνάρτηση ενέργειας δυναμικού

N_a = αριθμός ατόμων

$\mathbf{r}_{ij} = x \mathbf{i} + y \mathbf{j} + z \mathbf{k}$ είναι η θέση του διανύσματος του ατόμου i , όπου x_i, y_i και z_i είναι οι συντεταγμένες του ατόμου i και

$$\nabla_i = \frac{\partial}{\partial x_i} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y_i} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z_i} \mathbf{k}$$

Οι προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής διεξάγονται μέσω μιας σειράς χρονικών βημάτων, τα οποία αποτελούνται από:

- (α) άθροιση των ζευγών δυνάμεων για κάθε άτομο,
- (β) υπολογισμός των νέων ταχυτήτων και μετατοπίσεων σε κάθε βήμα,
- (γ) προσδιορισμός των νέων θέσεων των ατόμων, και
- (δ) έλεγχος διατήρησης της ενέργειας.

Για να δοθεί μια εκτίμηση της υπολογιστικής δυνατότητας που απαιτείται στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, πρέπει να σημειωθεί ότι το πλήθος των διαφορικών εξισώσεων που πρέπει να επιλυθούν είναι $6N$, όπου N το πλήθος των ατόμων που λαμβάνονται υπόψη στο τεμάχιο, το οποίο

μπορεί να ποικίλλει από μερικές εκατοντάδες ως αρκετές χιλιάδες άτομα. Όσο μεγαλύτερο το πλήθος, τόσο μεγαλύτερος και ο χρόνος επεξεργασίας. Σε γενικές γραμμές, 2000-10000 άτομα λαμβάνονται υπόψη σε κάθε προσομοίωση. Έτσι, ένα μοντέλο 2000 ατόμων, απαιτεί την επίλυση 12000 συζευγμένων, διαφορικών εξισώσεων κίνησης πρώτης τάξης. Στις περισσότερες προσομοιώσεις κατεργασιών, η συνάρτηση ενέργειας δυναμικού που χρησιμοποιείται, είναι η άθροιση των ζευγών αλληλεπιδράσεων. Το συνολικό πλήθος των ανά ζεύγη όρων σε ένα τέτοιο δυναμικό δίνεται από τη σχέση $N(N-1)/2$. Άρα, για $N=2000$, περίπου 2×10^6 ανά ζεύγη όροι πρέπει να υπολογισθούν σε κάθε βήμα ολοκλήρωσης. Άρα συνολικά για τον υπολογισμό μιας τροχιάς, απαιτούνται 8×10^6 υπολογισμοί, αφού σε κάθε βήμα ολοκλήρωσης απαιτούνται τέσσερις τέτοιοι υπολογισμοί. Ως εκ τούτου, ο υπολογιστικός χρόνος αυξάνεται πολύ γρήγορα, καθώς αυξάνεται το πλήθος των ατόμων που λαμβάνονται υπόψη. Όμως, το μοντέλο πρέπει να παρουσιάζει «σύγκλιση μεγέθους», δηλαδή, τα τελικά αποτελέσματα δεν πρέπει να είναι ευαίσθητα στην προσθήκη νέων ατόμων στο μοντέλο. Για να προσδιορίσουμε αν ένα μοντέλο παρουσιάζει σύγκλιση μεγέθους, πρέπει να προηγηθούν εμπειρικές μελέτες, στις οποίες προσδιορίζεται η ευαισθησία των τελικών αποτελεσμάτων ανάλογα με το πλήθος των ατόμων. Το βέλτιστο πλήθος, είναι η μικρότερη τιμή του N , για την οποία τα τελικά αποτελέσματα κρίνονται επαρκώς ανεπηρέαστα από το N . Τυπικοί χρόνοι επεξεργασίας για ένα μοντέλο επίπεδης, διδιάστατης νανομετρικής κοπής 2000 ατόμων, είναι μερικές ώρες. [8]

3.2.2 Άτομα θερμοστάτες

Στη Μοριακή Δυναμική γίνεται επιλογή του στατιστικού συνόλου που θα χρησιμοποιηθεί. Η επιλογή αφορά στους περιορισμούς που θα επιβληθούν στο σύστημα. Ο λόγος είναι ότι τα αποτελέσματα της προσομοίωσης θα αναχθούν σε μακροσκοπικές ιδιότητες των προς προσομοίωση υλικών. Εκτός του μικροκανονικού στατιστικού συνόλου, όλα τα υπόλοιπα έχουν ως περιορισμό την θερμοκρασία. Η ρύθμιση της θερμοκρασίας στην επιθυμητή τιμή, γίνεται με την διαδικασία της θερμοστάτησης. Στην ουσία, το σύστημα αφήνεται να εξελιχτεί για λίγο, χωρίς περιορισμό θερμοκρασίας, και σε τακτά χρονικά διαστήματα, η θερμοκρασία επιβάλλεται να γίνει ίση με την επιθυμητή.

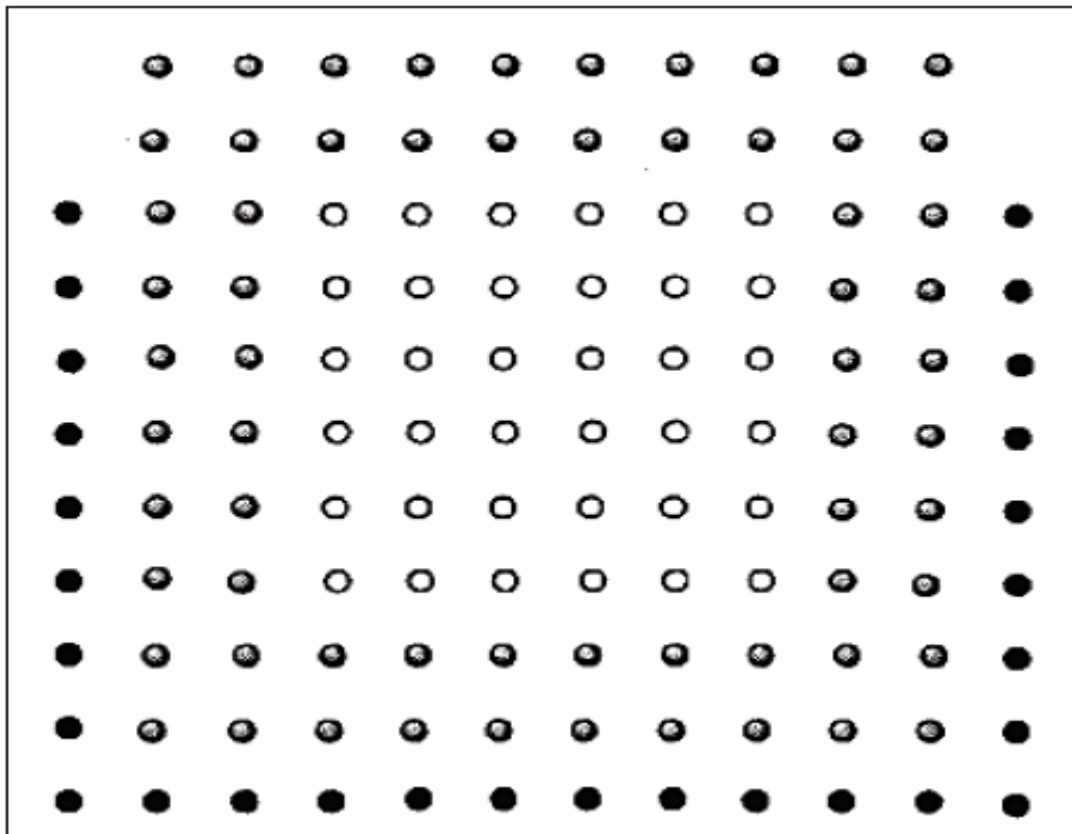
Στη διάρκεια εξέλιξης της Μοριακής Δυναμικής, εξελίχθηκαν διάφοροι αλγόριθμοι θερμοστάτησης, π.χ. Berensen, επανακαθορισμός ταχύτητας (Velocity rescaling), Nosé-Hoover. Οι διαφορές στους αλγορίθμους θερμοστάτησης, έγκειται στον τρόπο με τον οποίο προσαρμόζουν την θερμοκρασία στην επιθυμητή.

Σύμφωνα με την μέθοδο θερμοστάτησης Nosé-Hoover, στο σύστημα εισάγεται ένα «υπερ-μόριο». Το μόριο αυτό αλληλεπιδρά με τα υπόλοιπα του συστήματος επηρεάζοντας την κινητική τους ενέργεια. Ο τρόπος με τον οποίο την επηρεάζει, οδηγεί σε κινητική ενέργεια που αντιστοιχεί στην επιθυμητή θερμοκρασία. Το παραπάνω, είναι ανάλογο με την βύθιση του συστήματος σε λουτρό, με σκοπό τη διατήρηση της θερμοκρασίας σταθερής. [35-36].

3.2.3 Συνοριακά Άτομα

Τα συνοριακά άτομα του εργαλείου και του τεμαχίου θεωρούνται ανεπηρέαστα από την κατεργασία κοπής, καθώς είναι μακριά από την διεπιφάνεια εργαλείου-τεμαχίου. Κατά συνέπεια, οι θέσεις των συνοριακών ατόμων δε θα μεταβληθούν η μια ως προς την άλλη κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής. Στην Εικόνα 3.4, η ακμή του εργαλείου (γεμάτοι κύκλοι) θεωρείται άκαμπτη (δηλ. δεν παραμορφώνεται) ή άπειρης σκληρότητας. Αυτή είναι γενικά η περίπτωση, όταν έναν μαλακό τεμάχιο, όπως η χαλκός ή το αλουμίνιο, κατεργάζεται από ένα σκληρό κοπτικό εργαλείο, όπως ένα εργαλείο από διαμάντι. Εναλλακτικά, οι κοπτικές ακμές αποτελούνται από Νευτώνια άτομα, και τα συνοριακά άτομα μετακινούνται προς τα εξωτερικά τοιχώματα του εργαλείου, όπου στην περίπτωση αυτή, το εργαλείο μπορεί να παραμορφωθεί κατά τον ίδιο τρόπο που παραμορφώνεται και το τεμάχιο κατεργασίας. Αυτή είναι η περίπτωση όπου ένα τεμάχιο από χαλκό κατεργάζεται από ένα σιδερένιο εργαλείο, ή όπου η διαφορική σκληρότητα των δύο υλικών είναι μικρή. Ομοίως, τα συνοριακά άτομα στην πλευρά μακριά από το εργαλείο στην Εικόνα 3.4 μπορούν να αναπαρασταθούν ως γεμάτοι κύκλοι, ή μπορούν να αντικατασταθούν (μαζί με άτομα θερμοστάτες, άτομα δηλαδή που απορροφούν θερμότητα ώστε να διατηρείται η θερμοκρασία του συνόλου σταθερή) από Νευτώνια άτομα (άδειοι κύκλοι), στην οποία περίπτωση το

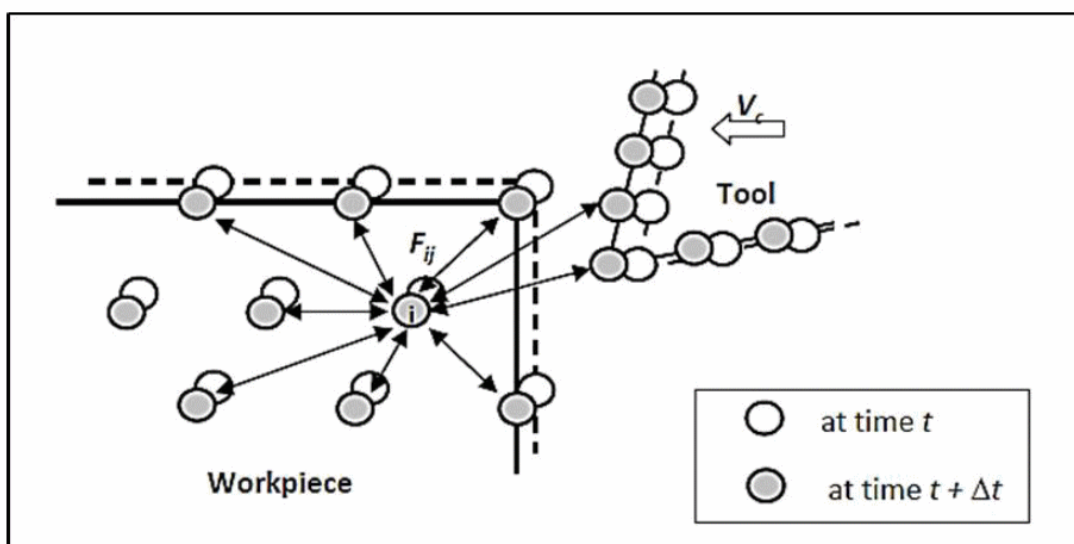
όριο δεν είναι πλέον άκαμπτο. Η πλαστική παραμόρφωση του εργαλείου, η φθορά του εργαλείου και οι χημικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ του εργαλείου και του τεμαχίου μπορούν να μελετηθούν μέσω αυτής της προσέγγισης. Καθώς η δημιουργία προεξοχών στις κατεργασίες συμβαίνει στην πλευρά εξόδου του τεμαχίου λόγω έλλειψης περιορισμού ακαμψίας, στην προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής τα συνοριακά άτομα (μαζί με τα άτομα θερμοστάτες) στη μακρινή πλευρά του τεμαχίου (ως προς την αρχική θέση του εργαλείου) απομακρύνονται, ώστε να επιτραπεί η παραμόρφωση των ατόμων χωρίς περιορισμό, όταν μοντελοποιείται η αστοχία εξόδου ή η δημιουργία προεξοχών. Τα άτομα που βρίσκονται σε δύο γειτονικά στρώματα ως προς τα οριακά άτομα, λειτουργούν ως θερμοστατικά άτομα. [2]



Εικόνα 3.1: Δισδιάστατη αναπαράσταση των διαφόρων ζωνών ενός τεμαχίου. Οι άδειοι κύκλοι, O, είναι στην πρωταρχική ζώνη, όπου η κίνηση ελέγχεται μόνο με επίλυση των κλασσικών εξισώσεων κίνησης. Οι σκιασμένοι γκρι κύκλοι, είναι στη ζώνη Q, όπου οι ταχύτητες ορίζονται ξανά μετά από χρονικό διάστημα Δt . Οι γεμάτοι κύκλοι, είναι στο όριο της ζώνης B. Είναι στάσιμοι και εξυπηρετούν την ίδια λειτουργία με το σφιγκτήρα του εργαλείου κατεργασίας. Διατηρούν το τεμάχιο σταθερό κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής, λείανσης ή οδόντωσης. [2]

3.3 Συναρτήσεις Δυναμικού Ενέργειας

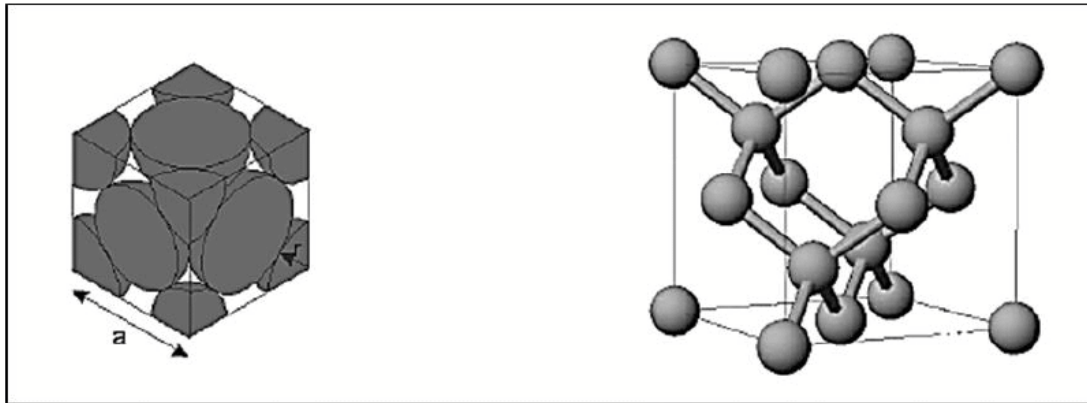
Όποτε αντιμετωπίζουμε ένα πρόβλημα σε ατομικό επίπεδο, όπως στην περίπτωση της προσομοίωσης της νανοκοπής μέσω Μοριακής Δυναμικής, είναι απαραίτητο να λάβουμε υπόψη τις δυνάμεις που υπάρχουν μεταξύ των ατόμων, διότι αυτές είναι κυρίως οι δυνάμεις που «αποφασίζουν» τι θα συμβεί σε οποιοδήποτε φυσικό φαινόμενο. Όπως φαίνεται και στην Εικόνα 3.2, σε κάθε χρονικό βήμα (Δt) κάθε άτομο αλλάζει θέση και αλληλεπιδρά με τα γειτονικά του άτομα με τρόπο, ο οποίος μπορεί να προσδιοριστεί από τη συνάρτηση διατομικών δυναμικών.



Εικόνα 3.2: Αλληλεπίδραση ατόμων στη νανοκοπή [34]

Παρόλο που η ακρίβεια του δυναμικού υπαγορεύει την ποιότητα των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης η συναρτησιακή του πολυπλοκότητα προσδιορίζει τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο, για ένα δεδομένο υπολογιστικό σύστημα. Οι διατομικές αυτές δυνάμεις μεταβάλλονται, ανάλογα με το αν το υλικό είναι μέταλλο (κυβικό εδροκεντρωμένο σύστημα fcc, κυβικό χωροκεντρωμένο σύστημα bcc, μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικό σύστημα hcp) ημιαγωγός, κεραμικό ή γυαλί. Μια έκφραση δυναμικού που αναπτύσσεται για μια κατηγορία υλικών, κατά πάσα πιθανότητα, δε θα μπορεί να εφαρμοσθεί ικανοποιητικά σε άλλες κατηγορίες υλικών, λόγω του ότι οι διατομικές δυνάμεις είναι διαφορετικές.

Κατά συνέπεια, είναι απαραίτητο να αναπτυχθεί μια έκφραση δυναμικού για κάθε κατηγορία υλικών.



Εικόνα 3.3: (a)κυβικόεδροκεντρωμένο σύστημα fcc (b) μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικό σύστημα hcp[19]

Δυστυχώς, η ανάπτυξη μιας έκφρασης δυναμικού δεν είναι απλή, και απαιτεί σημαντικό χρόνο και εμπειρία. Ευτυχώς, οι εκφράσεις δυναμικού έχουν αναπτυχθεί για ένα εύρος υλικών και η έρευνα βρίσκεται σε εξέλιξη για άλλα υλικά. Για παράδειγμα, τα δυναμικά Morse και Lennard- Jones εφαρμόστηκαν αρχικά σε μέταλλα με κυβική δομή. Η έκφραση δυναμικού πολλών σωματιδίων (Embedded Atom Method – EAM) αναπτύχθηκε ως βελτίωση για ένα μεγάλο εύρος υλικών. Ομοίως, τα δυναμικά Brenner και Tersoff αναπτύχθηκαν για υλικά με ομοιοπολικούς δεσμούς, όπως το πυρίτιο, το γερμάνιο, ακόμα και το διαμάντι. Το δυναμικό Born- Meyer αναπτύχθηκε ειδικά για κάποια κεραμικά. Πρέπει όμως να σημειωθεί, ότι τα δυναμικά αυτά αφορούν σε υλικά μονής φάσης μονοκρυστάλλου, με ένα συγκεκριμένο είδος δεσμών. Για τα πολυκρυσταλλικά υλικά, τα κράματα μετάλλων και για υλικά που είναι μερικώς ιοντικά και μερικώς ομοιοπολικά, απαιτείται η δημιουργία νέων πολυπλοκότερων δυναμικών.

Πρέπει να τονισθεί, ότι η ακρίβεια των τροχιών των ατόμων, που θα προκύψει από την προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής, επηρεάζεται σημαντικά από την κατάλληλη επιλογή της έκφρασης δυναμικού. Ως εκ τούτου, η επιλογή μιας κατάλληλης έκφρασης δυναμικού είναι προϋπόθεση. Η ολική ενέργεια του συστήματος, είναι το άθροισμα των κινητικών και δυναμικών ενεργειών. Η κινητική ενέργεια είναι εύκολο να υπολογιστεί, αλλά ο υπολογισμός της δυναμικής ενέργειας είναι πιο

πολύπλοκος, αφού εξαρτάται από τις θέσεις όλων των αλληλεπιδρώντων ατόμων. Η δυναμική ενέργεια παίζει κεντρικό ρόλο στην προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής. Πρώτον, η δύναμη που δρα πάνω σε κάθε άτομο είναι ανάλογη της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης δυναμικού. Δεύτερον, η ολική ενέργεια πρέπει να παρακολουθείται προσεκτικά σε μια προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής.

Υπάρχουν δύο προσεγγίσεις για τον προσδιορισμό των διατομικών δυναμικών. Η πρώτη μέθοδος είναι μια *abinitio* μέθοδος, ενώ η δεύτερη χρησιμοποιεί βασικά εμπειρικά δυναμικά. Στην *abinitio* μέθοδο, οι παράμετροι της συνάρτησης δυναμικού μπορούν να προσδιοριστούν, θεωρητικά, επιλύοντας την κυματική εξίσωση του Schrödinger. Όμως, στην πράξη είναι δύσκολο να βρεθούν οι διατομικές δυνάμεις με αυτή τη μέθοδο, με εξαίρεση ορισμένα πολύ απλά συστήματα.

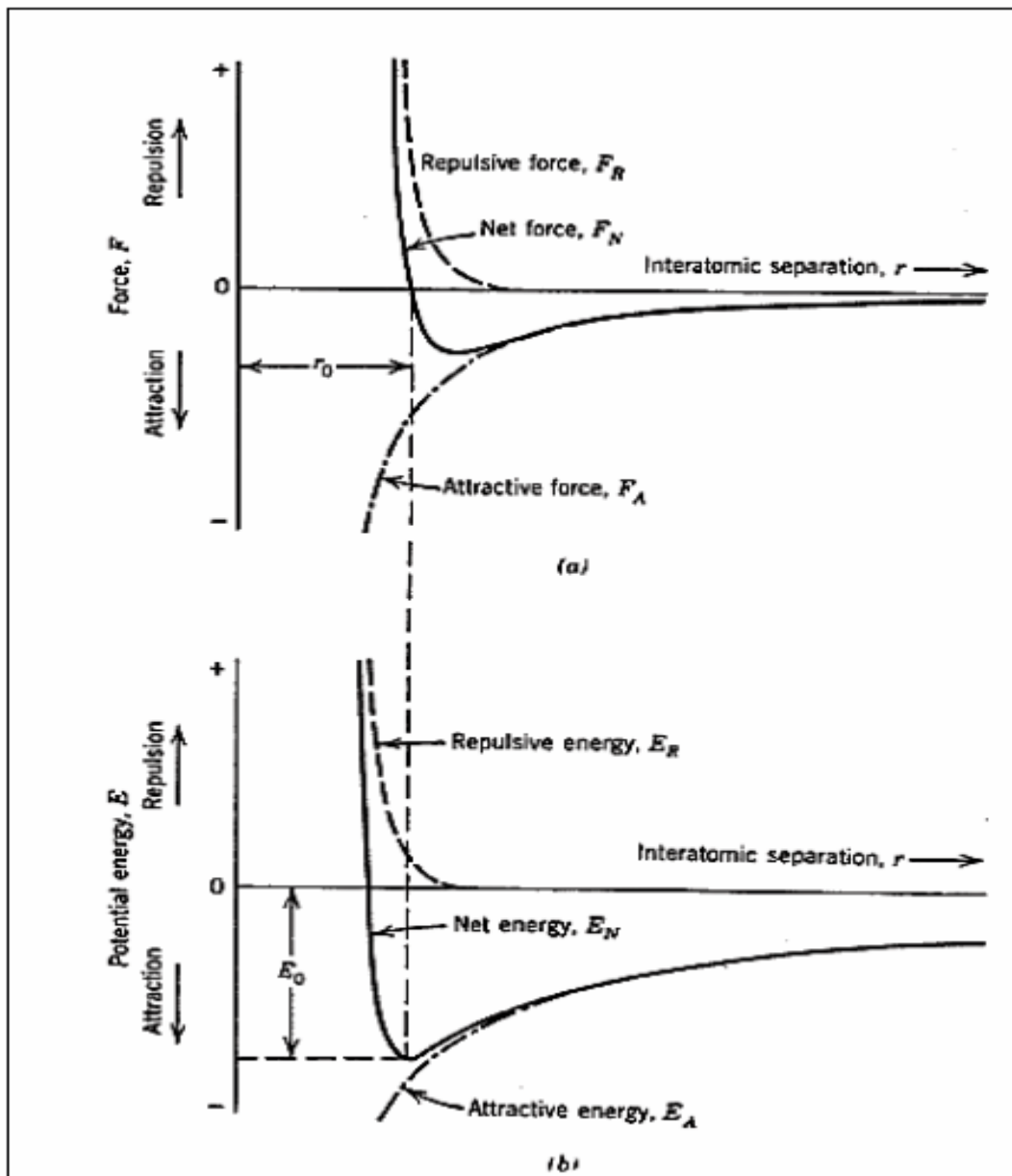
Πρέπει να τονισθεί ότι ο όρος εμπειρικός μπορεί να είναι παραπλανητικός ή υπεραπλουστευτικός. Στην πραγματικότητα, τα δυναμικά αυτά παρουσιάζουν μια πιο ρεαλιστική άποψη των ατομικών αλληλεπιδράσεων, σε σύγκριση με τα δυναμικά που προκύπτουν από καθαρά θεωρητικές προσεγγίσεις. Τα εμπειρικά δυναμικά βασίζονται σε απλές μαθηματικές εκφράσεις για τις ανά ζεύγη αλληλεπιδράσεις μεταξύ δύο ατόμων ή ιόντων, και περιέχουν μία ή περισσότερες παραμέτρους προσαρμοσμένες στα πειραματικά δεδομένα. Η εγκυρότητα της συνάρτησης καθώς και η σταθερότητα του κρυστάλλου για ένα δεδομένο υλικό, ελέγχονται για διάφορες ιδιότητες, όπως είναι η ενέργεια συνοχής, η θερμοκρασία Debye, η σταθερά πλέγματος, η συμπιεστότητα και οι ελαστικές σταθερές, καθώς και η εξίσωση κατάστασης. Κατά συνέπεια, τα δυναμικά αυτά μπορούν να θεωρηθούν αξιόπιστα για απλά μέταλλα κυβικής δομής.

Σε μεγαλύτερα συστήματα, χρησιμοποιούνται εμπειρικές συναρτήσεις δυναμικού, οι οποίες λαμβάνουν υπόψη παράγοντες όπως την έκταση του ομοιοπολικού δεσμού, τη μεταβολή της γωνίας του δεσμού λόγω κάμψης, στρέψης ή αλληλεπιδράσεων van der Waals και Coulomb. Αυτή είναι η δεύτερη και πιο συνήθης μέθοδος, όπου οι παράμετροι προσδιορίζονται βάσει των φυσικών ιδιοτήτων κάθε υλικού. Οι παράμετροι μπορούν να ληφθούν είτε από πειραματικές μελέτες, είτε από υπολογισμούς κβαντικής μηχανικής. Η διατομική δυναμική ενέργεια συνήθως λαμβάνεται ως το άθροισμα των (εμπειρικών) δυναμικών των n σωμάτων, το οποίο εξαρτάται μόνο από την απόσταση μεταξύ των ατόμων. Τα δυναμικά αυτά

κατατάσσονται περαιτέρω, σε δυναμικά δύο, τριών ή περισσότερων σωμάτων, ανάλογα με την ομάδα των ατόμων από τα οποία εξαρτώνται οι όροι του δυναμικού. Στη συνέχεια θα δοθούν οι εκφράσεις μερικών εμπειρικών δυναμικών, που χρησιμοποιούνται ευρέως.

Στην Εικόνα 3-1 φαίνεται η εξάρτηση των ελκτικών, απωστικών και συνισταμένων δυνάμεων (a) και δυναμικών ενεργειών (b), ως συνάρτηση της διατομικής απόστασης, r , δύο απομονωμένων ατόμων. Η ελκτική δύναμη συνδέει τα άτομα μεταξύ τους ενώ η απωστική τα εμποδίζει από το να καταστραφούν λόγω σύγκρουσης. Το μέγεθος των δύο δυνάμεων αυξάνεται, καθώς η απόσταση μεταξύ των ατόμων μειώνεται, και η απωστική δύναμη αυξάνεται γρηγορότερα σε σχέση με την ελκτική. Η καμπυλότητα της έκφρασης ενέργειας δυναμικού προσδιορίζεται κυρίως από την απωστική δύναμη, η οποία υπαγορεύει την ελαστική συμπεριφορά του στερεού.

Το μήκος του δεσμού r_0 , είναι η απόσταση των κέντρων των ατόμων. Οι ισχυροί δεσμοί φέρνουν τα άτομα σε μικρότερη απόσταση, και έτσι το μήκος του δεσμού είναι μικρότερο σε σύγκριση με τους ασθενείς δεσμούς. Στο σημείο r_0 , οι ελκτικές και οι απωστικές δυνάμεις εξισορροπούνται και η συνισταμένη δύναμη είναι μηδενική. Η κατάσταση αυτή αντιστοιχεί σε σταθερή ισορροπία ελάχιστης ενέργειας δυναμικού, το μέγεθος της οποίας είναι η ενέργεια του δεσμού. Οι ιδιότητες συνοχής ενός στερεού, η συμπεριφορά τήξης και ατμοποίησης προσδιορίζονται από το μέγεθος της μέγιστης ενέργειας δεσμού, η οποία καθορίζεται από την ελκτική συνιστώσα της διατομικής δύναμης. Όσο μεγαλύτερη είναι η ενέργεια δεσμού, τόσο μεγαλύτερη είναι η θερμοκρασία τήξης και το μέτρο ελαστικότητας του Young, και τόσο μικρότερος ο συντελεστής θερμικής διαστολής. Η κλίση της καμπύλης της δύναμης στο σημείο r_0 , δίνει το μέτρο ελαστικότητας. Οι μεγάλες «βυθίσεις» του δυναμικού είναι πιο συμμετρικές γύρω από τη θέση ισορροπίας r_0 , σε σχέση με τις πιο «ρηχές» βυθίσεις.



Εικόνα 3.4: Μεταβολή των ελκτικών, απωστικών και συνισταμένων δυνάμεων (a) και των ελκτικών, απωστικών και συνισταμένων δυναμικών ενέργειας (b), ως συνάρτηση της διατομικής απόστασης r , μεταξύ δύο απομονωμένων ατόμων[2]

Οι εκφράσεις ενέργειας δυναμικού γενικά αφορούν σε ένα μέτριο εύρος απόστασης ζευγών σε εξαιρετικά μικρά όμως επίπεδα ενέργειας. Αγνοώντας τις διατομικές επιδράσεις κάτω από ένα σημείο αποκοπής, μπορεί να επιτευχθεί μια σημαντική μείωση στο υπολογιστικό χρόνο με ασήμαντη απώλεια ακρίβειας. Η αποκοπή του δυναμικού καταλήγει επίσης και σε παρόμοια αποκοπή στην καμπύλη της δύναμης. Η απόσταση αποκοπής μπορεί να επιλεγεί σε οποιοδήποτε σημείο, αλλά γενικά

επιλέγεται σε απόσταση τέτοια, όπου η τιμή της δυναμικής ενέργειας είναι 3 ως 5% της τιμής της δυναμικής ενέργειας ισορροπίας.

3.3.1 Δυναμικό Morse

Το δυναμικό Morse είναι μια συχνά χρησιμοποιούμενη έκφραση ενέργειας δυναμικού. Είναι ένα δυναμικό ζεύγους κατάλληλο για τη μοντελοποίηση μετάλλων κυβικής δομής. Το δυναμικό αυτό παράγει απωστικές δυνάμεις σε μικρά εύρη, ελκτικές σε μεσαία και εξασθενεί ομαλά στο μηδέν σε μεγάλα εύρη. Χρησιμοποιεί μια μορφή δυναμικού που περιέχει δύο εκθετικούς όρους αντί για ένα νόμο που εξαρτάται από την ισχύ. Η έκφραση του δυναμικού Morse δίνεται από τη σχέση

$$V_{ij} = D\{\exp[-2a(r_{ij} - r_e)] - 2\exp[-a(r_{ij} - r_e)]\}$$

όπου

r_e και r_{ij} = απόσταση ισορροπίας και στιγμιαία απόσταση μεταξύ των ατόμων i και j , αντίστοιχα. D και a = σταθερές που προσδιορίζονται βάσει των φυσικών ιδιοτήτων του υλικού. Για παράδειγμα, τα r_e , D , a λαμβάνονται από την κοντινότερη απόσταση μεταξύ των ατόμων (αποστάσεις ισορροπίας πλέγματος), τη θερμοκρασία Debye και την ενέργεια εξάχνωσης. Η εγκυρότητα της συνάρτησης καθώς και η σταθερότητα του κρυστάλλου για ένα δοσμένο υλικό ελέγχεται ως προς διάφορες ιδιότητες, οι οποίες περιλαμβάνουν την ενέργεια συνοχής, τη σταθερά πλέγματος, τη σταθερά συμπιεστότητας και ελαστικότητας καθώς και την εξίσωση φάσης και την σταθερότητα του κρυστάλλου.

Οι **Girifalco & Weizer** [45] υπολόγισαν τις παραμέτρους Morse με χρήση πειραματικών τιμών για την ενέργεια ατμοποίησης, τις σταθερές πλέγματος και τη συμπιεστότητα. Η εξίσωση φάσης, οι ελαστικές σταθερές και οι συνθήκες σταθερότητας υπολογίστηκαν με χρήση των παραμέτρων Morse για μέταλλα με κυβική δομή, και βρέθηκε ότι τα αποτελέσματα συμφωνούσαν με τα πειραματικά.

3.3.2 Δυναμικό Lennard-Jones

Ένα ακόμα απλό δυναμικό ζεύγους για μεταλλικά υλικά, που περιγράφονται βάσει του μοντέλου των σκληρών σφαιρών (hard-sphere model), όπως και στο δυναμικό Morse, και χρησιμοποιείται ευρέως είναι το δυναμικό Lennard-Jones ή δυναμικό «6-12». Το δυναμικό Lennard-Jones δίνεται από τη σχέση

$$V_{ij} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} \right]$$

όπου οι σταθερές σ και ε προσδιορίζονται από τις φυσικές ιδιότητες του υλικού. Βάσει σύμβασης, οι απωστικές δυνάμεις θεωρούνται θετικές και οι ελκτικές αρνητικές. [34]

3.3.3 Δυναμικό Born-Meyer

Ένα πλήθος δυναμικών δημιουργήθηκαν ώστε να λαμβάνεται υπόψη μόνο η απωστική αλληλεπίδραση, σε μικρές αποστάσεις. Η ανάπτυξη του δυναμικού αυτού πραγματοποιήθηκε για δύο λόγους. Πρώτον, μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε περιπτώσεις όπου η ελκτική συνιστώσα παίζει δευτερεύοντα ή ασήμαντο ρόλο. Δεύτερον, η ελκτική συνιστώσα σε μεγάλη απόσταση, μπορεί να περιγραφεί από μια άλλη κατάλληλη συνάρτηση. Το δυναμικό Born-Meyer αναπαριστά την απώθηση των ιοντικών κρυστάλλων που βρίσκονται κοντά στο κέλυφος, και δίνεται από τη συνάρτηση:

$$V_{ij} = A \left\{ \exp \left[-2a (r_{ij} - r_o) \right] \right\}$$

όπου τα A και r_o είναι σταθερές που προσδιορίζονται από τις φυσικές ιδιότητες του υλικού. Η απωστική δύναμη εξασθενεί ομαλά καθώς η απόσταση r_{ij} αυξάνεται. Το δυναμικό αυτό εφαρμόζεται ειδικά στα κεραμικά υλικά. [41,95]

3.3.4 Δυναμικό Πολλαπλών Ατόμων (Embedded-Atom potential)

Τα δυναμικά πολλών ατόμων για μέταλλα με κυβική δομή αναπτύχθηκαν πρόσφατα, για να περιγράψουν το μεταλλικό δεσμικό χαρακτήρα με

μεγαλύτερη ακρίβεια σε σχέση με αυτή που είναι εφικτή με το δυναμικό δύο

ατόμων. Το δυναμικό αυτό αποτελεί μια επέκταση του δυναμικού δύο ατόμων για τα μέταλλα και αναμένεται να λάβει υπόψη του την επίδραση των ελεύθερων ηλεκτρονίων που περιβάλλουν τα άτομα. Είναι μια πιο ρεαλιστική συνάρτηση δυναμικού, που μπορεί να μοντελοποιήσει με ακρίβεια τη μεταβολή των ιδιοτήτων του μετάλλου κοντά σε μια ελεύθερη επιφάνεια. Η ολική ενέργεια του συστήματος αναπαρίσταται από μια έκφραση της μορφής

$$E = \frac{1}{2} \left[\sum \phi_{ij} (r_{ij}) \right] + \sum \phi_j \left[\sum \phi_j (r_{ij}) \right]$$

όπου τα i και j αναφέρονται στα άτομα, r_{ij} είναι η διατομική απόσταση μεταξύ των ατόμων και τα ϕ_{ij} και ϕ_j εξαρτώνται από τα εμπλεκόμενα είδη, καθώς και από τα ορίσματά τους. Ο πρώτος όρος χαρακτηρίζει το συμβατικό δυναμικό ζεύγους, και ο δεύτερος όρος είναι η ενέργεια που απαιτείται, ώστε να ενσωματωθεί ένα άτομο i σε ένα νέφος ηλεκτρονίων. Έτσι, στο δυναμικό αυτό, το δυναμικό ζεύγους αυξάνεται κατά ένα πρόσθετο άθροισμα ζευγών. Κατά συνέπεια, η μέθοδος αυτή, μπορεί να ενσωματώσει την εξάρτηση των αλληλεπιδράσεων από τις συντεταγμένες. Ένας σημαντικός περιορισμός είναι το εύρος των μεταλλικών συστημάτων, στα οποία η μέθοδος αυτή είναι ακριβής. Σύμφωνα με το τροποποιημένο μοντέλο δυναμικού πολλών ατόμων, υπάρχουν έντεκα παράμετροι που το επηρεάζουν, από τις οποίες οι τρεις μπορούν να ορισθούν στις ονομαστικές τους τιμές. Κάθε μία από τις εναπομείνουσες οκτώ παραμέτρους συνδέεται άμεσα με μια φυσική ποσότητα, δηλαδή, την ενέργεια εξάχνωσης, τη σταθερά του πλέγματος, το μέτρο διόγκωσης, δύο διατμητικές σταθερές, δύο δομικές ενεργειακές διαφορές και την ενέργεια σχηματισμού κενού χώρου. [34]

3.3.5 Δυναμικό Bolding-Anderson

Για την περίπτωση των ημιαγωγικών υλικών, όπως είναι το πυρίτιο, το γερμάνιο και το διαμάντι, τα οποία είναι μέταλλα ομοιοπολικών δεσμών, τα δυναμικά δύο σωμάτων Morse ή Lennard-Jones δεν είναι αποδεκτά. Για τη

μελέτη της κοπής σε πυρίτιο ή διαμάντι, είναι προτιμότερο να χρησιμοποιηθεί το δυναμικό Bolding-Anderson, το οποίο είναι μια σύνθετη συνάρτηση πολλών σωμάτων, η οποία μπορεί να αναπαράξει όλα τα απαραίτητα χαρακτηριστικά των συστημάτων της πυριτίου ή του διαμαντιού. Τα δυναμικά πολλών σωμάτων επινοήθηκαν, για να περιγράψουν τον ομοιοπολικό δεσμό με χαρακτηριστικά κατεύθυνσης.

Καθώς τα άτομα του άνθρακα στο πλέγμα του διαμαντιού έχουν μεταξύ τους ομοιοπολικούς δεσμούς και εξαρτώνται από την τύπο υβριδισμού, η φύση του δεσμού είναι πολύ σημαντική. Για το διαμάντι, το εμπειρικό δυναμικό που αναπτύχθηκε είναι το εξής:

$$V_{ij} = V_R(r_{ij}) - \bar{B}_{ij} V_A(r_{ij})$$

Όπου $V_R(\mathbf{r}_{ij})$ και $V_A(\mathbf{r}_{ij})$ είναι τα δυναμικά μεταξύ των ατόμων i και j λόγω των απωστικών και των ελκτικών δυνάμεων. Το μέγεθος \bar{B}_{ij} λαμβάνει υπόψη του την κατεύθυνση και το μήκος του δεσμού.

Συνοψίζοντας, μπορεί να τονισθεί ότι η επιλογή μιας έκφρασης δυναμικού εξαρτάται από το υλικό, καθώς και από τον τύπο της εφαρμογής. Κατά συνέπεια, η έκφραση του δυναμικού ενέργειας παίζει πολύ σημαντικό ρόλο σε μια προσομοίωση, καθώς υπαγορεύει το μέγεθος και την κατεύθυνση των δυνάμεων που ασκούνται σε ένα άτομο κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Το πιο κρίσιμο και δύσκολο μέρος μιας προσομοίωσης μοριακής δυναμικής είναι η ανάπτυξη μιας επιφάνειας δυναμικού ενέργειας, η οποία να είναι ικανοποιητικά κοντά στο δυναμικό των αντίστοιχων πειραματικών συστημάτων που εξετάζονται, ώστε τα αποτελέσματα των δυναμικών υπολογισμών να έχουν νόημα. [34]

3.4 Υπολογισμοί Τροχιών με χρήση Αριθμητικής Ολοκλήρωσης

Για τον υπολογισμό οποιασδήποτε ιδιότητας του μελετώμενου συστήματος, αναλύεται μια τροχιά. Η τροχιά είναι ένα σύνολο από χρονικά στιγμιότυπα του συστήματος, στο καθένα από τα οποία αποθηκεύονται οι

συντεταγμένες (ή ακόμα και οι ταχύτητες ή και οι δυνάμεις) για κάθε άτομο. Οποιοσδήποτε υπολογισμός που βασίζεται στην τροχιά, είναι ουσιαστικά στατιστικής φύσης, μιας και λαμβάνονται χρονικές μέσες τιμές από τα στιγμιότυπα που περιέχει η τροχιά. Η αρχική ταχύτητα καθενός από τα άτομα επιλέγεται στατιστικά, ώστε να ακολουθεί την κατανομή Maxwell-Boltzmann, βάσει της αρχικής θερμοκρασίας. Ο υπολογισμός της τροχιάς, απαιτεί την αριθμητική ολοκλήρωση των διαφορικών εξισώσεων της κίνησης από την αρχική κατάσταση, η οποία στην περίπτωση μιας κατεργασίας είναι η κατάσταση όπου το κοπτικό εργαλείο πλησιάζει το τεμάχιο, αλλά δεν το έχει ακουμπήσει ακόμα, μέχρι μια τελική κατάσταση, η οποία μπορεί να θεωρηθεί, η στιγμή που ένα στρώμα υλικού έχει αφαιρεθεί από το τεμάχιο.

Υπάρχει μια πληθώρα διαθέσιμων μεθόδων, που μπορούν να πραγματοποιήσουν την ολοκλήρωση αυτή, από τις οποίες η Runge-Kutta τέταρτης τάξης, είναι η πιο χρησιμοποιούμενη, διότι παρουσιάζει αρκετά πλεονεκτήματα. Πρώτον, είναι αυτοεκκινούμενη και έτσι δεν είναι απαραίτητο να είναι γνωστές οι τιμές του Y , το οποίο είναι ένα διάνυσμα στήλη, του οποίου τα στοιχεία είναι οι συντεταγμένες και η συνολική ορμή τους σε μια χρονική στιγμή πριν από την t_0 . Δεύτερον, το τοπικό σφάλμα σε ένα γνωστό βήμα ολοκλήρωσης είναι της τάξης του h^5 , (όπου h είναι το χρονικό βήμα ολοκλήρωσης). Επομένως η μέθοδος αυτή κατά συνέπεια παρέχει καλή ακρίβεια. Τρίτον, η μέθοδος είναι σταθερή και μπορεί εύκολα να προγραμματιστεί. Δύο μειονεκτήματα που σχετίζονται με αυτή τη μέθοδο είναι: (α) δεν παρέχει καμιά εκτίμηση για την ακρίβεια με την οποία έχει γίνει η ολοκλήρωση και (β) 24 N παράγωγοι πρέπει να υπολογισθούν σε κάθε βήμα ολοκλήρωσης. Το πρώτο μειονέκτημα δεν είναι και τόσο σημαντικό, καθώς η ακρίβεια μπορεί να εκτιμηθεί με την παρακολούθηση της ενέργειας και άλλων σταθερών της κίνησης, κατά τη διάρκεια της ολοκλήρωσης. Η εμπειρία δείχνει ότι αν οι ποσότητες αυτές παραμένουν σταθερές σε τέσσερα ή πέντε σημαντικά ψηφία, η ακρίβεια είναι συνήθως επαρκής για τις περισσότερες εφαρμογές. Επίσης, μπορεί να εφαρμοσθεί μια διαδικασία μείωσης του εύρους του βήματος. Στη μέθοδο αυτή, η ευαισθησία των τελικών αποτελεσμάτων ως προς το h , λαμβάνεται με διαδοχικές ολοκληρώσεις με συνεχώς μικρότερες τιμές του h . Με εμπειρικό προσδιορισμό της μεγαλύτερης τιμής του h , για την οποία τα τελικά αποτελέσματα είναι ανεξάρτητα του h , μπορεί να ληφθεί το

κατάλληλο μέγεθος βήματος. Τελικά, η ακρίβεια της ολοκλήρωσης μπορεί να ελεγχθεί με πίσω ολοκλήρωση της τροχιάς. [33]

3.4.1 Μέθοδος Βατραχοδρασκελισμών (Leapfrog-Type Method)

Η μέθοδος αυτή βασίζεται στο ανάπτυγμα Taylor της θέσης $x(t)$ συναρτήσει του χρόνου t , το οποίο φαίνεται στη συνέχεια:

$$x(t+h) = x(t) + h\dot{x}(t) + \frac{h^2}{2}\ddot{x}(t) + O(h^3)$$

$$x(t-h) = x(t) - h\dot{x}(t) + \frac{h^2}{2}\ddot{x}(t) + O(h^3)$$

όπου:

$$h = \Delta t$$

είναι το χρονικό βήμα.

Στη μέθοδο αυτή, το ανάπτυγμα Taylor μπορεί να γίνει ως εξής:

$$x(t+h) = x(t) + h \left(\dot{x}(t) + \frac{h}{2} \ddot{x}(t) \right) + O(h^3) = x(t) + h\dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right)$$

$$x(t-h) = x(t) - h \left(\dot{x}(t) - \frac{h}{2} \ddot{x}(t) \right) + O(h^3) = x(t) - h\dot{x}\left(t - \frac{h}{2}\right)$$

Αφαιρώντας τις δύο τελευταίες εξισώσεις, έχουμε:

$$\dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) = \dot{x}\left(t - \frac{h}{2}\right) + h\ddot{x}(t)$$

$$\dot{x}(t+h) = \dot{x}(t) + h\ddot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right)$$

που αποτελεί το αναδρομικό σχήμα της μεθόδου Leapfrog για τον υπολογισμό των θέσεων και των ταχυτήτων των ατόμων.

Ο όρος βατραχοδρασκελισμός προέρχεται από το γεγονός ότι ο υπολογισμός των θέσεων και των ταχυτήτων γίνεται για διαφορετικές χρονικές στιγμές, όπως φαίνεται και από τις προηγούμενες σχέσεις. Βέβαια κάτι τέτοιο δεν αποτελεί πρόβλημα. Για να υπολογιστεί η ταχύτητα τη χρονική στιγμή t , μπορεί να χρησιμοποιηθεί μία από τις παρακάτω σχέσεις:

$$\dot{x}(t) = \dot{x}\left(t - \frac{h}{2}\right) + \frac{h}{2}\ddot{x}(t)$$

$$\dot{x}(t) = \dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) - \frac{h}{2}\ddot{x}(t)$$

Η μέθοδος των βατραχοδρασκελισμών μπορεί να μετασχηματιστεί σε έναν εναλλακτικό, αλγεβρικά ισοδύναμο τρόπο, που επιτρέπει να γίνεται ο υπολογισμός των θέσεων και των ταχυτήτων την ίδια χρονική στιγμή, προκειμένου να αποφεύγεται η αποθήκευση των θέσεων και των ταχυτήτων σε διαφορετικές χρονικές στιγμές και ο μετέπειτα υπολογισμός των ταχυτήτων για τη χρονική στιγμή t , από τις τελευταίες εξισώσεις [33]. Για να γίνει αυτό, οι υπολογισμοί χωρίζονται σε δύο μέρη:

Πριν υπολογιστούν οι τιμές των επιταχύνσεων, γίνεται υπολογισμός των ταχυτήτων για μισό χρονικό βήμα, χρησιμοποιώντας τις παλιές τιμές των επιταχύνσεων, με τη σχέση:

$$\dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) = \dot{x}(t) + \frac{h}{2}\ddot{x}(t)$$

Στη συνέχεια, υπολογίζονται οι συντεταγμένες για ένα ολόκληρο χρονικό βήμα, χρησιμοποιώντας τις ενδιάμεσες τιμές των ταχυτήτων που υπολογίστηκαν από την προηγούμενη σχέση:

$$\dot{x}(t+h) = \dot{x}(t) + h\ddot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right)$$

Στο επόμενο βήμα, χρησιμοποιούνται οι καινούριες συντεταγμένες για να υπολογιστούν οι καινούριες τιμές των επιταχύνσεων και στη συνέχεια υπολογίζονται οι ταχύτητες προσθέτοντας και το άλλο μισό χρονικό βήμα, σύμφωνα με τη σχέση:

$$\dot{x}(t+h) = \dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) + \frac{h}{2} \ddot{x}(t+h)$$

3.4.2 Μέθοδος Verlet

Ο αλγόριθμος ολοκλήρωσης Verlet, που επινοήθηκε από τον Louis Verlet, είναι αλγεβρικά ισοδύναμος με τον αλγόριθμο των βατραχοδρασκεισμών. Βασίζεται και αυτός στο ανάπτυγμα κατά Taylor:

$$x(t+h) = x(t) + h\dot{x}(t) + \frac{h^2}{2} \ddot{x}(t) + O(h^3)$$

$$x(t-h) = x(t) - h\dot{x}(t) + \frac{h^2}{2} \ddot{x}(t) + O(h^3)$$

και αν προστεθούν τα δύο παραπάνω αναπτύγματα προκύπτει

$$x(t+h) = 2x(t) - x(t-h) + h^2 \ddot{x}(t) + O(h^4)$$

Οι θέσεις για την παρούσα χρονική στιγμή και την προηγούμενή της, δηλαδή οι $x(t)$ και $x(t-h)$, είναι γνωστές και επομένως μπορούν να υπολογιστούν και οι επιταχύνσεις των ατόμων, ως συνάρτηση των συντεταγμένων τους.

Ο υπολογισμός της ταχύτητας δεν εμπλέκεται στην επίλυση και εάν θέλουμε να υπολογίσουμε τις τιμές της, χρησιμοποιούμε τη σχέση:

$$\dot{x}(t) = \frac{x(t+h) - x(t-h)}{2h} + O(h^2)$$

Για τη μέθοδο αυτή μπορούμε να παρατηρήσουμε δύο χαρακτηριστικά. Το πρώτο είναι ότι για τον υπολογισμό της μετατόπισης από τη δύναμη δεν απαιτείται ο υπολογισμός κάποιας ενδιάμεσης μεταβλητής. Αυτό είναι ένα πολύ σημαντικό πλεονέκτημα, καθώς με αυτό τον τρόπο επιτυγχάνεται μεγάλη ακρίβεια, αποκοπή όρων και συσσώρευση αριθμητικών σφαλμάτων που εξαλείφονται. Το δεύτερο χαρακτηριστικό που μπορούμε να

διακρίνουμε και το οποίο είναι άμεση συνέπεια από το πρώτο, είναι ότι με τη μέθοδο αυτή επιτυγχάνεται ακρίβεια $O(\Delta t^4)$ [33].

Για τις δύο παραπάνω μεθόδους μπορούμε να παρατηρήσουμε πως και οι δύο δίνουν ακρίβεια στον υπολογισμό των συντεταγμένων μέχρι και την τρίτη δύναμη του Δt . Στη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής μάς ενδιαφέρει συγκεκριμένες ποσότητες, όπως η ενέργεια, να διατηρούνται. Κάτι τέτοιο βέβαια είναι αδύνατο να επιτευχθεί απολύτως, λόγω των διαφόρων αριθμητικών σφαλμάτων που εμφανίζονται, και προτιμώνται γενικότερα μέθοδοι οι οποίες να δίνουν καλή ακρίβεια στη διατήρηση της ενέργειας.

Γενικά, οι μέθοδοι των βατραχοδρασκελισμών και του Verlet, που είναι χαμηλής τάξης μέθοδοι, δίνουν καλύτερα και ακριβέστερα αποτελέσματα ως προς τη διατήρηση της ενέργειας σε σχέση με μεθόδους υψηλότερης τάξης. Επιπλέον, απαιτούν ελάχιστη μνήμη και χαρακτηρίζονται από υψηλότερη ευστάθεια σε σχέση με την απλή ολοκλήρωση κατά Euler.

3.4.3 Μέθοδοι Πρόβλεψης-Διόρθωσης

Οι μέθοδοι πρόβλεψης – διόρθωσης (predictor – corrector (PC) methods) είναι μέθοδοι πολλαπλών τιμών, με την έννοια ότι χρησιμοποιούν πλήθος πληροφοριών που υπολογίζονται σε ένα ή περισσότερα προηγούμενα χρονικά βήματα. Ουσιαστικά, προηγούνται στην αριθμητική ολοκλήρωση, υπολογίζοντας αρχικά κάποια εκτίμηση του μεγέθους και βελτιώνοντας την τιμή αυτή, καθώς προχωράει ο υπολογισμός. Οι δύο πιο δημοφιλείς μορφές της μεθόδου διακρίνονται από το εάν χρησιμοποιούνται οι τιμές της επιτάχυνσης προηγούμενων χρονικών βημάτων (μέθοδος Adams πολλαπλών βημάτων), ή εάν χρησιμοποιούνται παράγωγοι της επιτάχυνσης της παρούσας χρονικής στιγμής (μέθοδος Nordsieck). Σε περιπτώσεις όπου η ακρίβεια είναι συγκεκριμένη ως προς δεδομένη ισχύ του βήματος ολοκλήρωσης Δt , οι δύο παραπάνω μορφές αποδεικνύεται ότι είναι αλγεβρικά ισοδύναμες.

Οι μέθοδοι είναι υψηλότερης τάξης από τη μέθοδο των βατραχοδρασκελισμών, αλλά συνεπάγονται συγκεκριμένη ποσότητα από επιπλέον υπολογισμούς και απαιτούν μεγαλύτερη μνήμη για τις επιπλέον μεταβλητές που σχετίζονται με κάθε άτομο. Εδώ θα αναφερθούμε μόνο

στις μεθόδους πολλαπλών βημάτων, όπως είναι η μέθοδος Adams, καθώς οι παράγωγοι της επιτάχυνσης απουσιάζουν, εφ' όσον δεν συμμετέχουν με φυσικό τρόπο στη δυναμική του Newton [33].

Στη μέθοδο Adams, στόχος είναι η επίλυση της δευτεροβάθμιας διαφορικής εξίσωσης:

$$\ddot{x} = f(x, \dot{x}, t)$$

Στη φάση πρόβλεψης (predictor step) για τη χρονική στιγμή $t + h$ γίνεται μια παρεκβολή των τιμών που υπολογίστηκαν σε προηγούμενα χρονικά βήματα $t, t-h, \dots$, με τον τύπο Adams – Bashforth

$$P(x) : x(t+h) = x(t) + h\dot{x}(t) + h^2 \sum_{i=1}^{k-1} (a_i f(t + (1-i)h))$$

Για δεδομένη τιμή του k , ο παραπάνω τύπος παρέχει ακριβή αποτελέσματα για όλα τα πολυώνυμα:

$$x(t) = t^q, \forall q \leq k$$

και στη γενική περίπτωση το τοπικό σφάλμα είναι $O(h^{k+1})$. Προκειμένου να ισχύει η προηγούμενη απαίτηση, πρέπει οι συντελεστές $\{a_i\}$ να ικανοποιούν το ακόλουθο σύστημα των $k - 1$ εξισώσεων:

$$\sum_{i=1}^{k-1} (1-i)^q a_i = \frac{1}{(q+1)(q+2)}, q = 0, \dots, k-2$$

Το παραπάνω αλλά και τα επακόλουθα συστήματα εξισώσεων εύκολα επιλύονται και δίνουν ρητές συναρτήσεις για τα a_i .

Παρόμοια συνάρτηση υπάρχει και για την ταχύτητα:

$$P(\dot{x}) : h\dot{x}(t+h) = x(t+h) - x(t) + h^2 \sum_{i=1}^{k-1} (a'_i f(t + (1-i)h))$$

με συντελεστές που να ικανοποιούν τις εξισώσεις:

$$\sum_{i=1}^{k-1} (1-i)^q a_i' = \frac{1}{(q+2)}$$

Αφού λοιπόν υπολογιστούν οι προβλέψεις για τη θέση και την ταχύτητα της χρονικής στιγμής $t + h$, στη συνέχεια χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της τιμής του $f(t + h)$. Οι διορθώσεις γίνονται με τη βοήθεια του τύπου Adams – Moulton:

$$C(x) : x(t+h) = x(t) + h\dot{x}(t) + h^2 \sum_{i=1}^{k-1} (\beta_i f(t+(2-i)h))$$

$$C(x) : h\dot{x}(t+h) = x(t+h) - x(t) + h^2 \sum_{i=1}^{k-1} (\beta_i' f(t+(2-i)h))$$

με τους συντελεστές να προκύπτουν από το ακόλουθο σύστημα:

$$\sum_{i=1}^{k-1} (2-i)^q \beta_i = \frac{1}{(q+1)(q+2)}$$

$$\sum_{i=1}^{k-1} (2-i)^q \beta_i' = \frac{1}{(q+2)}$$

Αυτό που μπορούμε να παρατηρήσουμε είναι ότι οι προβλέψεις δεν εμφανίζονται στις εξισώσεις διόρθωσης, πέρα από τη χρήση τους για τον υπολογισμό του f . Οι συντελεστές (α_i) που προκύπτουν από την επίλυση των εξισώσεων αυτών για $k = 4$ και για $k = 5$ παρουσιάζονται στον επόμενο πίνακα (Πίνακας 3.1):

$k = 4 (\times 1/24)$	1	2	3	
$P(x):$	19	-10	3	
$P(\dot{x}):$	27	-22	7	
$C(x):$	3	10	-1	
$C(\dot{x}):$	7	6	-1	
$k = 5 (\times 1/360)$	1	2	3	4
$P(x):$	323	-264	159	-38
$P(\dot{x}):$	502	-621	396	-97
$C(x):$	38	171	-36	7
$C(\dot{x}):$	97	114	-39	8

Πίνακας 3.1: Παράμετροι πρόβλεψης – διόρθωσης για δευτεροβάθμιες εξισώσεις[3]

Τα αποτελέσματα αυτά μπορούν εύκολα να ενσωματωθούν στη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής, με το πρώτο στάδιο της διαδικασίας να περιλαμβάνει την εφαρμογή του βήματος πρόβλεψης σε όλες τις μεταβλητές (θέσεις και ταχύτητες ατόμων), να ακολουθεί ο υπολογισμός των δυνάμεων βάση των υπολογισθέντων τιμών και στη συνέχεια το βήμα της διόρθωσης.

Παρ' όλο που τα περισσότερα δυναμικά προβλήματα που μελετώνται στη φάση αυτή μπορούν να εκφραστούν ως διαφορικές εξισώσεις δεύτερης τάξης, υπάρχουν περιπτώσεις κατά τις οποίες χρειάζονται διαφορικές εξισώσεις πρώτης τάξης. Παρόμοιες μέθοδοι πρόβλεψης – διόρθωσης λοιπόν είναι διαθέσιμες για την εξίσωση:

$$\dot{x} = f(x, t)$$

Οι τύποι πρόβλεψης – διόρθωσης στην περίπτωση αυτή είναι:

$$P(x): x(t+h) = x(t) + h \sum_{i=1}^k (a_i f(t+(1-i)h))$$

$$C(x): x(t+h) = x(t) + h \sum_{i=1}^k (\beta_i f(t+(2-i)h))$$

με συντελεστές που να ικανοποιούν τις σχέσεις:

$$\sum_{i=1}^k (1-i)^q a_i = \frac{1}{q+1}$$

$$\sum_{i=1}^k (1-i)^q \beta_i = \frac{1}{q+1}$$

Τα αποτελέσματα στην περίπτωση αυτή φαίνονται στον ακόλουθο πίνακα (Πίνακας 3.2):

$k = 3 (\times 1/12)$	1	2	3	
$P(x):$	23	-16	5	
$C(x):$	5	8	-1	
$k = 4 (\times 1/24)$	1	2	3	4
$P(x):$	55	-59	37	-9
$C(x):$	9	19	-5	1

Πίνακας 3.2: Παράμετροι πρόβλεψης – διόρθωσης για πρωτοβάθμιες εξισώσεις [3]

3.5 Συναρτήσεις Επανακαθορισμού Ταχυτήτων

Καθώς η πλαστική παραμόρφωση στη ζώνη διάτμησης και η τριβή στη διεπιφάνεια αποβλίπτου-εργαλείου μετατρέπονται σε θερμότητα, η θερμότητα αυτή πρέπει να αποβάλλεται διαρκώς. Στις πραγματικές κατεργασίες, μεγάλο μέρος της θερμότητας απομακρύνεται με το απόβλιπτο και το λιπαντικό, καθώς και από το εργαλείο και το κατεργαζόμενο υλικό. Η πιο αποτελεσματική μέθοδος προσομοίωσης αποβολής της παραγόμενης κατά την κατεργασία θερμότητας είναι η **χρήση των συναρτήσεων ορισμού θερμότητας**. Οι μέθοδοι αυτές προτάθηκαν από τους Agrawal *etal*[49] . Η διαδικασία αυτή επιτρέπει τις στατιστικές διακυμάνσεις γύρω από μια θερμοκρασία ισορροπίας.

Για να εφαρμοσθεί η μέθοδος αυτή, τα N άτομα του πλέγματος πρέπει να χωρισθούν σε τρεις ζώνες. Η πρωτεύουσα ζώνη (P- ζώνη) περιέχει τα νευτώνια άτομα που μας ενδιαφέρουν. Μια δευτερεύουσα ζώνη (Q- ζώνη) συνίσταται από όλα τα περιφερειακά άτομα του κρυστάλλου. Τα πιο εξωτερικά άτομα είναι στο όριο ή στη B- ζώνη. Στους υπολογισμούς Μοριακής Δυναμικής, οι κινήσεις των ατόμων της P- ζώνης προσδιορίζονται μόνο από τις δυνάμεις που παράγονται από την αλληλεπίδραση του δυναμικού και της διαδικασίας κοπής. Οι κινήσεις των ατόμων της Q- ζώνης τροποποιούνται λόγω του επανακαθορισμού ταχυτήτων ή των συναρτήσεων θερμοποίησης, που αφορούν κάθε άτομο της ζώνης. Η συνάρτηση θερμοποίησης για τη x συνιστώσα της ταχύτητας του i -οστού ατόμου του πλέγματος δίνεται από τη σχέση:

$$V_{x_i}^n = (1-w)^{1/2} V_{x_i}^o + w^{1/2} V_{x_i}^r(\xi, T)$$

Όπου

$V_{x_i}^n$ είναι η νέα x συνιστώσα της ταχύτητας για το άτομο την $t = t_n$

$V_{x_i}^o$ είναι η παλιά του ταχύτητα

$V_{x_i}^r(\xi, T)$ είναι η τυχαία ταχύτητα που επιλέγεται από την κατανομή Boltmann σε θερμοκρασία T από ένα τυχαίο πλήθος x .

W είναι μια παράμετρος που ελέγχει τη δύναμη του επανακαθορισμού

Ανάλογες εξισώσεις χρησιμοποιούνται και για τις y και z συνιστώσες της ταχύτητας. Αυτή η διαδικασία επανακαθορισμού εφαρμόζεται σε κάθε άτομο της Q- ζώνης σε ίσα δομημένα χρονικά διαστήματα Δt .

3.5.1 Συνάρτηση επιθυμητής θερμοκρασίας

Η θερμοκρασία του συστήματος εκφράζεται από το μέσο τετράγωνο των ταχυτήτων των N ατόμων και δίνεται από:

$$T = \frac{1}{N} \frac{m_i}{3k_B} \sum_{i=1}^N v_i^2 = \frac{1}{N} \frac{m_i}{3k_B} \sum_{i=1}^N (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)$$

Αν $|\mathbf{T}-\mathbf{T}_d| \leq 3$, τότε η συνθήκη ικανοποιείται, διαφορετικά απαιτείται ανάθεση νέων ταχυτήτων. \mathbf{T}_d είναι η επιθυμητή θερμοκρασία. Εάν η απόλυτη διαφορά μεταξύ της μετρούμενης θερμοκρασίας και αυτής που επιθυμείται δεν υπερβαίνει τους 3 K τότε η ακρίβεια θεωρείται ικανοποιητική. οπότε η προσομοίωση προχωρά. Σε αντίθετη περίπτωση αναθέτονται νέες ταχύτητες μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο. [52]

3.5.2 Επαναπροσδιορισμός ταχυτήτων

Στην περίπτωση που απαιτείται ανάθεση νέων ταχυτήτων, αυτό γίνεται ακολουθώντας τις παρακάτω εξισώσεις και επιστρέφονται για την επίλυση των εξισώσεων κίνησης με τον αλγόριθμο Verlet.

$$v_i = \sqrt{\frac{T_d}{T}} v_i \quad i = 1, \dots, N$$

$$\begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_i^{New} = \sqrt{\frac{T_d}{T}} \begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}_i \quad i = 1, \dots, N$$

Είναι σημαντικό να σημειώσουμε ότι μερικοί θεωρητικοί δε θεωρούν την προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής ως μια πειραματική τεχνική διότι δεν εκτελούνται καθόλου μετρήσεις σε πραγματικά συστήματα, δηλαδή οι

προσομοιώσεις της Μοριακής Δυναμικής είναι το αποτέλεσμα καθαρών υπολογισμών. Οι πειραματιστές θεωρούν ότι τα αποτελέσματα της προσομοίωσης, όπως τα πειράματα, χρησιμοποιούνται για να ελέγξουν τις θεωρίες και υπόκεινται σε προβλήματα αναπαραξιμότητας και στατιστικών σφαλμάτων. [52]

3.7 Μέθοδοι υπολογισμών αλληλεπιδράσεων

Ύστερα από τα βασικά ζητήματα της επιλογής των κατάλληλων δυναμικών ενέργειας και των κατάλληλων εξισώσεων για να περιγραφεί σωστά η δυναμική κατάσταση του συστήματος, σειρά έχει η επιλογή του κατάλληλου τρόπου υπολογισμού των αλληλεπιδράσεων ανάμεσα στα άτομα. Διακρίνουμε τρεις μεθόδους, οι οποίες περιγράφονται στη συνέχεια [96].

3.7.1 Όλαταζεύγη (all-pairsmethod)

Αποτελεί τη μέθοδο υπολογισμού των δυνάμεων αλληλεπίδρασης που χαρακτηρίζεται από τη μεγαλύτερη χρονικά και υπολογιστικά πολυπλοκότητα. Αυτό συμβαίνει διότι με τη μέθοδο αυτή υπολογίζονται οι δυνάμεις αλληλεπίδρασης ανάμεσα σε όλα τα ζεύγη ατόμων. Συγκεκριμένα, για κάθε ένα από τα N_m άτομα υπολογίζονται όλες οι $N_m - 1$ αλληλεπιδράσεις μεταξύ του συγκεκριμένου ατόμου και όλων των άλλων ατόμων.

Η υπολογιστική πολυπλοκότητα της μεθόδου αυτής είναι

$$N_m(N_m - 1) = \Theta(N_m^2)$$

Ακόμα και αν ληφθεί υπ' όψιν ο 3ος νόμος του Newton της δράσης - αντίδρασης και αποφευχθεί η επανάληψη του υπολογισμού των αλληλεπιδράσεων των ζευγών των ατόμων, η υπολογιστική πολυπλοκότητα γίνεται:

$$\frac{N_m(N_m - 1)}{2} = \Theta(N_m^2)$$

Ένας τρόπος για να μειωθεί ο υπολογιστικός φόρτος της παραπάνω μεθόδου είναι εισάγοντας μία συγκεκριμένη απόσταση αποκοπής r_c όπου μόνο για τιμές αποστάσεων των ατόμων κάτω από την τιμή αυτή, θα γίνεται υπολογισμός των μεταξύ τους δυνάμεων και αυτό διότι σε μεγαλύτερες αποστάσεις, οι αλληλεπιδράσεις τείνουν να εξασθενούν. Πάλι όμως και σε αυτή την περίπτωση απαιτείται υπολογισμός της απόστασης

$$d_{ij} = \|r_{ij}\|$$

για κάθε ζεύγος ατόμων i και j και έλεγχος της σχέσης

$$d_{ij} < r_c$$

Η μέθοδος αυτή γενικά αποφεύγεται λόγω της μεγάλης υπολογιστικής πολυπλοκότητας, καθώς όπως είδαμε απαιτούνται πολλές πράξεις. Για το λόγο αυτό είναι προτιμητέο να χρησιμοποιούνται μέθοδοι που απαιτούν πράξεις, οι οποίες προσεγγίζουν το κατώτερο δυνατό επίπεδο. Λόγω του ότι ο υπολογισμός των δυνάμεων γίνεται κάθε φορά αναγκαστικά για κάθε άτομο, καταλαβαίνουμε ότι η υπολογιστική πολυπλοκότητα και επομένως το κατώτατο όριο πράξεων δεν μπορεί να είναι κάτω από το $\Omega(N_m)$ [96].

3.7.2 Υποδιαίρεση κυττάρων (cell subdivision)

Με τη μέθοδο αυτή μειώνεται ο φόρτος υπολογισμού των δυνάμεων αλληλεπίδρασης μεταξύ των ατόμων. Στην περίπτωση αυτή εφαρμόζεται απόσταση αποκοπής r_c και επομένως δεν υπολογίζονται δυνάμεις για ζεύγη ατόμων που απέχουν μεταξύ τους απόσταση μεγαλύτερη από αυτήν.

Η περιοχή προσομοίωσης υποδιαιρείται σε κύτταρα. Κάθε τετραγωνικό ή κυβικό κύτταρο έχει διάσταση ακμής λίγο μεγαλύτερη από την απόσταση αποκοπής. Κάθε άτομο αντιστοιχίζεται στο κύτταρο στο οποίο βρίσκεται. Επομένως, η αλληλεπίδραση

υπολογίζεται μόνο για άτομα που βρίσκονται σε γειτονικά κύτταρα και τα οποία προφανώς απέχουν απόσταση μικρότερη από την απόσταση αποκοπής. Με τον τρόπο αυτό λοιπόν δεν γίνεται υπολογισμός δυνάμεων

σε ζεύγη ατόμων τα οποία απέχουν μεταξύ τους απόσταση μεγαλύτερη από την απόσταση αποκοπής r_c .

Λόγω συμμετρίας, είναι αρκετό να λαμβάνονται υπ' όψιν μόνο τα μισά γειτονικά κύτταρα, συμπεριλαμβανομένου και του κυττάρου στο οποίο βρίσκεται το υπό εξέταση άτομο. Η μέθοδος αυτή είναι χρήσιμη εφ' όσον η συνολική διάσταση της περιοχής προσομοίωσης είναι μεγαλύτερη από $4r_c$.

Με τη μέθοδο αυτή επιτυγχάνεται μείωση της υπολογιστικής χρονικά πολυπλοκότητας, η οποία όμως συνοδεύεται από μία αύξηση στην απαιτούμενη μνήμη. Βέβαια, η αύξηση αυτή, η οποία απαιτείται για τη συσχέτιση των ατόμων με τα αντίστοιχα κύτταρα, είναι γραμμική και επομένως συνολικά μειώνεται η υπολογιστική πολυπλοκότητα [96].

3.7.3 Κατάλογος γειτόνων (neighbor-list method)

Για να μπορέσουμε μέσω της προηγούμενης μεθόδου να μειώσουμε περαιτέρω την υπολογιστική πολυπλοκότητα, μπορούμε να κατασκευάσουμε μία λίστα ζευγών γειτόνων εντός της περιοχής

$$d_{ij} < r_c + \Delta r$$

Η μέθοδος αυτή βασίζεται στη σχετικά αργή μεταβολή του μικροσκοπικού περιβάλλοντος. Λόγω αυτής της σχετικά αργής μεταβολής, η λίστα παραμένει ακριβής για ένα συγκεκριμένο χρονικό διάστημα, το οποίο είναι περίπου 20 - 30 επαναλήψεις. Ο επιπλέον όρος Δr στην παραπάνω σχέση, που αφορά άτομα εκτός της απόστασης αποκοπής που δεν αλληλεπιδρούν, διασφαλίζει ότι δε θα εισέλθουν εντός εμβέλειας αλληλεπίδρασης άτομα που δεν περιλαμβάνονται στη λίστα μεταξύ των διαδοχικών ενημερώσεών της.

Οι λίστες ανανεώνονται κάθε φορά που ισχύει η συνθήκη:

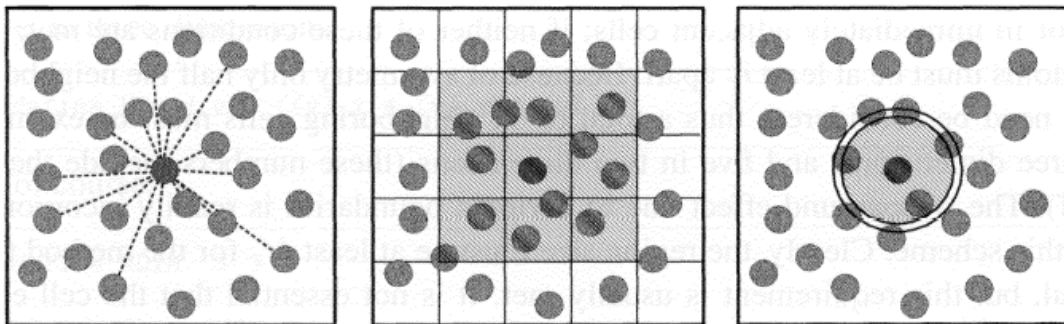
$$\sum_{steps} \left(\max_i \{ \|v_i\| \} \right) > \frac{\Delta r}{2\Delta t} \Leftrightarrow \sum_{steps} \left(\max_i \{ \|\Delta r_i\| \} \right) > \frac{1}{2} \Delta r$$

η οποία είναι συντηρητική διότι λαμβάνει υπ' όψιν συνεισφορές από διαφορετικά άτομα. Η σχέση αυτή διασφαλίζει ότι δεν προλαβαίνει να

εμφανιστεί και να εμπλακεί στον υπολογισμό κανένα ζεύγος αλληλεπίδρασης που να μην περιλαμβάνεται στον κατάλογο γειτόνων.

Όπως και στην προηγούμενη περίπτωση, παρ' όλο που με τη μέθοδο αυτή επιτυγχάνεται μείωση της υπολογιστικής πολυπλοκότητας, αυξάνεται η απαιτούμενη μνήμη για την υλοποίησή της [96].

Οι παραπάνω διαφορετικές προσεγγίσεις παρουσιάζονται στην Εικόνα 3.5.



Εικόνα 3.5: Οι διαφορετικές προσεγγίσεις για τον υπολογισμό των αλληλεπιδράσεων: όλα τα ζεύγη, υποδιαίρεση κυττάρων και κατάλογος γειτόνων ([96], Fig. 3.1, p. 49).

Κεφάλαιο 4

Βασική ανάλυση του κώδικα προσομοίωσης

4.1 Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό θα γίνει μία προσπάθεια ανάλυσης του βασικού κώδικα προσομοίωσης, καθώς και των προσθηκών και των τροποποιήσεων που έγιναν σε αυτόν για να επιτύχουμε την αποτελεσματική προσομοίωση της κατεργασίας της λείανσης με κόκκους σε νανοκλίμακα. Στις επόμενες ενότητες, θα παρουσιάσουμε καταρχήν μία σύντομη ανάλυση της δομής του αλγόριθμου και στη συνέχεια θα επιχειρήσουμε να περιγράψουμε διεξοδικά τον κώδικα προσομοίωσης MD. Με τη χρήση του υπολογιστικού πακέτου Matlab R2009b και στα πλαίσια του τροποποιημένου κώδικα, θα πραγματοποιηθεί μία σειρά προσομοιώσεων της λείανσης με λειαντικούς κόκκους σε νανοκλίμακα με τη μεταβολή συγκεκριμένων παραμέτρων και εξαγωγή των επιθυμητών χαρακτηριστικών της κατεργασίας σε κάθε περίπτωση. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων αυτών θα παρουσιαστούν λεπτομερώς και θα αναλυθούν στα επόμενα κεφάλαια.

4.2 Γενική Δομή του Αλγόριθμου

Έχουμε διαπιστώσει επανειλημμένως στην τρέχουσα εργασία πως η θεμελιώδης φιλοσοφία της Μοριακής Δυναμικής και κατ' επέκταση και η δομή του κώδικα προσομοίωσης, είναι η επαναληπτική ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης του Νεύτωνα. Οι εξισώσεις κίνησης αφορούν συγκεκριμένο πλήθος ατόμων, που αποτελούν τα Νευτώνεια άτομα (Newtonian atoms). Από αυτές τις εξισώσεις, με χρήση της μεθόδου των βατραχοδρασκελισμών, θα γίνεται η αριθμητική ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης και η εξαγωγή των επιθυμητών αποτελεσμάτων.

Για την ενσωμάτωση και τον υπολογισμό των εξισώσεων κίνησης των Νευτώνειων ατόμων στον κώδικά μας, θα χρησιμοποιήσουμε το δυναμικό Morse. Ο λόγος που χρησιμοποιούμε το συγκεκριμένο δυναμικό είναι ότι πρόκειται για ένα ιδιαίτερα εύχρηστο δυναμικό ενέργειας και μπορεί να περιγράψει ικανοποιητικά τα μεταλλικά υλικά, ειδικά τα υλικά δομής fcc όπως ο χαλκός. Το δυναμικό Morse είναι ίσως το πιο ευρέως διαδεδομένο

και χρησιμοποιημένο δυναμικό, κυρίως εξαιτίας της ακρίβειας που προσφέρει και της δυνατότητας έκφρασης αλληλεπιδράσεων μεταξύ ατόμων για πολλά διαφορετικά υλικά. Αρκετές μελέτες που έχουν γίνει για την προσομοίωση κατεργασίας σε νανοκλίμακα με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής χρησιμοποιούν το εν λόγω δυναμικό, για να ελέγξουν τα αποτελέσματα πιο σύγχρονα εξελιγμένων δυναμικών καθώς και για την ανάπτυξη νέων. Επομένως, οι εξισώσεις μέσω των οποίων θα υπολογίσουμε τις δυνάμεις που αναπτύσσονται ανάμεσα στα άτομα του χαλκού (Cu-Cu), αλλά και ανάμεσα στα άτομα του τεμαχίου και του εργαλείου (κόκκου λείανσης), δηλαδή μεταξύ των ατόμων του χαλκού και των ατόμων του διαμαντιού (Cu-C) θα προκύψουν από το δυναμικό ενέργειας Morse. Θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε το δυναμικό ενέργειας Lennard – Jones 12 – 6, όμως το συγκεκριμένο δυναμικό δεν περιγράφει τις αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα άτομα του χαλκού και τα άτομα του διαμαντιού επιτυχώς, καθώς δεν υπάρχουν οι απαραίτητες παράμετροι για το δυναμικό Lennard – Jones 12 – 6 και θα πρέπει να γίνουν επιπλέον παραδοχές. Ακόμα, ενώ η περιγραφή των αλληλεπιδράσεων ανάμεσα στα άτομα του χαλκού μέσω του δυναμικού Lennard – Jones 12 – 6 είναι αρκετά ικανοποιητική, υπάρχουν αναφορές σε διάφορες μελέτες ότι το εν λόγω δυναμικό παρουσιάζει πολύ μεγαλύτερες τιμές δυνάμεων και ορατά χειρότερη επιφάνεια κατεργασίας. [17]

Όσον αφορά στο πρώτο τμήμα του κώδικα, αυτό της αρχικοποίησης των δεδομένων, γίνεται ένας πρώτος ορισμός των χαρακτηριστικών του συστήματός μας. Εν προκειμένω, τα χαρακτηριστικά που πρέπει να οριστούν είναι τα εξής: Αρχικά, ορίζονται τα χαρακτηριστικά του προς κατεργασία τεμαχίου. Αυτά είναι ο αριθμός των ατόμων που το απαρτίζουν, η διάταξη των ατόμων και οι αρχικές θέσεις που αυτά έχουν κατά την έναρξη της προσομοίωσης. Βέβαια, οι θέσεις αυτές σχετίζονται άμεσα με τη δομή του συγκεκριμένου υλικού το οποίο θέλουμε να μελετήσουμε. Στην περίπτωσή μας, το πλήθος των ατόμων που απαρτίζουν το τεμάχιο επιλέγεται ίσο με 1800, που χωρίζονται σε νευτώνεια και συνοριακά (ακίνητα καθ' όλη τη διάρκεια της κατεργασίας) όπως γνωρίζουμε και θα δούμε και στη συνέχεια. Η τιμή αυτή θεωρείται αποδεκτή και ικανοποιητική για παρόμοιες παρομοιώσεις. Η διάταξη επιλέγεται βάσει του υλικού, το οποίο είναι ο χαλκός με δομή fcc. Στη συνέχεια, πρέπει να οριστούν οι αρχικές ταχύτητες των ατόμων του

τεμαχίου κατά την έναρξη της προσομοίωσης. Αυτές εξαρτώνται από τη θερμοκρασία του τεμαχίου και επιλέγονται έτσι ώστε η συνολική ορμή του συστήματος να είναι μηδενική, δηλαδή το κέντρο μάζας να παραμένει σταθερό. Επιπλέον, ορίζονται οι αρχικές επιταχύνσεις των ατόμων, οι οποίες θεωρούμε ότι είναι μηδενικές.

Στη συνέχεια, η ίδια διαδικασία ακολουθείται για τον ορισμό των χαρακτηριστικών του εργαλείου, που στην προκειμένη περίπτωση είναι ο λειαντικός κόκκος. Ορίζεται ο αριθμός των ατόμων που το απαρτίζουν, η διάταξή τους και η δομή ανάλογα με το χρησιμοποιούμενο υλικό. Ουσιαστικά, ορίζονται οι αρχικές θέσεις ατόμων του κόκκου λείανσης κατά την έναρξη της προσομοίωσης. Το υλικό των εργαλείων είναι το μονοκρυσταλλικό διαμάντι. Λόγω της συγκεκριμένης επιλογής υλικού, τα εργαλεία θεωρούνται άκαμπτα κατά τη διάρκεια της κατεργασίας. Το πλήθος των ατόμων του ενός εργαλείου-κόκκου αρχικά επιλέγεται ίσο με 100, ώστε να είναι σε πραγματική αναλογία με τα άτομα του τεμαχίου. Το ίδιο πλήθος ατόμων επιλέγεται και για το άλλο εργαλείο-κόκκος. Κατά τη διεξαγωγή της σειράς προσομοιώσεων, ο αριθμός αυτός θα μεταβληθεί για τους σκοπούς της έρευνας της κατεργασίας και κυρίως θα μειωθεί για να μειωθεί αντίστοιχα και ο υπολογιστικός χρόνος. Στη φάση αυτή, θεωρούμε ότι βρισκόμαστε λίγο πριν από την έναρξη της διεργασίας, δηλαδή πριν ο λειαντικός κόκκος έρθει σε επαφή με το τεμάχιο, επομένως κατά την έναρξη της προσομοίωσης ο ένας από τους κόκκους μας βρίσκεται σε κάποια ορισμένη απόσταση από το τεμάχιο. Στη συνέχεια, γίνεται ορισμός των αρχικών ταχυτήτων των ατόμων των κόκκων, όπου στη συγκεκριμένη περίπτωση πρόκειται για μία συγκεκριμένη τιμή της ταχύτητας με κατεύθυνση τέτοια έτσι ώστε ο κόκκος λείανσης να τείνει να προσεγγίσει το τεμάχιο και να ξεκινήσει η κατεργασία. Οι αρχικές επιταχύνσεις των ατόμων των κόκκων και εδώ θεωρούμε ότι είναι μηδενικές, με τη διαφορά ότι σε αυτή την περίπτωση θα παραμείνουν μηδενικές καθ' όλη τη διάρκεια της λείανσης, επειδή σε όλη τη σειρά προσομοιώσεων η ταχύτητα των ατόμων του κόκκων θα διατηρείται σταθερή. Επίσης επιλέγουμε και το τελικό σημείο που θέλουμε να τερματίσει ο δεύτερος κόκκος μας ώστε με βάση το αρχικό και το τελικό σημείο να υπολογίσουμε την τροχιά επάνω στην οποία κινούνται οι κόκκοι μας.[33]

Στη συνέχεια, ακολουθεί το τμήμα της επίλυσης. Αυτό αποτελεί το βασικό τμήμα του προβλήματος, καθώς σε αυτό γίνεται η ενσωμάτωση και η

ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης. Η διαδικασία αυτή είναι επαναληπτική. Η λογική σε κάθε επανάληψη του αλγορίθμου είναι η εξής: Πραγματοποιείται υπολογισμός της δύναμης αλληλεπίδρασης σε κάθε δομική μονάδα, δηλαδή σε κάθε ένα από τα άτομα. Για κάθε ένα άτομο, οι δυνάμεις αλληλεπίδρασης που υπολογίζονται είναι αυτές που δέχεται το συγκεκριμένο άτομο από τα γειτονικά του άτομα. Στην δική μας περίπτωση δεν θα υπολογίζονται οι δυνάμεις αλληλεπίδρασης για όλα τα ζεύγη ατόμων, αλλά θα οριστεί μία συγκεκριμένη απόσταση αποκοπής r_c . Με άλλα λόγια, σε κάθε άτομο θα υπολογίζονται οι δυνάμεις αλληλεπίδρασης που δέχεται το συγκεκριμένο άτομο από όλα τα γειτονικά του άτομα που βρίσκονται σε απόσταση μικρότερη ή ίση από r_c . Στη συνέχεια, για κάθε ένα άτομο, θα γίνεται άθροιση των συνισταμένων δυνάμεων που δέχεται. Αφού έχει ευρεθεί για κάθε άτομο η συνισταμένη του δύναμη τη συγκεκριμένη στιγμή, ακολουθεί ο υπολογισμός της στιγμιαίας του επιτάχυνσης μέσω των εξισώσεων κίνησης που εφαρμόζονται. Στη συνέχεια, ακολουθεί η μέθοδος της αριθμητικής ολοκλήρωσης που χρησιμοποιούμε, που στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι αυτή των βατραχοδρασκελισμών. Εφόσον η επιτάχυνση είναι η πρώτη παράγωγος της ταχύτητας και με χρήση των επιταχύνσεων των ατόμων, γίνεται υπολογισμός της μεταβολής της ταχύτητας για το κάθε άτομο μέσα στο συγκεκριμένο διάστημα ολοκλήρωσης. Γνωρίζοντας αυτή τη συγκεκριμένη μεταβολή της ταχύτητας κάθε ατόμου και εφόσον η ταχύτητα είναι η πρώτη παράγωγος της θέσης, μπορεί να βρεθεί η μεταβολή στη θέση κάθε ατόμου, δηλαδή με άλλα λόγια η μετατόπιση κάθε δομικής μονάδας. Εν συνεχεία, ο αλγόριθμος επαναλαμβάνεται και βρίσκουμε νέες τιμές δυνάμεων αλληλεπίδρασης, ταχυτήτων και επιταχύνσεων. Για τα εργαλεία μας η ταχύτητα τους στην οριζόντια κατεύθυνση είναι ορισμένη από την αρχή ενώ κατακόρυφα μεταβάλλεται ανάλογα τη θέση που έχει το καθένα στην υπολογισμένη τροχιά. Στην παρούσα εργασία η τροχιά έχει τη μορφή παραβολής με γενική μορφή εξίσωσης την ακόλουθη:

$$(ax^2+bx+c=0)$$

Σε κάθε βήμα επανάληψης, η προσομοίωση της κοπής εξελίσσεται και ο κόκκος λείανσης αφαιρεί σταδιακά υλικό από το τεμάχιο. Η διαδικασία αυτή εξελίσσεται, έως ότου ολοκληρωθεί το σύνολο των επαναληπτικών βημάτων, που ορίζουμε στο πρώτο τμήμα του κώδικα, αυτό της αρχικοποίησης δεδομένων. Σε κάθε επανάληψη, ευρίσκονται και αποθηκεύονται οι τιμές όλων των μεγεθών που μας ενδιαφέρουν [33].

Στο τέλος, ακολουθεί η εξαγωγή και η επεξεργασία των αποτελεσμάτων, τα οποία θα δούμε αναλυτικά στην πορεία.

Εκτός από τα νευτώνεια και τα συνοριακά άτομα, υπάρχουν και τα θερμοστατικά άτομα. Τα θερμοστατικά άτομα επιτελούν, όπως μαρτυρά και το όνομά τους, τη διαδικασία της θερμοστάτησης, που είναι η ρύθμιση της θερμοκρασίας στην επιθυμητή τιμή. Στην ουσία, το σύστημα αφήνεται να εξελιχθεί για λίγο χωρίς περιορισμό θερμοκρασίας και σε τακτά χρονικά διαστήματα η θερμοκρασία επιβάλλεται να γίνει ίση με την επιθυμητή. Τα θερμοστατικά άτομα αλληλεπιδρούν με τα υπόλοιπα του συστήματος, επηρεάζοντας την κινητική τους ενέργεια. Ο τρόπος με τον οποίο την επηρεάζουν, οδηγεί σε κινητική ενέργεια, η οποία αντιστοιχεί στην επιθυμητή θερμοκρασία μέσω επαναπροσδιορισμού της ταχύτητας. Όταν η θερμοκρασία των θερμοστατικών ατόμων, κατά την προσομοίωση της λείανσης νανοκλίμακας, ξεπερνά την καθορισμένη θερμοκρασία για το υλικό κατά 3 βαθμούς, οι ταχύτητες ανακατατάσσονται βάσει συγκεκριμένων εξισώσεων.

Παρόλο που ο βασικός αλγόριθμος προσφέρει τα πλαίσια και για τρισδιάστατη μελέτη του φαινομένου, η μοντελοποίηση γίνεται σε δύο διαστάσεις, για να μειωθεί σημαντικά η υπολογιστική πολυπλοκότητα και ο χρόνος της προσομοίωσης. Και πάλι, ένας ηλεκτρονικός υπολογιστής με 16Gb μνήμης RAM και quad-quadro (τετραπύρηνος) επεξεργαστή, όπως αυτός που έχουμε στη διάθεσή μας για την πραγματοποίηση των προσομοιώσεων, θέλει τουλάχιστον 8 με 10 ώρες για να εκτελέσει μία προσομοίωση.

4.3 Περιγραφή του Κώδικα Προσομοίωσης MD

Στην ενότητα αυτή, θα προχωρήσουμε στην περιγραφή του κώδικα, ο οποίος αναπτύχθηκε με βάση το σκεπτικό που παρουσιάστηκε προηγουμένως. Σε πρώτη φάση, ορίζονται κάποια αρχικά δεδομένα για τον κώδικα, όπως είναι οι διαστάσεις του υπό περιγραφή συστήματος, το χρονικό βήμα, η θερμοκρασία και συγκεκριμένες παράμετροι για την εξέλιξη του φαινομένου, όπως για παράδειγμα ο ρυθμός εξαγωγής των

επιθυμητών αποτελεσμάτων. Σε αυτό το αρχικό στάδιο ορίζονται και οι χρησιμοποιούμενες μονάδες μέτρησης.

Λόγω του ότι η λείανση λαμβάνει χώρα στη νανοκλίμακα και οι μεταβλητές λαμβάνουν εξαιρετικά μικρές τιμές, είναι απαραίτητη η επιλογή εύχρηστων μονάδων μέτρησης των διαφόρων μεγεθών. Για το λόγο αυτό χρησιμοποιούνται αδιάστατες μονάδες μέτρησης.

Η μονάδα μέτρησης μήκους είναι :

$$[L] = 1 \times 10^{-1} nm = 1 \times 10^{-10} m = 1 \text{ \AA}$$

Η μονάδα μέτρησης ενέργειας είναι :

$$[E] = 1 eV = 1.602176 \times 10^{-19} J$$

Η μονάδα μέτρησης δύναμης είναι :

$$[F] = [a][D] = \frac{[E]}{[L]} = \frac{eV}{\text{ \AA}} = \frac{1.602176 \times 10^{-19} J}{10^{-10} m} = 1.602176 \times 10^{-9} N$$

Η μονάδα μέτρησης μάζας είναι :

$$[m] = \frac{[M]}{[M_r]} = \frac{62.93 \times 10^{-26}}{6.022} kg = 1.045 \times 10^{-25} kg$$

Η μονάδα μέτρησης χρόνου είναι :

$$[\ddot{r}] = \frac{[F]}{[m]} = \frac{[L]}{[t]^2} \rightarrow [t] = \sqrt{\frac{[L][m]}{[F]}} = 80.76 \times 10^{-15} s = 80.76 fs$$

Η μονάδα μέτρησης θερμοκρασίας είναι :

$$[T] = \frac{[L]^2 [m]}{[L]^2 [k_B]} = \frac{[L]^2 [m]}{[L][m][F]^{-1}[k_B]} = 11604.505 K$$

Το χρονικό βήμα ολοκλήρωσης επιλέγεται ίσο με :

$$dt = 10 \text{ fs} = 0.123 t_{\text{unit},MD}$$

Η θερμοκρασία προσομοίωσης είναι :

$$T = 293 \text{ K} = \frac{29}{11 \cdot 5} 11604.505 \text{ K} = 0.0252 T_{\text{un}} ,MD$$

Στη συνέχεια, ορίζεται το τελικό σημείο τερματισμού του 2^ο κόκκου και καλείται η κατάλληλη συνάρτηση, στην οποία ορίζονται μεταβλητές απαραίτητες για την προσομοίωση, στις αντίστοιχες βέβαια κάθε φορά μονάδες της Μοριακής Δυναμικής, πέρα από αυτές που ορίστηκαν προηγουμένως. Η πιο σημαντική μεταβλητή που ορίζεται στη συνάρτηση αυτή είναι η *rCut*, η οποία αντιπροσωπεύει την απόσταση αποκοπής για τη μέθοδο του υπολογισμού αλληλεπιδράσεων που εφαρμόζουμε. Στη δική μας περίπτωση, επιλέγουμε να είναι *rCut* = **10** , πάντα σε μονάδες Μοριακής Δυναμικής, που εν προκειμένω είναι 10 Angstrom. Ο λόγος που διαλέγουμε μία μεγαλύτερη γενικά τιμή είναι για να έχουμε περισσότερο αντιπροσωπευτικά αποτελέσματα για το σύστημα που θέλουμε να μελετήσουμε, λαμβάνοντας υπόψη το μέγεθός του. Αυτό σημαίνει ότι ο υπολογισμός των αλληλεπιδράσεων θα γίνεται μόνο για ζεύγη ατόμων τα οποία απέχουν μεταξύ τους απόσταση μικρότερη ή ίση από 10 Å, ενώ για μεγαλύτερες αποστάσεις, οι δυνάμεις θα θεωρούνται μηδενικές.

Έπειτα, καλείται η συνάρτηση με την οποία γίνεται αρχικοποίηση βασικών μεταβλητών και ορισμός του υπό περιγραφή συστήματος. Ορίζουμε λοιπόν σε αυτή τη συνάρτηση τον αριθμό ατόμων στο τεμάχιο και το λειαντικό κόκκο και τη διάταξή τους στο επίπεδο, που καθορίζει τη μορφή του τεμαχίου και του κόκκου. Για να μπορούμε να διακρίνουμε τα είδη των ατόμων, ορίζουμε τη μεταβλητή *moltype* και ουσιαστικά δίνουμε μία διαφορετική τιμή στη μεταβλητή αυτή ανάλογα με το είδος των ατόμων που έχουμε. Η μεταβλητή αυτή είναι ένα διάνυσμα – γραμμή, με τόσες στήλες όσο είναι το συνολικό πλήθος των ατόμων στο μοντέλο μας. Έτσι, για τα άτομα του κοπτικού εργαλείου, δηλαδή του κόκκου διαμαντιού στην περίπτωσή μας, ορίζουμε :

$$\text{moltype}(1, \text{tool})=1$$

Για τα Νευτώνεια άτομα του τεμαχίου δίνουμε :

$$\text{moltype}(1, \text{partNewton})=2$$

Για τα Θερμοστατικά άτομα του τεμαχίου έχουμε :

$$\text{moltype}(1, \text{partThermo})=3$$

Οπότε για τα Συνοριακά άτομα του τεμαχίου έχουμε :

$$\text{moltype}(1, \text{partBoundary})=4$$

Με βάση λοιπόν τη μεταβλητή *moltype* και τις μεταβλητές *tool*, *part*, *partNewton* και *partBoundary*, γίνεται ακριβής ορισμός και διάκριση των διαφορετικών ατόμων του συστήματός μας. Για το εργαλείο ορίζουμε στην αρχική του μορφή να αποτελείται από 100 άτομα, ενώ τα 1800 άτομα του τεμαχίου χωρίζονται σε 1296 Νευτώνεια, 239 Θερμοστατικά και 265 Συνοριακά.

Αφού έγινε ο ορισμός του πλήθους των ατόμων και διάκρισή τους, ακολουθεί ο ακριβής ορισμός των θέσεων τους. Οι θέσεις των ατόμων στον κώδικά μας περιγράφονται από τη μεταβλητή *r*. Ο ορισμός των θέσεων των ατόμων του τεμαχίου γίνεται με κλήση ξεχωριστής συνάρτησης. Σε αυτήν ορίζονται οι αρχικές συντεταγμένες των ατόμων του τεμαχίου στο επίπεδο (*x*, *y*), οι οποίες εξαρτώνται από την δομή του υλικού, δηλαδή του χαλκού, όπως έχουμε προαναφέρει. Όπως είδαμε, ο χαλκός έχει δομή *fcc* και τα άτομά του απέχουν μεταξύ τους απόσταση 3.62 Å. Σύμφωνα λοιπόν με αυτά τα δεδομένα και την επιθυμητή μορφή του τεμαχίου, ορίζουμε τις συντεταγμένες που έχουν κατά την έναρξη της προσομοίωσης τα άτομά του. Θεωρούμε ότι το τεμάχιο στο επίπεδο (*x*, *y*) έχει ορθογωνική μορφή.

Στη συνέχεια, με τον ίδιο ακριβώς τρόπο, καλείται η συνάρτηση για τον ορισμό των αρχικών συντεταγμένων των ατόμων του κόκκου λείανσης. Για

να γίνει αυτό λαμβάνεται υπόψη η δομή του διαμαντιού και το γεγονός ότι οι διατομικές αποστάσεις σε αυτό είναι 1.54 Å. Σε μία πρώτη προσπάθεια, ο λειαντικός κόκκος θεωρούμε ότι έχει την πιο απλή μορφή.

Αφού οριστούν οι αρχικές συντεταγμένες των ατόμων του συστήματός μας, σειρά έχει ο ορισμός των αρχικών ταχυτήτων των ατόμων, οι οποίες περιγράφονται από τη μεταβλητή vn . Επομένως, στη συνέχεια, καλείται η συνάρτηση με στην οποία γίνεται ορισμός των αρχικών ταχυτήτων που έχουν τα άτομα του τεμαχίου. Βέβαια, οι αρχικές αυτές ταχύτητες αφορούν μόνο τα Νευτώνεια άτομα του τεμαχίου, καθώς τα Συνοριακά άτομα, όπως έχουμε δει, παραμένουν ακίνητα καθ' όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης και επομένως οι ταχύτητές τους, τόσο στην αρχή όσο και σε όλη την εξέλιξη του φαινομένου, είναι μηδενικές. Αναφορικά λοιπόν με τα Νευτώνεια άτομα του τεμαχίου, αυτά έχουν αρχικές ταχύτητες, οι οποίες εξαρτώνται άμεσα από τη θερμοκρασία και επιλέγονται με τέτοιο τρόπο έτσι ώστε η ορμή του συστήματος να είναι μηδενική, δηλαδή το κέντρο μάζας του τεμαχίου να παραμένει σταθερό. Έτσι λοιπόν, ορίζεται η μεταβλητή $velMag$ η οποία αντιπροσωπεύει το μέτρο της αρχικής ταχύτητας των ατόμων του τεμαχίου, και η οποία περιγράφεται από τη σχέση :

$$velMag = (2 \times (1 - 1/nMolNewton) \times T)^{0.5}$$

όπου η μεταβλητή $nMolNewton$ εκφράζει το πλήθος των Νευτώνειων ατόμων του τεμαχίου και η μεταβλητή T εκφράζει τη θερμοκρασία της προσομοίωσης. Επομένως, κατά την έναρξη της προσομοίωσης, ορίζεται ότι όλα τα Νευτώνεια άτομα του τεμαχίου έχουν την παραπάνω ταχύτητα κατά μέτρο και τυχαία κατεύθυνση.[33]

Παρόμοια ορίζεται η αρχική ταχύτητα των ατόμων του λειαντικού κόκκου, η οποία είναι κοινή για όλα τα άτομά του και σταθερή καθ' όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης. Είναι η ταχύτητα με την οποία ο κόκκος τρίβει το τεμάχιο και αντιπροσωπεύει την ταχύτητα της λειαντικής διεργασίας στην προσομοίωση. Στη συγκεκριμένη μελέτη ορίζεται ως:

$$V_L = 0.1 \frac{L_{\text{min},MD}}{L_{\text{min},MD}} = 0.1 \frac{10^{-10} \text{ m}}{80.76 \times 10^{-15} \text{ s}} = 123 \text{ m/s}$$

η οποία είναι γενικά μία αποδεκτή και συχνά χρησιμοποιούμενη και από άλλους ερευνητές τιμή ταχύτητας της λειαντικής διεργασίας. Στη βιομηχανία αλλά και στις πειραματικές έρευνες, οι πιο συνηθισμένες ταχύτητες λείανσης που συναντώνται είναι της τάξεως των 5 με 15 για λείανση υψηλής ακρίβειας, 25 με 85 για τις περισσότερες λειαντικές κατεργασίες και 180 με 250 για τις λειάνσεις υψηλών ταχυτήτων (high speed grinding)[17,33,51,84,85,86]. Επομένως, οι τιμές της ταχύτητας της λείανσης που χρησιμοποιούμε (246m/s , 492 m/s) είναι λίγο μεγαλύτερες από την πειραματική πραγματικότητα αλλά θεωρούμε, έχοντας συνεχώς στο νου μας και τη μείωση του χρόνου προσομοίωσης, πως αυτή τιμή για την ταχύτητα λείανσης της προσομοίωσης είναι κατάλληλη. Η μεταβλητή που στον κώδικα αντιπροσωπεύει αυτή την τιμή της ταχύτητας λείανσης είναι η *veltool* και στον κώδικά μας δίνεται ως *veltool = [-0,4, 0, 0]*, σε μονάδες Μοριακής Δυναμικής βεβαίως. Παρατηρούμε ότι η *veltool* έχει συνιστώσα μόνο κατά τη διεύθυνση x, οπότε ο κόκκος θα κινείται μόνο κατά τη διεύθυνση x προκειμένου να τρίψει το τεμάχιο. Αυτό θα συμβαίνει, όπως θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο, μόνο στην αρχή καθώς όταν ξεκινάει η διαδικασία της λείανσης αποκτάει και ταχύτητα κατά προκειμένου να ακολουθήσει την τροχιά που του έχουμε ορίσει.

Έπειτα από τον ορισμό των θέσεων και των ταχυτήτων των ατόμων του συστήματος κατά την έναρξη της προσομοίωσης, ακολουθεί και ο ορισμός των αρχικών επιταχύνσεων των ατόμων, οι οποίες περιγράφονται από τη μεταβλητή r_a . Αυτές ορίζονται καλώντας κατάλληλη συνάρτηση και θεωρούμε ότι τόσο για τα άτομα του τεμαχίου όσο και για αυτά του λειαντικού κόκκου, αυτές είναι μηδενικές κατά την έναρξη της προσομοίωσης (για τον κόκκο λείανσης παραμένουν μηδενικές μέχρι το πέρας της προσομοίωσης).

Έπειτα, καλείται η συνάρτηση με την οποία υπολογίζονται οι σταθεροί όροι a, b, c από τους οποίους περιγράφεται η τροχιά (Τροχιά : Παραβολή $\rightarrow ax^2+bx+c=0$) που θέλουμε να έχουν τα εργαλεία μας. Αυτοί οι όροι θα χρησιμοποιηθούν αργότερα για τον υπολογισμό των ταχυτήτων στον κύριο

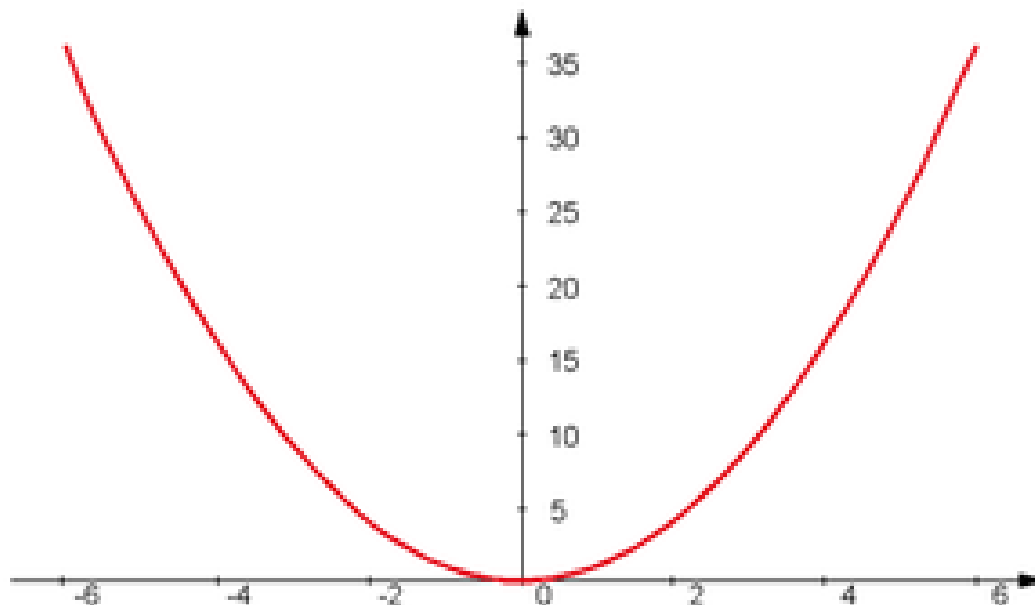
κώδικα.

Τέλος, καλείται κατάλληλη συνάρτηση που χρησιμοποιείται για να εισαχθεί στη διαδικασία το δεύτερο κοπτικό εργαλείο. Το 1^ο άτομο στο δεύτερο αυτό εργαλείο τοποθετείται σε μια απόσταση γύρω στα 20 Å από το πρώτο και η γσυνιστώσα του υπολογίζεται έτσι ώστε το άτομο αυτό να ανήκει επάνω στην καμπύλη $ax^2+bx+c=0$, όπου a,b,c,οι συντελεστές που έχουν υπολογιστεί από την *Parabola*. Τα στοιχεία που χρειαζόμαστε για να υπολογιστεί η επικείμενη τροχιά θα πρέπει να είναι 3 εφόσον έχουμε και 3 αγνώστους (a,b,c) :

- Οι αρχικές συντεταγμένες του κατώτερου σημείου από αριστερά του 1^{ου} εργαλείου (StartPoint)
- Οι τελικές συντεταγμένες του κατώτερου σημείου από αριστερά του 1^{ου} εργαλείου (FinalPoint)
- Η γσυνιστώσα της ταχύτητας του 1^{ου} κοπτικού εργαλείου είναι 0.

Με τις 3 λοιπόν αυτές συνθήκες υπολογίζονται οι σταθερές της εξίσωσης της τροχιάς από τις οποίες αργότερα θα υπολογίζεται κάθε φορά η κατά γσυνιστώσα της ταχύτητας του κάθε εργαλείου.

Οι θέσεις των άλλων εργαλείων καθορίζονται έτσι ώστε τα κατώτερα σημεία τους από αριστερά να βρίσκονται πάνω στην τροχιά του επόμενου σχήματος.



Εικόνα 4.1: Σχηματική αναπαράσταση της τροχιάς των εργαλείων.

Μετά λοιπόν από αυτή τη φάση των αρχικοποιήσεων, κατά την οποία εισάγονται στο πρόγραμμα διάφορες παράμετροι και άλλα δεδομένα και αρχικοποιούνται, εισάγεται στο πρόγραμμα ένας επαναληπτικός βρόγχος.

Κάθε επανάληψη του βρόγχου αναβαθμίζει το πρόγραμμα κατά ένα χρονικό βήμα και αυτή τερματίζει όταν η μεταβλητή *stepLimit* φτάσει σε μία καθορισμένη τιμή. Στη συγκεκριμένη συνάρτηση, που αποτελεί το κύριο μέρος του κώδικα, περιλαμβάνονται κλήσεις σε άλλες συναρτήσεις, οι οποίες αφορούν την ενσωμάτωση των εξισώσεων κίνησης, την εκτίμηση των αναπτυσσόμενων δυνάμεων και τη μέτρηση των θερμοκρασιών, όπως θα δούμε στη συνέχεια .

Στη συνέχεια, καλείται η συνάρτηση η οποία ενσωματώνει τη μέθοδο που χρησιμοποιούμε για την ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης, η οποία είναι η μέθοδος των βατραχοδρασκεισμών. Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, το πρώτο βήμα της μεθόδου περιλαμβάνει τον υπολογισμό των ταχυτήτων για μισό χρονικό βήμα, χρησιμοποιώντας τις παλιές τιμές των επιταχύνσεων και τον υπολογισμό των συντεταγμένων για ένα ολόκληρο χρονικό βήμα, χρησιμοποιώντας τις ενδιάμεσες τιμές των ταχυτήτων που μόλις υπολογίστηκαν για το μισό χρονικό βήμα.

Έπειτα, ακολουθεί η κλήση κατάλληλης συνάρτησης η οποία είναι

υπεύθυνη για τον υπολογισμό των αλληλεπιδράσεων ανάμεσα στα άτομα. Στο σημείο αυτό, εισάγονται οι σχέσεις για τον υπολογισμό των δυνάμεων αλληλεπίδρασης ανάμεσα στα άτομα του χαλκού μεταξύ τους και ανάμεσα στα άτομα του χαλκού και του διαμαντιού. Στον κώδικα, η μεταβλητή που χρησιμοποιείται για να περιγράψει τη δύναμη αλληλεπίδρασης είναι η $fcVal$. Από τον υπολογισμό των δυνάμεων αλληλεπίδρασης υπολογίζονται στη συνέχεια κάθε φορά οι καινούριες επιταχύνσεις που προκύπτουν για τα άτομα, από τον δεύτερο νόμο του Νεύτωνα.

Συνεχίζοντας λοιπόν να βρισκόμαστε εντός της βασικής συνάρτησης υπολογίζονται με βάση τον νέο χρόνο οι νέες συνιστώσες κατά y των ταχυτήτων των κοπτικών εργαλείων έτσι ώστε να συνεχίζουν να κινούνται πάνω στην επικείμενη τροχιά τα δύο κοπτικά εργαλεία. Η ταχύτητα κατά x παραμένει σταθερή για λόγους ευκολίας στην σύγκριση αποτελεσμάτων.

Ύστερα, ακολουθεί η δεύτερη κλήση της συνάρτησης ,με την οποία γίνεται η αριθμητική ολοκλήρωση , η οποία αφορά το δεύτερο τμήμα της μεθόδου των βατραχοδρασκελισμών και στο οποίο αφού έχουν χρησιμοποιηθεί οι καινούριες συντεταγμένες που προέκυψαν από το πρώτο βήμα για να υπολογιστούν οι καινούριες δυνάμεις και κατ' επέκταση οι καινούριες επιταχύνσεις, υπολογίζονται πλέον οι ταχύτητες προσθέτοντας και το υπόλοιπο μισό χρονικό βήμα.

Με αυτόν τον τρόπο, καταφέρνουμε σε κάθε χρονικό βήμα να γίνεται υπολογισμός των καινούριων δυνάμεων αλληλεπίδρασης και των καινούριων επιταχύνσεων, όπως επίσης και των καινούριων ταχυτήτων και θέσεων στα διάφορα άτομα του συστήματος, χρησιμοποιώντας κάθε φορά τις προηγούμενες τιμές των μεγεθών αυτών. Με τον τρόπο αυτό καταφέρνουμε να έχουμε πλήρη αντίληψη της χρονικής εξέλιξης της προσομοίωσης και κατ' επέκταση της λείανσης, τόσο από την άποψη της γνώσης των διαφόρων τιμών όσο και από την άποψη της γραφικής απεικόνισης της προσομοίωσης. Κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης χρησιμοποιείται ειδική συνάρτηση , η οποία σχεδιάζει τα άτομα του τεμαχίου και του κοπτικού εργαλείου με βάση τις ορισμένες συντεταγμένες, οι οποίες αλλάζουν σε κάθε χρονική επανάληψη του κώδικα, με αποτέλεσμα να μπορούμε να παρατηρούμε τη διαδικασία της λείανσης και τη διαδικασία σχηματισμού του αποβλήτου. Επιπλέον, για κάθε άτομο μπορούμε να βλέπουμε τη στιγμιαία ταχύτητα και επιτάχυνσή του. Με την

ανανέωση λοιπόν σε κάθε επανάληψη των τιμών των συντεταγμένων, των ταχυτήτων και των επιταχύνσεων, μπορούμε να έχουμε πλήρη εικόνα της χρονικής εξέλιξης του φαινομένου.

Η επαναληπτική διαδικασία της επίλυσης συνεχίζεται μέχρις ότου ο 2^{95} κόκκος ξεπεράσει το τελικό σημείο που έχουμε ορίσει για τη λήξη της προσομοίωσης και την ολοκλήρωση της κατεργασίας της λείανσης.

Ο προσδιορισμός του αποβλίττου λείανσης γίνεται σύμφωνα με κατάλληλη συνάρτηση, από την οποία υπολογίζεται το ύψος του αποβλίττου και τα άτομα που το αποτελούν. Το ύψος υπολογίζεται από το σημείο που έχει φτάσει το υψηλότερο άτομο του τεμαχίου το οποίο όμως είναι σχεδόν ενωμένο με τα υπόλοιπα άτομα και δεν έχει εκσφενδονιστεί. Το πλήθος των ατόμων υπολογίζεται από τα άτομα του τεμαχίου εκείνα που βρίσκονται από ένα συγκεκριμένο ύψος και πάνω στο τέλος της λείανσης. Έτσι βρίσκουμε το τελικό μέγεθος του αποβλίττου μετά το πέρας της κατεργασίας.

Ο προσδιορισμός της θερμοκρασίας λείανσης γίνεται σύμφωνα με την παρακάτω διαδικασία:

$$Temperature = (2 * M_{cu} * 0.5 * (\sqrt{v_x^2 + v_y^2})) / (3 * K_b)$$

όπου M_{cu} είναι η μάζα των ατόμων του χαλκού (υλικό κατεργασίας) και K_b είναι η σταθερά Boltzmann ίση με $1,38 \times 10^{-23} J/K$.

Παρατηρούμε ότι η μεταβλητή της θερμοκρασίας λείανσης υπολογίζεται από την κινητική ενέργεια των ατόμων του υλικού. Πιο συγκεκριμένα προκύπτει από το άθροισμα των κινητικών ενεργειών των ατόμων.

Κεφάλαιο 5

Αποτελέσματα και Ανάλυση Προσομοιώσεων

5.1 Εισαγωγή

Στο προηγούμενο κεφάλαιο έγινε μία βασική περιγραφή του κώδικα προσομοίωσης που τροποποιήσαμε για να μοντελοποιήσουμε τη διεργασία της λείανσης με κόκκους στη νανοκλίμακα με τη βοήθεια της Μοριακής Δυναμικής. Σε αυτό το κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα της σειράς προσομοιώσεων που διεξήχθησαν με χρήση του συγκεκριμένου κώδικα. Ειδικότερα, σε κάθε περίπτωση προσομοίωσης παρουσιάζονται κάποια στιγμιότυπα από τη διεργασία της λείανσης, όπου απεικονίζεται γραφικά ο σχηματισμός του αποβλίττου ανάλογα με τις συνθήκες της κατεργασίας. Έπειτα, δίνονται διαγράμματα των μεγεθών που μας απασχολούν και μας ενδιαφέρει η εξέλιξή τους, όπως οι δυνάμεις λείανσης (δύναμη κοπής του λειαντικού κόκκου), η μέση θερμοκρασία όλων των ατόμων του τεμαχίου και τα ύψη των αποβλίττων. Για κάθε προσομοίωση θα μελετηθεί κυρίως ο τρόπος επίδρασης των διαφόρων συνθηκών της λείανσης (όπως βάθος κοπής, ταχύτητα, γωνία αποβλίττου) τόσο στο μηχανισμό σχηματισμού αποβλίττου, όσο και στην ποιότητα της κατεργαζόμενης επιφάνειας και στα μετρούμενα μεγέθη που είναι υπεύθυνα. Σε όλες τις προσομοιώσεις χρησιμοποιούμε τη συνάρτηση δυναμικού Morse.

5.2 Πρώτη Σειρά Προσομοιώσεων

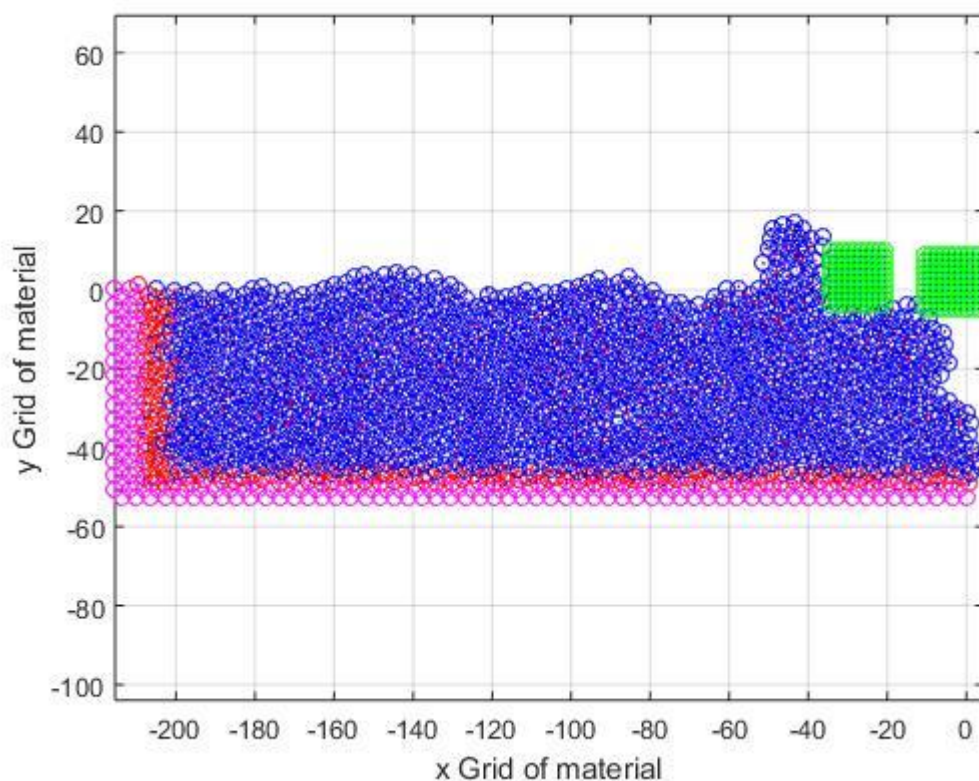
Σε αυτή την πρώτη σειρά προσομοιώσεων που πραγματοποιήσαμε ξεκινώντας τις προσπάθειές μας, παρουσιάζεται λείανση τεμαχίου χαλκού με 2 κόκκους διαμαντιού ορθογωνικής γεωμετρίας, που αποτελεί την απλούστερη μορφή γεωμετρίας κόκκου λείανσης. Οι προσομοιώσεις έλαβαν χώρα για τρία διαφορετικά βάθη κοπής. Η γωνία αποβλίττου διατηρείται στις 0° σε όλη τη σειρά προσομοιώσεων, η κατά x συνιστώσα της ταχύτητας δεν μεταβάλλεται για κάθε βάθος λείανσης με στόχο την ορθότερη σύγκριση των αποβλίττων των δυνάμεων ανά βάθος κοπής.

5.2.1 Προσομοίωση 1a

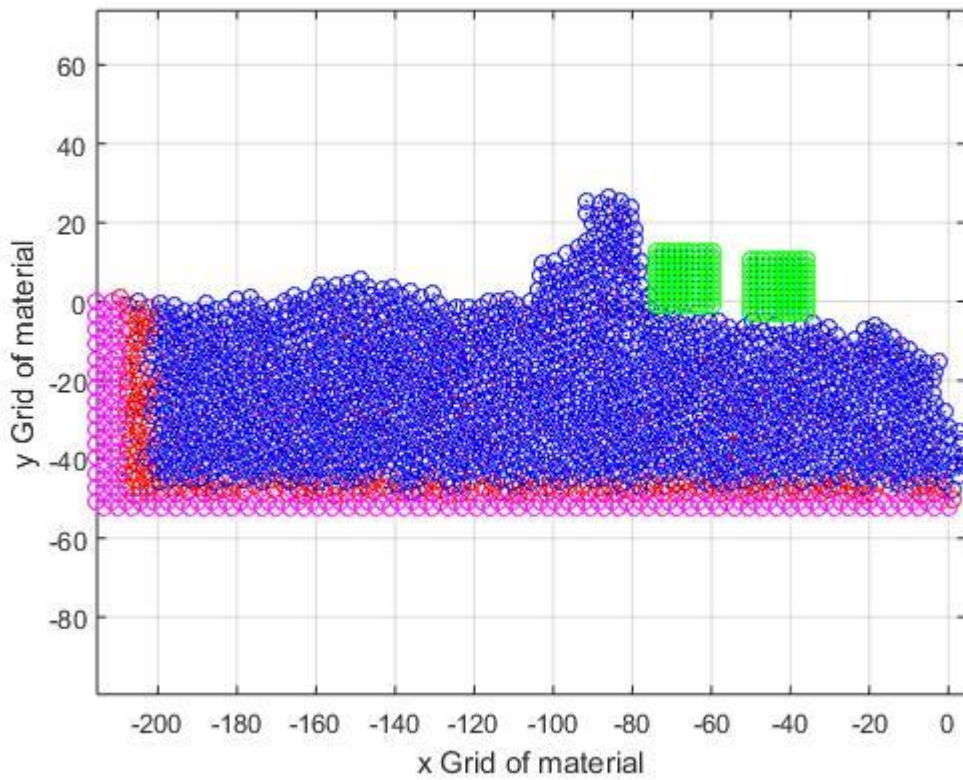
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 1a είναι :

Προσομοίωση 1a	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 1 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	0 ^ο
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 2 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	0 ^ο
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	5 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	246 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	1800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 1	100
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 2	100
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	10 fsec

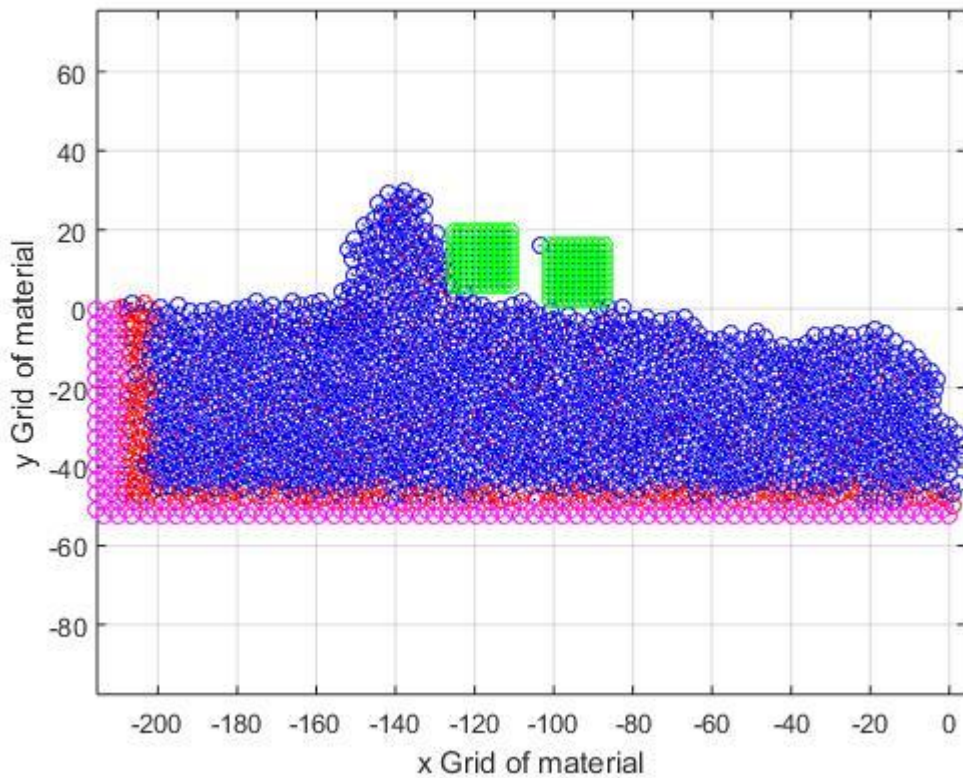
Πίνακας 5.1: Παράμετροι προσομοίωσης 1a



Εικόνα 5.1: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης κατά την έναρξη της κατεργασίας



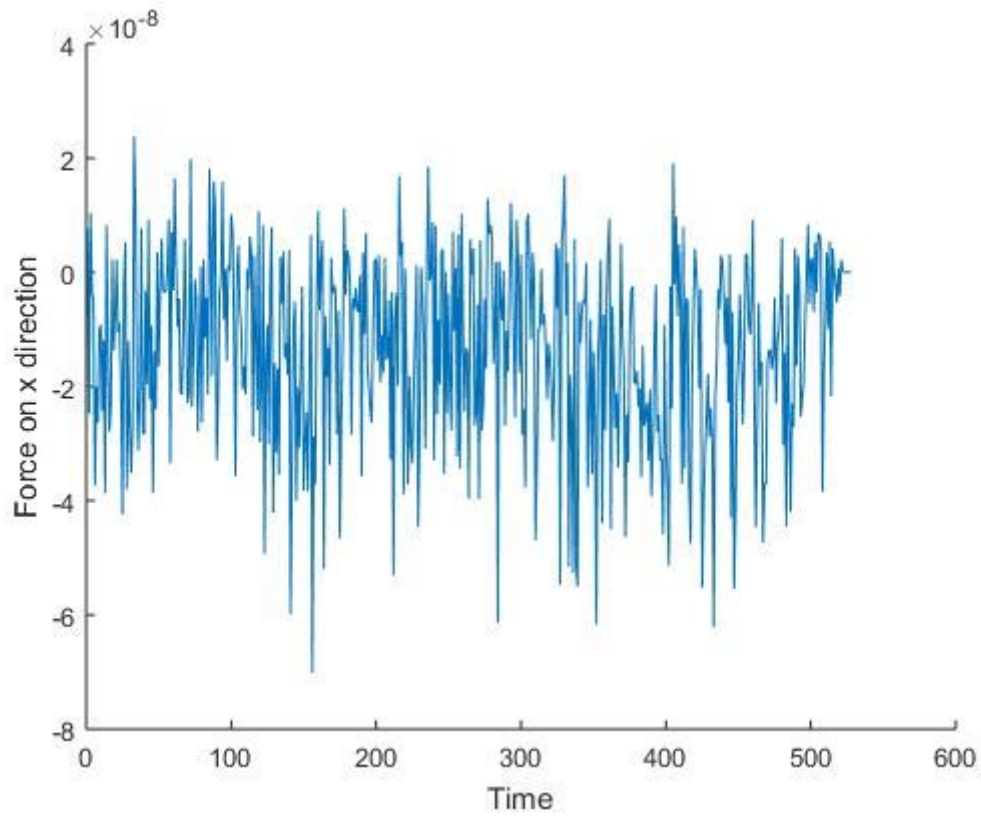
Εικόνα 5.2: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας



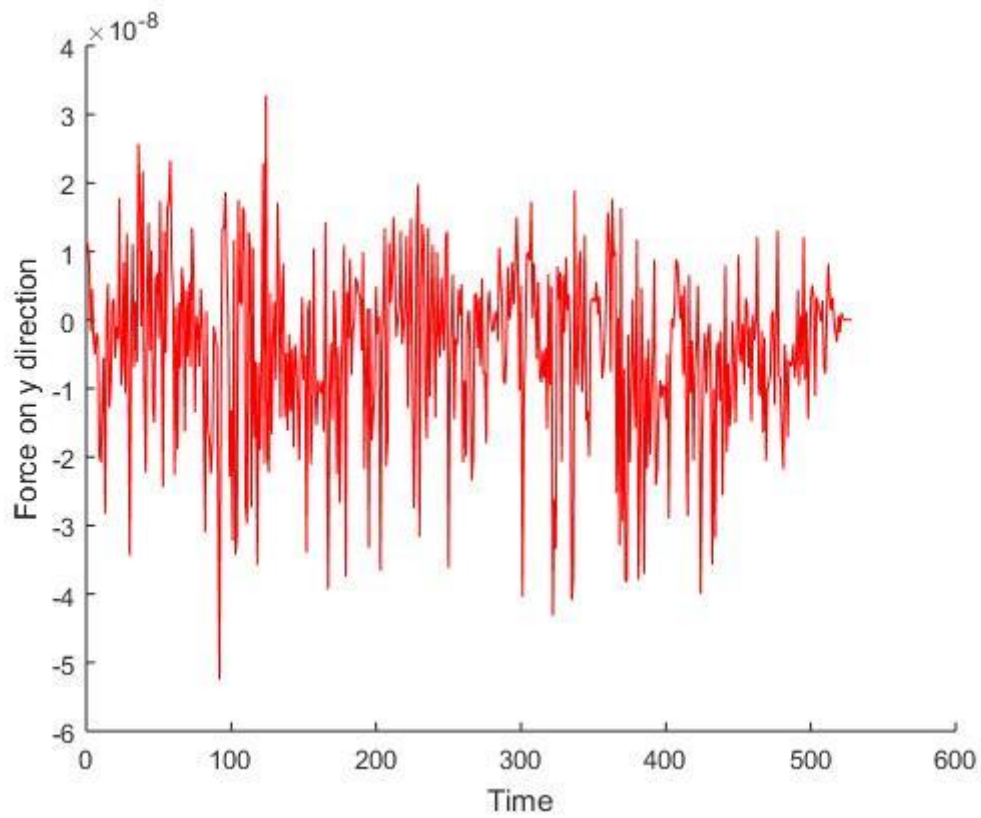
Εικόνα 5.3: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Από τις παραπάνω εικόνες των φάσεων της κατεργασίας, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι το υλικό κατεργασίας παραμορφώνεται μπροστά από τον λειαντικό κόκκο, πράγμα το οποίο συναντάται γενικά και στις συμβατικές κατεργασίες λείανσης. Παρατηρούμε ότι η κατεργασία υπό αυτές τις συνθήκες θυμίζει πολύ νανοκοπή. Καθώς εξελίσσεται η προσομοίωση, το απόβλιτο μετακινείται προς τα επάνω, παράλληλα με την επιφάνεια του κόκκου και με τον τρόπο αυτό διαμορφώνεται και η κατεργασμένη επιφάνεια. Η ομοιότητα αυτή οφείλεται κυρίως στη μηδενική γωνία αποβλήτου η οποία μπορεί να χαρακτηρίσει αρκετές περιπτώσεις νανοκοπής και έχει να κάνει με τη γεωμετρία του κόκκου λείανσης. Στη γεωμετρία του κόκκου επίσης χρωστάμε την πιο ομαλή κατεργασμένη επιφάνεια, από ότι σε αντίστοιχες νανοκοπές, κάτι που έχει να κάνει με το πλάτος του κόκκου, δηλαδή τις σειρές των 10 ατόμων του εργαλείου στον άξονα των x . Επιπλέον, στην κατεργασμένη επιφάνεια του τεμαχίου είναι εμφανής η πλαστική παραμόρφωση και η ελαστική επαναφορά του υλικού. Το υλικό που βρίσκεται μακριά από το κοπτικό εργαλείο δεν επηρεάζεται σχεδόν καθόλου από την κατεργασία.

Σε όλα τα στιγμιότυπα, με το μπλε αναπαριστούμε τα Νευτώνια άτομα, με το μώβ τα Συνοριακά άτομα και με το κόκκινο τα άτομα Θερμοστάτες. Με την εξέλιξη του φαινομένου, μεγαλώνουν και οι ταχύτητες των ατόμων, πράγμα το οποίο αντιστοιχεί και σε αύξηση των θερμοκρασιών του υλικού κατεργασίας. Παρακάτω έχουμε τα διαγράμματα των δυνάμεων που αναπτύσσονται.



Εικόνα 5.4: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.5: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

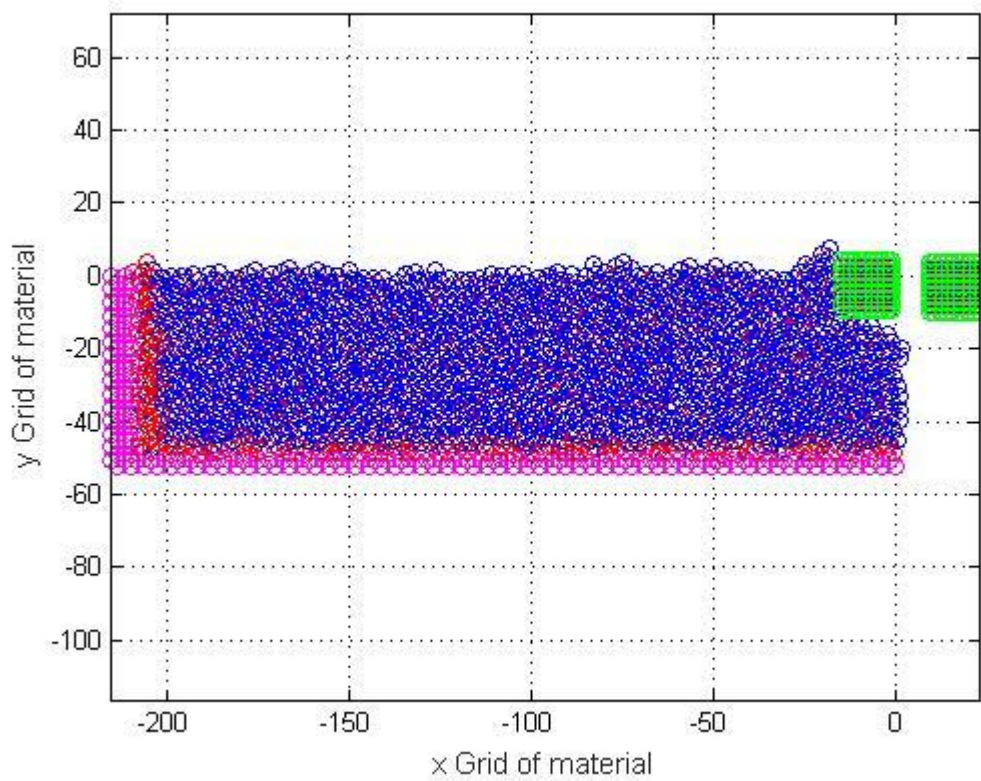
Από τα διαγράμματα των δυνάμεων κατά τους άξονες x και y (Εικόνες 5.4-5.5), είναι αντιληπτό ότι οι δυνάμεις παρουσιάζουν έντονη διακύμανση, όπως αναμενόταν. Οι τιμές των δυνάμεων είναι γενικά μεγαλύτερες κατά τον οριζόντιο άξονα x σε σύγκριση με τον κατακόρυφο y, ενώ η τάση όλων των δυνάμεων και του εύρους των διακυμάνσεων είναι γενικά αυξητική. Τα παραπάνω ισχύουν για όλες τις σειρές προσομοιώσεων. Στην προκειμένη περίπτωση, οι δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης παρουσιάζουν μέσες τιμές κατά x και y, είναι $F_{x\mu}=21.21nN$ και $F_{y\mu}=7.17nN$, αντιστοίχως. Το ύψος του αποβλίττου είναι 31 Å και τα άτομα που το αποτελούν είναι 64.

5.2.2 Προσομοίωση 1b

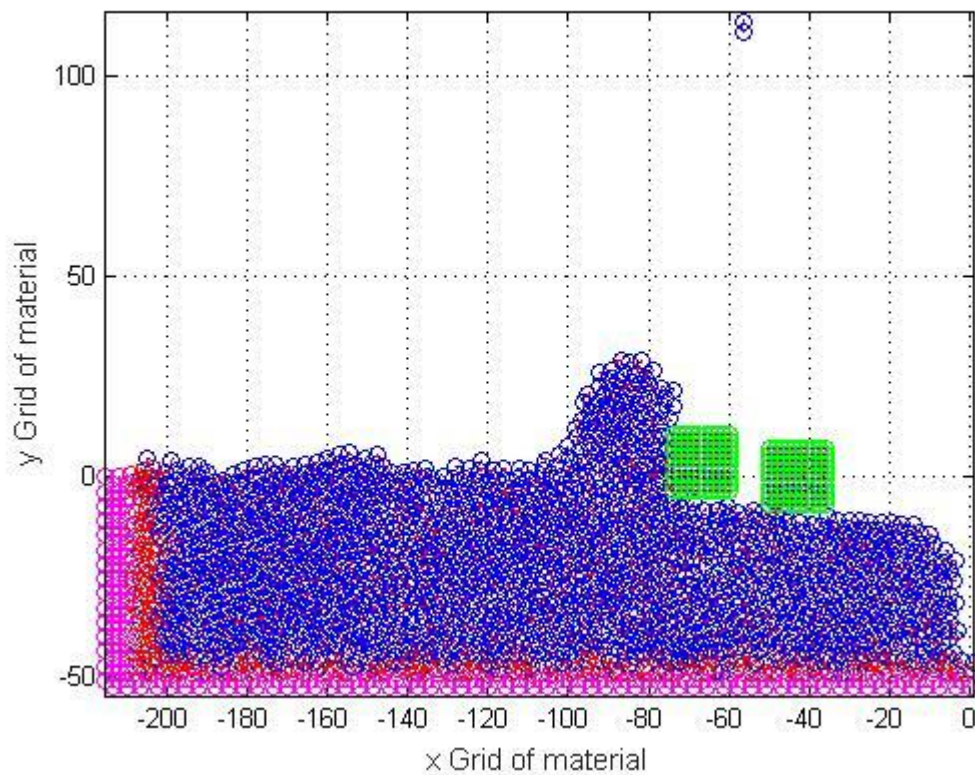
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 1b είναι :

Προσομοίωση 1b	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 1 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	0 ^ο
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 2 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	0 ^ο
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	10 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	246 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	1800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 1	100
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 2	100
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	10 fsec

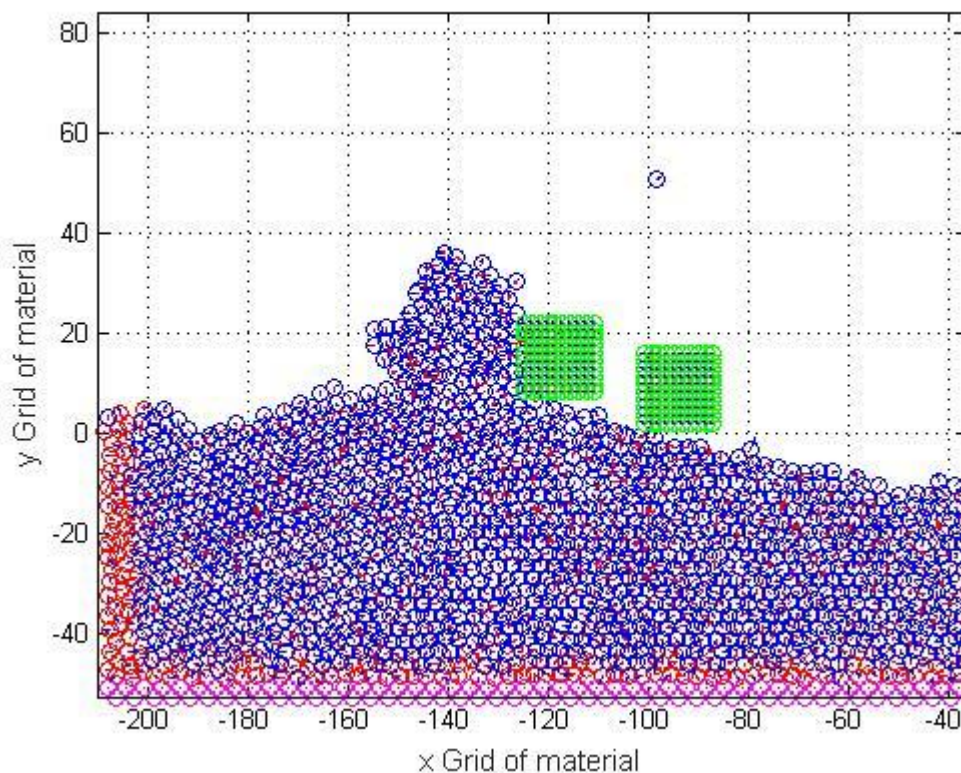
Πίνακας 5.2: Παράμετροι προσομοίωσης 1b



Εικόνα 5.7: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης κατά την έναρξη της κατεργασίας



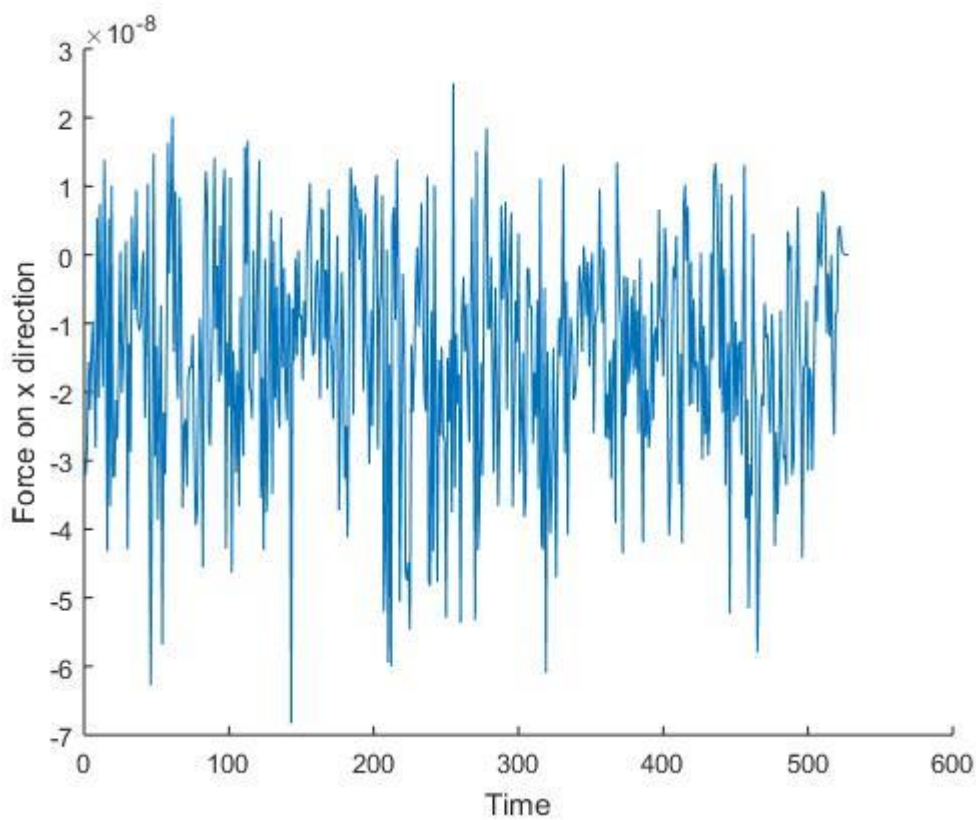
Εικόνα 5.8: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας



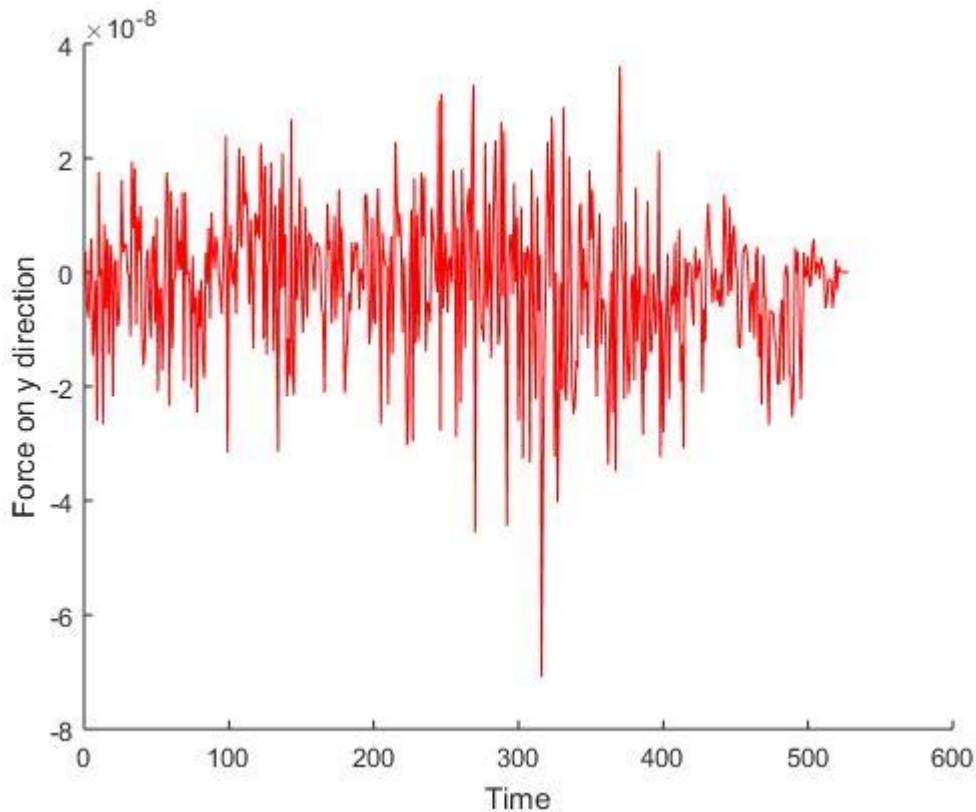
Εικόνα 5.9: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Από τα στιγμιότυπα της προσομοίωσης, παρατηρούμε ότι καθώς το βάθος κοπής αυξάνεται, αυξάνεται και η έκταση της πλαστικής παραμόρφωσης μπροστά από το κοπτικό εργαλείο. Όπως εξελίσσεται η διεργασία, η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας φαίνεται να είναι εφάμιλλη με αυτήν της προηγούμενης περίπτωσης. Όμως, προς το τέλος της προσομοίωσης και καθώς ο κόκκος βγαίνει από το τεμάχιο κατεργασίας, η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας μειώνεται σε μικρό βαθμό και παρατηρούμε ότι δημιουργούνται κενά και αποκολλήσεις ατόμων. Λόγω των δυσμορφιών που προκύπτουν, οι αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα άτομα γίνονται ακόμη πιο έντονες, με αποτέλεσμα κατά τη λήξη της προσομοίωσης, να είναι πιο έντονη η ανωμαλία στη μορφή της κατεργασμένης επιφάνειας, όπως επίσης και η αύξηση της τραχύτητας. Ακόμα όμως και στην ακατέργαστη επιφάνεια, (κοντά στην περιοχή του αποβλίττου), μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι κατά τη διάρκεια της κατεργασίας, σταδιακά τα άτομα αρχίζουν να μετατοπίζονται με πιο έντονο ρυθμό και να τείνουν να φύγουν από τις αρχικές τους θέσεις πιο γρήγορα

σε σχέση με την προσομοίωση με μικρότερο βάθος κοπής. Το σχήμα του αποβλίττου σε αυτή την περίπτωση μοιάζει περισσότερο με θραύσμα αποκοπής που δημιουργείται (chipformation) κατά την κατεργασία της λείανσης με κόκκους, παρά με συνεχές απόβλητο κοπής. Εκτός από το σχηματισμό του αποβλίττου, και η ελαφρώς κεκλιμένη κατεργασμένη επιφάνεια (με διακριτά καλύτερη ποιότητα από κατεργασμένες επιφάνειες αντίστοιχων μελετών κοπής) είναι χαρακτηριστικά της κατεργασίας της λείανσης με κόκκους και των μηχανισμών με τους οποίους αυτή εξελίσσεται.



Εικόνα 5.10: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.11: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

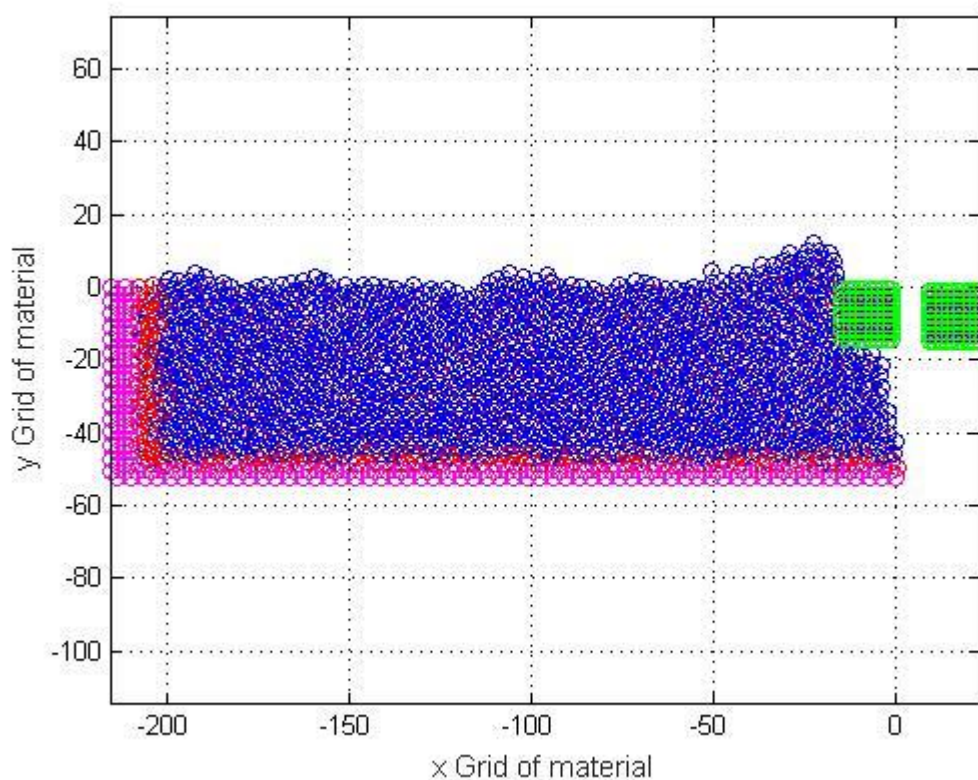
Σε αυτή την περίπτωση προσομοίωσης, οι δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης παρουσιάζουν μέσες τιμές κατά x και y, $F_{x\mu}=23.06nN$ και $F_{y\mu}=3.41nN$, αντιστοίχως. Παρατηρούμε ότι η δύναμη κοπής F_x εξακολουθεί να είναι μεγαλύτερη από τη δύναμη κοπής F_y , κάτι που συμβαίνει σε όλες τις προσομοιώσεις που δεν έχει το κοπτικό εργαλείο κάποια κλίση. Επιπλέον, παρατηρούμε ότι οι δυνάμεις κοπής κατά x, με την αύξηση του βάθους κοπής, έχουν αυξηθεί. Συγκεκριμένα, για τη δύναμη κοπής F_x η αύξηση είναι της τάξης του 8.72%, ενώ για την F_y η μείωση είναι της τάξης του 52%. . Το ύψος του αποβλίττου είναι 38 Å και τα άτομα που το αποτελούν είναι 100.

5.2.3 Προσομοίωση 1c

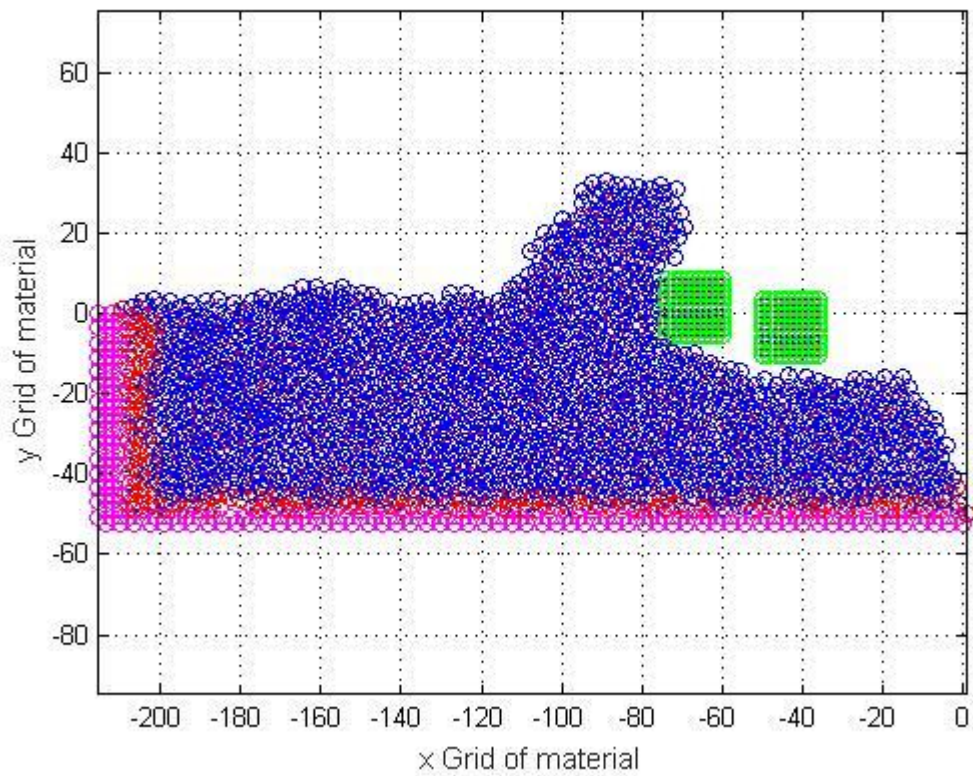
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 1b είναι :

Προσομοίωση 1c	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 1 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	0 ^ο
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 2 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	0 ^ο
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	10 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	246 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	1800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 1	100
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 2	100
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	10 fsec

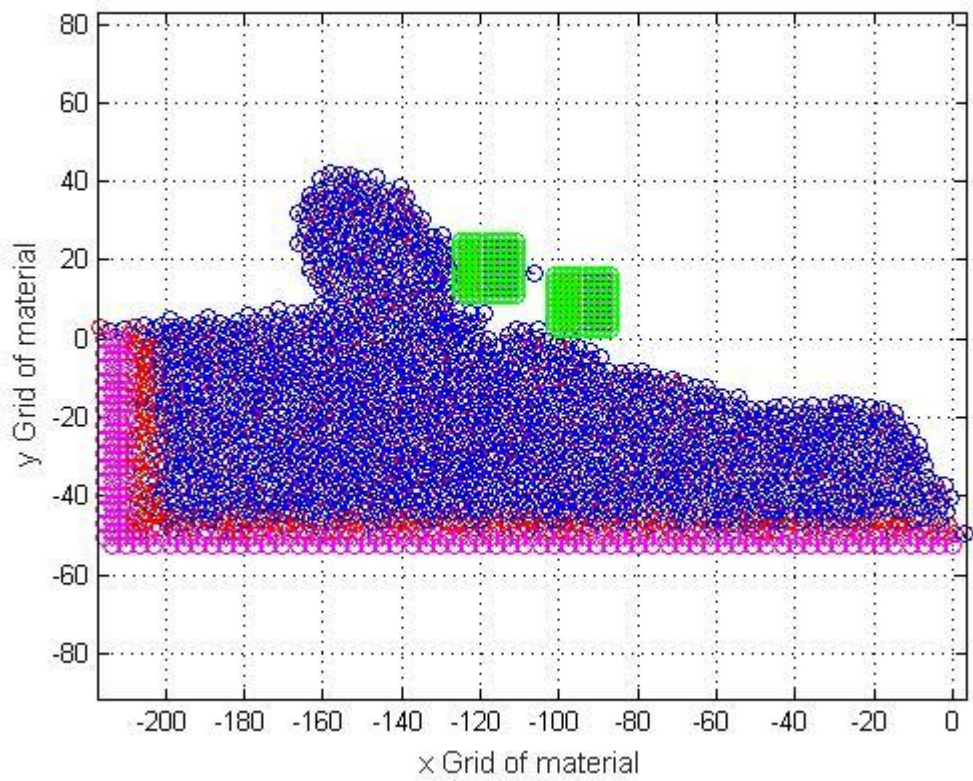
Πίνακας 5.3: Παράμετροι προσομοίωσης 1c



Εικόνα 5.12: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης κατά την έναρξη της κατεργασίας

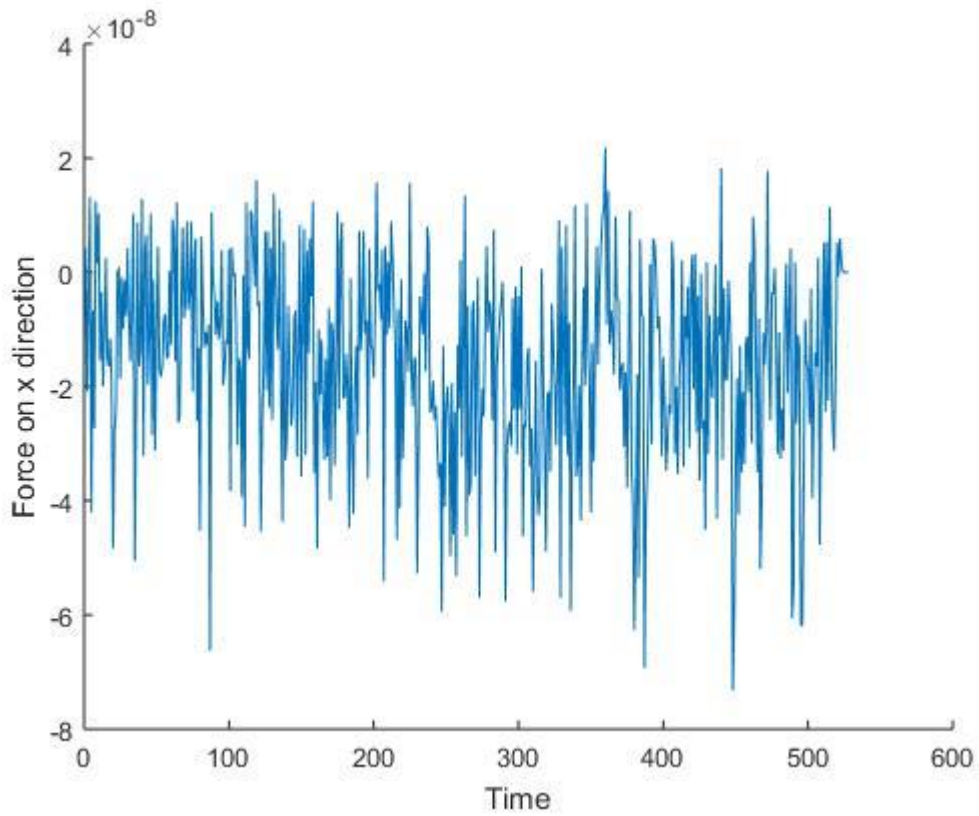


Εικόνα 5.13: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας

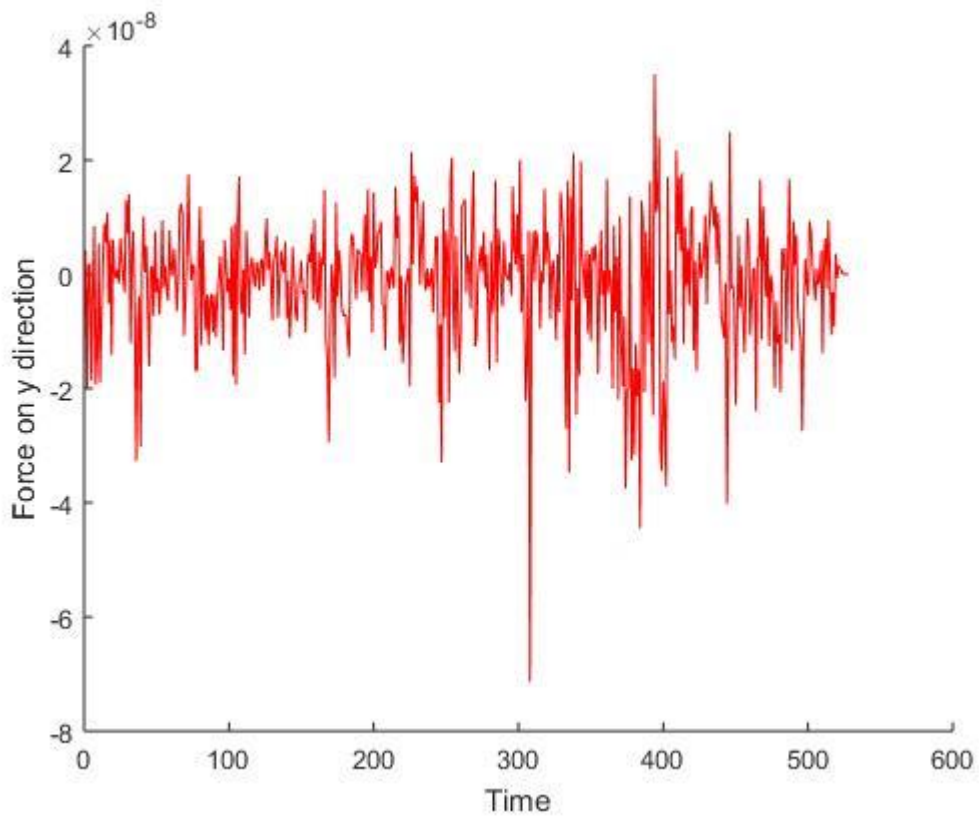


Εικόνα 5.14: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Όπως παρατηρούμε, με περαιτέρω αύξηση του βάθους κοπής, η πλαστική παραμόρφωση του υλικού είναι πολύ πιο έντονη και μειώνεται αισθητά η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας κατά τη διάρκεια της κατεργασίας. Παρόλα αυτά, στο τελευταίο στιγμιότυπο η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας παρουσιάζει μια σχετικά ικανοποιητική ομαλότητα, αναφορικά με τη μηδενική γωνία αποβλήτου και την διεύθυνση της ταχύτητας. Άλλωστε, από το δεύτερο κιόλας στιγμιότυπο, φαίνεται ότι τα άτομα αποκτούν μεγαλύτερες ταχύτητες από ότι προηγουμένως, οι οποίες μάλιστα αυξάνονται με μεγαλύτερο βαθμό και για μεγαλύτερο πλήθος ατόμων. Οι ταχύτητες αυτές λοιπόν αυξάνονται αισθητά κατά τη διάρκεια της κατεργασίας και σε ορισμένες περιπτώσεις οδηγούν σε αποκολλήσεις ατόμων. Σε κάποιες φάσεις μάλιστα, φαίνεται να δημιουργούνται τάσεις να παρουσιαστούν στο τεμάχιο κενά υλικού, όμως καθώς τα άτομα του υλικού ηρεμούν αφού απομακρυνθεί ο κόκκος από το χώρο τους και δεν επηρεάζονται από την κατεργασία άμεσα, το πλέγμα παραμένει συμπαγές, παρά το ότι έχουμε ελάχιστες αποκολλήσεις ατόμων. Στο τελευταίο στιγμιότυπο παρατηρούμε, όπως και στην προηγούμενη περίπτωση, ότι ο σχηματισμός του αποβλίττου είναι συνεχής, έως ότου εξέλθει ο κόκκος λείανσης από το τεμάχιο και έχουμε αποκόλληση του αποβλήτου και δημιουργία θραύσματος (ρινίσματος). Μέχρι τότε ο σχηματισμός του αποβλίττου είναι συνεχής, αλλά μεταβάλλεται αισθητά σε όγκο και σε σχήμα, σε σχέση με την περίπτωση 1b. Παρατηρούμε λοιπόν ότι αυξάνεται το απόβλιττο τόσο σε ύψος όσο και στην ποσότητα των ατόμων που το αποτελούν.



Εικόνα 5.15: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου

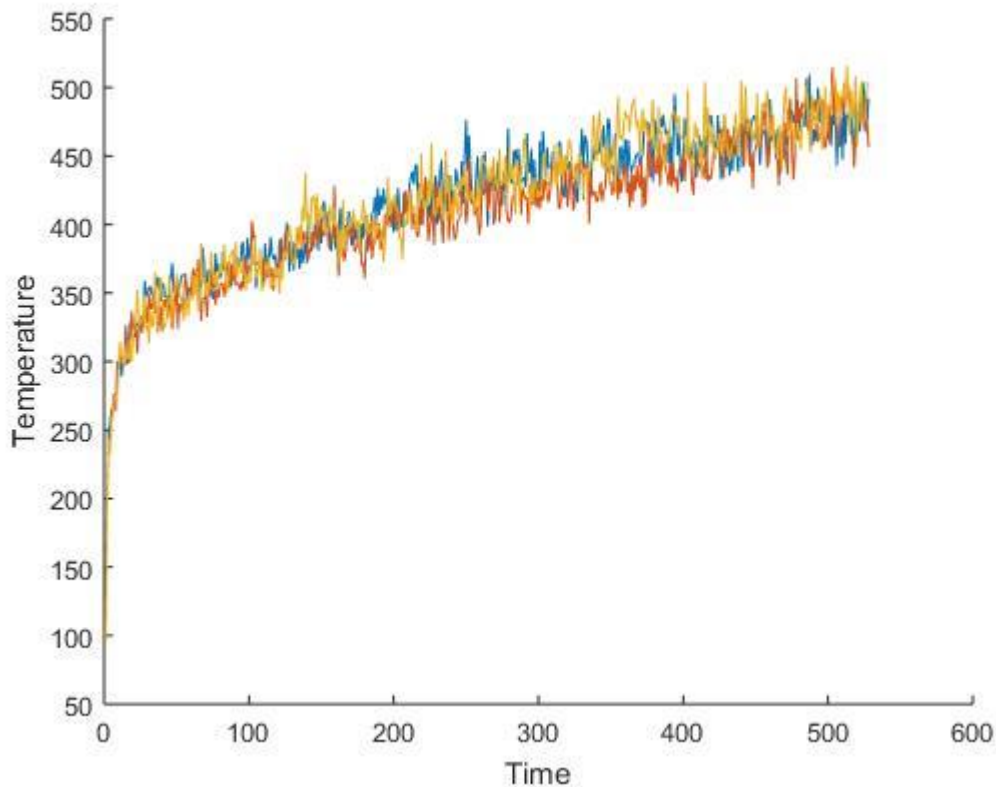


Εικόνα 5.16: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

Όσον αφορά στις δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης που προκύπτουν με περαιτέρω αύξηση του βάθους λείανσης, αυτές συνεχίζουν να αυξάνουν και παρουσιάζουν μέσες τιμές κατά x και y , είναι $F_{x\mu}=24.76nN$ και $F_{y\mu}=2.45nN$, αντιστοίχως. Όπως και προηγουμένως, παρατηρούμε ότι οι δυνάμεις κοπής, με την αύξηση του βάθους κοπής, έχουν αυξηθεί. Συγκεκριμένα, για τη δύναμη κοπής F_x η αύξηση είναι της τάξης του 7.37%, ενώ για την F_y η μείωση είναι της τάξης του 28.15%. Παρατηρούμε λοιπόν ότι η αύξηση της δύναμης κοπής κατά την οριζόντια διεύθυνση F_x είναι αρκετά μικρότερη από την αντίστοιχη μείωση της δύναμης κοπής κατά την κατακόρυφη διεύθυνση F_y . Το ύψος του αποβλήτου είναι 42 Å και τα άτομα που το αποτελούν είναι 148.

5.2.4 Παρατηρήσεις

Με το πέρας της πρώτης σειράς προσομοιώσεων, αξίζει να σημειώσουμε κάποια πράγματα. Αρχικά παρατηρούμε στο διάγραμμα 5.17 τις σωρευτικές θερμοκρασίες ανά βάθος κοπής. Με **μπλε** παριστάνουμε τη θερμοκρασία για βάθος κοπής 5, με **κόκκινο** για βάθος κοπής 10 και με **πορτοκαλί** την θερμοκρασία για βάθος κοπής 15. Παρατηρούμε ότι οι θερμοκρασίες κυμαίνονται περίπου στο ίδιο επίπεδο και δεν έχουν ουσιαστικές διαφορές.



Εικόνα 5.17: Σωρευτική θερμοκρασία σε °C των ατόμων του υλικού κατεργασίας ανά βάθος κοπής

5.3 Δεύτερη Σειρά Προσομοιώσεων

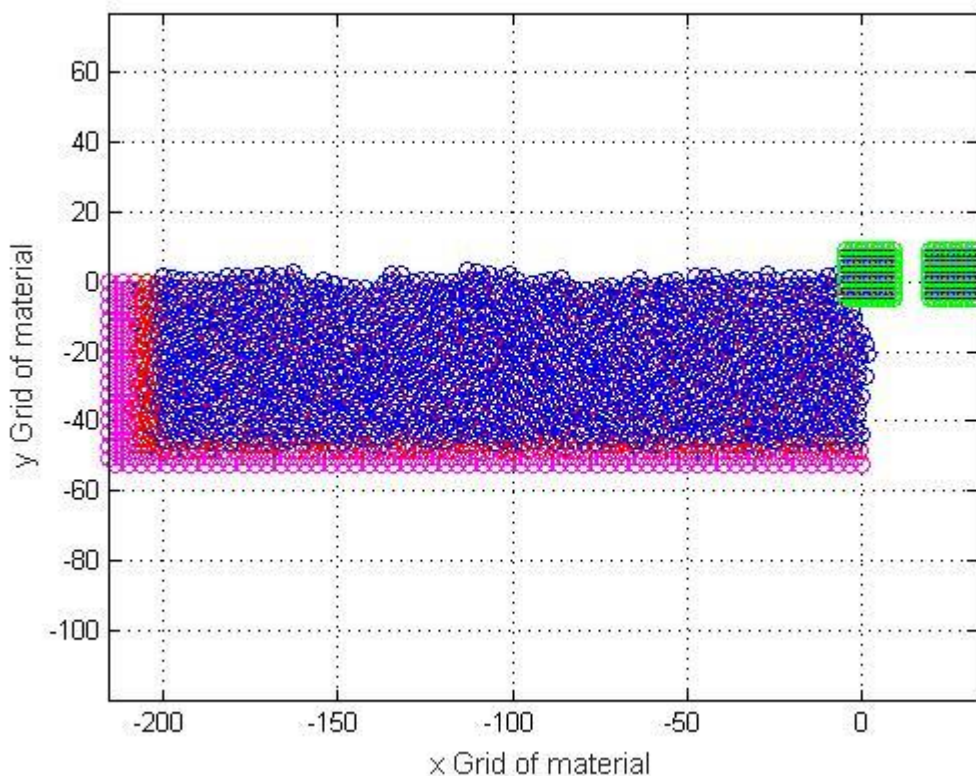
Στη συγκεκριμένη σειρά προσομοιώσεων παρουσιάζεται λείανση τεμαχίου χαλκού με κόκκο διαμαντιού με διπλάσια ταχύτητα κοπής από αυτή της πρώτης περίπτωσης. Οι προσομοιώσεις έλαβαν χώρα για τρία διαφορετικά βάθη λείανσης. Η γωνία αποβλίττου διατηρείται σταθερή στις 0° σε όλη τη σειρά προσομοιώσεων, και σε κάθε περίπτωση παρακολουθούμε την εξέλιξη των δυνάμεων και των θερμοκρασιών για μία πιο επαρκή περιγραφή του φαινομένου.

5.3.1 Προσομοίωση 2a

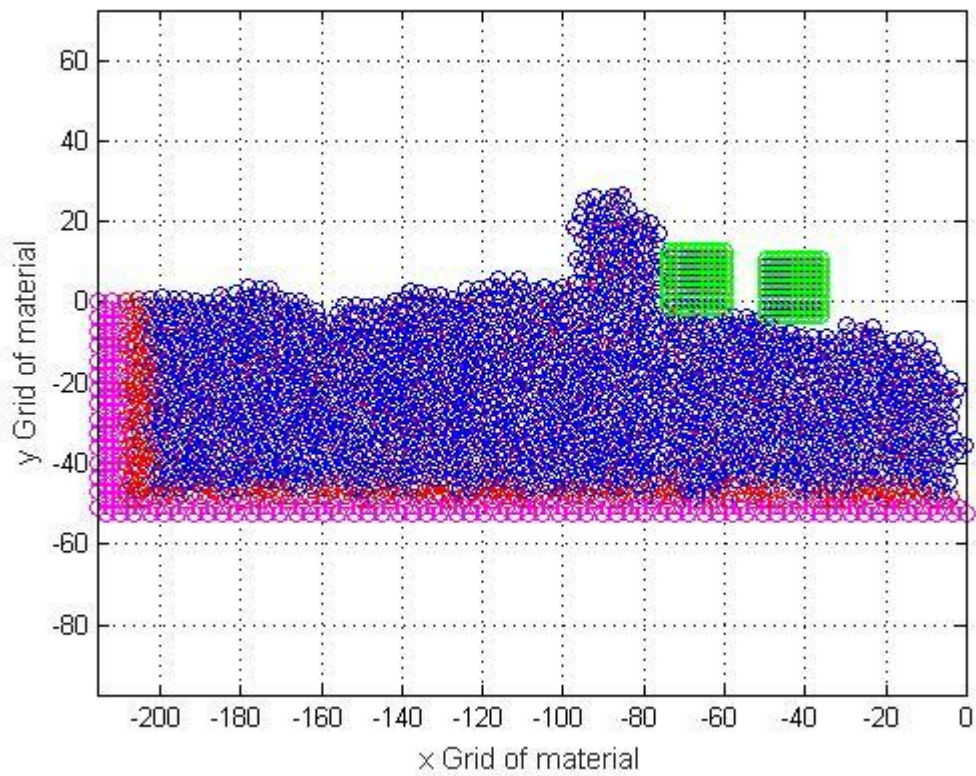
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 2a φαίνονται στον Πίνακα 5.4 και ακολουθούν τα διαγράμματα που αφορούν τα μετρούμενα μεγέθη.

Προσομοίωση 2a	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 1 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	0 ^ο
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 2 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	0 ^ο
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	5 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	492 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	1800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 1	100
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 2	100
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	10 fsec

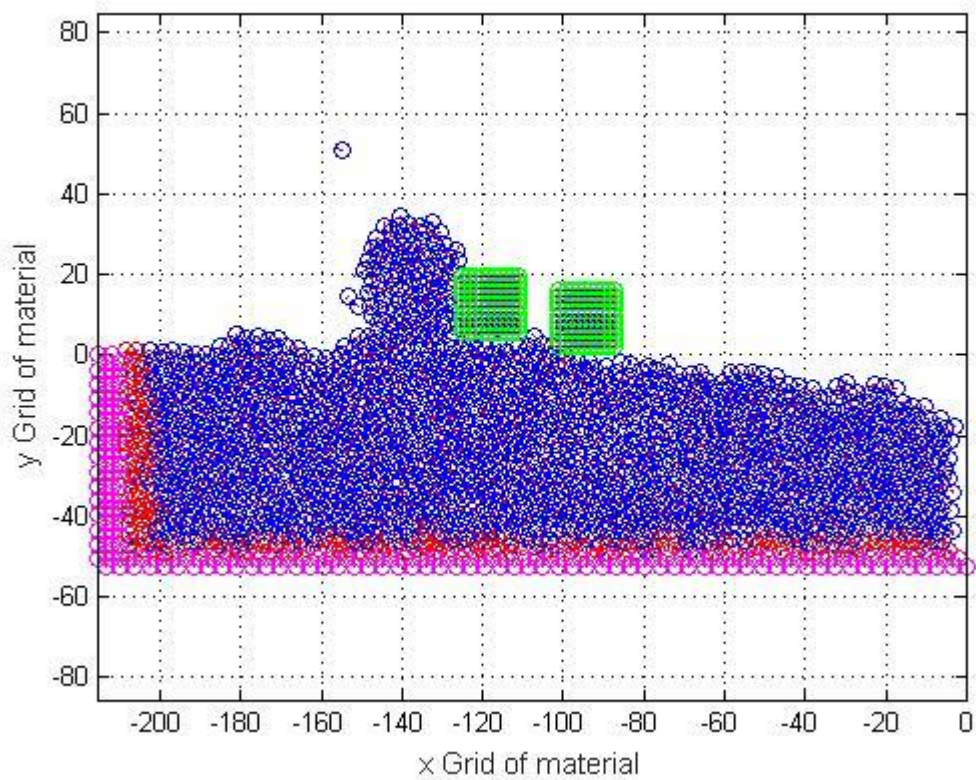
Πίνακας 5.4: Παράμετροι προσομοίωσης 2a



Εικόνα 5.18: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην έναρξη της κατεργασίας



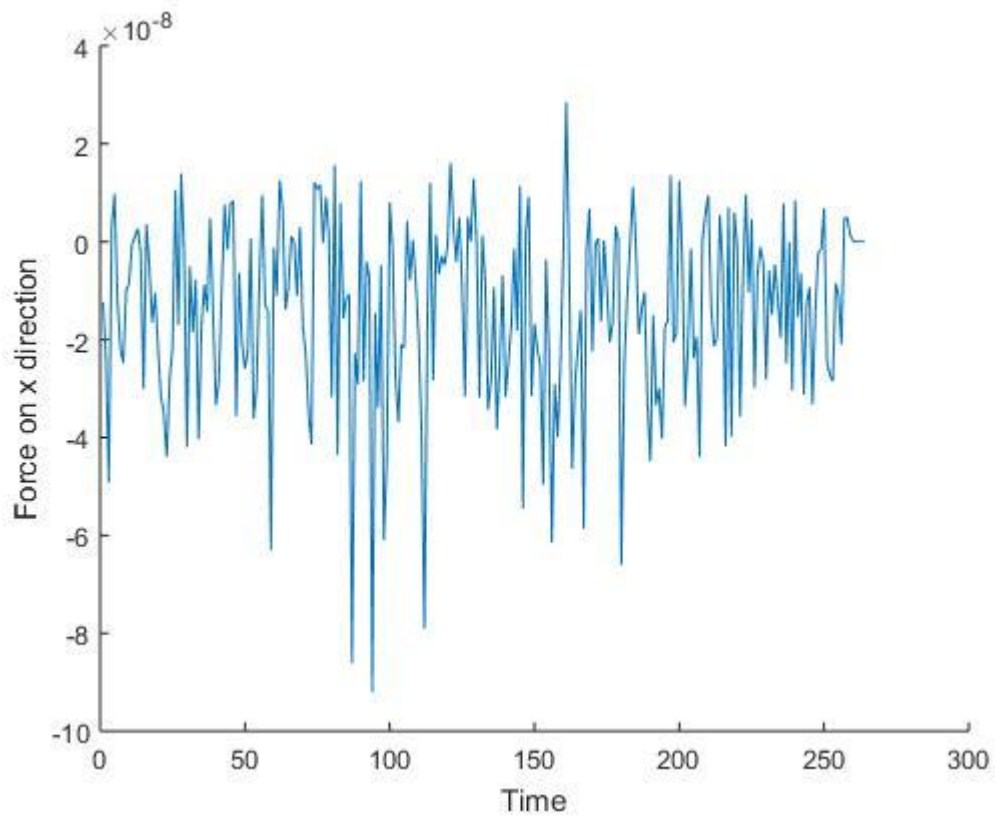
Εικόνα 5.19: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας



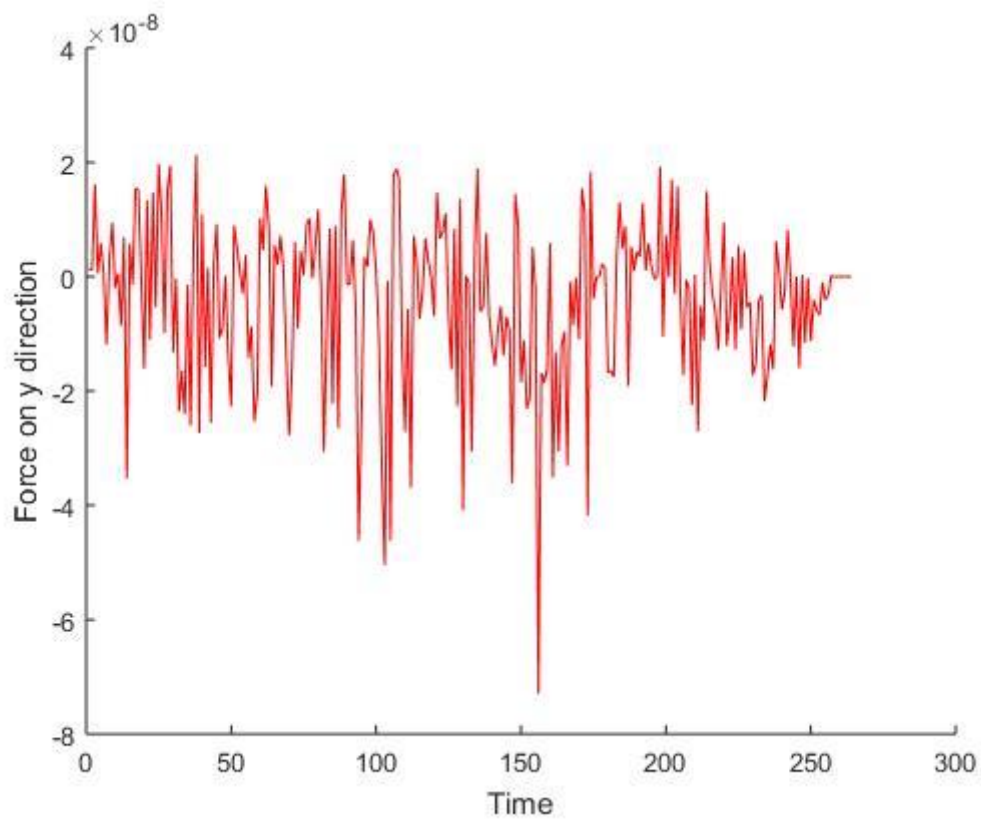
Εικόνα 5.20: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Από τις παραπάνω εικόνες είναι φανερό ότι η πλαστική παραμόρφωση του υλικού είναι πολύ πιο έντονη και μειώνεται σε μεγάλο βαθμό η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας κατά τη διάρκεια της κατεργασίας. Το απόβλιττο που παράγεται φαίνεται να διασπάται αρκετά συχνά και σχετικά εύκολα κάτω από αυτές τις συνθήκες, προκαλώντας και θραύσματα (chipformation), ενώ διατηρεί τη μορφή που ικανοποιεί τις προσομοιώσεις λείανσης (όπως και η 2η σειρά προσομοιώσεων). Τα άτομα αποκτούν μεγαλύτερες ταχύτητες από ότι στις προηγούμενες περιπτώσεις, οι οποίες μάλιστα αυξάνονται με μεγαλύτερο βαθμό και για μεγαλύτερο πλήθος ατόμων. Οι ταχύτητες αυτές λοιπόν αυξάνονται αισθητά κατά τη διάρκεια της κατεργασίας και σε συνδυασμό με τις μεγάλες δυνάμεις κοπής που αναπτύσσονται, οδηγούν σε αποκολλήσεις ατόμων. Έτσι, από πολύ νωρίς στην προσομοίωση, παρουσιάζονται κενά υλικού στο τεμάχιο κατεργασίας, ενώ έχουμε συνεχείς αποκολλήσεις ατόμων, τόσο από τον λειαντικό κόκκο, όσο και από το τεμάχιο. Ο μηχανισμός σχηματισμού αποβλήτου λειτουργεί όπως και στη δεύτερη σειρά προσομοιώσεων, με τη μόνη διαφορά, ότι οι θλιπτικές τάσεις που αναπτύσσονται αυτή τη φορά είναι πολύ μεγαλύτερες και πιέζουν μέχρι και τα χαμηλότερα στρώματα ατόμων του τεμαχίου, προκαλώντας από πολύ νωρίς στην προσομοίωση σημαντική διαρροή υλικού, καθ' όλη τη διάρκεια της κατεργασίας. Στις Εικόνες 5.21-5.22 έχουμε τα διαγράμματα των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου.

Οι δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης που προκύπτουν λοιπόν, παρουσιάζουν μέσες τιμές κατά x και y , $F_{x\mu}=22.35nN$ και $F_{y\mu}=6.85nN$, αντιστοίχως. Οι τιμές όπως διαπιστώνουμε, είναι μεγαλύτερες από τις αντίστοιχες στην πρώτη σειρά προσομοιώσεων. Η αύξηση αυτή οφείλεται εξ ολοκλήρου στη διπλάσια ταχύτητα κοπής, όπως προαναφέρθηκε. Ο συνδυασμός των παραπάνω με το γεγονός ότι τα άτομα του αποβλήτου «στριμώχονται» μεταξύ του κόκκου και των άκαμπτων συνοριακών ατόμων στο τέλος της προσομοίωσης, δικαιολογεί απόλυτα τις μεγαλύτερες τιμές που συναντούμε στις αναπτυσσόμενες δυνάμεις κοπής. Το ύψος του αποβλήτου είναι 38 \AA και τα άτομα που το αποτελούν είναι 114.



Εικόνα 5.21: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.22: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

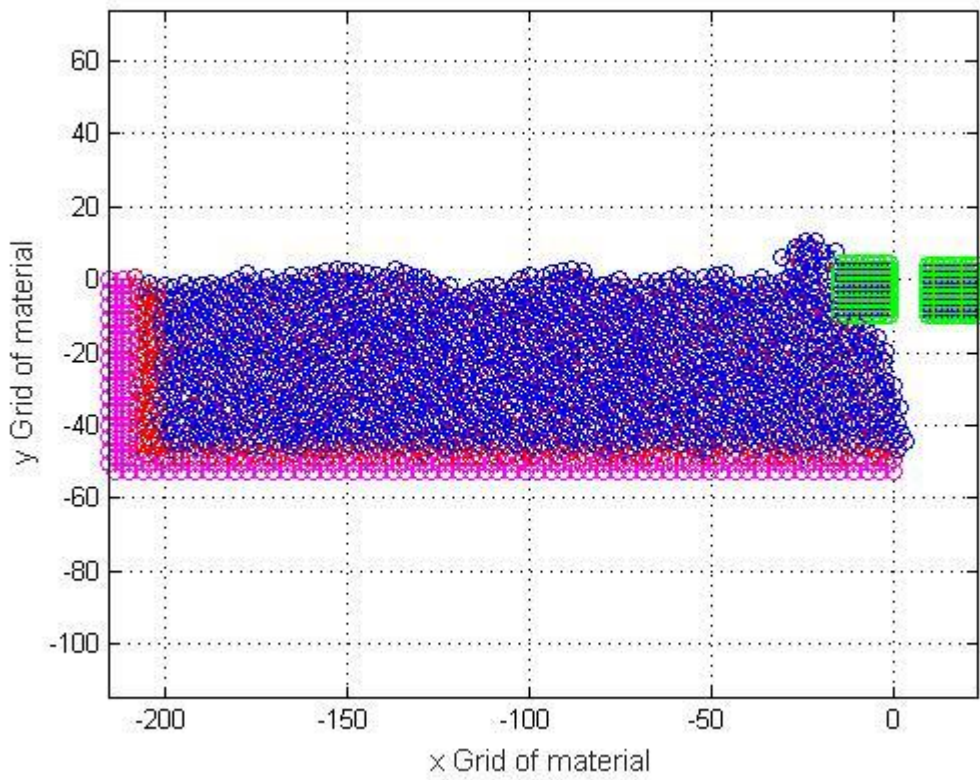
5.3.2 Προσομοίωση 2b

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 2b φαίνονται στον Πίνακα 5.5 και ακολουθούν τα διαγράμματα που αφορούν τα μετρούμενα μεγέθη.

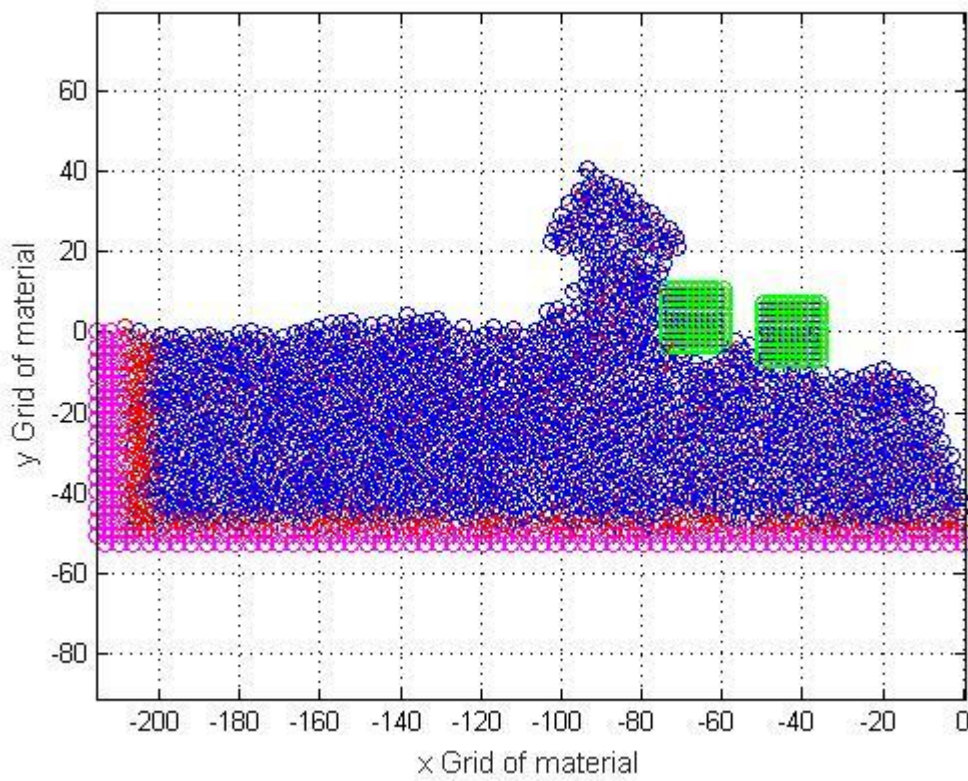
Προσομοίωση 2b	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 1 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	0 ^ο
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 2 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	0 ^ο
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	10 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	492 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	1800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 1	100
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 2	100
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	10 fsec

Πίνακας 5.5: Παράμετροι προσομοίωσης 2b

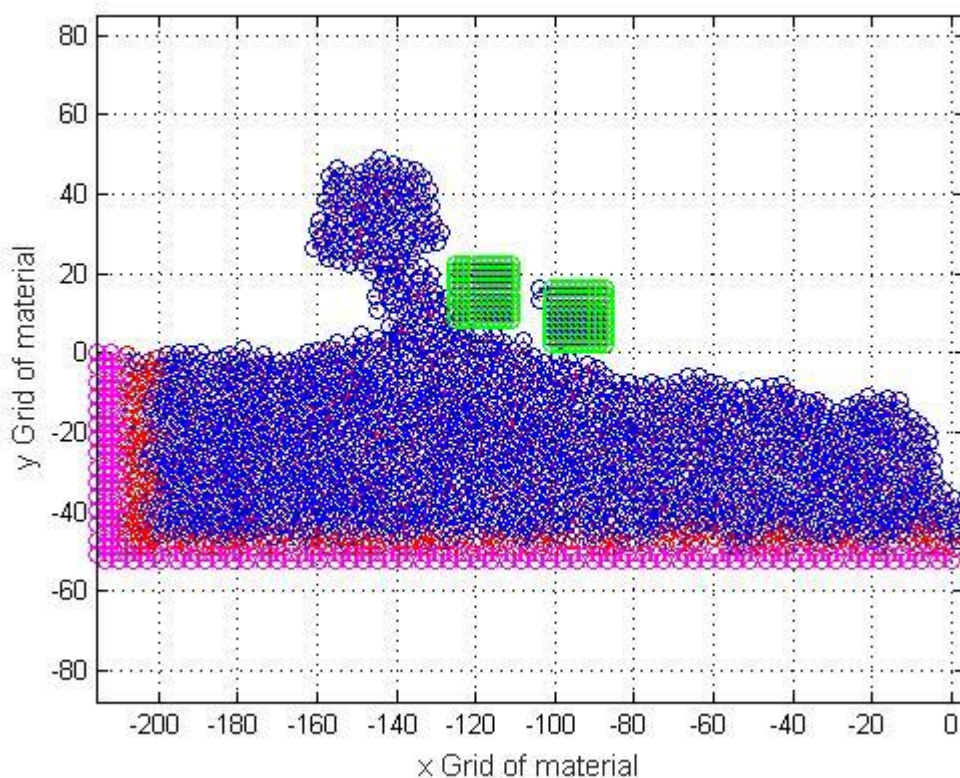
Στις Εικόνες 5.23-5.25 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της κατεργασίας.



Εικόνα 5.23: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην έναρξη της κατεργασίας



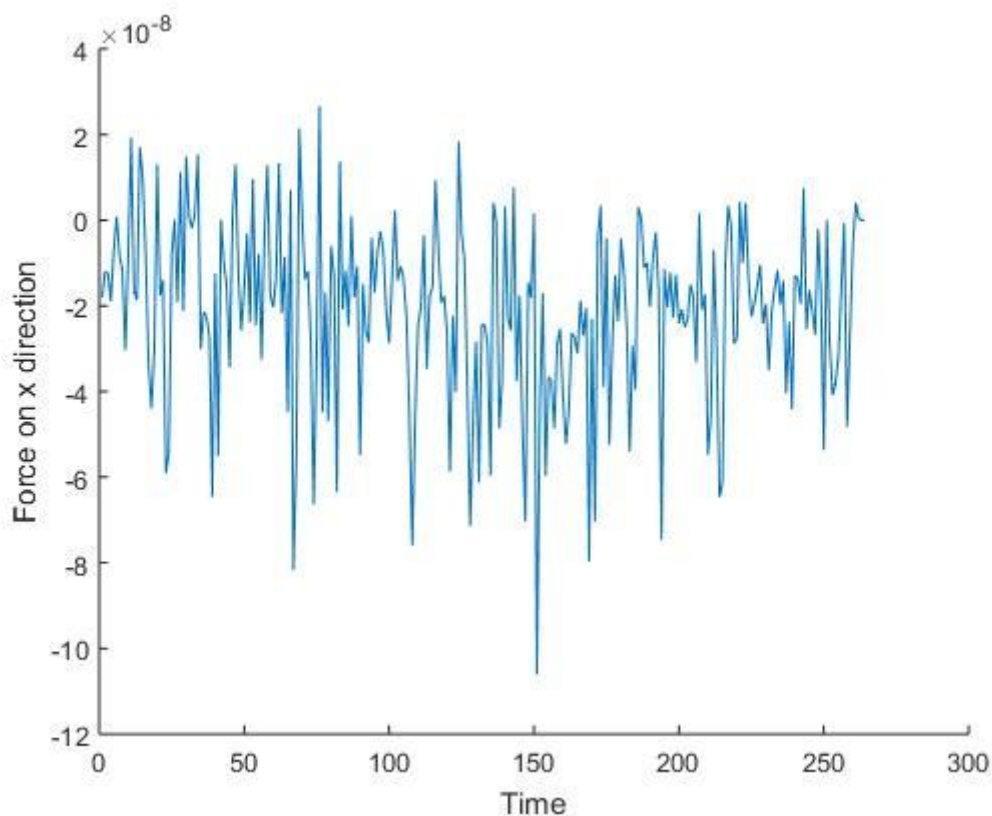
Εικόνα 5.24: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας



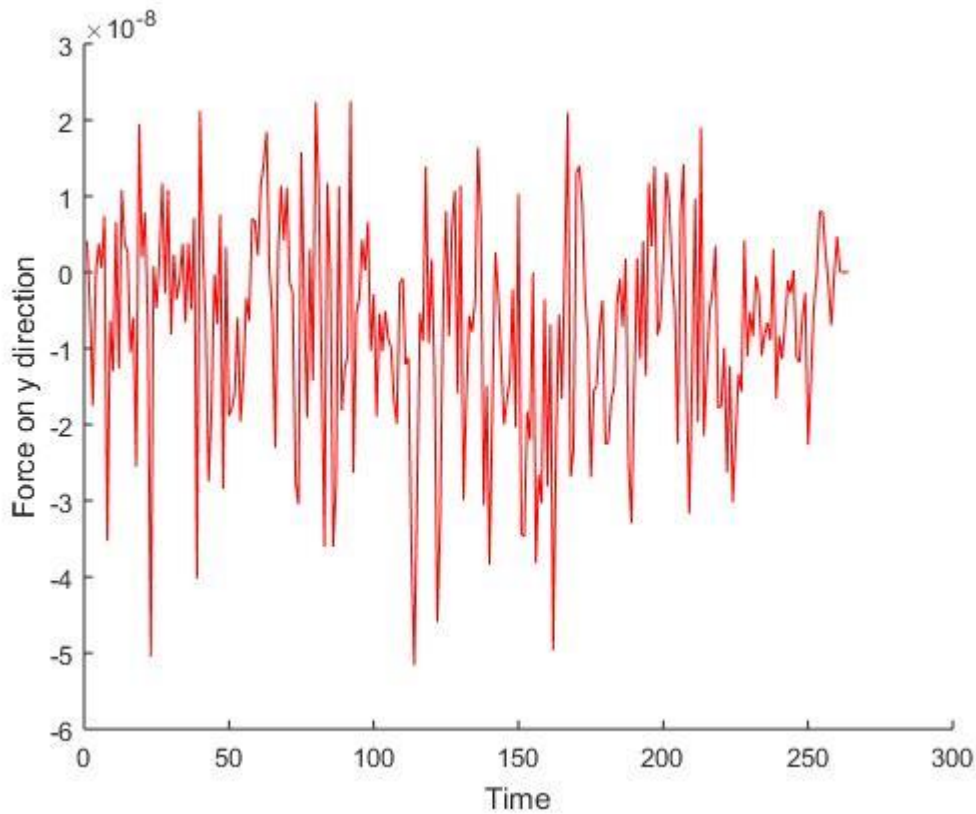
Εικόνα 5.25: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Από τα στιγμιότυπα της προσομοίωσης, παρατηρούμε ότι καθώς το βάθος κοπής αυξάνεται, αυξάνεται και η έκταση της πλαστικής παραμόρφωσης μπροστά από το κοπτικό εργαλείο. Όπως εξελίσσεται η διεργασία, η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας φαίνεται να είναι εφάμιλλη με αυτήν της προηγούμενης περίπτωσης. Όμως, προς το τέλος της προσομοίωσης και καθώς ο κόκκος βγαίνει από το τεμάχιο κατεργασίας, η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας μειώνεται σε μικρό βαθμό και παρατηρούμε ότι δημιουργούνται κενά και εξαρθρώσεις ατόμων. Σε αυτό το στάδιο της προσομοίωσης παρατηρούμε και πάλι ένα είδος φαινομένου “bottle-neck” (λαιμός μπουκαλιού). Ο κόκκος σε αυτή τη φάση πιέζει τα Νευτώνεια άτομα του τεμαχίου έναντι των Συνοριακών ατόμων, με αποτέλεσμα την ανάπτυξη μεγάλων δυνάμεων κοπής, ακριβώς όπως στην προηγούμενη περίπτωση. Λόγω των δυσμορφιών που προκύπτουν, οι αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα άτομα γίνονται ακόμη πιο έντονες, με αποτέλεσμα κατά τη λήξη της προσομοίωσης, να είναι πιο έντονη η ανωμαλία στη μορφή της κατεργασμένης επιφάνειας, όπως επίσης και η αύξηση της τραχύτητας. Ακόμα όμως και στην ακατέργαστη επιφάνεια,

(κοντά στην περιοχή του αποβλήτου) μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι κατά τη διάρκεια της κατεργασίας, σταδιακά τα άτομα αρχίζουν να μετατοπίζονται με πιο έντονο ρυθμό και παρουσιάζονται πολλές περιπτώσεις εξάρθρωσης ατόμων, κυρίως από το απόβλητο αλλά και από το τεμάχιο κατεργασίας. Αυτό μπορεί να φανεί καλύτερα αν παρατηρήσουμε τις ταχύτητες και τις επιταχύνσεις των ατόμων κατά τη διάρκεια της κοπής. Βλέπουμε ότι αυτές αυξάνονται με μεγαλύτερο ρυθμό σε σχέση με την προηγούμενη προσομοίωση και επίσης αυτό συμβαίνει για μεγαλύτερο αριθμό ατόμων. Κατά τα άλλα ο μηχανισμός σχηματισμού αποβλήτου λειτουργεί όπως πριν. Ο λειαντικός κόκκος, καθώς «προχωράει» πάνω στο τεμάχιο, περισσότερο το «σπρώχνει», το πιέζει και τρίβεται επάνω του, παρά το κόβει. Το απόβλητο στο τέλος της κατεργασίας τείνει να αποκολληθεί από το τεμάχιο και να γίνει θραύσμα αποκοπής (chipformation).



Εικόνα 5.26: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.27: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

Οι δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης που προκύπτουν, παρουσιάζουν μέσες τιμές κατά x και y, $F_{x\mu}=33.77nN$ και $F_{y\mu}=11.78nN$, αντιστοίχως. Συγκεκριμένα, για τη δύναμη κοπής F_x η αύξηση είναι της τάξης του 51%, ενώ για την F_y η αύξηση είναι της τάξης του 71%. Το ύψος του αποβλίττου είναι 49 \AA και τα άτομα που το αποτελούν είναι 121.

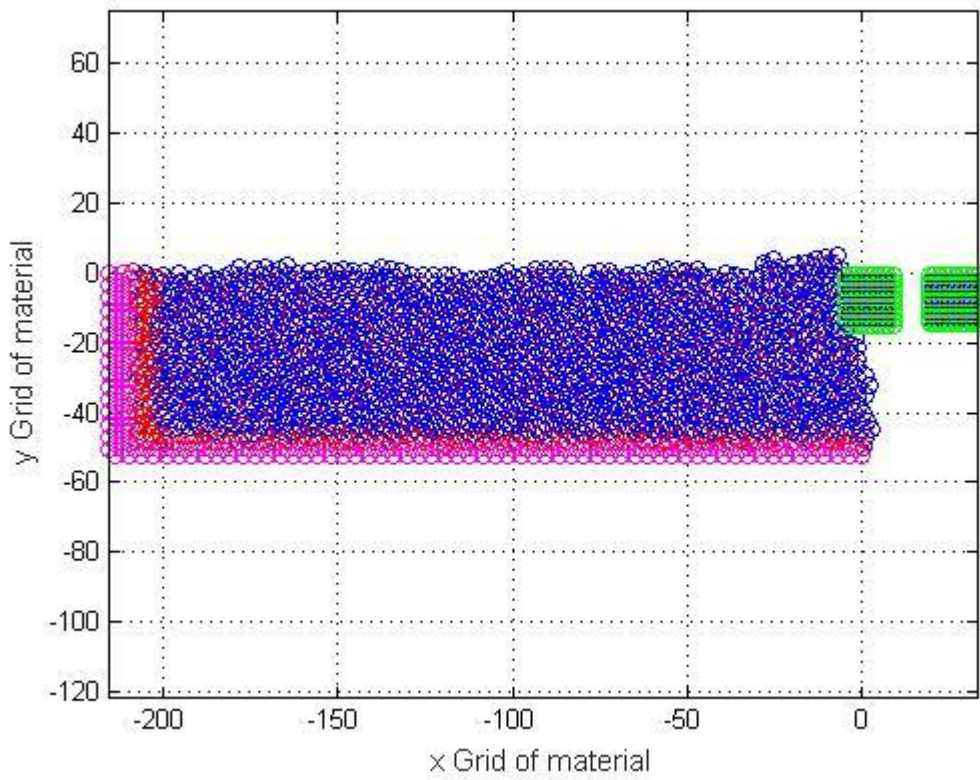
5.3.3 Προσομοίωση 2c

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 2c φαίνονται στον Πίνακα 5.6 και ακολουθούν τα διαγράμματα που αφορούν τα μετρούμενα μεγέθη.

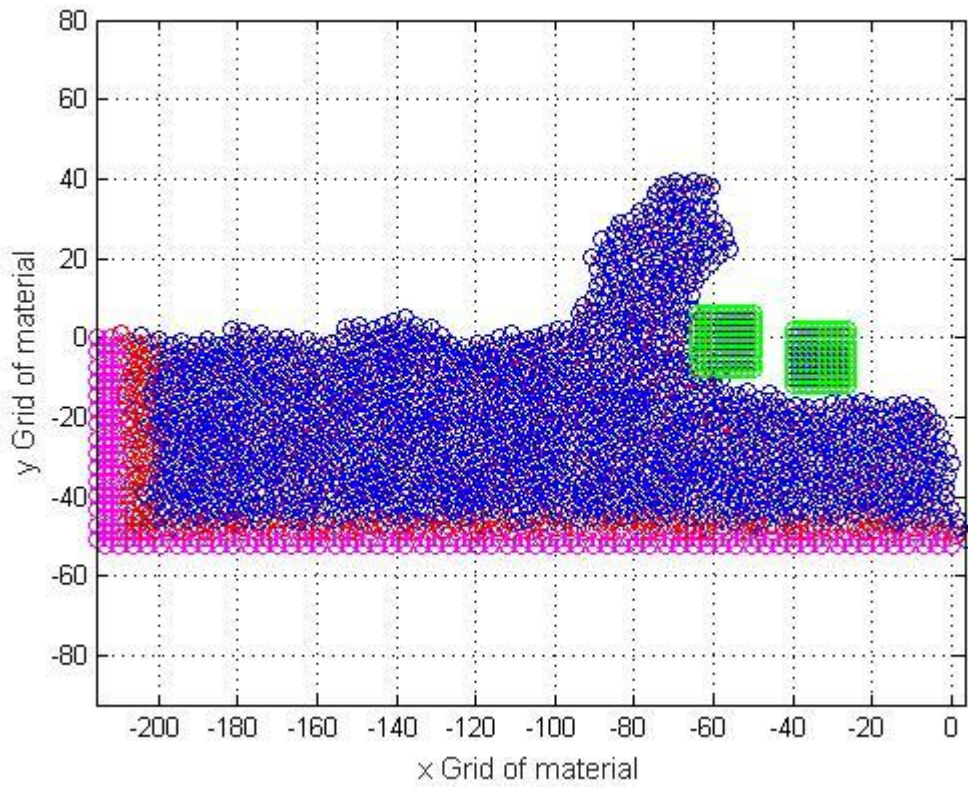
Προσομοίωση 2c	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 1 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	0 ^ο
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 2 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	0 ^ο
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	15 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	492 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	1800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 1	100
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 2	100
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	10 fsec

Πίνακας 5.6: Παράμετροι προσομοίωσης 2c

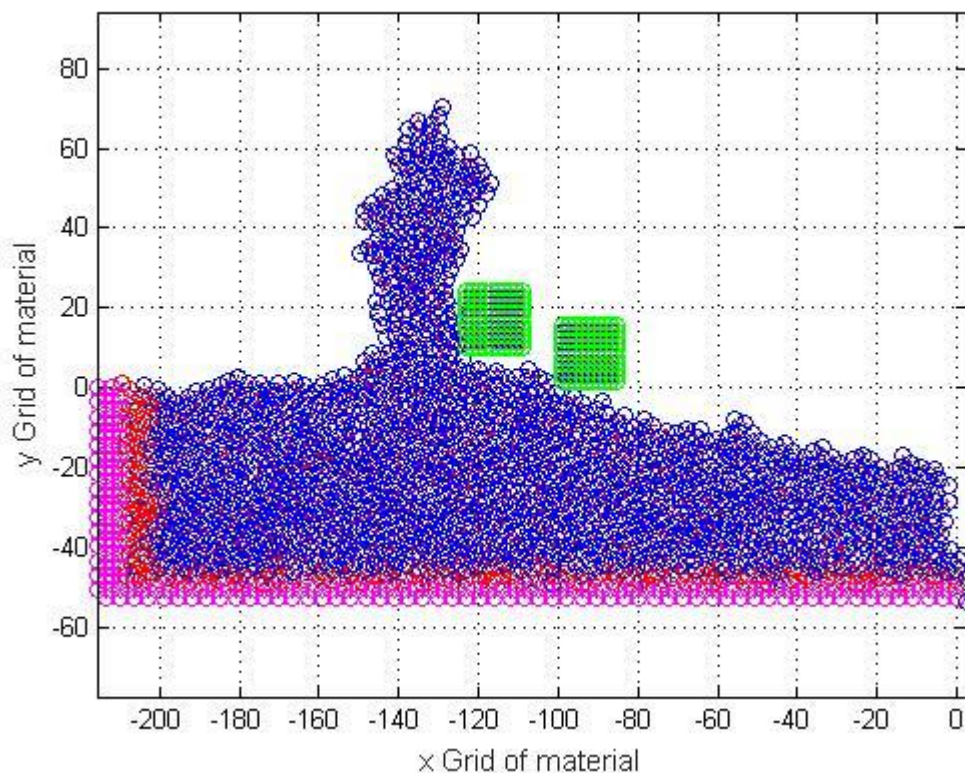
Στις Εικόνες 5.28-5.30 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της κατεργασίας.



Εικόνα 5.28: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην έναρξη της κατεργασίας



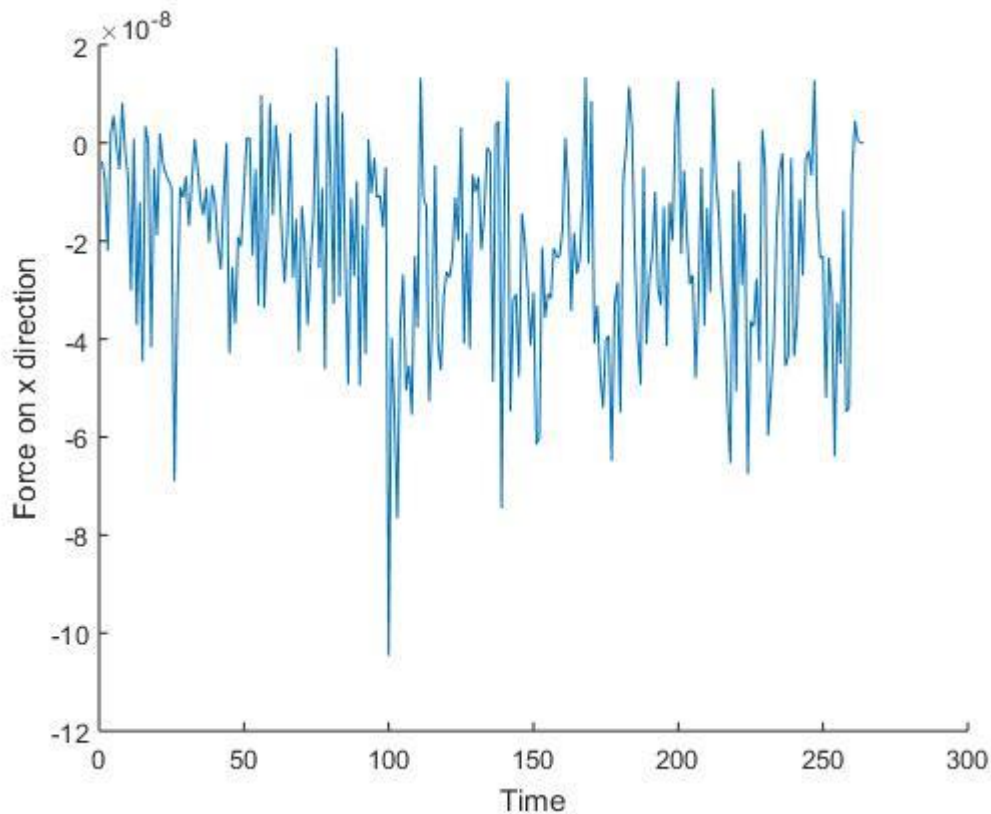
Εικόνα 5.29: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στη μέση της κατεργασίας



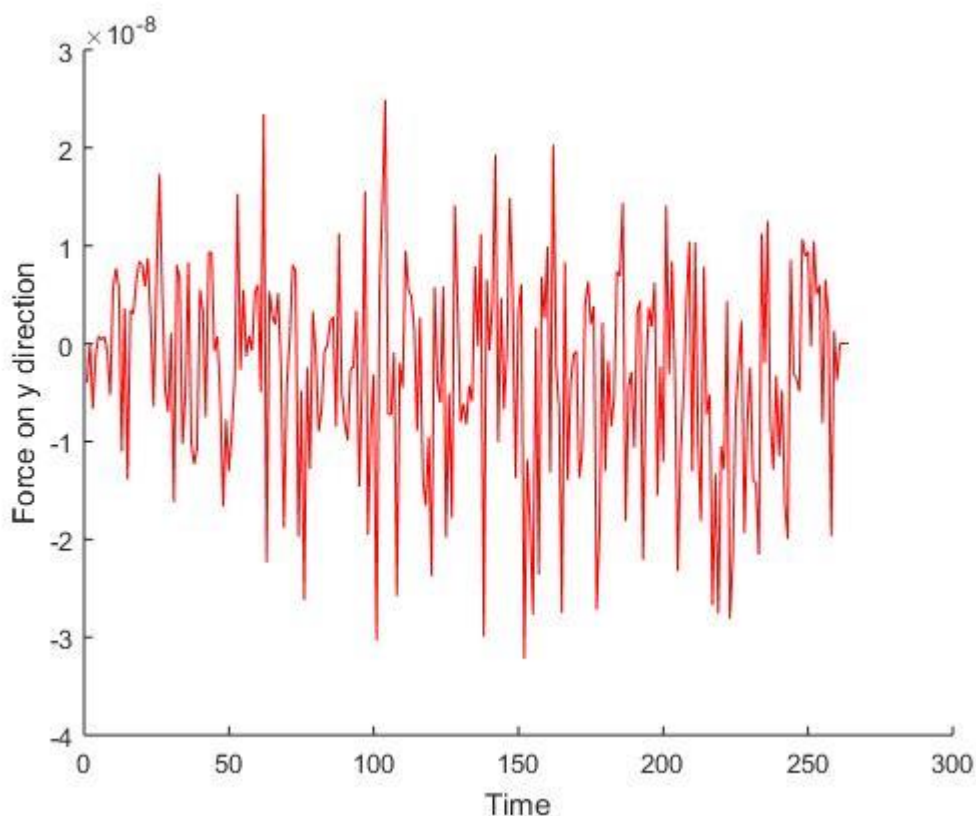
Εικόνα 5.30: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Όπως έχουμε διαπιστώσει και προηγουμένως, καθώς το βάθος κοπής αυξάνεται, αυξάνεται και η έκταση της πλαστικής παραμόρφωσης μπροστά από το κοπτικό εργαλείο. Όπως εξελίσσεται η διεργασία, η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας φαίνεται να είναι παρόμοια με αυτήν της προηγούμενης περίπτωσης. Όμως, προς το τέλος της προσομοίωσης και καθώς ο όγκος του αποβλίττου μεγαλώνει, η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας μειώνεται αρκετά και παρατηρούμε ότι δημιουργούνται κενά και αποκολλήσεις ατόμων. Ο κόκκος πιέζει τα Νευτώνεια άτομα του τεμαχίου έναντι των Συνοριακών του ατόμων, με αποτέλεσμα την ανάπτυξη μεγάλων δυνάμεων κοπής, ακριβώς όπως στην προηγούμενη περίπτωση. Οι θλιπτικές τάσεις που αναπτύσσονται σε αυτή τη φάση είναι πολύ μεγάλες και αναγκάζουν τα χαμηλότερα στρώματα ατόμων, που δεν επηρεάζονται άμεσα από την κατεργασία, να ανασυνταχτούν μέσα στο πλέγμα και να δημιουργηθούν δυσμορφίες στα χαμηλά στρώματα ατόμων κάτω από τον λειαντικό κόκκο και αντίθετα από τη φορά της κίνησής του. Λόγω των δυσμορφιών που προκύπτουν, οι αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα άτομα γίνονται ακόμη πιο έντονες, με αποτέλεσμα κατά τη λήξη της

προσομοίωσης, να είναι πιο έντονη η ανωμαλία στη μορφή της κατεργασμένης επιφάνειας, όπως επίσης και η αύξηση της τραχύτητας. Ο μηχανισμός σχηματισμού αποβλήτου λειτουργεί όπως πριν. Ο λειαντικός κόκκος, καθώς «προχωράει» πάνω στο τεμάχιο, το «σπρώχνει», το πιέζει και τρίβεται επάνω του. Το απόβλητο στο τέλος της κατεργασίας τείνει να αποκολληθεί από το τεμάχιο και να γίνει θραύσμα αποκοπής (chipformation).



Εικόνα 5.31: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα χ συναρτήσει του χρόνου

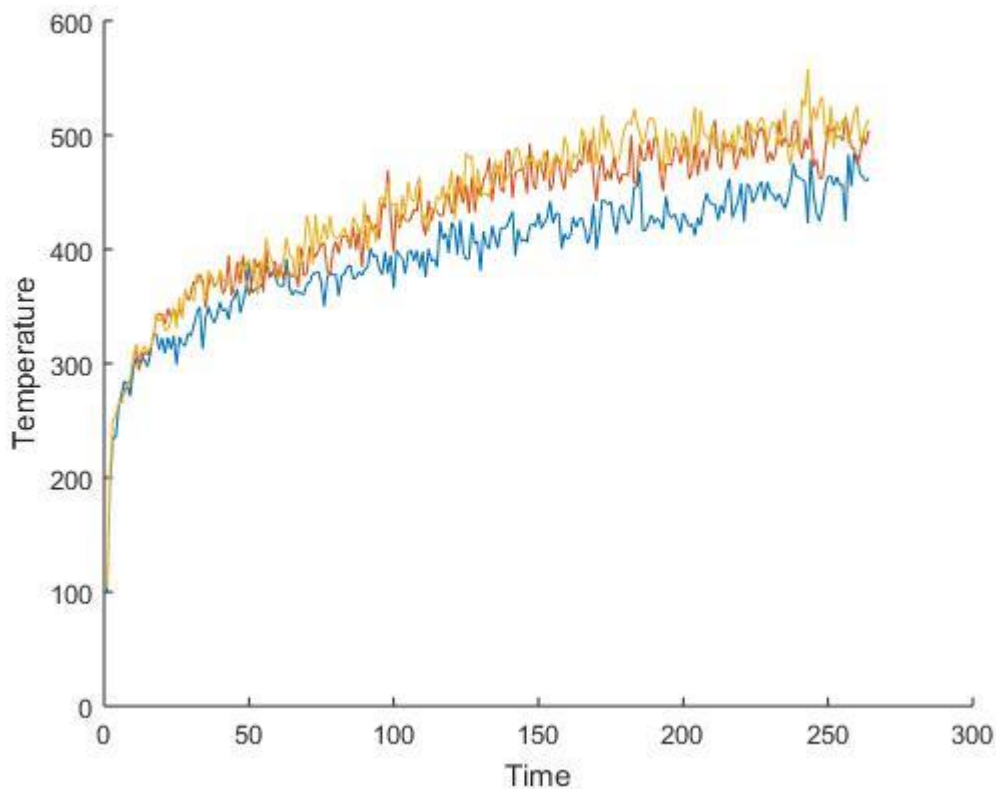


Εικόνα 5.32: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

Οι δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης που προκύπτουν, παρουσιάζουν μέσες τιμές κατά x και y, $F_{x\mu}=34.81$ nN και $F_{y\mu}=4.92$ nN, αντιστοίχως. Οι τιμές, είναι κατά μεγαλύτερες από τις αντίστοιχες στην πρώτη σειρά προσομοιώσεων. Η αύξηση αυτή οφείλεται εξ ολοκλήρου στη νέα ταχύτητα κοπής, όπως προαναφέρθηκε. Επιπλέον, οι μέσες δυνάμεις κοπής του κόκκου στην παρούσα προσομοίωση, σχετικά με τις μέσες δυνάμεις κοπής της περίπτωσης 2b, μετάβαλλονται με την αύξηση του βάθους κοπής,. Συγκεκριμένα, για τη δύναμη κοπής F_x η αύξηση είναι της τάξης του 3.07%, ενώ για την F_y η μείωση είναι της τάξης του 58.2. Το ύψος του αποβλίττου είναι 71 Å και τα άτομα που το αποτελούν είναι 218.

5.3.4 Παρατηρήσεις

Με το πέρας της δεύτερης σειράς προσομοιώσεων, αξίζει να σημειώσουμε επίσης κάποια πράγματα όπως κάναμε και στην πρώτη σειρά. Αρχικά παρατηρούμε στο διάγραμμα 5.33 τις σωρευτικές θερμοκρασίες ανά βάθος κοπής. Με **μπλε** παριστάνουμε τη θερμοκρασία για βάθος κοπής 5 , με **κόκκινο** για βάθος κοπής 10 και με **πορτοκαλί** την θερμοκρασία για βάθος κοπής 15. Παρατηρούμε ότι για το ελάχιστο βάθος κοπής οι διαφορές είναι εμφανέστερες ενώ για τα άλλα δύο βάθη κοπής (10 και 15) οι διαφορές στη θερμοκρασία είναι ελάχιστες. Σε αντίθεση με την 1^η σειρά προσομοιώσεων οι θερμοκρασίες δεν κυμαίνονται όλες στα ίδια επίπεδα.



Εικόνα 5.33: Σωρευτική θερμοκρασία σε °C των ατόμων του υλικού κατεργασίας ανά βάθος κοπής

5.4 Τρίτη Σειρά Προσομοιώσεων

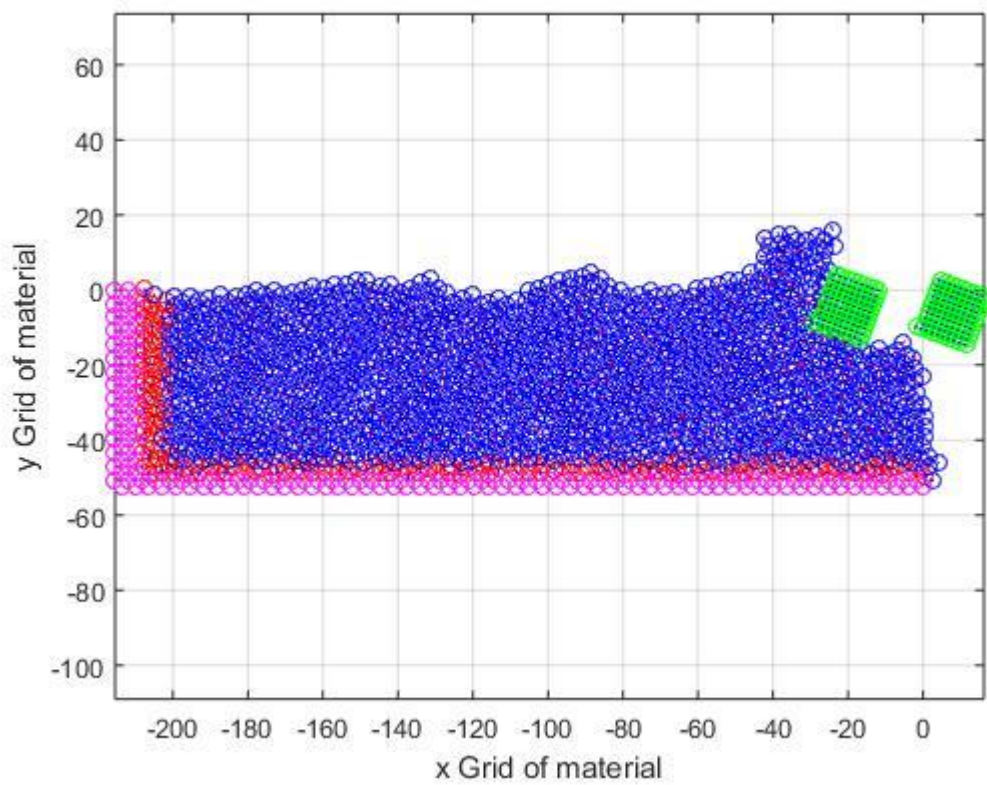
Στις επόμενες σειρές προσομοιώσεων που πραγματοποιήσαμε παρουσιάζεται λείανση τεμαχίου χαλκού με κόκκο διαμαντιού διαφορετικής γεωμετρίας από την ορθογωνική, με στόχο να προσομοιώσουμε με πιο ρεαλιστικό τρόπο τη διαδικασία της λείανσης. Αυτή η τρίτη σειρά προσομοιώσεων έλαβε χώρα για 2 ίσες και αντίθετες γωνίες αποβλίτου. Η ταχύτητα και το βάθος κοπής διατηρούνται σταθερά σε όλη τη σειρά προσομοιώσεων αλλά και στις επόμενες.

5.4.1 Προσομοίωση 3a

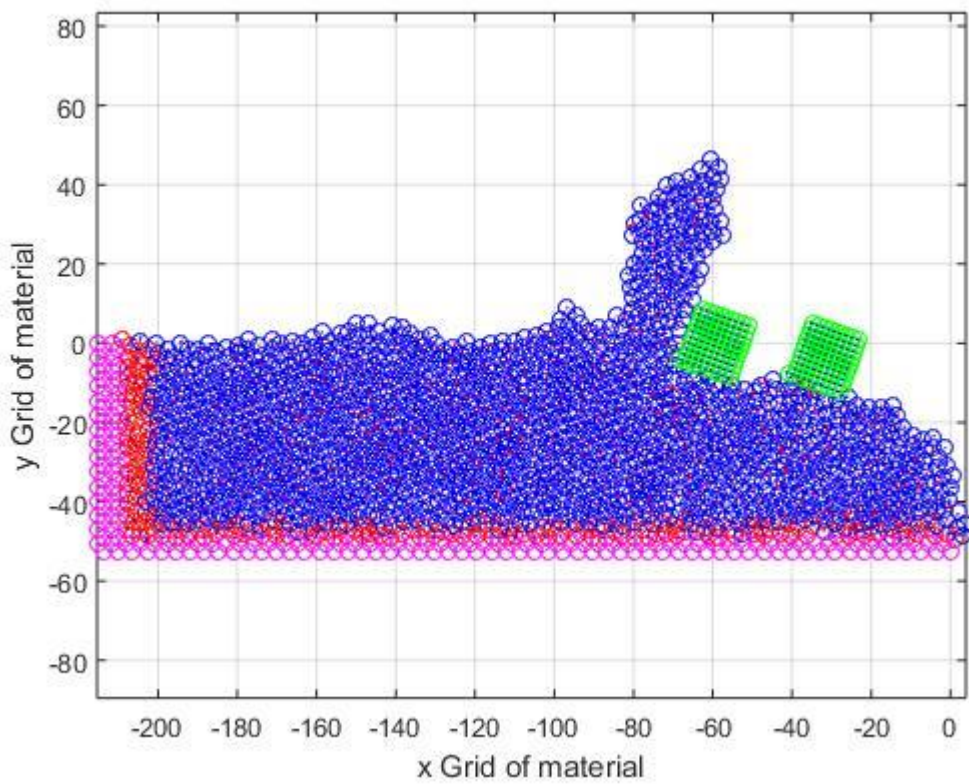
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 3a είναι :

Προσομοίωση 3a	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 1 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	-20 ⁰
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 2 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	-20 ⁰
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	10 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	492 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	1800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 1	100
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 2	100
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	10 fsec

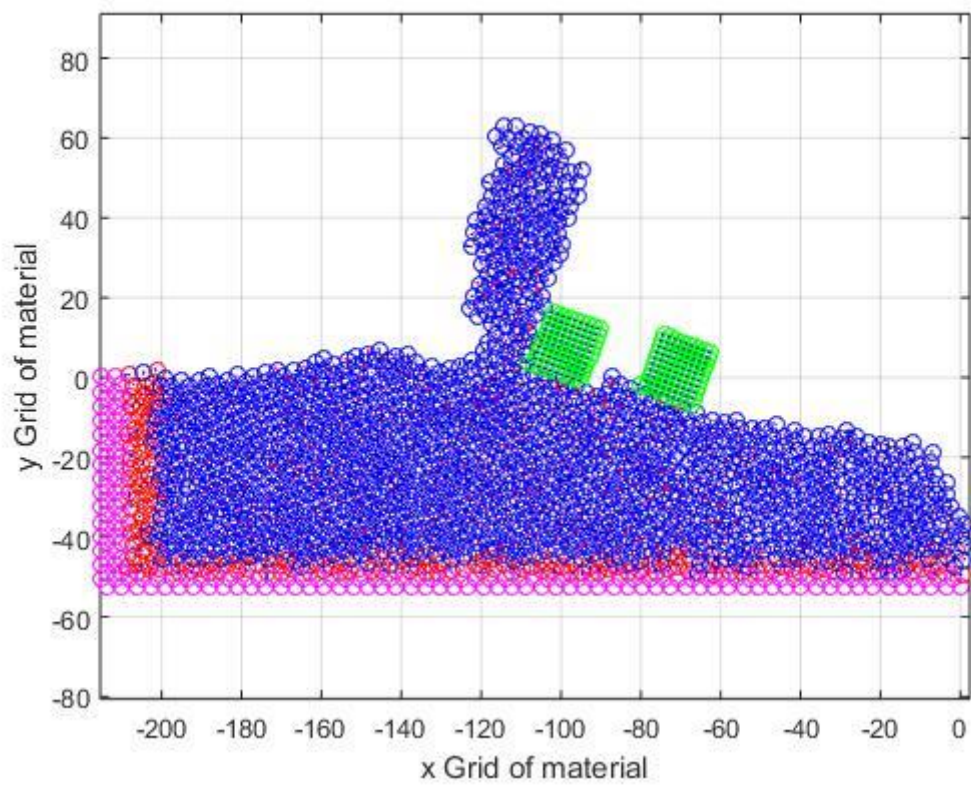
Πίνακας 5.7: Παράμετροι προσομοίωσης 3a



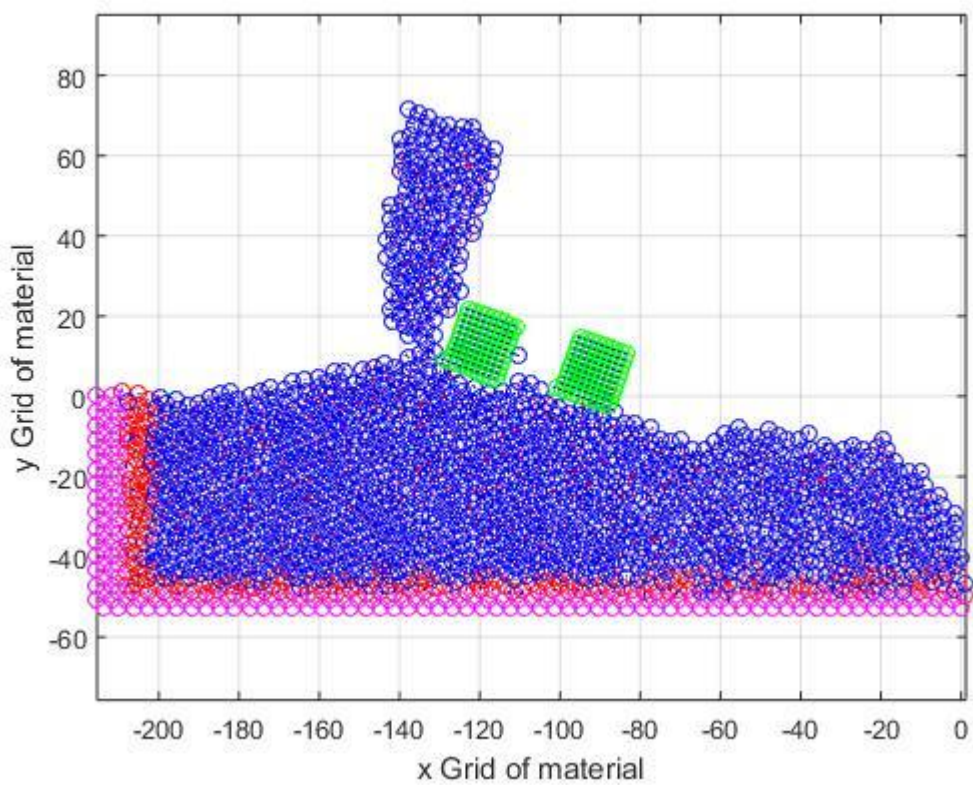
Εικόνα 5.34: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης κατά την έναρξη της κατεργασίας



Εικόνα 5.35: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας

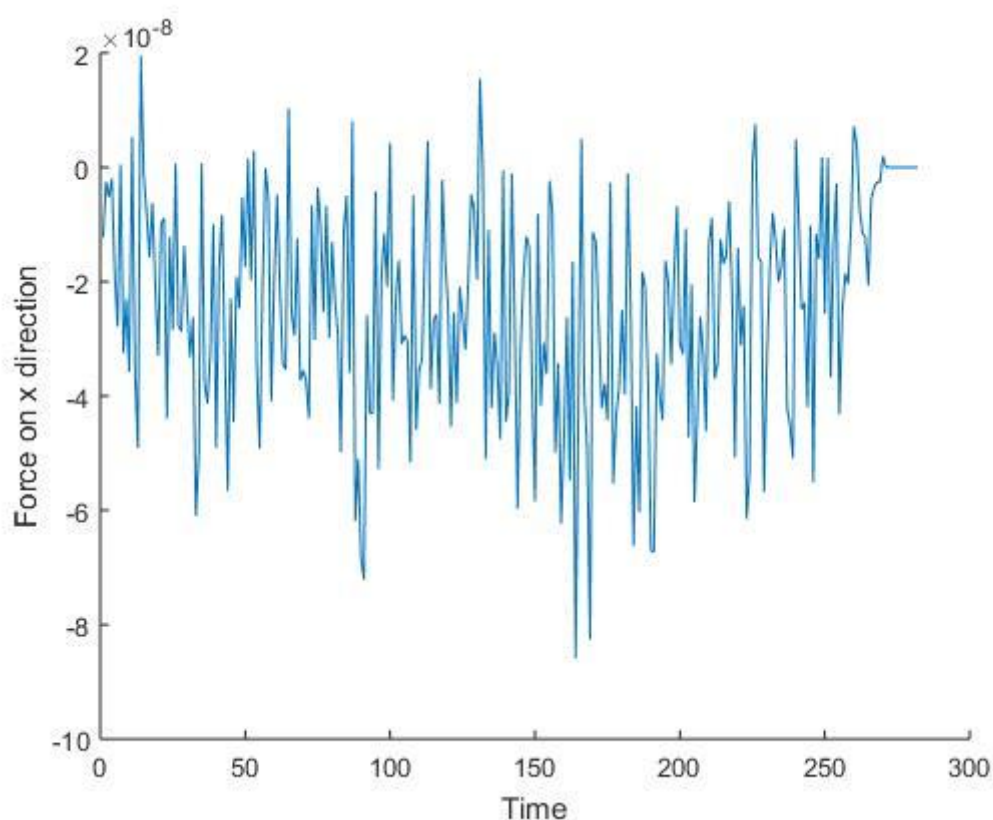


Εικόνα 5.36: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας

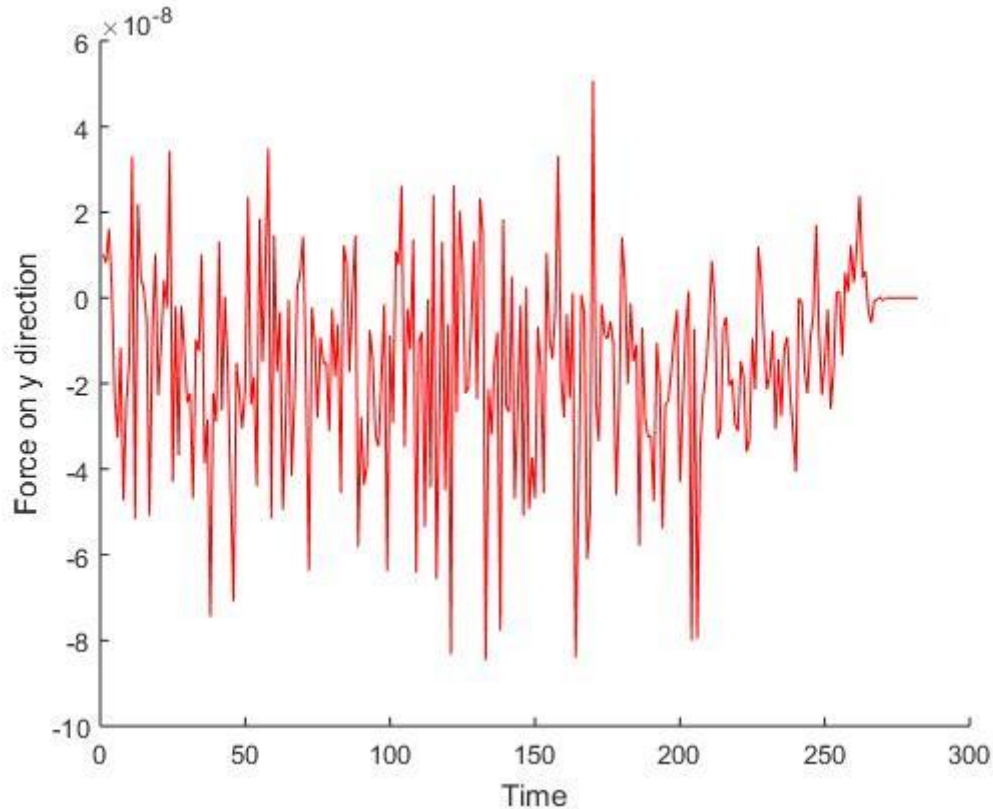


Εικόνα 5.37: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Από τις παραπάνω εικόνες των φάσεων της κατεργασίας, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι καθώς εξελίσσεται η προσομοίωση, το απόβλητο μετακινείται προς τα επάνω, παράλληλα με την επιφάνεια του εργαλείου κοπής ,δηλαδή σχηματίζει και αυτό την ίδια κλίση σε σχέση με την επιφάνεια του τεμαχίου. Η ομοιότητα αυτή οφείλεται κυρίως στην αρνητική γωνία αποβλήτου η οποία μπορεί να χαρακτηρίσει αρκετές περιπτώσεις νανοκοπής και έχει να κάνει με τη γεωμετρία του κόκκου λείανσης που έχουμε θέσει στην προκειμένη προσομοίωση. Στη γεωμετρία του 2^{ου} κόκκου επίσης χρωστάμε την ανωμαλία που εμφανίζεται στην κατεργασμένη επιφάνεια και τα κενά που σχηματίζονται. Παρατηρούμε στο τέλος της κατεργασίας ότι είναι πολύ έντονη πάλι η παρουσία λαιμού που τείνει να κόψει το απόβλητο από το υπόλοιπο τεμάχιο. Το γεγονός αυτό οφείλεται επίσης στη μεγάλη γωνία κοπής που έχει το κοπτικό μας εργαλείο.



Εικόνα 5.38: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.39: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

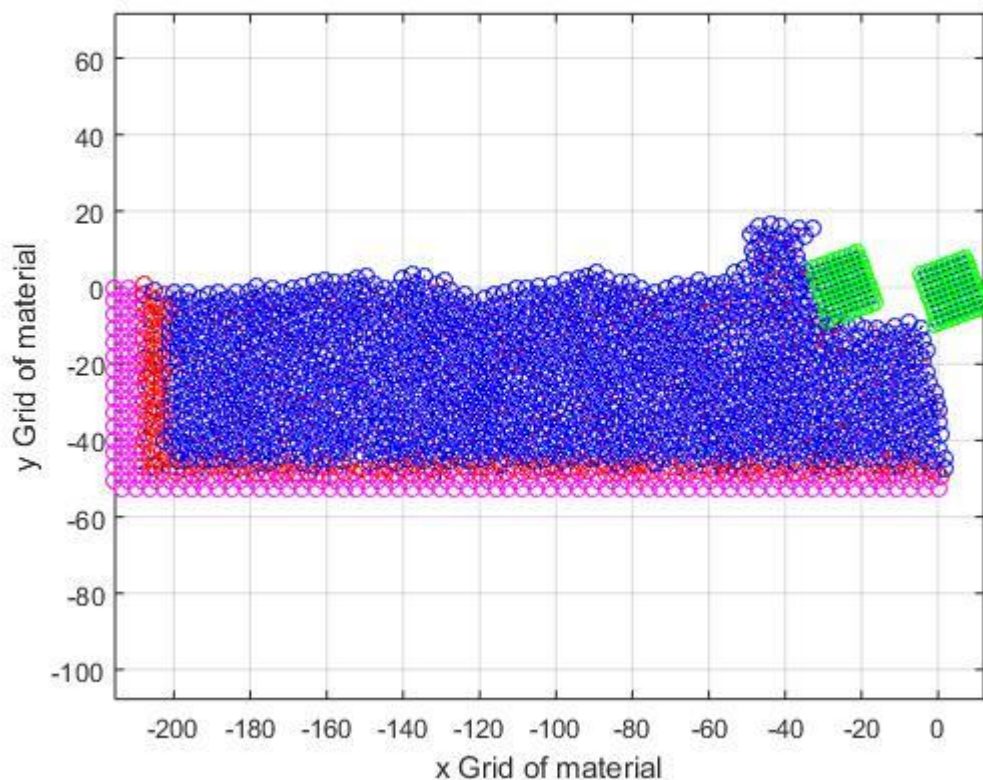
Από τα διαγράμματα των δυνάμεων κατά τους άξονες x και y (Εικόνες 5.38-5.39), είναι αντιληπτό ότι οι δυνάμεις παρουσιάζουν έντονη διακύμανση, όπως αναμενόταν. Οι τιμές των δυνάμεων είναι γενικά μεγαλύτερες κατά τον οριζόντιο άξονα x σε σύγκριση με τον κατακόρυφο y, ενώ η τάση όλων των δυνάμεων και του εύρους των διακυμάνσεων είναι γενικά αυξητική. Τα παραπάνω ισχύουν για όλες τις σειρές προσομοιώσεων. Στην προκειμένη περίπτωση, οι δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης παρουσιάζουν μέσες τιμές κατά x και y, είναι $F_{x\mu}=39.01nN$ και $F_{y\mu}=24.38nN$, αντιστοίχως. Το ύψος του αποβλίττου είναι 77 \AA και τα άτομα που το αποτελούν είναι 191.

5.4.2 Προσομοίωση 3b

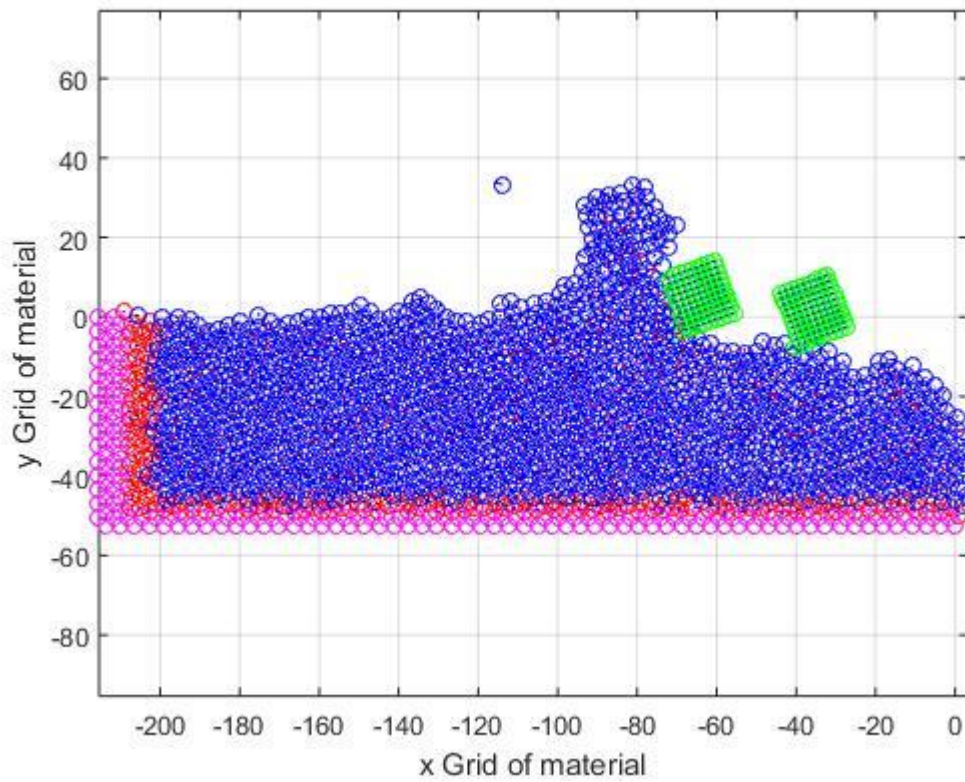
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 3b είναι :

Προσομοίωση 3b	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 1 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	+20 ^ο
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 2 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	+20 ^ο
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	10 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	492 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	1800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 1	100
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 2	100
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	10 fsec

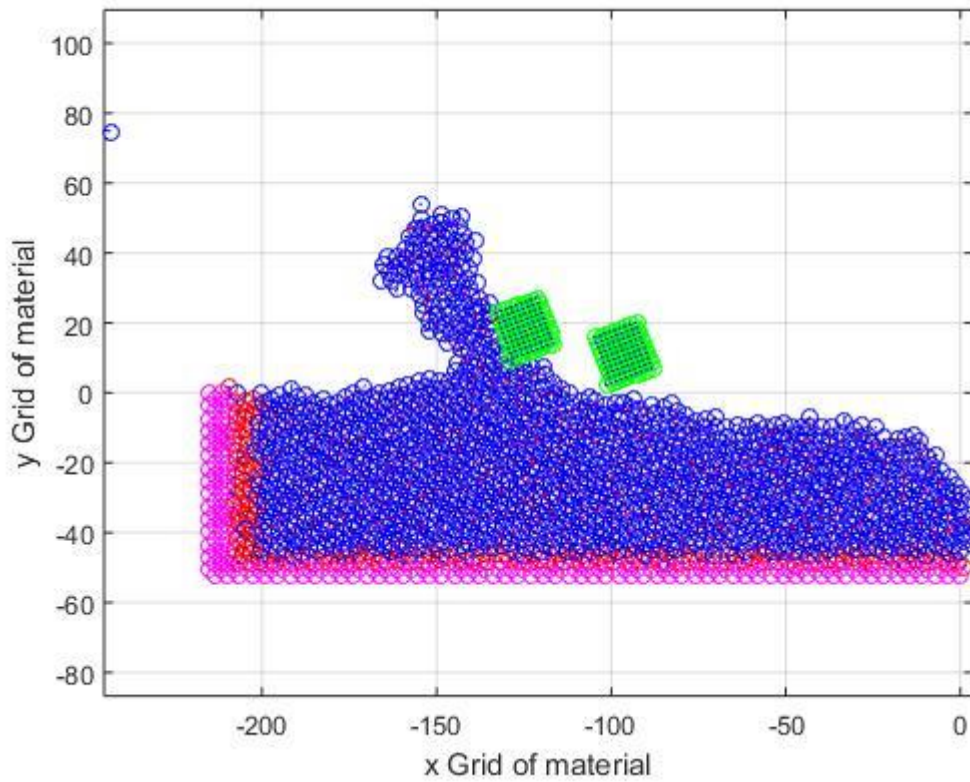
Πίνακας 5.8: Παράμετροι προσομοίωσης 3b



Εικόνα 5.40: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης κατά την έναρξη της κατεργασίας

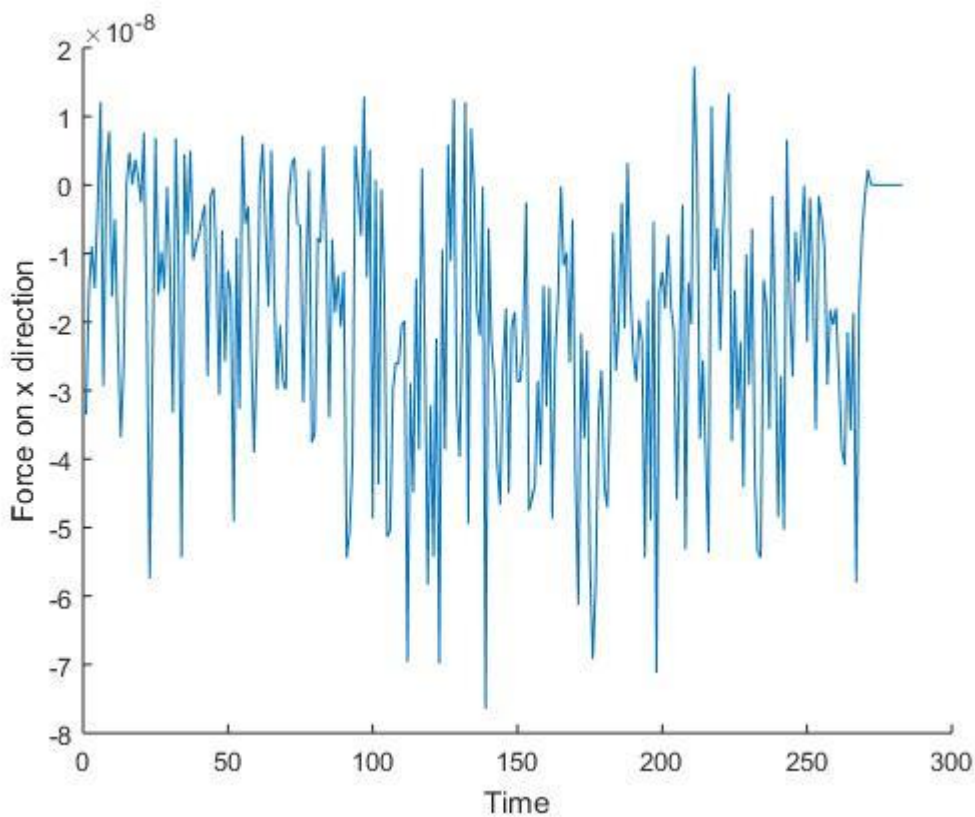


Εικόνα 5.41: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας

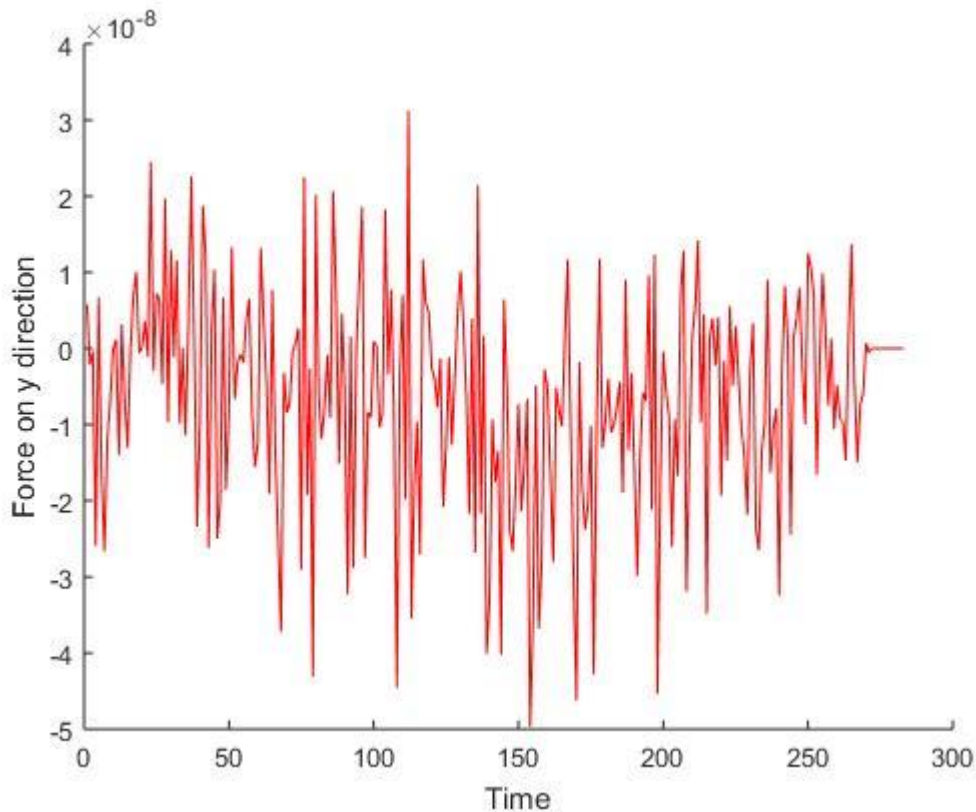


Εικόνα 5.42: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Από τα στιγμιότυπα της προσομοίωσης, παρατηρούμε ότι με αντίθετες και ίσες σε μέτρο γωνίες αποβλίττου και για τους 2 κόκκου λείανσης έχουμε μικρότερο μέγεθος αποβλίττου και πιο ομαλή κατεργασμένη επιφάνεια. Επίσης δεν παρουσιάζεται τόσο έντονα το φαινόμενο του σχηματισμού “λαιμού” κατά τον σχηματισμό του αποβλίττου. Και σε αυτήν την περίπτωση το απόβλιττο έχει την ίδια κλίση με το κοπτικό εργαλείο.



Εικόνα 5.43: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου

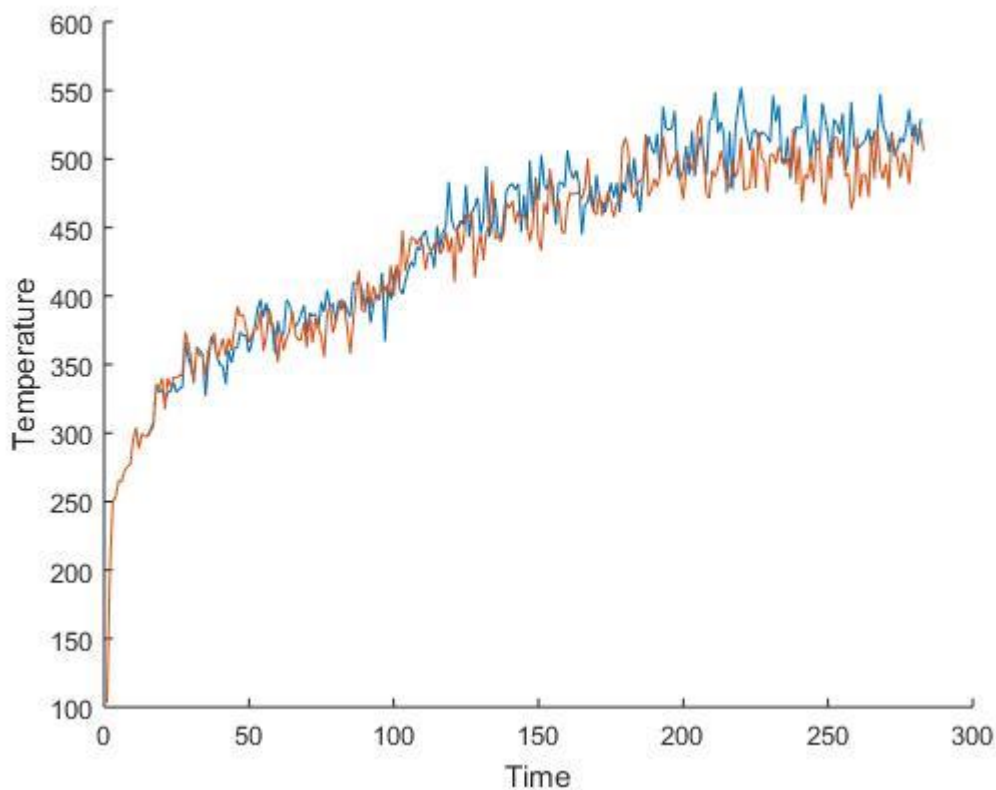


Εικόνα 5.44: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

Σε αυτή την περίπτωση προσομοίωσης, οι δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης παρουσιάζουν μέσες τιμές κατά x και y, $F_{x\mu}=26.76nN$ και $F_{y\mu}=12.62nN$, αντιστοίχως. Παρατηρούμε ότι η δύναμη κοπής F_x εξακολουθεί να είναι μεγαλύτερη από τη δύναμη κοπής F_y , κάτι που συμβαίνει σε όλες τις προσομοιώσεις που δεν έχει το κοπτικό εργαλείο κάποια κλίση. Επιπλέον, παρατηρούμε ότι οι δυνάμεις κοπής κατά x, με την αύξηση του βάθους κοπής, έχουν αυξηθεί. Συγκεκριμένα, για τη δύναμη κοπής F_x η μείωση είναι της τάξης του 19.66%, ενώ για την F_y η μείωση είναι της τάξης του 56.84%. . Το ύψος του αποβλίττου είναι 40 Å και τα άτομα που το αποτελούν είναι 153.

5.4.3 Παρατηρήσεις

Με το πέρας της δεύτερης σειράς προσομοιώσεων, αξίζει να σημειώσουμε επίσης κάποια πράγματα όπως κάναμε και στην πρώτη σειρά. Αρχικά παρατηρούμε στο διάγραμμα 5.45 τις σωρευτικές θερμοκρασίες ανά βάθος κοπής. Με **μπλε** παριστάνουμε τη θερμοκρασία για την 1^η περίπτωση, με **κόκκινο** για την 2^η. Παρατηρούμε ότι για την 1^η περίπτωση με αρνητικές γωνίες αποβλίττου εμφανίζονται ελαφρώς μεγαλύτερες θερμοκρασίες σε σχέση με τις θετικές γωνίες.



Εικόνα 5.45: Σωρευτική θερμοκρασία σε °C των ατόμων του υλικού κατεργασίας για τις 2 προσομοιώσεις

5.5 Τέταρτη Σειρά Προσομοιώσεων

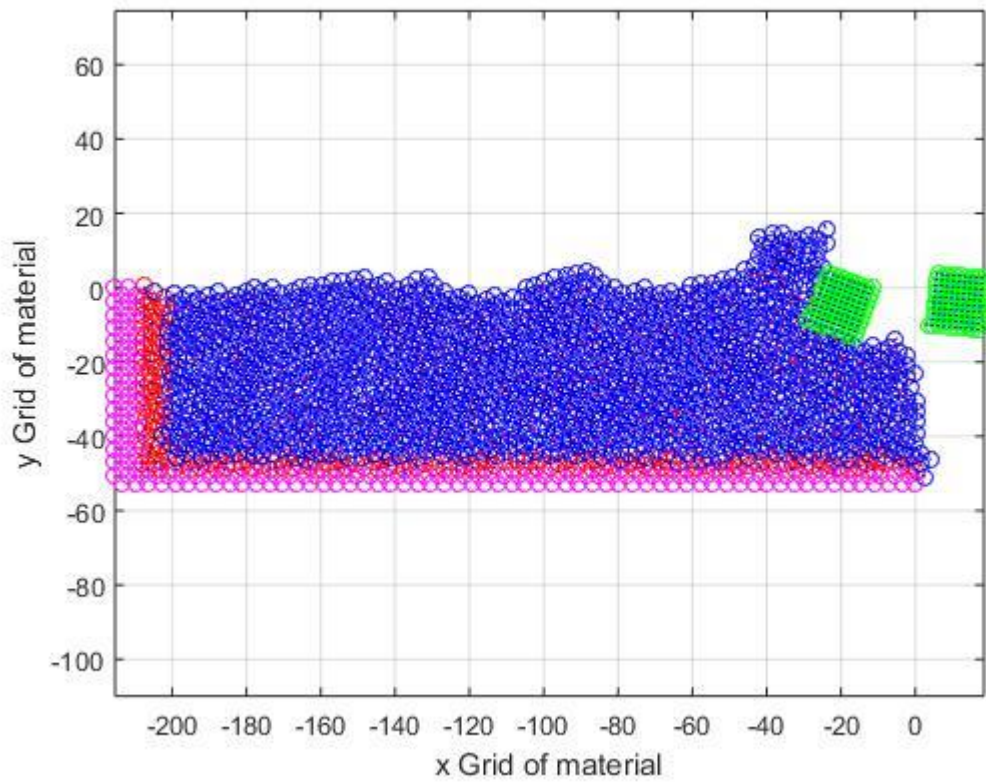
Στην τέταρτη σειρά προσομοιώσεων ερευνάμε το σχηματισμό του αποβλίττου και την επιφάνεια του τεμαχίου για 2 διαφορετικές γωνίες αποβλίττου του 2^{ου} κοπτικού εργαλείου με σταθερή τη γωνία αποβλίττου του 1^{ου}. Η ταχύτητα και το βάθος κοπής διατηρούνται σταθερά σε όλη τη σειρά προσομοιώσεων.

5.5.1 Προσομοίωση 4a

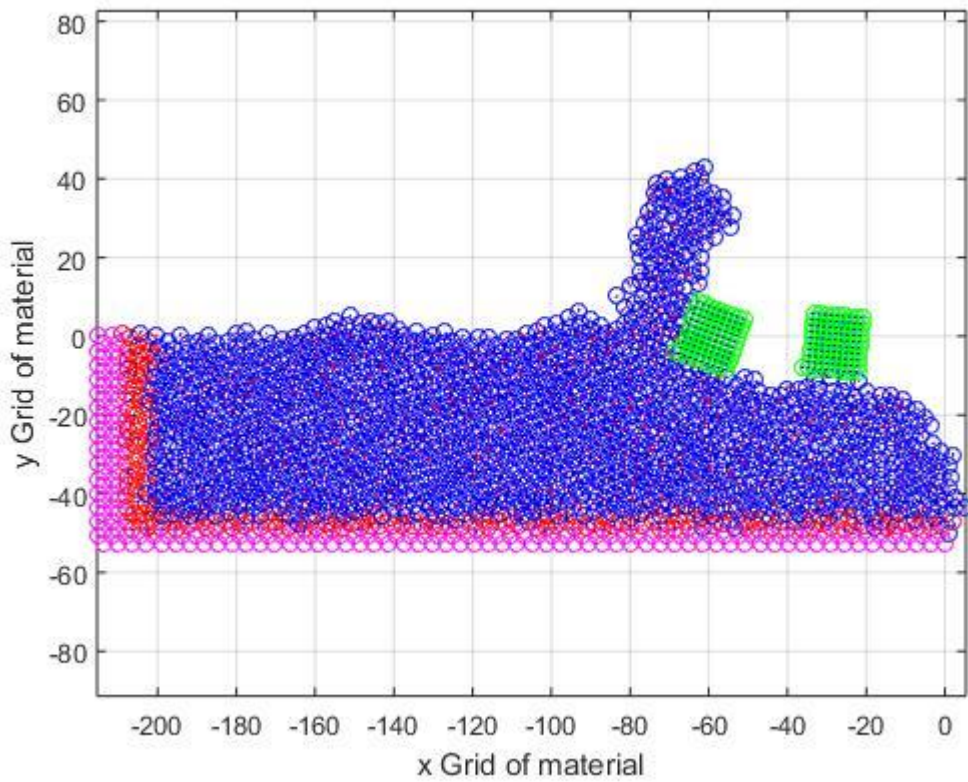
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 4a είναι :

Προσομοίωση 4a	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 1 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	-20 ^ο
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 2 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	-5 ^ο
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	10 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	492 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	1800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 1	100
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 2	100
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	10 fsec

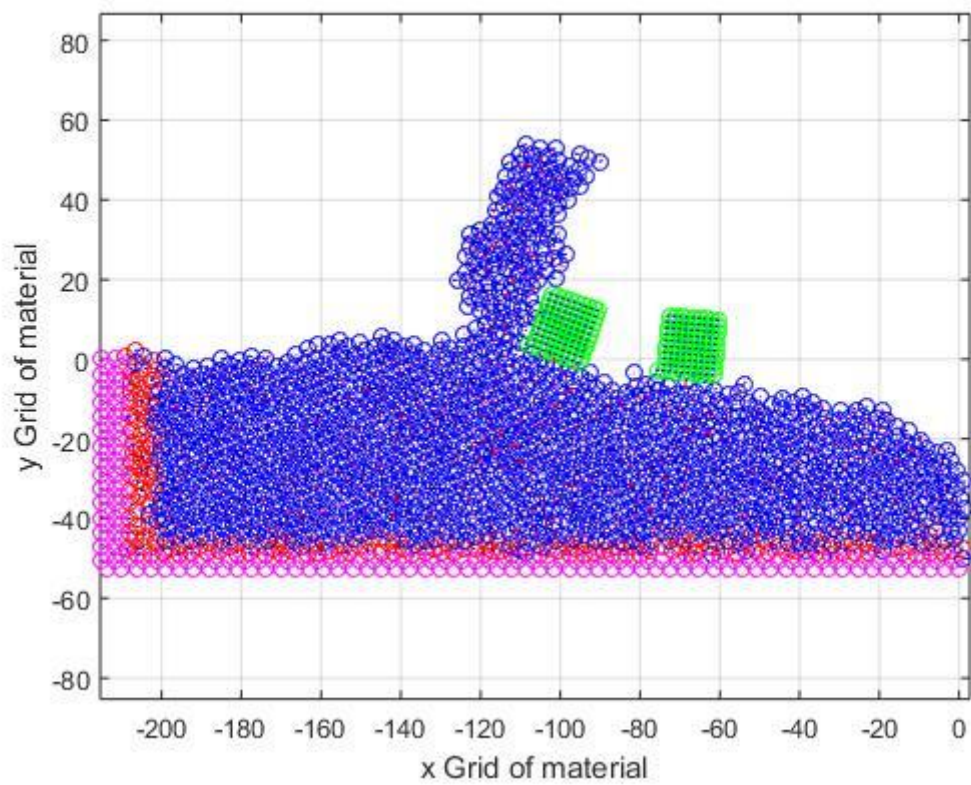
Πίνακας 5.9: Παράμετροι προσομοίωσης 4a



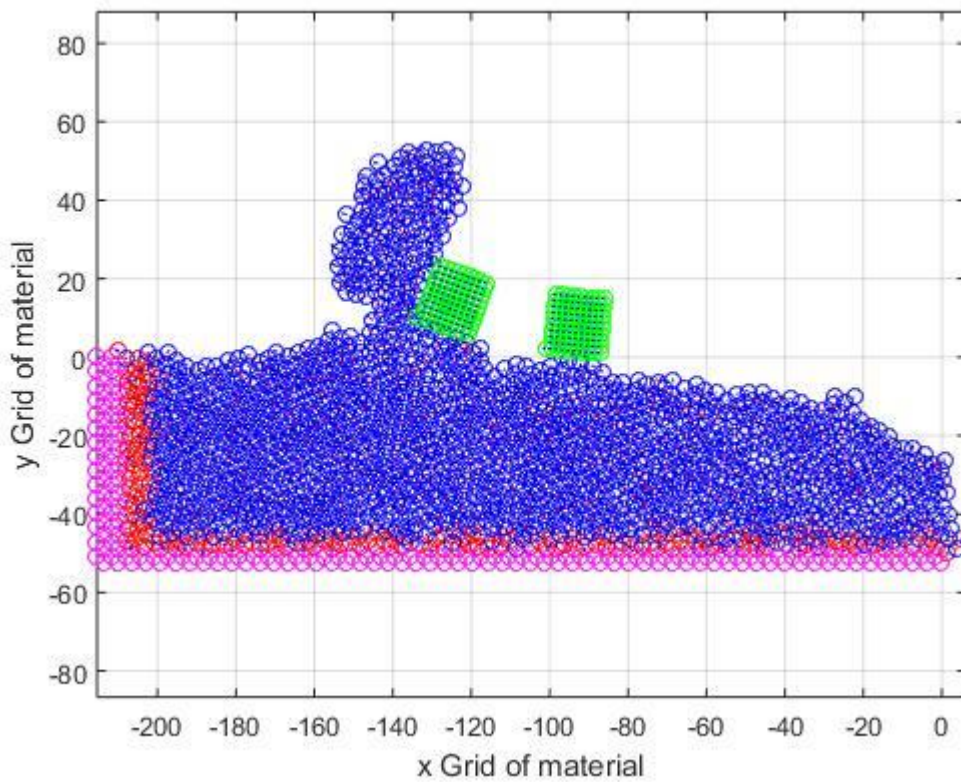
Εικόνα 5.46: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης κατά την έναρξη της κατεργασίας



Εικόνα 5.47: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας

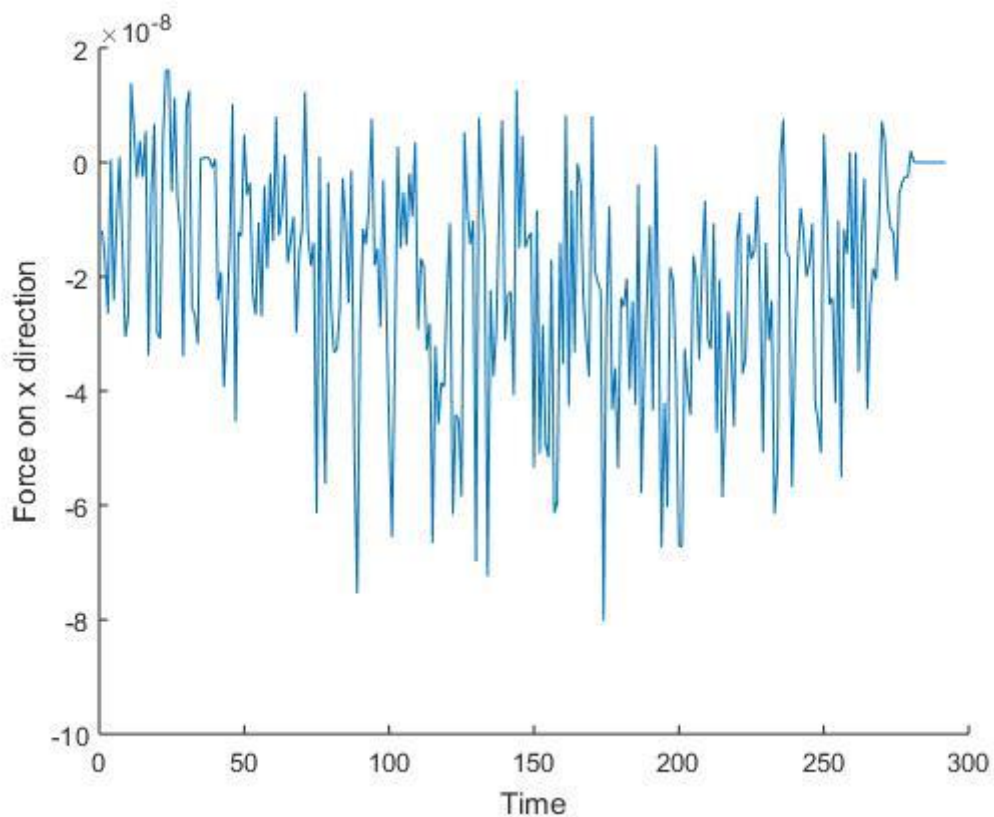


Εικόνα 5.48: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας

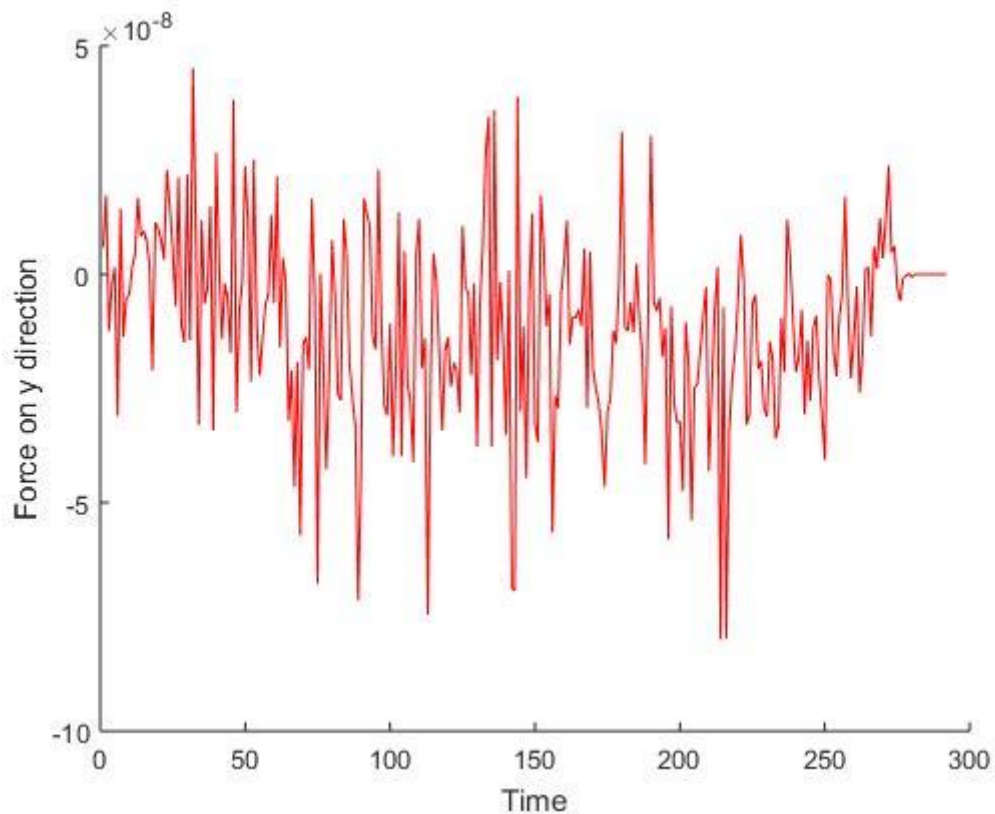


Εικόνα 5.49: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Από τις παραπάνω εικόνες των φάσεων της κατεργασίας, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι το απόβλιττο όπως και στις προηγούμενες περιπτώσεις λαμβάνει την ίδια κλίση με την κλίση του 1^{ου} κόκκου λείανσης και παρουσιάζει το φαινόμενο του σχηματισμού ‘‘λαιμού’’. Σε αυτό που διαφέρει η περίπτωση αυτή είναι στη γωνία αποβλίττου του 2^{ου} κόκκου λείανσης η οποία είναι μικρότερη από την περίπτωση 3a. Η διαφορά αυτή έχει σαν αποτέλεσμα τον σχηματισμό ομαλότερης επιφανείας καθώς το λειαίνει ο 2^{ος} κόκκος σε σχέση με την περίπτωση 3b όπου έχουμε τετραπλάσια γωνία αποβλίττου για τον 2^ο κόκκο.



Εικόνα 5.50: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.51: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

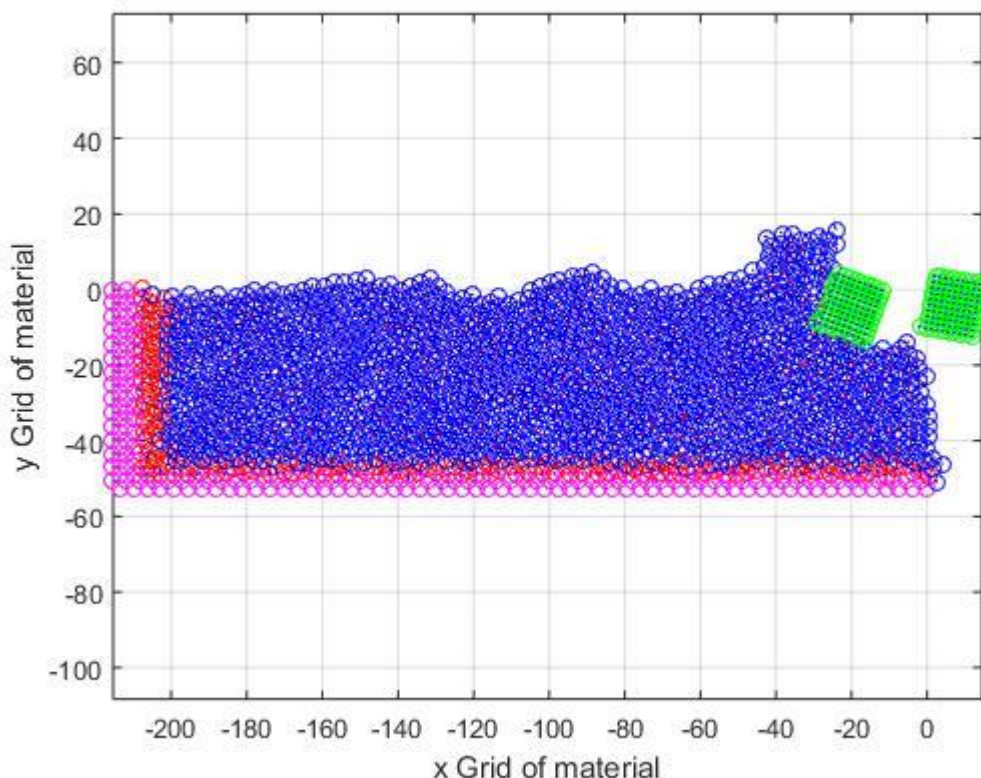
Από τα διαγράμματα των δυνάμεων κατά τους άξονες x και y (Εικόνες 5.50-5.51), είναι αντιληπτό ότι οι δυνάμεις παρουσιάζουν έντονη διακύμανση, όπως αναμενόταν. Στην προκειμένη περίπτωση, οι δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης παρουσιάζουν μέσες τιμές κατά x και y, είναι $F_{x\mu}=32.51nN$ και $F_{y\mu}=17.42nN$, αντιστοίχως. Το ύψος του αποβλίττου είναι 57 \AA και τα άτομα που το αποτελούν είναι 173.

5.5.2 Προσομοίωση 4b

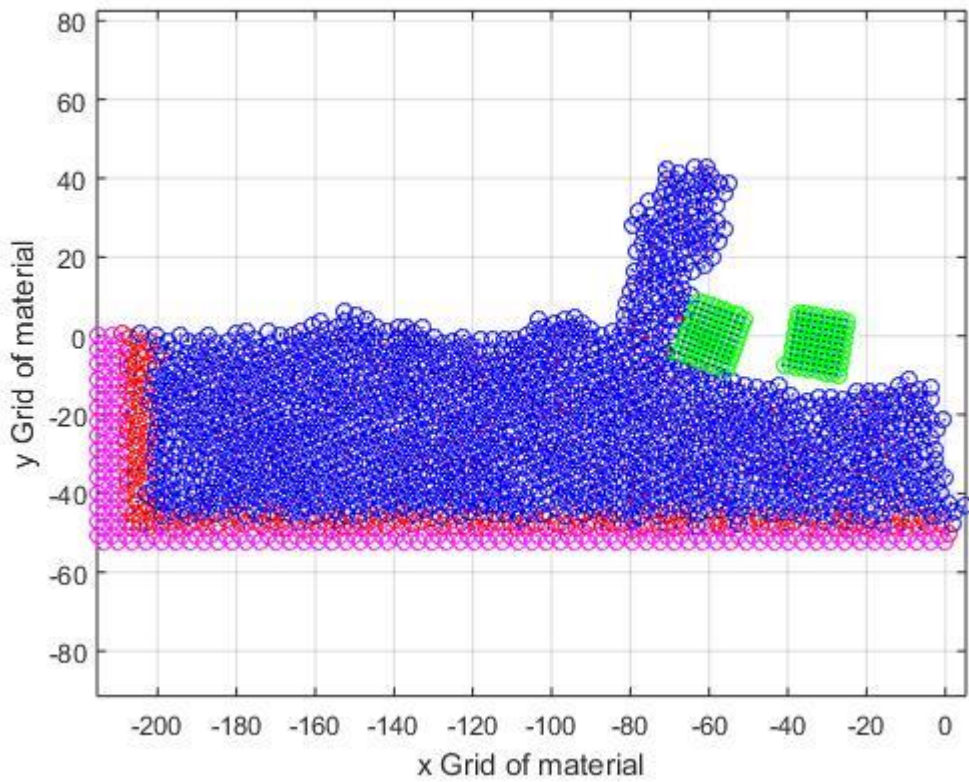
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 4b είναι :

Προσομοίωση 4b	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 1 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	-20 ^ο
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 2 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	-10 ^ο
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	10 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	492 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	1800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 1	100
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 2	100
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	10 fsec

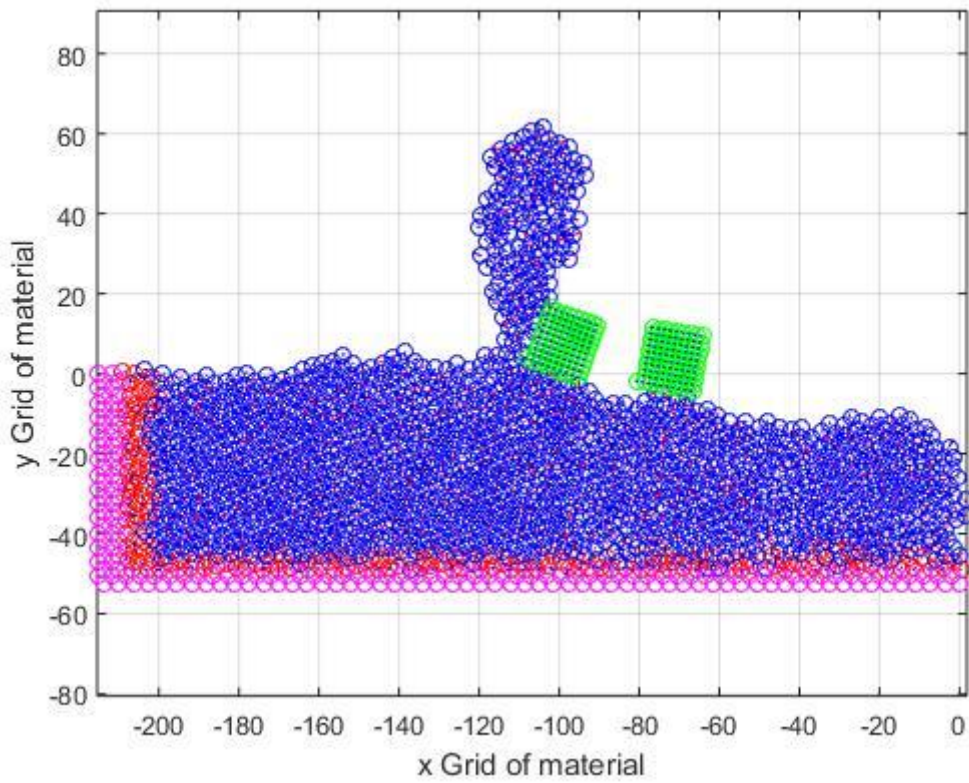
Πίνακας 5.10: Παράμετροι προσομοίωσης 4b



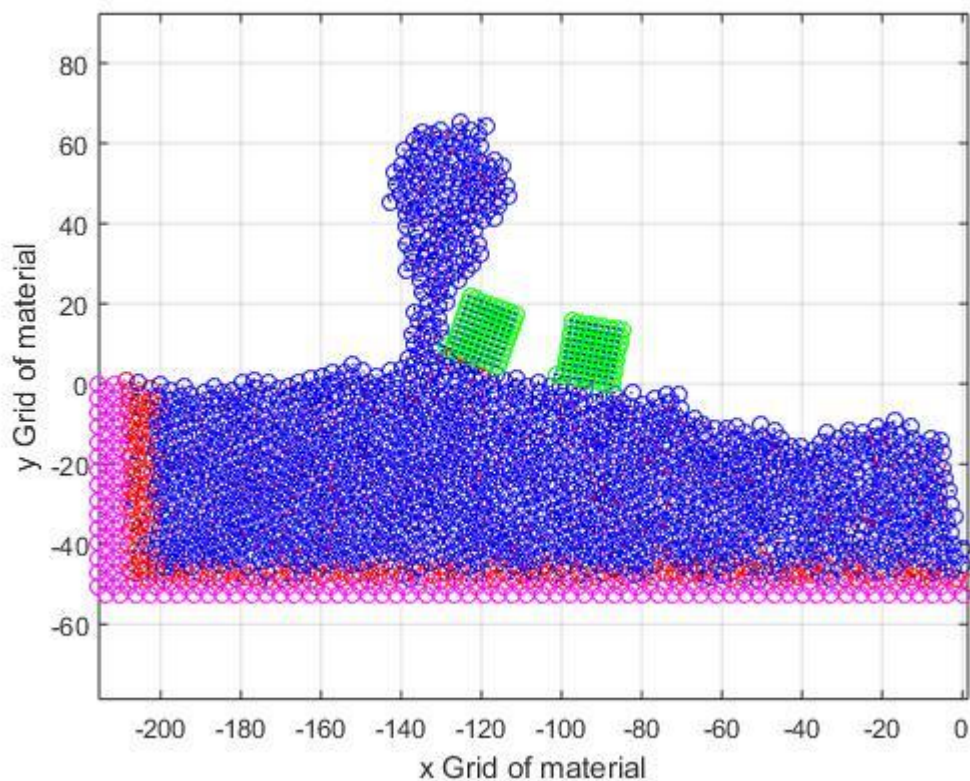
Εικόνα 5.52: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης κατά την έναρξη της κατεργασίας



Εικόνα 5.53: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας

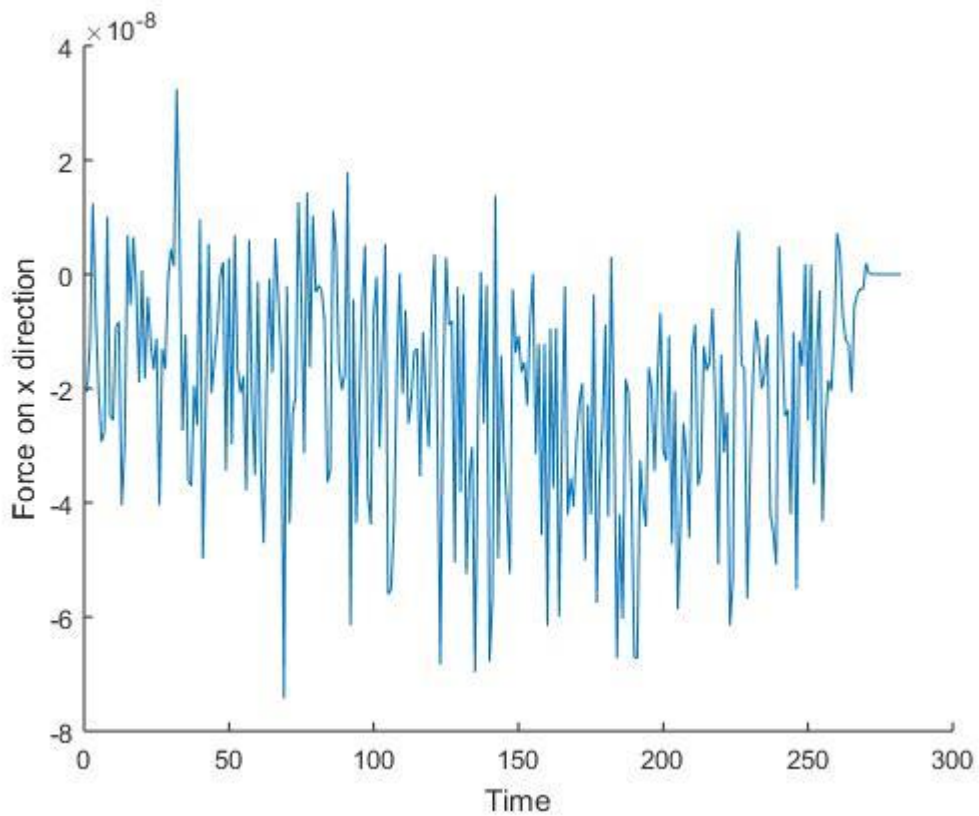


Εικόνα 5.54: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας

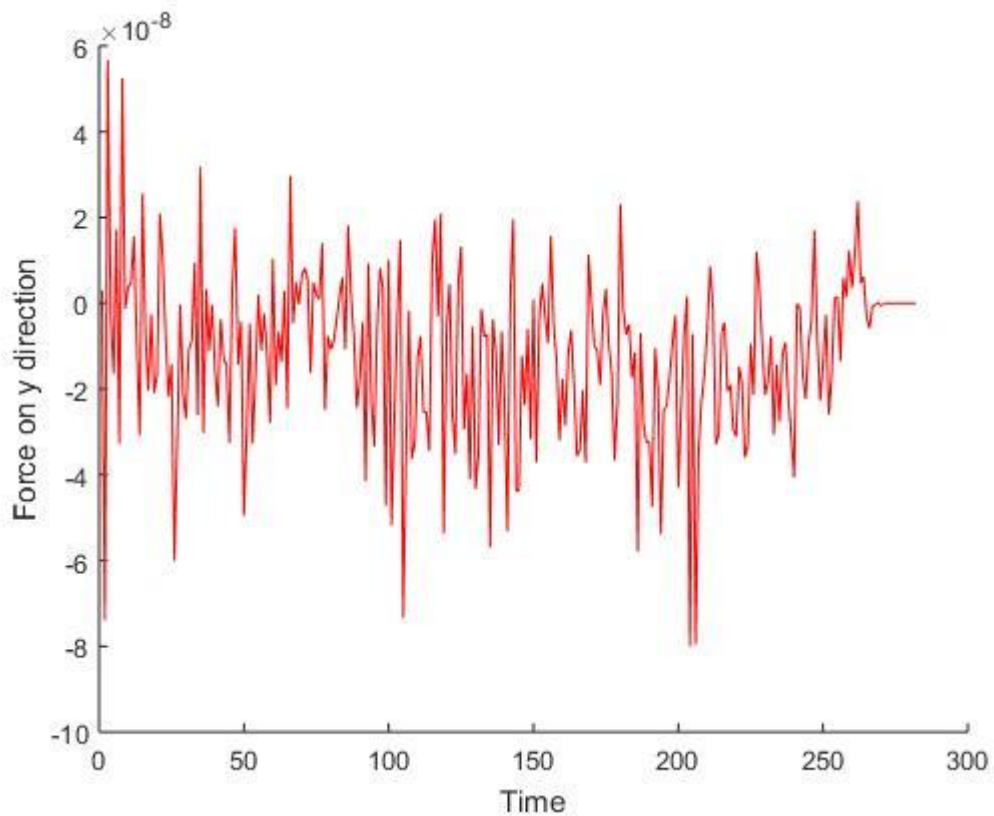


Εικόνα 5.55: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Από τις παραπάνω εικόνες των φάσεων της κατεργασίας, παρατηρούμε παραδόξως ότι το απόβλιττο λαμβάνει μεν την ίδια κλίση με την κλίση του 1^{ου} κόκκου λείανσης αλλά το φαινόμενο του σχηματισμού “λαιμού” είναι αρκετά πιο έντονο σε σχέση με την προηγούμενη περίπτωση . Επίσης η περίπτωση αυτή διαφέρει στην επιφάνεια της κατεργασίας την οποία έχει επηρεάσει και ο 2^{ος} κόκκος. Παρατηρούμε στην περίπτωση αυτή περισσότερες ανωμαλίες και κενά στην επιφάνεια γεγονός που οφείλεται στην διπλάσια γωνία αποβλίττου του 2^{ου} κόκκου. Παρόλ’ αυτά οι ανωμαλίες στην επιφάνεια δεν είναι τόσες όσες στην περίπτωση 3b.



Εικόνα 5.56: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου

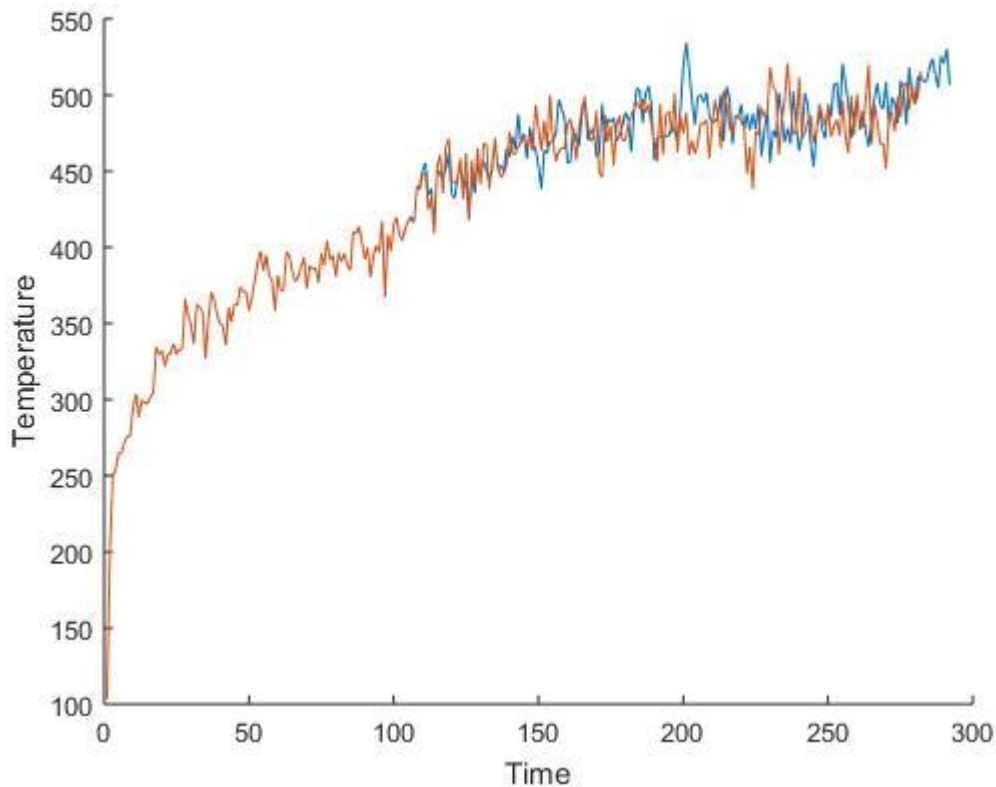


Εικόνα 5.57: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

Σε αυτή την περίπτωση προσομοίωσης, οι δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης παρουσιάζουν μέσες τιμές κατά x και y, $F_{x\mu}=31.93 \text{ nN}$ και $F_{y\mu}=19.2 \text{ nN}$, αντιστοίχως. Παρατηρούμε ότι η δύναμη κοπής F_x εξακολουθεί να είναι μεγαλύτερη από τη δύναμη κοπής F_y , κάτι που συμβαίνει σε όλες τις προσομοιώσεις που δεν έχει το κοπτικό εργαλείο κάποια κλίση. Επιπλέον, παρατηρούμε ότι οι δυνάμεις κοπής κατά x, με την αύξηση του βάθους κοπής, έχουν αυξηθεί. Συγκεκριμένα, για τη δύναμη κοπής F_x η μείωση είναι της τάξης του 1.78%, ενώ για την F_y η μείωση είναι της τάξης του 10.21%. . Το ύψος του αποβλίττου είναι 64 Å και τα άτομα που το αποτελούν είναι 170.

5.5.3 Παρατηρήσεις

Με το πέρας της δεύτερης σειράς προσομοιώσεων, αξίζει να σημειώσουμε επίσης κάποια πράγματα όπως κάναμε και στην πρώτη σειρά. Αρχικά παρατηρούμε στο διάγραμμα 5.58 τις σωρευτικές θερμοκρασίες ανά βάθος κοπής. Με **μπλε** παριστάνουμε τη θερμοκρασία για την 1^η περίπτωση και με **κόκκινο** για τη 2^η περίπτωση. Παρατηρούμε ότι οι διαφορές στη θερμοκρασία είναι ελάχιστες. Σε κάποια σημεία μόνο η θερμοκρασία της 1^{ης} περίπτωσης (όπου έχουμε μικρότερη γωνία αποβλίττου για τον 2^ο κόκκο λείανσης) είναι ελάχιστα μεγαλύτερη.



Εικόνα 5.58: Σωρευτική θερμοκρασία σε °C των ατόμων του υλικού κατεργασίας ανά βάθος κοπής.

5.6 Πέμπτη Σειρά Προσομοιώσεων

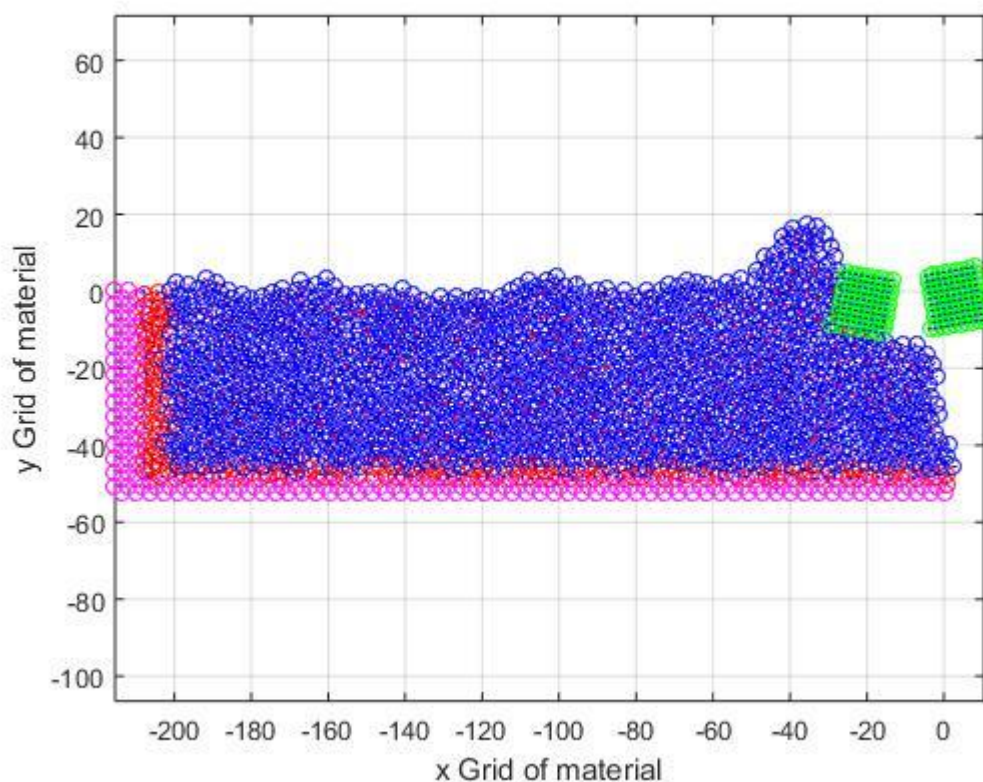
Στη πέμπτη σειρά προσομοιώσεων ερευνάμε το σχηματισμό αποβλίττου και την επιφάνεια του τεμαχίου κατά τη λείανση για 2 ίσες αλλά αντίθετες γωνίες αποβλίττου για τα 2 κοπτικά εργαλεία με διαφορετικό μέτρο για κάθε περίπτωση. Η ταχύτητα και το βάθος κοπής διατηρούνται σταθερά σε όλη τη σειρά προσομοιώσεων .

5.6.1 Προσομοίωση 5a

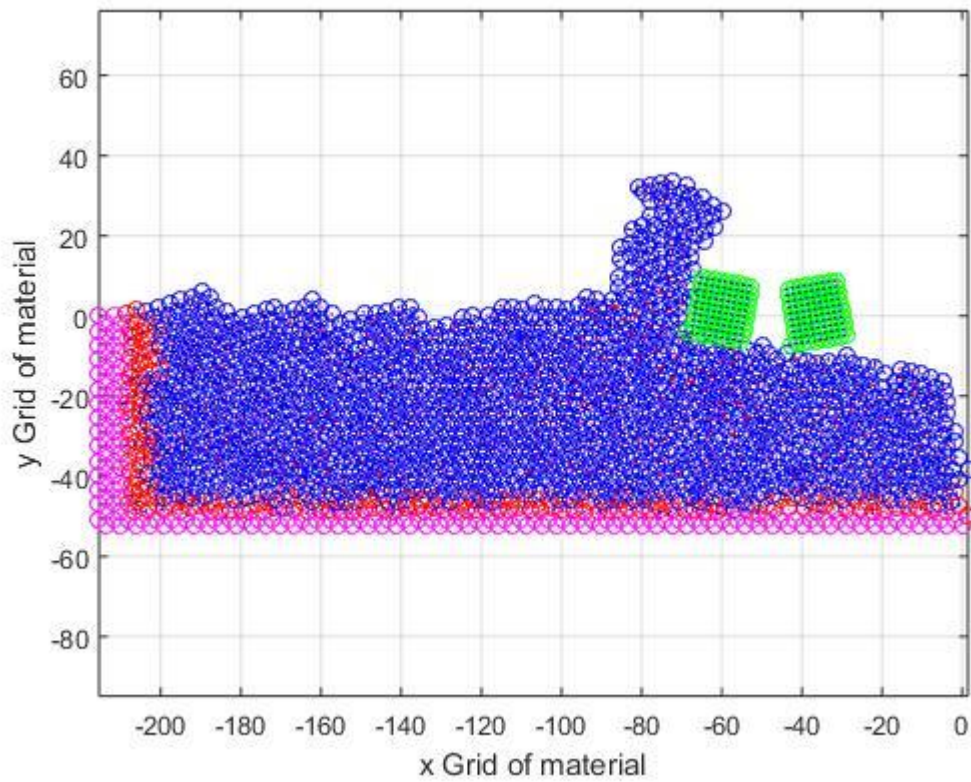
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 5a είναι :

Προσομοίωση 5a	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 1 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	-10 ⁰
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 2 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	+10 ⁰
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	10 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	492 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	1800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 1	100
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 2	100
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	10 fsec

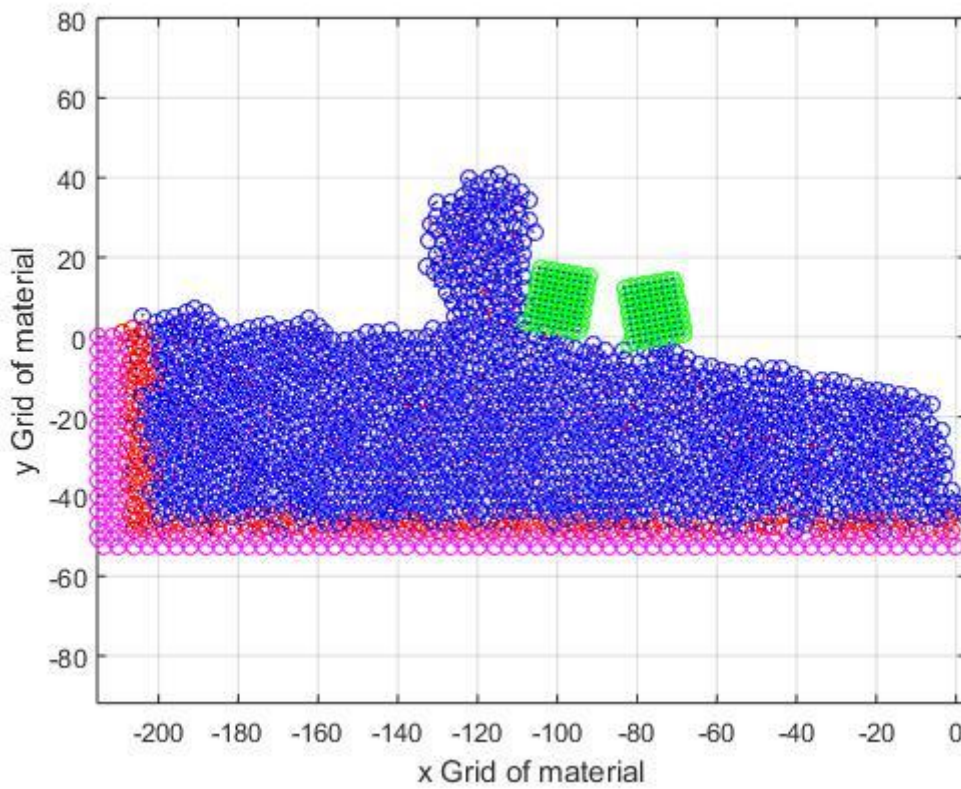
Πίνακας 5.11: Παράμετροι προσομοίωσης 5a



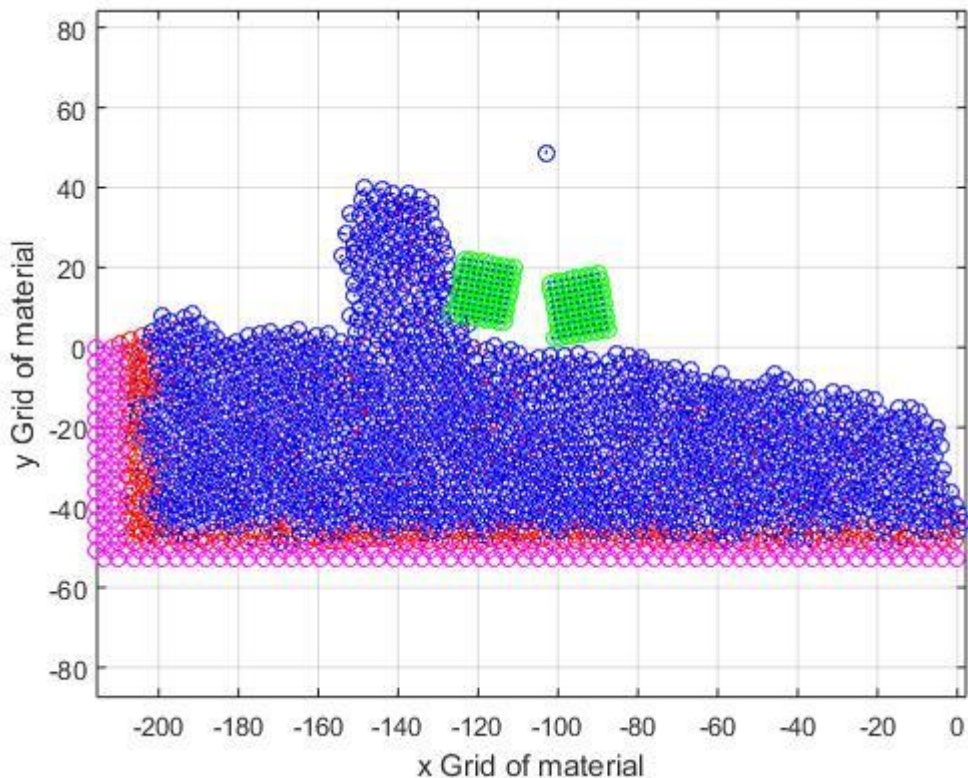
Εικόνα 5.59: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης κατά την έναρξη της κατεργασίας



Εικόνα 5.60: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας

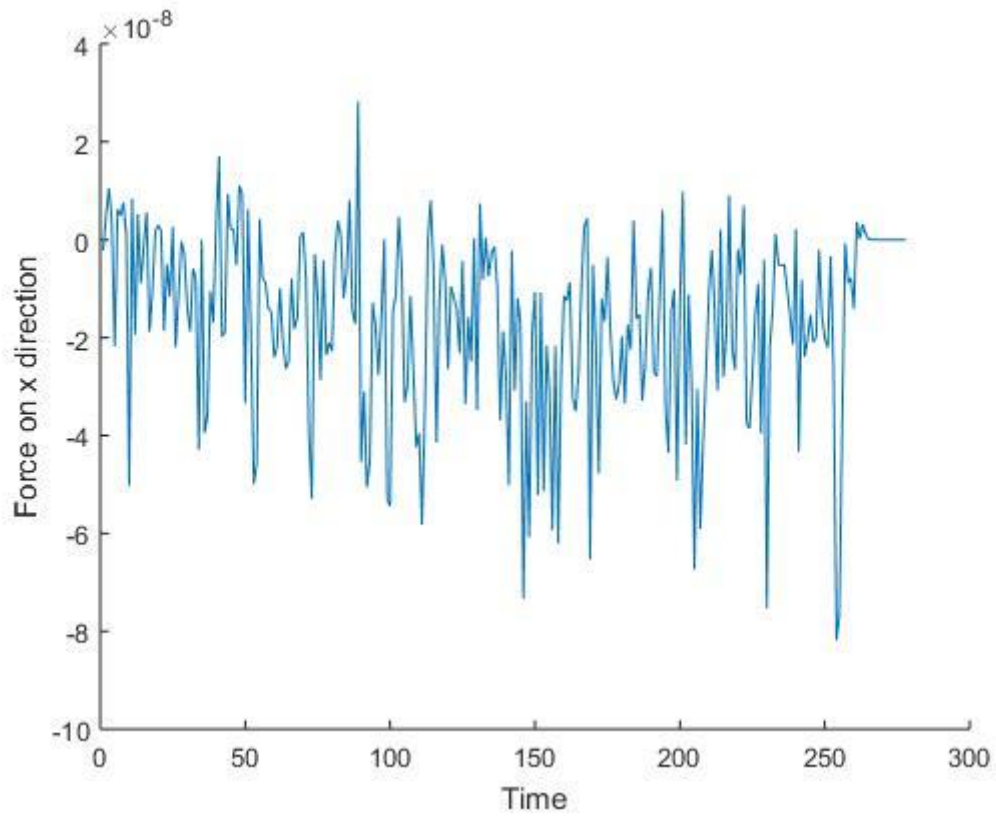


Εικόνα 5.61: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας

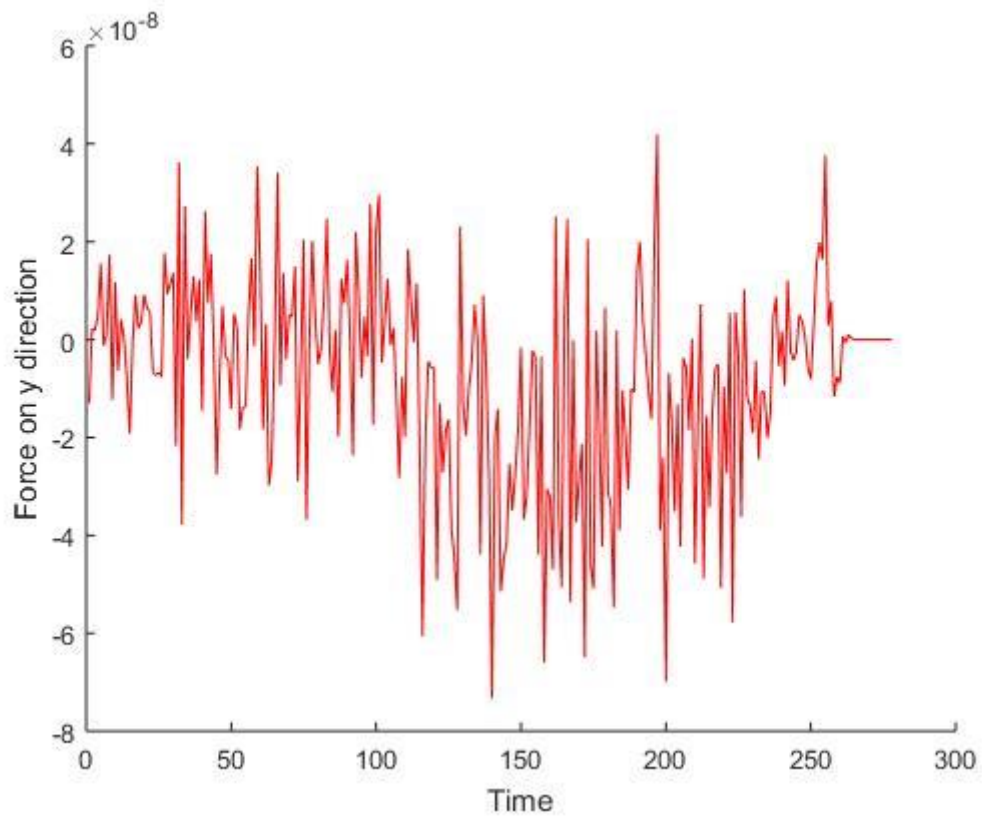


Εικόνα 5.62: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Από τις παραπάνω εικόνες των φάσεων της κατεργασίας, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι το απόβλιττο αποκτάει και πάλι παρόμοια κλίση με την κλίση του 1^{ου} κοπτικού εργαλείου αλλά αυτή τη φορά το φαινόμενο του σχηματισμού “λαιμού” δεν είναι τόσο έντονο εξαιτίας της μικρής γωνίας αποβλίττου. Επίσης επειδή τα κοπτικά μας εργαλεία βρισκόντουσαν στις ίδιες θέσεις με τις προηγούμενες περιπτώσεις, όταν αλλάξαμε τη γωνία για το 2^ο κόκκο λείανσης παρατηρούμε ότι μια θετική μετατόπιση της γωνίας προκαλεί την κάτω πλευρά του εργαλείου να μετατοπιστεί προς τα επάνω με αποτέλεσμα να μην επηρεάζει και τόσο την επιφάνεια της κατεργασμένης επιφάνειας. Παρόλ’ αυτά σε κάποιες φάσεις της κατεργασίας ο 2^{ος} κόκκος εμποδίζει τα άτομα της επιφάνειας να ξεφύγουν με αποτέλεσμα να διατηρείται μια ομαλότητα στην κατεργασμένη επιφάνεια.



Εικόνα 5.63: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.64: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

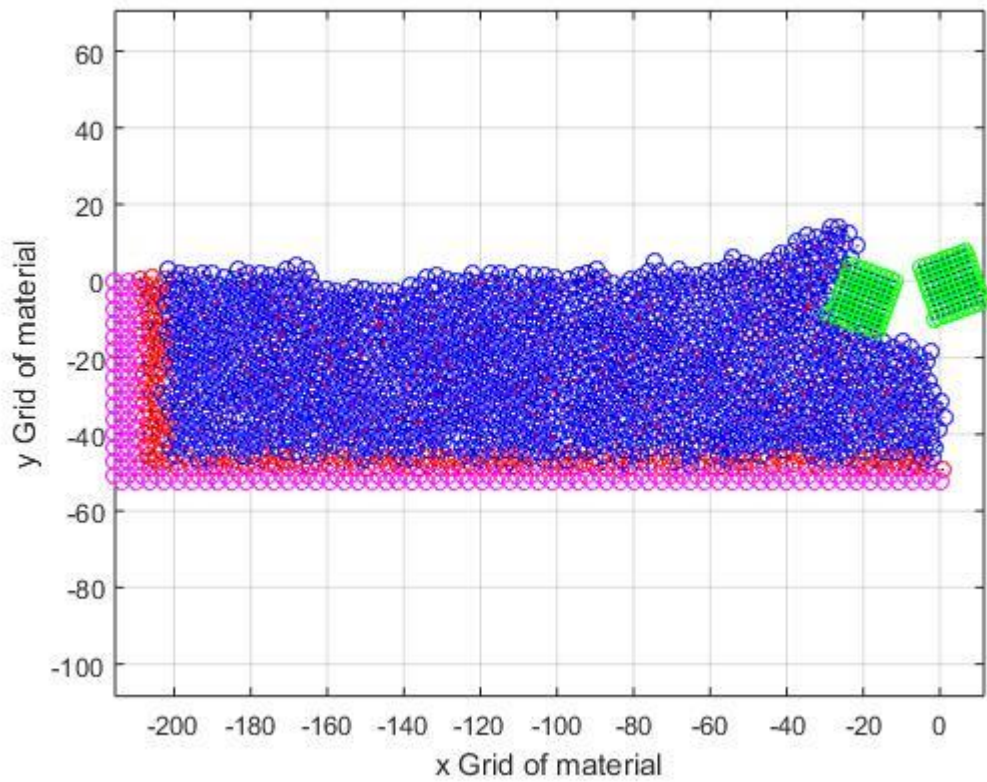
Από τα διαγράμματα των δυνάμεων κατά τους άξονες x και y (Εικόνες 5.63-5.64), είναι αντιληπτό ότι οι δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης παρουσιάζουν μέσες τιμές κατά x και y, είναι $F_{x\mu}=26.76 \text{ nN}$ και $F_{y\mu}=12.62\text{nN}$, αντιστοίχως. Το ύψος του αποβλίττου είναι 40 \AA και τα άτομα που το αποτελούν είναι 153.

5.6.2 Προσομοίωση 5b

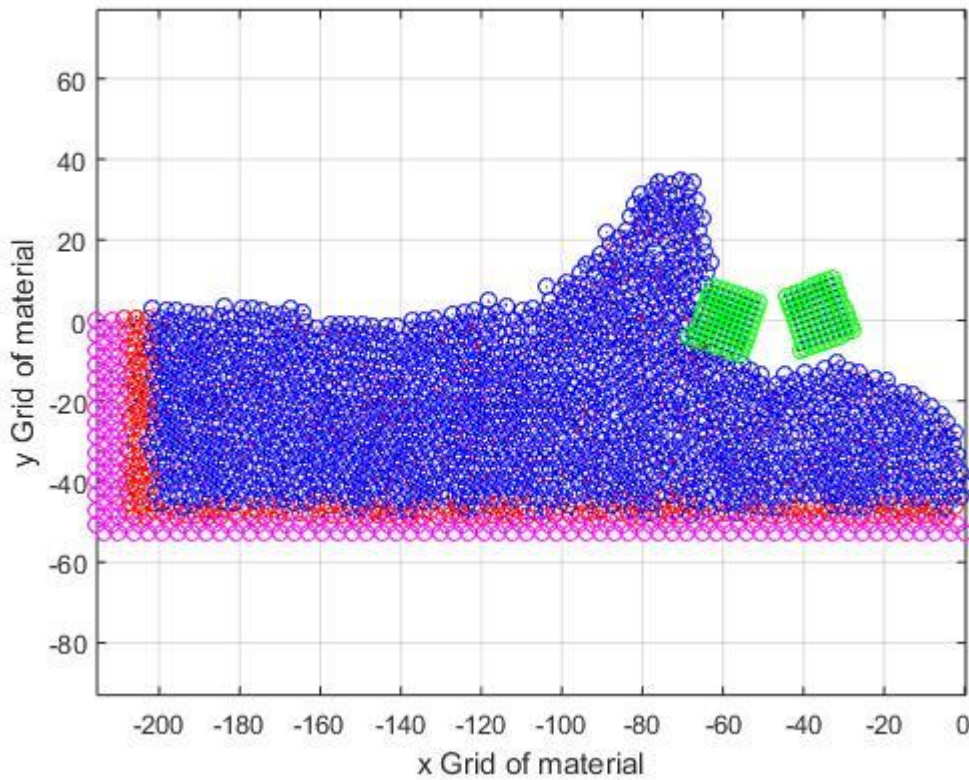
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 5b είναι :

Προσομοίωση 5b	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 1 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	-20 ^ο
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟ 2 ^ο ΕΡΓΑΛΕΙΟ	+20 ^ο
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	10 \AA
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	492 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	1800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 1	100
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ 2	100
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	80 fsec

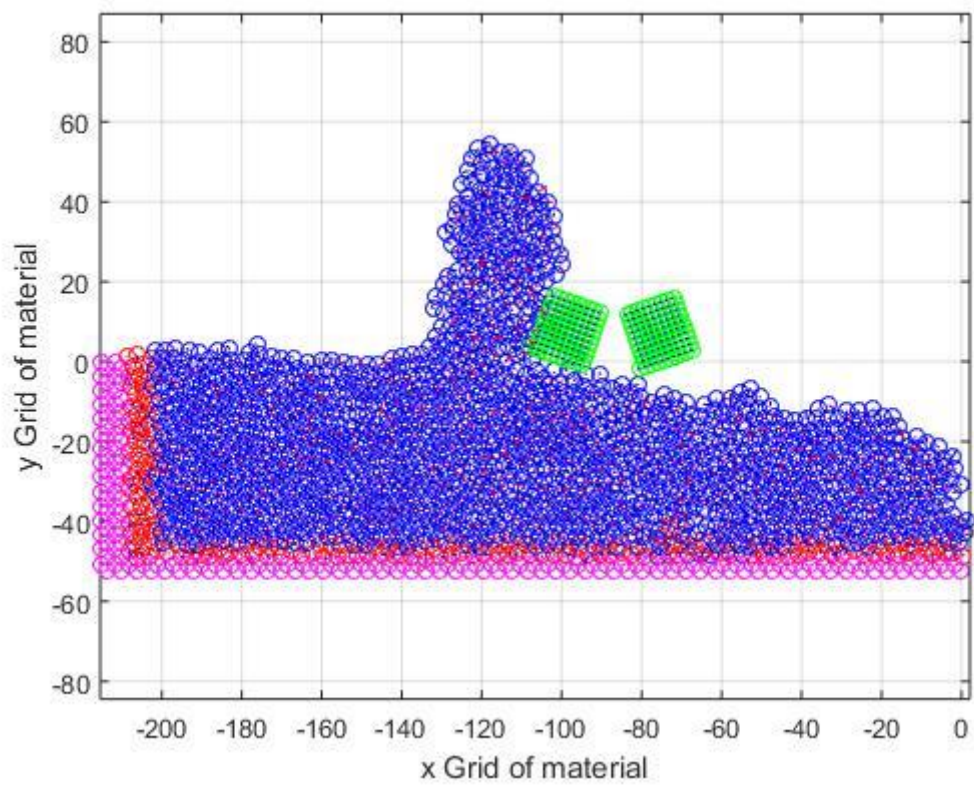
Πίνακας 5.12: Παράμετροι προσομοίωσης 5b



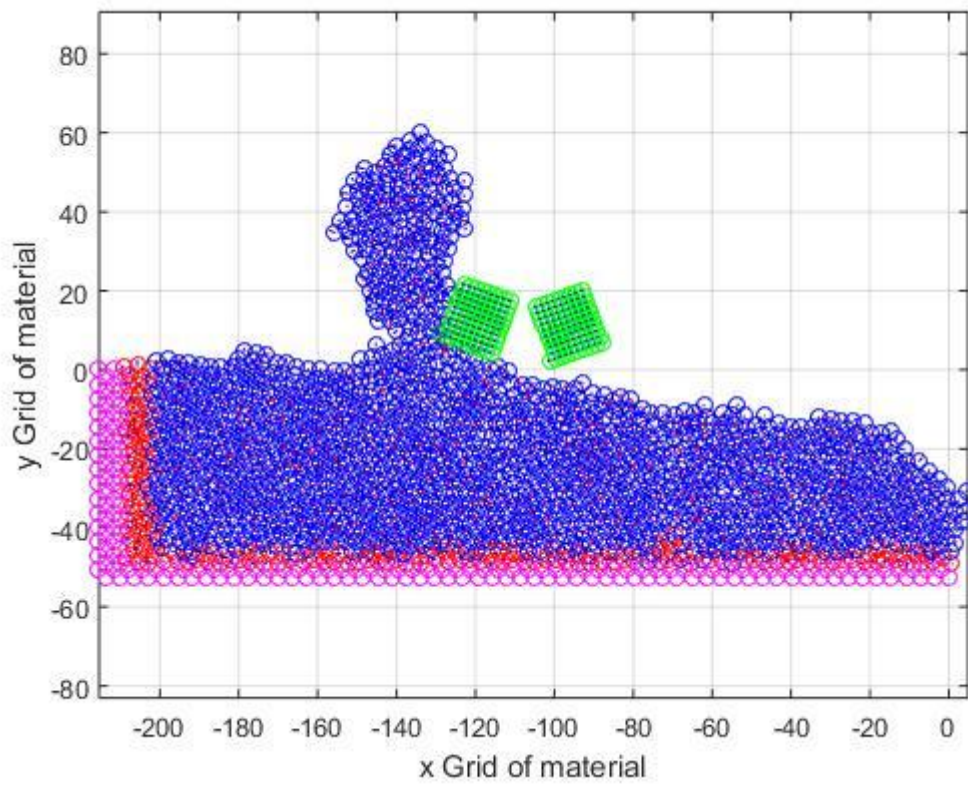
Εικόνα 5.65: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης κατά την έναρξη της κατεργασίας



Εικόνα 5.66: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας

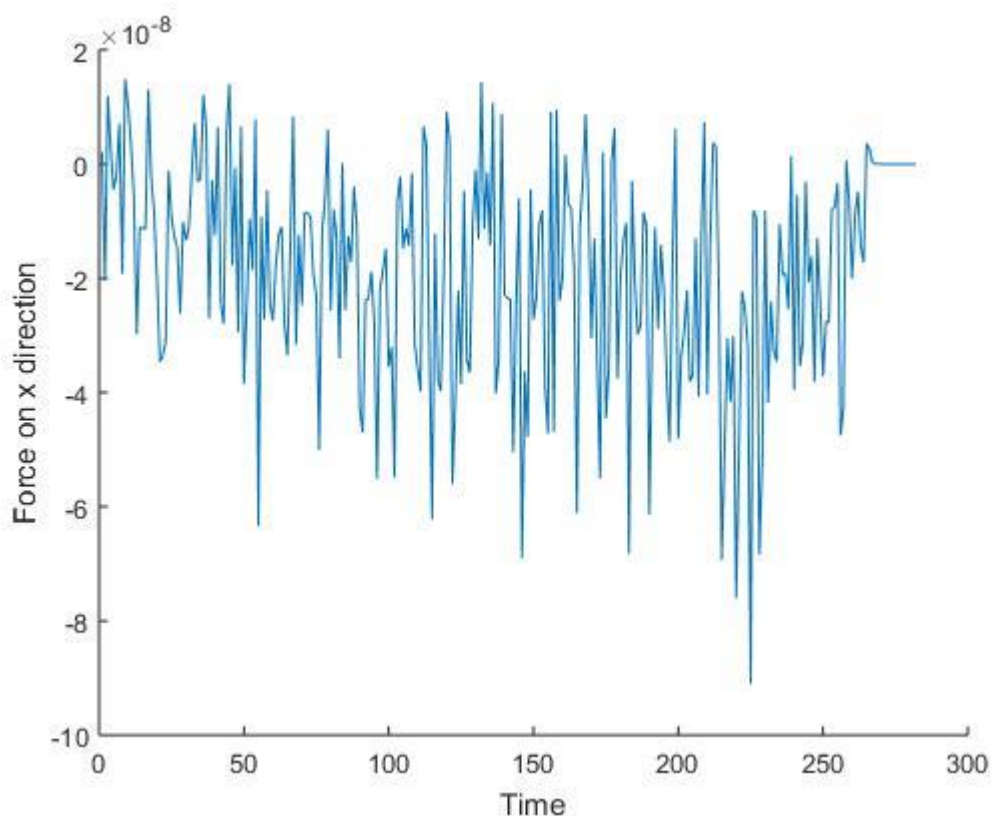


Εικόνα 5.67: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας

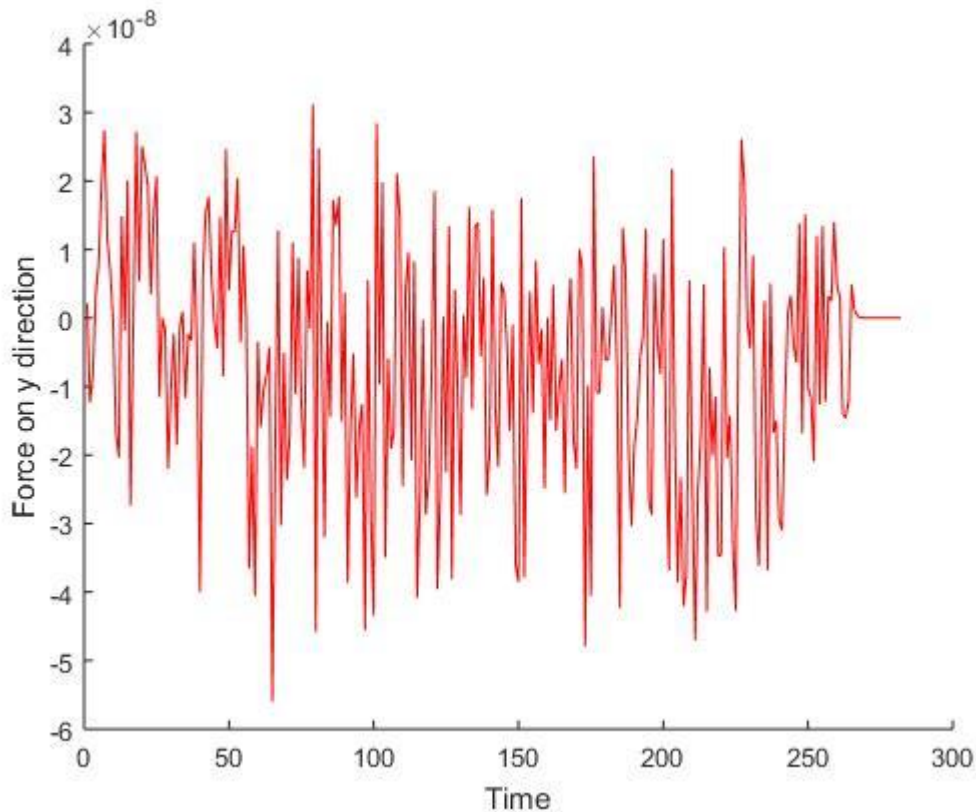


Εικόνα 5.68: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Από τις παραπάνω εικόνες των φάσεων της κατεργασίας, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι το απόβλιττο αποκτάει μεγαλύτερη κλίση σε σχέση με την 1^η περίπτωση και αυτό οφείλεται στη μεγαλύτερη γωνία αποβλίττου του 1^{ου} κοπτικού εργαλείου. Η διαφορά αυτή στις γωνίες έχει και σαν αποτέλεσμα το φαινόμενο του σχηματισμού “λαιμού” να είναι πιο έντονο. Επίσης εξαιτίας του λόγου που παρουσιάσαμε παραπάνω ο 2^{ος} κόκκος επηρεάζει ακόμα λιγότερο την επιφάνεια της κατεργασμένης επιφάνειας με αποτέλεσμα να υπάρχουν περισσότερες ανωμαλίες και “βουναλάκια” στην κατεργασμένη επιφάνεια. Τέλος παρατηρούμε ότι το μέγεθος του αποβλίττου είναι αρκετά μεγαλύτερο σε σχέση με την 1^η περίπτωση.



Εικόνα 5.69: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου

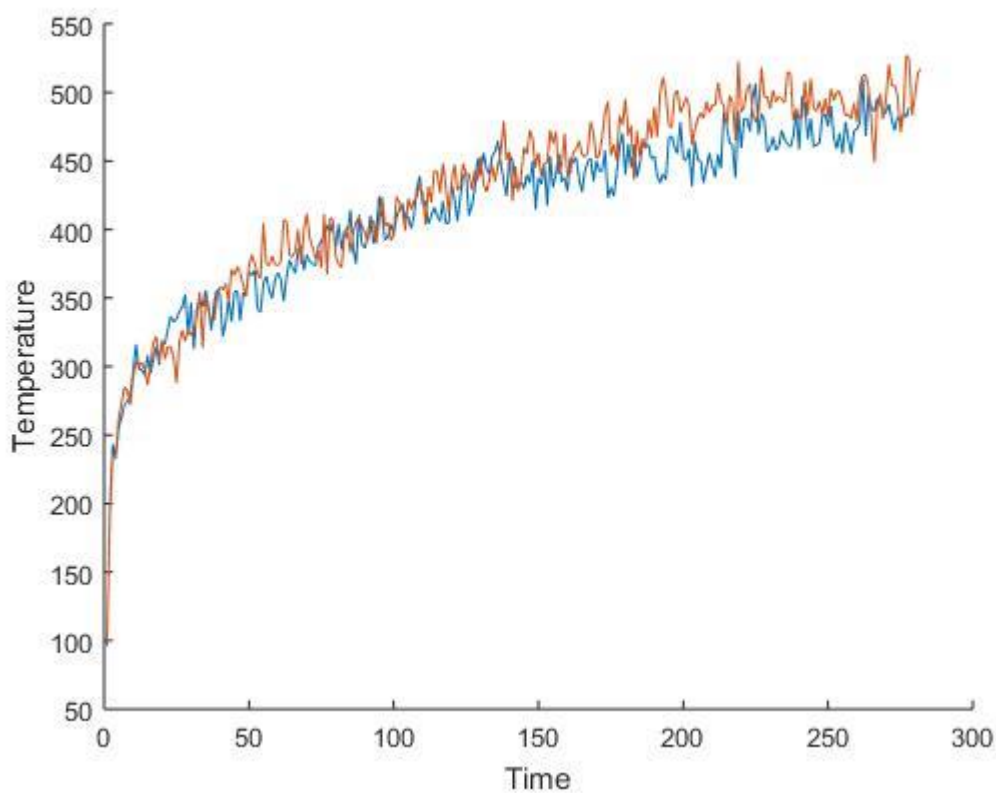


Εικόνα 5.70: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

Σε αυτή την περίπτωση προσομοίωσης, οι δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης παρουσιάζουν μέσες τιμές κατά x και y , $F_{x\mu}=29.52nN$ και $F_{y\mu}=10.94nN$, αντιστοίχως. Παρατηρούμε ότι η δύναμη κοπής F_x εξακολουθεί να είναι μεγαλύτερη από τη δύναμη κοπής F_y . Επιπλέον, παρατηρούμε ότι οι δυνάμεις κοπής κατά x , με την αύξηση του βάθους κοπής, έχουν αυξηθεί. Συγκεκριμένα, για τη δύναμη κοπής F_x η μείωση είναι της τάξης του 10.31%, ενώ για την F_y η μείωση είναι της τάξης του 13.31%. Το ύψος του αποβλίττου αυξήθηκε σε 60 Å και τα άτομα που το αποτελούν σε 198.

5.6.3 Παρατηρήσεις

Με το πέρας της δεύτερης σειράς προσομοιώσεων, αξίζει να σημειώσουμε επίσης κάποια πράγματα όπως κάναμε και στην πρώτη σειρά. Αρχικά παρατηρούμε στο διάγραμμα 5.71 τις σωρευτικές θερμοκρασίες ανά βάθος κοπής. Με **μπλε** παριστάνουμε τη θερμοκρασία για την 1^η περίπτωση και με **κόκκινο** για τη 2^η περίπτωση. Παρατηρούμε ότι η θερμοκρασία στη 2^η περίπτωση όπου οι γωνίες αποβλίπτου είναι μεγαλύτερες και για τα 2 κοπτικά είναι μεγαλύτερη από την 1^η περίπτωση.



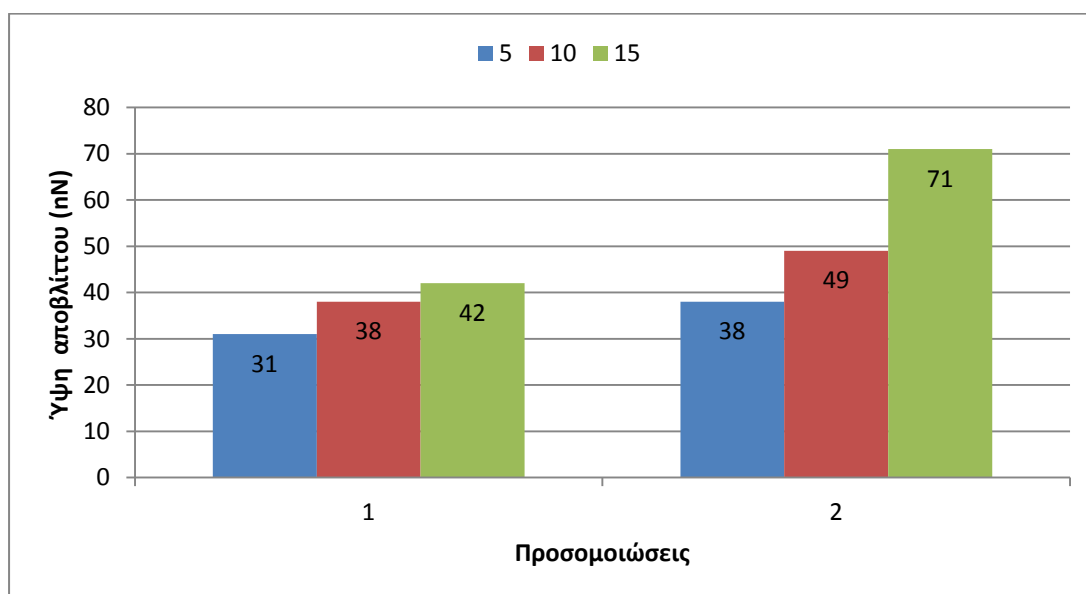
Εικόνα 5.71: Σωρευτική θερμοκρασία σε °C των ατόμων του υλικού κατεργασίας ανά βάθος κοπής.

5.7 Σύγκριση Αποτελεσμάτων Προσομοιώσεων

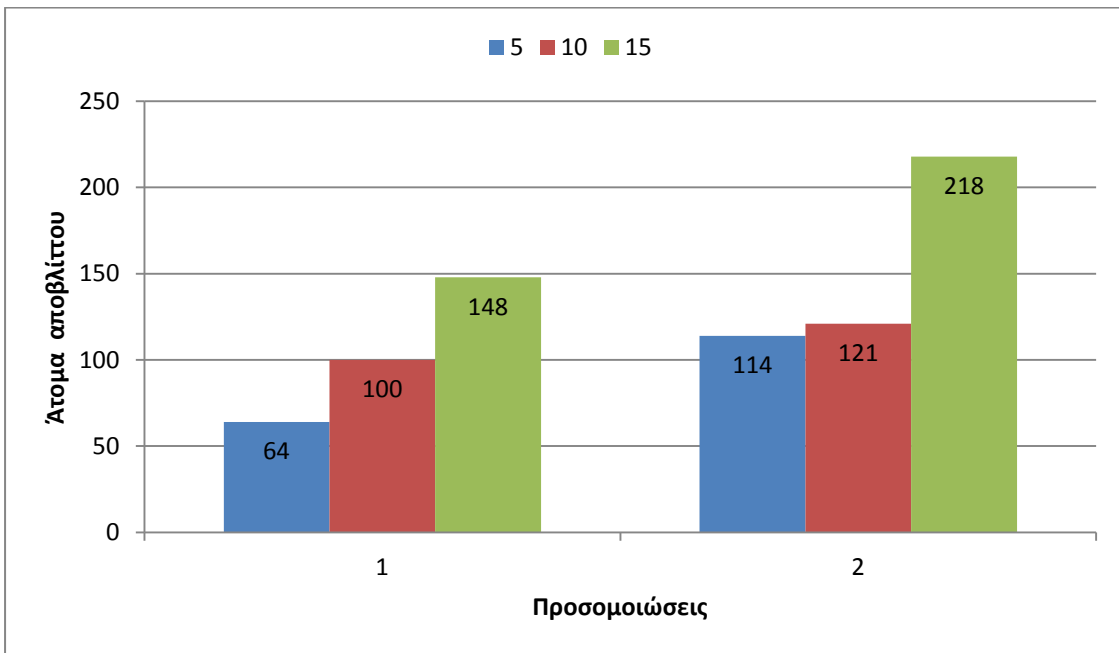
Στη συγκεκριμένη παράγραφο θα γίνει μία προσπάθεια συγκέντρωσης και συνοπτικής παρουσίασης των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων που προηγήθηκαν. Επιπλέον, θα προχωρήσουμε σε γραφικές συγκρίσεις κάποιων χαρακτηριστικών που μας απασχόλησαν.

5.7.1 Σύγκριση Αποτελεσμάτων των Προσομοιώσεων 1 και 2

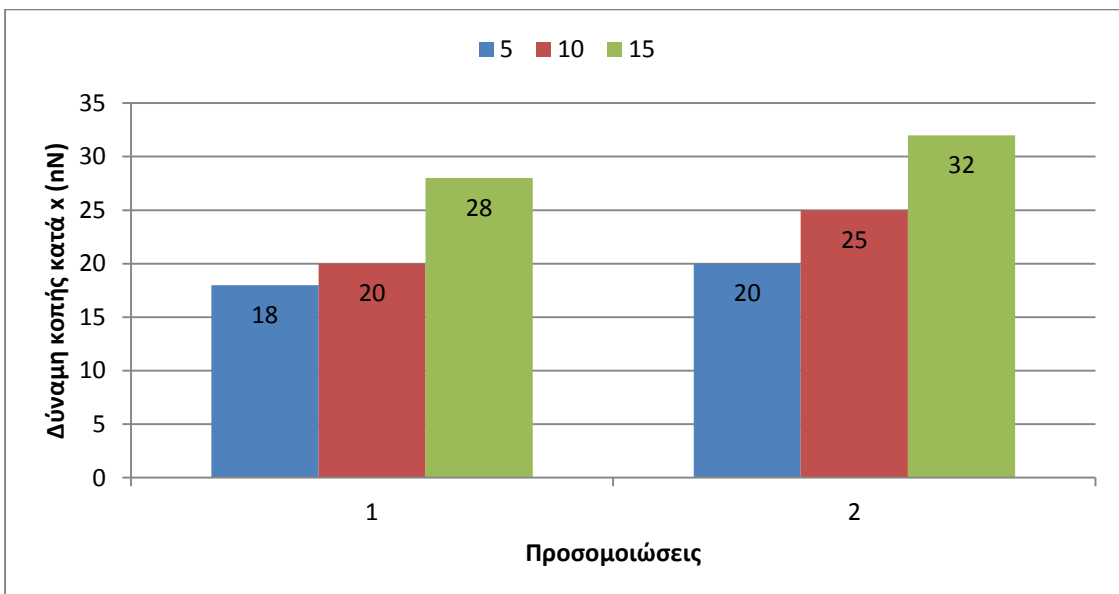
Αρχικά, στις Εικόνες 5.72-5.75, μπορούμε να παρατηρήσουμε τις δυνάμεις και τα απόβλιττα που αναπτύσσονται για κάθε προσομοίωση. Πιο συγκεκριμένα, στα διαγράμματα αυτά παρουσιάζονται οι μέσες τιμές των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου ($F_{cxμ}$ και $F_{cyμ}$), κατά τους x και y άξονες, καθώς και τα ύψη και τα άτομα αποβλίττου. Όλες οι δυνάμεις εκφράζονται σε nN και τα ύψη σε nm.



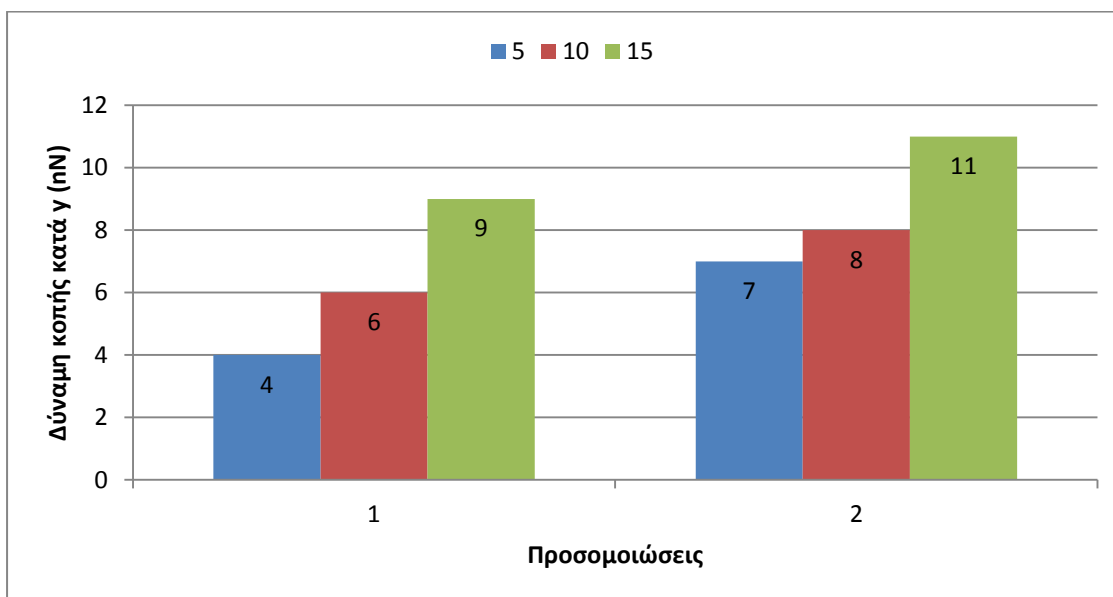
Εικόνα 5.72: Υψη αποβλίττου για τα 3 βάθη κοπής στην 1^η, στην 2^η σειρά προσομοιώσεων.



Εικόνα 5.73: Ατομα αποβλήττου για τα 3 βάθη κοπής στην 1^η και στην 2^η σειρά προσομοιώσεων



Εικόνα 5.74: Μέση δύναμη κοπής κατά χάξονα για τα 3 βάθη κοπής στην 1^η και στην 2^η σειρά προσομοιώσεων



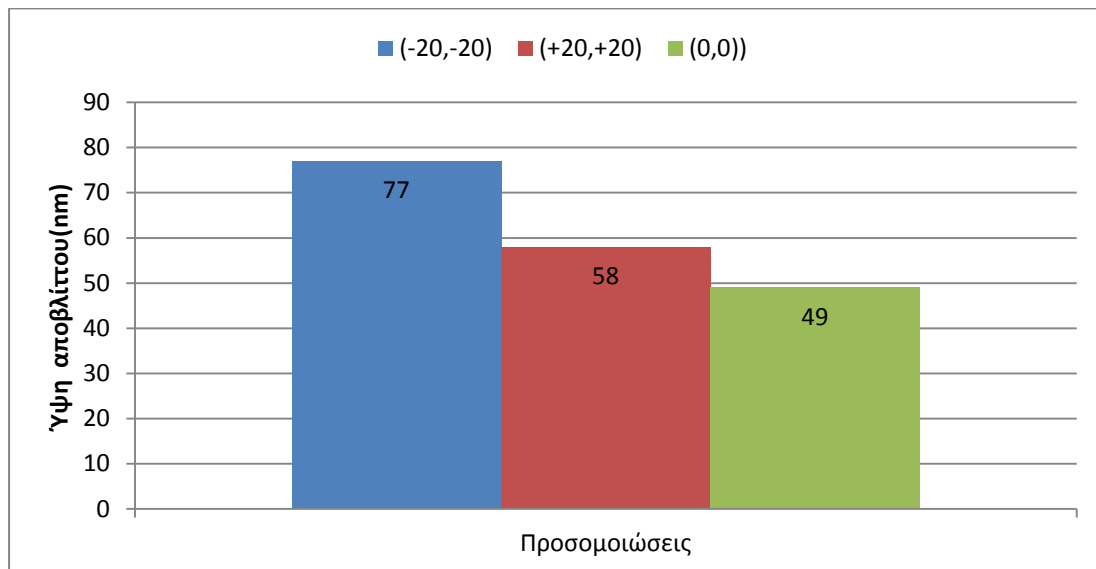
Εικόνα 5.75: Μέση δύναμη κοπής κατά γάζονα για τα 3 βάθη κοπής στην 1^η και στην 2^η σειρά προσομοιώσεων

Εύκολα παρατηρούμε πως οι δυνάμεις κοπής του κόκκου, επηρεάζονται άμεσα από τη ταχύτητα του εργαλείου. Παρατηρούμε ότι όσο αυξάνεται η ταχύτητα κοπής και το βάθος της λείανσης τόσο αυξάνονται τα παραπάνω μετρούμενα μεγέθη. Όσον αφορά τις δυνάμεις, παρατηρείται βαθμιαία αύξηση των δυνάμεων κοπής του κόκκου, με αύξηση του βάθους λείανσης. Αυτό συμβαίνει γιατί το εργαλείο κοπής έρχεται σε επαφή με περισσότερα άτομα υλικού πράγμα που οδηγεί σε περισσότερη παραμόρφωση του υλικού και μεγαλύτερους όγκους αποβλίττου. Αυτό πρακτικά οδηγεί σε ανάπτυξη μεγαλύτερων δυνάμεων κοπής.

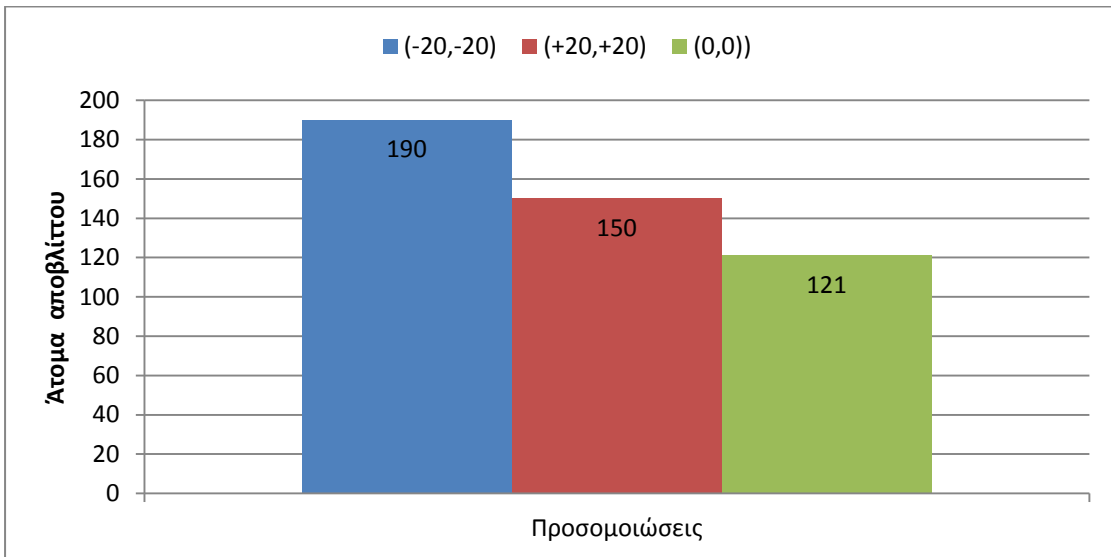
5.7.2 Σύγκριση Αποτελεσμάτων Προσομοιώσεων 3 και 2b

Στην ενότητα αυτή θα συγκρίνουμε 3 παρόμοιες περιπτώσεις για να δούμε κατά πόσο επηρεάζει το πρόσημο της γωνίας αποβλίττου και για τα 2 κοπτικά εργαλεία το μέγεθος του αποβλίττου και τις δυνάμεις κοπής.

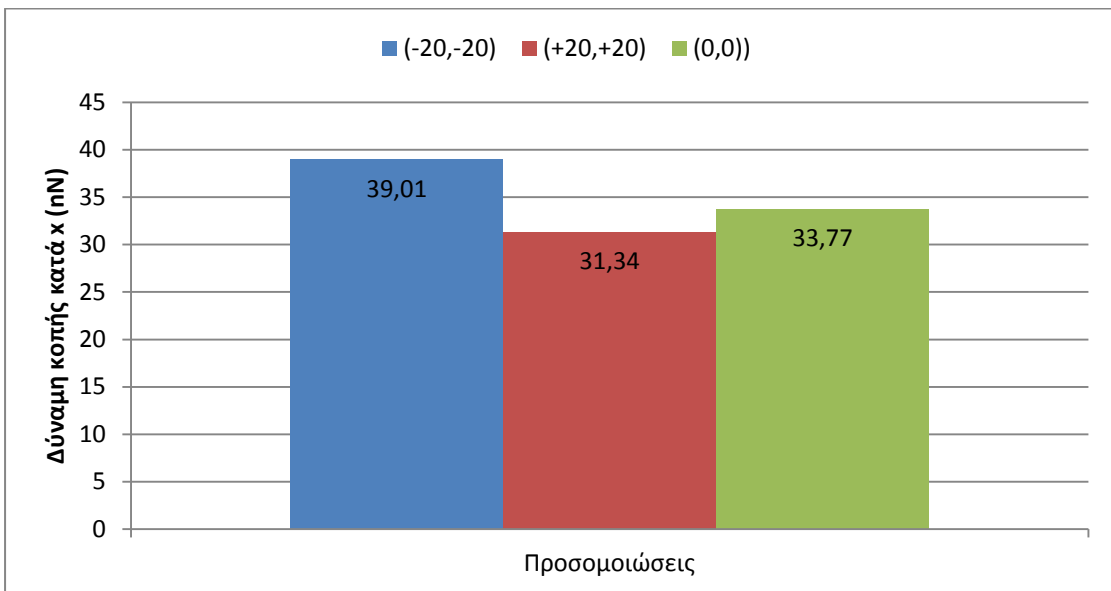
Στις Εικόνες 5.76-5.79, μπορούμε να παρατηρήσουμε τις δυνάμεις και τα απόβλιττα που αναπτύσσονται για κάθε περίπτωση. Πιο συγκεκριμένα, στα διαγράμματα αυτά παρουσιάζονται οι μέσες τιμές των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου (F_{cxm} και F_{cym}), κατά τους x και y άξονες, καθώς και τα ύψη και τα άτομα αποβλίττου. Όλες οι δυνάμεις εκφράζονται σε nN και τα ύψη σε nm.



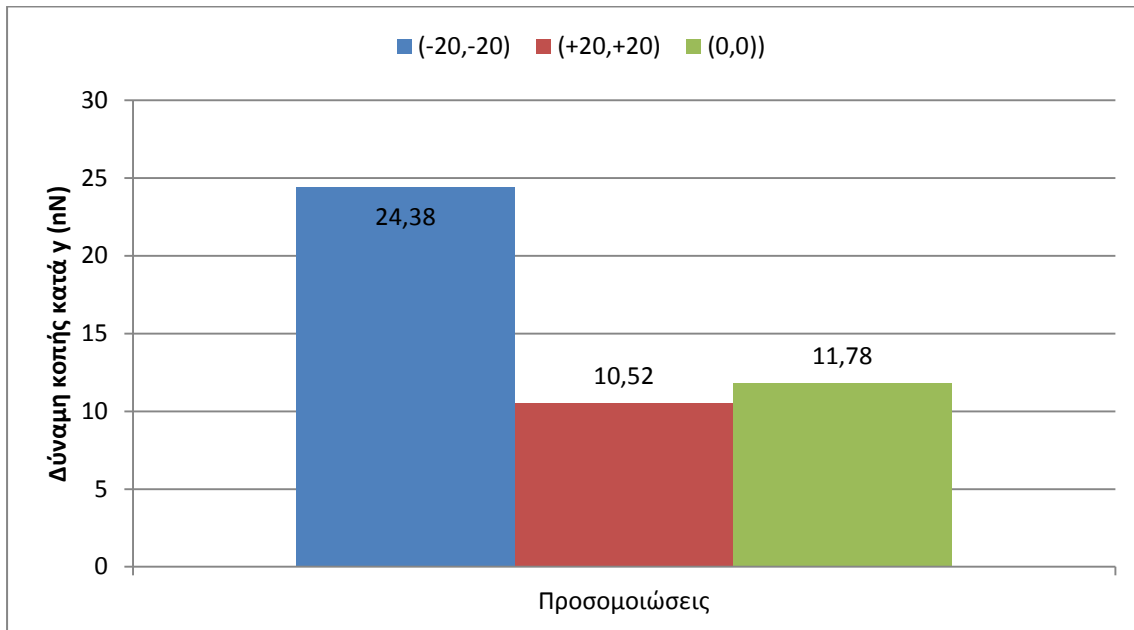
Εικόνα 5.76: Υψη αποβλίττου για τις 3 διαφορετικές συνθήκες προσομοιώσεων.



Εικόνα 5.77: Άτομα αποβλήττου για τις 3 διαφορετικές συνθήκες προσομοιώσεων.



Εικόνα 5.78: Μέση δύναμη κοπής κατά xάξονα για τις 3 διαφορετικές συνθήκες προσομοιώσεων.



Εικόνα 5.79: Μέση δύναμη κοπής κατά γάζονα για τις 3 διαφορετικές συνθήκες προσομοιώσεων.

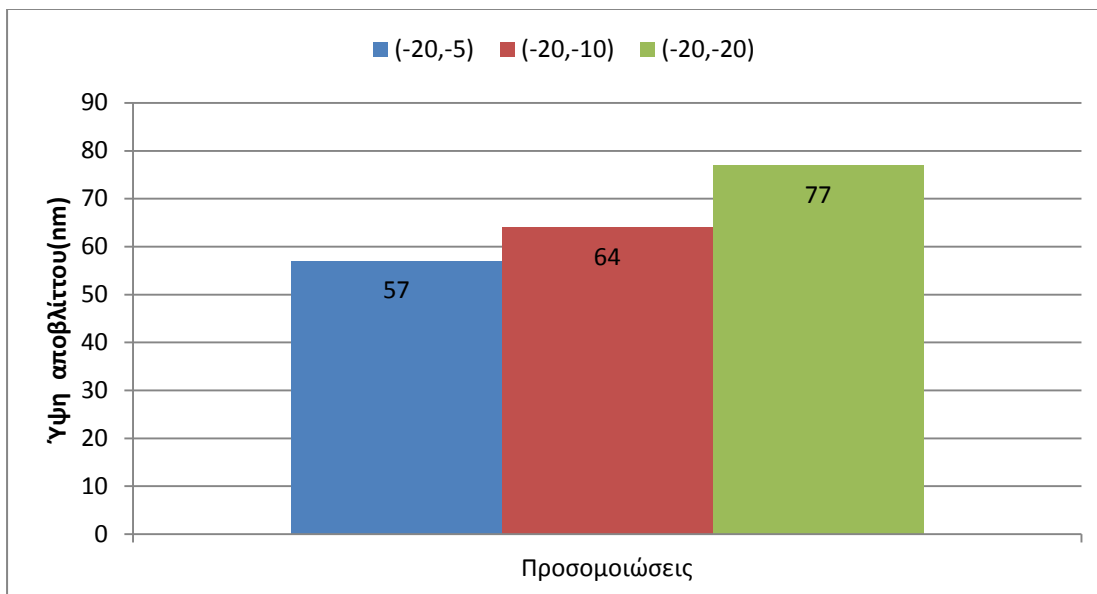
Εύκολα παρατηρούμε πως το μέγεθος του αποβλίττου επηρεάζεται άμεσα από τις γωνίες που έχουν τα κοπτικά μας εργαλεία. Παρατηρούμε επίσης ότι όσο μειώνονται οι δύο γωνίες τόσο αυξάνονται οι δυνάμεις κοπής και στους 2 άξονες. Αυτό συμβαίνει γιατί η εργαζόμενη πλευρά του εργαλείου κοπής έρχεται σε επαφή με περισσότερα άτομα υλικού πράγμα που οδηγεί σε περισσότερη παραμόρφωση του υλικού και μεγαλύτερους όγκους αποβλίττου. Αυτό πρακτικά οδηγεί σε ανάπτυξη μεγαλύτερων δυνάμεων κοπής.

5.7.3 Σύγκριση Αποτελεσμάτων Προσομοιώσεων 4 και 3a

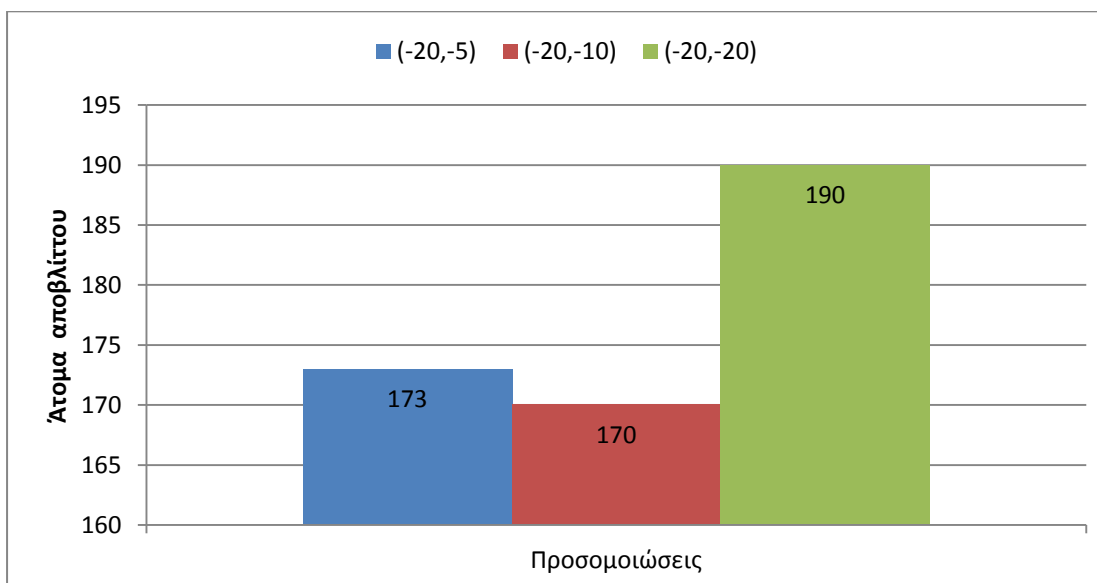
Στην ενότητα αυτή θα συγκρίνουμε 3 παρόμοιες περιπτώσεις για να δούμε κατά πόσο επηρεάζει η γωνία αποβλίττου του 2^{ου} κοπτικού εργαλείου το μέγεθος του αποβλίττου και τις δυνάμεις κοπής.

Αρχικά, στις Εικόνες 5.80-5.83, μπορούμε να παρατηρήσουμε τις δυνάμεις και τα απόβλιττα που αναπτύσσονται για κάθε προσομοίωση. Πιο συγκεκριμένα, στα διαγράμματα αυτά παρουσιάζονται οι μέσες τιμές των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου ($F_{cxμ}$ και $F_{cyμ}$), κατά τους x και

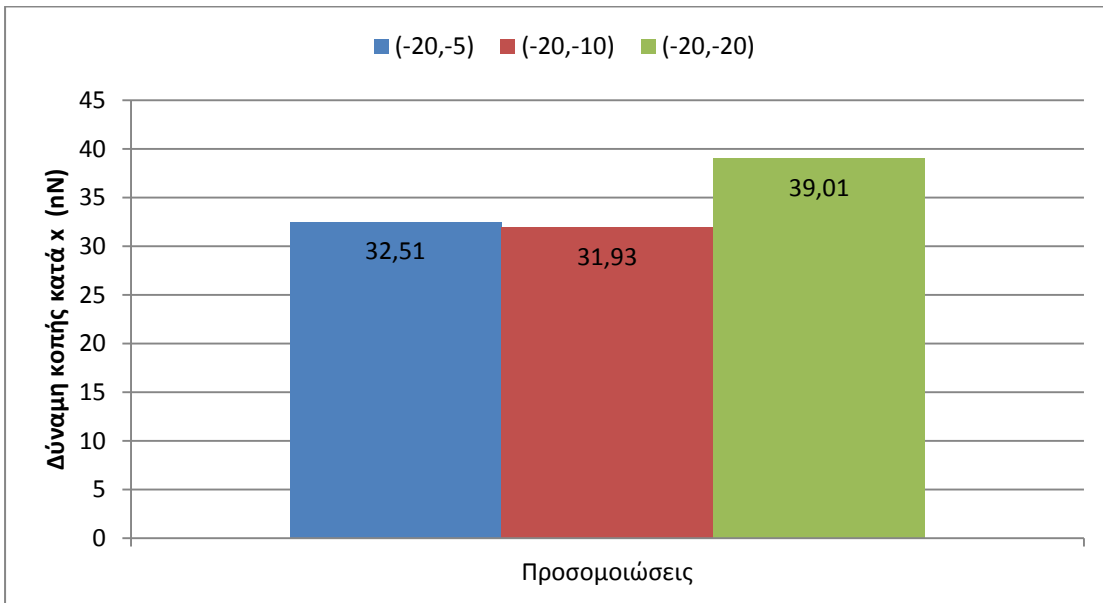
γάξονες, καθώς και τα ύψη και τα άτομα αποβλίττου. Όλες οι δυνάμεις εκφράζονται σε nN και τα ύψη σε nm.



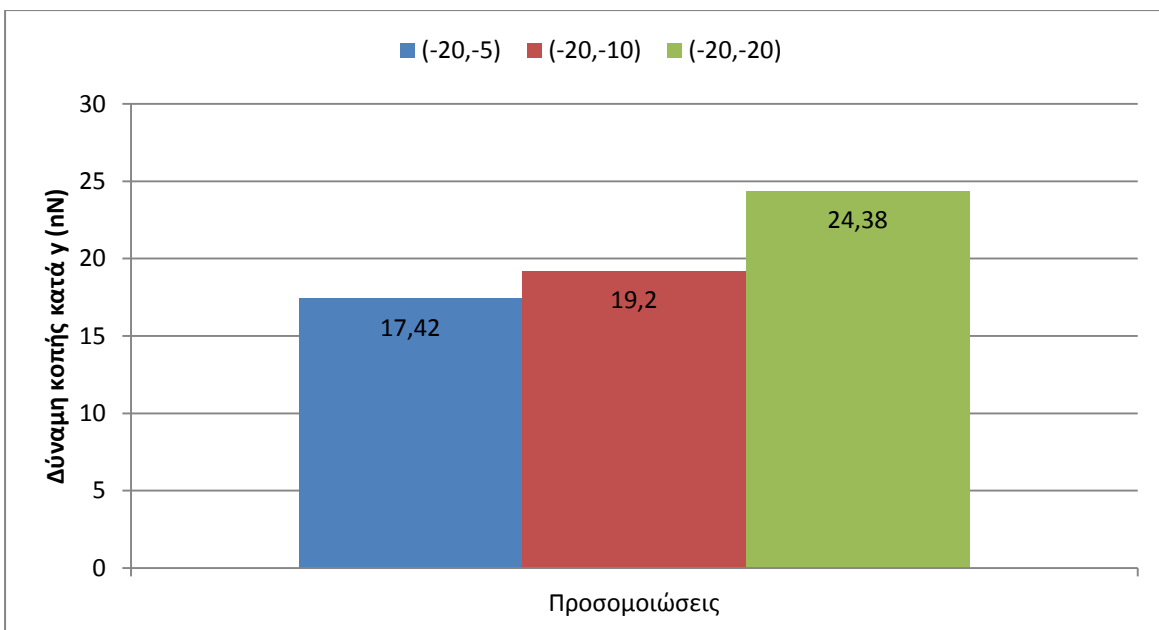
Εικόνα 5.80: Ύψη αποβλίττου για τις 3 διαφορετικές συνθήκες προσομοιώσεων.



Εικόνα 5.81: Άτομα αποβλίττου για τις 3 διαφορετικές συνθήκες προσομοιώσεων.



Εικόνα 5.82: Μέση δύναμη κοπής κατά χιάζονα για τις 3 διαφορετικές συνθήκες προσομοιώσεων.



Εικόνα 5.83: Μέση δύναμη κοπής κατά γιάζονα για τις 3 διαφορετικές συνθήκες προσομοιώσεων.

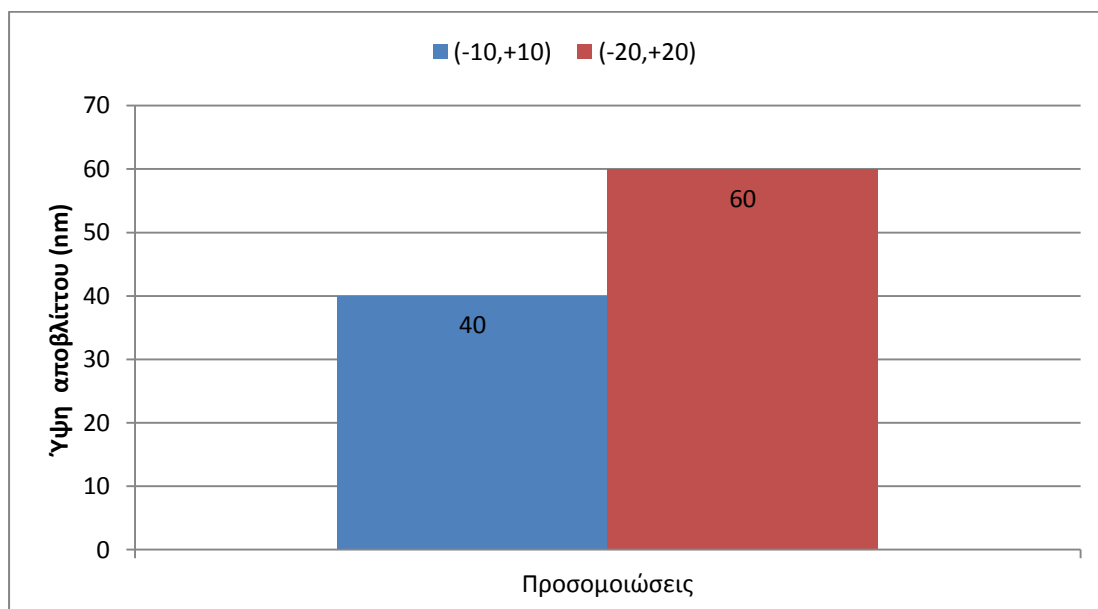
Εύκολα παρατηρούμε πως για μικρές γωνίες αποβλίττου του 2^ο κοπτικού εργαλείου δεν παρατηρούνται μεγάλες διαφορές τόσο στις δυνάμεις κοπής όσο και στο μέγεθος του αποβλίττου. Παρατηρούμε όμως ότι για τη μεγαλύτερη γωνία αποβλίττου για το 2^ο εργαλείο υπάρχουν σημαντικές

διαφορές και αυξάνονται κατά πολύ τόσο οι δυνάμεις κοπής όσο και το μέγεθος του αποβλίττου.

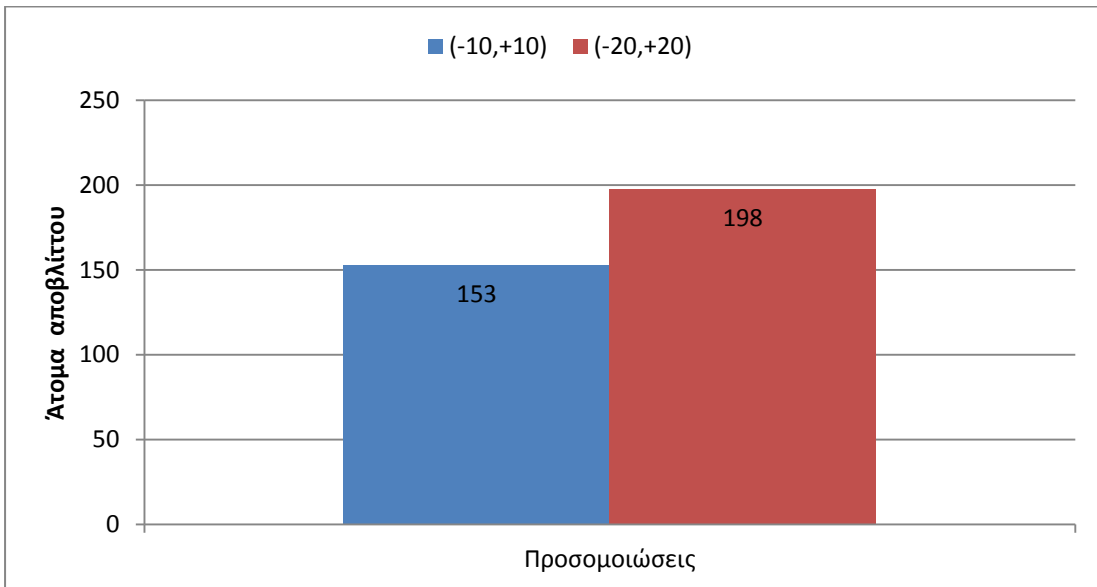
5.7.4 Σύγκριση Αποτελεσμάτων της Προσομοίωσης 5

Στην ενότητα αυτή θα συγκρίνουμε 2 παρόμοιες περιπτώσεις για να δούμε κατά πόσο επηρεάζει το μέγεθος της γωνία αποβλίττου των 2 κοπτικών εργαλείων το μέγεθος του αποβλίττου και τις δυνάμεις κοπής.

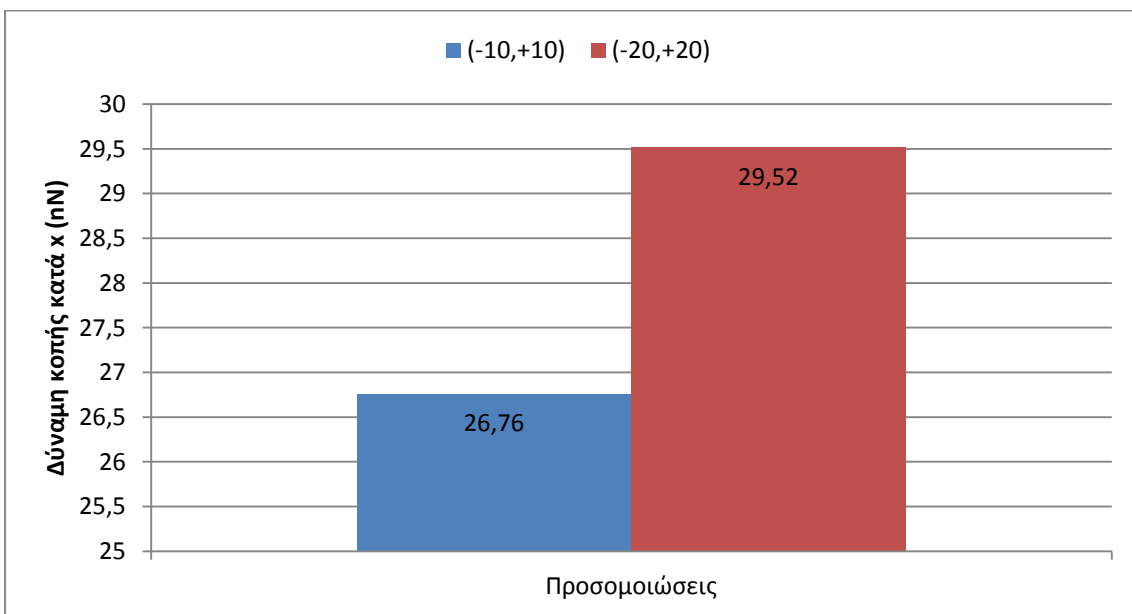
Στις Εικόνες 5.84-5.87, μπορούμε να παρατηρήσουμε τις δυνάμεις, τις θερμοκρασίες και τα απόβλιττα που αναπτύσσονται για κάθε περίπτωση της προσομοίωσης. Πιο συγκεκριμένα, στα διαγράμματα αυτά παρουσιάζονται οι μέσες τιμές των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου ($F_{cxμ}$ και $F_{cyμ}$), κατά τους x και y άξονες, καθώς και τα ύψη και τα άτομα αποβλίττου. Όλες οι δυνάμεις εκφράζονται σε nN και τα ύψη σε nm.



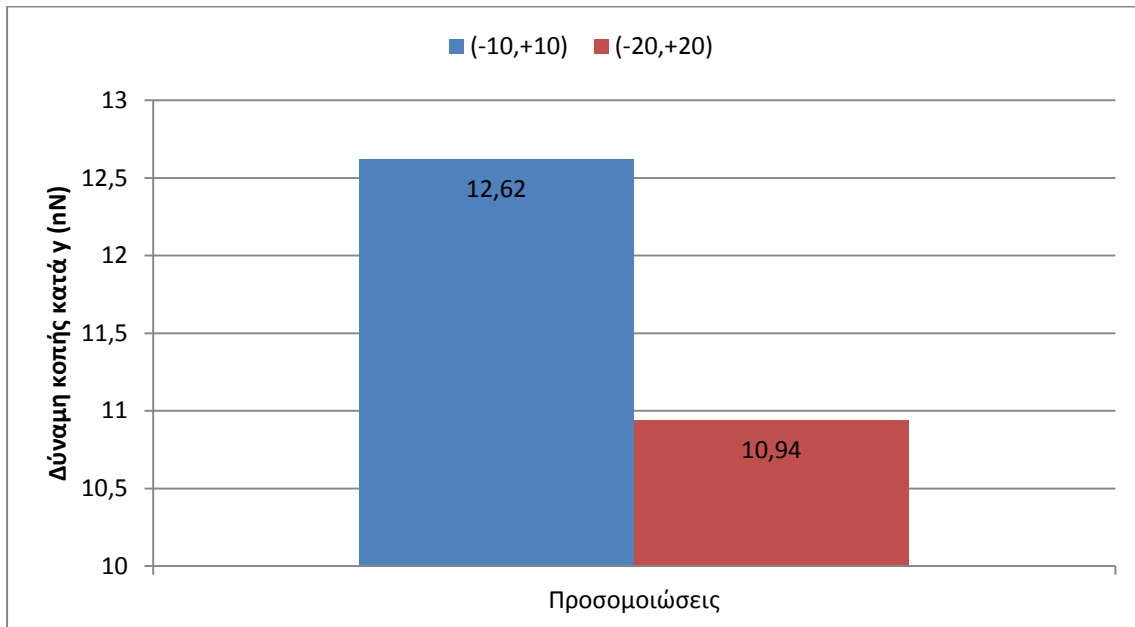
Εικόνα 5.84: Ύψη αποβλίττου για τις 3 διαφορετικές συνθήκες προσομοιώσεων.



Εικόνα 5.85: Άτομα αποβλήττου για τις 3 διαφορετικές συνθήκες προσομοιώσεων.



Εικόνα 5.86: Μέση δύναμη κοπής κατά χάζονα για τις 3 διαφορετικές συνθήκες προσομοιώσεων.



Εικόνα 5.87: Μέση δύναμη κοπής κατά γάζονα για τις 3 διαφορετικές συνθήκες προσομοιώσεων.

Εύκολα παρατηρούμε πως το μέγεθος του αποβλίττου είναι μεγαλύτερο στην 2^η περίπτωση όπου έχουμε μεγαλύτερες γωνίες αποβλίττου. Η δύναμη κατά χείναι επίσης μεγαλύτερη στη δεύτερη περίπτωση όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε από τα διαγράμματα. Από την άλλη η δύναμη κοπής στον άξονα γείναι μεγαλύτερη για την 1^η περίπτωση .

Κεφάλαιο 6

Συμπεράσματα και προτάσεις για περαιτέρω μελέτη

6.1 Συμπεράσματα

Από τις προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν μπορούν να εξαχθούν ορισμένα συμπεράσματα όσον αφορά την ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας, το μηχανισμό σχηματισμού αποβλίττου, τις αναπτυσσόμενες δυνάμεις και τις θερμοκρασίες που εμφανίζονται στο υλικό κατεργασίας.

Με αύξηση του βάθους κοπής, η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας μειώνεται και δημιουργούνται όλο και περισσότερα κενά στο υλικό, καθώς τα άτομα έχουν την τάση να «φεύγουν». Η επιφανειακή τραχύτητα και οι επιφανειακές παραμορφώσεις είναι πολύ πιο έντονες. Το ύψος στο οποίο φτάνει το απόβλιττο φαίνεται να μεγαλώνει.

Οι δυνάμεις κοπής σε όλες τις περιπτώσεις ήταν μεγαλύτερες κατά την κατεύθυνση x σε σύγκριση με την κατεύθυνση y . Οι δυνάμεις κοπής έδειξαν εξάρτηση από το βάθος κοπής, καθώς η αύξηση του βάθους κοπής οδήγησε σε αύξηση των δυνάμεων, λόγω της επαφής του εργαλείου με μεγαλύτερο τμήμα του υλικού.

Όσον αφορά τη γωνία κοπής του 2^{ου} εργαλείου παρατηρήσαμε ότι επηρεάζει περισσότερο τη μορφή της κατεργασμένης επιφάνειας παρά το σχηματισμό του αποβλίττου.

Σχετικά με τις αναπτυσσόμενες θερμοκρασίες, παρατηρήθηκε ότι αυξάνονται με αύξηση του βάθους κοπής, καθώς η αύξηση του βάθους κοπής οδηγεί σε μεγαλύτερες ταχύτητες και επιταχύνσεις των ατόμων του υλικού, οι οποίες βάσει του μοντέλου που χρησιμοποιήθηκε, μεταφράζονται σε μεγαλύτερες θερμοκρασίες στο υλικό. Οι γωνίες αποβλίττου δεν επηρεάζουν ιδιαίτερα τις αναπτυσσόμενες θερμοκρασίες. Από την άλλη παρατηρήθηκε το φαινόμενο να αυξάνουν οι δυνάμεις κοπής καθώς αυξάνεται το μέτρο της γωνίας αποβλίττου. Επίσης παρατηρήθηκε το σχηματιζόμενο απόβλιττο να λαμβάνει την κλίση που έχει και το κοπτικό εργαλείο. (λειαντικός κόκκος)

Τα αποτελέσματά της παρούσας διπλωματικής είναι κυρίως ποιοτικά όσον αφορά τις θερμοκρασίες, μιας και η προσέγγιση που κάναμε βάσει κλασικής μηχανικής δεν μοντελοποιεί με ακρίβεια τη μεταφορά θερμότητας για μέταλλα. Η ατομιστική ανάλυση μεταφοράς θερμότητας απαιτεί ενσωμάτωση ηλεκτρονιακών μοντέλων μεταφοράς θερμότητας στο ήδη υπάρχον κλασικό μοντέλο Μοριακής Δυναμικής.

Πρέπει ακόμη να σημειωθεί ότι, όσον αφορά τις ταχύτητες κοπής της συγκεκριμένης προσομοίωσης, αλλά και γενικά των προσομοιώσεων Μοριακής Δυναμικής, οι ταχύτητες που χρησιμοποιούνται είναι αρκετά υψηλές και σε ορισμένες περιπτώσεις μη ρεαλιστικές, κυρίως λόγω του γεγονότος ότι μειώνουν τους απαιτούμενους χρόνους προσομοίωσης. Η πρακτική αυτή έχει ως αποτέλεσμα να μην συμπεριλαμβάνεται στο μοντέλο χρόνος χαλάρωσης και άρα η προσομοίωση να οδηγεί σε υλικό με περισσότερες παραμορφώσεις σε σύγκριση με την πραγματικότητα.

Παρόλο που με τον τρόπο αυτό βέβαια οι ερευνητές βρίσκονται από την ασφαλή πλευρά των αποτελεσμάτων, η έρευνα πρέπει να στραφεί σε υιοθέτηση ταχυτήτων κοπής πιο κοντά στις πραγματικές (1-5 m/s), πράγμα που θα βοηθήσει να εξαλειφθούν και οι πιθανές παραμορφώσεις του υλικού, αφού θα δίνεται επιπλέον χρόνος χαλάρωσης στα άτομα και οι προσομοιώσεις θα προσεγγίζουν με μεγαλύτερη ακρίβεια την πραγματικότητα. Βέβαια μέχρι σήμερα για ταχύτητα π.χ. 1 m/s, ένας οκταπύρηνος επεξεργαστής χρειάζεται μια εβδομάδα προσομοίωσης.

6.2 Προτάσεις για περαιτέρω μελέτη

Σε κάποιο επόμενο στάδιο μελέτης, κάποιες προτάσεις για την εξαγωγή καινούριων αποτελεσμάτων και τη βαθύτερη ανάλυση του αντικειμένου, είναι οι ακόλουθες:

- Αρχικά, η μετάβαση στις τρεις διαστάσεις και η εφαρμογή περιοδικών συνοριακών συνθηκών στη z διάσταση.
- Επιπλέον, μία σημαντική βελτίωση θα αφορούσε την αλλαγή της μορφής του κοπτικού εργαλείου, για να είναι πιο ρεαλιστικό και για να μελετηθεί η μεταβολή της ακτίνας καμπυλότητας στα αποτελέσματα της προσομοίωσης. Επίσης, το κοπτικό εργαλείο θα μπορούσε να θεωρηθεί ότι δέχεται παραμορφώσεις, προκειμένου να υπολογιστούν οι δυνάμεις που αναπτύσσονται σε αυτό και η παραμόρφωσή του.
- Επιπλέον, θα μπορούσαν να αλλαχθούν οι κρυσταλλικές διευθύνσεις στα υλικά, προκειμένου να μελετηθεί η επίδρασή τους στα διάφορα αποτελέσματα. Βέβαια, σημαντική εξέλιξη θα ήταν η αλλαγή του υλικού του τεμαχίου για την εύρεση της συμπεριφοράς και άλλων υλικών στο νανόκοσμο.
- Όσον αφορά στο υπολογιστικό τμήμα, θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί η μέθοδος του καταλόγου γειτόνων για την εύρεση των αλληλεπιδράσεων, αντί για τη μέθοδο όλων των ζευγών που χρησιμοποιήσαμε εμείς, για τη μείωση του υπολογιστικού φόρτου και του απαιτούμενου χρόνου υπολογισμού. Το αντικείμενο αυτό είναι ακόμη σε πρώιμο στάδιο και πλήθος παραγόντων μένει για να ενσωματωθεί στις διαδικασίες υπολογισμού, προκειμένου να αποκτηθεί κάποτε μία πλήρη εικόνα για την κατεργασία κοπής στο νανόκοσμο.
- Επιπλέον, θα μπορούσε να επιλεγθούν διαφορετικά τελικά σημεία προορισμού ώστε οι κόκκοι να ακολουθήσουν διαφορετικές τροχιές και να γίνει σύγκριση των διάφορων χαρακτηριστικών για τις τροχιές αυτές. Ακόμα είναι δυνατόν να προστεθούν και περισσότεροι κόκκοι στην προσομοίωση.

Βιβλιογραφία

- 1.** Meyer, M. and Pontikis, V., (1991), “Computer Simulation in Materials Science”, NATO ASI series, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, the Netherlands, Vol 205.
- 2.** R. Komanduri and L. M. Raff. A review on the molecular dynamics simulation of machining at the atomic scale. Proc. Instn Mech. Engrs, Part B, Journal of Engineering Manufacture, 215(B): 1639 – 1672, 2001.
- 3.** D. Frenkel, B. Smit, and M. A. Ratner. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, volume 50. Published by Academic Press, United States of America, 1997.
- 4.** Feynman, R. P., Leighton, R. B. and Sands, M., (1964), “Feynman Lectures on Physics”, Addison-Wesley.
- 5.** N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, J. Chem. Phys., 1953, 21, 1087-1092
- 6.** Adler, B. J. and Wainwright, T. E., (1959), “Studies in Molecular Dynamics General Method”, Journal of Chemical Physics, Vol. 31, p. 459.
- 7.** Παναγιώτης Γ. Σταυρόπουλος, Πειραματική και θεωρητική ανάλυση με τη χρήση Μοριακής δυναμικής του μηχανισμού φωτοαποδόμησης μεταλλικών υλικών προκαλούμενης από ακτίνες laser, Πανεπιστήμιο Πατρών, Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών, Εργαστήριο συστημάτων παραγωγής & αυτοματισμού / δυναμικής & θεωρίας μηχανών, Πάτρα 2007.
- 8.** H. Goldstein. Classical Mechanics. Addison – Wesley, Reading, Massachusetts, 1965.
- 9.** Frenkel, D. and Smit, B., (1996), “Understanding Molecular Simulation: from algorithms to applications”, Academic Press: San Diego.
- 10.** Η. Ηλιόπουλος, Εισαγωγή στη Μοριακή Προσομοίωση, Μοριακή Αναγνώριση, ΓΠΑ 2001.
- 11.** Ι. Κυρίκου, Α. Κάπου, Θ. Μαυρομούστακος, Κ. Πούλος, Μοριακά Μοντέλα: Ένα Ανεκτίμητο Εργαλείο στον Ορθολογιστικό Σχεδιασμό

Φαρμάκων, Άρθρο Επισκόπηση Φαρμακευτική 14, III, 109-123, 2001, Ινστιτούτο Οργανικής και Φαρμακευτικής Χημείας, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών, Αθήνα.

12. Σπανίδης Δημήτρης, Ανάλυση βάσεων για την εφαρμογή της μεθόδου MonteCarlo, Α.Π.Θ., Φεβρουάριος 2005

13. Belak, J., Stowers, I. F., 1991, The Indentation and Scraping of a Metal Surface: A Molecular Dynamics Study, Fundamentals of Friction: Macroscopic and Microscopic, Eds.: Singer, Pollock, ASI Series E, 220: 1-10.

14. Ikawa, N., Shimada, S., Tanaka, H., Ohmori, G., 1991. An Atomistic Analysis of Nanometric Chip Removal as Affected by Tool-Work Interaction in Diamond Turning, Annals of the CIRP, 40/1: 551-554.

15. Hoover, W. G., De Groot, A. J., 1990, Large-Scale Elastic-Plastic Indentation Simulations via Nonequilibrium Molecular Dynamics, Phys. Rev. A 10/42: 5844– 5853.

16. Landman, U., Luedtke, W. D., Nitzan, A., 1989, Dynamics of Tip-Substrate Interactions in Atomic Force Microscopy, Surface Science 210: 177- 184.

17. E. Brinksmeier, J. C. Aurich, E. Govekar, C. Heinzl, H.-W. Hoffmeister, F. Klocke, J. Peters, R. Rentsch, D. J. Stephenson, E. Uhlmann, K. Weinert, M. Wittmann. Advances in Modeling and Simulation of Grinding Processes, 2006, DOI: 10.1016/j.cirp.2006.10.003, Published by Elsevier Ltd.

18. I. Inasaki, R. Rentsch, Molecular Dynamics Simulation for Abrasive Processes Keio University, Yokohama, Japan Received on January 12, 1994

19. RapeepanPromyoo, Dr. Hazim El-Mounayri. Molecular Dynamics Simulation of Nanometric Machining Under Realistic Cutting Conditions Using LAMMPS. Thesis Presentation, Department of Mechanical Engineering Purdue School of Engineering and Technology, IUPUI, 2008.

20. Belak, J. and Stowers, I. F. A molecular dynamics model of the orthogonal cutting process. In Proceedings of the ASPE Annual Conference, Rochester, New York, 1990, p. 76.

21. Stowers, I. F., Belak, J., Lucca, D. A., Komanduri, R., Rhorer, R. L., Moriwaki, T., Okuda, K., Ikawa, N., Shimada, S., Tanaka, H., Dow, T. A. and Drescher, J. D. Molecular dynamics simulation of the chip forming process in single crystal copper and comparison with experimental data. In Proceedings of the ASPE Annual Conference, 1991, pp. 100-103.
22. Belak, J., Boercker, D. B. and Stowers, I. F. Simulation of nanometer-scale deformation of metallic and ceramic surfaces. MRS Bull., May 1993, 21(2),55-60.
23. Belak, J. Nanotribology: modeling atoms when surfaces collide. Energy and Technology Review, Lawrence Livermore National Laboratories (LLNL), August-September 1994, pp. 13-24.
24. Ikawa, N., Donaldson, R., Komanduri, R., Konig, W., McKeown, P. A., Moriwaki, T. and Stowers, I. Ultra precision metal cutting—the past, the present, and the future. Ann. CIRP, 1991, 40(2), 587-594.
25. Ikawa, N., Shimada, S., Tanaka, H. and Ohmori, G. An atomistic analysis of nanometric chip removal as affected by tool-work interaction in diamond turning. Ann. CIRP, 1991, 40(1), 551-554.
26. Shimada, S., Ikawa, N., Ohmori, G. and Tanaka, H. Molecular dynamics analysis as compared with experimental results of micromachining. Ann. CIRP, 1992,41(1), 117-120.
27. Shimada, S., Ikawa, N., Tanaka, H., Ohmori, G., Uchikoshi, J. and Yoshinaga, H. Feasibility study on ultimate accuracy in microcutting using molecular dynamics simulation. Ann. CIRP, 1993, 42(1), 91-94.
28. Shimada, S., Ikawa, N., Tanaka, H. and Uchikoshi, J. Structure of micromachined surface simulated by molecular dynamics analysis. Ann. CIRP, 1994, 43(1), 51-54.
29. Inamura, T., Suzuki, H. And Takezawa, N. Cutting experiments in a computer using atomic models of a copper crystal and a diamond tool. Int. J. Jap. Soc. Precision Engng, 1991, 25(4), 259-266.
30. Inamura, T., Takezawa, N. and Taniguchi, N. Atomic-scale cutting in a computer using crystal models of copper and diamond. Ann. CIRP, 1992, 41(1),121-124.

- 31.** Inamura, T., Takezawa, N. and Kumaki, Y. Mechanics and energy dissipation in nanoscale cutting. *Ann. CIRP*, 1993, 42(1), 79-82.
- 32.** Inamura, T., Takezawa, N., Kumaki, Y. And Sata, T. On a possible mechanism of shear deformation in nanoscale cutting. *Ann. CIRP*, 1994, 43(1),47-50.
- 33.** D. C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, 2nd edition, Cambridge University Press, 2004
- 34.** Torrens, I. M. *Interatomic Potentials*, 1972 (Academic Press, New York).
- 35.** S. Nose'. A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble. *Molecular Physics*, 52(2):255–268, 1984.
- 36.** P.A. Romero a, G. Anciaux a, A. Molinari b, J.-F.Molinari a, \uparrow , Insights into the thermo-mechanics of orthogonal nanometric machining, *Computational Materials Science* 72 (2013) 116–126.
- 37.** Brenner, D. W. and Garrison, B. J. Dissociative valence force field potential for silicon. *Phys. Rev. B*, July 1986, 34(2), 1304-1307.
- 38.** Stillinger, F. H. and Weber, T. A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon. *Phys. Rev. B*, April 1985, 31(8), 5262-5271.
- 39.** Biswas, R. and Hamann, D. R. Interatomic potentials for silicon structural energies. *Phys. Rev. Lett.*, November 1985, 55(19), 2001-2004.
- 40.** Bolding, B. C. and Anderson, H. C. Interatomic potential for silicon clusters, crystals, and surfaces. *Phys. Rev. B*, 1990, 41, 10 568-10 585.
- 41.** Tersoff, J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems. *Phys. Rev. B*, April 1988, 37(12), 6991-6999.
- 42.** Brenner, D. W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films. *Phys. Rev. B*, November 1990,42(15), 9458-9471.
- 43.** Voter, A. F. Interatomic potentials for atomic simulations. *MRS Bull.*, 1996,21(2), 17-18.
- 44.** Morse, P. M. Diatomic molecules according to the wave mechanics II vibrational levels. *Phys. Rev.*, 1929, 34, 57-64.

- 45.** Girifalco, L. A. and Weizer, V. G. Application of the Morse potential function to cubic materials. *Phys. Rev.*, 1959, 114, 687-690.
- 46.** R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff. Molecular dynamics (MD) simulation of uniaxial tension of some single crystal cubic metals at nanolevel. *Int. J. Mech. Sci.*, 43: 2237 – 2260, 2001.
- 47.** Lennard-Jones, J. E. Forces between atoms and ions. *Proc. R. Soc. (Lond.) A*, 1925, 109, 584.
- 48.** Foiles, S. M. Embedded-atom and related methods for modeling metallic systems. *MRS Bull.*, 1996, 21(2), 24-28.
- 49.** Agrawal, P. M., Raff, L. M. and Thompson, D. L. *Surface Science*, 1988, 188, 402.
- 50.** Baskes, M. I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities. *Phys. Rev. B*, 1992, 46, 2727-2742.
- 51.** Loladze, T. N. *Wear of Diamond in Grinding Steel*, 1972 (MIR Publications, Moscow)
- 52.** Chryssolouris, G., (2006), “*Manufacturing Systems: Theory and Practice*, 2nd Edition”, Springer, New York.
- 53.** K. Maekawa, A. Itoh. Friction and tool wear in nano-scale machining-a molecular dynamics approach. Department of Mechanical Engineering. Ibaraki University, 4-12-1 Nakanarusawa, Hitachi 316, Japan *Wear* 188 (1995) 115-122
- 54.** Jeong – Du Kim and Chan – Hong Moon. A Study on the Cutting Mechanism of Microcutting using Molecular Dynamics. *Int. J. Adv. Manuf. Technol.*, 11: 319 –324, 1996.
- 55.** L. Zhang and H. Tanaka. Towards a deeper understanding of wear and friction on the atomic scale – a molecular dynamics analysis. *Wear*, 211: 44 – 53, 1997.
- 56.** R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff. Some aspects of machining with negative rake tools simulating grinding: an MD simulation approach. *Phil. Mag. B.*, 79: 955 – 968, 1999.

57. R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff. Effect of tool geometry in nanometric cutting: a molecular dynamics simulation approach. *Wear*, 219: 84 –97, 1998.
58. R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff. MD simulation of nanometric cutting of single crystal aluminum: effect of crystal orientation and direction of cutting. *Wear*, 242: 60 – 88, 2000.
59. Q. X. Pei, C. Lu, F. Z. Fang, H. Wu. Nanometric cutting of copper: A molecular dynamics study. *Computational Materials Science*, 37: 434 – 441, 2006.
60. Q. X. Pei, C. Lu, H. P. Lee and Y. W. Zhang. Study of Materials Deformation in Nanometric Cutting by Large – scale Molecular Dynamics Simulations. *Nanoscale Res Lett*, 4: 444 – 451, 2009.
61. Hahn, R. S. The relation between grinding conditions and thermal damage in the workpiece. *Trans. ASME*, 1956, 78, 807-810.
62. Y. Y. Ye, R. Biswas, J. R. Morris, A. Bastawros and A. Chandra. Molecular dynamics simulation of nanoscale machining of copper. Department of Physics and Microelectronics Research Center, Iowa State University, *Nanotechnology*, 14: 390 – 396, 2003.
63. R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L.M. Raff. MD simulation of indentation and scratching of single crystal aluminum. *Mechanical and Aerospace Engineering, Oklahoma State University, 218 Engineering North, Stillwater, OK 74078, USA. Wear* 240 2000. 113–143.
64. Te-Hua Fang, Jia-Hung Wu. Molecular dynamics simulations on nanoindentation mechanisms of multilayered films. Institute of Mechanical and Electromechanical Engineering, National Formosa University, Yunlin 632, Taiwan. *Computational Materials Science* 43 (2008) 785–790.
65. B. Lin, S.Y. Yu, S.X. Wang. An experimental study on molecular dynamics simulation in nanometer grinding. School of Mechanical Engineering, Tianjin University, Tianjin, China *Journal of Materials Processing Technology* 138(2003) 484–488.
66. Y Y Ye, R Biswas, J R Morris, A Bastawros and A Chandra, Molecular dynamics simulation of nanoscale machining of copper, Department of Physics and Microelectronics Research Center, Iowa State University, USA, *Nanotechnology* 14 (2003) 390–396.

67. Sagil James, Murali M. Sundaramn. A molecular dynamics study of the effect of impact velocity, particle size and angle of impact of abrasive grain in the Vibration Assisted Nano Impact-machining by Loose Abrasives. School of Dynamic Systems, University of Cincinnati, OH 45221, USA. September 2012.

68. Till Junge, Jean-Francois Molinari. Molecular dynamics nano-scratching of aluminium: a novel quantitative energy-based analysis method. École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), School of Architecture, Civil and Environmental Engineering (ENAC), Computational Solid Mechanics Laboratory (LSMS), 1015 Lausanne, Switzerland. *Procedia IUTAM* 3 (2012) 192 – 204.

69. A. Noreyan, J.G. Amar. Molecular dynamics simulations of nanoscratching of 3C SiC. Department of Mechanical, Automotive, and Materials Engineering, University of Windsor, Windsor ON N9B3P4, Canada Department of Physics & Astronomy, University of Toledo, Toledo OH 43606, USA 5 April 2006.

70. Peng-zhe Zhu, Yuan-zhong Hu, Tian-bao Ma, Hui Wang. Study of AFM-based nanometric cutting process using molecular dynamics. State Key Laboratory of Tribology, Tsinghua University, Chengfu Road, Beijing 100084, PR China. *Applied Surface Science* 256 (2010) 7160–7165.

71. Y.H. Chen, F.Z. Fang, X.D. Zhang and X.T. Hu, Molecular Dynamics Investigation of Cutting Force in Nanometric Cutting of Monocrystalline Silicon, State Key Laboratory of Precision Measuring Technology and Instruments, Tianjin University, China, *American Journal of Nanotechnology* 1 (2): 62-67, 2010.

72. De Chiffrea, L., H. Kunzmann, G.N. Pegg and D.A. Lucca, 2003. Surfaces in precision engineering, microengineering and nanotechnology. *CIRP Annals-Manuf. Technol.*, 52: 561-577.

73. Fang, F.Z. and V.C. Venkatesh, 1998. Diamond cutting of silicon with nanometric finish. *CIRP Ann. Manuf. Technol.*, 47: 45-49.

74. Fang, F.Z., H. Wu, W. Zhou and X.T. Hu, 2007. A study on mechanism of nano-cutting single crystal silicon. *J. Mater. Process. Technol.*, 184: 407-410.

75. Lee, W.B., 1990. Prediction of microcutting force variation in ultra-precision machining. *Precis. Eng.*, 12: 25-28.
76. Tsuzuki, H., P.S. Branicio and J.P. Rino, 2007. Structural characterization of deformed crystals by analysis of common atomic neighborhood. *Comput. Phys. Commun.*, 177: 518-523.
77. Fang T and Weng C-I 2000 Three-dimensional molecular dynamics analysis of processing using a pin tool on the atomic scale *Nanotechnology* 11:148–53.
78. Shaw MC(ed) 1984 *Metal Cutting Principles* (Oxford: Oxford University Press).
79. Steigerwald J M, Murarka S P and Gutmann R J 1997 *Chemical Mechanical Planarization of Microelectronic Materials* (New York: Wiley).
80. Reese R L 2000 *University Physics* (New York: Brooks–Cole).
81. Ye Y, Biswas R, Bastawros A and Chandra A 2002 Simulation of chemical mechanical planarization of copper with molecular dynamics *Appl. Phys. Lett.* 81: 1875.
82. Rentsch R 2000 Atomistic Simulation and Experimental Investigation of Ultra Precision Cutting Processes (MRS Proc. vol 578) (Pittsburgh, PA: Materials Research Society) pp 261–6.
83. J. Tersoff, *Phys. Rev.* 39 (8) (1989) 5566–5568.
84. E. Brinksmeier, Y. Mutlugunes, F. Klocke, J.C. Aurich, P. Shore, H. Ohmori. Ultra-precision grinding. *CIRP Annals - Manufacturing Technology* 59 (2010) 652–671.
85. J. Shimizu, L.B. Zhou, H. Eda. Simulation and experimental analysis of superhigh-speed grinding of ductile material. *Journal of Materials Processing Technology* 129 (2002) 19-24
86. I. Inasaki, H. K. Tonshoff, T. D. Howes. Abrasive Machining in the Future. *CIRP Annals - Manufacturing Technology* Volume 42, Issue 2, 1993, Pages 723–732. DOI: 10.1016/S0007-8506(07)62535-9
87. J.S. Colton *Grinding Processes and Analysis*. GIT 2009 ME 6222:

Manufacturing Processes and Systems. Georgia Institute of Technology.

88. E.h. F. Klocke Cutting with geometrically undefined cutting edges – Fundamentals and techniques. Manufacturing Technology I, Lecture 9. Laboratory for Machine Tools and Production Engineering Chair of Manufacturing Technology. WZL/Fraunhofer IPT

89. Boercker, D. B., Belak, J., Stowers, I. F., Donaldson, R. R., Siekhaus, W. J., 1992, Simulation of Diamond Turning of Silicon Surfaces, Proc. of ASPE, Oct. 1992, Florida, USA: 45-48.

90. Chen, H., Zhang, D., Hagiwara, I., 2004, Parallel Molecular Dynamics Simulation of Nanoscale Grinding, Proc. of the 4th int. euspen conference May 31st-June 2nd: 163-164.

91. Rentsch, R., 2004, Molecular Dynamics for abrasive process simulation, chapter 7 in Tribology of abrasive machining processes, eds. Marinescu, Rowe, Dimitrow, Inasaki, William Andrew Publ., NY, USA: 239-264.

92. Rentsch, R., Brinksmeier, E., 2005, Tribology aspects in state of the art MD cutting simulations, 8th. CIRP Int. Workshop on Modeling of Machining Operations, Chemnitz, Germany May 2005: 401 – 408

93. Shimizu, J., Zhou, L., Eda, H., 2003, Molecular Dynamics Simulation of Material Removal Mechanism beyond Propagation Speed of Plastic Wave, LEM21, JSME: 309-314.

94. Q. X. Pei, C. Lu, F. Z. Fang, H. Wu. Nanometric cutting of copper: A molecular dynamics study. *Computational Materials Science*, 37: 434 – 441, 2006.

95. Kustas, F. M., Fehrenbacher, L. L. and Komanduri, R. Nanocoatings on cutting tools for dry machining. *Ann. CIRP*, 1997, 46(1), 39-42.

96. Marshall, E. R. and Shaw, M. C. Forces in dry surface grinding. *Trans. ASME*, 1952, 74, 51-59.