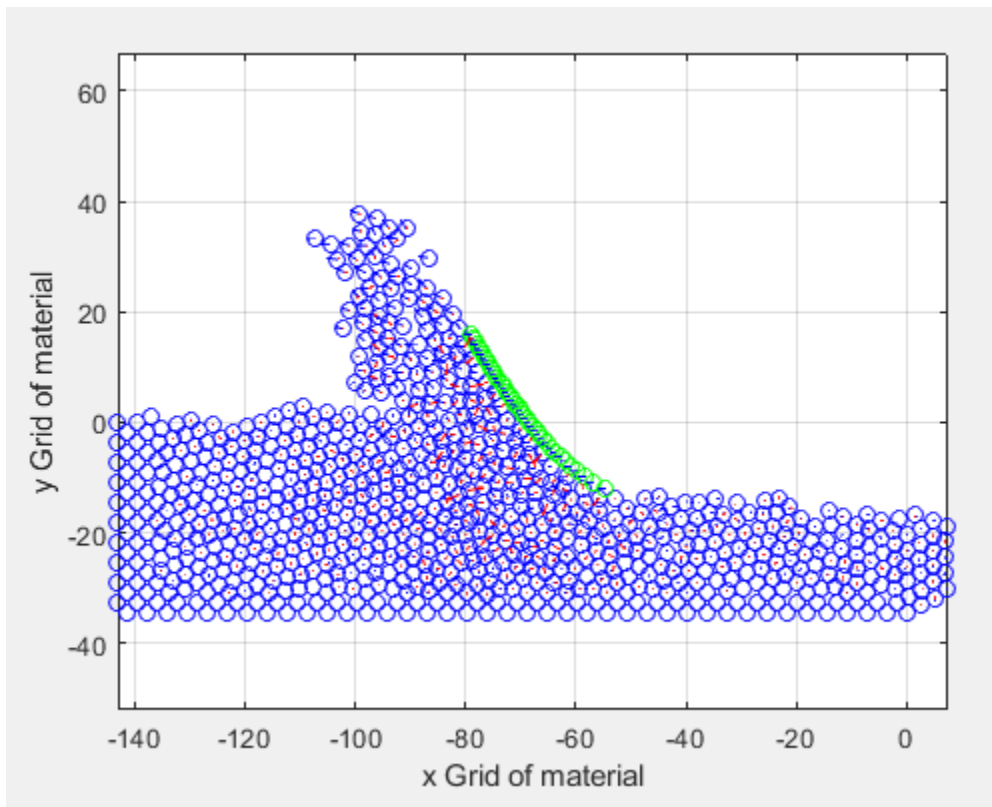




ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΩΝ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Μελέτη της φθοράς κοπτικού εργαλείου κατά την κοπή σε
νανοκλίμακα με χρήση της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής



ΜΑΝΤΖΟΣ ΑΡΓΥΡΙΟΣ

ΑΜ: 02110082

Επιβλέπων: Μαρκόπουλος Άγγελος, Επίκουρος Καθηγητής Ε.Μ.Π.
Αθήνα, 2019

Πρόλογος

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου, κ. Άγγελο Μαρκόπουλο, για την υπομονή και 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 βοήθειά του σε όλες τις φάσεις της διπλωματικής μου εργασίας, για την συνεργασία και τις παρατηρήσεις/εξηγήσεις που μου προσέφερε ώστε να εκπονήσω την παρούσα διπλωματική εργασία. Χωρίς τη συνεισφορά του όλα θα ήταν πολύ πιο δύσκολα. Του εύχομαι μέσα από την καρδιά μου κάθε επιτυχία, στο διδακτορικό του αλλά και μελλοντικά στην καριέρα του.

Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου, τους φίλους μου και το γενικότερο κοντινό μου περιβάλλον για την αμέριστη συμπαράσταση, υπομονή και πίστη στις ικανότητες μου. Ελπίζω να τους έκανα περήφανους με την ολοκλήρωση της φοίτησής 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
Αργύρη Μάντζου

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 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 3, 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 4, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για διαφορετικές συνθήκες κοπής και η μελέτη της επίδρασης των παραμέτρων κοπής στις δυνάμεις κοπής και στο σχηματισμό του απόβλιττου. Μελετάται η εξέλιξη της διαδικασίας αποβολής υλικού, οι αναπτυσσόμενες θερμοκρασίες και δυνάμεις για διαφορετικά βάθη κοπής, μεταβολές της ταχύτητας, της γεωμετρίας και της φθοράς του κοπτικού εργαλείου. Γίνεται επίσης συνοπτική παρουσίαση των αποτελεσμάτων.

Τέλος, στο Κεφάλαιο 5, 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
Mantzou Argyrios

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 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 3, 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 4, 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, changes in the speed and geometry and tool wear of the cutting tool is studied. Results of the simulations are presented collectively.

Finally, in Chapter 5, 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	5
Abstract	7
Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή.....	13
Κεφάλαιο 2: Θεωρία Μοριακής Δυναμικής.....	19
2.1 Εισαγωγή.....	19
2.2 Είδη Ατόμων.....	21
2.2.1 Νευτώνεια Άτομα.....	21
2.2.2 Άτομα Θερμοστάτες.....	22
2.2.3 Συνοριακά Άτομα.....	23
2.3 Συναρτήσεις Δυναμικού Ενέργειας.....	24
2.3.1 Δυναμικό Morse.....	29
2.3.2 Δυναμικό Lennard- Jones.....	29
2.3.3 Δυναμικό Born-Meyer.....	30
2.3.4 Δυναμικό Πολλαπλών Ατόμων (Embedded-AtomPotential).....	30
2.3.5 Δυναμικό Bolding – Anderson.....	31
2.4 Υπολογισμοί Τροχιών με χρήση Αριθμητικής Ολοκλήρωσης	32
2.4.1 Μέθοδος Βατραχοδρασκεισμών (Leapfrog-Type Method).....	33
2.4.2 Μέθοδος Verlet.....	35
2.4.3 Μέθοδοι Πρόβλεψης Διόρθωσης.....	36
2.5 Συναρτήσεις Επανακαθορισμού Ταχυτήτων.....	40
2.5.1 Συνάρτηση Επιθυμητής Θερμοκρασίας.....	41
2.5.2 Επαναπροσδιορισμός ταχυτήτων.....	41
2.6 Μέθοδοι υπολογισμών αλληλεπιδράσεων.....	42
2.6.1 Όλα τα ζεύγη (all-pairs method).....	42
2.6.2 Υποδιαίρεση κυττάρων(cell subdivision).....	43

2.6.3 Κατάλογος γειτόνων (neighbor-list method)	43
Κεφάλαιο 3: Βασική Ανάλυση του Κώδικα Προσομοίωσης.....	45
3.1 Εισαγωγή.....	45
3.2 Γενική Δομή του Αλγόριθμου.....	45
3.3 Περιγραφή του Κώδικα Προσομοίωσης MD.....	48
3.4 Προσομοίωση φθοράς κοπτικού εργαλείου.....	55
Κεφάλαιο 4: Αποτελέσματα και Ανάλυση Προσομοιώσεων.....	59
4.1 Εισαγωγή.....	59
4.2 Πρώτη Σειρά Προσομοιώσεων.....	59
4.2.1 Προσομοίωση 1a.....	60
4.2.2 Προσομοίωση 1b.....	69
4.2.3 Προσομοίωση 1c.....	73
4.2.4 Προσομοίωση 1d.....	76
4.3 Δεύτερη Σειρά Προσομοιώσεων.....	79
4.3.1 Προσομοίωση 2a.....	80
4.3.2 Προσομοίωση 2b.....	87
4.3.3 Προσομοίωση 2c.....	90
4.3.4 Προσομοίωση 2d.....	93
4.3.5 Προσομοίωση 2e.....	96
4.3.6 Προσομοίωση 2f.....	99
4.3.7 Προσομοίωση 2g.....	103
4.3.8 Προσομοίωση 2h.....	106
4.4 Τρίτη Σειρά Προσομοιώσεων.....	109
4.4.1 Προσομοίωση 3a.....	109
4.4.2 Προσομοίωση 3b.....	115

4.4.3 Προσομοίωση 3c.....	118
4.4.4 Προσομοίωση 3d.....	121
4.4.5 Προσομοίωση 3e.....	124
4.4.6 Προσομοίωση 3f.....	127
4.4.7 Προσομοίωση 3g.....	130
4.4.8 Προσομοίωση 3h.....	133
4.7 Σύγκριση Αποτελεσμάτων Προσομοιώσεων.....	136
Κεφάλαιο 5: Συμπεράσματα και προτάσεις για περαιτέρω μελέτη.....	143
5.1 Συμπεράσματα	143
5.2 Προτάσεις για περαιτέρω μελέτη.....	144
Βιβλιογραφία.....	147

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

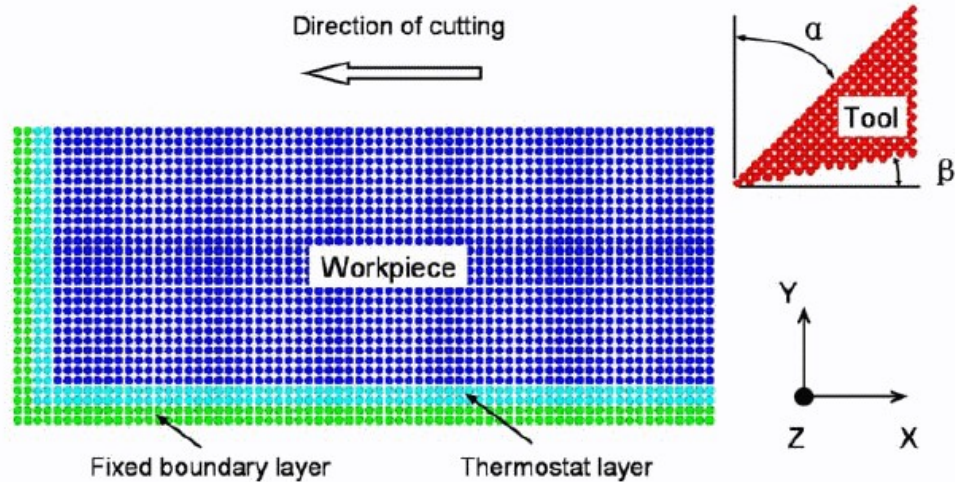
Οι κατεργασίες των υλικών αποτελούν τις τελευταίες δεκαετίες έναν πολύ σημαντικό τομέα της τεχνολογίας, καθώς μέσω αυτών μπορεί να κατασκευαστεί πληθώρα αντικειμένων και εξαρτημάτων. Ιδίως τα τελευταία χρόνια, οι βελτιώσεις που παρουσιάζονται είναι πολύ αξιόλογες και οι δυνατότητες που εμφανίζονται είναι 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 nm 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.

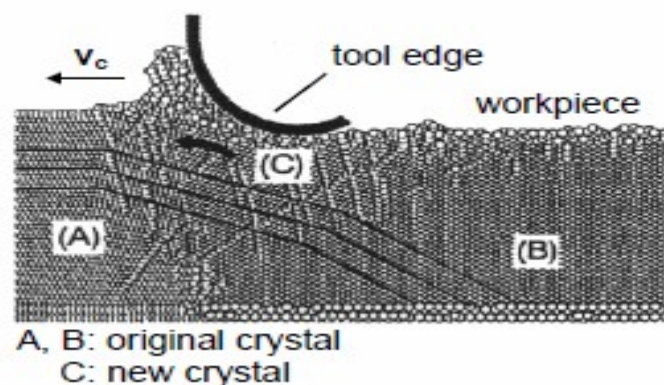
Οι κατεργασίες λίαν υψηλής ακριβείας που έχουν εμφανιστεί με κοπτικά εργαλεία από διαμάντι μπορούν να αφαιρέσουν υλικό στην κλίμακα των nm, κάτι που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την επίτευξη πολύ υψηλής ακρίβειας επιφανείας. Προκειμένου, λοιπόν, να μπορέσουν να κατασκευαστούν τέτοια αντικείμενα στη συγκεκριμένη κλίμακα, είναι απαραίτητο να μελετηθεί ο μηχανισμός κοπής στη νανοκλίμακα, καθώς και διάφοροι άλλοι συναφείς μηχανισμοί, όπως είναι ο μηχανισμός σχηματισμού του απόβλιττου, οι πλαστικές παραμορφώσεις, οι δυνάμεις κοπής, η απαγωγή θερμότητας και τα τριβολογικά χαρακτηριστικά.

Η προσομοίωση με τη μέθοδο Μοριακής Δυναμικής (MD) χρησιμοποιώντας ατομιστικά 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.

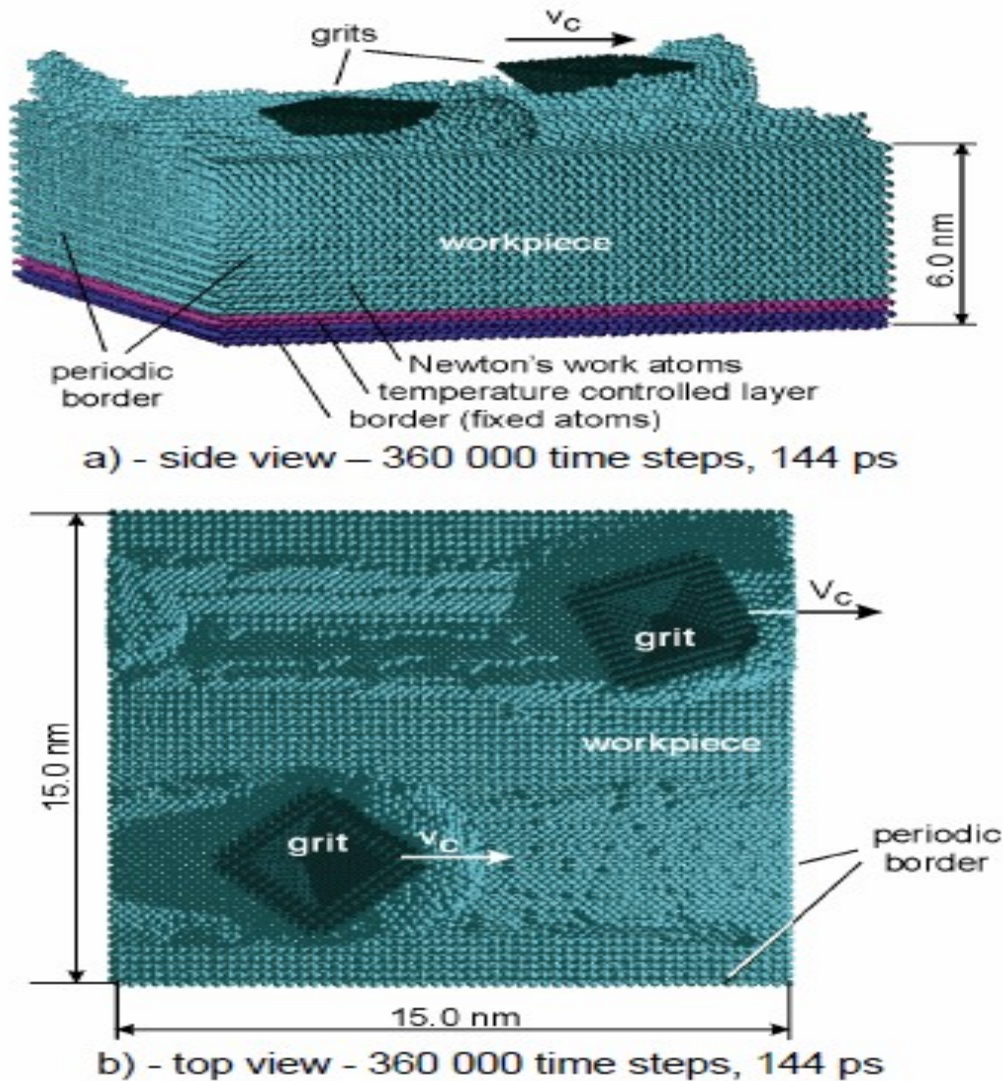


Εικόνα 1.1: Σχηματικό μοντέλο προσομοίωσης για τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής [59]

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-κρύσταλλα, 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 αφαίρεσης 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]



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 σε 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 απόβλιττου και καλύπτει μόνο λίγα νανόμετρα του μήκους της κατεργασίας και λίγα πικοδευτερόλεπτα (ps) του χρόνου της διεργασίας (ως επί το πλείστον <15nm και <20ps). 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 απόβλιττου, της ελαστικής και πλαστικής απόκρισης του τεμαχίου και των άλλων ποσοτήτων της MD προσομοίωσης 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 απόβλιττου 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 μικροκοπές 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 μέθοδος, 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

Η θεωρία της Μοριακής Δυναμικής

2.1 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 ατομικές μελέτες προσομοίωσης, απαιτείται ένα κλασσικό ή ημικλασσικό 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 συμπιεστότητα, 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 1fs). 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]

2.2 Είδη Ατόμων

2.2.1 Νευτώνια Άτομα

Στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, η αριθμητική ολοκλήρωση των κλασικών 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 ($\Sigma\Delta$) 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

$\mathbf{r}_i = x_i \mathbf{i} + y_i \mathbf{j} + z_i \mathbf{k}$ 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]

2.2.2 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

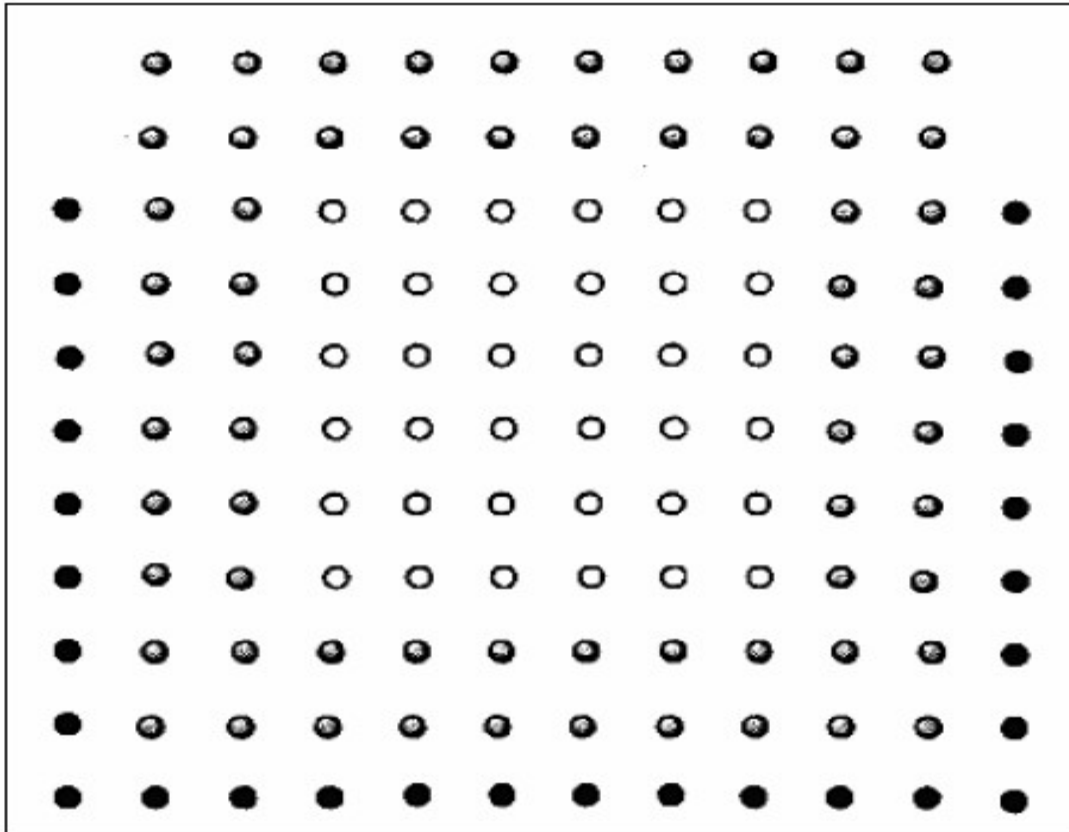
περιορισμό θερμοκρασίας, και σε τακτά χρονικά διαστήματα, η θερμοκρασία επιβάλλεται να γίνει ίση με την επιθυμητή.

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].

2.2.3 Συνοριακά Άτομα

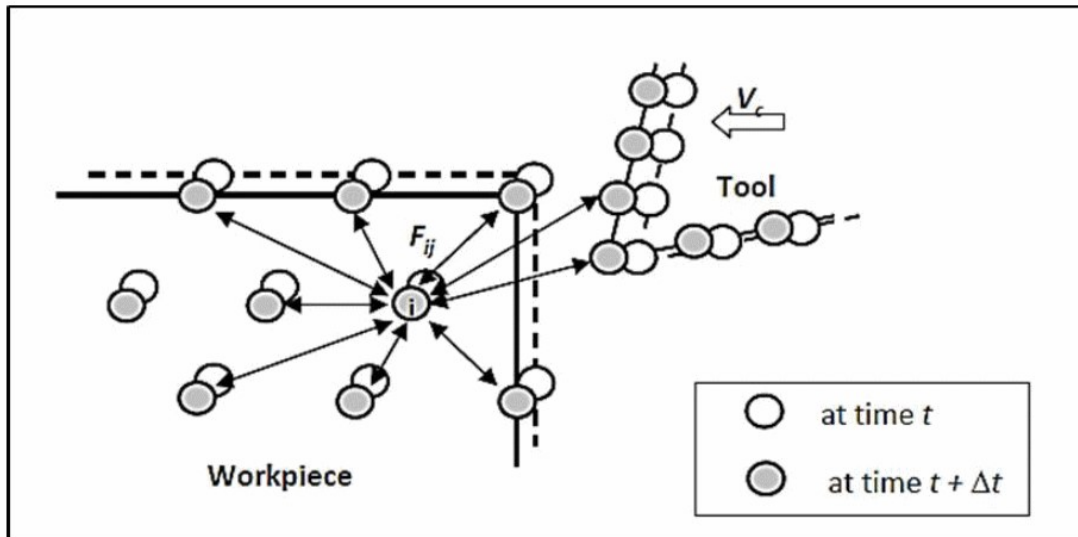
Τα συνοριακά άτομα του εργαλείου και του τεμαχίου θεωρούνται ανεπηρέαστα από την κατεργασία κοπής, καθώς είναι μακριά από την διεπιφάνεια εργαλείου-τεμαχίου. Κατά συνέπεια, οι θέσεις των συνοριακών ατόμων δε θα μεταβληθούν η μια ως προς την άλλη κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής. Στην Εικόνα 2.4, 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 διαφορετική σκληρότητα των δύο υλικών είναι μικρή. Ομοίως, τα συνοριακά άτομα στην πλευρά μακριά από το εργαλείο στην Εικόνα 2.4 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 2.1:** 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]*

2.3 Συναρτήσεις Δυναμικού Ενέργειας

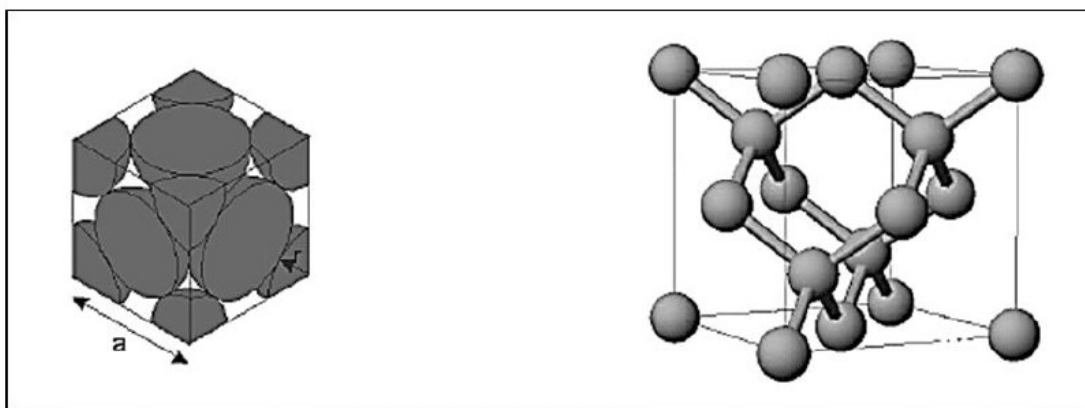
Όποτε αντιμετωπίζουμε ένα πρόβλημα σε ατομικό επίπεδο, όπως στην περίπτωση της προσομοίωσης της νανοκοπής μέσω Μοριακής Δυναμικής, είναι απαραίτητο να λάβουμε υπόψη τις δυνάμεις που υπάρχουν μεταξύ των ατόμων, διότι αυτές είναι κυρίως οι δυνάμεις που « αποφασίζουν » τι θα συμβεί σε οποιοδήποτε φυσικό φαινόμενο. Όπως φαίνεται και στην Εικόνα 2.2, 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 2.2: 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 2.3: (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.

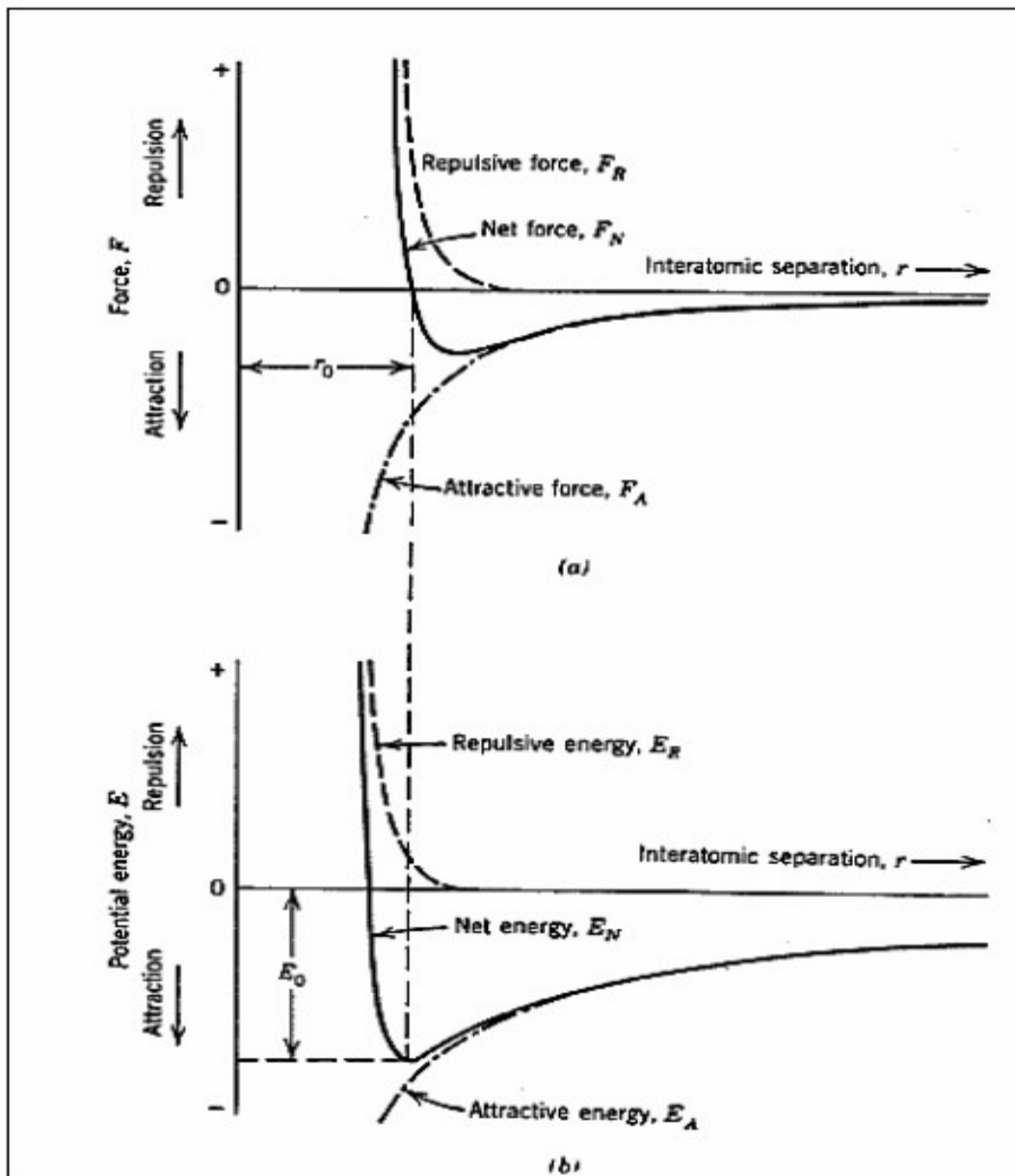
Υπάρχουν δύο προσεγγίσεις για τον προσδιορισμό των διατομικών δυναμικών. Η πρώτη μέθοδος είναι μια *abinitio* μέθοδος, ενώ η δεύτερη χρησιμοποιεί βασικά εμπειρικά δυναμικά. Στην *abinitio* μέθοδο, οι παράμετροι της συνάρτησης δυναμικού μπορούν να προσδιοριστούν, θεωρητικά, επιλύοντας την κυματική εξίσωση 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 συμπίεστικότητα 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 2.4 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 2.4: 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.

2.3.1 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.

2.3.2 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

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

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]

2.3.3 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]

2.3.4 Δυναμικό Πολλαπλών Ατόμων (Embedded-Atompotential)

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]

2.3.5 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 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]

2.4 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 \mathbf{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]

2.4.1 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 βατραχοδρασκεισμών 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:

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

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:

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

2.4.2 Μέθοδος Verlet

Ο αλγόριθμος ολοκλήρωσης Verlet, που επινοήθηκε από τον Loup 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 $\mathbf{x}(t)$ και $\mathbf{x}(t-h)$, 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.

2.4.3 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 $\{\alpha_i\}$ να ικανοποιούν το ακόλουθο σύστημα των $k-1$ εξισώσεων:

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

Το παραπάνω αλλά και τα επακόλουθα συστήματα εξισώσεων εύκολα επιλύονται και δίνουν ρητές συναρτήσεις για τα α_i . Παρόμοια συνάρτηση υπάρχει και για την ταχύτητα:

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

με συντελεστές που να ικανοποιούν τις εξισώσεις:

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

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 2.1: 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 2.2: Παράμετροι πρόβλεψης - διόρθωσης για πρωτοβάθμιες εξισώσεις [3]

2.5 Συναρτήσεις Επανακαθορισμού Ταχυτήτων

Καθώς η πλαστική παραμόρφωση στη ζώνη διάτμησης και η τριβή στη διεπιφάνεια απόβλιττου-εργαλείου μετατρέπονται σε θερμότητα, η θερμότητα αυτή πρέπει να αποβάλλεται διαρκώς. Στις πραγματικές κατεργασίες, μεγάλο μέρος της θερμότητας απομακρύνεται με το απόβλιττο 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 *eta*[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 .

2.5.1 Συνάρτηση επιθυμητής θερμοκρασίας

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

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

Αν $|T - T_d| \leq 3$, τότε η συνθήκη ικανοποιείται, διαφορετικά απαιτείται ανάθεση νέων ταχυτήτων. 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]

2.5.2 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]

2.6 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].

2.6.1 Όλα τα ζεύγη (all-pairs method)

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].

2.6.2 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].

2.6.3 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.

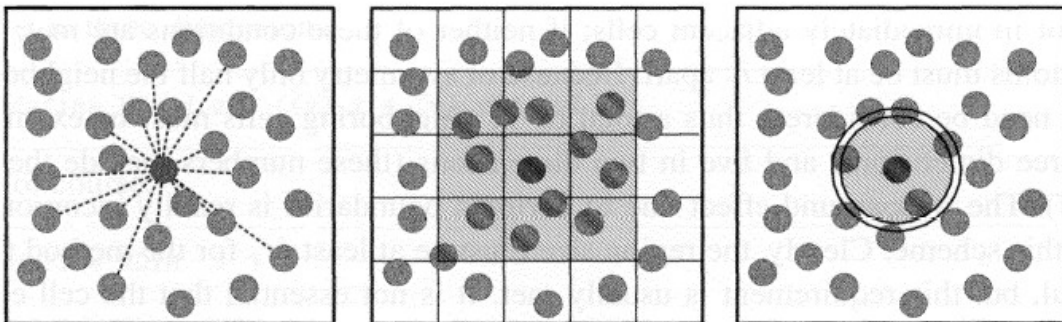
Οι λίστες ανανεώνονται κάθε φορά που ισχύει η συνθήκη:

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

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 2.5.



Εικόνα 2.5: Οι διαφορετικές προσεγγίσεις για τον υπολογισμό των αλληλεπιδράσεων: όλα τα ζεύγη, υποδιαίρεση κυττάρων και κατάλογος γειτόνων ([96], Fig. 3.1, p. 49).

Κεφάλαιο 3

Βασική ανάλυση του κώδικα προσομοίωσης

3.1 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.

3.2 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 βατραχοδρασκεισμών, 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 περίπτωση 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.

3.3 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 :

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

Η μονάδα μέτρησης ενέργειας είναι :

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

Η μονάδα μέτρησης δύναμης είναι :

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

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 :

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

Το χρονικό βήμα ολοκλήρωσης επιλέγεται ίσο με :

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

Η θερμοκρασία προσομοίωσης είναι :

$$T = 293 K = \frac{29}{11.5} 11604.505 K = 0.0252 T_{unit, MD}$$

Στη συνέχεια, ορίζεται το τελικό σημείο τερματισμού του 2^{ου} 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 τεμαχίο 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 περίπτωση μας, ορίζουμε :

$$moltype(1, tool)=1$$

Για τα Νευτώνεια άτομα του τεμαχίου δίνουμε :

$$moltype(1, partNewton)=2$$

Για τα Θερμοστατικά άτομα του τεμαχίου έχουμε :

$$moltype(1, partThermo)=3$$

Οπότε για τα Συνοριακά άτομα του τεμαχίου έχουμε :

$$moltype(1, partBoundary)=4$$

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 \AA . 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 \AA . 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 (615m/s, 1230 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 βεβιάως. 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 *y* 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 έχουμε τα εργαλεία μας. Αυτοί οι όροι θα χρησιμοποιηθούν αργότερα για τον υπολογισμό των ταχυτήτων στον κύριο κώδικα.

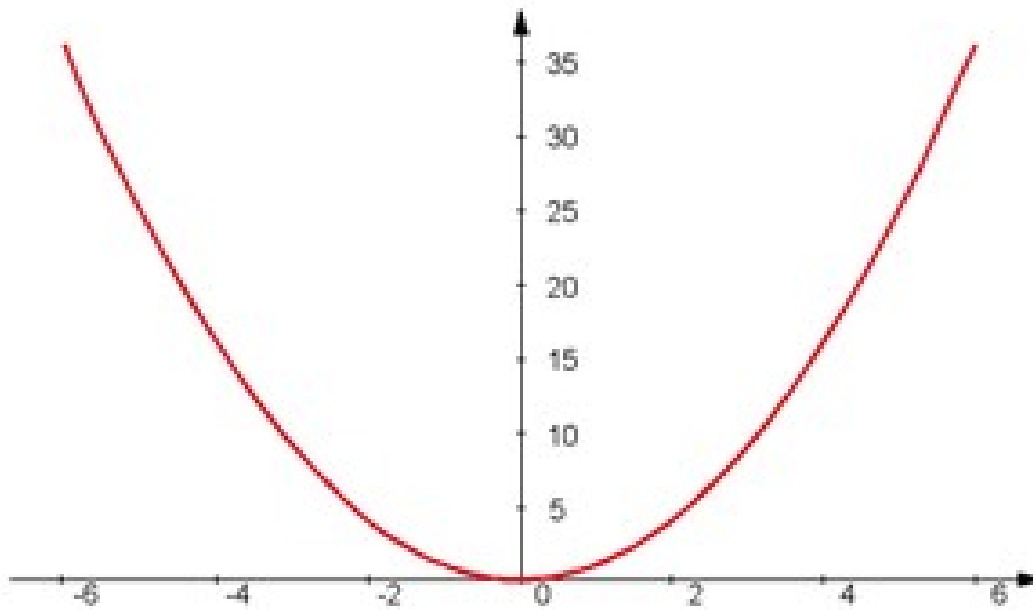
Τέλος, καλείται κατάλληλη συνάρτηση που χρησιμοποιείται για να εισαχθεί στη διαδικασία το δεύτερο κοπτικό εργαλείο. Το 1^ο άτομο στο δεύτερο αυτό εργαλείο τοποθετείται σε μια απόσταση γύρω στα 20 Å από το πρώτο και η γωνία του υπολογίζεται έτσι ώστε το άτομο αυτό να ανήκει επάνω στην καμπύλη $ax^2+bx+c=0$, 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 γυσνιστώσα 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 γυσνιστώσα 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 3.1: 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.

Υστερα, ακολουθεί η δεύτερη κλήση της συνάρτησης ,με την οποία γίνεται η αριθμητική ολοκλήρωση , η οποία αφορά το δεύτερο τμήμα της μεθόδου των βατραχοδρασκεισμών 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 αποβλίττου. 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^{ος} κόκκος ξεπεράσει το τελικό σημείο που έχουμε ορίσει για τη λήξη της προσομοίωσης και την ολοκλήρωση της κατεργασίας της λείανσης.

Ο προσδιορισμός του απόβλιττου λείανσης γίνεται σύμφωνα με κατάλληλη συνάρτηση, από την οποία υπολογίζεται το ύψος του απόβλιττου 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 απόβλιττου 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.

3.4 Προσομοίωση φθοράς κοπτικού εργαλείου

Στην παρούσα διπλωματική εξετάζεται η προσομοίωση της φθοράς του κοπτικού εργαλείου κατά την κατεργασία. Σύμφωνα με τη μελέτη των Maekawa και Itoh, δύο Ιαπόνων επιστημόνων, μπορεί κανείς να χρησιμοποιήσει τη μέθοδο του δυναμικού Morse και να προσομοιώσει την διαδικασία της ναοκατεργασίας λαμβάνοντας υπόψη και τη φθορά του κοπτικού εργαλείου. Προφανώς μέχρι τώρα έχουν μελετηθεί περιπτώσεις που το κοπτικό εργαλείο είναι ιδανικό, δεν φθείρεται δηλαδή κατά την κατεργασία και την επαφή με το τεμάχιο που επεξεργάζεται. Επομένως τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων δεν λαμβάνουν υπόψη κάτι που πρακτικά συμβαίνει κατά τη διάρκεια της κατεργασίας.

Νωρίτερα, στην ενότητα 2.3.1 είδαμε την έκφραση του δυναμικού Morse:

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

Στην παραπάνω εξίσωση, το D εκφράζει την ενέργεια συνοχής των ατόμων του κοπτικού εργαλείου με τα άτομα του προς επεξεργασία τεμαχίου. Σύμφωνα με τους Maekawa και Itoh, μεταβάλλοντας την ενέργεια συνοχής μπορεί κανείς πρακτικά να

προσομοιώσει τη φθορά της επιφάνειας του κοπτικού εργαλείου κατά την εκτέλεση της κατεργασίας. Οι δύο Ιάπωνες μελέτησαν τον τρόπο με τον οποίο επιδρά η αλλαγή του D (cohesion energy) στις προσομοιώσεις και στα αποτελέσματα αυτών.

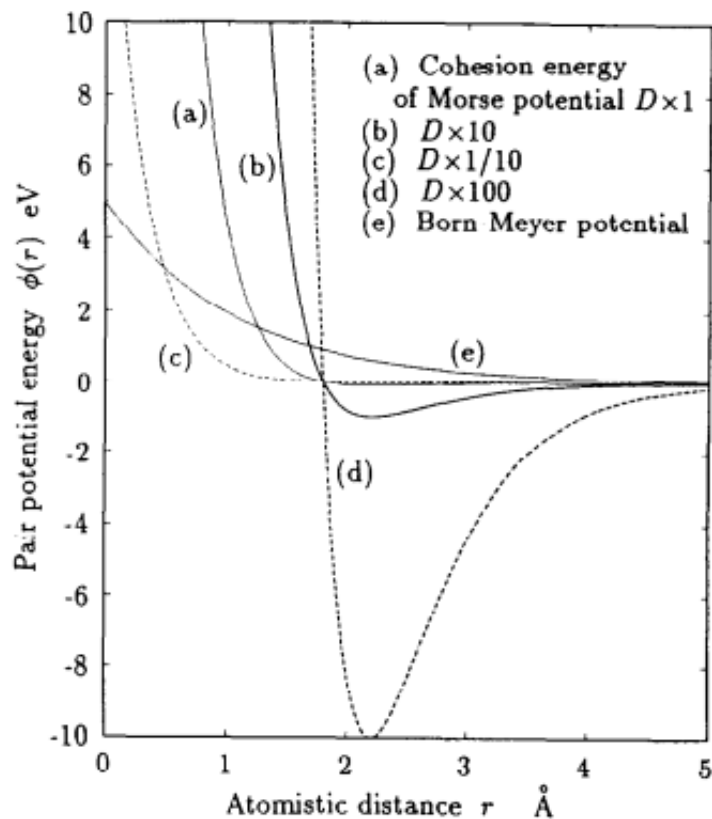
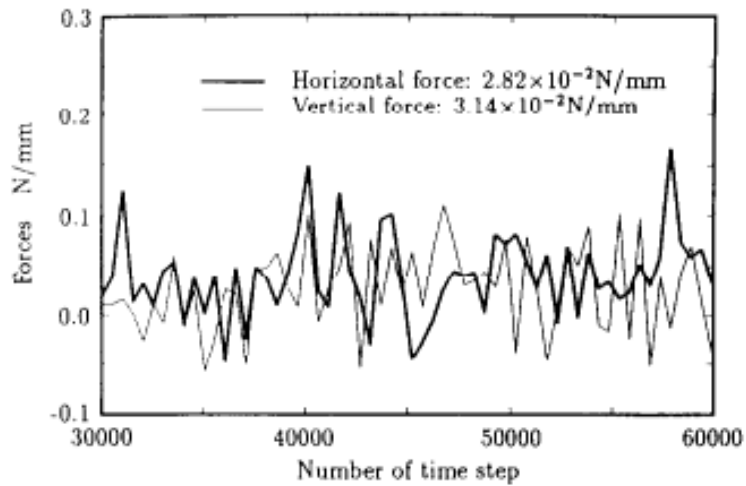


Fig. 7. Shape of pair potentials at tool-work interface.

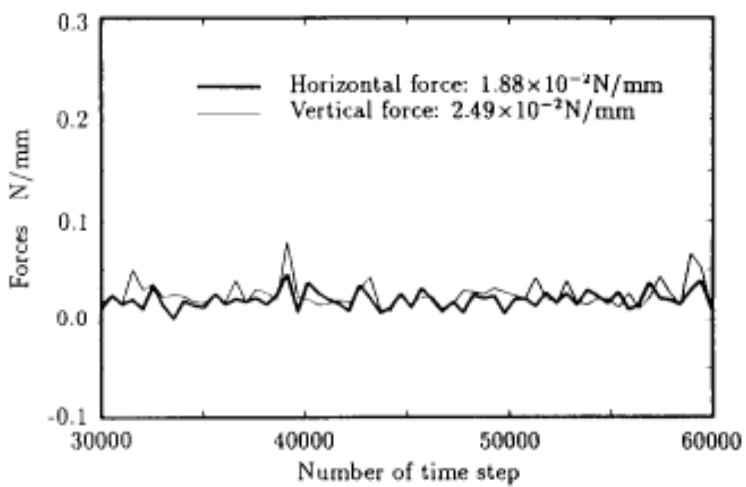
Εικόνα 3.2 : Η ενέργεια συνοχής μεταξύ ατόμων για διάφορες τιμές του D συναρτηθεί της διατομικής απόστασης

Το ζητούμενο λοιπόν ήταν ότι καθώς μειώνεται το D , δηλαδή η ενέργεια συνοχής μεταξύ των ατόμων των δύο υλικών, οι δεσμοί που διατηρούν τα άτομα του άνθρακα ενωμένα χαλαρώνουν και δημιουργούνται κενά στην κρυσταλλική δομή του, με αποτέλεσμα να εισέρχονται στην επιφάνεια του κοπτικού εργαλείου τα άτομα του υπό επεξεργασία τεμαχίου και να καταλαμβάνουν τις θέσεις αυτές. Αν δεν μεταβληθεί ο συντελεστής D τότε δεν δημιουργούνται αυτά τα κενά και επομένως κατά την κοπή τα άτομα του τεμαχίου απλά κάθονται στην επιφάνεια του εργαλείου μέχρι να απομακρυνθούν είτε λόγω της κίνησης του είτε λόγω του σχηματισμού αποβλίττου.

Έχοντας αυτή τη θεωρία κατά νου, οι Maekawa και Itoh δοκίμασαν να μετρήσουν τις δυνάμεις κοπής που αναπτύσσονται κατά τη λείανση στους άξονες x και y χρησιμοποιώντας στην παραπάνω εξίσωση μεγέθη D που απείχαν 100 τάξεις μεγέθους μεταξύ τους. Τα αποτελέσματα του πειράματος που κάνανε έδειξαν ότι για μια τέτοια μεταβολή φθοράς η δύναμη κοπής κατά τον άξονα x μειώνεται κατά 33% με την μικρότερη τιμή του D ενώ στον άξονα y παρατήρησαν μείωση της κοπτικής δύναμης κατά 20%.



(a)



(b)

Εικόνα 3.3 : Αποτελέσματα πειράματος για D (a) και $D/100$ (b)

Υπό αυτό το πρίσμα, θα δοκιμάσουμε με την ίδια λογική να πάρουμε αποτελέσματα για διαφορετικές ταχύτητες, βάθη κοπής, γεωμετρίες κοπτικού εργαλείου αλλά και επιπλέον μεταβολές του D ώστε να δούμε τη συμπεριφορά των μεγεθών που χαρακτηρίζουν την κατεργασία. Κύρια μεγέθη που μας απασχολούν είναι οι δυνάμεις κοπής κατά άξονες x και y καθώς και η μέση θερμοκρασία των ατόμων του τεμαχίου. Επίσης, απόρροια όλων αυτών των παραγόντων θα είναι ο σχηματισμός του αποβλίττου σε κάθε διαφορετική περίπτωση και η μελέτη κι ο σχολιασμός του σχήματός του. [53]

Κεφάλαιο 4

Αποτελέσματα και Ανάλυση Προσομοιώσεων

4.1 Εισαγωγή

Στο προηγούμενο κεφάλαιο έγινε μία βασική περιγραφή του κώδικα προσομοίωσης που τροποποιήσαμε για να μοντελοποιήσουμε τη διεργασία της λείανσης με κόκκους στη ναοκλίμακα 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 απόβλητων. Για κάθε προσομοίωση θα μελετηθεί κυρίως η επίδραση που έχει η φθορά του εργαλείου στα παραπάνω μεγέθη τόσο στο μηχανισμό σχηματισμού απόβλιττου, όσο και στην ποιότητα της κατεργαζόμενης επιφάνειας και στα μετρούμενα μεγέθη που είναι υπεύθυνα. Προκειμένου να προσομοιώσουμε την φθορά του εργαλείου στην κατεργασία, αλλάζουμε την ενέργεια συνοχής όπως αναφέρθηκε νωρίτερα στη θεωρία. Σε όλες τις προσομοιώσεις χρησιμοποιούμε τη συνάρτηση δυναμικού Morse.

4.2 Πρώτη Σειρά Προσομοιώσεων

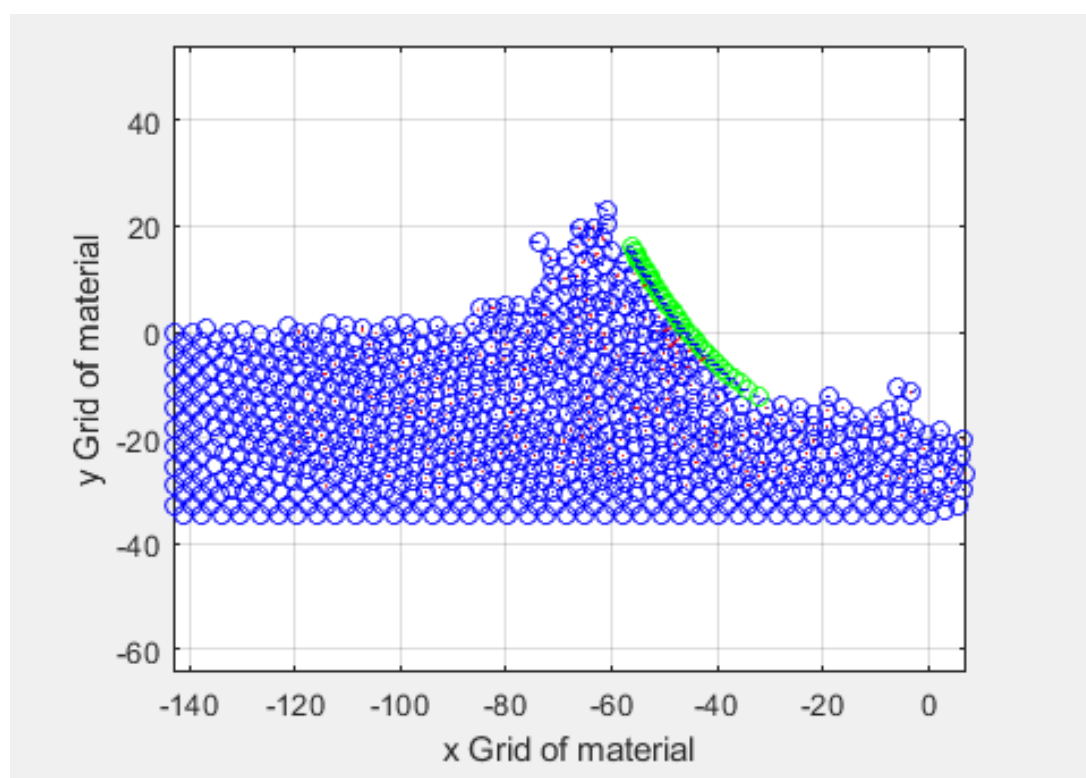
Σε αυτή την πρώτη σειρά προσομοιώσεων που πραγματοποιήσαμε ξεκινώντας τις προσπάθειές μας, παρουσιάζεται λείανση τεμαχίου χαλκού με κοπτικό εργαλείο διαμαντιού. Αρχικά θέσαμε τα μεγέθη της φθοράς που θα προσομοιωθούν. Δεδομένου ότι οι διαφορές στις τιμές της ενέργειας συνοχής έπρεπε να είναι μεγάλες προκειμένου να δημιουργήσουμε τις αντίστοιχες συνθήκες φθοράς, δοκιμάσαμε προσομοιώσεις με το αρχικό D και έπειτα 3 διαφορετικές περιπτώσεις με $D/100$, $D/50$ και $D/20$. Οι προσομοιώσεις της πρώτης σειράς έχουν να κάνουν αποκλειστικά με τη συγκεκριμένη μελέτη, ώστε να επιβεβαιώσουμε όσα είδαμε στη θεωρία και να βγάλουμε επιπρόσθετα συμπεράσματα μέσω των ενδιάμεσων τιμών. Οι προσομοιώσεις έλαβαν χώρα για τρία διαφορετικά βάθη κοπής. Η γωνία απόβλιττου διατηρείται στις -45° σε όλη τη σειρά προσομοιώσεων, η ταχύτητα δεν μεταβάλλεται και το βάθος κοπής παραμένει σταθερό στα 12\AA .

4.2.1 Προσομοίωση 1a

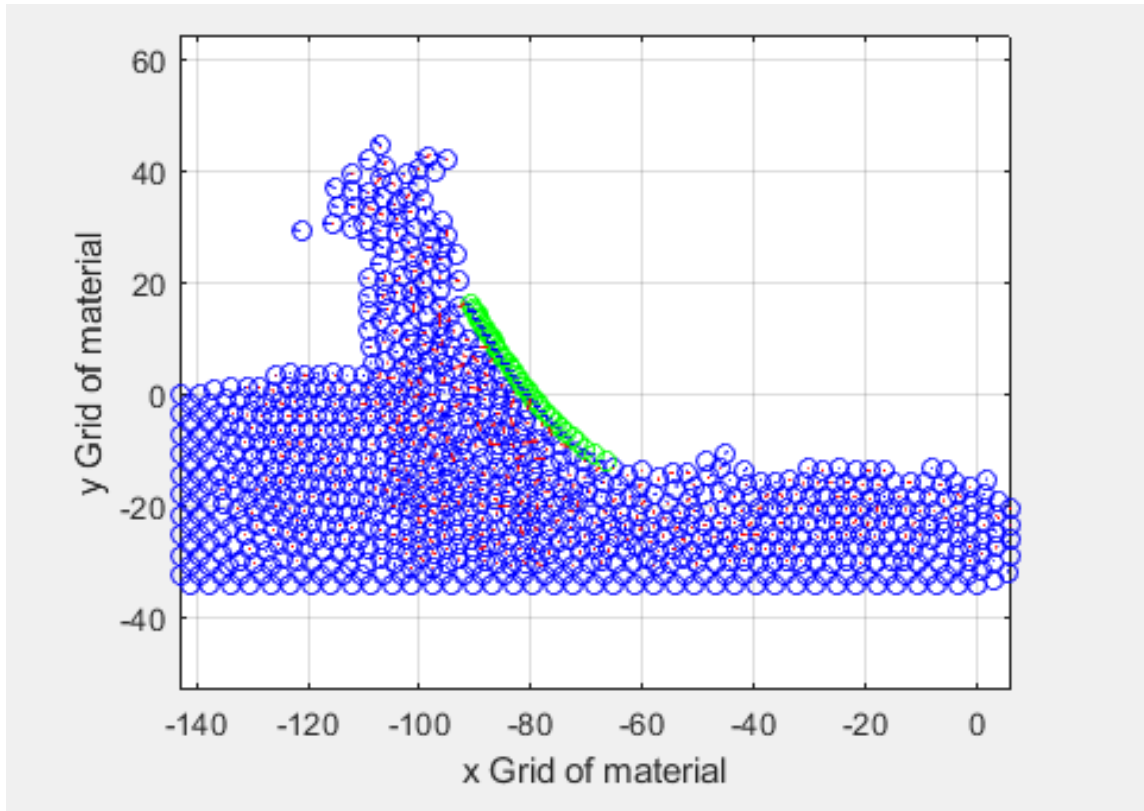
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 1a είναι:

Προσομοίωση 1a	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	-45°
COHESION ENERGY	0.087
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	12 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	1230 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

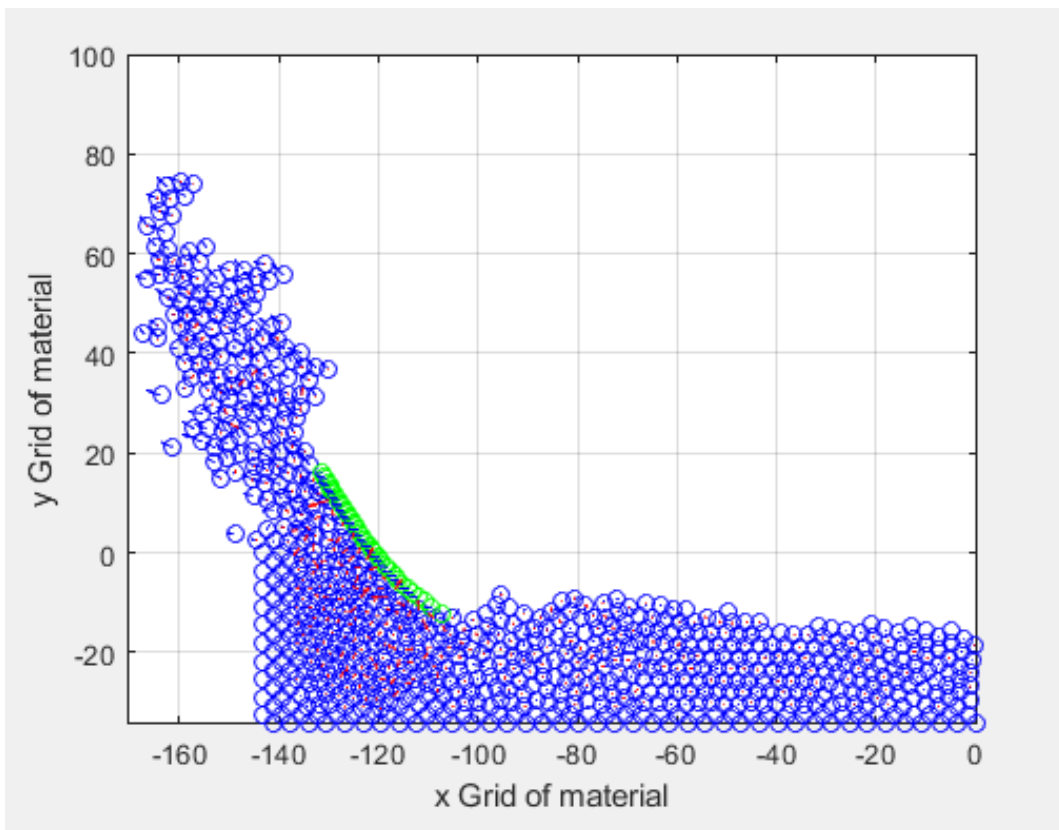
Πίνακας 4.1: Παράμετροι προσομοίωσης 1a



Εικόνα 4.1: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης κατά την έναρξη της κατεργασίας



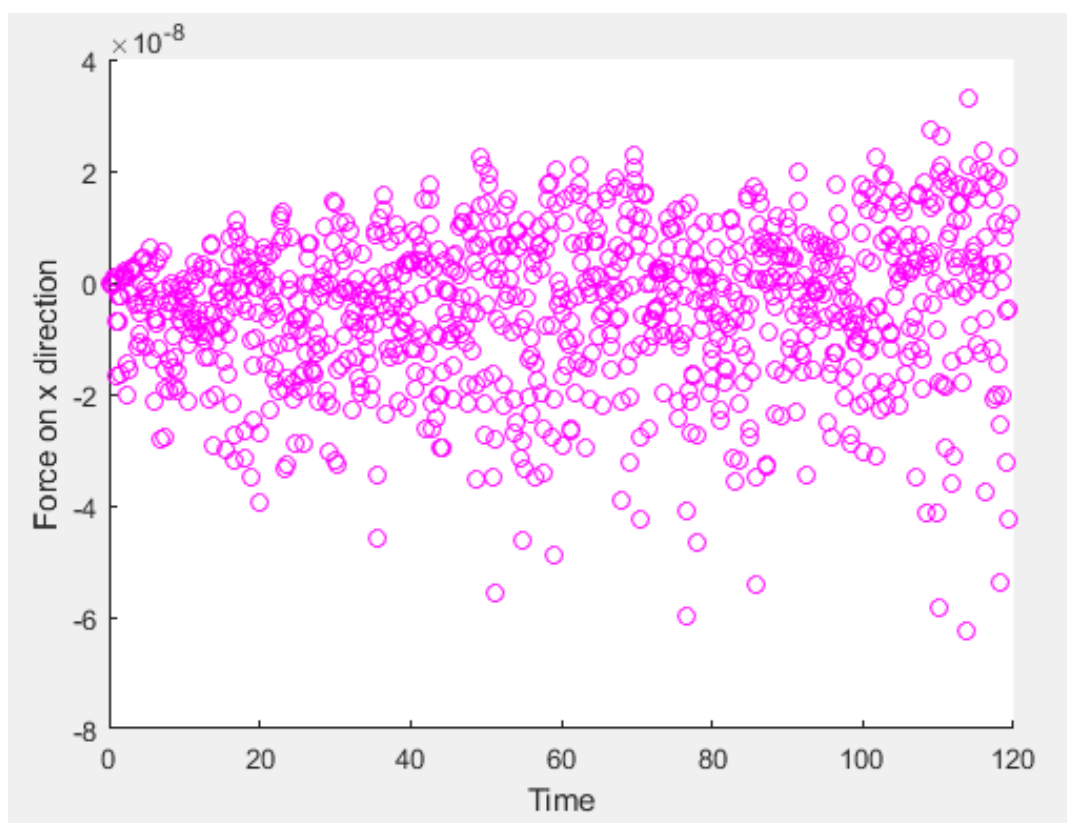
Εικόνα 4.2: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας



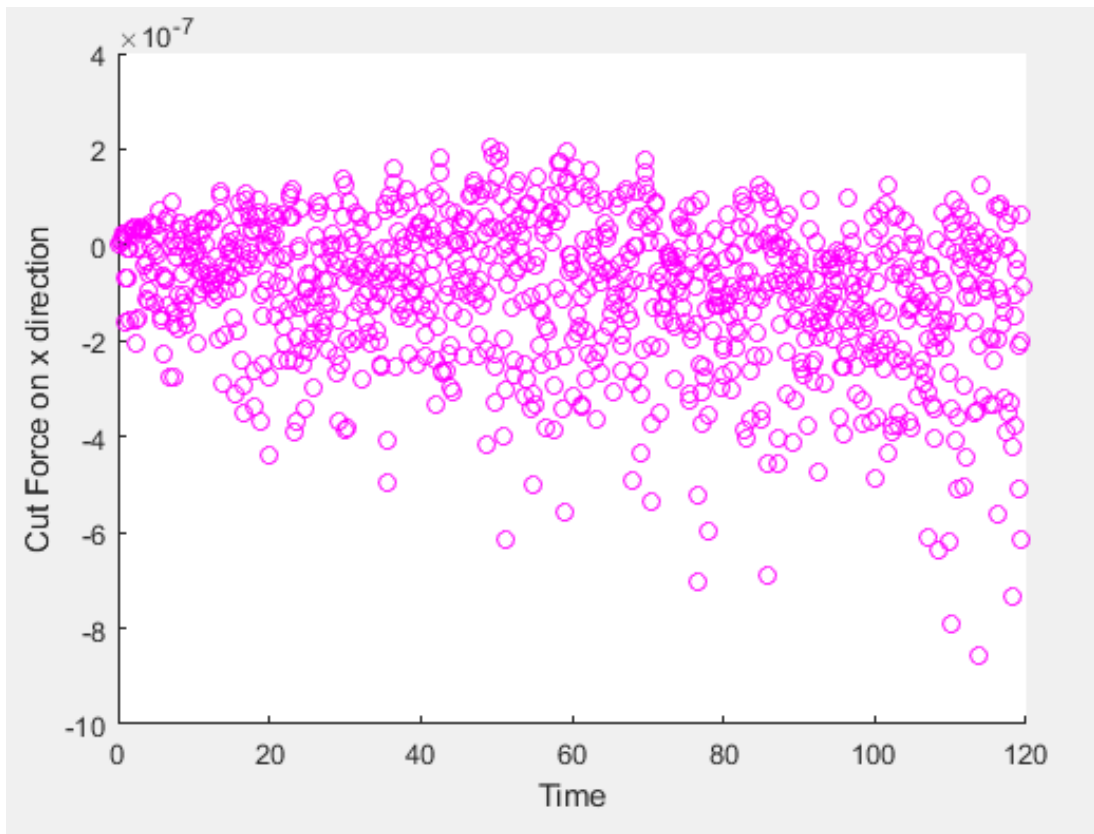
Εικόνα 4.3: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

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 απόβλιττο μετακινείται προς τα επάνω, παράλληλα με την επιφάνεια του κόκκου και με τον τρόπο αυτό διαμορφώνεται και η κατεργασμένη επιφάνεια. Επίσης, η γεωμετρία του κόκκου επίσης παίζει ρόλο στην 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.

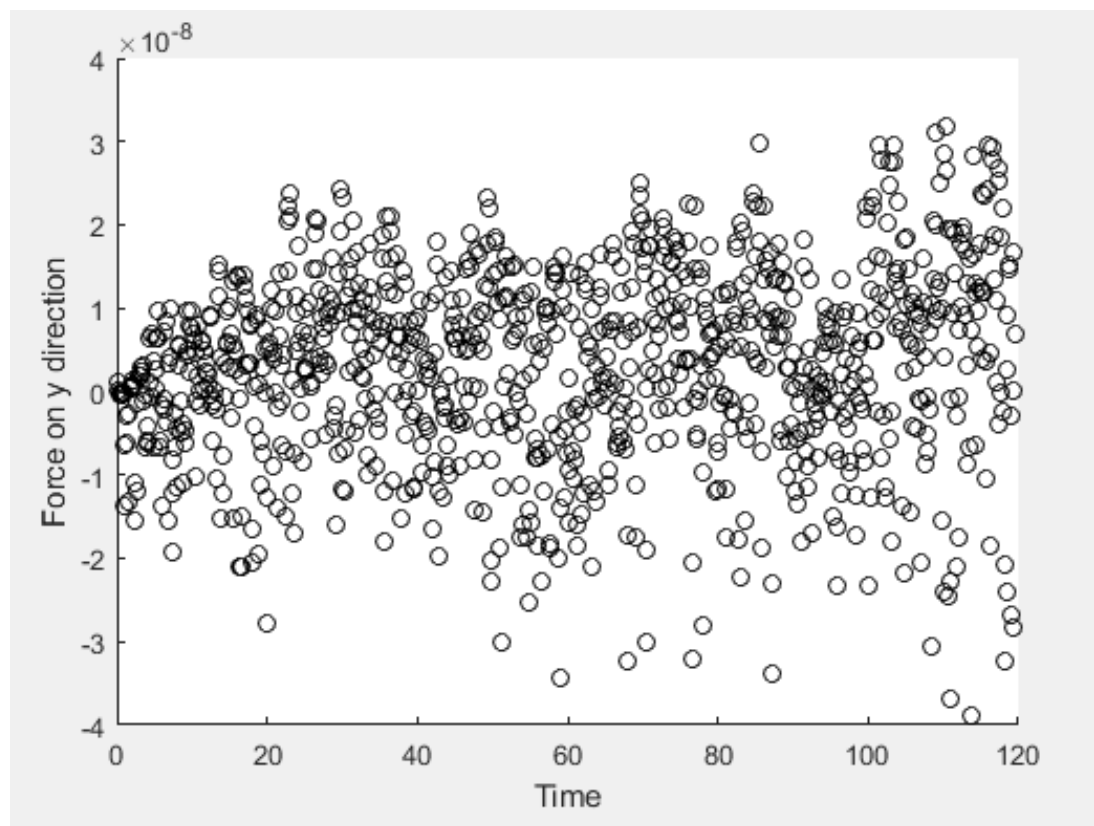
Σε όλα τα στιγμιότυπα, τα μπλε βέλη παριστάνουν τις ταχύτητες των ατόμων και τα κόκκινα τις αντίστοιχες επιταχύνσεις. Με την εξέλιξη του φαινομένου, μεγαλώνουν και οι ταχύτητες των ατόμων, πράγμα το οποίο αντιστοιχεί και σε αύξηση των θερμοκρασιών του υλικού κατεργασίας. Παρακάτω έχουμε τα διαγράμματα των δυνάμεων που αναπτύσσονται.



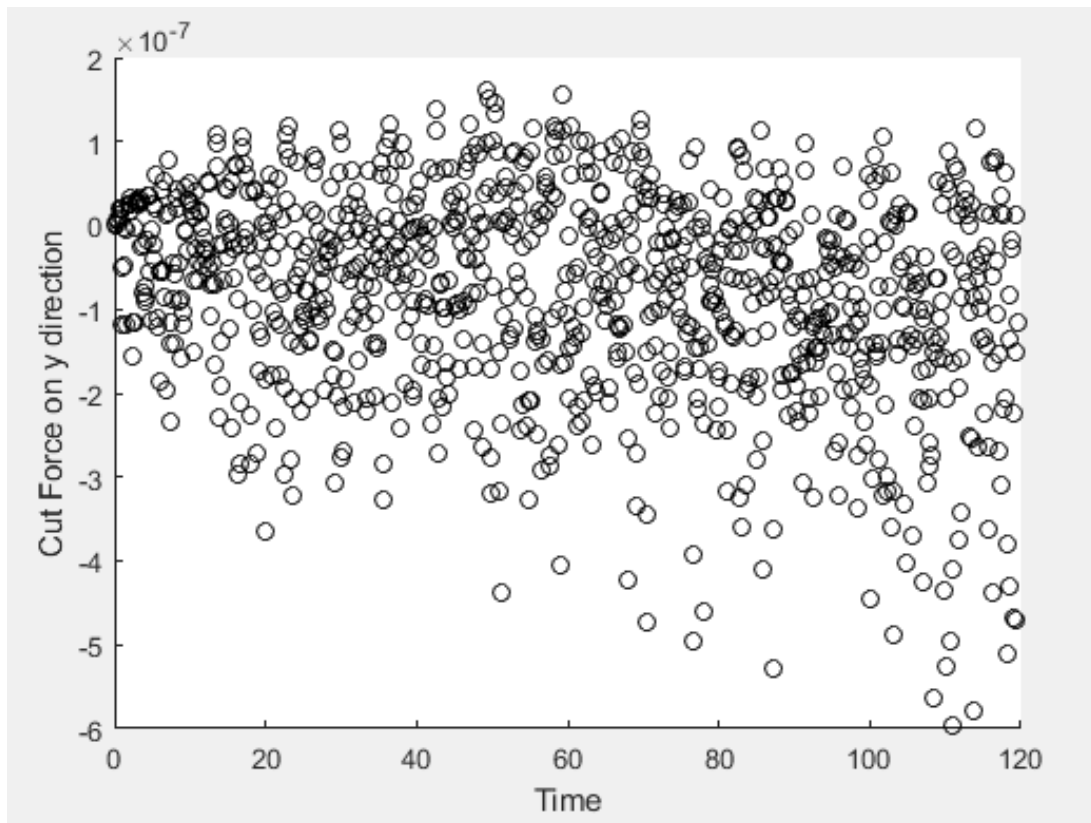
Εικόνα 4.4 : Μεταβολή της δύναμης στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.5 : Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



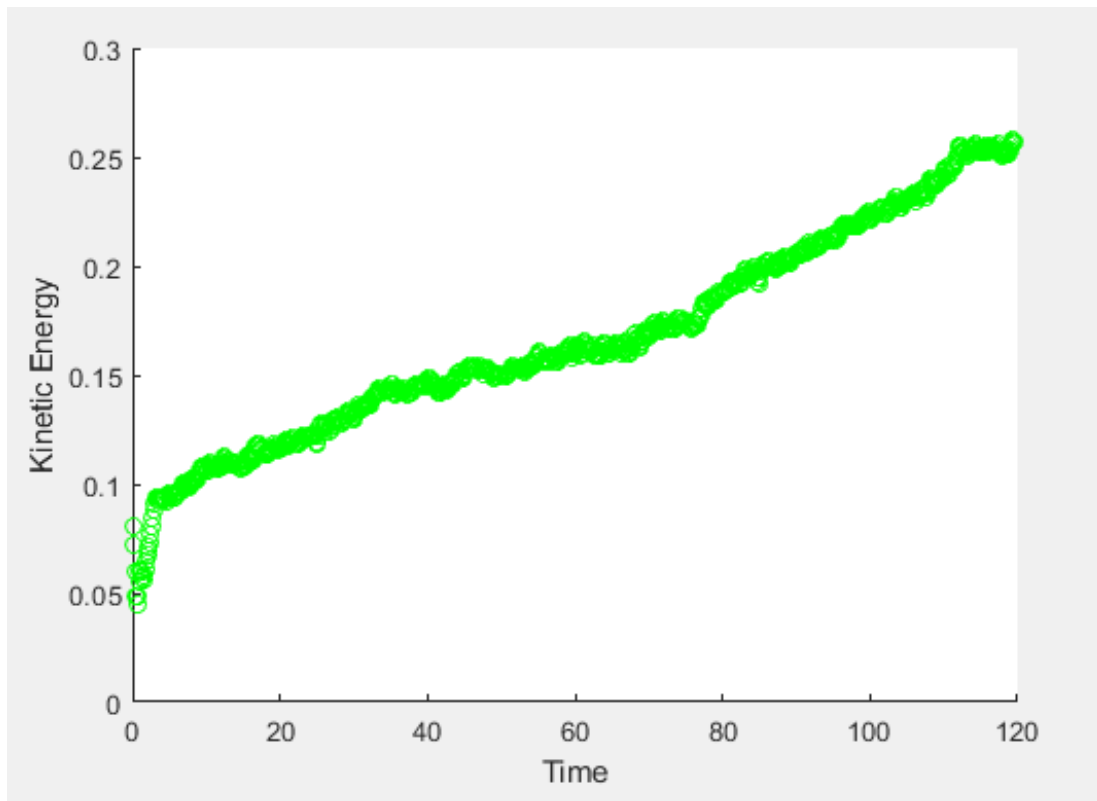
Εικόνα 4.6 : Μεταβολή της δύναμης στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου



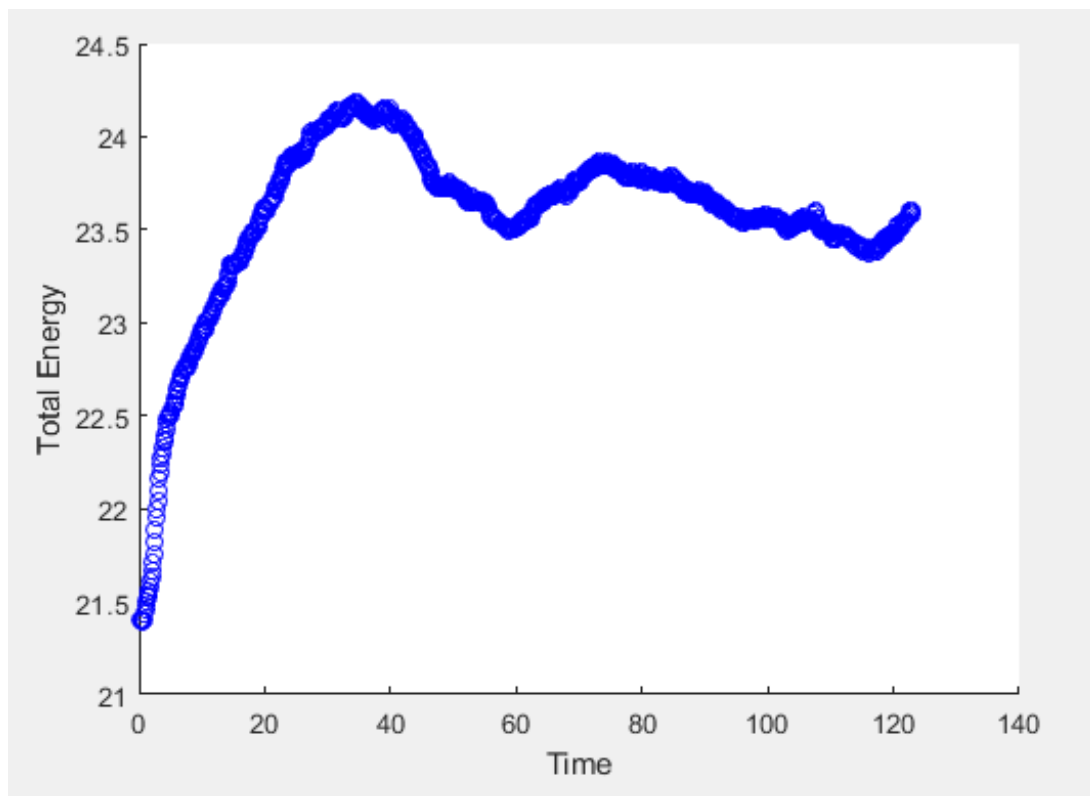
Εικόνα 4.7: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

Από τα διαγράμματα των δυνάμεων κατά τους άξονες x και y (Εικόνες 4.4-4.7), 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. Οι μέσες τιμές κατά x και y, είναι $CF_{xμ} = 63.04\text{nN}$ και $CF_{yμ} = 50.37\text{nN}$ αντιστοίχως.

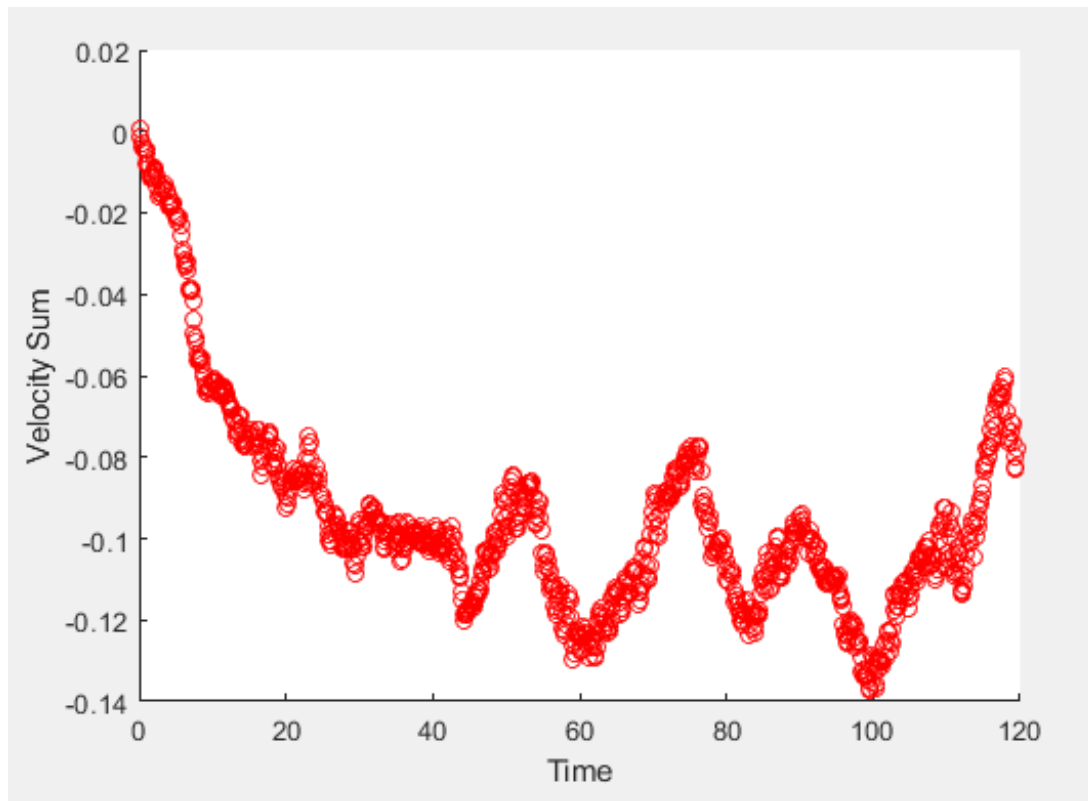
Στις Εικόνες 4.8 και 4.9 μπορούμε να παρατηρήσουμε τη μεταβολή της κινητικής και της ολικής ενέργειας του συστήματος συναρτήσει του χρόνου. Παρατηρούμε ότι τόσο η συνολική όσο και η κινητική ενέργεια του συστήματος αυξάνονται κατά τη διάρκεια της κοπής. Γενικά, η εξέλιξή τους πραγματοποιείται με ομαλό τρόπο, σε αντίθεση με τις δυνάμεις κοπής που χαρακτηρίζονται από έντονες διακυμάνσεις στις τιμές τους. Από αυτά τα διαγράμματα μπορούμε να βγάλουμε κάποια συμπεράσματα και για τη δυναμική ενέργεια στην προσομοίωση. Διαπιστώνουμε λοιπόν, ότι η δυναμική ενέργεια αποτελεί γενικά ένα αρκετά μεγάλο ποσοστό της συνολικής ενέργειας του συστήματος. Στην Εικόνα 4.10, έχουμε το διάγραμμα του αθροίσματος των ταχυτήτων. Εδώ παρατηρούμε μία πιο ομαλή διακύμανση, σε σχέση με τις διακυμάνσεις των δυνάμεων, που δείχνει ότι τείνει να μειώνεται και να συγκλίνει σε ένα σημαντικά μικρότερο εύρος τιμών, όσο εξελίσσεται η κατεργασία.



Εικόνα 4.8: Μεταβολή της κινητικής ενέργειας συναρτήσει του χρόνου



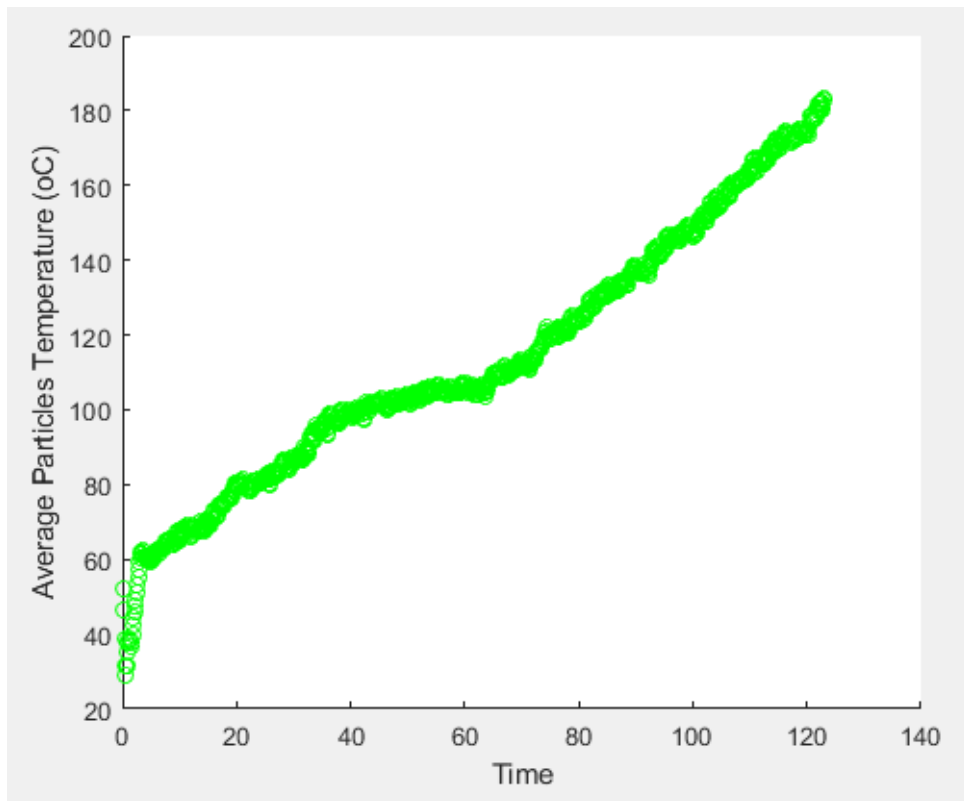
Εικόνα 4.9: Μεταβολή της ολικής ενέργειας συναρτήσει του χρόνου



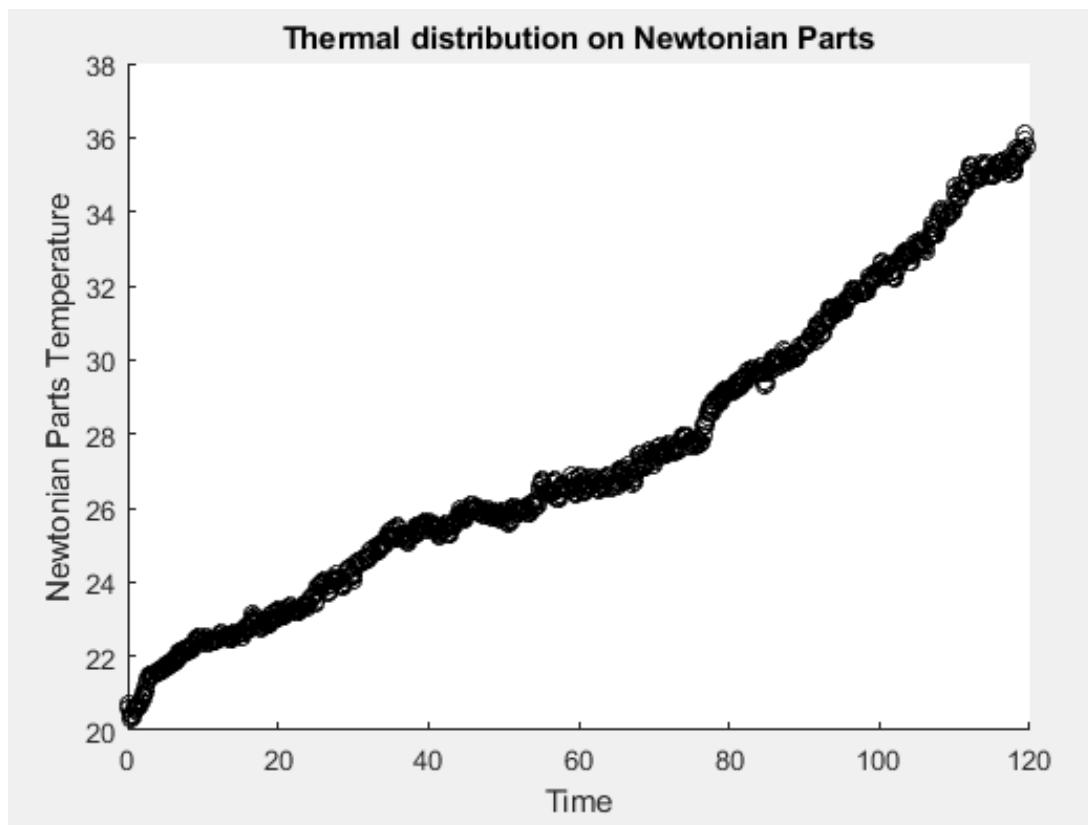
Εικόνα 4.10 : Μεταβολή του αθροίσματος ταχυτήτων συναρτήσει του χρόνου

Από το σύνολο των προσομοιώσεων που πραγματοποιήσαμε, παρατηρήθηκε, όπως άλλωστε και με τις δυνάμεις κοπής, ότι η μορφή των παραπάνω διαγραμμάτων, πάντα ποιοτικά, παραμένει η ίδια, ανεξαρτήτως των συνθηκών κοπής που επιλέξαμε για τις προσομοιώσεις αυτές. Βέβαια, κάτι τέτοιο εννοείται ότι δεν συμβαίνει και με τις τιμές των μεγεθών αυτών. Για το λόγο αυτό, στα παρακάτω, δε θα παρουσιάζονται σε κάθε περίπτωση τα αντίστοιχα διαγράμματα, καθώς ουσιαστικά δε προσφέρουν κάποια χρήσιμη πληροφορία. Στο εξής λοιπόν, θα παρουσιάζονται μόνο οι προκύπτουσες δυνάμεις κοπής και η εξάρτησή τους από τις εκάστοτε συνθήκες κοπής, καθώς γενικά στις κατεργασίες αποβολής υλικού, οι δυνάμεις κοπής είναι αυτές για τις οποίες ενδιαφερόμαστε. Επιπλέον, η μεταβολή της συνολικής ενέργειας του συστήματος ακολουθεί γενικά τον τρόπο μεταβολής των δυνάμεων κοπής συναρτήσει των συνθηκών κοπής, επομένως θεωρούμε ότι η παρουσίαση των τιμών της ενέργειας για κάθε περίπτωση προσομοίωσης δεν μας προσφέρει κάποια επιπλέον κρίσιμη πληροφορία για την κατανόηση της εξέλιξης του φαινομένου στηνανοκλίμακα.

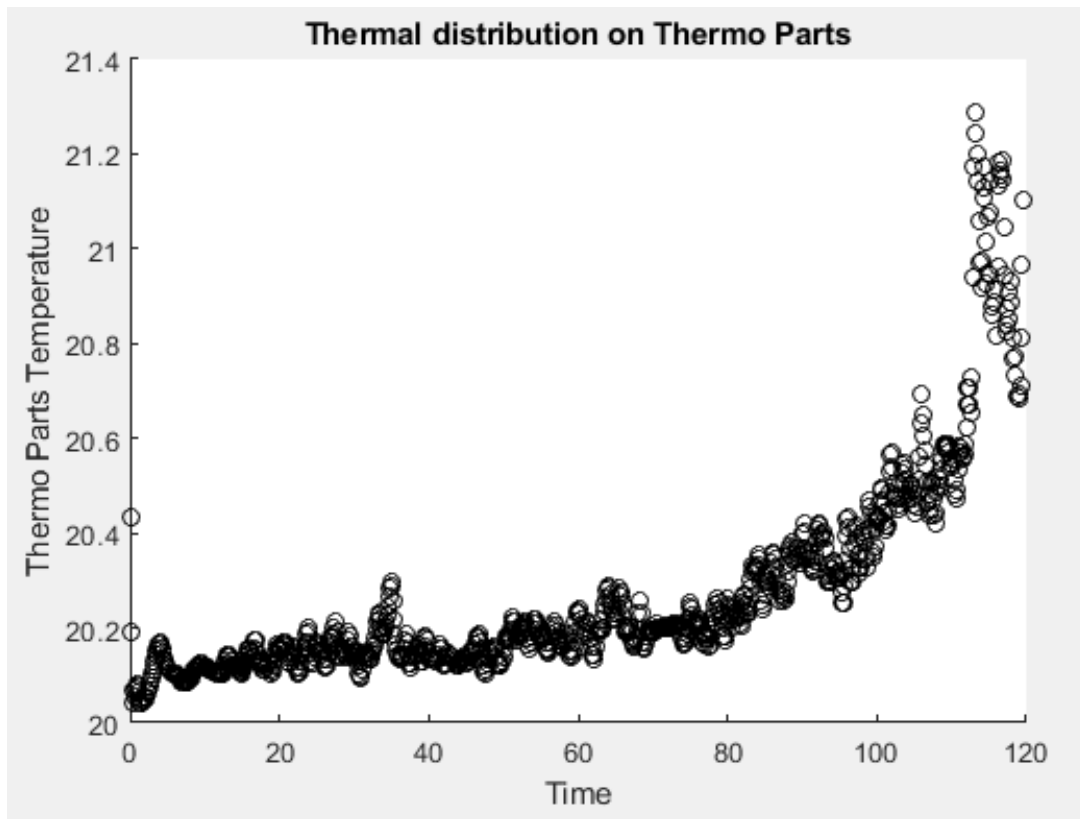
Στο διάγραμμα της Εικόνας 4.11 απεικονίζεται η σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού. Ο υπολογισμός των θερμοκρασιών των ατόμων γίνεται μέσω της συνάρτησης *PropAccum* του κώδικα. Η συνάρτηση αυτή για να δώσει την τρέχουσα τιμή του μεγέθους, βρίσκει σε κάθε χρονικό βήμα το μέσο όρο όλων των προηγούμενων τιμών, υπολογίζει τη διασπορά τους και στη συνέχεια για να βρει την τρέχουσα τιμή αφαιρεί από την τιμή της διασποράς την τιμή του τελευταίου βήματος. Άρα, η συνάρτηση αυτή μας δείχνει τη συσσώρευση θερμοκρασίας που προκύπτει ως προς το προηγούμενο χρονικό βήμα.



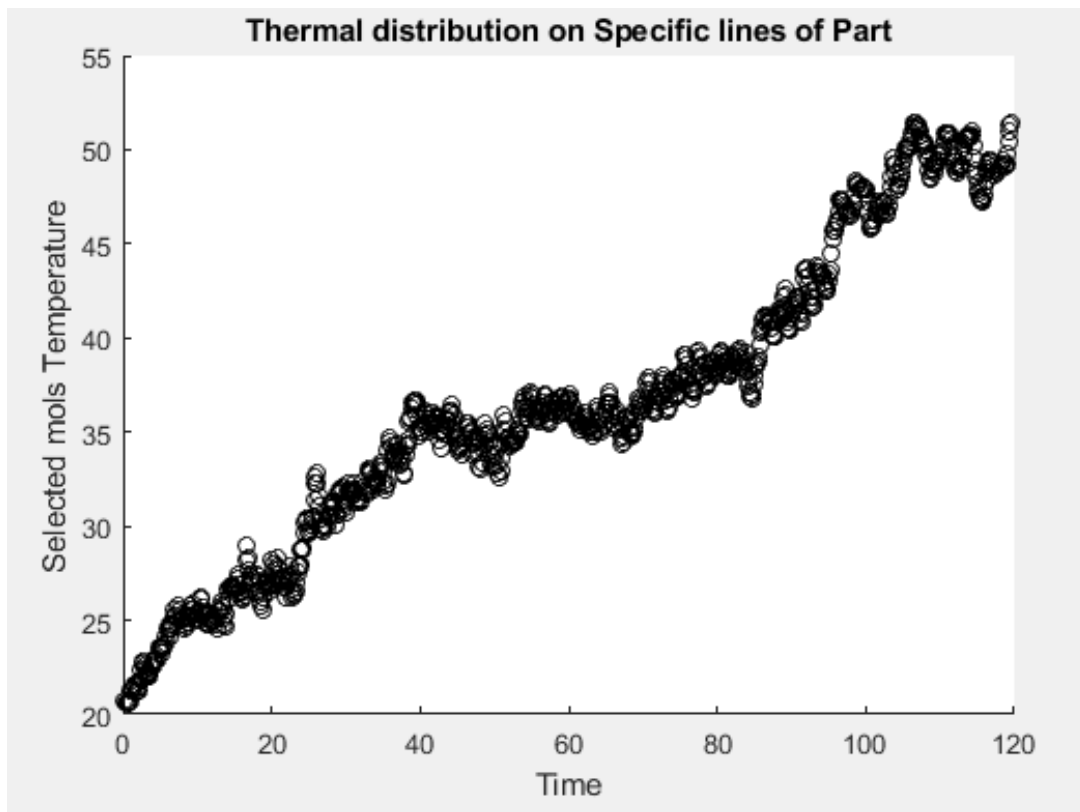
Εικόνα 4.11 : Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας



Εικόνα 4.12 : Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.13 : Μέση θερμοκρασία των θερμοστατικών ατόμων συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.14 : Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων συναρτήσει του χρόνου

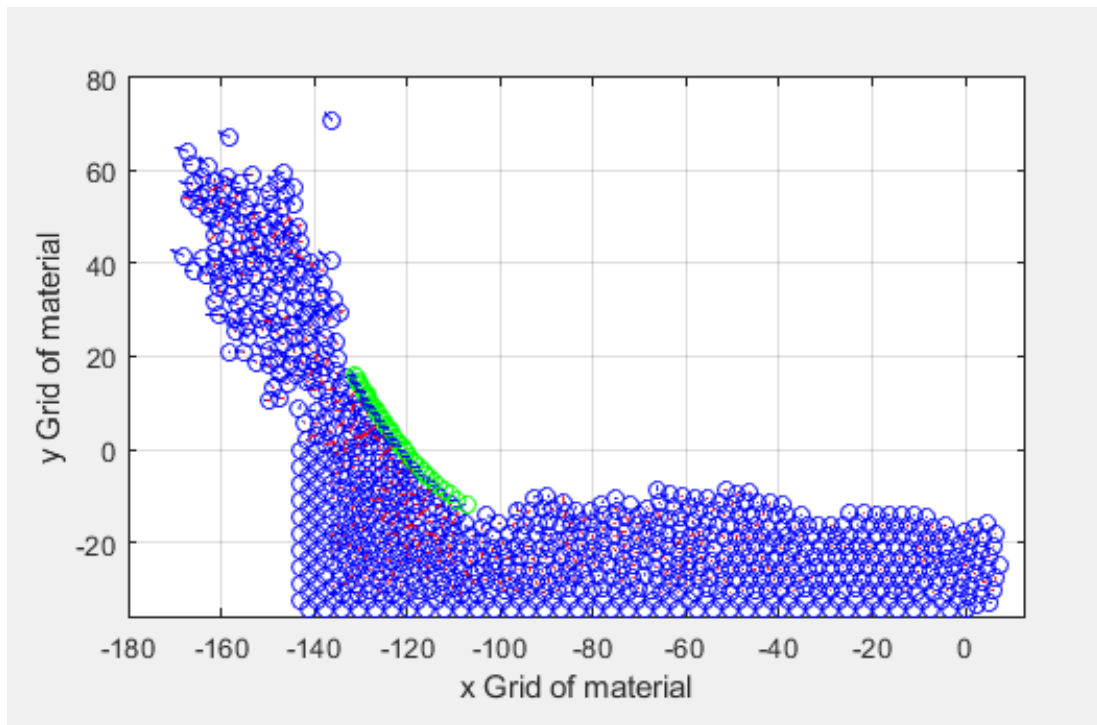
Παρατηρούμε ότι η σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κυμαίνεται σε ένα εύρος από 60 μέχρι 180°C, με σταθερή αύξηση από αρκετά νωρίς και για το μεγαλύτερο μέρος της προσομοίωσης, με τη μέγιστη τιμή στους 184°C και τη μέση τιμή στους 113°C. Στην Εικόνα 4.12 έχουμε την εξέλιξη της μέσης θερμοκρασίας των Νευτώνειων ατόμων κατά τη λείανση. Παρατηρούμε μία σχετικά ομαλή αύξηση από τους 20 στους 36°C. Στο διάγραμμα αυτό είναι φανερή η σημαντική λειτουργία των θερμοστατικών ατόμων. Η μέση θερμοκρασία των θερμοστατών φαίνεται στην Εικόνα 4.13 και παρουσιάζει πολύ μικρές διακυμάνσεις γύρω από τους 20-21°C. Τέλος, στην Εικόνα 4.14, δίνεται η μέση θερμοκρασία της ομάδας ατόμων που επιλέξαμε να μελετήσουμε, η οποία σε αυτή την περίπτωση είναι οι 2 ανώτερες σειρές των Νευτώνειων ατόμων του υλικού κατεργασίας, που είναι συνολικά 72 (θέσεις 765-800 και 725-760). Παρατηρείται συνεχής αύξηση της μέσης θερμοκρασίας των επιλεγμένων ατόμων, με μικρές διακυμάνσεις, από τους 21 ως τους 50°C.

4.2.2 Προσομοίωση 1b

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 1b είναι:

Προσομοίωση 1b	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	-45°
COHESION ENERGY D	0.00087
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	12 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	1230 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

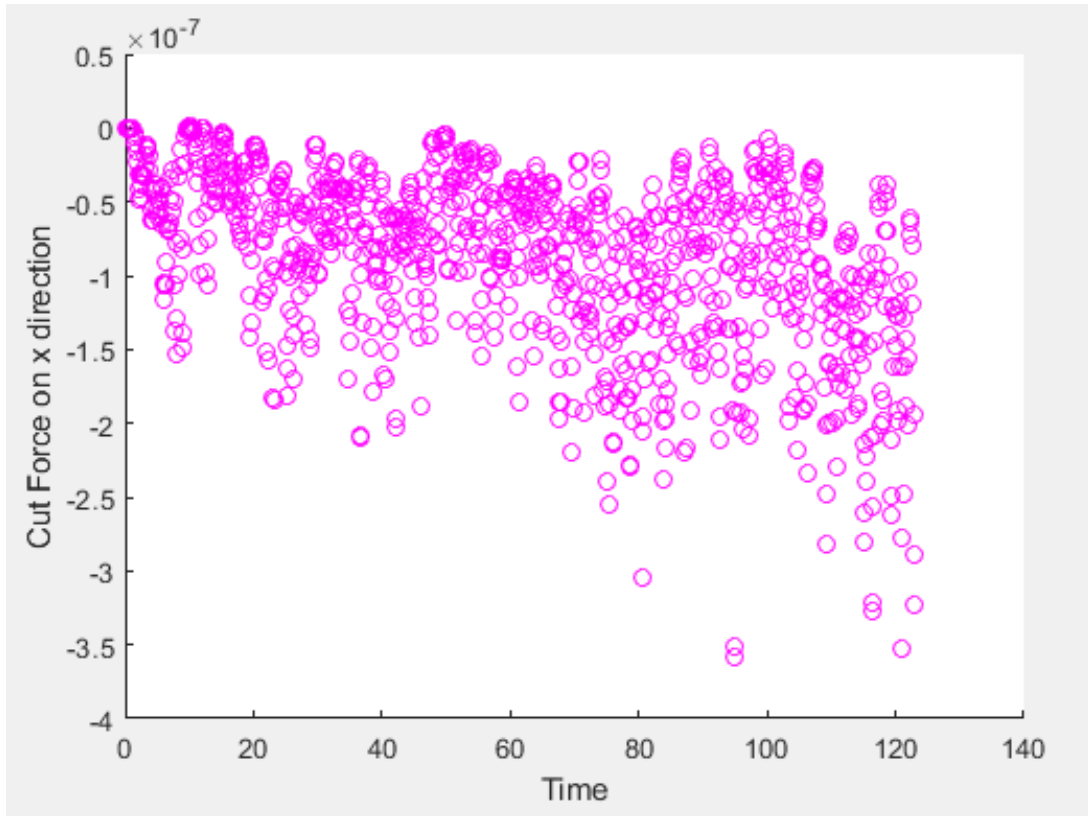
Πίνακας 4.2: Παράμετροι προσομοίωσης 1b



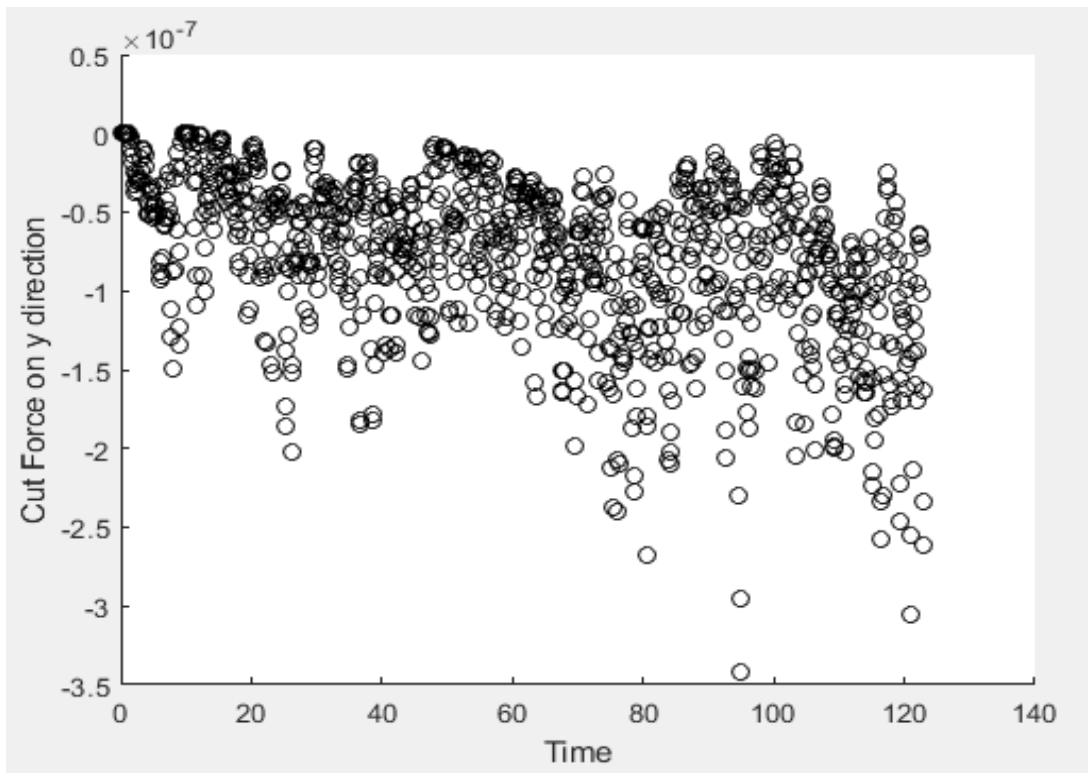
Εικόνα 4.15: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Έχοντας υπολογίσει την ενέργεια συνοχής κατά 100 φορές μικρότερη της αρχικής είναι λογικό να έχουμε το παραπάνω σχήμα στην τελική επεξεργασία του αντικειμένου μας. Θεωρητικά το εργαλείο λόγω της φθοράς που έχει υποστεί δεν ασκεί την ίδια δύναμη στο απόβλιττο, πράγμα που σημαίνει ότι το απόβλιττο παραμένει συμπαγές, και δεν απομακρύνεται τόσο από το αντικείμενο όπως παρατηρήσαμε νωρίτερα στην προηγούμενη προσομοίωση, που το απόβλιττο έχει πιο λεπτή μορφή και μεγαλύτερο μήκος. Εδώ καθώς οι δυνάμεις που ασκεί το εργαλείο ατονούν, οι δυνάμεις μεταξύ των ατόμων του υλικού του εργαλείου καταφέρνουν να κρατούν τα γειτονικά άτομα πλησιέστερα.

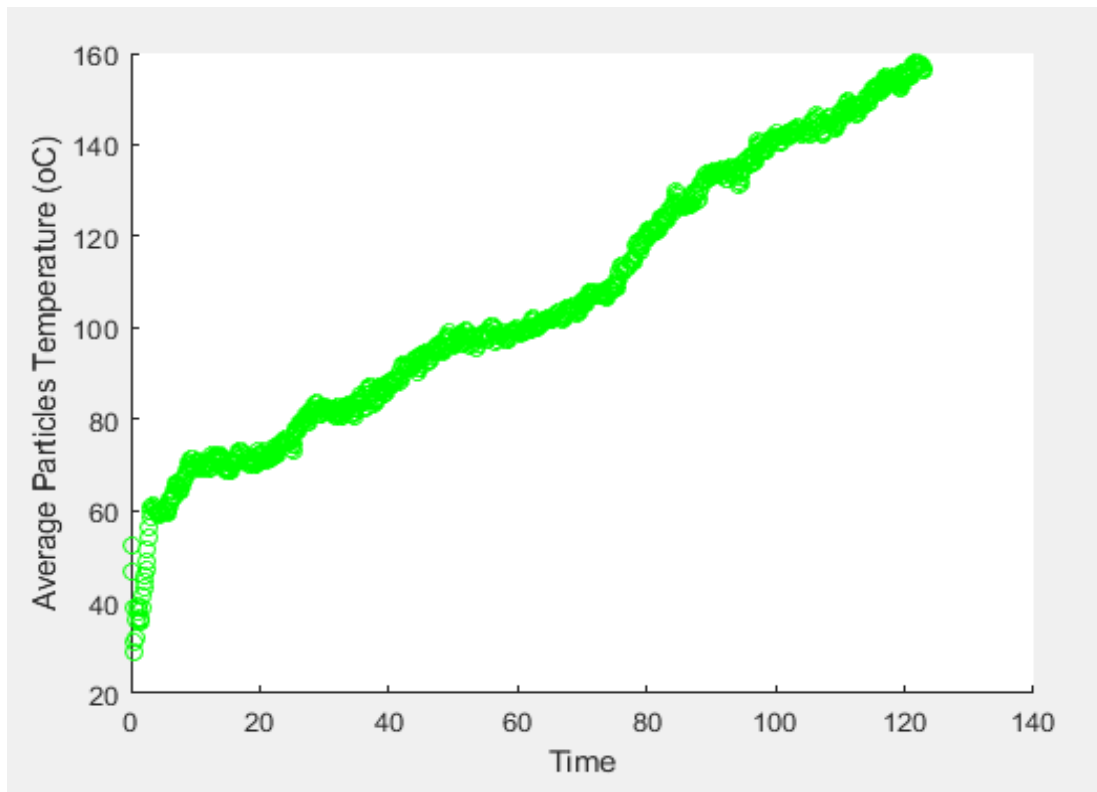
Αυτό εξηγείται ακόμα καλύτερα αν δούμε την ανάλυση των παρακάτω διαγραμμάτων. Σύμφωνα με τη θεωρία που μελετήσαμε για την επίδραση που έχει η αλλαγή του D στην κατεργασία, αναμένουμε μείωση 33% στην δύναμη κοπής στον άξονα x και 20% της δύναμης κοπής στον άξονα y (αναφερόμενοι στην περίπτωση σύγκρισης των D και $D/100$). Πράγματι, από τα παρακάτω διαγράμματα λαμβάνουμε παραπλήσιες τιμές με τη μελέτη, που υποστηρίζουν αυτό που περιμέναμε και εξηγούν και την παραπάνω απεικόνιση της κατεργασίας. Συγκεκριμένα προκύπτει πως οι μέσες τιμές κατά x και y είναι $CF_{xμ} = 45.07nN$ και $CF_{yμ} = 41.20nN$ αντιστοίχως, δηλαδή ως προς τον άξονα x παρατηρούμε μείωση κατά 28.5% και για τον άξονα y 18.2%, αποτελέσματα που βρίσκονται πολύ κοντά στην περίπτωση που διερευνά η μελέτη των Maekawa και Itoh.



Εικόνα 4.16: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.17: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.18: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

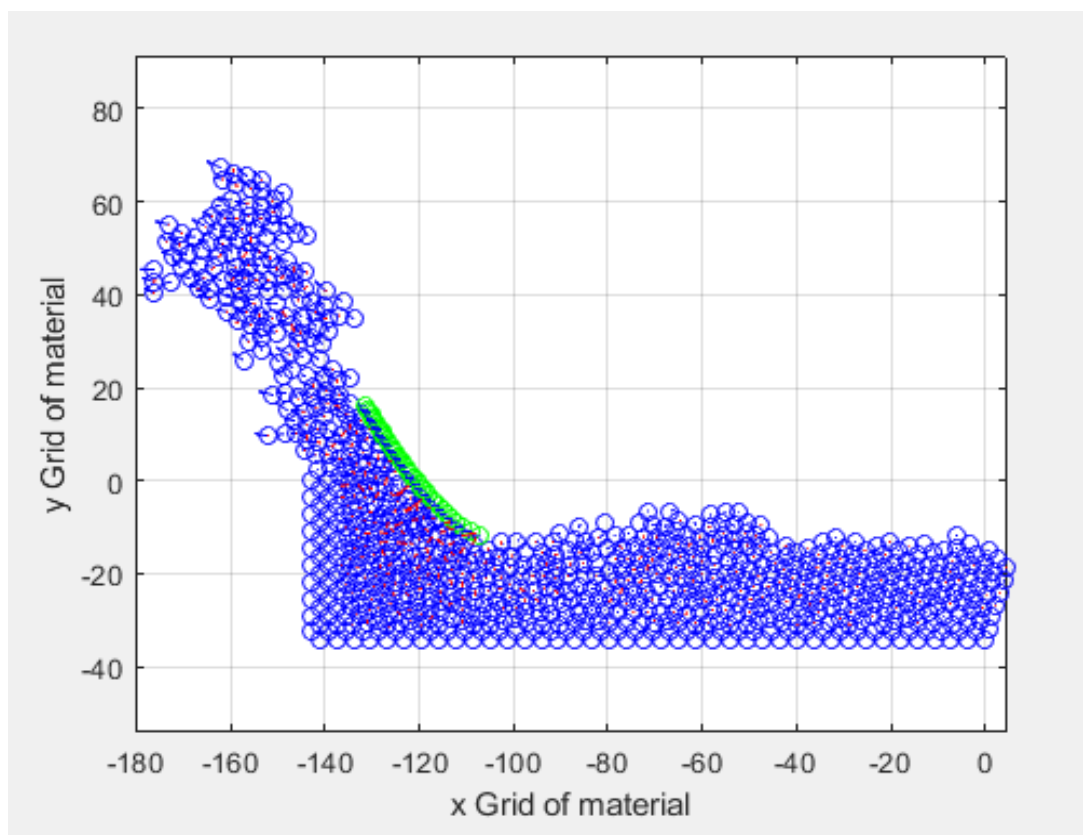
Στην ίδια γραμμή σκέψης και βάσει λογικής, θα περιμέναμε πως και η θερμοκρασία θα παρουσίαζε κάποια μείωση, μιας και οι δυνάμεις είναι μικρότερες άρα αντίστοιχα και οι θερμοκρασίες που αναπτύσσονται μεταξύ των ατόμων επίσης μικρότερες. Πράγματι στο παραπάνω διάγραμμα παρατηρούμε ότι η θερμοκρασία δεν ξεπερνά τους 160°C βαθμούς, με μέγιστη τιμή τους 158. Η μέση τιμή βρίσκεται στους 101°C οπότε παρατηρούμε μείωση κατά 10.6% σε σχέση με την αρχική προσομοίωση με τιμή $D = 0.087$. Κάτι τέτοιο επιβεβαιώνεται και από τα συμπεράσματα της έρευνας που μελετήθηκε.

4.2.2 Προσομοίωση 1c

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 1c είναι:

Προσομοίωση 1c	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	-45°
COHESION ENERGY D	0.00174
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	12 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	1230 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

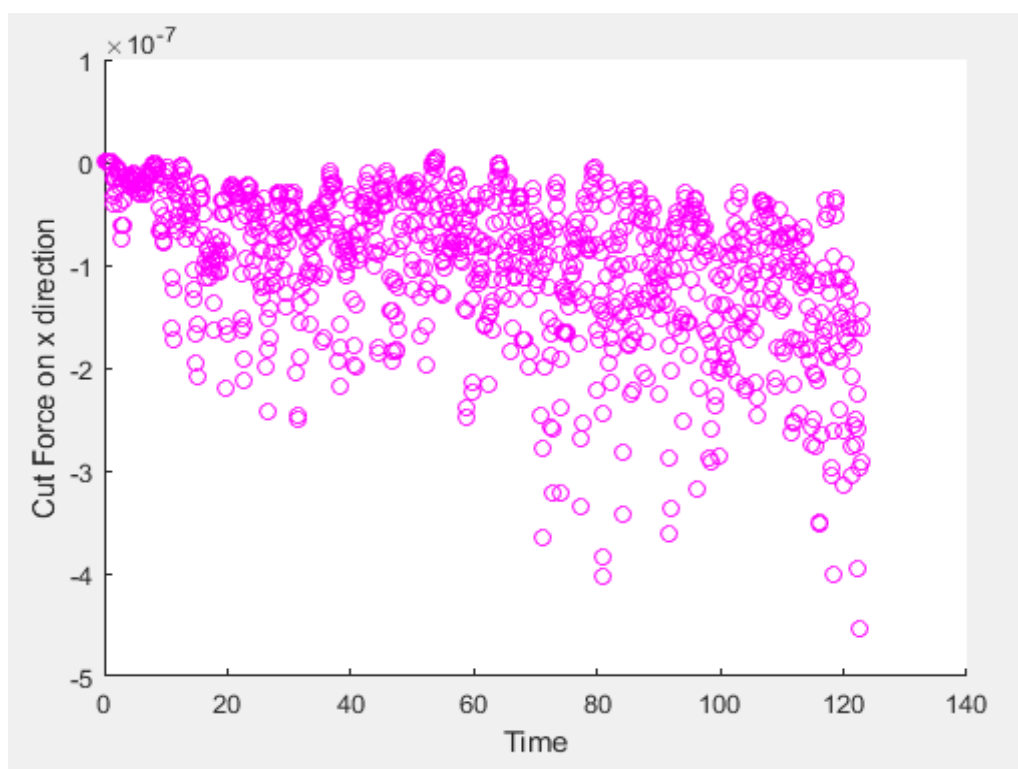
Πίνακας 4.3: Παράμετροι προσομοίωσης 1c



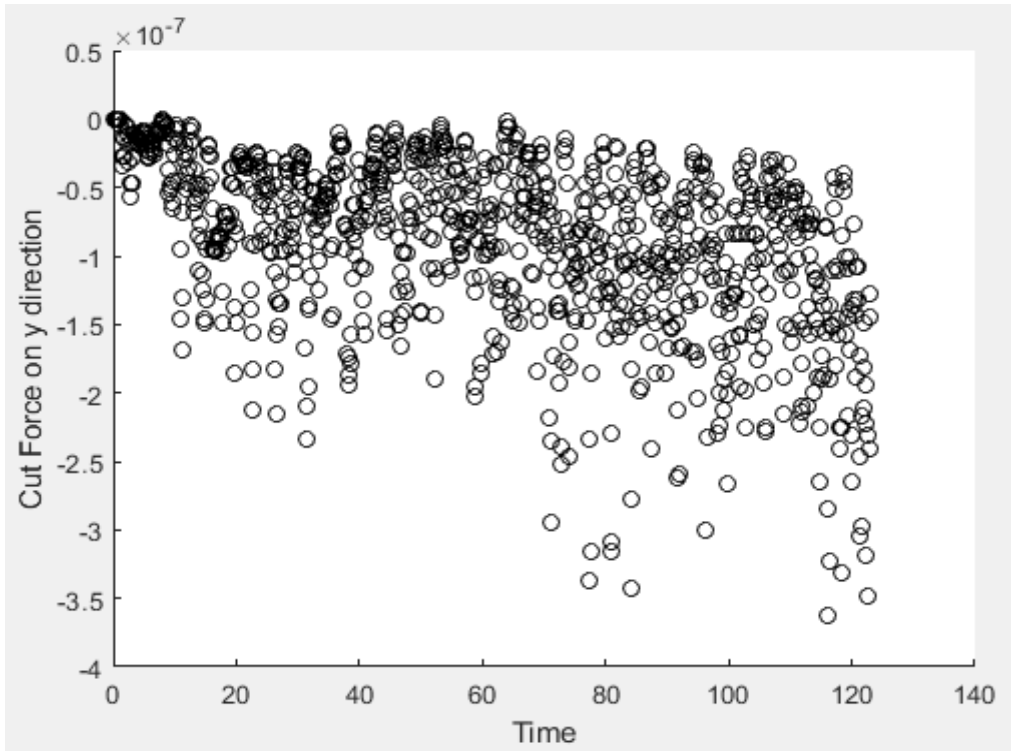
Εικόνα 4.19: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Προκειμένου να πάμε τη μελέτη του Maekawa ένα βήμα παραπάνω, επιλέξαμε να τρέξουμε τον αλγόριθμο για ενδιάμεσες τιμές του D προκειμένου να δούμε αν μπορούν να φανούν διαφορές και σε αυτές. Αν δηλαδή υπάρχει μια αναλογική ή κάποιου άλλου είδους σχέση με την αλλαγή της ενέργειας συνοχής των ατόμων του εργαλείου μας. Δεδομένου ότι στην έρευνα χρησιμοποιείται μια τόσο μεγάλη διαφορά στις δοκιμές, θεωρήσαμε ότι με αλλαγές του D κατά 10%, 20% και 50% δεν μπορούν να προκύψουν σαφή συμπεράσματα, οπότε μια τιμή της τάξης του D/50 είναι σίγουρα άξια δοκιμής και ανάλυσης. Στο παραπάνω σχήμα (4.19) βλέπουμε την εικόνα του απόβλιττου στη συγκεκριμένη περίπτωση. Πάλι βλέπουμε ότι το μήκος είναι μικρότερο συγκριτικά με την αρχική περίπτωση και το απόβλιττο πιο συμπαγές. Αυτό σημαίνει ότι ξανά η μείωση της ενέργειας συνοχής είναι αρκετά σημαντική για να προκαλεί διαφορά στη δύναμη με την οποία το εργαλείο μας κόβει το αντικείμενο. Παρατηρούμε πάντως ότι το απόβλιττο ξεφεύγει κατά τον άξονα x περισσότερο σε σύγκριση με την 2η περίπτωση, επομένως δέχεται μεγαλύτερη δύναμη, άρα πράγματι μελετάμε μια ενδιάμεση κατάσταση των δυο προηγούμενων περιπτώσεων

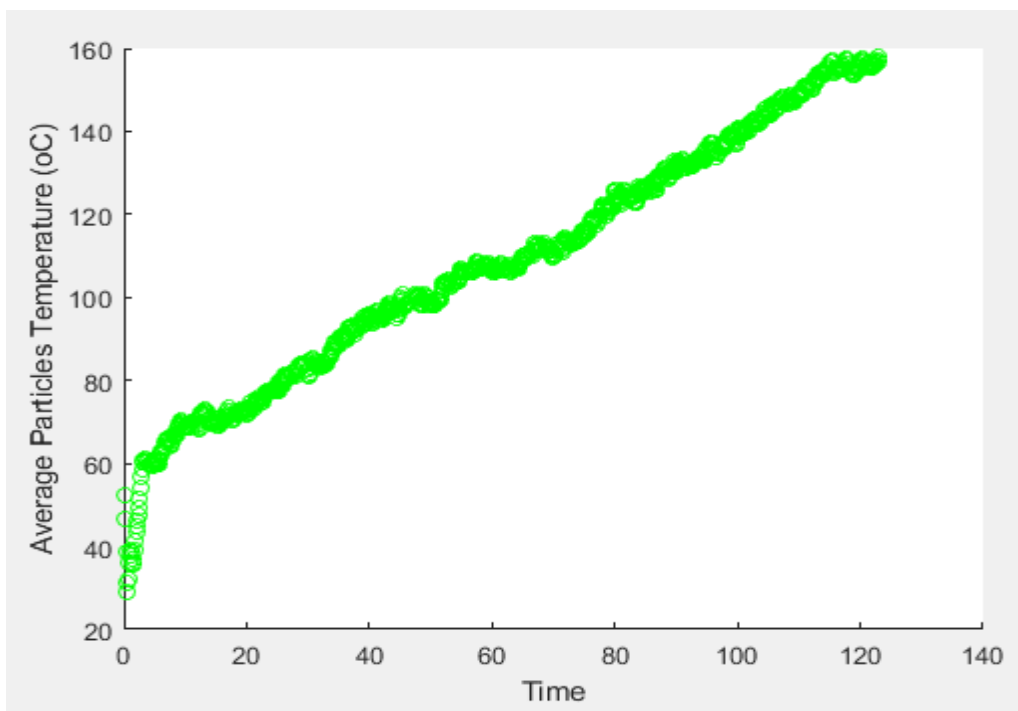
Από τα παρακάτω διαγράμματα (Εικόνα 4.20-4.21) των δυνάμεων κοπής αποδεικνύεται η παρατήρηση που μόλις κάναμε. Σύμφωνα με τις τιμές που προκύπτουν από τον αλγόριθμό μας, για ενέργεια συνοχής D/50 έχουμε μείωση 13.4% στην δύναμη κοπής κατά τον άξονα x και μείωση 9.3% στη δύναμη κοπής κατά τον άξονα y. Επομένως τα αποτελέσματα που προκύπτουν για τις μέσες τιμές κατά x και y είναι $CF_{xμ} = 54.59\text{nN}$ και $CF_{yμ} = 45.69\text{nN}$.



Εικόνα 4.20: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.21: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.22 : Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

Στην Εικόνα 4.22 παρατηρούμε ότι η θερμοκρασία δεν ξεπερνά και πάλι τους 160°C, με τη μέγιστη τιμή να είναι 159.89°C. Η μέση τιμή της θερμοκρασίας κατεργασίας μετρήθηκε στους 105.1°C, δηλαδή μείωση από την αρχική προσομοίωση της τάξης του 7%.

4.2.2 Προσομοίωση 1d

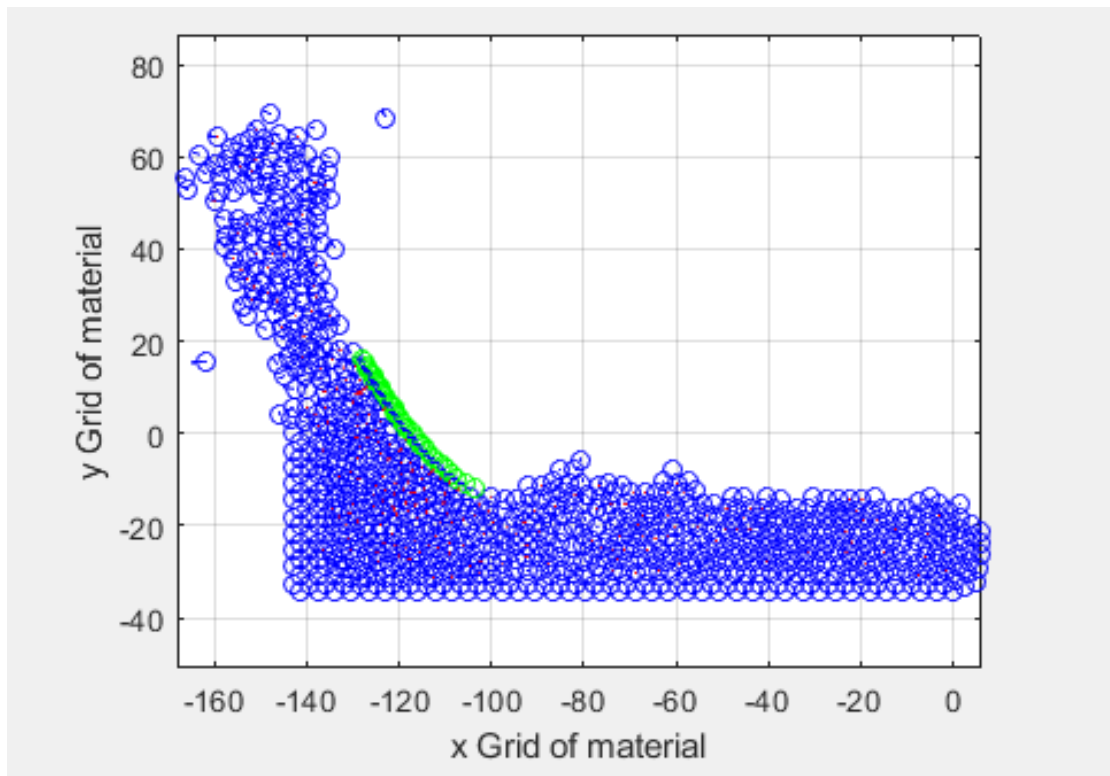
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 1d είναι:

Προσομοίωση 1d	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	-45°
COHESION ENERGY D	0.00435
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	12 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	1230 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

Πίνακας 4.4: Παράμετροι προσομοίωσης 1d

Στο πλαίσιο των ενδιάμεσων δοκιμών προσθέσαμε και την περίπτωση για ενέργεια συνοχής $D/20$. Όπως είπαμε και νωρίτερα, εξετάζοντας περιπτώσεις μείωσης κατά 10% ή 50% δεν προέκυπτε σαφές συμπέρασμα, οι διαφορές ήταν ελάχιστες με ακανόνιστη διακύμανση στα αποτελέσματα, κάτι που δικαιολογεί ίσως και τη δημοσίευση που εξετάζουμε, αφού οι κύριοι Maekawa και Itoh εξετάζουν κατευθείαν σημαντική διαφοροποίηση στην ενέργεια συνοχής, λογικά γιατί παρατήρησαν ότι μικρότερες διαφορές δεν βοηθούσαν σε κάποιο ουσιώδες συμπέρασμα. Έτσι κι εδώ, κρίναμε πως ένα πείραμα για 20 φορές τη τάξη μεγέθους μικρότερη ενέργεια συνοχής θα πλησιάζαμε στο όριο το σημείο που πλέον τα συμπεράσματα που προκύπτουν ξεκινούν να αποτελούν αξιόπιστο συμπέρασμα για τη μελέτη μας.

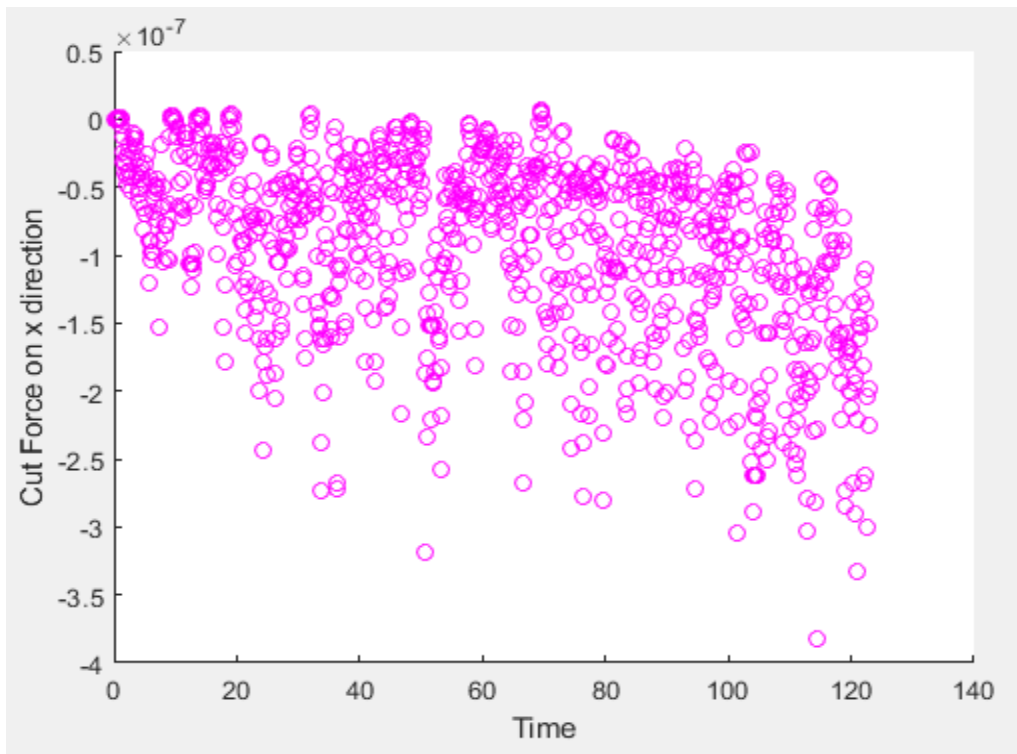
Παρακάτω (Εικόνα 4.23) παρατηρούμε το τέλος της κατεργασίας για τη συγκεκριμένη περίπτωση. Το απόβλιττο έχει ελαφρώς μεγαλύτερο μήκος από τις προηγούμενες δύο περιπτώσεις, ενώ επίσης μπορούμε να προσέξουμε ότι η επιφάνεια του επεξεργασμένου αντικειμένου από την οποία έχει περάσει το εργαλείο μας παρουσιάζει ελαφρούς κυματισμούς, δείγμα του ότι η κατεργασία διενεργείται με μεγαλύτερες δυνάμεις και παράλληλα μειώνεται κατά έναν βαθμό η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας. Η φθορά του εργαλείου είναι πλέον αισθητά μικρότερη και το εργαλείο ασκεί μεγαλύτερη δύναμη στο χάλκινο υλικό, οπότε και το παραμορφώνει εντονότερα.



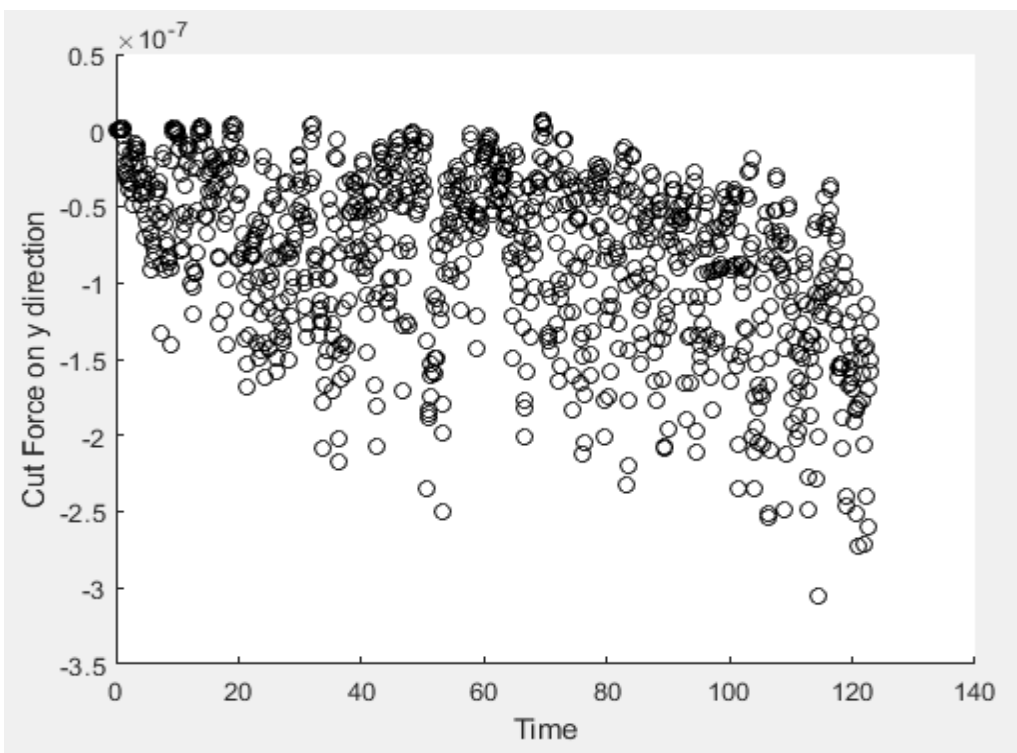
Εικόνα 4.23: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Στις Εικόνες 4.24-4.25 που ακολουθούν αποτυπώνονται τα διαγράμματα των δυνάμεων κοπής για τους δύο άξονες x και y. Πράγματι, οι τιμές που προκύπτουν επιβεβαιώνουν τη θεωρία μας, καθώς στον άξονα x έχουμε μείωση της δύναμης κοπής κατά 8% σε σχέση με την προσομοίωση με ενέργεια συνοχής D (Προσομοίωση 1a) και στον άξονα y η μείωση της δύναμης κοπής είναι ίση με 5.1%. Επομένως, οι μέσες τιμές κατά x και y είναι $CF_{xμ} = 58nN$ και $CF_{yμ} = 47.8nN$. Αυτό που αξίζει να ειπωθεί σ' αυτό το σημείο είναι ότι οι τιμές που έχουμε λάβει από τις τρεις προσομοιώσεις που εκτελέσαμε, σε σχέση με την αρχική προσομοίωση, δεν κινούνται αναλογικά αλλά δεν απέχουν και ιδιαίτερα από το συγκεκριμένο μοντέλο. Πάντως, λόγω του ότι το φάσμα των τιμών που χρησιμοποιούμε για την ενέργεια συνοχής κυμαίνεται μεταξύ $D = 0.087$ και $D = 0.00087$, δεν μπορούμε να βγάλουμε συμπεράσματα για τιμές έξω από αυτό. Άλλωστε όπως δείχνει και η μελέτη των δύο Ιαπώνων επιστημόνων, η συμπεριφορά των δυνάμεων και ο σχηματισμός του απόβλιττου αλλάζει όχι μόνο λόγω των τιμών του D αλλά και άλλων παραγόντων όπως η ατομιστική ακτίνα.

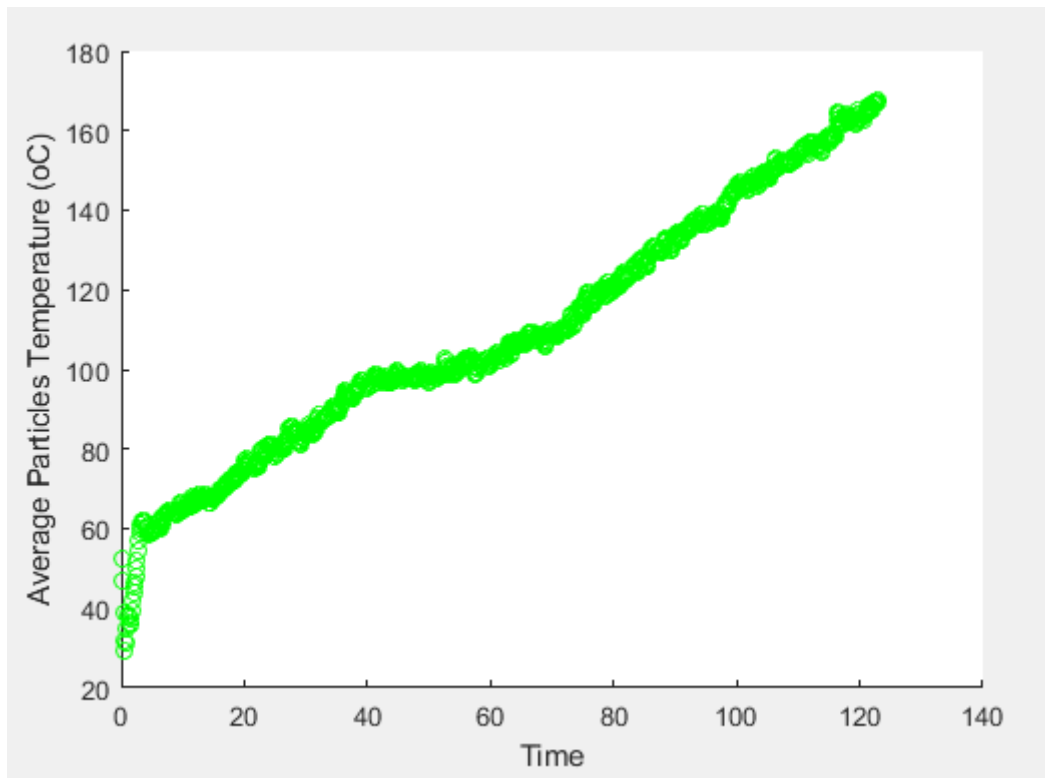
Στην Εικόνα 4.26 παρατηρούμε το διάγραμμα της σωρευτικής θερμοκρασίας των ατόμων. Στο συγκεκριμένο είναι ξεκάθαρο πως απόρροια της αύξησης των δυνάμεων είναι και η αύξηση της θερμοκρασίας. Η θερμοκρασία φτάνει ως και τους $173.43^{\circ}C$ ενώ η μέση τιμή βρίσκεται στους $109.22^{\circ}C$, τιμές που πλησιάζουν πολύ την Προσομοίωση 1a και απέχουν αρκετά των Προσομοιώσεων 1b και 1c.



Εικόνα 4.24: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.25: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.26 : Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

4.3 Δεύτερη Σειρά Προσομοιώσεων

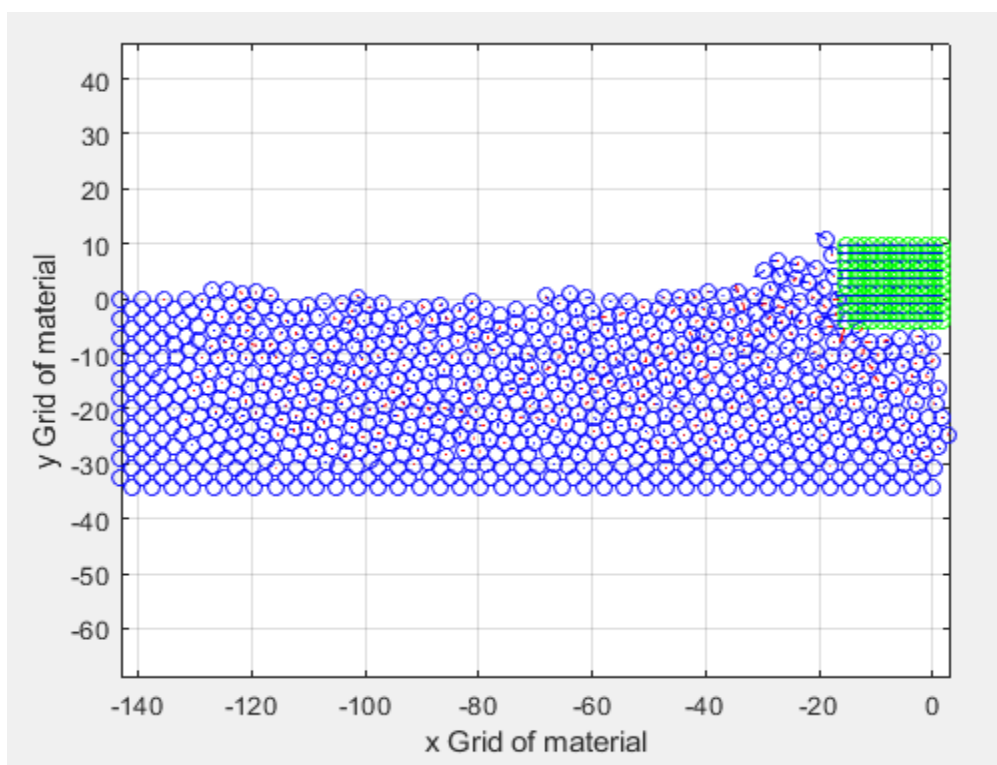
Στη δεύτερη σειρά προσομοιώσεων που πραγματοποιήσαμε, παρουσιάζεται λείανση τεμαχίου χαλκού με κόκκο διαμαντιού ορθογωνικής γεωμετρίας, που αποτελεί την απλούστερη μορφή γεωμετρίας κόκκου λείανσης. Οι προσομοιώσεις έλαβαν χώρα για δυο διαφορετικά βάθη λείανσης, ενώ όπως και στην πρώτη σειρά δοκιμάσαμε 4 διαφορετικές τιμές του D. Στόχος εδώ είναι να δούμε αν υπάρχει παρόμοια σχέση στις μετρήσεις των μεγεθών που μελετήσαμε στην πρώτη σειρά προσομοιώσεων σε αναλογία με τις διάφορες τιμές D. Η συγκεκριμένη γεωμετρία κόκκου δεν είχε μελετηθεί στη δημοσίευση που εξετάσαμε οπότε έχει μεγάλο ενδιαφέρον να δούμε αν η ίδια θεωρία εφαρμόζεται και εδώ. Ξεκινάμε λοιπόν με την ιδανική περίπτωση και στη συνέχεια θα προχωρήσουμε στις ανάλογες συγκρίσεις με βάση τα αποτελέσματα και τα διαγράμματα που θα προκύψουν από τον κώδικά μας. Η γωνία αποβλίττου διατηρείται στις 0° σε όλη τη σειρά προσομοιώσεων.

4.3.1 Προσομοίωση 2a

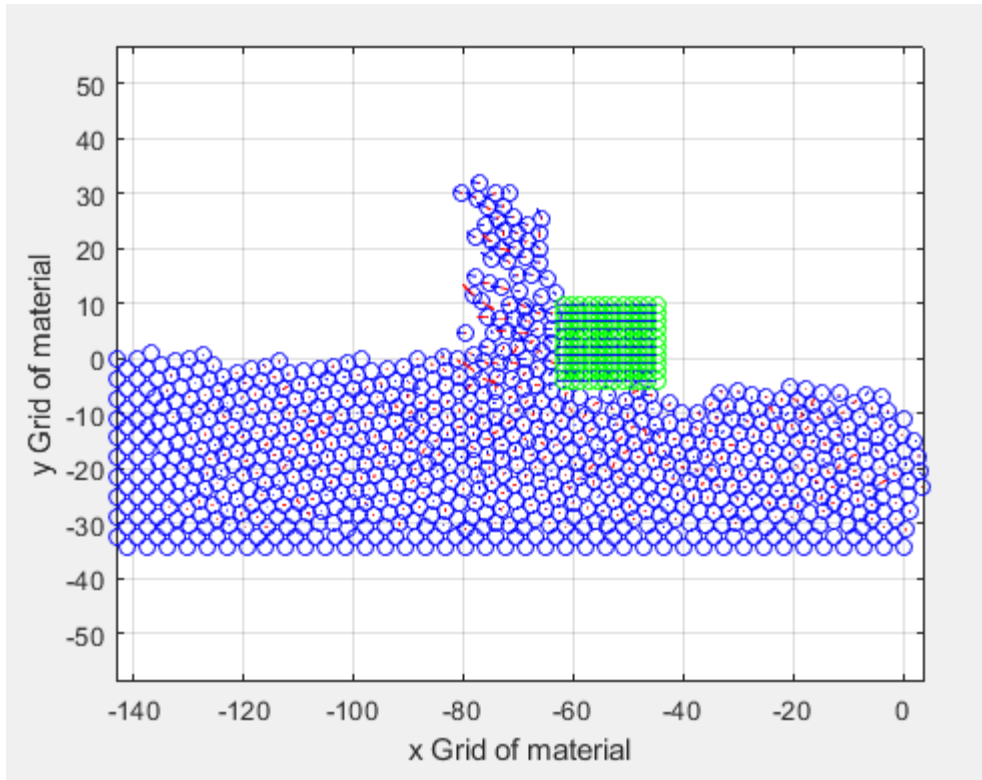
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 2a είναι:

Προσομοίωση 2a	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0°
COHESION ENERGY D	0.087
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	4 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	1230 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

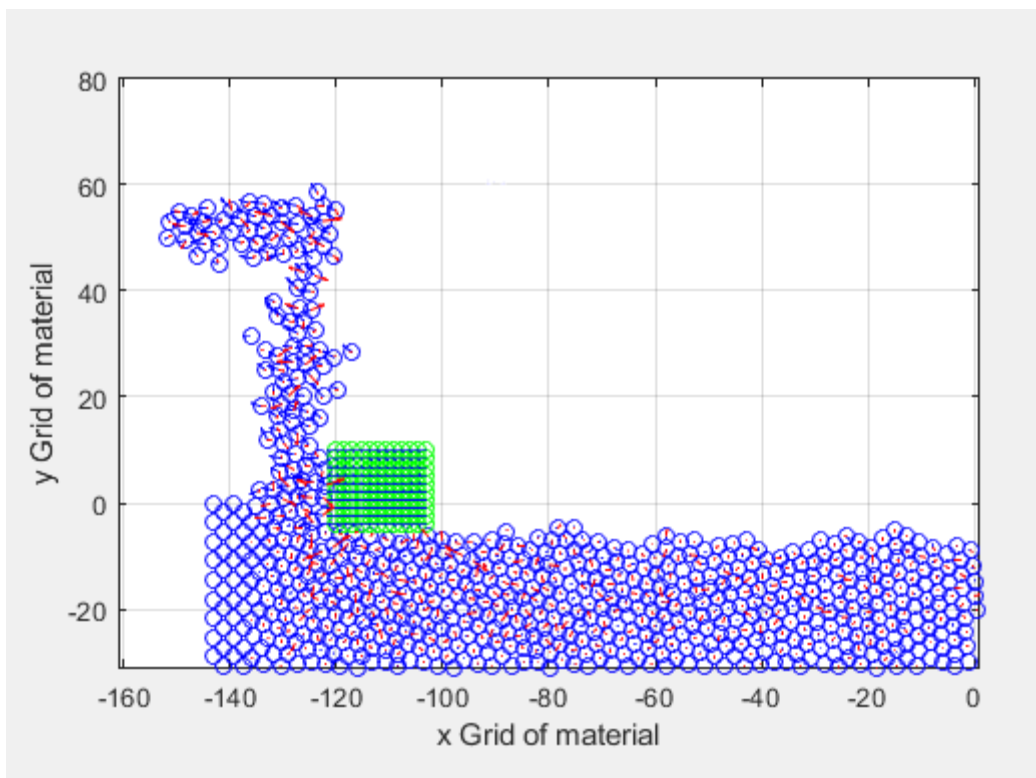
Πίνακας 4.5: Παράμετροι προσομοίωσης 2a



Εικόνα 4.27: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης κατά την έναρξη της κατεργασίας

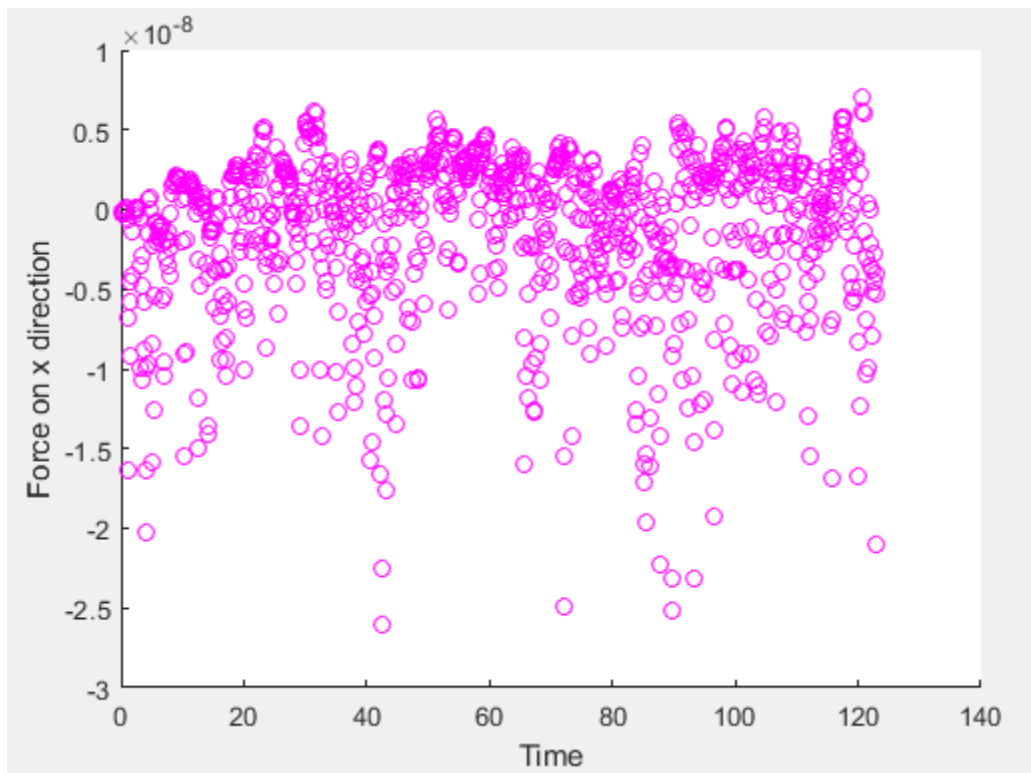


Εικόνα 4.28: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας

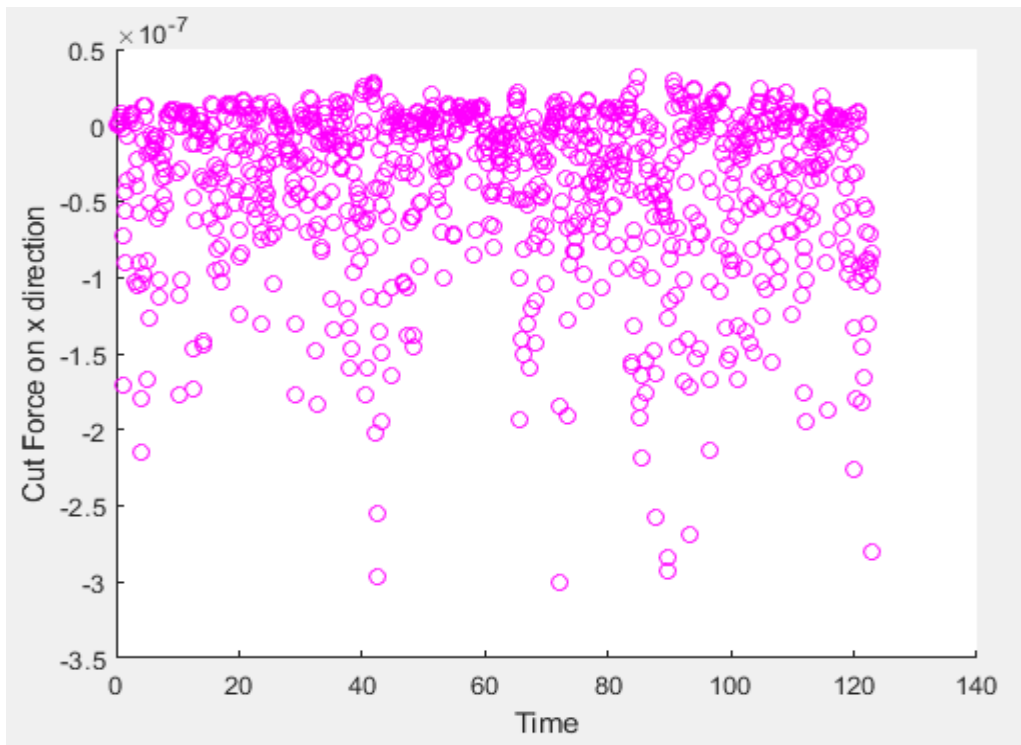


Εικόνα 4.29: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

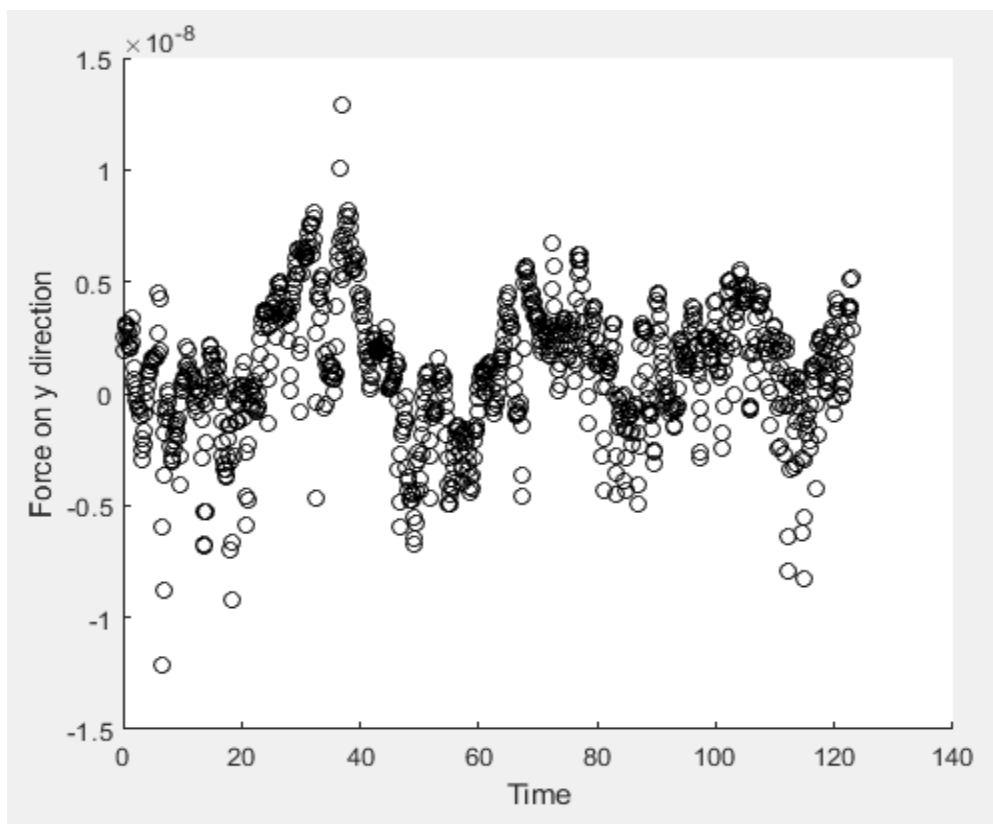
Από τις παραπάνω εικόνες (4.27-4.29) των φάσεων της κατεργασίας, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι το υλικό κατεργασίας παραμορφώνεται μπροστά από τον λειαντικό κόκκο, πράγμα το οποίο συναντάται γενικά και στις συμβατικές κατεργασίες λείανσης. Παρατηρούμε ότι η κατεργασία υπό αυτές τις συνθήκες θυμίζει πολύ νανοκοπή. Καθώς εξελίσσεται η προσομοίωση, το απόβλιττο μετακινείται προς τα επάνω, παράλληλα με την επιφάνεια του εργαλείου κοπής και με τον τρόπο αυτό διαμορφώνεται και η κατεργασμένη επιφάνεια. Η ομοιότητα αυτή οφείλεται κυρίως στη μηδενική γωνία αποβλίττου 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 τη σειράς των 12 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.



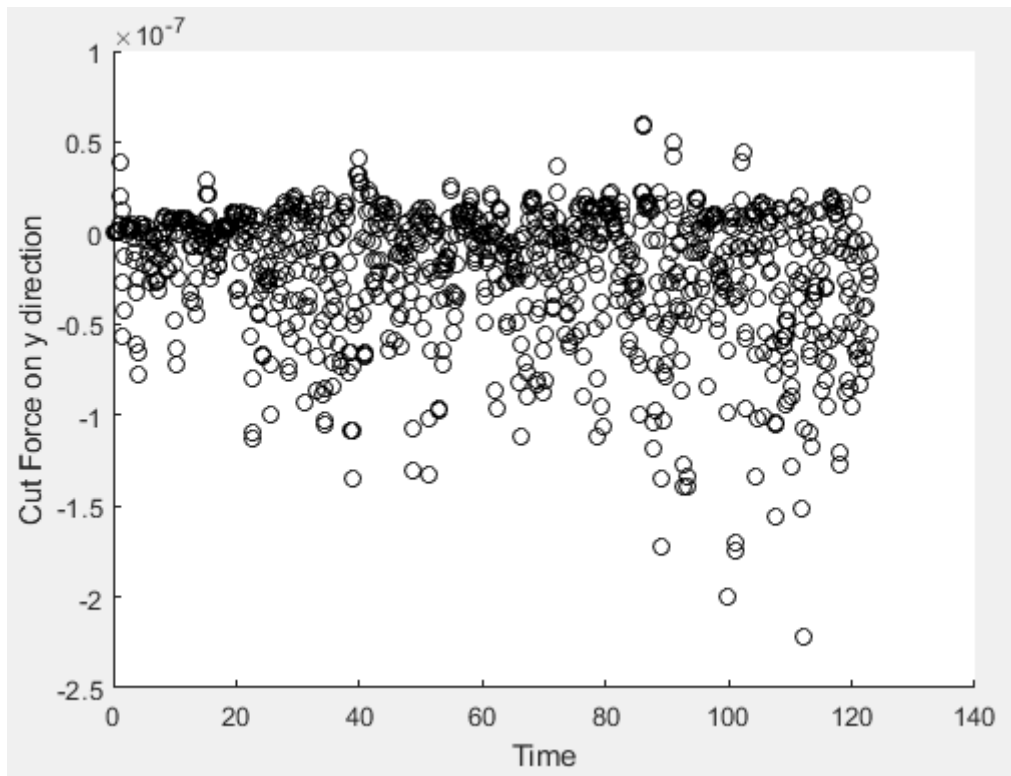
Εικόνα 4.30: Μεταβολή της δύναμης στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.31: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



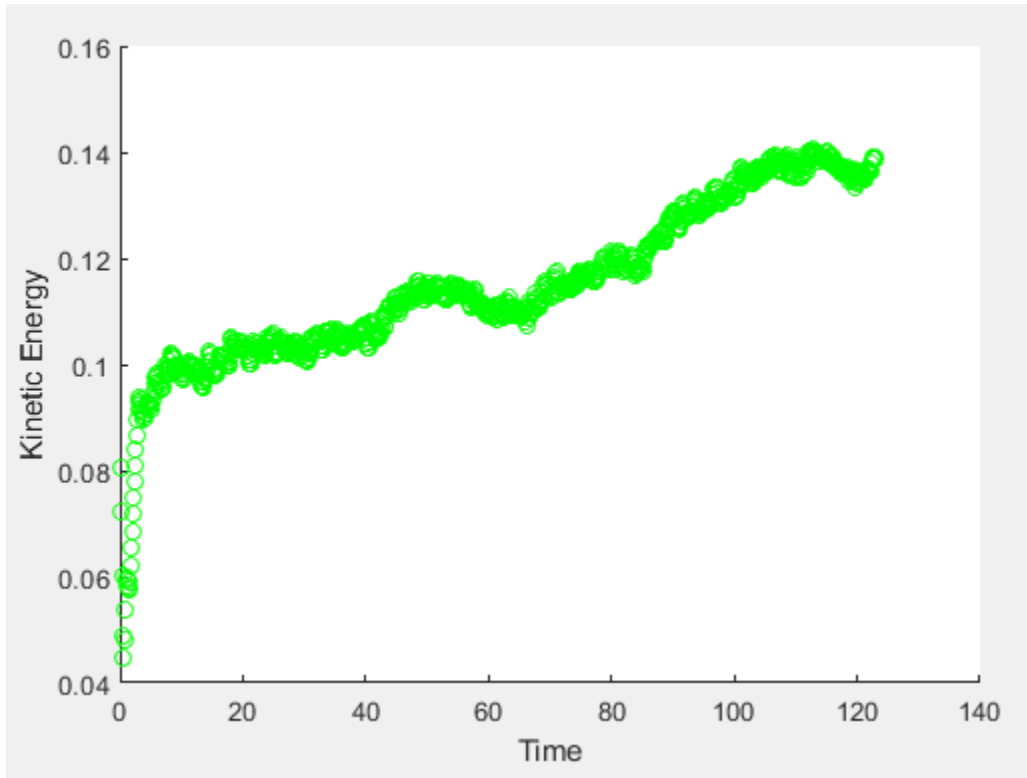
Εικόνα 4.32: Μεταβολή της δύναμης στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου



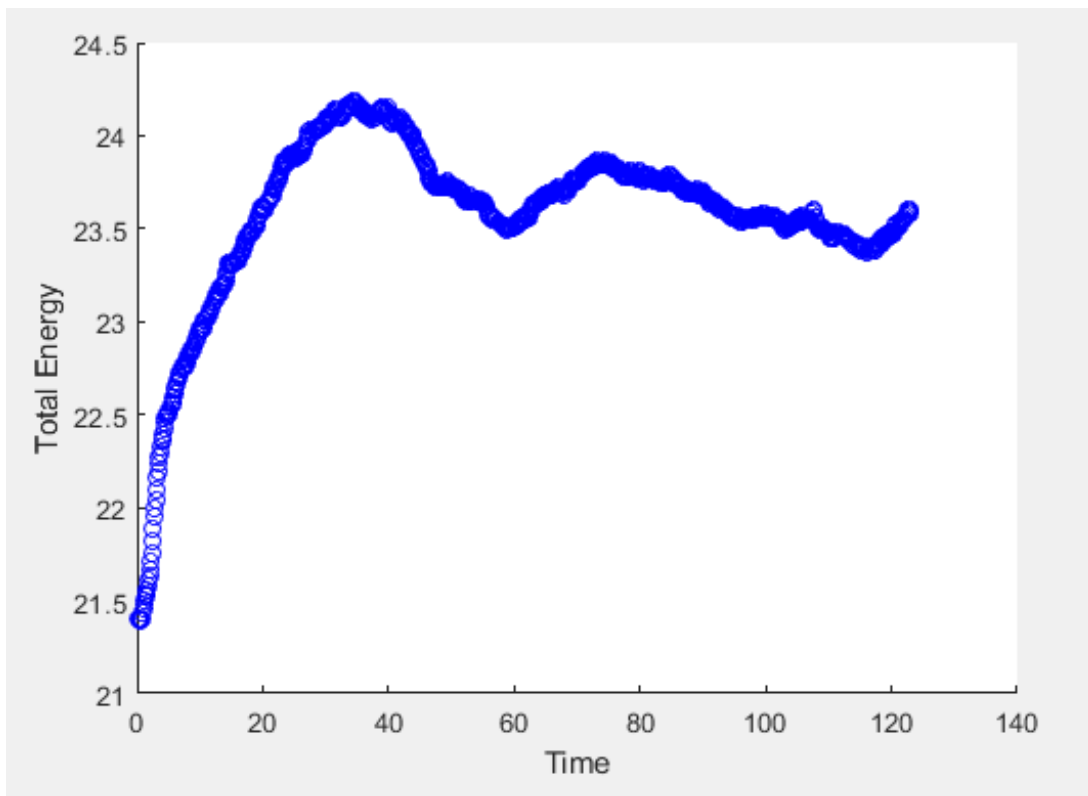
Εικόνα 4.33: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

Από τα διαγράμματα των δυνάμεων κατά τους άξονες x και y (Εικόνες 4.30-4.33), 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 μέσες τιμές κατά x και y, είναι $CF_{x\mu}=22.34$ nN και $CF_{y\mu}=8.09$ nN, αντιστοίχως.

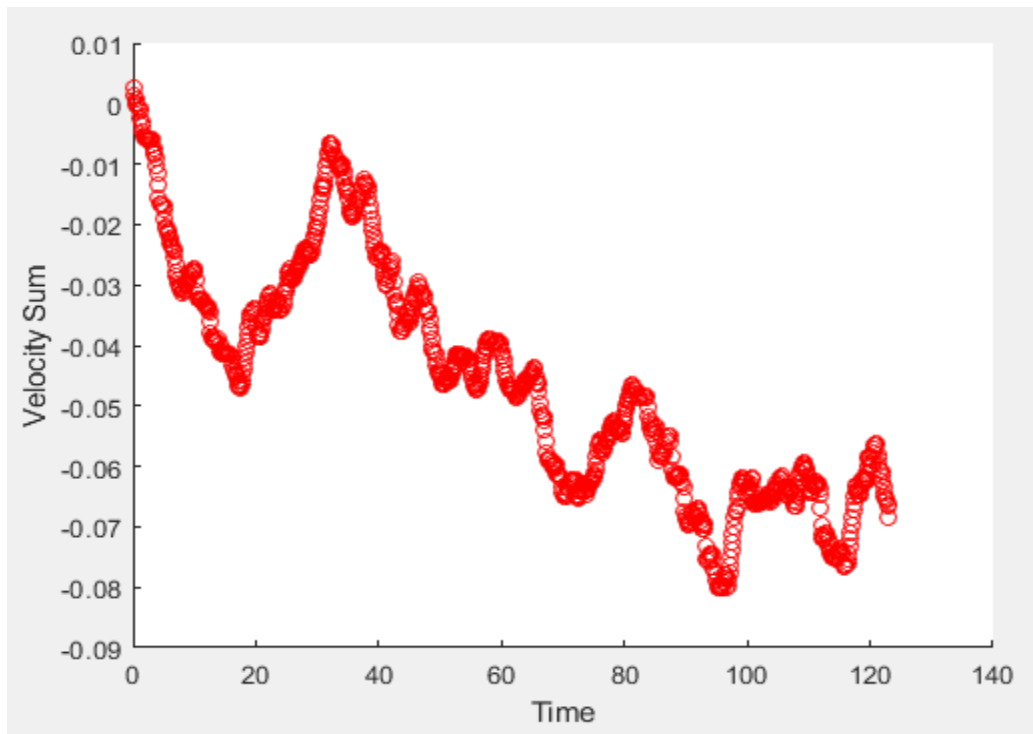
Στις Εικόνες 4.34 και 4.35 μπορούμε να παρατηρήσουμε τη μεταβολή της κινητικής και της ολικής ενέργειας του συστήματος συναρτήσει του χρόνου. Παρατηρούμε ότι τόσο η συνολική όσο και η κινητική ενέργεια του συστήματος αυξάνονται κατά πολύ στην αρχή της διαδικασίας κοπής, λογικό βέβαια από τη στιγμή που τα άτομα του υλικού από την ακινησία στην οποία βρίσκονταν έρχονται σε επαφή με το εργαλείο. Γενικά, η εξέλιξη των διαγραμμάτων πραγματοποιείται με ομαλό τρόπο, σε αντίθεση με τις δυνάμεις κοπής που χαρακτηρίζονται από έντονες διακυμάνσεις στις τιμές τους. Από αυτά τα διαγράμματα μπορούμε να βγάλουμε κάποια συμπεράσματα και για τη δυναμική ενέργεια στην προσομοίωση. Διαπιστώνουμε λοιπόν, ότι η δυναμική ενέργεια αποτελεί γενικά ένα αρκετά μεγάλο ποσοστό της συνολικής ενέργειας του συστήματος. Στην Εικόνα 4.36, έχουμε το διάγραμμα του αθροίσματος των ταχυτήτων. Εδώ παρατηρούμε μία πιο ομαλή διακύμανση, σε σχέση με τις διακυμάνσεις των δυνάμεων, που δείχνει ότι τείνει να μειώνεται και να συγκλίνει σε ένα σημαντικά μικρότερο εύρος τιμών, όσο εξελίσσεται η διεργασία της λείανσης.



Εικόνα 4.34: Μεταβολή της κινητικής ενέργειας συναρτήσει του χρόνου



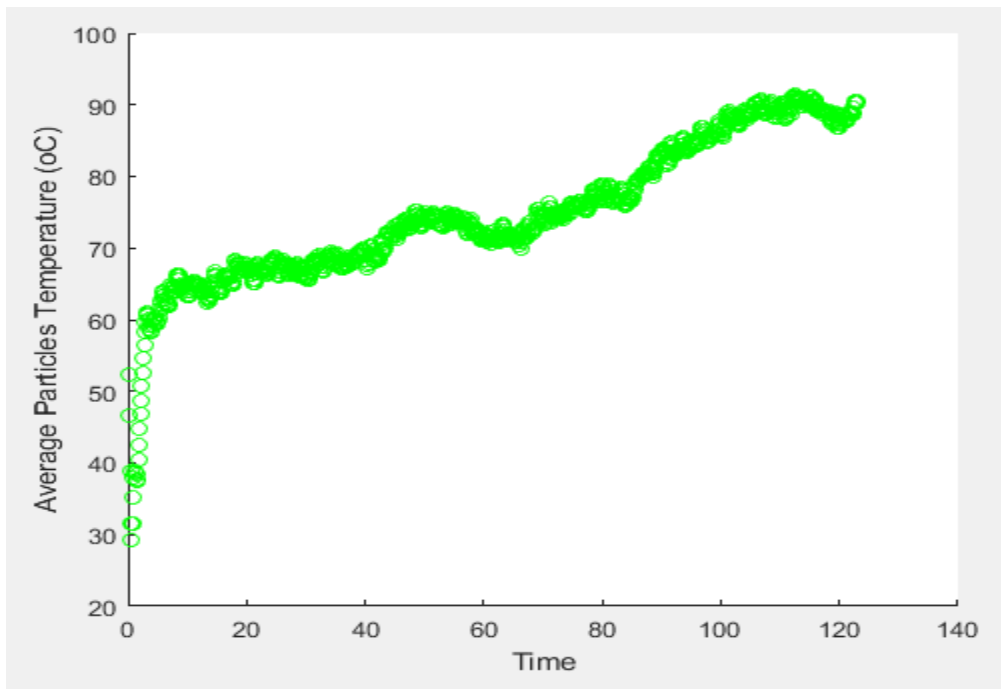
Εικόνα 4.35: Μεταβολή της ολικής ενέργειας συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.36: Μεταβολή του αθροίσματος ταχυτήτων συναρτήσει του χρόνου

Από το σύνολο των προσομοιώσεων που πραγματοποιήσαμε, παρατηρήθηκε, όπως άλλωστε και με τις δυνάμεις κοπής, ότι η μορφή των παραπάνω διαγραμμάτων, πάντα ποιοτικά, παραμένει η ίδια, ανεξαρτήτως των συνθηκών κοπής που επιλέξαμε για τις προσομοιώσεις αυτές. Βέβαια, κάτι τέτοιο εννοείται ότι δεν συμβαίνει και με τις τιμές των μεγεθών αυτών. Για το λόγο αυτό, στα παρακάτω, δε θα παρουσιάζονται σε κάθε περίπτωση τα αντίστοιχα διαγράμματα, καθώς ουσιαστικά δε προσφέρουν κάποια χρήσιμη πληροφορία. Στο εξής λοιπόν, θα παρουσιάζονται μόνο οι προκύπτουσες δυνάμεις κοπής και η εξάρτησή τους από τις εκάστοτε συνθήκες κοπής, καθώς γενικά στις κατεργασίες αποβολής υλικού, οι δυνάμεις κοπής είναι αυτές για τις οποίες ενδιαφερόμαστε. Επιπλέον, η μεταβολή της συνολικής ενέργειας του συστήματος ακολουθεί γενικά τον τρόπο μεταβολής των δυνάμεων κοπής συναρτήσει των συνθηκών κοπής, επομένως θεωρούμε ότι η παρουσίαση των τιμών της ενέργειας για κάθε περίπτωση προσομοίωσης δεν μας προσφέρει κάποια επιπλέον κρίσιμη πληροφορία για την κατανόηση της εξέλιξης του φαινομένου στηνανοκλίμακα.

Στο διάγραμμα της Εικόνας 4.37 απεικονίζεται η σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού. Ο υπολογισμός των θερμοκρασιών των ατόμων γίνεται μέσω της συνάρτησης *PropAccum* του κώδικα. Η συνάρτηση αυτή για να δώσει την τρέχουσα τιμή του μεγέθους, βρίσκει σε κάθε χρονικό βήμα το μέσο όρο όλων των προηγούμενων τιμών, υπολογίζει τη διασπορά τους και στη συνέχεια για να βρει την τρέχουσα τιμή αφαιρεί από την τιμή της διασποράς την τιμή του τελευταίου βήματος. Άρα, η συνάρτηση αυτή μας δείχνει τη συσσώρευση θερμοκρασίας που προκύπτει ως προς το προηγούμενο χρονικό βήμα.



Εικόνα 4.37: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

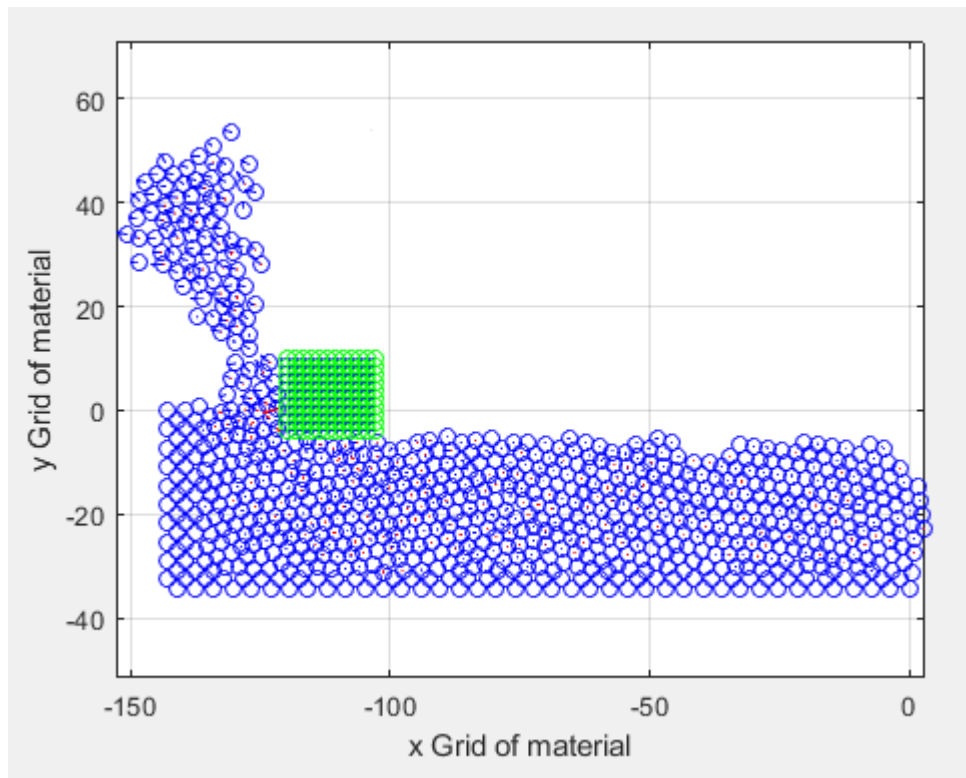
Παρατηρούμε ότι η σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κυμαίνεται σε ένα εύρος από 60 μέχρι 94^oC, με μικρές διακυμάνσεις από αρκετά νωρίς, για το μεγαλύτερο μέρος της προσομοίωσης.

4.3.2 Προσομοίωση 2b

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 2b είναι:

Προσομοίωση 2b	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0 ^o
COHESION ENERGY D	0.00087
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	4 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	1230 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

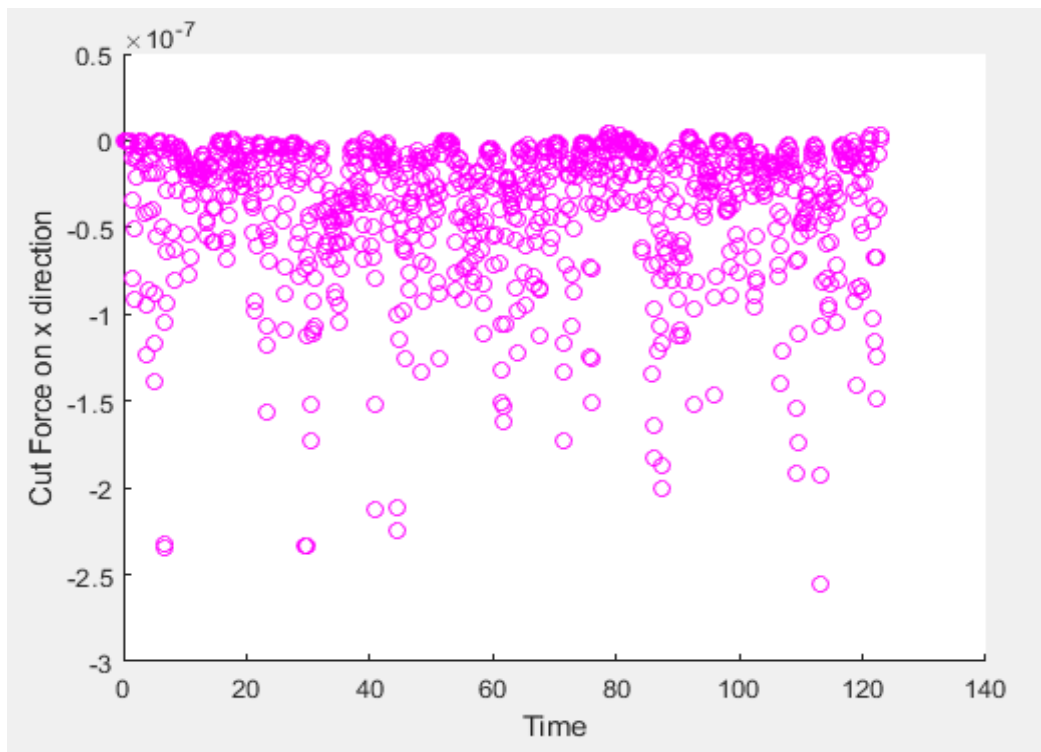
Πίνακας 4.6: Παράμετροι προσομοίωσης 2b



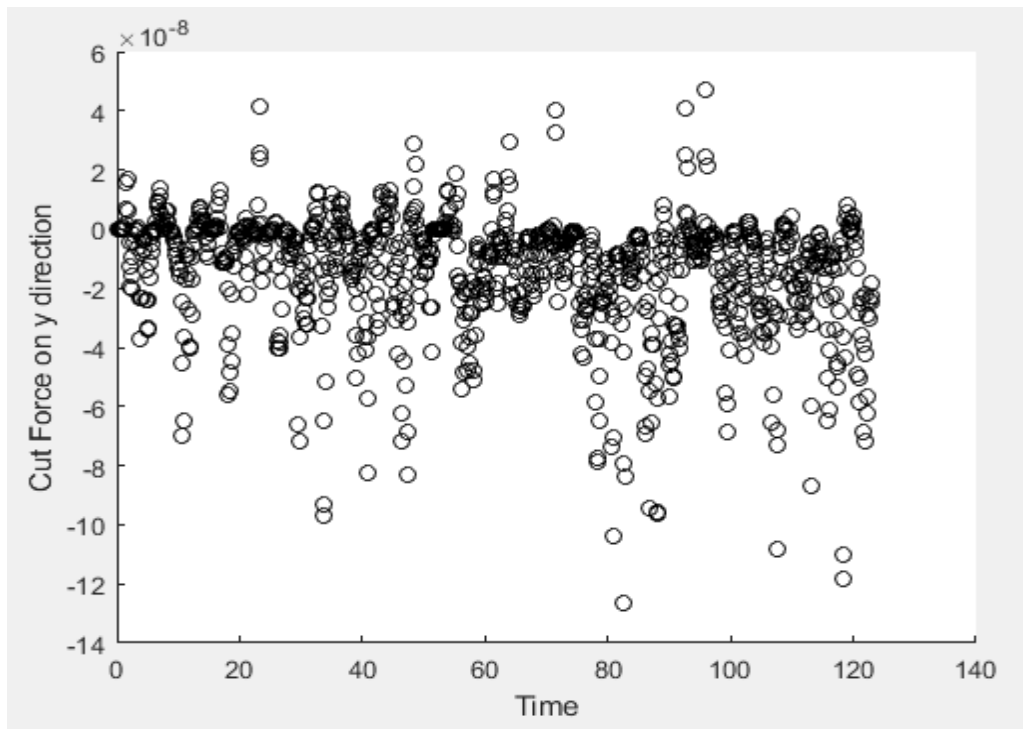
Εικόνα 4.38: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Όπως είναι φανερό στο σχήμα 4.38, παρόμοια με το αποτέλεσμα της πρώτης σειράς προσομοιώσεων που είδαμε νωρίτερα, ο σχηματισμός του απόβλιττου είναι πολύ πιο συμπαγής για $D/100$. Αυξάνοντας κι εδώ την φθορά του εργαλείου βλέπουμε χαρακτηριστικές διαφορές στο σχήμα του αποβλίττου, που είναι πιο παχύ και δεν φτάνει στο ίδιο ύψος. Οι δυνάμεις κοπής που ασκούνται στην επιφάνεια του υλικού είναι μικρότερες αφού μέρος της κοπτικής ικανότητας του εργαλείου χάνεται στη φθορά του υλικού του. Αυτό επιτρέπει στα άτομα του χαλκού να παραμείνουν κοντά, καθώς δεν υπερνικούνται στον ίδιο βαθμό οι συνεκτικές δυνάμεις μεταξύ τους.

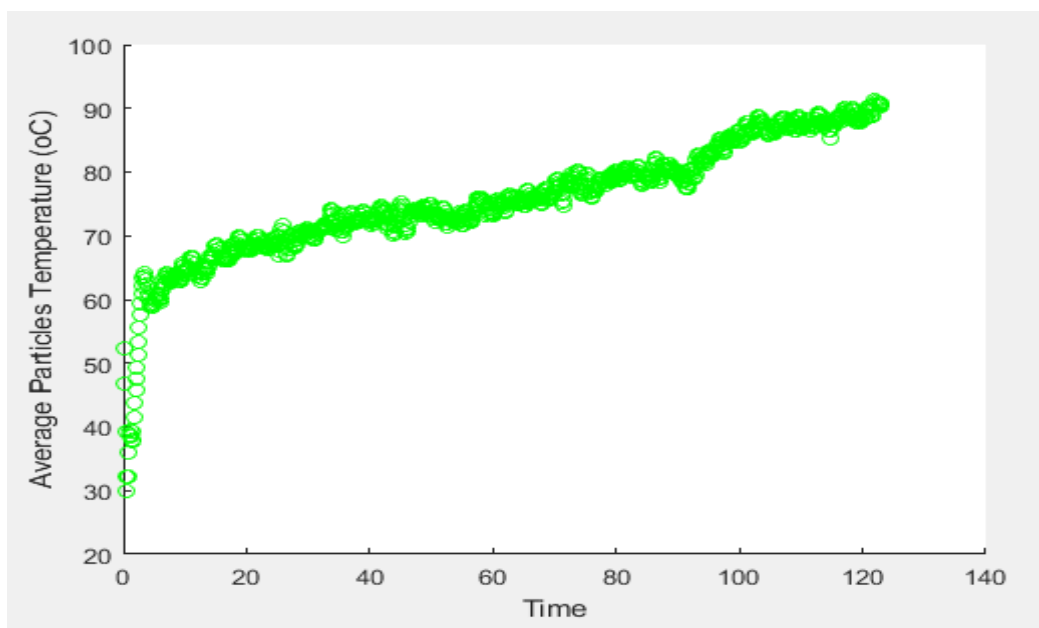
Αυτό επιβεβαιώνεται κι από τα διαγράμματα των δυνάμεων κοπής στους 2 άξονες x και y που ακολουθούν (Εικόνα 4.39-4.40). Μάλιστα βλέπουμε στην Εικόνα 4.39 σε σύγκριση με την αντίστοιχη της Προσομοίωσης 2a (Εικόνα 4.31) πως η διασπορά των μετρήσεων είναι πολύ μικρότερη. Εδώ, λόγω της φθοράς το εργαλείου η κοπτική του ικανότητα ελαττώνεται όσο προχωράει η διαδικασία της κατεργασίας, αλλά παράλληλα συμπιέζεται το χάλκινο υλικό προς τα τοιχώματα του τεμαχίου, διατηρώντας έτσι μια ισορροπία στις μετρήσεις. Νωρίτερα (Εικόνα 4.31) κάτι τέτοιο δε συμβαίνει, οπότε οι συμπιέση των ατόμων του υλικού σε συνδυασμό με την χωρίς απώλειες δύναμη κοπής του κόκκου διαμαντιού προκαλούν μεγαλύτερες διακυμάνσεις στις τιμές των δυνάμεων που καταγράφονται. Όσον αφορά σε νούμερα, σε αυτό το παράδειγμα πλησιάσαμε περισσότερο το αποτέλεσμα της έρευνας των Maekawa και Itoh, με την κοπτική δύναμη στον άξονα x να μειώνεται κατά 31.9% και στον άξονα y κατά 22.5%. Συγκεκριμένα, οι μέσες τιμές κατά x και y , είναι $CF_{xμ}=15.21$ nN και $CF_{yμ}=6.27$ nN, αντιστοίχως.



Εικόνα 4.39: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.40: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.41: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

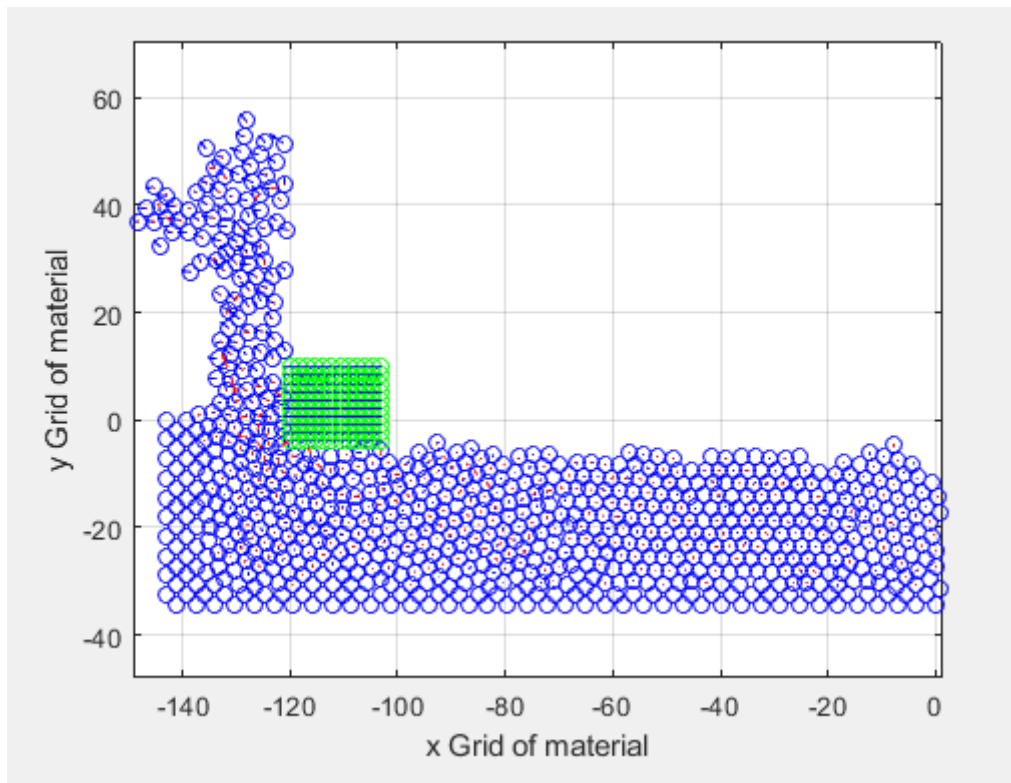
Ως προς τη σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού, αυτή κυμαίνεται σε ένα εύρος από 60 μέχρι 91^oC, με ομαλή αύξηση καθ' όλη τη διάρκεια της κατεργασίας. Εδώ δεν βλέπουμε σημαντικές διαφορές ως προς τη θερμοκρασία ίσως διότι το απόβλιττο παραμένοντας συμπαγές σε σχήμα, προκαλεί τριβές μεταξύ των ατόμων του υλικού του, αυξάνοντας τη θερμοκρασία και μακριά από την επιφάνεια κατεργασίας.

4.3.3 Προσομοίωση 2c

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 2c είναι:

Προσομοίωση 2c	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0 ^o
COHESION ENERGY D	0.00174
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	4 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	1230 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

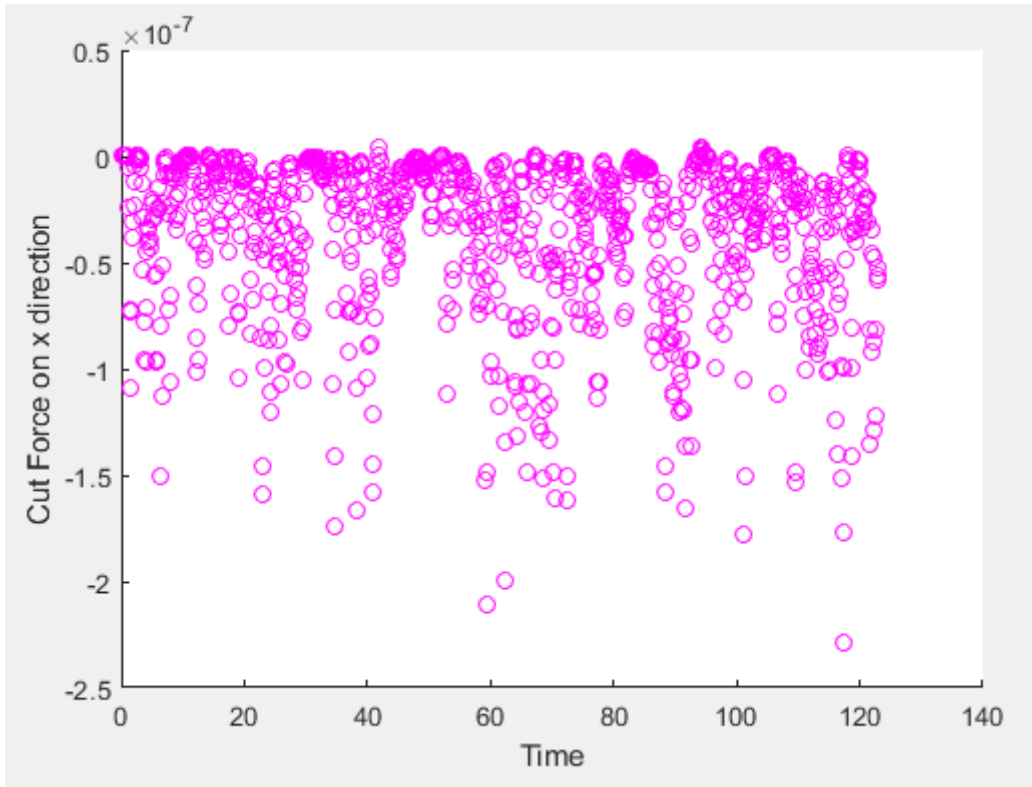
Πίνακας 4.7: Παράμετροι προσομοίωσης 2c



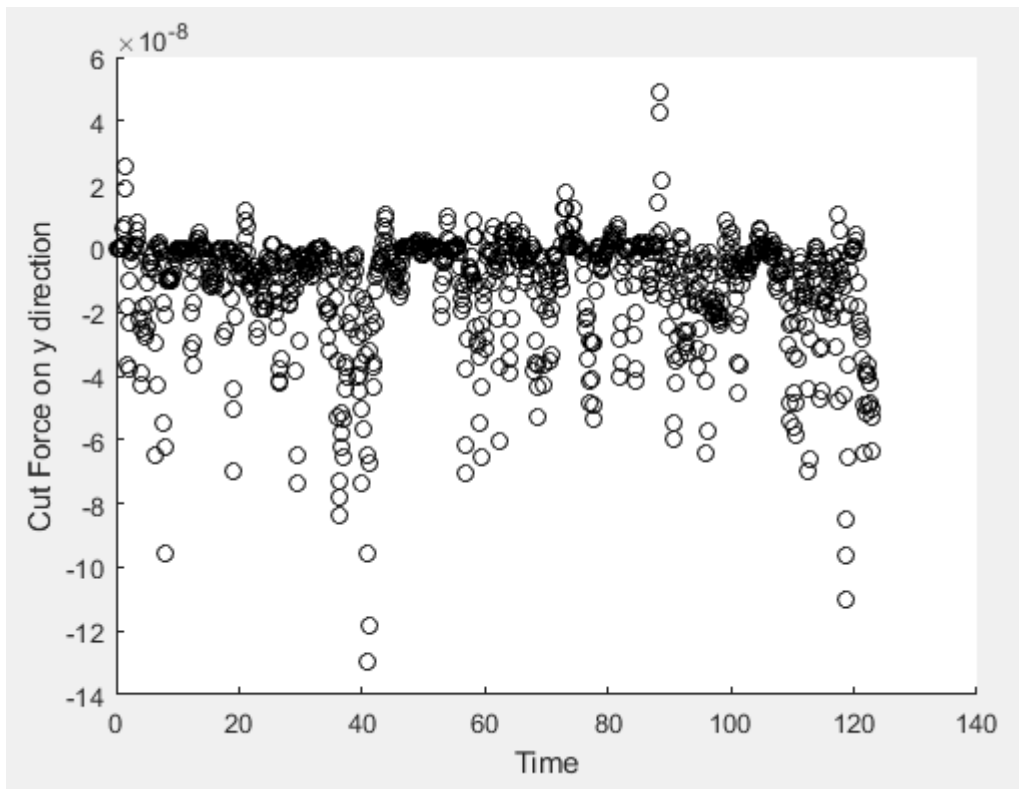
Εικόνα 4.42: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Ομοίως με την πρώτη σειρά Προσομοιώσεων, συνεχίζουμε τη διαδικασία με D/50 και στη συνέχεια D/20 ώστε να ελέγξουμε κι εδώ τις ενδιαμέσες περιπτώσεις φθοράς. Στο παραπάνω σχήμα (4.42) βλέπουμε την εικόνα του αποβλίττου στη συγκεκριμένη περίπτωση. Πάλι παρατηρούμε ότι το μήκος είναι μικρότερο συγκριτικά με την αρχική περίπτωση και το απόβλιττο πιο συμπαγές. Αυτό σημαίνει ότι ξανά η μείωση της ενέργειας συνοχής είναι αρκετά σημαντική για να προκαλεί διαφορά στη δύναμη με την οποία το εργαλείο μας κόβει το αντικείμενο. Αξίζει επίσης να προσέξουμε κι εδώ το φαινόμενο bottle-neck, μιας και το απόβλιττο βρίσκει εμπόδιο στα πακτωμένα άτομα που έχουμε θέσει στο τεμάχιό μας στην αριστερή πλευρά του. Το εργαλείο σπρώχνει το απόβλιττο προς τα αριστερά ενώ ταυτόχρονα τα τοιχώματα το εμποδίζουν να κινηθεί προς τα εκεί, κι ως αποτέλεσμα δημιουργείται ο παραπάνω λαιμός. Η φθορά του εργαλείου είναι μειωμένη συγκριτικά με την περίπτωση 2b και επομένως η δύναμη κοπής που ασκεί το εργαλείο στο υλικό είναι αρκετή για να του δώσει την απαιτούμενη ώθηση για την παραπάνω απεικόνιση.

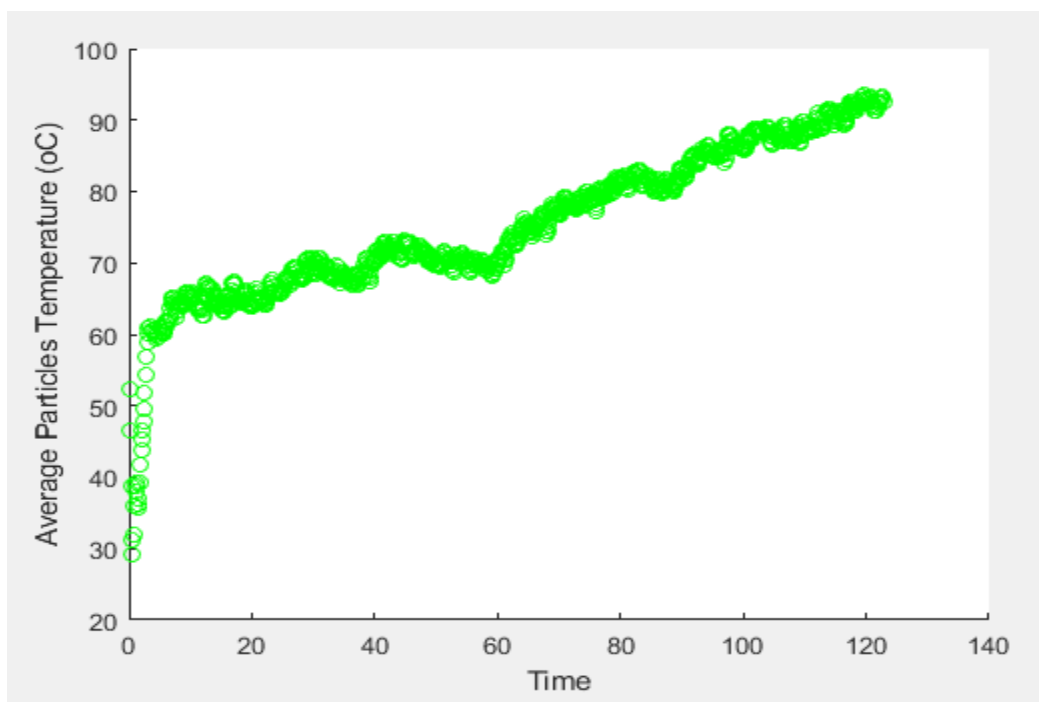
Από τα παρακάτω διαγράμματα (Εικόνα 4.43-4.44) των δυνάμεων κοπής αποδεικνύεται η παρατήρηση που μόλις κάναμε. Σύμφωνα με τις τιμές που προκύπτουν από τον αλγόριθμό μας, για ενέργεια συνοχής D/50 έχουμε μείωση 14.2% στην δύναμη κοπής κατά τον άξονα x και μείωση 12.3% στη δύναμη κοπής κατά τον άξονα y. Επομένως τα αποτελέσματα που προκύπτουν για τις μέσες τιμές κατά τους άξονες x και y είναι $CF_{x\mu} = 19.17\text{nN}$ και $CF_{y\mu} = 7.09\text{nN}$.



Εικόνα 4.43: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.44: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.45: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

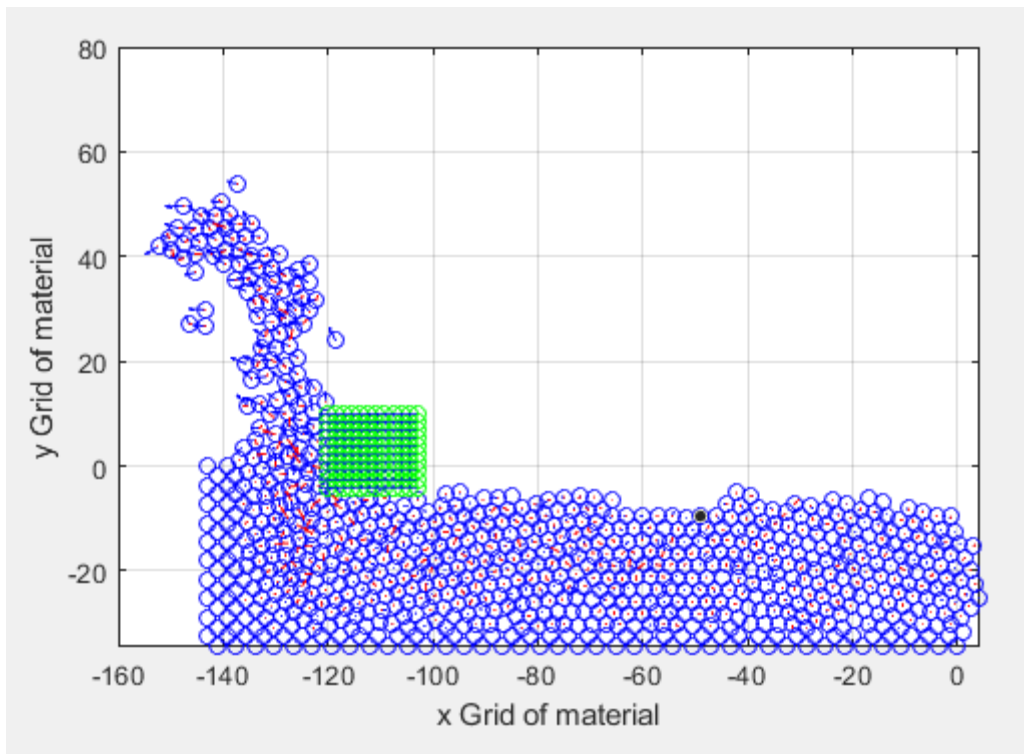
Ως προς τη σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού, αυτή κυμαίνεται σε ένα εύρος από 60 μέχρι 92.2⁰C, με ομαλή αύξηση καθ' όλη τη διάρκεια της κατεργασίας.

4.3.4 Προσομοίωση 2d

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 2d είναι:

Προσομοίωση 2d	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0 ⁰
COHESION ENERGY D	0.00435
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	4 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	1230 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

Πίνακας 4.8: Παράμετροι προσομοίωσης 2d

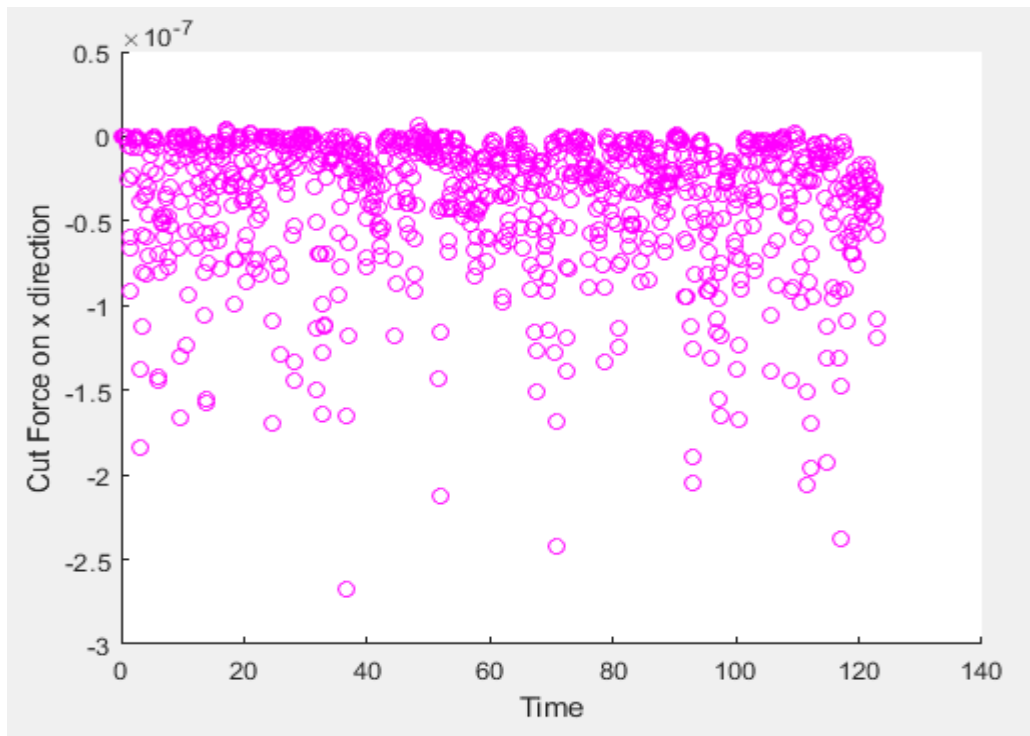


Εικόνα 4.46: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

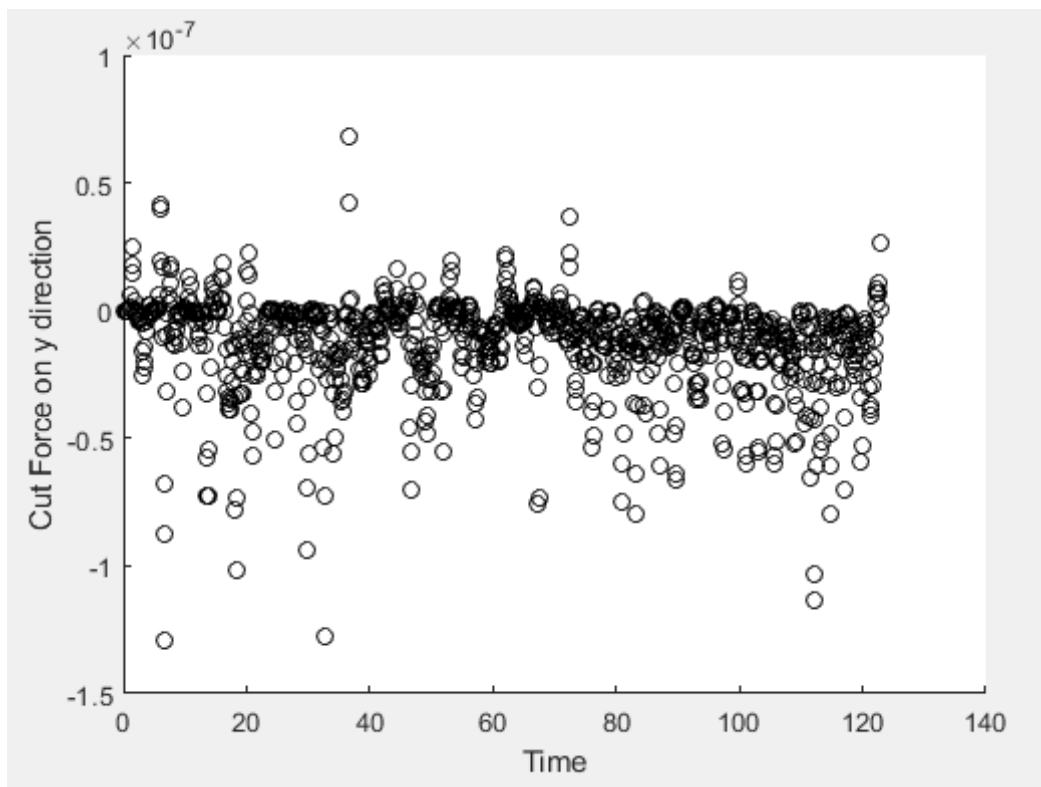
Για $D/20$ βλέπουμε ότι η φθορά του εργαλείου δείχνει αισθητά μικρότερη, αφού το απόβλιττο που έχει δημιουργηθεί είναι λεπτό, ενώ διακρίνουμε τα μικρά μπλε βέλη στα άτομα που το αποτελούν να είναι αισθητά έντονα. Όπως είπαμε και νωρίτερα, τα μπλε βέλη απεικονίζουν το διάνυσμα της ταχύτητας του κάθε ατόμου, οπότε το εργαλείο είναι σε θέση να ασκήσει τέτοιες δυνάμεις κατά την κοπή του υλικού ώστε να δώσει μεγάλη ώθηση στα άτομα του αποβλίττου. Δεύτερο στοιχείο που επιβεβαιώνει αυτή την ανάλυση είναι τα θραύσματα που παρατηρούμε ότι δημιουργούνται. Και αυτά είναι απόρροια των μεγαλύτερων δυνάμεων που έχουν ασκηθεί στο υλικό, άρα περιμένουμε τα αποτελέσματά μας να αποτυπώσουν με νούμερα τις παραπάνω διαφορές σε σχέση με τις Προσομοιώσεις 2b και 2c.

Πράγματι, για την περίπτωση με ενέργεια συνοχής 20 φορές μικρότερη της αρχικής, οι μετρήσεις που προκύπτουν δηλώνουν μια ελαφρά μείωση στις δυνάμεις κοπής κατά τους δυο άξονες, με 4.5% ($CF_{x\mu} = 21.33\text{nN}$) και 3.4% ($CF_{y\mu} = 7.81\text{nN}$) για τους x και y αντίστοιχα. Κατανοούμε λοιπόν ότι αντίθετα με την προηγούμενη γεωμετρία της πρώτης σειράς προσομοιώσεων, εδώ για ορθογωνικό σχήμα κόκκου διαμαντιού και για βάθος κοπής 4\AA , χρειάζονται μεγαλύτερες αποτυπώσεις φθοράς του εργαλείου προκειμένου να δούμε μεγάλες διαφοροποιήσεις στις μετρήσεις που λαμβάνουμε. Η ποσοστιαία μείωση των δυνάμεων κοπής μειώνεται πολύ πιο γρήγορα όσο μειώνουμε τη φθορά του εργαλείου, πλησιάζοντας την ιδανική περίπτωση.

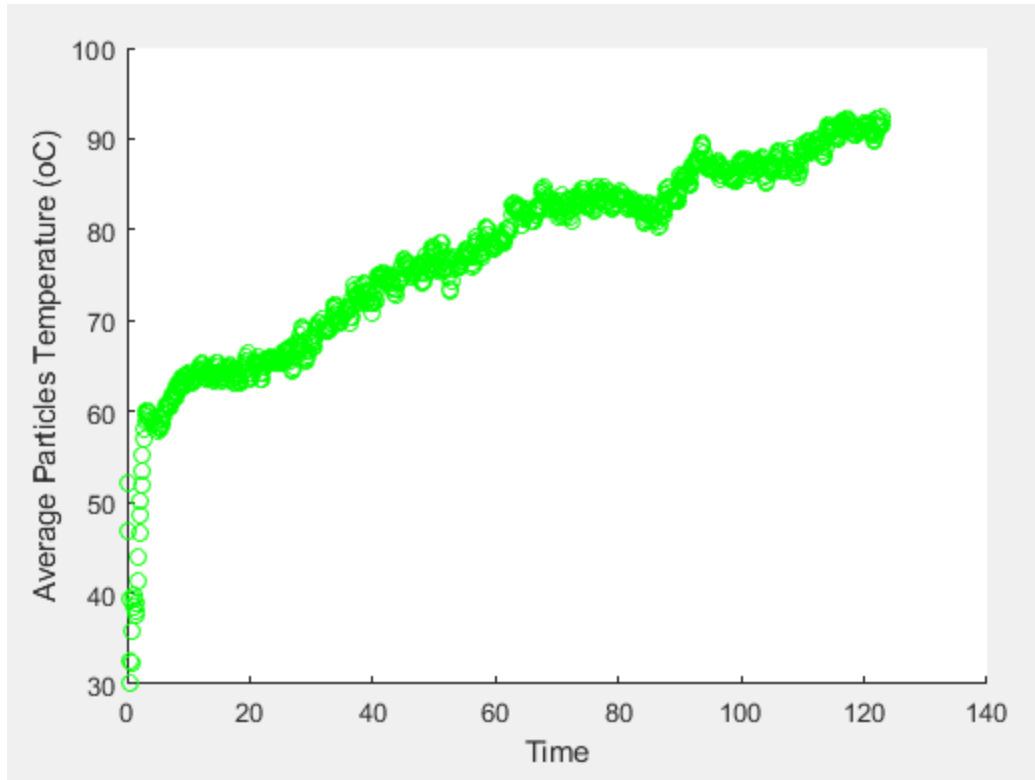
Στην ίδια γραμμή με τα παραπάνω συμπεράσματα, η θερμοκρασία (Εικόνα 4.49) φτάνει τους 93.9°C , πρακτικά ίδια με την αρχική περίπτωση (2a) που εξετάσαμε.



Εικόνα 4.47: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.48: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου



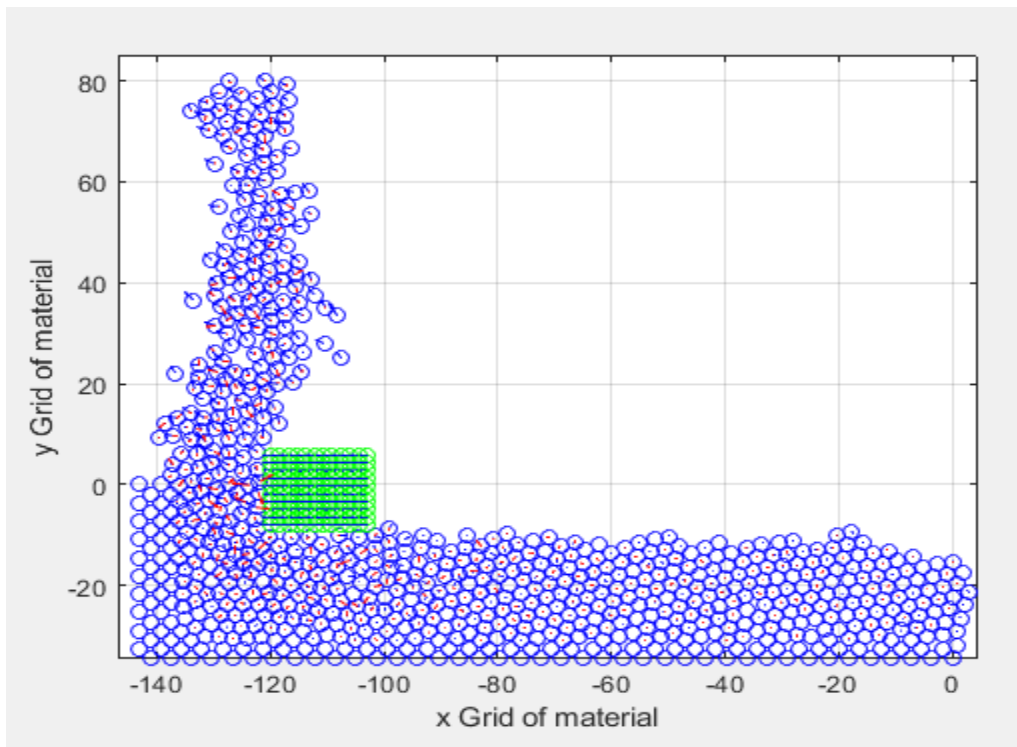
Εικόνα 4.49: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

4.3.5 Προσομοίωση 2e

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 2e είναι:

Προσομοίωση 2e	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0°
COHESION ENERGY D	0.087
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	8 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	1230 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

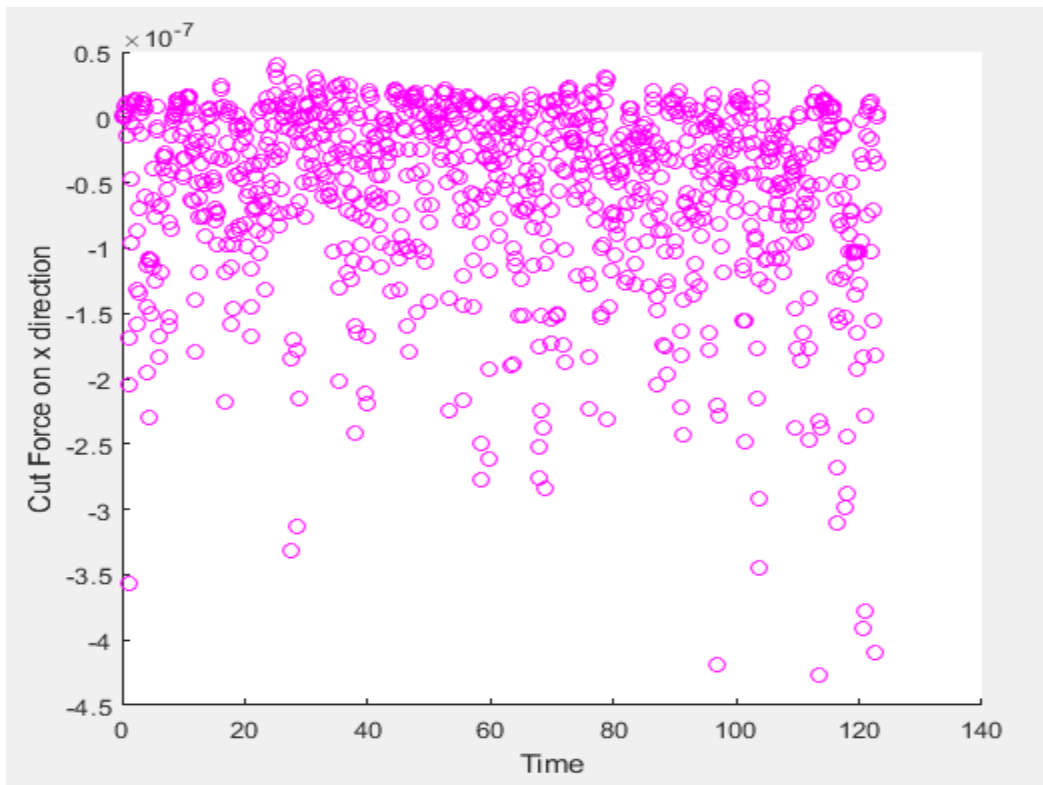
Πίνακας 4.9: Παράμετροι προσομοίωσης 2e



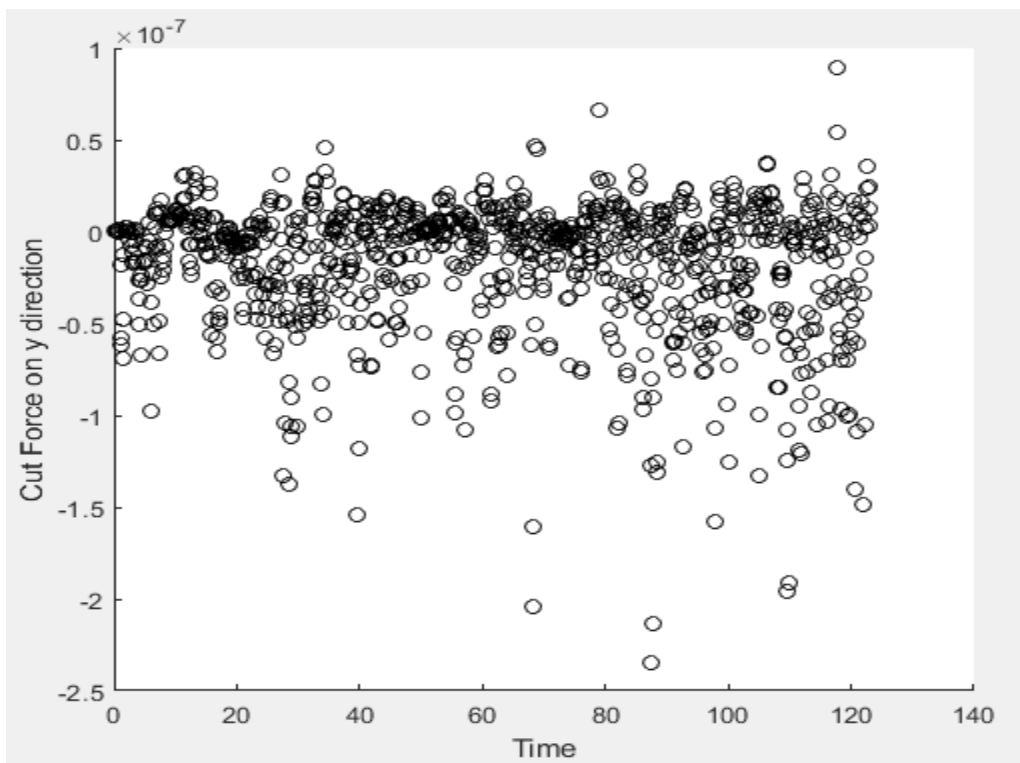
Εικόνα 4.50: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Με τις επόμενες 4 προσομοιώσεις που ακολουθούν (2e-2h) εξετάζουμε τα αποτελέσματα του κώδικά μας για βάθος κοπής 8Å, ώστε να εξάγουμε συμπεράσματα και πάλι για τις μετρήσεις που λαμβάνουμε και τις διαφορές που παρατηρούμε, τόσο στο σχήμα του αποβλίττου και στην ποιότητα της επεξεργασμένης επιφάνειας όσο και στις δυνάμεις κοπής που αναπτύσσονται στους άξονες x και y καθώς επίσης και τη σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του τεμαχίου μας, ανάλογα με την αύξηση της φθοράς της επιφάνειας του κόκκου διαμαντιού. Δε θα μπορούμε σε λεπτομερή σύγκριση των περιπτώσεων 2a και 2e μιας και αυτό είναι αντικείμενο προηγούμενης διπλωματικής, άρα θα εξετάσουμε τις διαφορές πάνω στις επιπτώσεις αλλαγής της ενέργειας συνοχής των ατόμων του εργαλείου. Στην Εικόνα 4.50 παρατηρούμε πάντως συνοπτικά παρατηρούμε ότι το ύψος του αποβλίττου είναι μεγαλύτερο, προφανώς λογικό μιας και λόγω του μεγαλύτερου βάθους κοπής έχουμε μεγαλύτερο όγκο αποβλίττου και ταυτόχρονα μεγαλύτερη κάθετη δύναμη. Παρατηρούμε επίσης τα θραύσματα που δημιουργούνται και αναμένουμε να μην είναι τόσο έντονη η ύπαρξή τους στις επόμενες προσομοιώσεις.

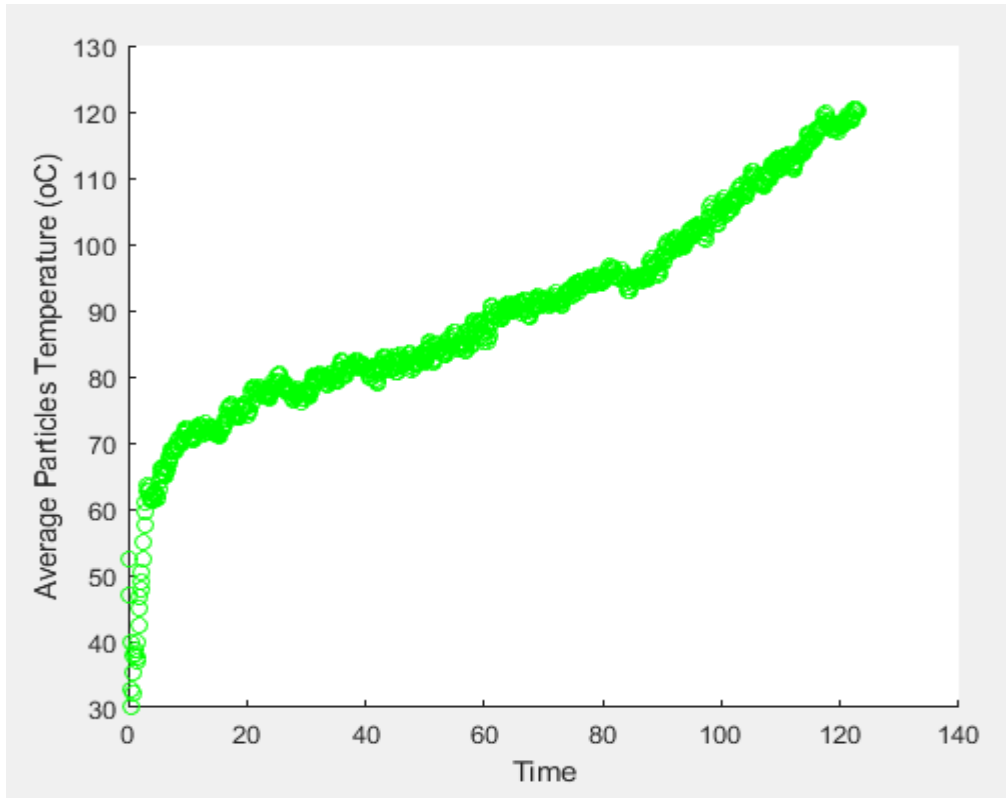
Οι δυνάμεις κοπής κατά x και y φαίνονται στα διαγράμματα 4.51-4.52 και η σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του τεμαχίου στο σχήμα 4.53. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν για τις μέσες τιμές είναι $CF_{x\mu} = 30.16nN$ και $CF_{y\mu} = 13.39nN$. Παρατηρούμε ότι σε σχέση με την Προσομοίωση 2a η ποσοστιαία αύξηση είναι 35% και 63% αντίστοιχα. Επίσης η μέγιστη θερμοκρασία αγγίζει τους 124⁰C, αύξηση της τάξης του 31.9% από την περίπτωση 2a.



Εικόνα 4.51: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.52: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου



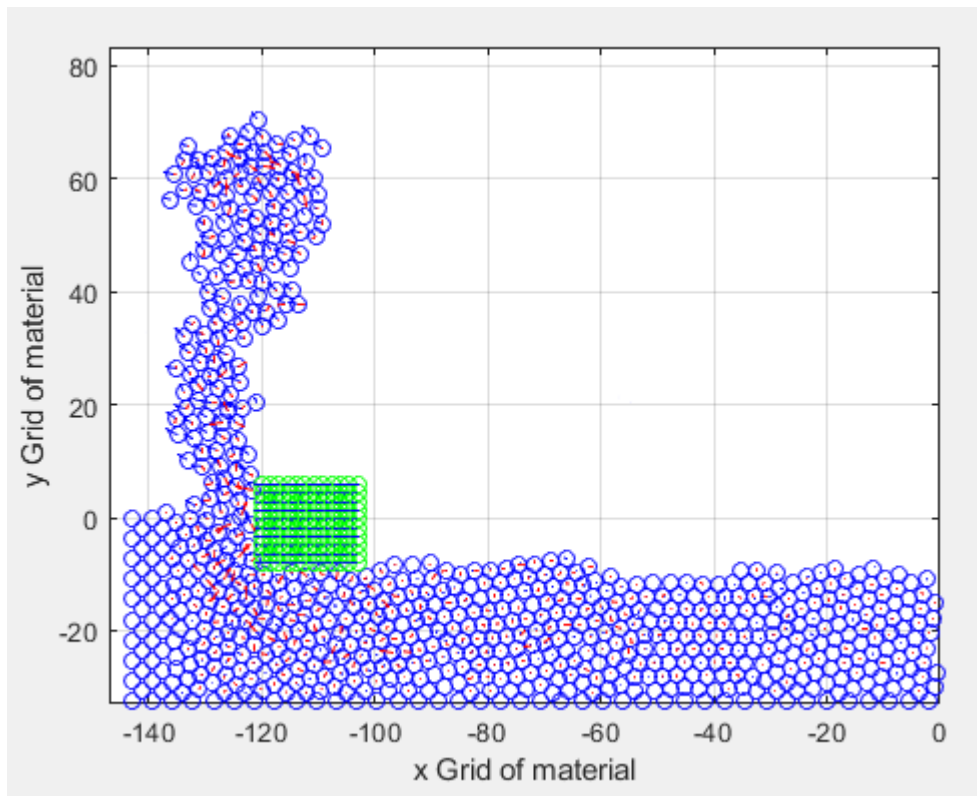
Εικόνα 4.53: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

4.3.6 Προσομοίωση 2f

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 2f είναι:

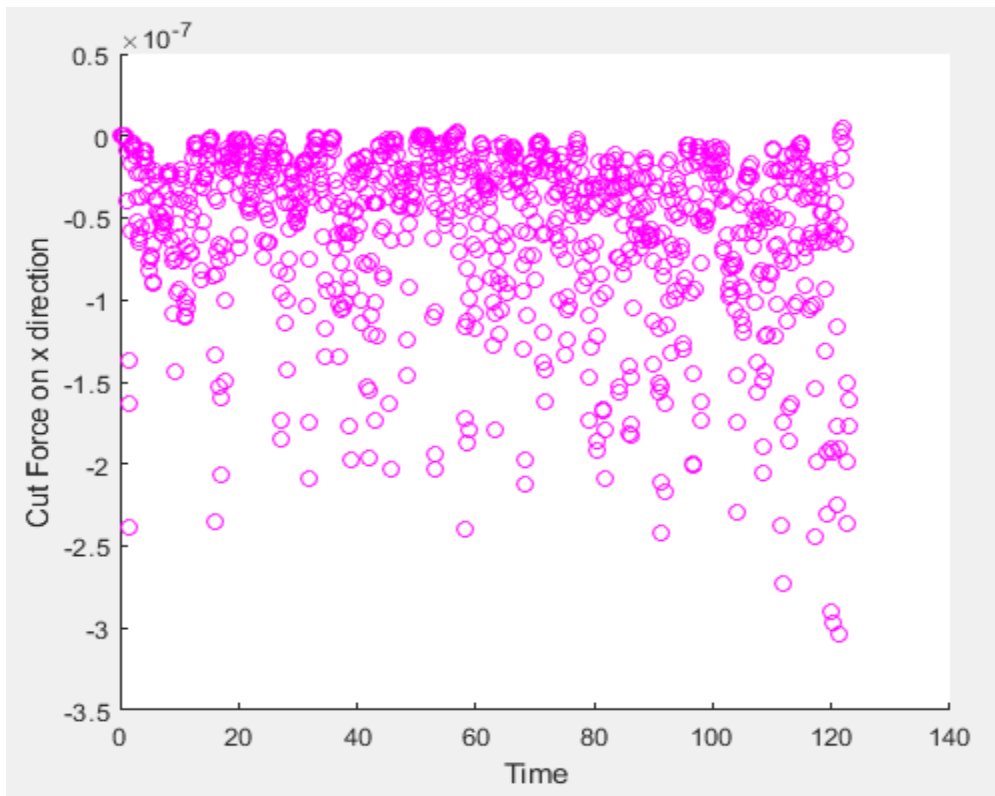
Προσομοίωση 2f	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0°
COHESION ENERGY D	0.00087
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	8 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	1230 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

Πίνακας 4.10: Παράμετροι προσομοίωσης 2f

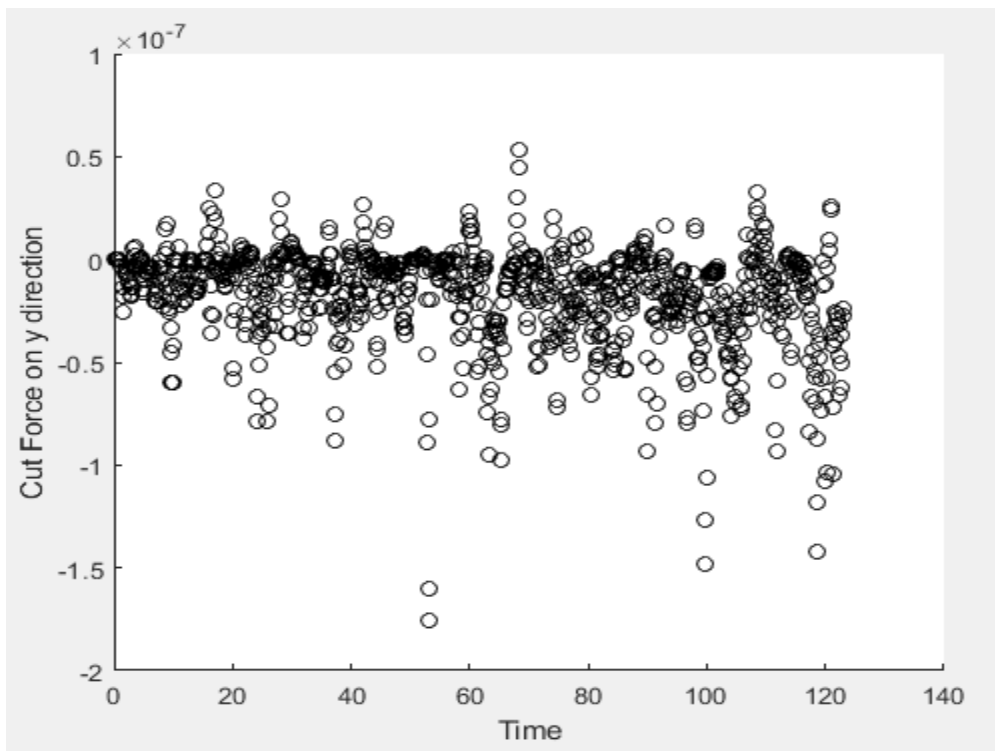


Εικόνα 4.54: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Στην Εικόνα 4.54 παρατηρούμε και πάλι ότι απόβλιττο έχει πολύ πιο συμπαγή μορφή, αποτέλεσμα των μικρότερων δυνάμεων που έχει δεχτεί κατά την κατεργασία. Για άλλη μια φορά είναι αισθητή η διαφορά που προκαλείται από την αλλαγή της τιμής της ενέργειας συνοχής στον κώδικα μας. Επιπλέον δείγμα των μικρότερων δυνάμεων κατά την κατεργασία είναι και το γεγονός ότι δεν βλέπουμε θραύσματα, το απόβλιττο είναι συμπαγές και παχύ. Μάλιστα στην Εικόνα 4.56 παρατηρούμε πόσο μικρή είναι η διασπορά των τιμών της CF_y και εξηγείται το μικρότερο μήκος που αποκτά στο τέλος της κατεργασίας το απόβλιττο. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν για τις μέσες τιμές είναι $CF_{xμ} = 19.85nN$ και $CF_{yμ} = 10.20nN$, μείωση 34.2% και 23.8% αντίστοιχα. Αν το συγκρίνουμε με τα αποτελέσματα της έρευνας των δύο Ιαπώνων επιστημόνων βλέπουμε ότι για το συγκεκριμένο βάθος κοπής με αυτή τη γεωμετρία εργαλείου έχουμε αποτέλεσμα μεγαλύτερο της μείωσης που οι ίδιοι υπολόγισαν (33% και 20% αντίστοιχα).

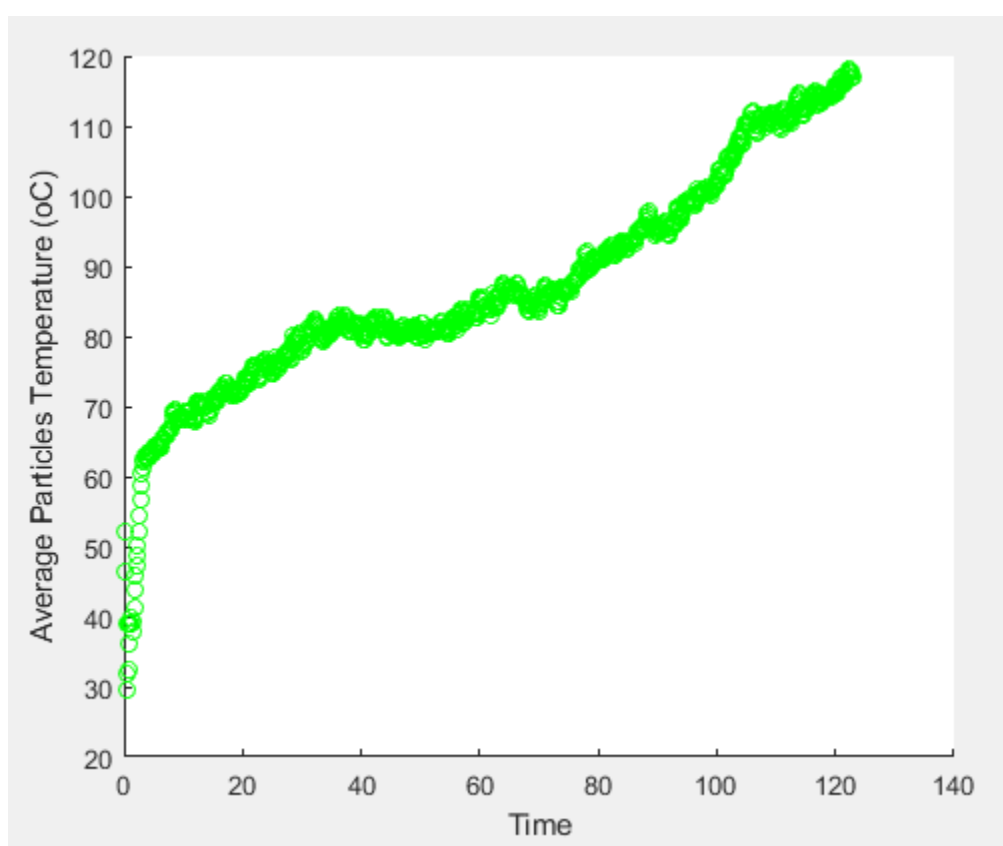


Εικόνα 4.55: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.56: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

Η Εικόνα 4.57 αποτυπώνει τη σωρευτική θερμοκρασία. Αποτέλεσμα των μικρότερων δυνάμεων είναι το γεγονός ότι η μέγιστη τιμή που λαμβάνουμε είναι 117.4°C. Παρατηρούμε πως στη μέση της κατεργασίας το διάγραμμα της θερμοκρασίας παρουσιάζει μια οριζόντια κίνηση, με τις τιμές να σταθεροποιούνται γύρω από τους 80°C. Η αύξηση που διαγράφεται στη συνέχεια έχει να κάνει και πάλι με τη συμπίεση του υλικού προς τα τοιχώματα του τεμαχίου, που θυμίζουμε ότι είναι πακτωμένα. Αυτό δημιουργεί μεγαλύτερες τριβές μεταξύ των ατόμων χαλκού, με αποτέλεσμα την περαιτέρω αύξηση της θερμοκρασίας. Οπότε συμπεραίνουμε ότι όσον αφορά την κατεργασία και την αύξηση της θερμοκρασίας λόγω της κίνησης του εργαλείου μας στην επιφάνεια του τεμαχίου, η επίδρασή της δεν ευθύνεται για την αύξηση μέχρι την μέγιστη τιμή που λάβαμε αλλά περίπου ως τους 85-90°C.



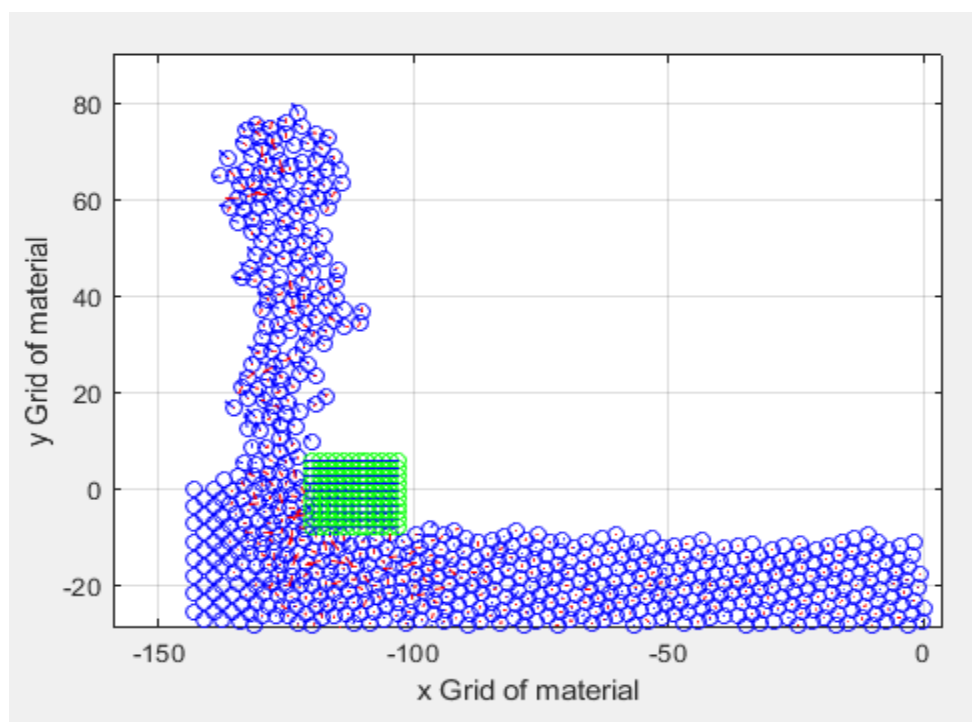
Εικόνα 4.57: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

4.3.7 Προσομοίωση 2g

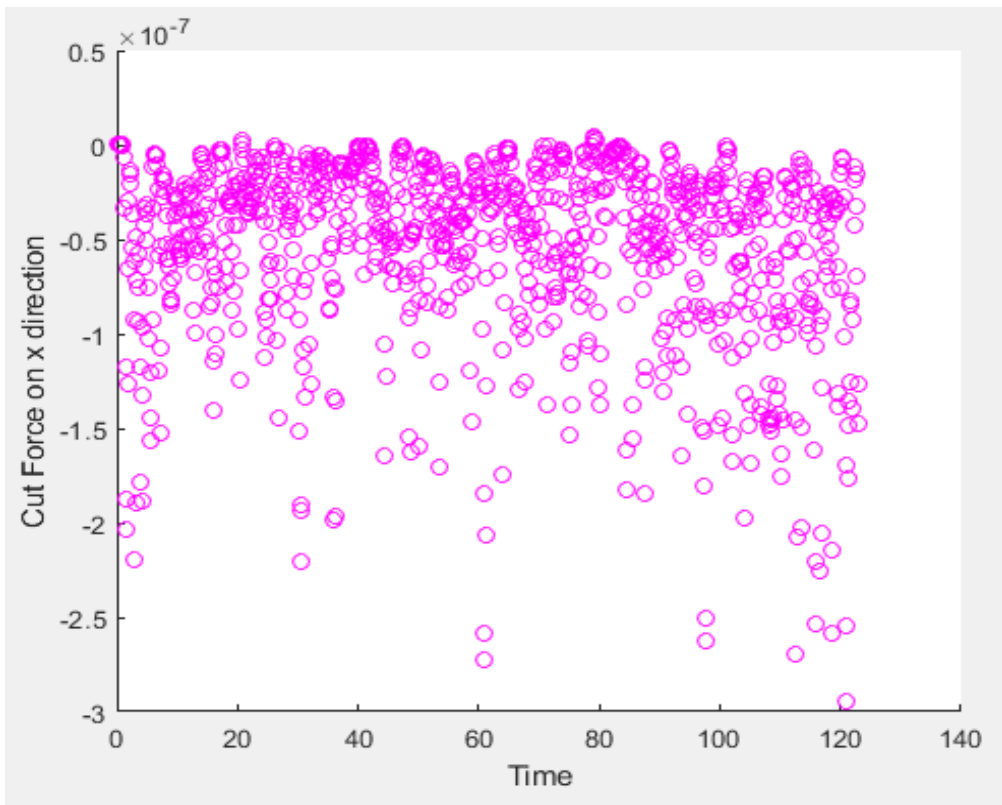
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 2g είναι:

Προσομοίωση 2g	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0°
COHESION ENERGY D	0.00174
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	8 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	1230 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

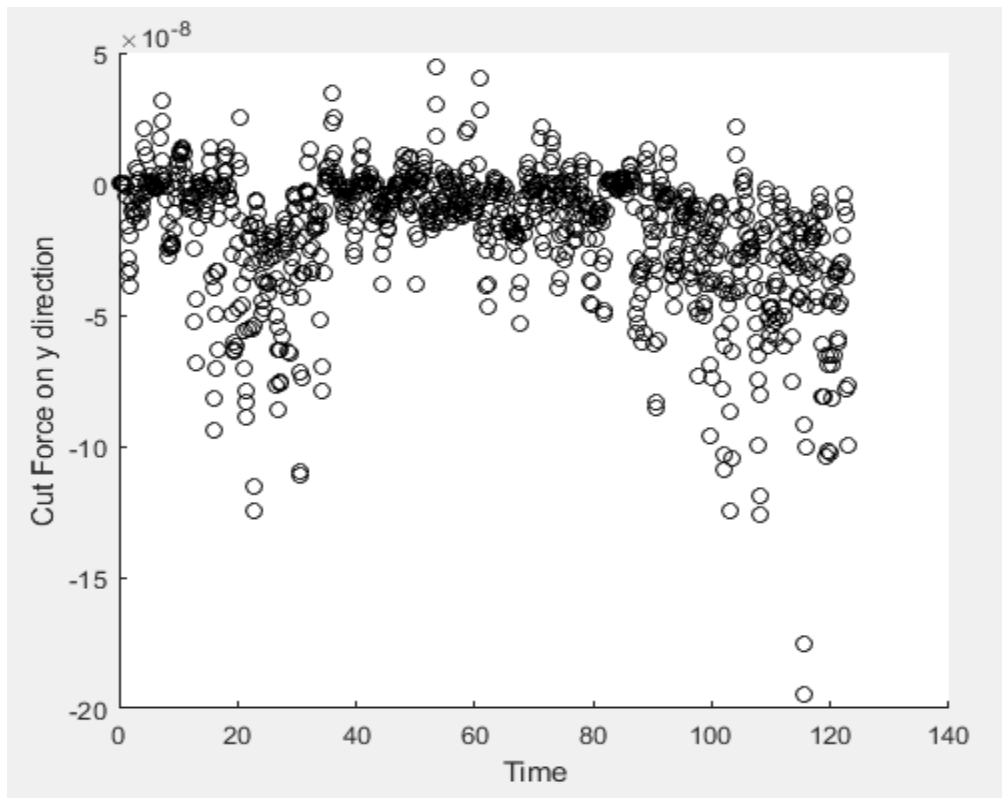
Πίνακας 4.11: Παράμετροι προσομοίωσης 2g



Εικόνα 4.58: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

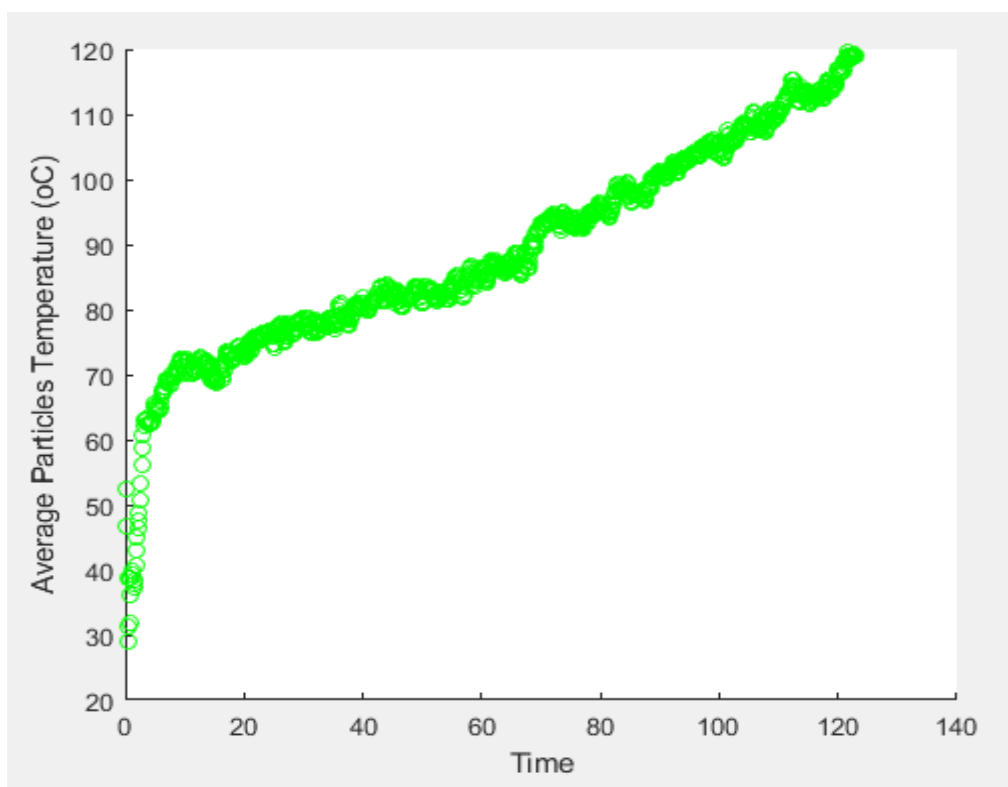


Εικόνα 4.59: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.60: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

Για ενέργεια συνοχής D/50 παρατηρούμε ότι το μήκος του αποβλίττου είναι αρκετά μεγαλύτερο της προηγούμενης περίπτωσης, πλησιάζοντας αρκετά το αρχικό σχήμα 4.50. Πάντως το απόβλιττο συνεχίζει να έχει συμπαγή μορφή χωρίς θραύσματα. Η διασπορά των δυνάμεων κοπής στον άξονα y είναι σαφώς μεγαλύτερη εδώ από ότι στην περίπτωση 2f, εξού και το μήκος που προκύπτει στο στιγμιότυπο της προσομοίωσης παραπάνω (Εικόνα 4.58). Τα αποτελέσματα που προκύπτουν για τις μέσες τιμές είναι $CF_{xμ} = 25.61nN$ και $CF_{yμ} = 11.93nN$. Παρατηρούμε κάτι που προέκυψε και στις δοκιμές με το προηγούμενο βάθος κοπής (2a-2d). Η μείωση εδώ είναι μεγαλύτερη καθώς μειώνουμε και πάλι τη φθορά πλησιάζοντας στην ιδανική περίπτωση. Πλέον για τον άξονα x καταγράψαμε μείωση 15.1% στο μέσο όρο των δυνάμεων κοπής και για τον άξονα y μείωση 10.9%, οπότε σε μεγαλύτερο βάθος και με την ίδια γεωμετρία ανοίγει η ψαλίδα της επίπτωσης που προκαλεί η φθορά της επιφάνειας του διαμαντιού στις μετρήσεις. Όσον αφορά τη σωρευτική θερμοκρασία (Εικόνα 4.61) αυτή φτάνει το μέγιστο των 119.8°C.



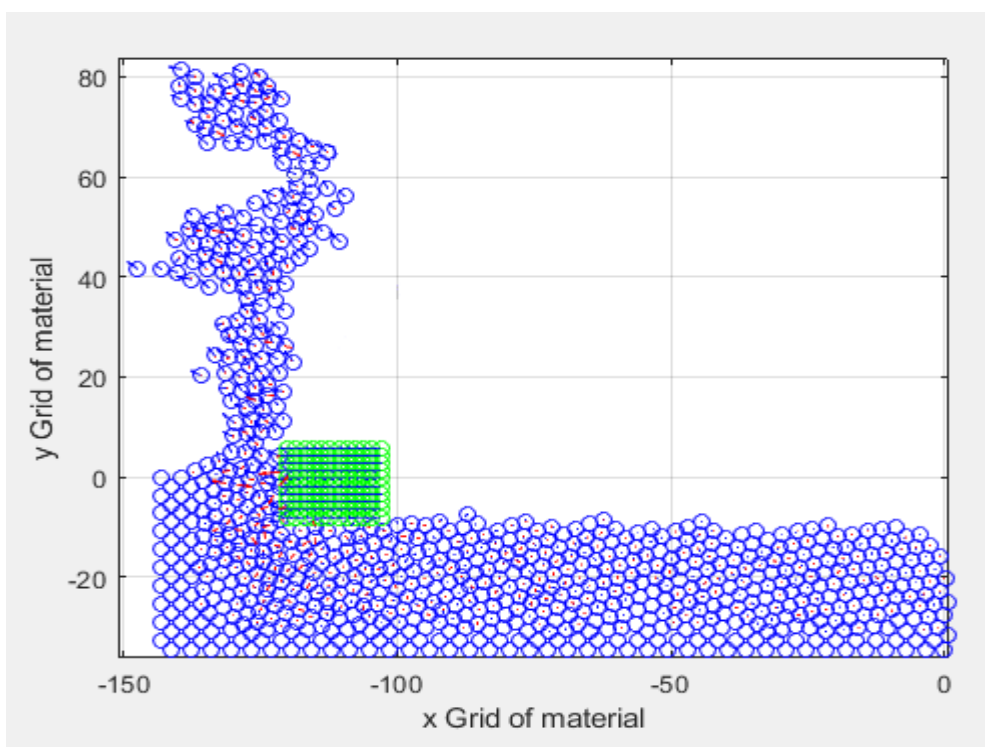
Εικόνα 4.61: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

4.3.8 Προσομοίωση 2h

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 2h είναι:

Προσομοίωση 2h	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0°
COHESION ENERGY D	0.00435
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	8 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	1230 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

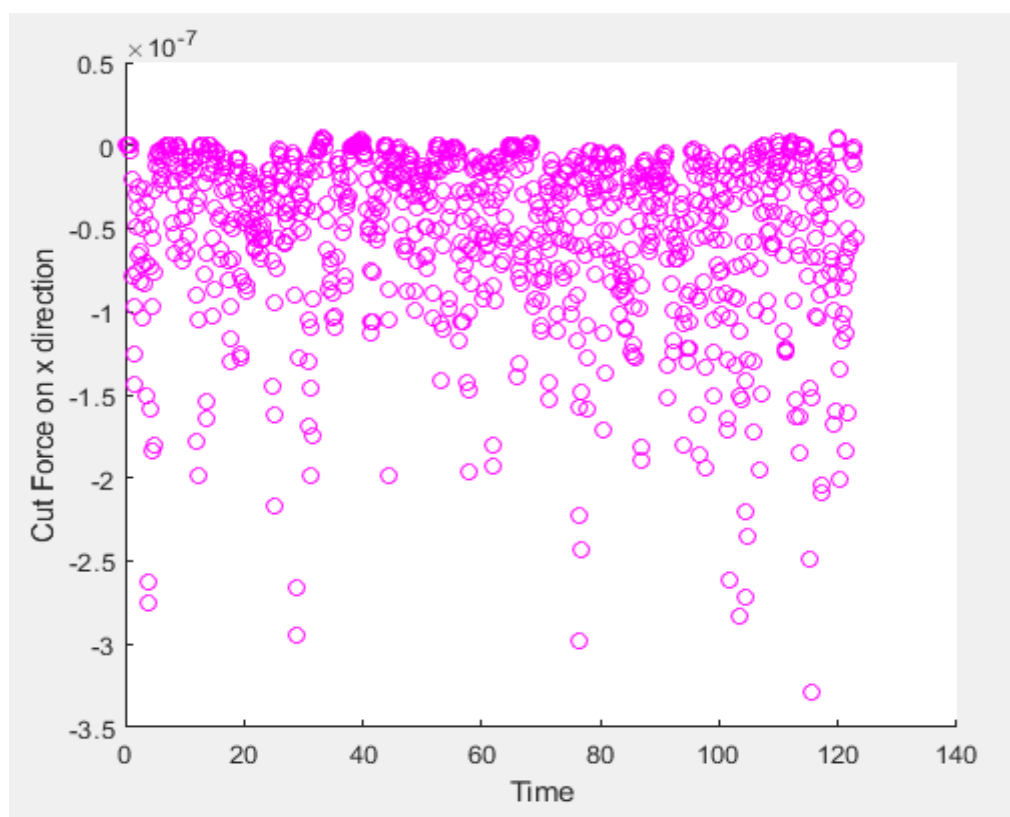
Πίνακας 4.12: Παράμετροι προσομοίωσης 2h



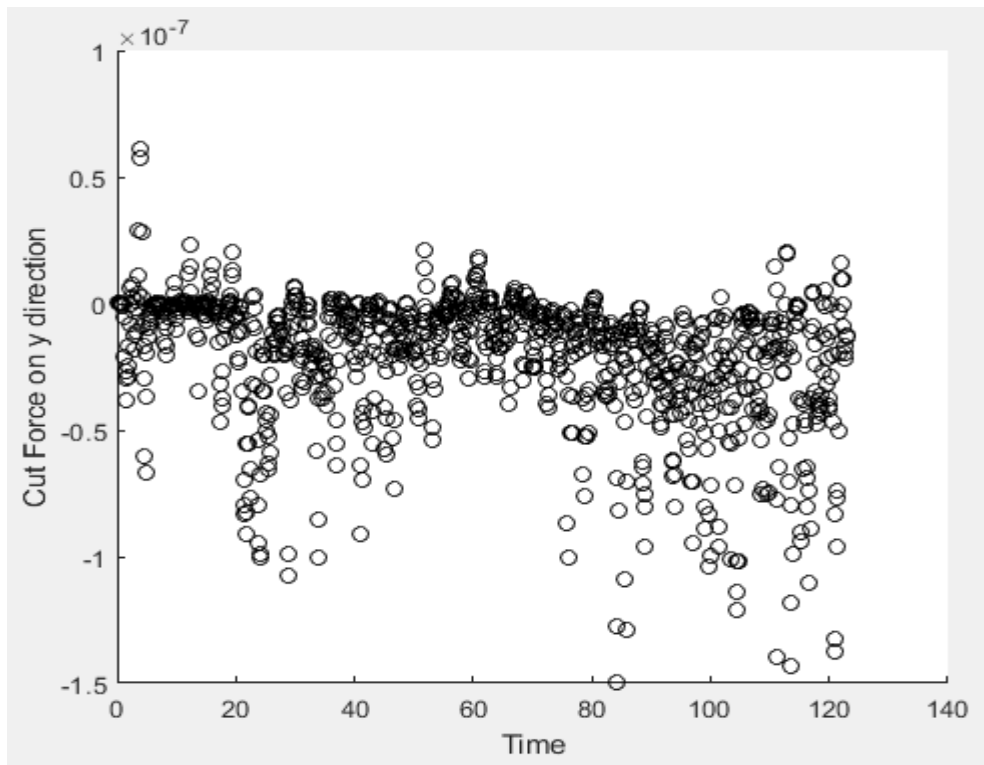
Εικόνα 4.62: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Τέλος, έχουμε τη δοκιμή για $D = 0.00435$, δηλαδή 20 φορές μικρότερη της αρχικής. Μέχρι τώρα έχουμε παρατηρήσει ότι αυτή η δοκιμή πλησιάζει τα αποτελέσματα αυτής με $D = 0.087$, είναι ίσως το μέγεθος που ξεκινά να δείχνει σαφή αποτελέσματα η επίπτωση της φθοράς του εργαλείου μας στις δυνάμεις κοπής της κατεργασίας.

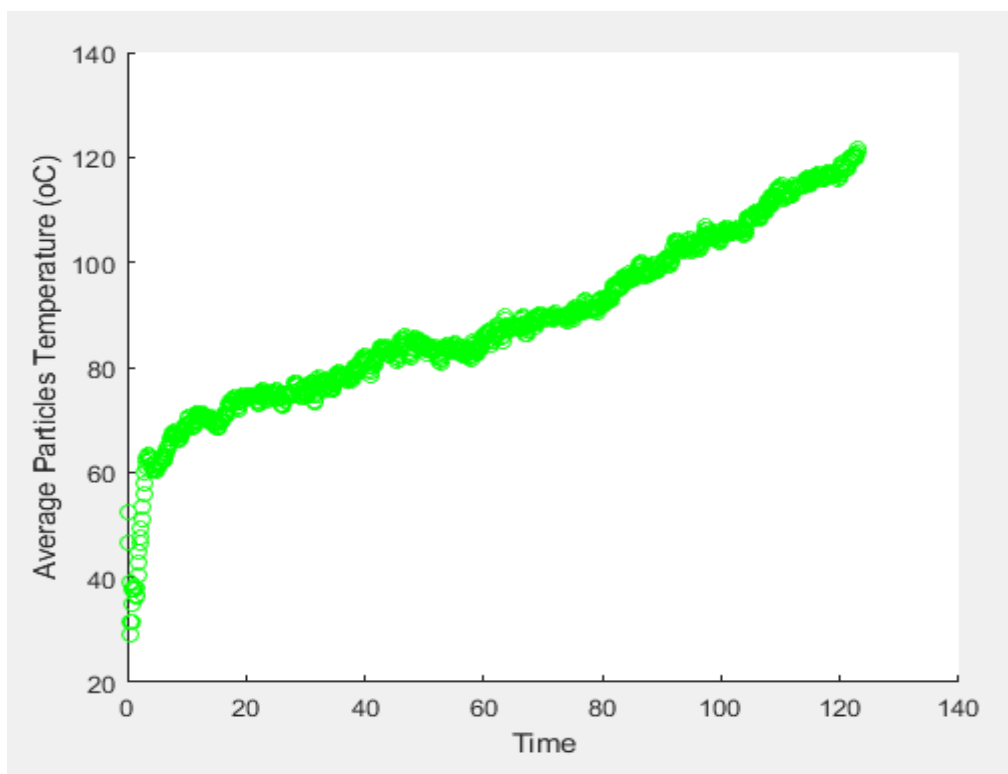
Στο σχήμα 4.62 βλέπουμε ότι το απόβλιττο έχει λεπτή μορφή, σχηματίζει δύο λαιμούς και παρουσιάζει θραύσματα (chip formation). Είναι φανερό ότι η κατεργασία γίνεται πιο "βίαια" από τις δυο προηγούμενες περιπτώσεις 2f-2g και πως η επιφάνεια του κοπτικού εργαλείου ασκεί μεγαλύτερες δυνάμεις στο υλικό μας, υπερσχύοντας των συνεκτικών δυνάμεων των ατόμων του χαλκού. Πράγματι, από τις μετρήσεις των διαγραμμάτων 5.63-5.64 επιβεβαιώνεται το παραπάνω πόρισμα. Οι μέσες τιμές των δυνάμεων κοπής κατά x και y είναι $CF_{xμ} = 28.44\text{nN}$ και $CF_{yμ} = 12.75\text{nN}$, δηλαδή ποσοστιαία μείωση για τον εκάστοτε άξονα 5.7% και 4.8%. Παρόμοια με τις προηγούμενες προσομοιώσεις, η διαφοροποίηση στην ποσοστιαία μείωση είναι μεγάλη, και ως προς τις προσομοιώσεις με βάθος 4\AA αλλά και ως προς την πρώτη σειρά προσομοιώσεων που οι δοκιμές περιλάμβαναν άλλη γεωμετρία εργαλείου. Οι τιμές για $D/20$ πλησιάζουν πολύ τις αρχικές (Προσομοίωση 2e). Η σωρευτική θερμοκρασία (Εικόνα 4.65) αγγίζει τους 123°C .



Εικόνα 4.63: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.64: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.65: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

4.4 Τρίτη Σειρά Προσομοιώσεων

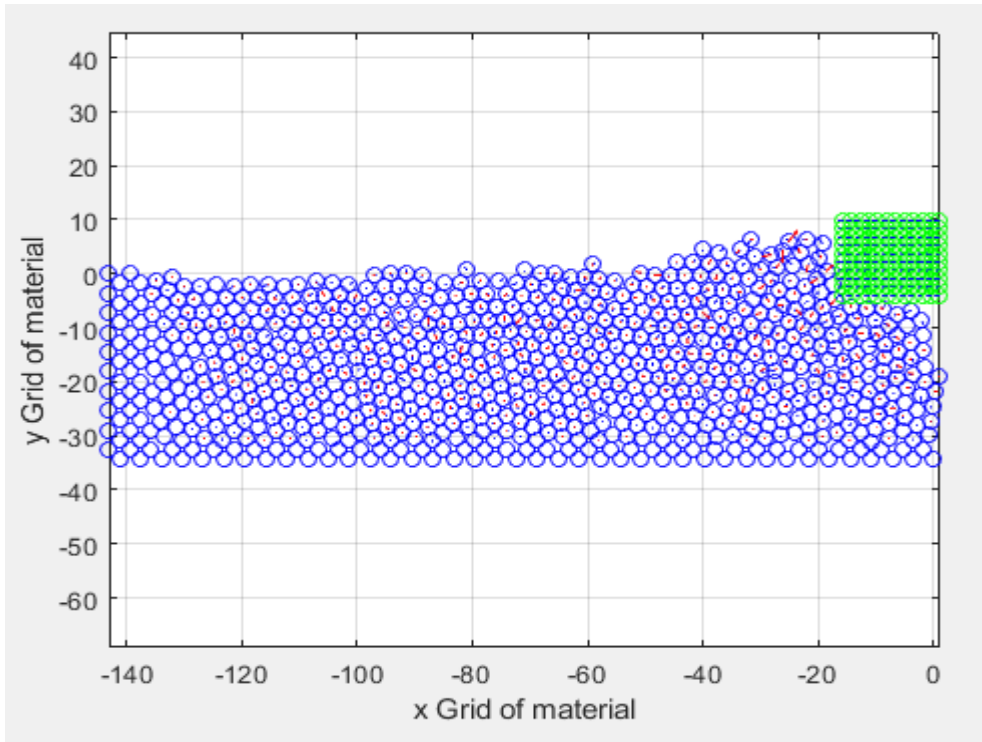
Στην τρίτη σειρά προσομοιώσεων που πραγματοποιήσαμε, παρουσιάζεται λείανση τεμαχίου χαλκού με κόκκο διαμαντιού ορθογωνικής γεωμετρίας και πάλι, μόνο που στη συγκεκριμένη σειρά θα μειώσουμε την ταχύτητα του εργαλείου κατά τον άξονα x στο μισό. Θα εξετάσουμε όπως και πριν τα αποτελέσματα για βάθη 4Å και 8Å για τα διάφορα επίπεδα φθοράς του εργαλείου μας (D, D/100, D/50 και D/20). Ταχύτητα κατά την y κατεύθυνση δεν υπάρχει οπότε το βάθος κοπής δεν αλλάζει κατά τη διάρκεια της κατεργασίας και μέχρι το τέλος αυτής.

4.4.1 Προσομοίωση 3a

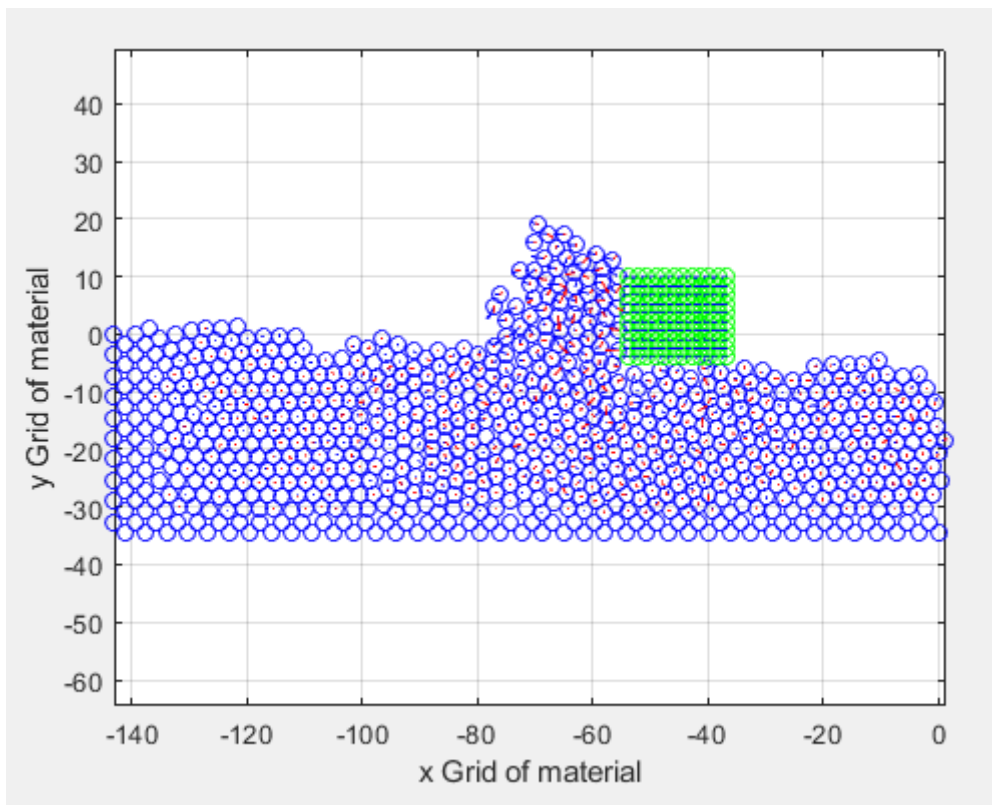
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 3a είναι:

Προσομοίωση 3a	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0°
COHESION ENERGY D	0.087
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	4 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	615 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

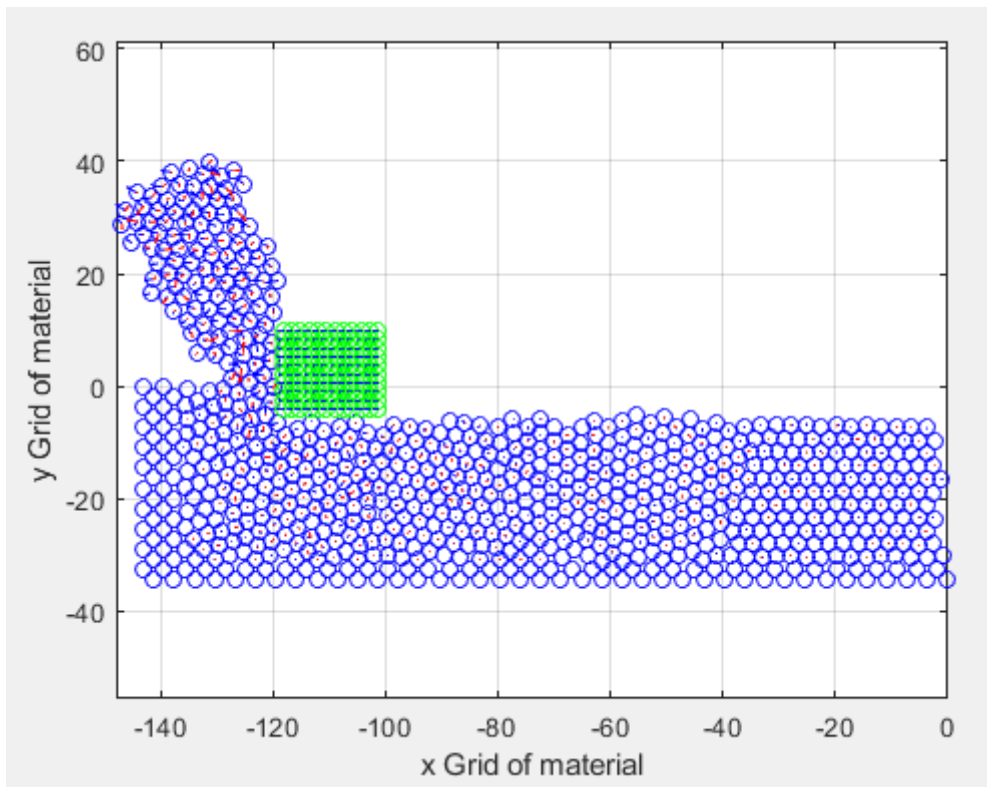
Πίνακας 4.13: Παράμετροι προσομοίωσης 3a



Εικόνα 4.66: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης κατά την έναρξη της κατεργασίας



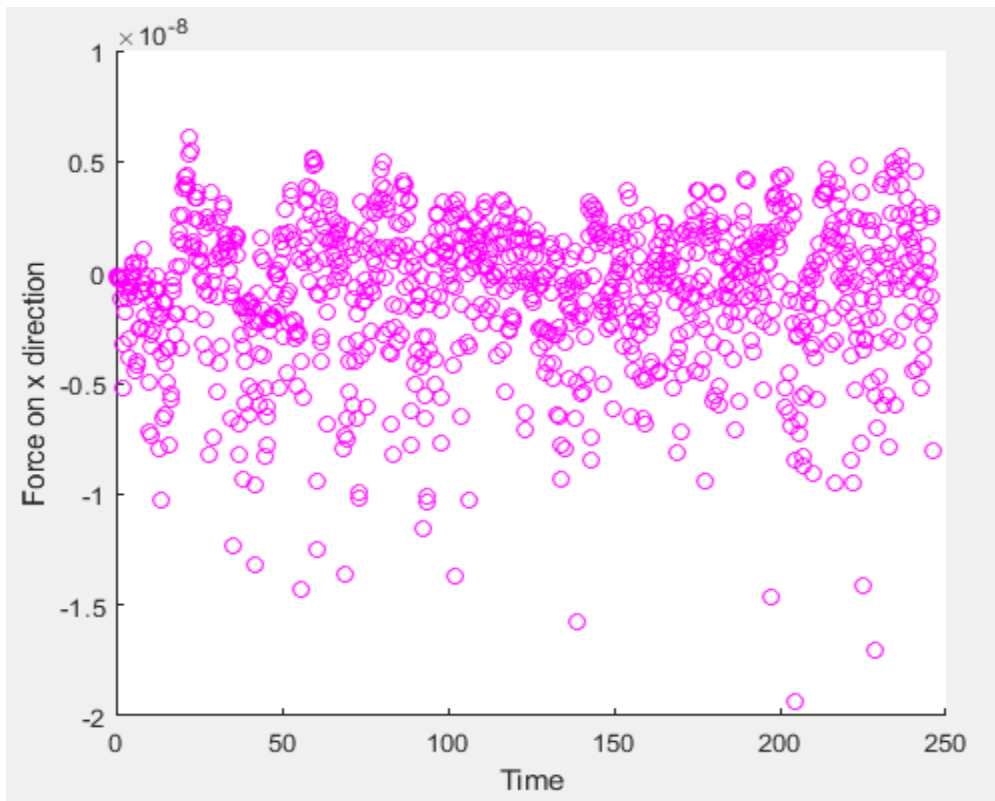
Εικόνα 4.67: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στην μέση της κατεργασίας



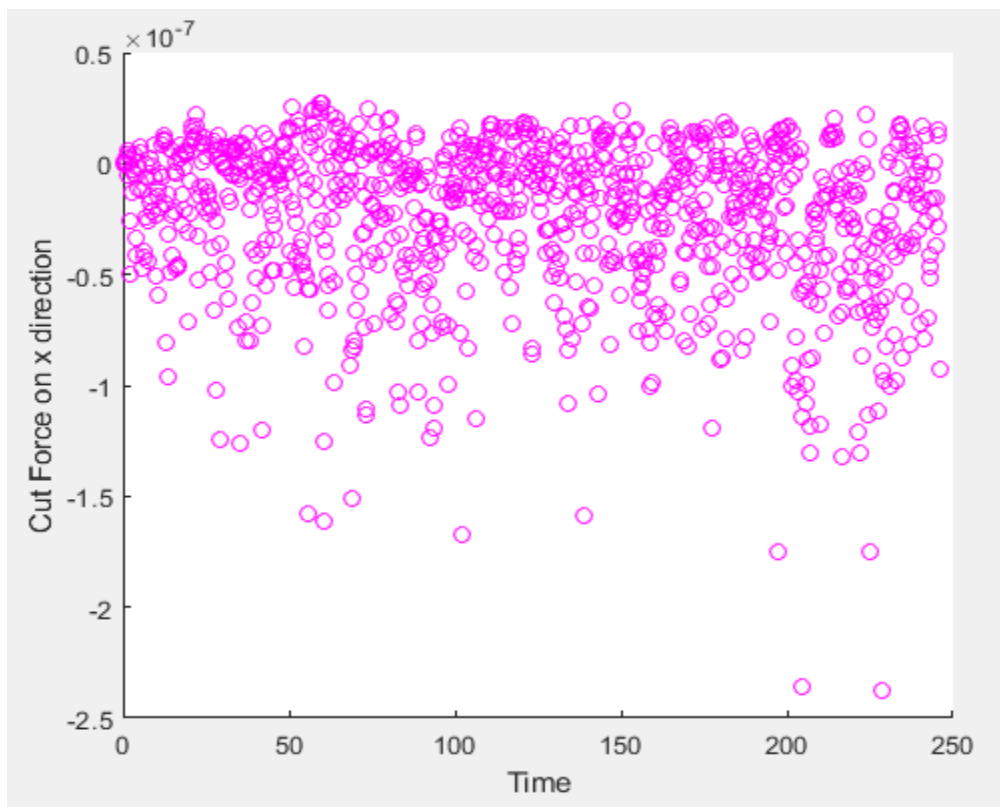
Εικόνα 4.68: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Από τις παραπάνω εικόνες (4.66-4.68) των φάσεων της κατεργασίας, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι το υλικό κατεργασίας παραμορφώνεται μπροστά από τον λειαντικό κόκκο. Παρατηρούμε ότι από την κατεργασία προκύπτει πολύ μικρότερο σχήμα αποβλίττου, συμπαγές και μαζεμένο χωρίς θραύσματα και με μικρό μήκος. Η μικρότερη ταχύτητα έχει άμεση σχέση με αυτό καθώς πλέον οι δυνάμεις που αναπτύσσονται μεταξύ τεμαχίου και εργαλείου είναι πολύ μικρότερες. Η επεξεργασία του τεμαχίου γίνεται πιο προσεκτικά και το απόβλιττο σχηματίζεται πολύ πιο αργά. Επιπλέον, στην κατεργασμένη επιφάνεια του τεμαχίου είναι εμφανής η καλύτερη ποιότητα που αφήνει πίσω του το υλικό, με το χαλκό να μην παρουσιάζει πολλές ακανόνιστες παραμορφώσεις και αν λάβουμε υπόψη ότι αυτό που παρατηρούμε στα στιγμιότυπα παραπάνω είναι σε νανοκλίμακα, αντιλαμβάνεται κανείς ότι η επιφάνεια που αφήνει πίσω του ο κόκκος διαμαντιού είναι σχεδόν τέλεια. Το υλικό που βρίσκεται μακριά από το κοπτικό εργαλείο δεν επηρεάζεται σχεδόν καθόλου από την κατεργασία.

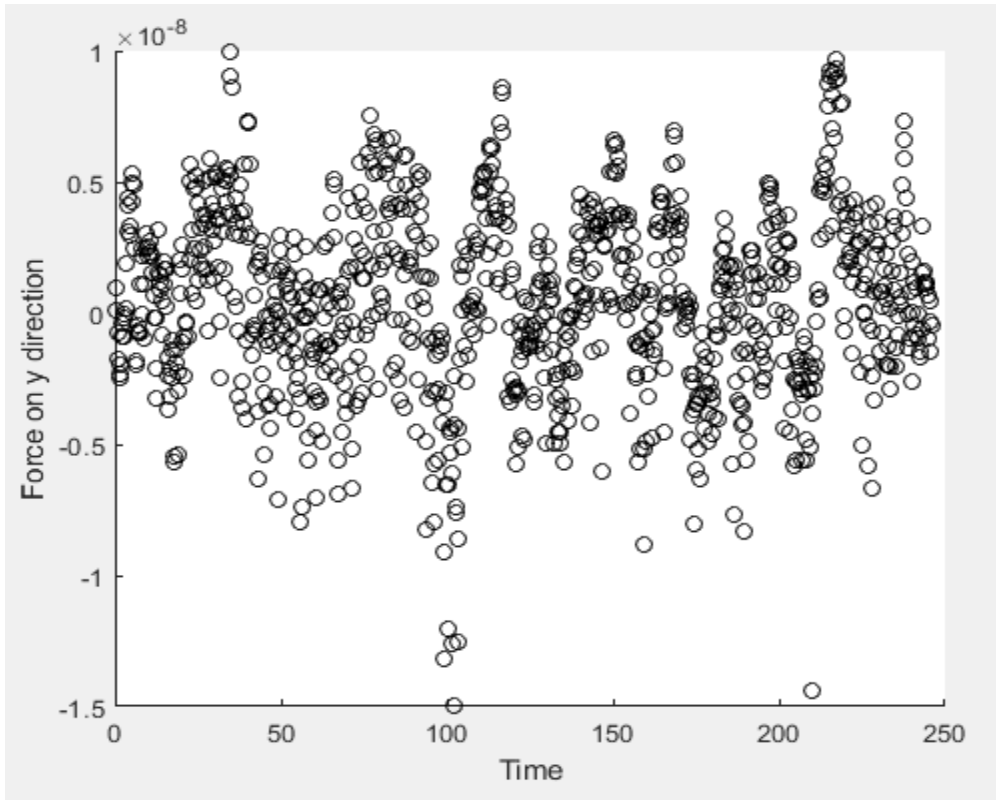
Μιας και οι συγκρίσεις μεταξύ των προσομοιώσεων με $D = 0.087$ ήταν αντικείμενο άλλης διπλωματικής, δε θα μπούμε σε μεγαλύτερες λεπτομέρειες όσον αφορά τη σύγκριση των ιδανικών περιπτώσεων και θα ασχοληθούμε εκτενέστερα με τις διαφορές που προκύπτουν λόγω της φθοράς του εργαλείου.



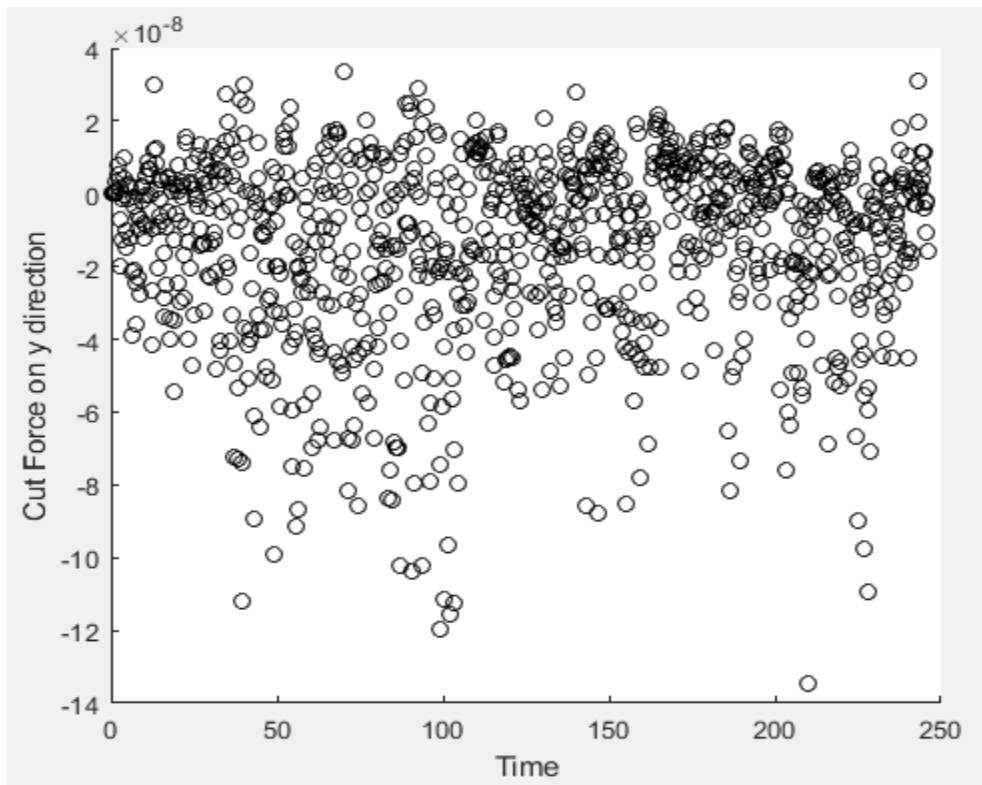
Εικόνα 4.69: Μεταβολή της δύναμης στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.70: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.71: Μεταβολή της δύναμης στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

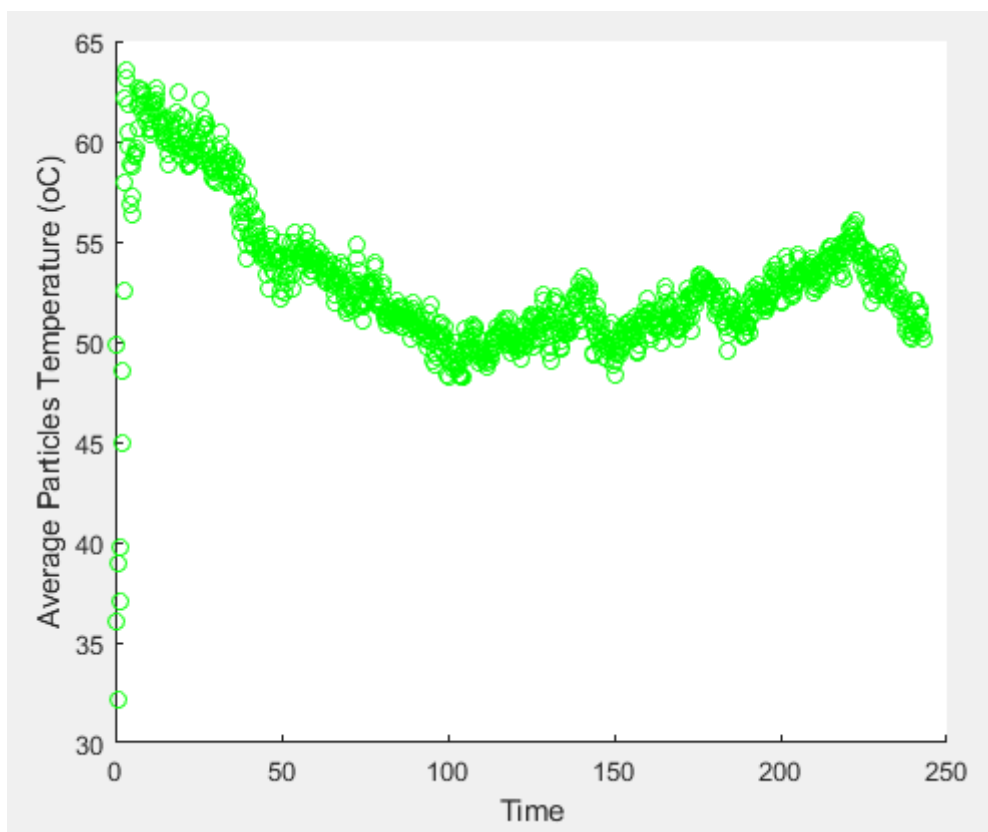


Εικόνα 4.72: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

Από τα διαγράμματα των δυνάμεων κατά τους άξονες x και y (Εικόνες 4.69-4.72), είναι αντιληπτό ότι οι δυνάμεις παρουσιάζουν έντονη διακύμανση. Οι τιμές των δυνάμεων είναι γενικά μεγαλύτερες κατά τον οριζόντιο άξονα x σε σύγκριση με τον κατακόρυφο y, πάντως η διασπορά κατά τον y άξονα δείχνει μεγαλύτερη. Επίσης άλλο ένα γενικό συμπέρασμα είναι ότι η τάση όλων των δυνάμεων και του εύρους των διακυμάνσεων είναι γενικά αυξητική.

Στην προκειμένη περίπτωση οι μέσες τιμές κατά x και y, είναι $CF_{xμ}=19.99\text{nN}$ και $CF_{yμ}=6.71\text{nN}$, αντιστοίχως.

Στο διάγραμμα 4.73 βλέπουμε τη σωρευτική θερμοκρασία. Εδώ παρατηρούμε ότι λόγω της αρχικής επαφής του εργαλείου με το τεμάχιο υπάρχει απότομη αύξηση αρχικά, αλλά λόγω της μειωμένης ταχύτητας της κατεργασίας η θερμοκρασία κατά το μεγαλύτερο μέρος της κατεργασίας κινείται ανάμεσα στους 50 και 55°C.



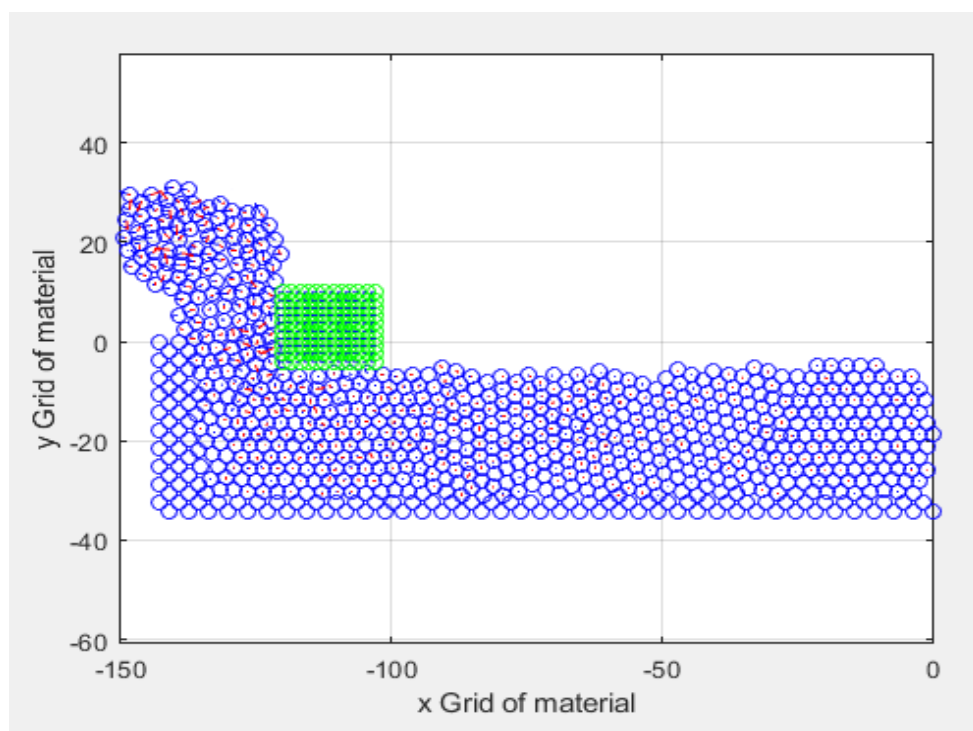
Εικόνα 4.73: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

4.4.2 Προσομοίωση 3b

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 3b είναι:

Προσομοίωση 3b	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0°
COHESION ENERGY D	0.00087
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	4 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	615 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

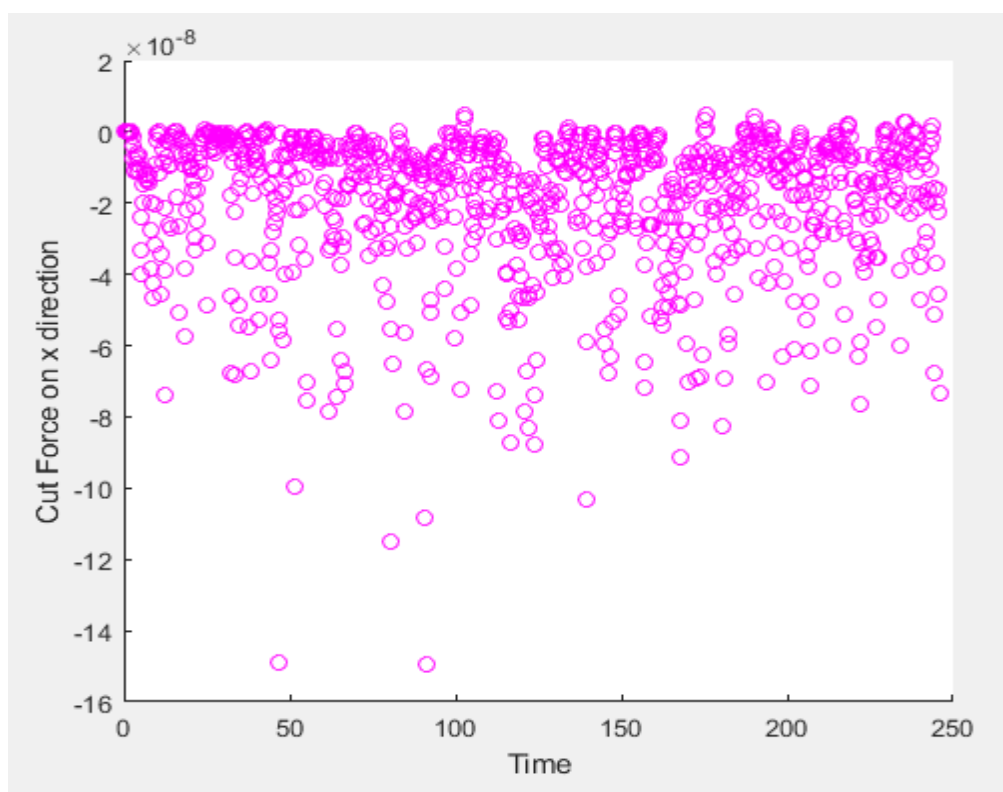
Πίνακας 4.14: Παράμετροι προσομοίωσης 3b



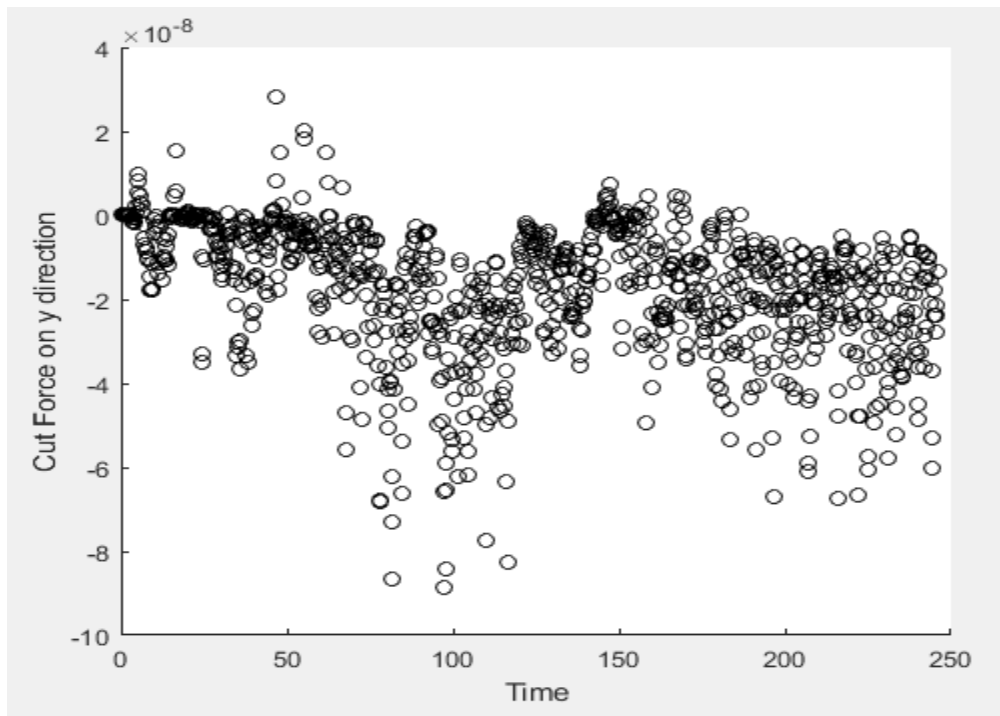
Εικόνα 4.74: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Στην περίπτωση της μεγαλύτερης φθοράς που εξετάζουμε βλέπουμε ήδη διαφορές με την προηγούμενη προσομοίωση. Το απόβλιττο είναι πιο συμπαγές και με μικρότερο μήκος. Είδαμε στο στιγμιότυπο 4.70 το απόβλιττο να φτάνει σε ύψος 40\AA ενώ στο στιγμιότυπο 4.74 που αποτυπώνει το τέλος της κατεργασίας με ενέργεια συνοχής 100 φορές μικρότερη της αρχικής το απόβλιττο μετά βίας ξεπερνά το ύψος των 30\AA . Οι συνεκτικές δυνάμεις μεταξύ των ατόμων του χαλκού φέρουν αντίσταση στο εργαλείο και τα άτομα του αποβλίττου παραμένουν συμπυκνωμένα. Σημαντικό είναι να παρατηρήσουμε ότι η επιφάνεια που αφήνει πίσω του το φθαρμένο εργαλείο έχει μεγάλη ποιοτική διαφορά από αυτή που αφήνει πίσω του το ιδανικό, δείγμα του ότι όσο προχωράει η κατεργασία αυξάνεται η φθορά στην επιφάνεια του διαμαντιού.

Όπως αναμενόταν, υπάρχει αισθητή μείωση στις μετρήσεις των κοπτικών δυνάμεων που αναπτύχθηκαν. Οι μέσες τιμές κατά x και y , είναι $CF_{x\mu}=13.73\text{nN}$ και $CF_{y\mu}=5.23\text{nN}$, αντιστοίχως. Αυτό μεταφράζεται σε μείωση 31.3% κατά τον άξονα x και μείωση 22.1% κατά τον άξονα y . Αν προσέξουμε ιδιαίτερα στην Εικόνα 4.75 παρατηρούμε ότι οι περισσότερες μετρήσεις συγκεντρώνονται γύρω από συγκεκριμένη τιμή ($\sim -1 \times 10^{-8}$ αδιαστατοποιημένη τιμή, με το αρνητικό να σημαίνει κατεύθυνση προς τα αριστερά προφανώς). Αποτέλεσμα αυτού είναι το απόβλιττο να παραμένει συμπαγές καθώς δεν υπάρχουν πολλές και έντονες αλλαγές στις δυνάμεις που αναπτύσσονται μεταξύ των ατόμων των δύο επιφανειών.

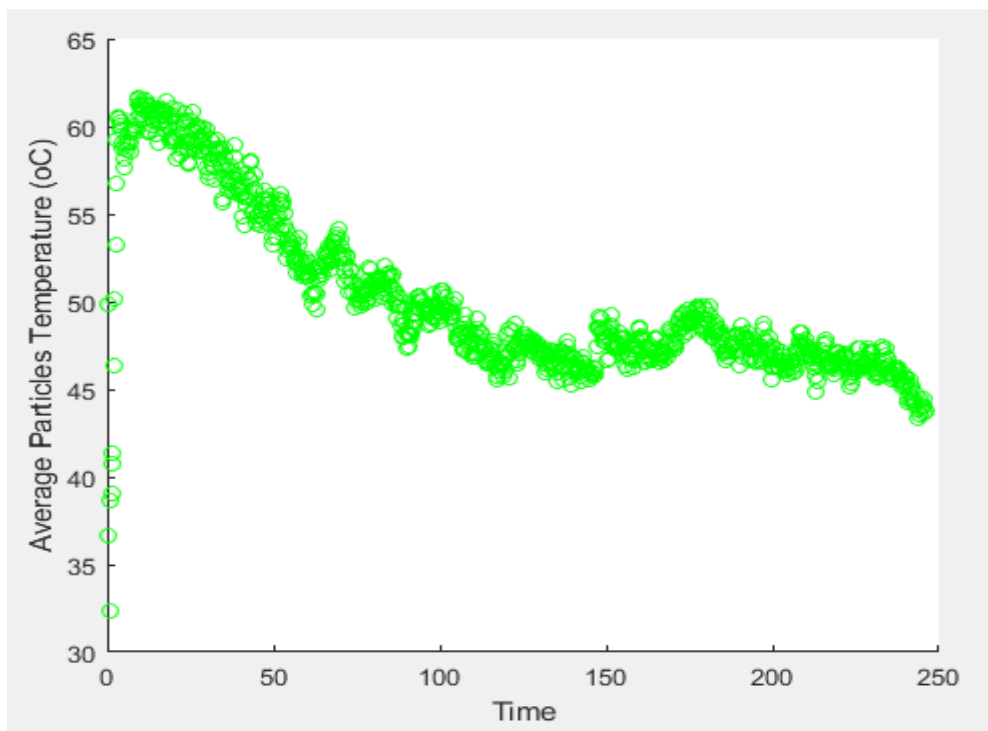


Εικόνα 4.75: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.76: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

Λόγω της αργής κίνησης του εργαλείου αλλά και της συμπαγούς μορφής και μικρής ταχύτητας των ατόμων του αποβλίττου, ο μέσος όρος της θερμοκρασίας των ατόμων του τεμαχίου διατηρείται πολύ χαμηλά. Σ' αυτό συμβάλλει και το γεγονός ότι τα περισσότερα άτομα χαλκού μένουν ανεπηρέαστα από την κατεργασία.



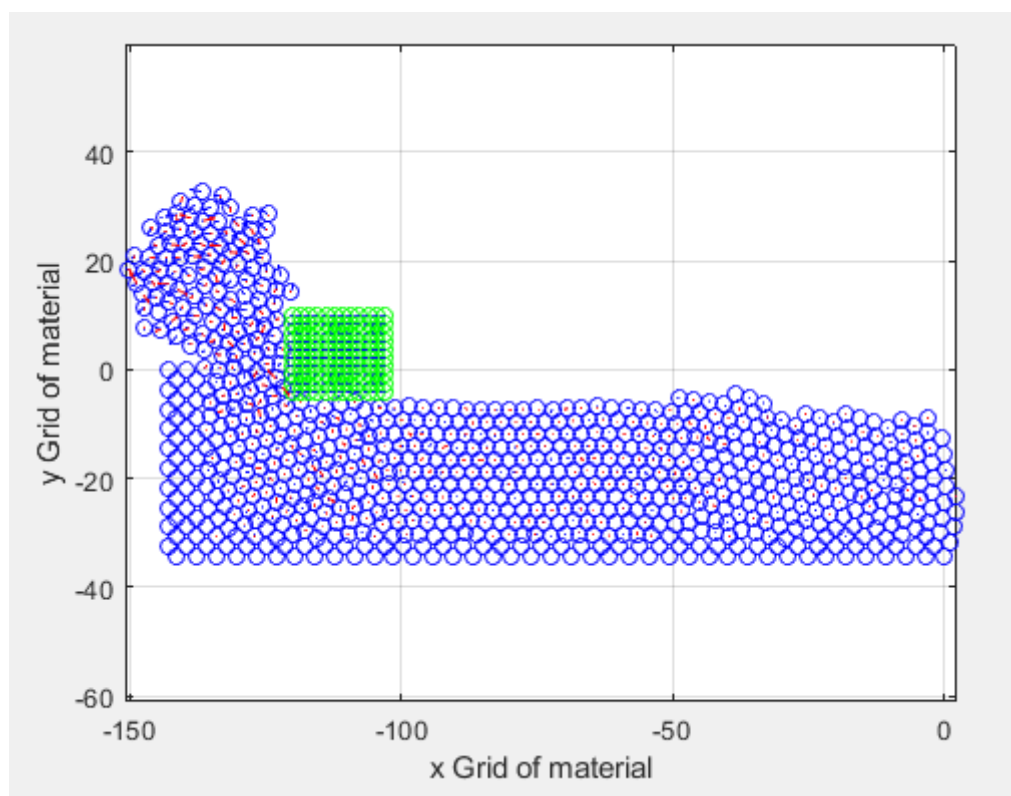
Εικόνα 4.77: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

4.4.3 Προσομοίωση 3c

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 3c είναι:

Προσομοίωση 3c	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0°
COHESION ENERGY D	0.00174
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	4 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	615 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

Πίνακας 4.15: Παράμετροι προσομοίωσης 3c

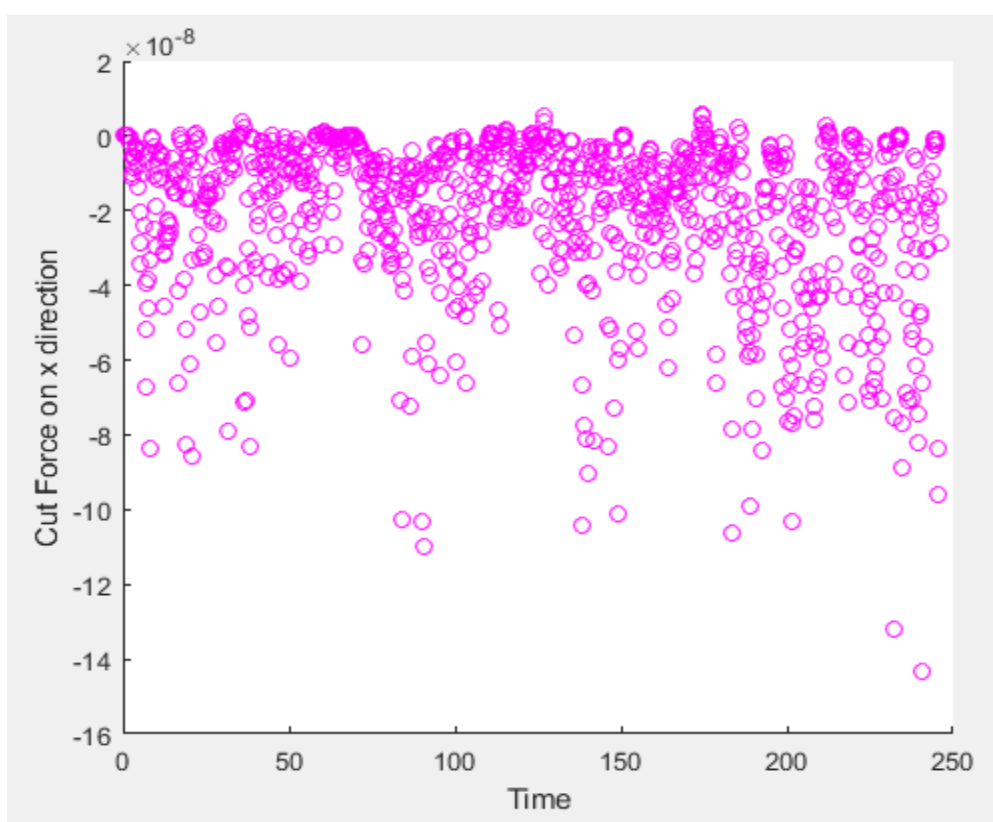


Εικόνα 4.78: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

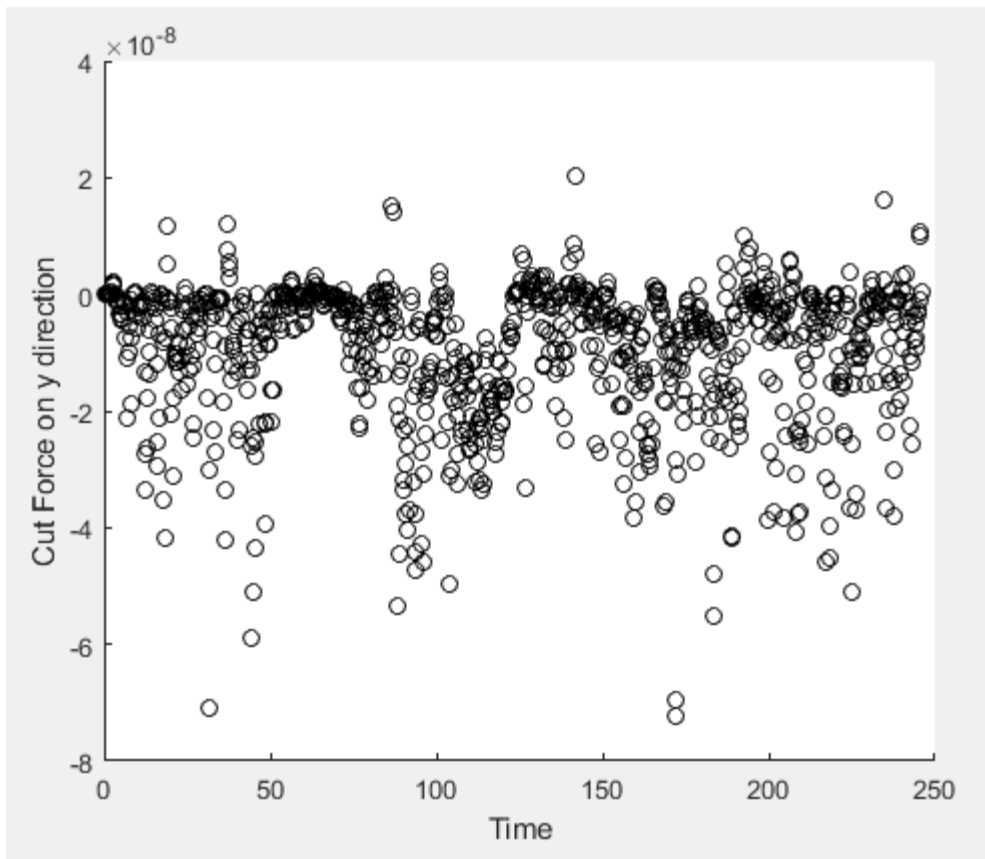
Για ενέργεια συνοχής $D/50$ παρατηρούμε ότι το μήκος του αποβλίττου είναι λίγο μεγαλύτερο της προηγούμενης περίπτωσης, πλησιάζοντας το ύψος των 35\AA . Το απόβλιττο συνεχίζει να έχει συμπαγή μορφή χωρίς θραύσματα. Η διασπορά των δυνάμεων κοπής στον άξονα x είναι σαφώς μεγαλύτερη εδώ, και σε αυτό μπορεί να οφείλεται το πάχος του αποβλίττου. Πάντως φαίνεται ξεκάθαρα η βελτιωμένη ποιότητα της επιφάνειας που έχει υποστεί την επεξεργασία. (Εικόνα 4.78).

Τα αποτελέσματα που προκύπτουν για τις μέσες τιμές είναι $CF_{x\mu} = 17.19\text{nN}$ και $CF_{y\mu} = 5.92\text{nN}$. Δηλαδή για τον άξονα x καταγράψαμε μείωση 14% στο μέσο όρο των δυνάμεων κοπής και για τον άξονα y μείωση 11.8%.

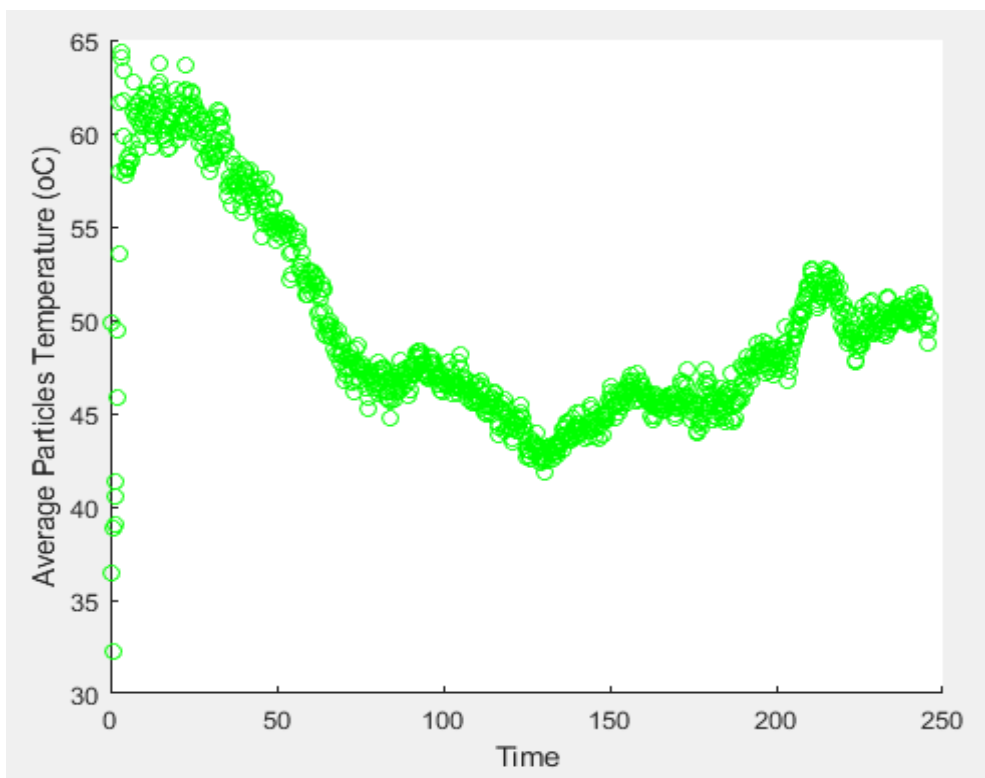
Όσον αφορά τη σωρευτική θερμοκρασία (Εικόνα 4.81) παρατηρούμε ότι προς το τελευταίο τέταρτο της διαδικασίας το διάγραμμα παρουσιάζει αυξητική τάση. Αυτό κυρίως οφείλεται στο σχήμα του αποβλίττου και τη συμπίεση των ατόμων του χαλκού ανάμεσα στο εργαλείο και το πακτωμένο τοίχωμα του τεμαχίου. Τα άτομα του χαλκού έχουν παραμείνει πολύ κοντά μεταξύ τους και το απόβλιττο στριμώνχεται στο τέλος της κατεργασίας, οπότε και οι θερμοκρασίες ανεβαίνουν στο συγκεκριμένο κομμάτι της κατεργασίας.



Εικόνα 4.79: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.80: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου



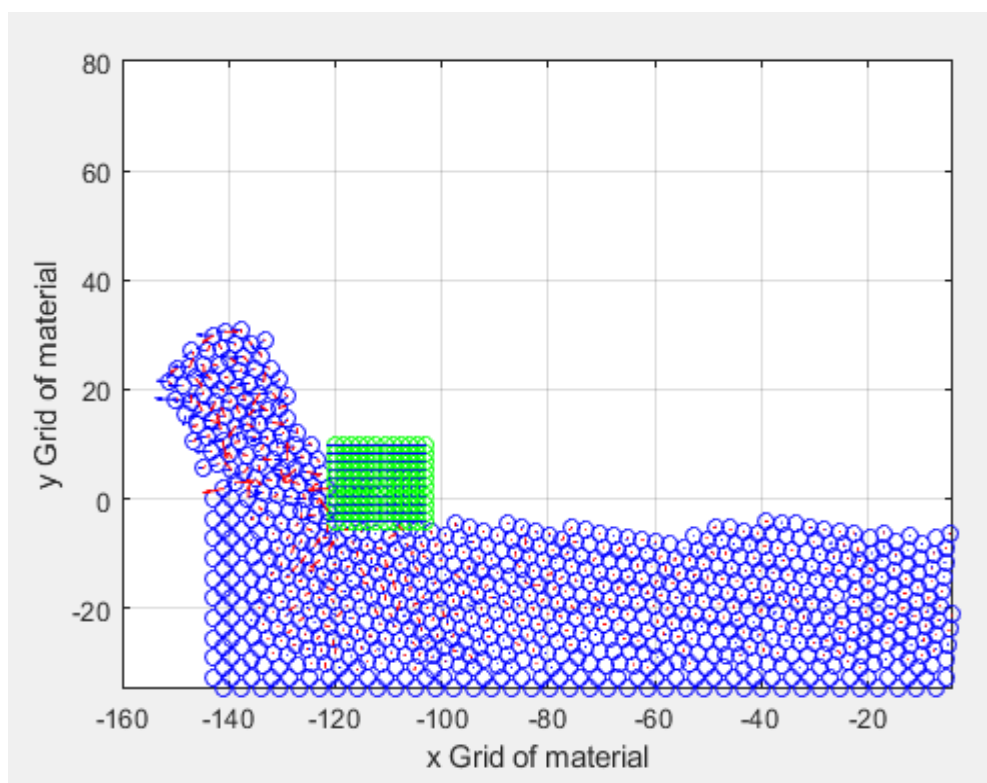
Εικόνα 4.81: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

4.4.4 Προσομοίωση 3d

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 3d είναι:

Προσομοίωση 3d	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0°
COHESION ENERGY D	0.00435
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	4 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	615 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

Πίνακας 4.16: Παράμετροι προσομοίωσης 3d



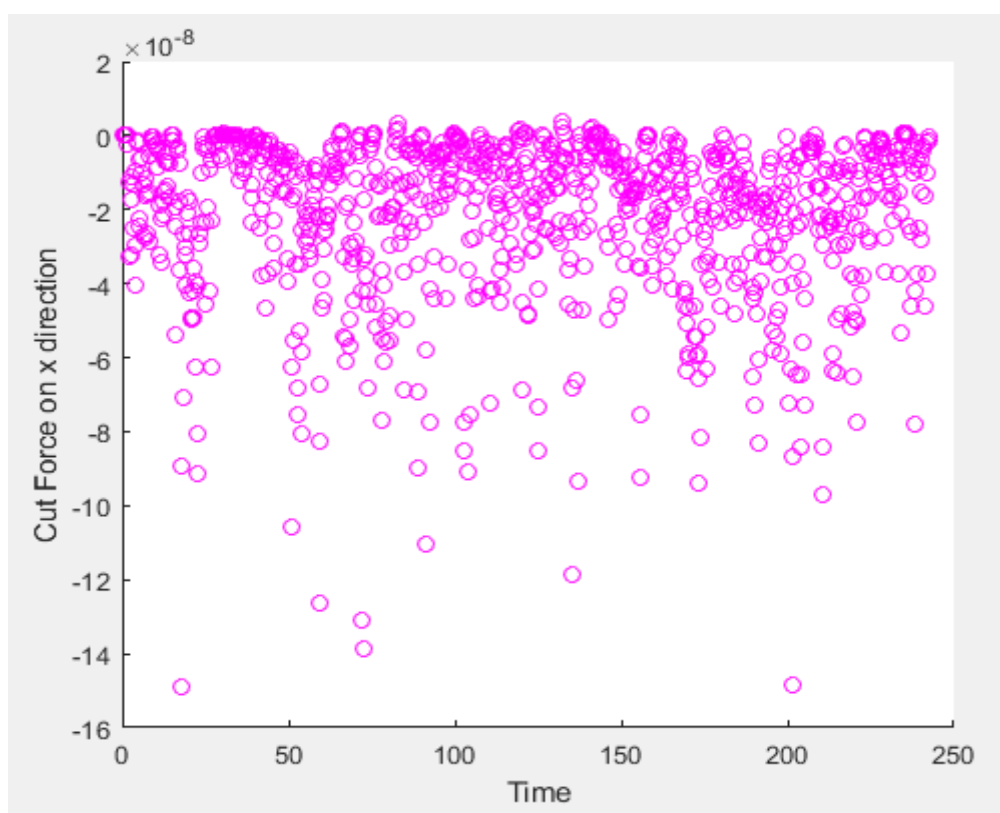
Εικόνα 4.82: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Τέλος, έχουμε τη δοκιμή για $D = 0.00435$, δηλαδή 20 φορές μικρότερη της αρχικής. Μέχρι τώρα έχουμε παρατηρήσει ότι αυτή η δοκιμή πλησιάζει τα αποτελέσματα αυτής με $D = 0.087$, είναι ίσως το μέγεθος που ξεκινά να δείχνει σαφή αποτελέσματα η επίπτωση της φθοράς του εργαλείου μας στις δυνάμεις κοπής της κατεργασίας.

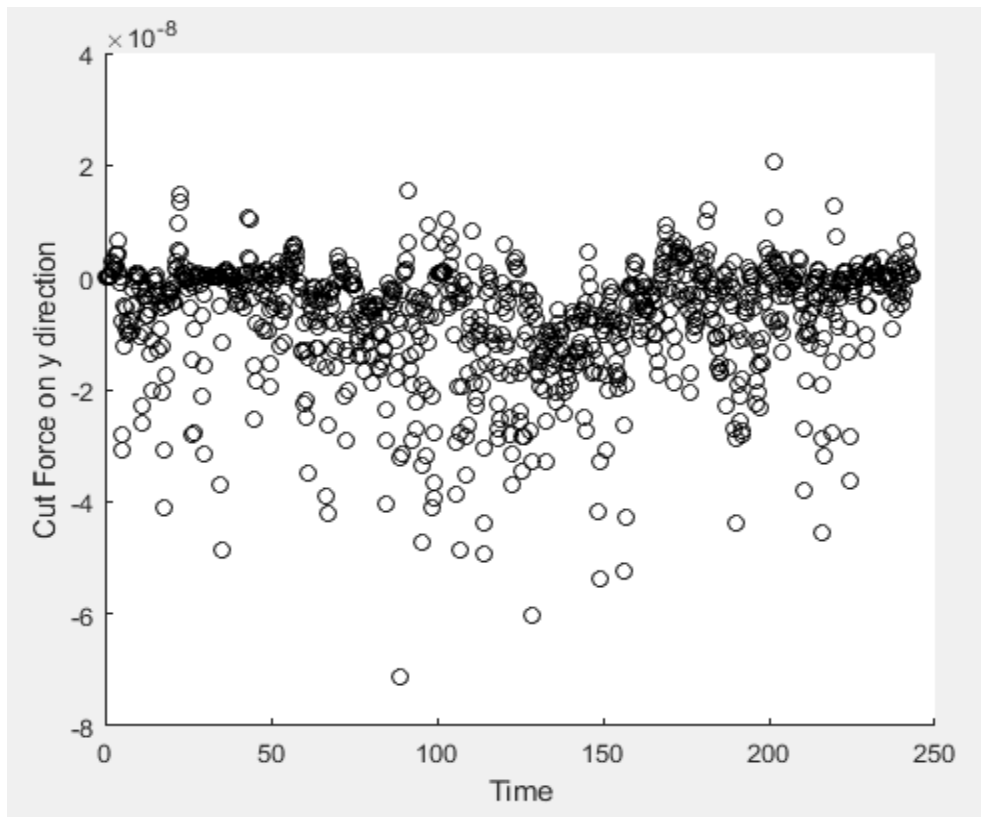
Στο σχήμα 4.82 βλέπουμε ότι το απόβλιττο έχει λεπτή μορφή και κινείται έντονα προς τα αριστερά σε σχέση με τις θέσεις που έχουν τα άλλα σχήματα αποβλίττων. Αυτό φανερώνει ότι οι δυνάμεις έχουν αυξηθεί συγκριτικά με τις περιπτώσεις 3b και 3c. Η φθορά πάντως του κόκκου διαμαντιού δεν επιτρέπει στο εργαλείο να αφήσει πίσω του στην κατεργασμένη επιφάνεια την καλύτερη ποιότητα.

Από τις μετρήσεις των διαγραμμάτων 4.83-4.84 επιβεβαιώνεται ότι οι δυνάμεις έχουν και πάλι αυξηθεί, βρίσκονται μάλιστα πολύ κοντά στις αρχικές τιμές της πρώτης περίπτωσης 3a. Οι μέσες τιμές των δυνάμεων κοπής κατά x και y είναι $CF_{x\mu} = 19.09\text{nN}$ και $CF_{y\mu} = 6.44\text{nN}$, δηλαδή ποσοστιαία μείωση για τον εκάστοτε άξονα 4.5% και 4%.

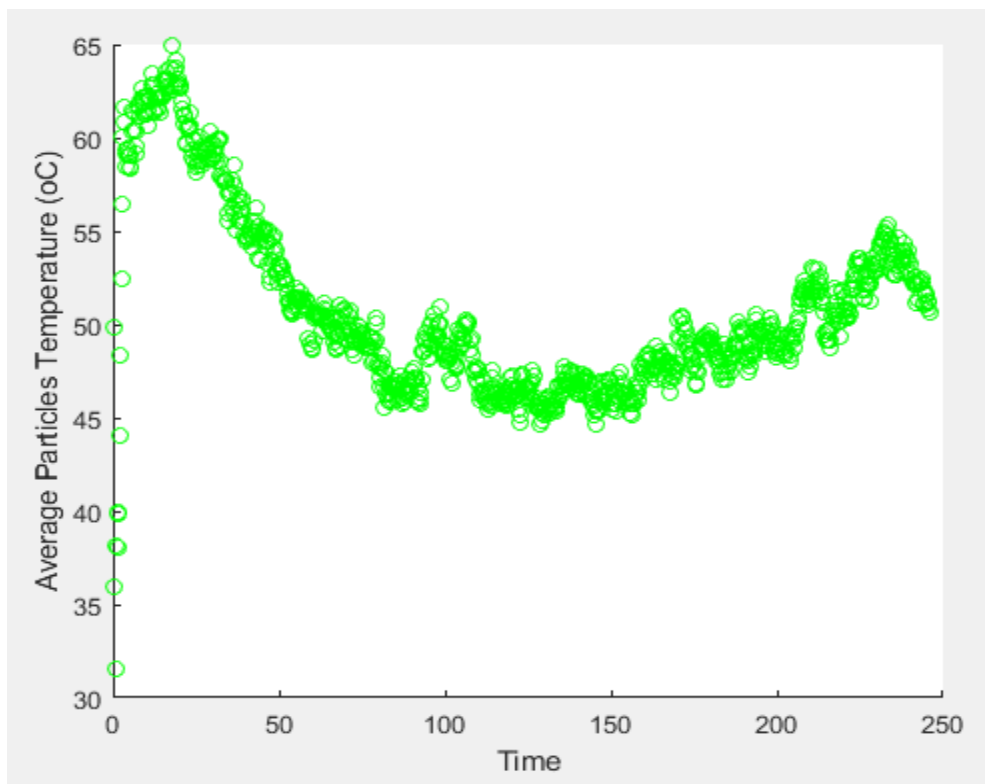
Η σωρευτική θερμοκρασία (Εικόνα 4.85) κυμαίνεται επί τω πλείστον ανάμεσα στους 45 και τους 55°C .



Εικόνα 4.83: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.84: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου



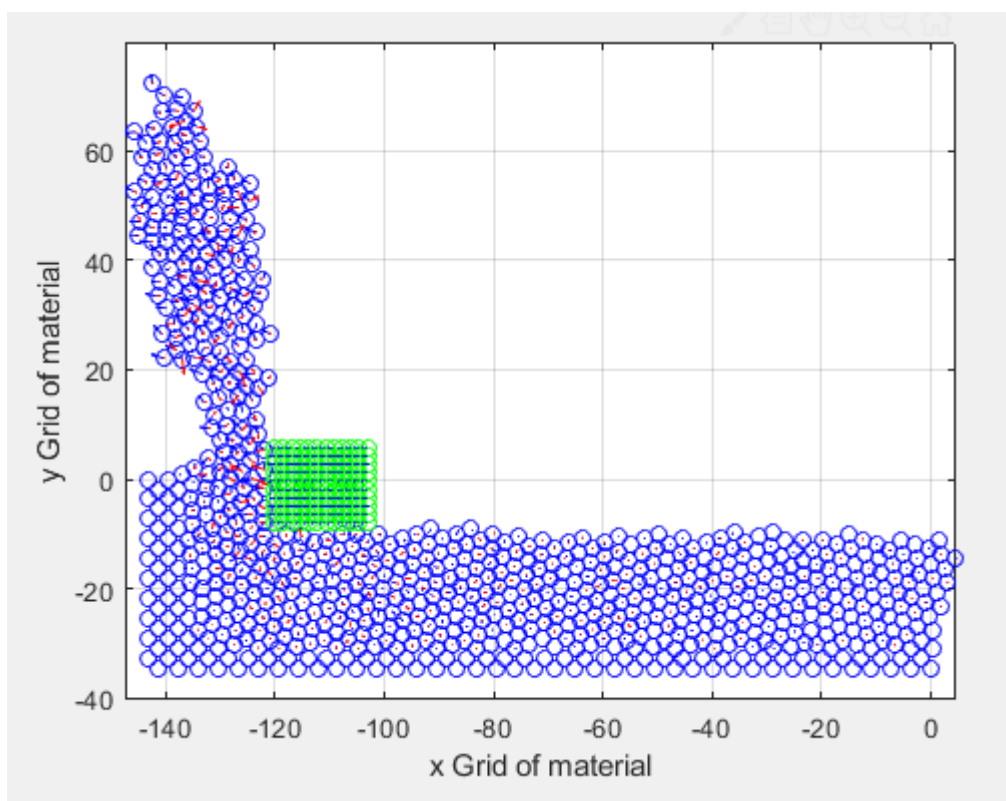
Εικόνα 4.85: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

4.4.5 Προσομοίωση 3e

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 3e είναι:

Προσομοίωση 3e	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0°
COHESION ENERGY D	0.087
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	8 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	615 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

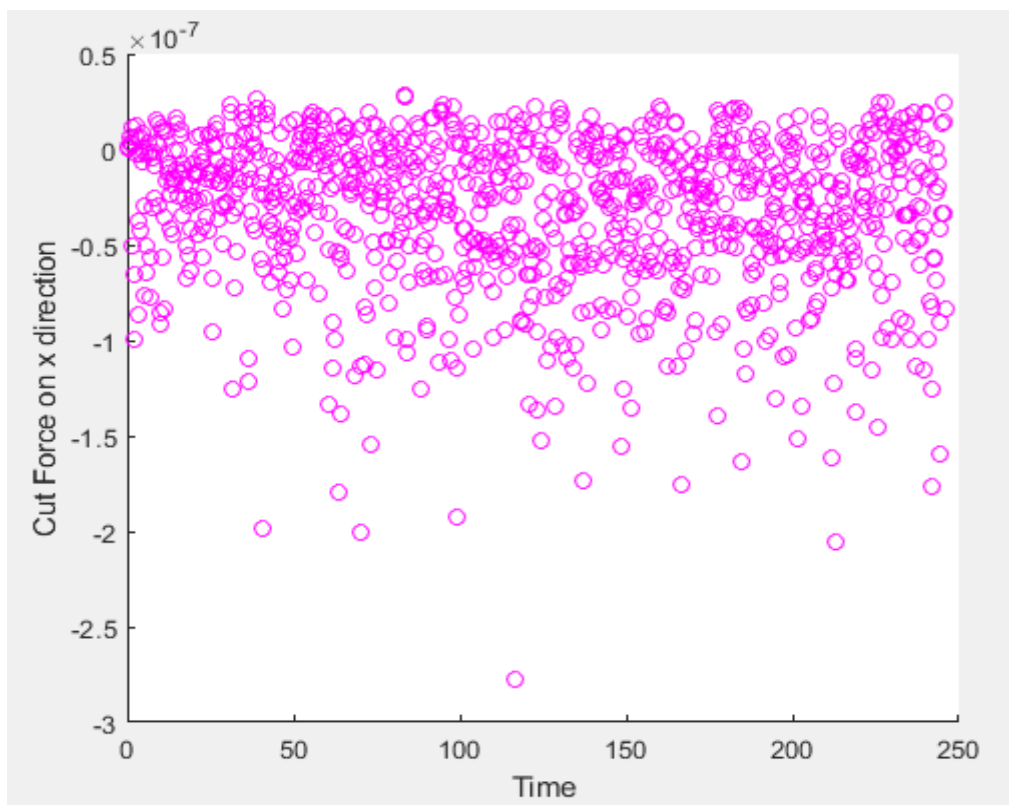
Πίνακας 4.17: Παράμετροι προσομοίωσης 3e



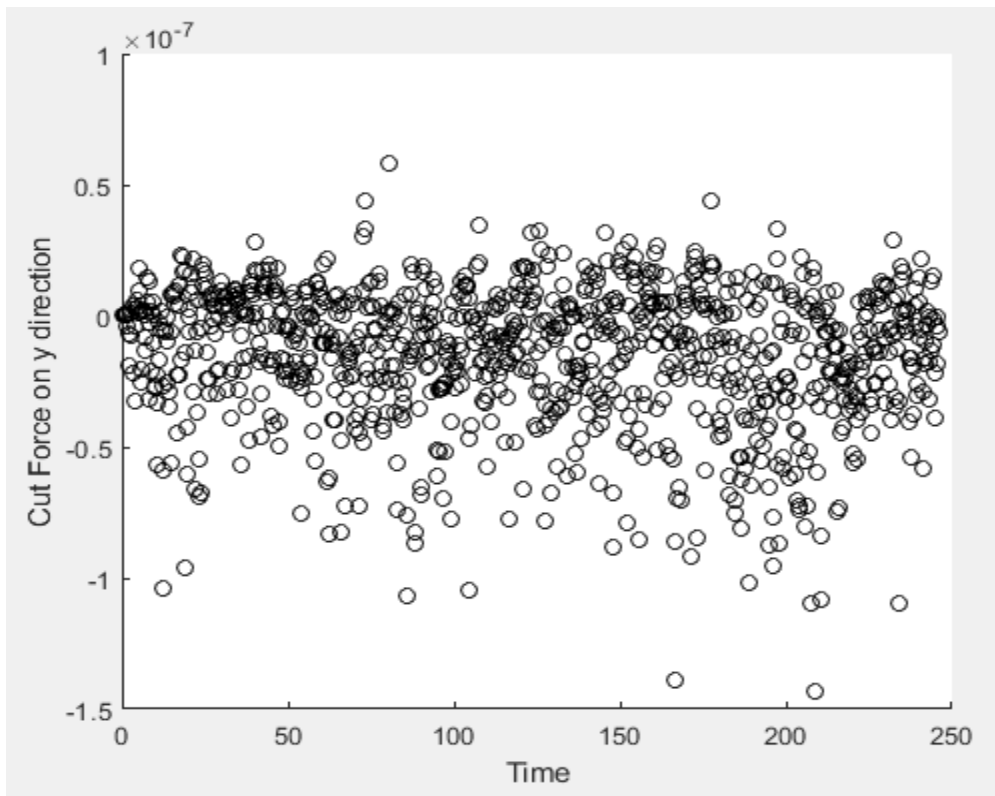
Εικόνα 4.86: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Με τις επόμενες 4 προσομοιώσεις που ακολουθούν (3e-3h) εξετάζουμε τα αποτελέσματα του κώδικά μας για βάθος κοπής 8Å, ώστε να εξάγουμε συμπεράσματα και πάλι για τις μετρήσεις που λαμβάνουμε και τις διαφορές που παρατηρούμε, τόσο στο σχήμα του αποβλίττου και στην ποιότητα της επεξεργασμένης επιφάνειας όσο και στις δυνάμεις κοπής που αναπτύσσονται στους άξονες x και y καθώς επίσης και τη σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του τεμαχίου μας, ανάλογα με την αύξηση της φθοράς της επιφάνειας του κόκκου διαμαντιού. Δε θα μπορούμε σε λεπτομερή σύγκριση των περιπτώσεων 3a και 3e μιας και αυτό είναι αντικείμενο προηγούμενης διπλωματικής, άρα θα εξετάσουμε τις διαφορές πάνω στις επιπτώσεις αλλαγής της ενέργειας συνοχής των ατόμων του εργαλείου. Στην Εικόνα 4.86 παρατηρούμε πάντως συνοπτικά παρατηρούμε ότι το ύψος του αποβλίττου είναι μεγαλύτερο, προφανώς λογικό, μιας και λόγω του μεγαλύτερου βάθους κοπής έχουμε μεγαλύτερο όγκο αποβλίττου και ταυτόχρονα μεγαλύτερη κάθετη δύναμη.

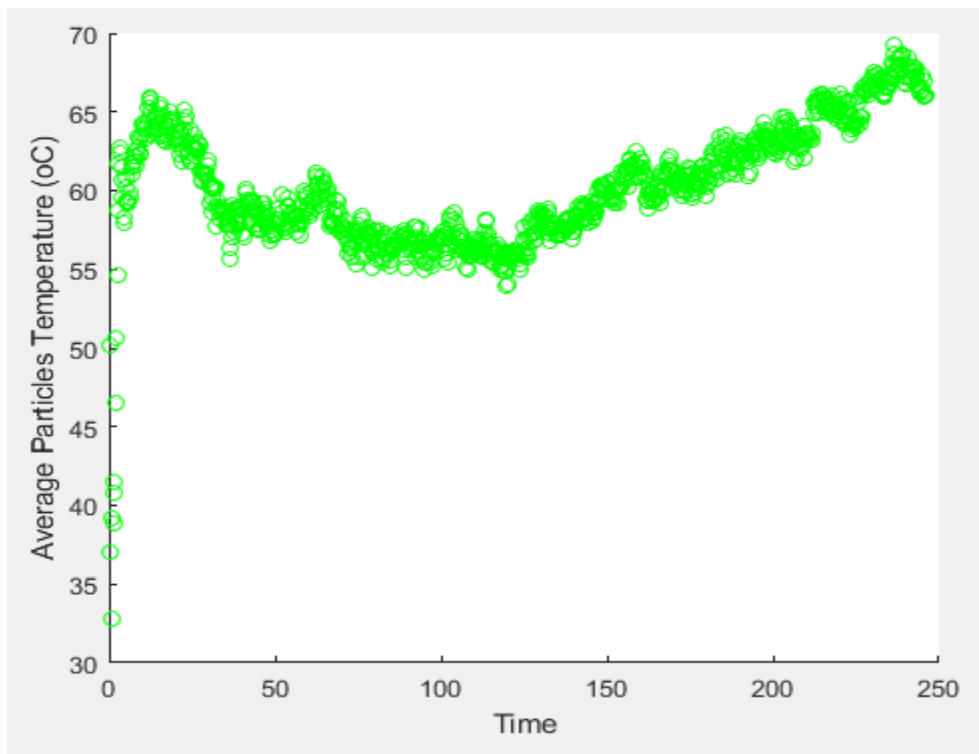
Οι δυνάμεις κοπής κατά x και y φαίνονται στα διαγράμματα 4.87-5.88 και η σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του τεμαχίου στο σχήμα 4.89. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν για τις μέσες τιμές είναι $CF_{xμ} = 25.22nN$ και $CF_{yμ} = 9.88nN$. Παρατηρούμε ότι σε σχέση με την Προσομοίωση 3a η ποσοστιαία αύξηση είναι 26.2% και 47.3% αντίστοιχα. Η διαφορά που προκύπτει είναι μικρότερη των 2a-2e επειδή η ταχύτητα είναι κατά το ήμισυ μικρότερη, άρα και η κατεργασία πιο ευγενική προς γενικότερα όπως έχουμε δει ήδη (3a-3d). Επίσης η μέγιστη θερμοκρασία αγγίζει τους 70°C.



Εικόνα 4.87: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.88: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου



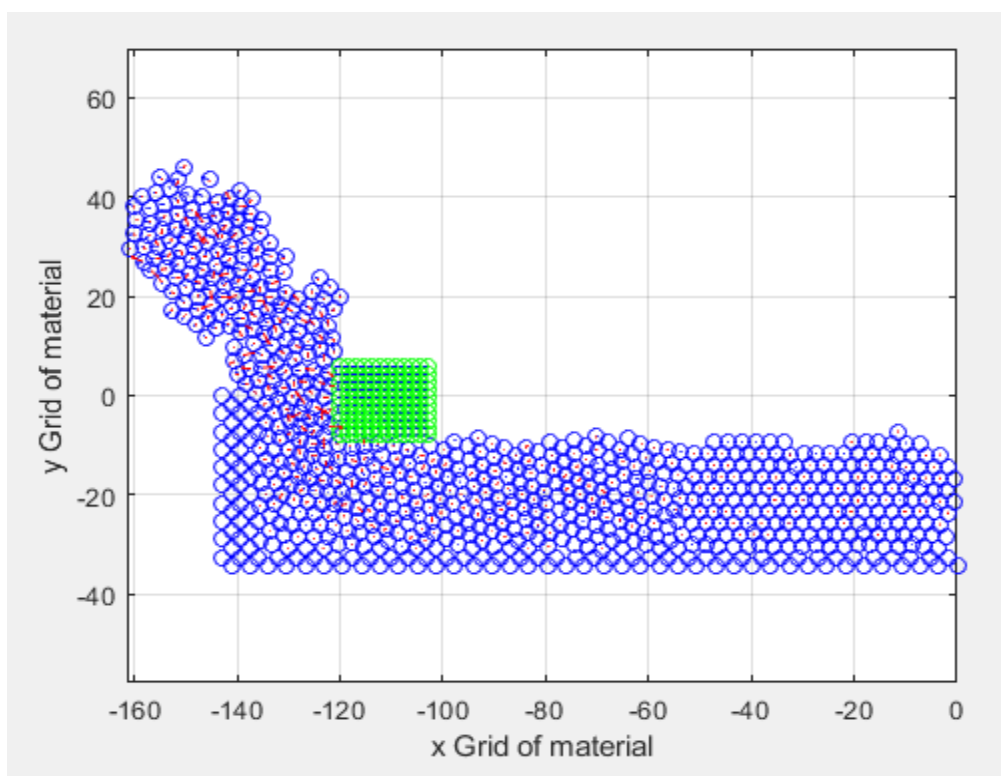
Εικόνα 4.89: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

4.4.6 Προσομοίωση 3f

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 3f είναι:

Προσομοίωση 3f	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0°
COHESION ENERGY D	0.00087
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	8 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	615 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

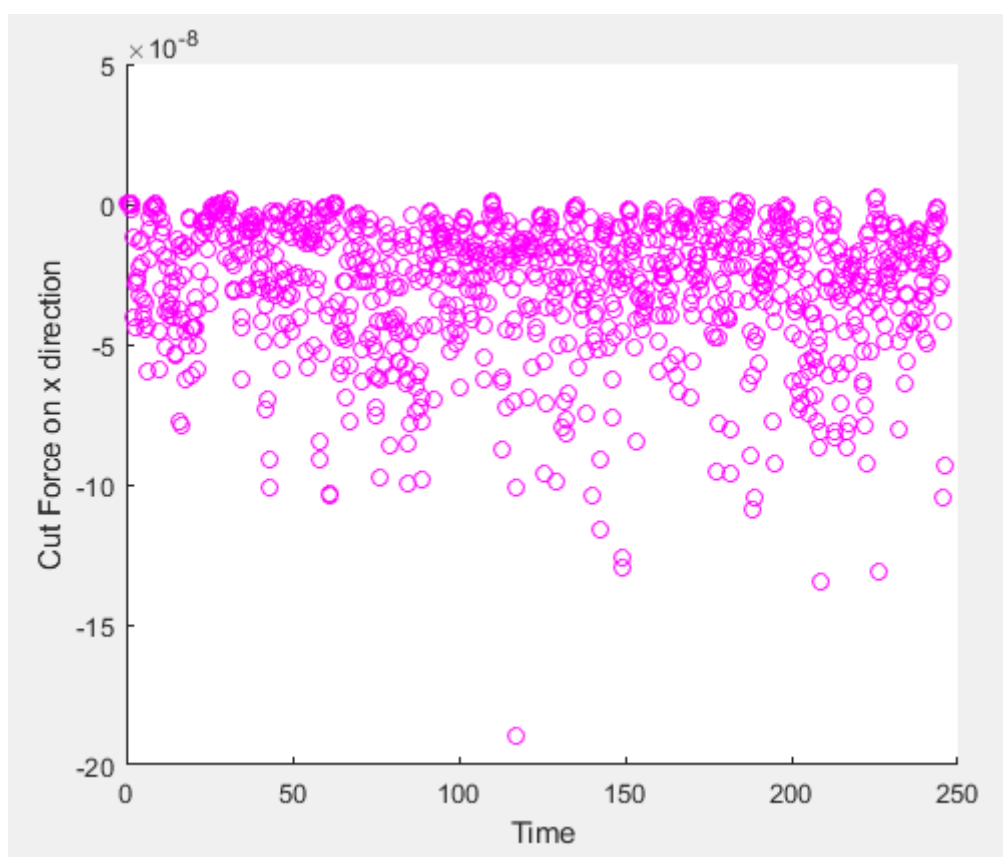
Πίνακας 4.18: Παράμετροι προσομοίωσης 3f



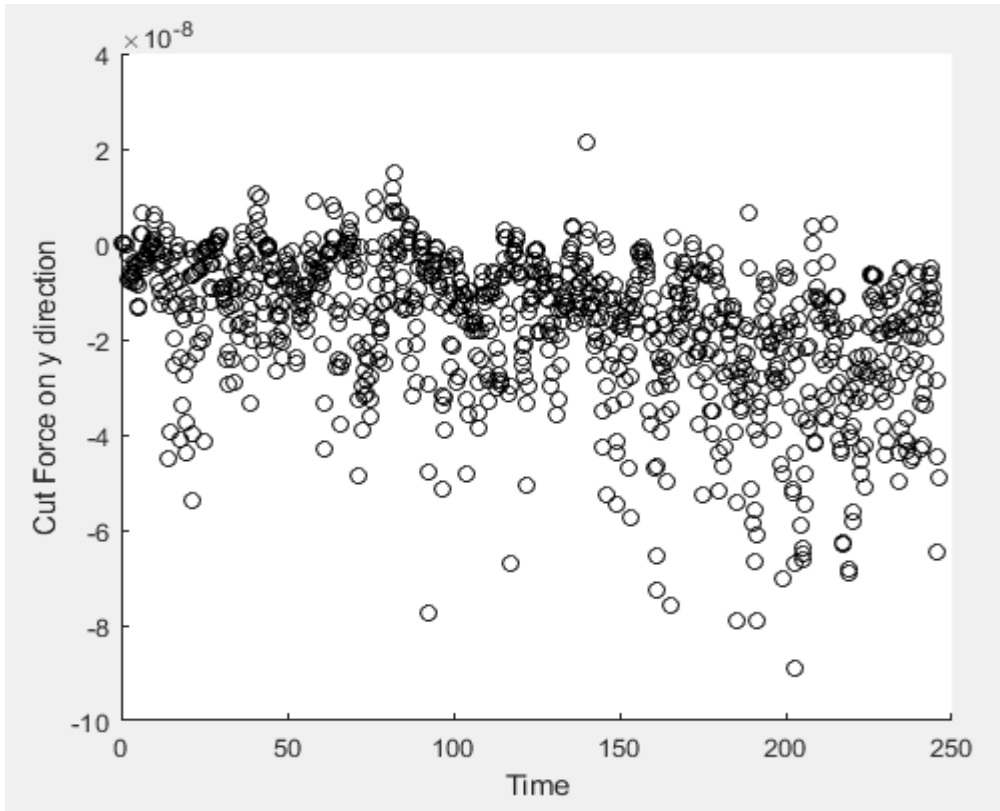
Εικόνα 4.90: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Στην Εικόνα 4.90 παρατηρούμε και πάλι ότι απόβλιττο έχει πολύ πιο συμπαγή μορφή, αποτέλεσμα των μικρότερων δυνάμεων που έχει δεχτεί κατά την κατεργασία. Για άλλη μια φορά είναι αισθητή η διαφορά που προκαλείται από την αλλαγή της τιμής της ενέργειας συνοχής στον κώδικα μας. Επιπλέον δείγμα της φθοράς του εργαλείου είναι και η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας. Έστω και σε νανοεπίπεδο, έχουμε δει σε άλλα στιγμιότυπα πολύ πιο λείες επιφάνειες. Εδώ το εργαλείο έχει υποστεί τη μέγιστη φθορά που μελετάμε και η επιφάνειά του δεν κάνει το ίδιο καλή κατεργασία με την ιδανική έκδοση. Στην Εικόνα 4.92 παρατηρούμε πόσο μικρή είναι η διασπορά των τιμών της CF_y και εξηγείται το μικρότερο μήκος που αποκτά στο τέλος της κατεργασίας το απόβλιττο. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν για τις μέσες τιμές είναι $CF_{xμ} = 16.72nN$ και $CF_{yμ} = 7.58nN$, μείωση 33.7% και 23.7% αντίστοιχα. Στις αντίστοιχες δοκιμές για τη διπλάσια ταχύτητα με το αντίστοιχο βάθος κοπής είδαμε μείωση 34.2% και 23.8%, οπότε προκύπτουν παραπλήσια αποτελέσματα.

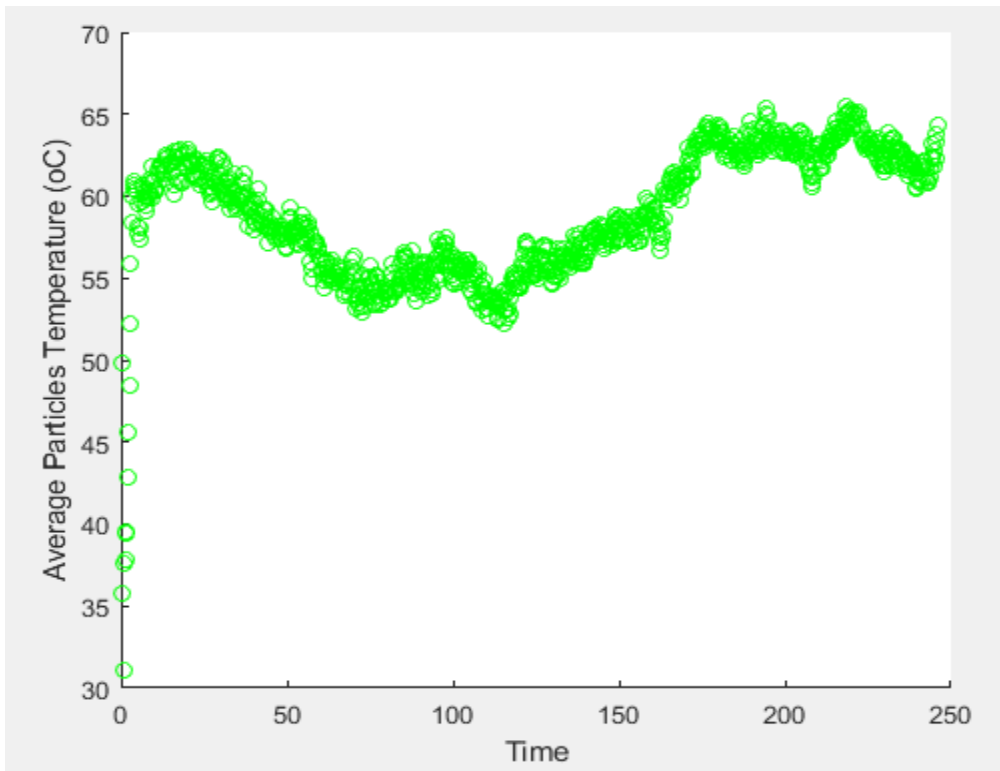
Όσο για τη σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων χαλκού (Εικόνα 4.93) βλέπουμε ότι η μέση θερμοκρασία τους κυμαίνεται στους $55^{\circ}C$ για το μεγαλύτερο διάστημα της κατεργασίας, ενώ και πάλι καθώς το απόβλιττο συμπιέζεται μεταξύ του κόκκου διαμαντιού και των πακτωμένων τοιχωμάτων του εργαλείου αυξάνεται αγγίζοντας τους $65^{\circ}C$.



Εικόνα 4.91: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.92: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου



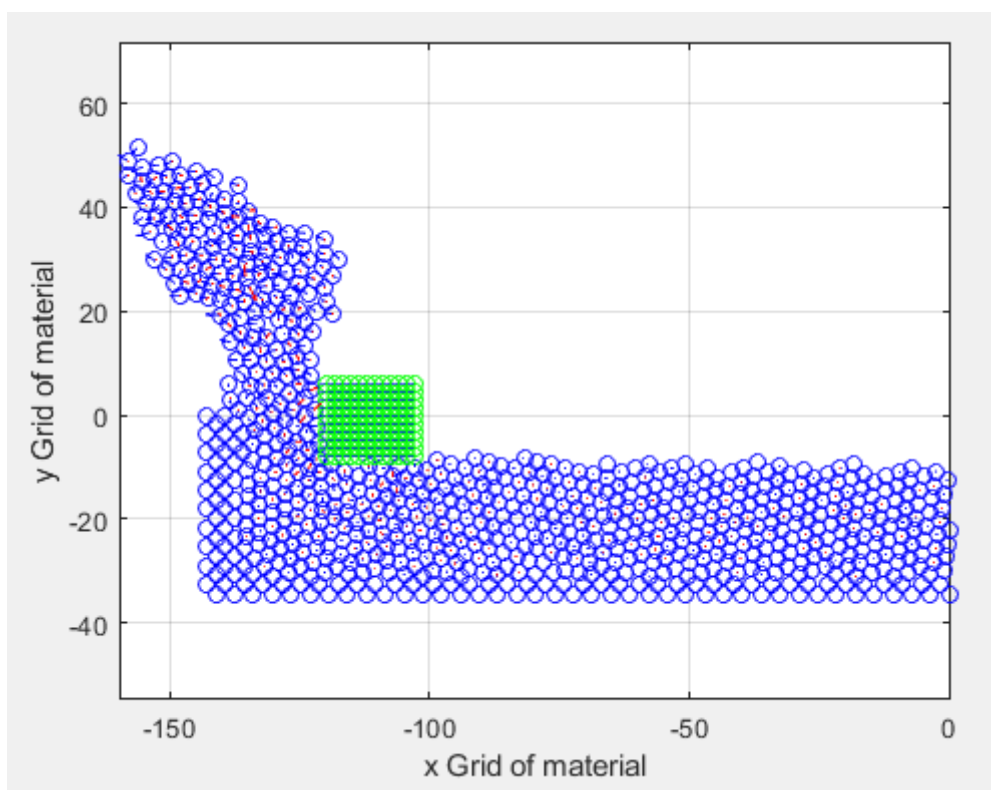
Εικόνα 4.93: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

4.4.7 Προσομοίωση 3g

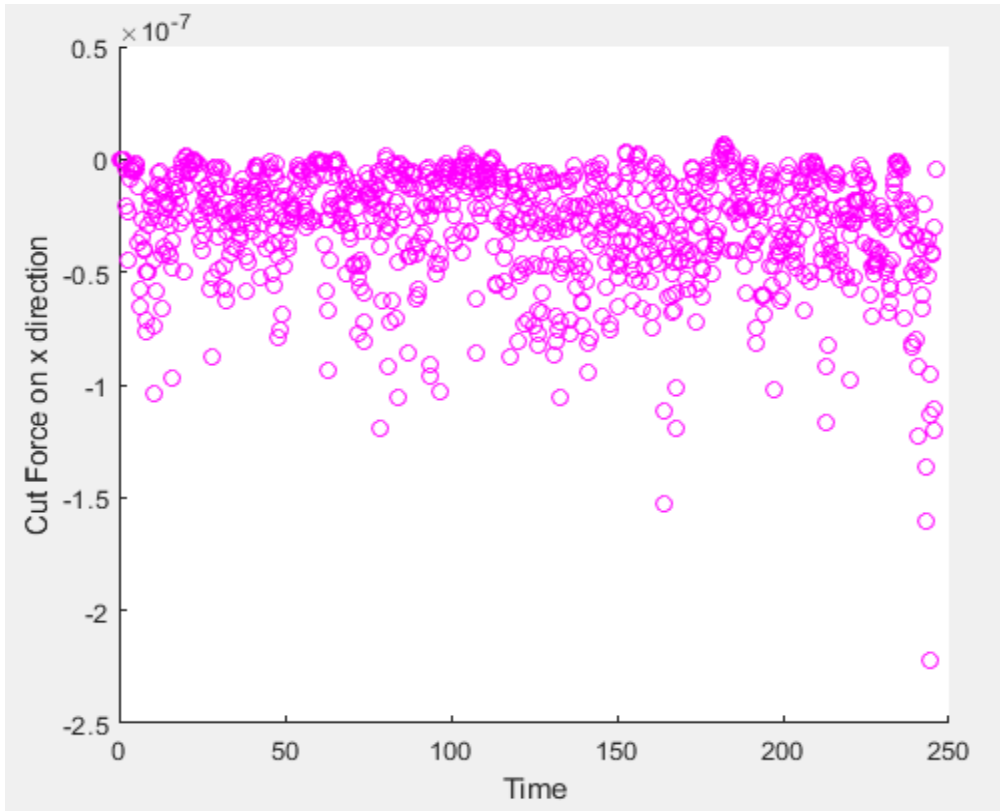
Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 3g είναι:

Προσομοίωση 3g	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0°
COHESION ENERGY D	0.00174
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	8 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	615 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

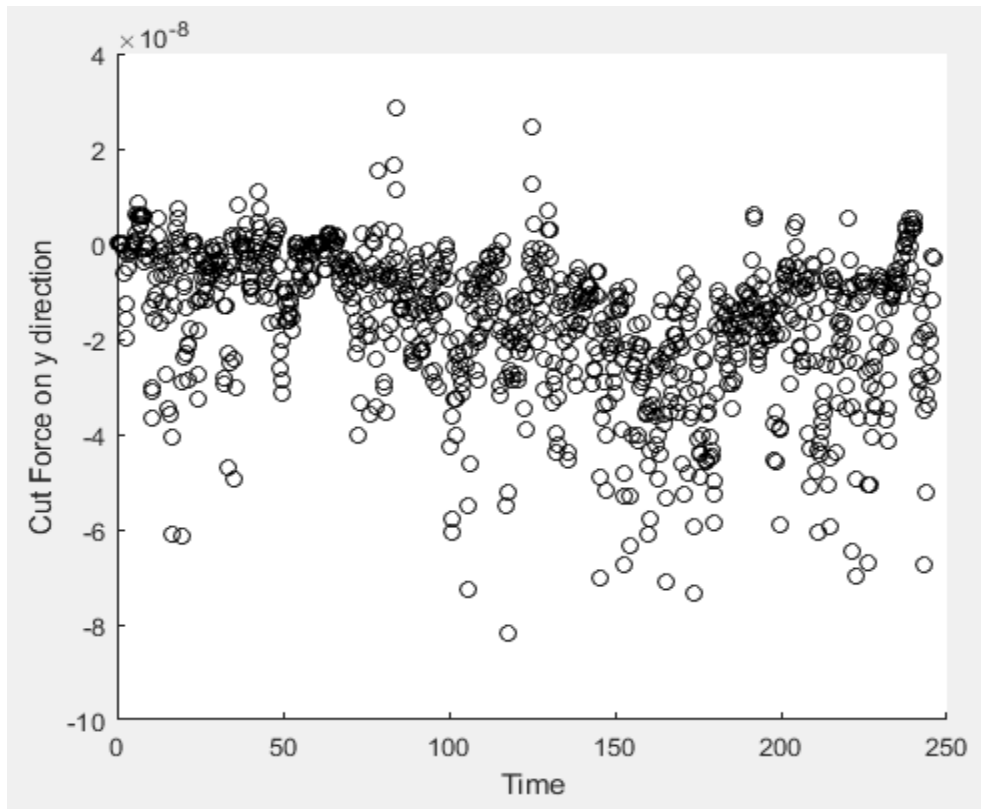
Πίνακας 4.19: Παράμετροι προσομοίωσης 3g



Εικόνα 4.94: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας



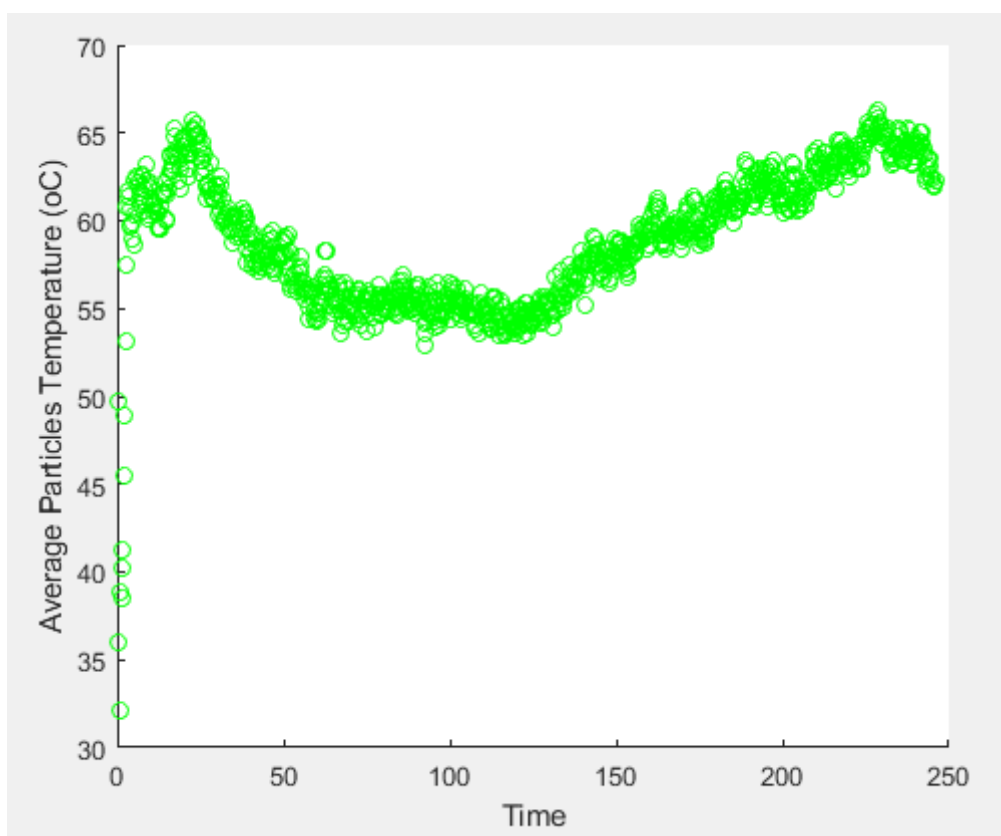
Εικόνα 4.95: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.96: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου

Για ενέργεια συνοχής D/50 παρατηρούμε ότι το απόβλιττο έχει μεγαλύτερο μήκος από την προηγούμενη περίπτωση. Παρατηρούμε ότι συνεχίζει να έχει συμπαγή μορφή χωρίς θραύσματα, ενώ από το σχήμα του φαίνεται ότι τα άτομα που αποτελούν το απόβλιττο έχουν μεγαλύτερη ταχύτητα από την Προσομοίωση 3f. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν για τις μέσες τιμές είναι $CF_{x\mu} = 21.34\text{nN}$ και $CF_{y\mu} = 8.76\text{nN}$. Παρατηρούμε κάτι που προέκυψε και στις δοκιμές με το προηγούμενο βάθος κοπής (3a-3d). Η μείωση εδώ είναι μεγαλύτερη καθώς μειώνουμε και πάλι τη φθορά πλησιάζοντας στην ιδανική περίπτωση. Πλέον για τον άξονα x καταγράψαμε μείωση 15.4% στο μέσο όρο των δυνάμεων κοπής και για τον άξονα y μείωση 11.3%, οπότε σε μεγαλύτερο βάθος και με την ίδια γεωμετρία ανοίγει η ψαλίδα της επίπτωσης που προκαλεί η φθορά της επιφάνειας του διαμαντιού στις μετρήσεις.

Όσον αφορά τη σωρευτική θερμοκρασία (Εικόνα 4.61) αυτή φτάνει το μέγιστο των 67.2°C .



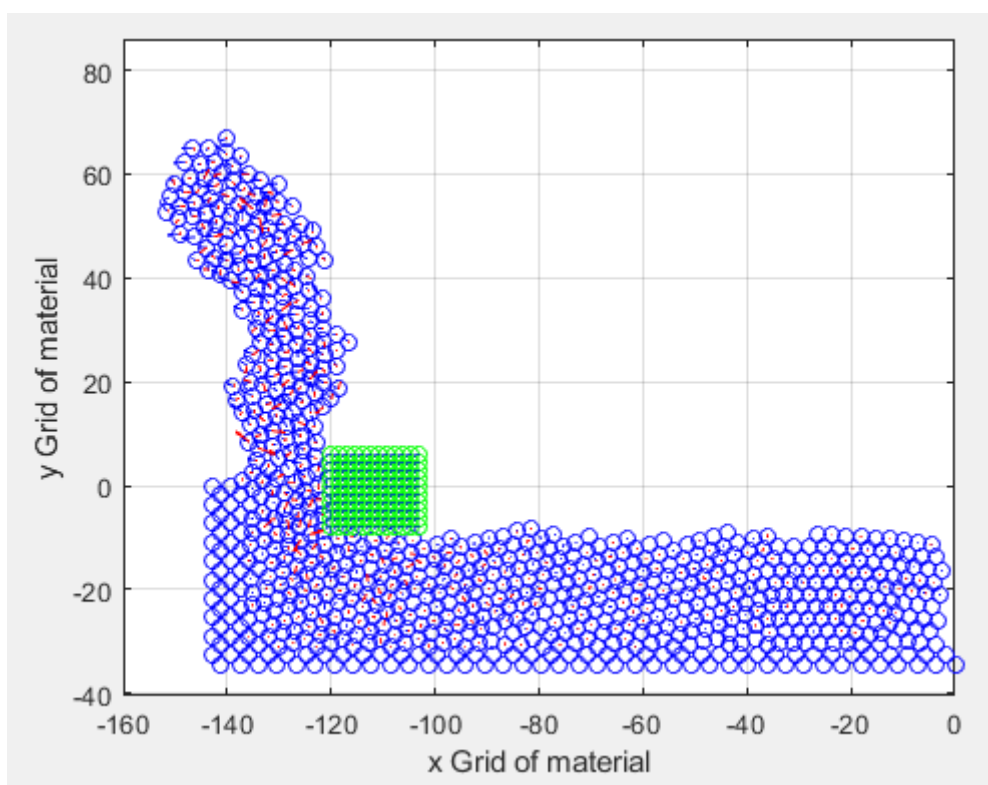
Εικόνα 4.97: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

4.4.8 Προσομοίωση 3h

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 3h είναι:

Προσομοίωση 3h	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ	Διαμάντι
ΓΩΝΙΑ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΩΣ ΠΡΟΣ ΤΟ ΤΕΜΑΧΙΟ	0°
COHESION ENERGY D	0.00435
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	8 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	615 m/s
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	1 fsec

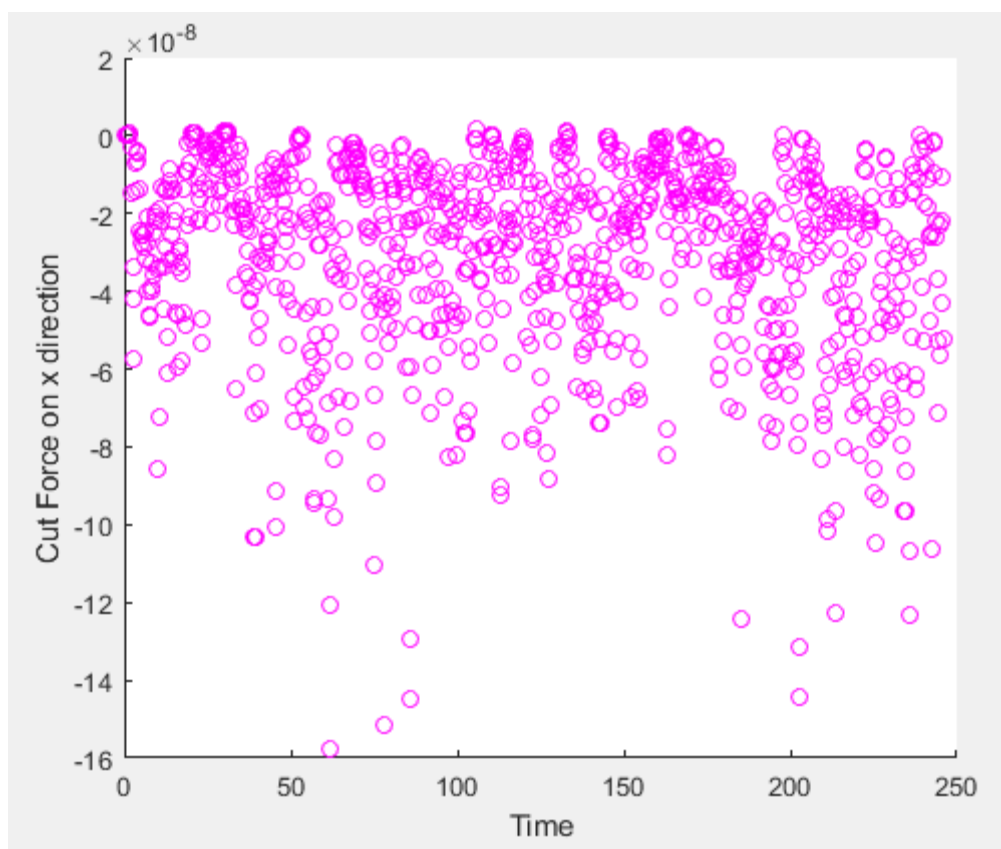
Πίνακας 4.20: Παράμετροι προσομοίωσης 3h



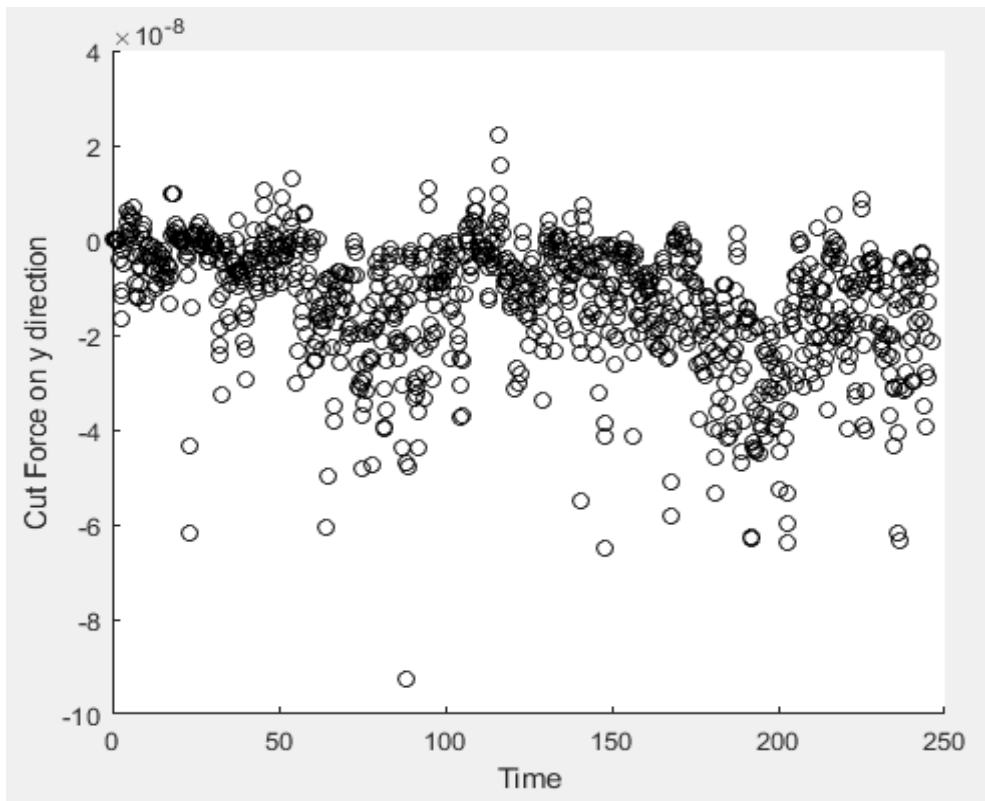
Εικόνα 4.98: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης στο τέλος της κατεργασίας

Τέλος, δοκιμάζουμε στον κώδικα και την περίπτωση για $D = 0.00435$, δηλαδή 20 φορές μικρότερη ενέργεια συνοχής από την αρχική.

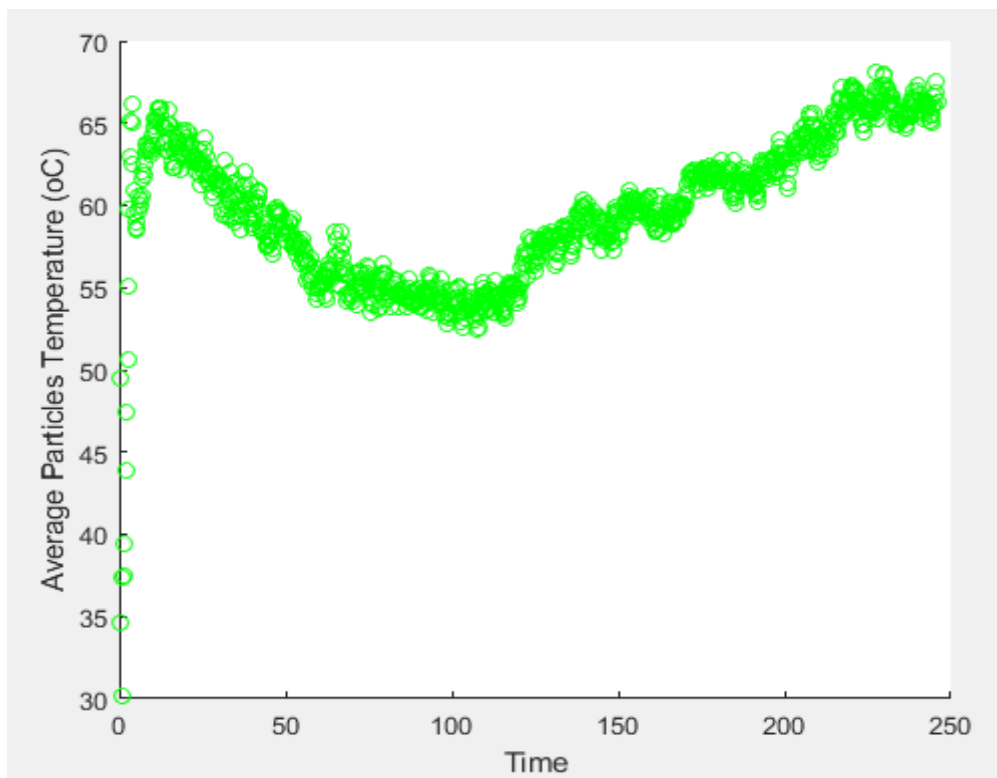
Στο σχήμα 4.62 βλέπουμε ότι το απόβλιττο έχει λεπτή μορφή και σε ύψος ξεπερνά τα 60\AA . Είναι φανερό ότι το εργαλείο ασκεί μεγαλύτερες δυνάμεις στην επιφάνεια του χαλκού καθώς φθείρεται πολύ λιγότερο και ως αποτέλεσμα υπερσχύει των συνεκτικών δυνάμεων των ατόμων του χαλκού, με αποτέλεσμα το μήκος του αποβλίττου να μεγαλώνει καθώς τα άτομα δεν μένουν κοντά το ένα με το άλλο. Πράγματι, από τις μετρήσεις των διαγραμμάτων 4.99-4.100 επιβεβαιώνεται το παραπάνω πόρισμα. Οι μέσες τιμές των δυνάμεων κοπής κατά x και y είναι $CF_{x\mu} = 23.68\text{nN}$ και $CF_{y\mu} = 9.35\text{nN}$, δηλαδή ποσοστιαία μείωση για τον εκάστοτε άξονα 6.1% και 5.4%. Στην αντίστοιχη σύγκριση με τη διπλάσια ταχύτητα λάβαμε τιμές 5.7% και 4.8% αντίστοιχα, όποτε και εδώ η συμπεριφορά είναι παραπλήσια. Παρόμοια με τις προηγούμενες προσομοιώσεις, η διαφοροποίηση στην ποσοστιαία μείωση είναι μεγάλη, και ως προς τις προσομοιώσεις με βάθος 4\AA αλλά και ως προς την πρώτη σειρά προσομοιώσεων που οι δοκιμές περιλάμβαναν άλλη γεωμετρία εργαλείου. Οι τιμές για $D/20$ πλησιάζουν πολύ τις αρχικές (Προσομοίωση 3e). Η σωρευτική θερμοκρασία (Εικόνα 4.101) αγγίζει τους 68.4°C .



Εικόνα 4.99: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 4.100: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου

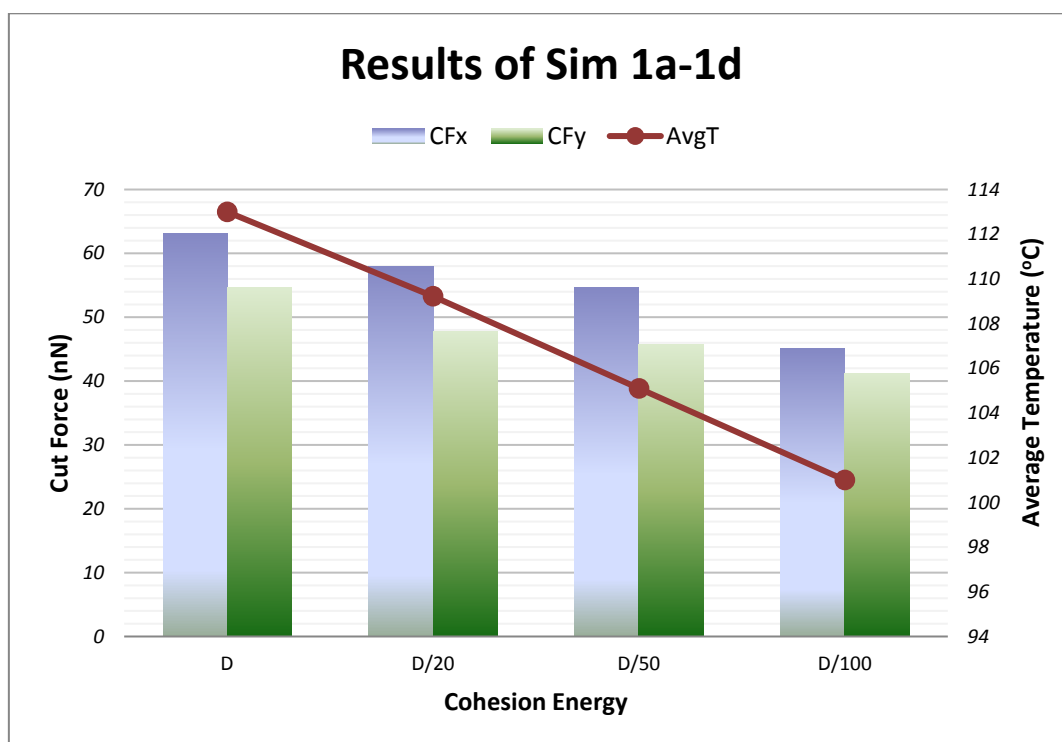


Εικόνα 4.101: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

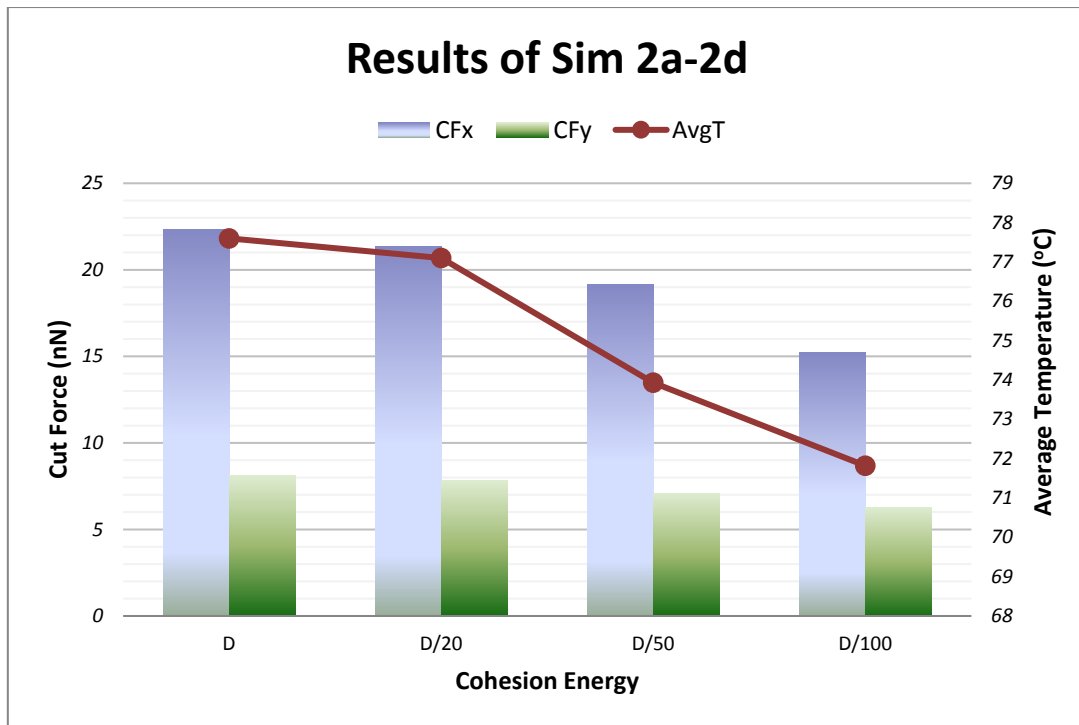
4.5 Σύγκριση Αποτελεσμάτων Προσομοιώσεων

Στη συγκεκριμένη παράγραφο θα γίνει μια προσπάθεια συγκέντρωσης και συνοπτικής παρουσίασης των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων που προηγήθηκαν. Επιπλέον, θα προχωρήσουμε σε γραφικές συγκρίσεις μέγιστων και μέσων τιμών για μεγέθη που μας απασχολήσαν.

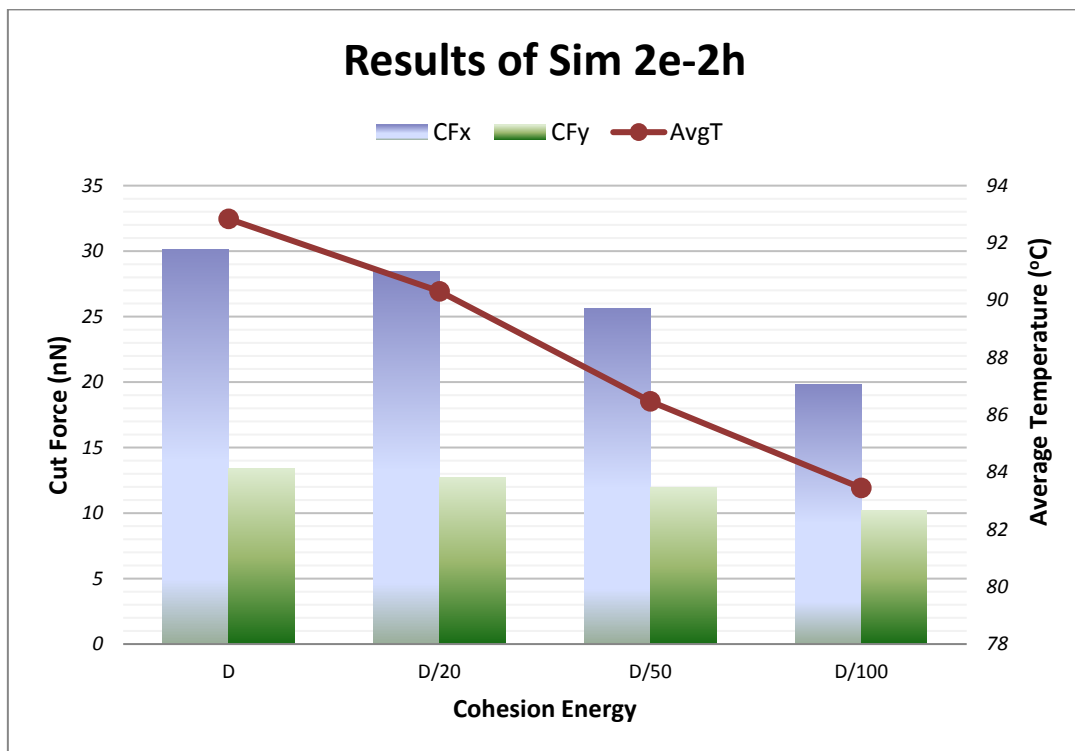
Αρχικά ξεκινάμε με τα την κάθε σειρά Προσομοιώσεων ξεχωριστά, ώστε να δούμε συγκεντρωμένα τα αποτελέσματα και να κατανοηθούν ευκολότερα τα σχόλια που κάναμε νωρίτερα. Στις Εικόνες 4.102-4.106 παρατηρούμε ότι όσο αυξάνεται η φθορά του υλικού κρατώντας όλους τους άλλους παράγοντες σταθερούς, τότε μειώνονται τόσο οι δυνάμεις κοπής και στους δύο άξονες όσο και η θερμοκρασίες που αναπτύσσονται κατά την κατεργασία.



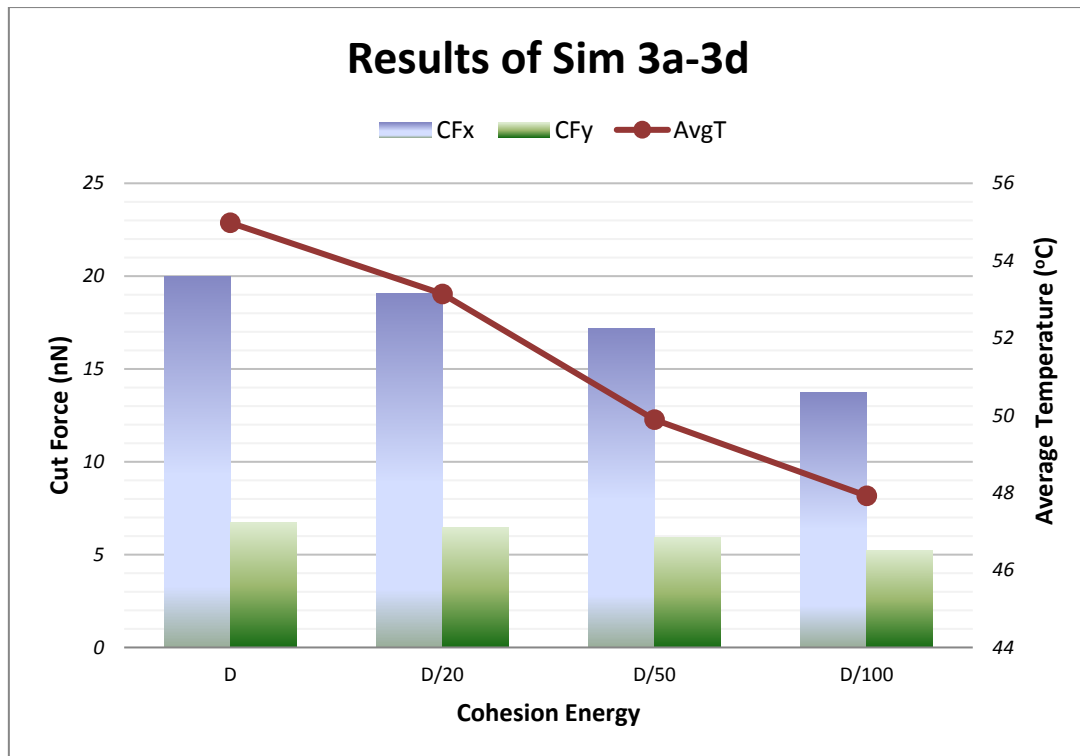
Εικόνα 4.102: Μέσες τιμές δυνάμεων κοπής και μέση θερμοκρασία για την 1η σειρά Προσομοιώσεων



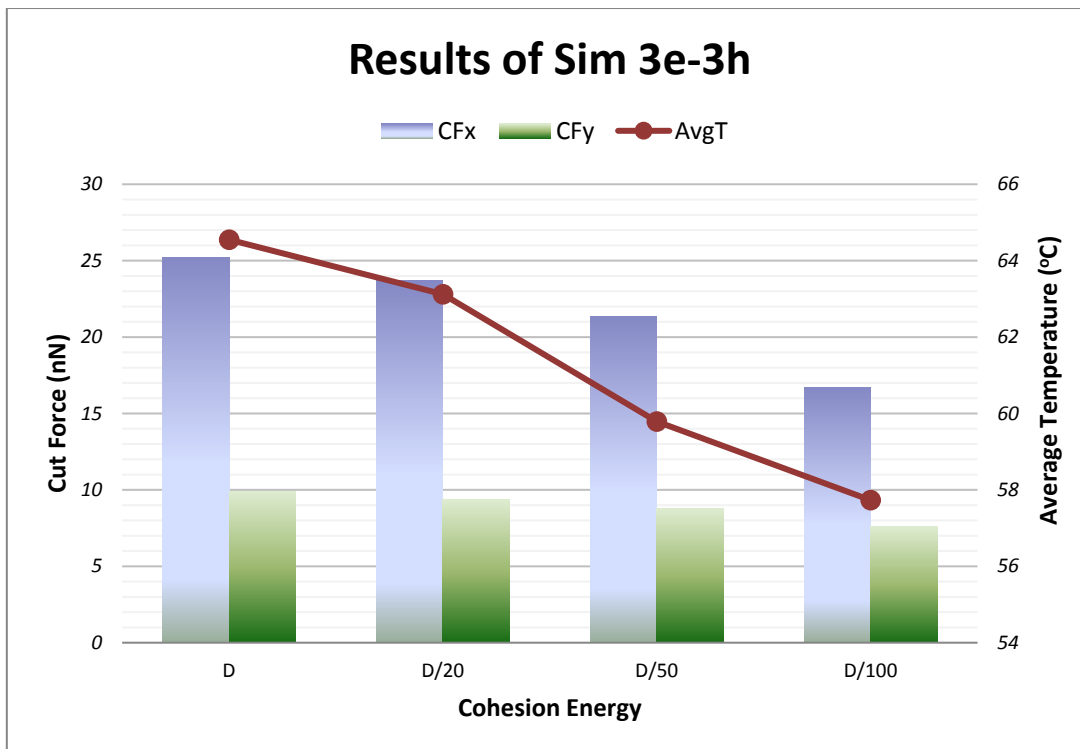
Εικόνα 4.103: Μέσες τιμές δυνάμεων κοπής και μέση θερμοκρασία για την 1η ομάδα της 2ης σειράς Προσομοιώσεων



Εικόνα 4.104: Μέσες τιμές δυνάμεων κοπής και μέση θερμοκρασία για την 2η ομάδα της 2ης σειράς Προσομοιώσεων



Εικόνα 4.105: Μέσες τιμές δυνάμεων κοπής και μέση θερμοκρασία για την 1η ομάδα της 3ης σειράς Προσομοιώσεων

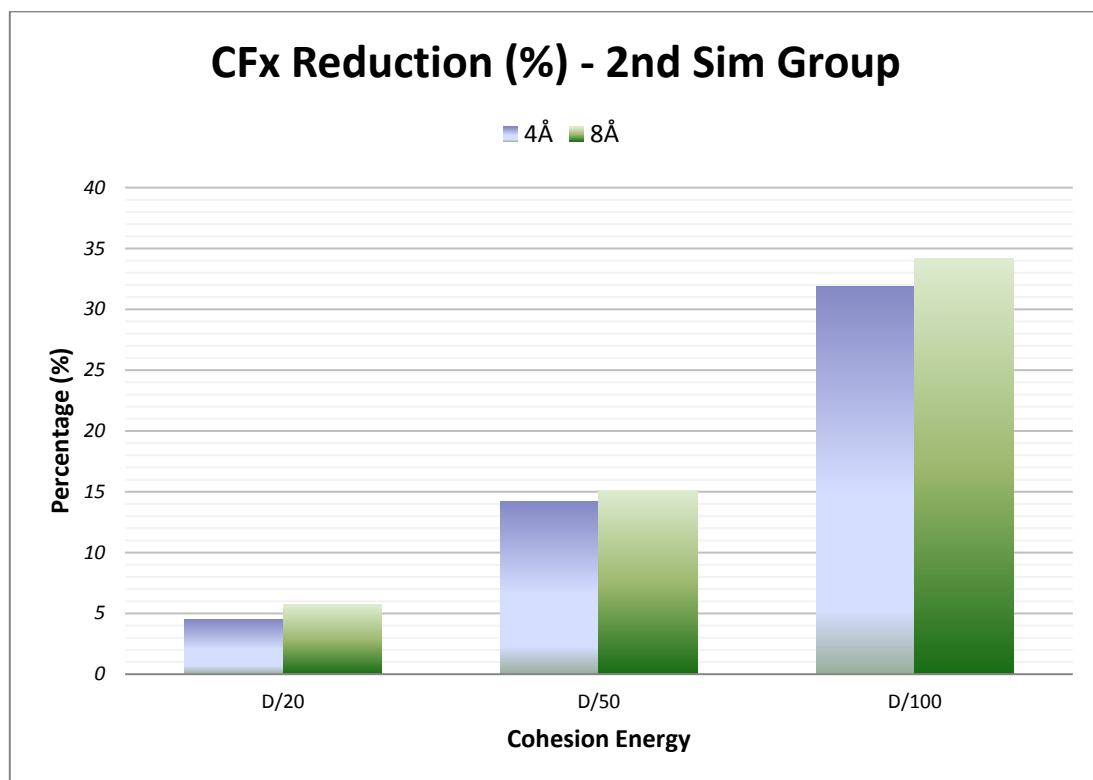


Εικόνα 4.106: Μέσες τιμές δυνάμεων κοπής και μέση θερμοκρασία για την 2η ομάδα της 3ης σειράς Προσομοιώσεων

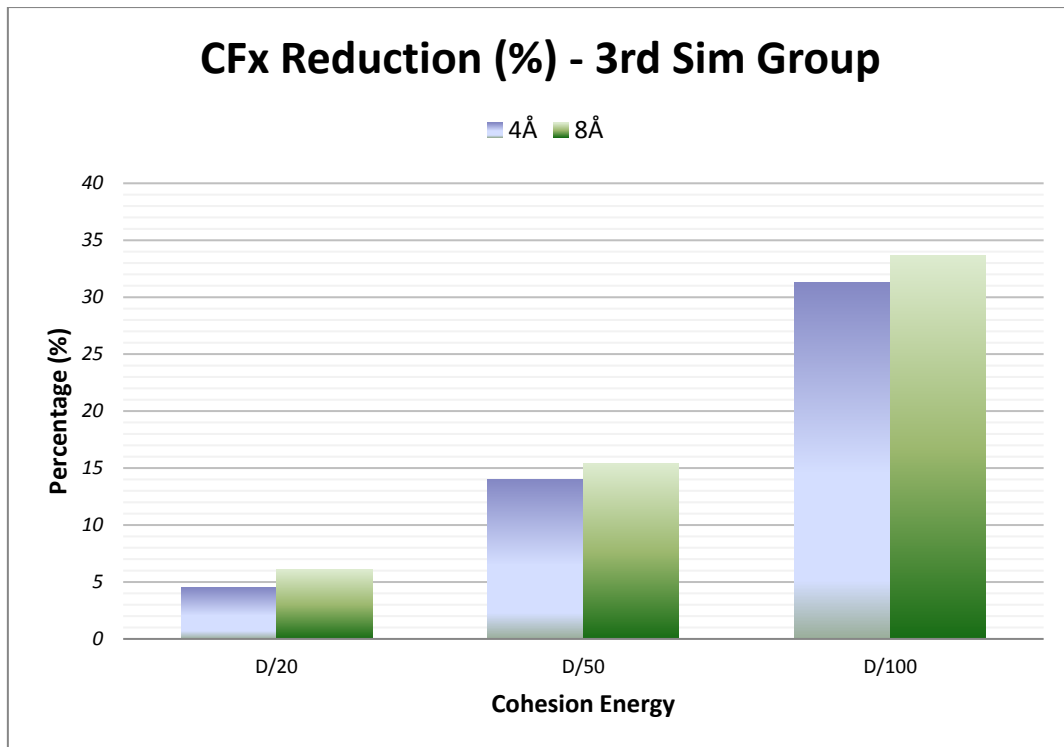
Στα διαγράμματα 4.107-4.110 που ακολουθούν συγκρίνουμε τις ποσοστιαίες μεταβολές των δυνάμεων κοπής ως προς τον άξονα x και y ξεχωριστά με την επίδραση του βάθους κοπής, ώστε να δούμε κατά πόσο επηρεάζεται η δύναμη κοπής κατά τα διάφορα επίπεδα φθοράς στα δύο βάθη κοπή που δοκιμάσαμε.

Παρατηρούμε ότι για τη δύναμη κοπής στον άξονα x, για μεγαλύτερο βάθος κοπής η ποσοστιαία μεταβολή της CF_x είναι μεγαλύτερη, για ίδιες αλλαγές στην ενέργεια συνοχής και άρα στη φθορά του εργαλείου.

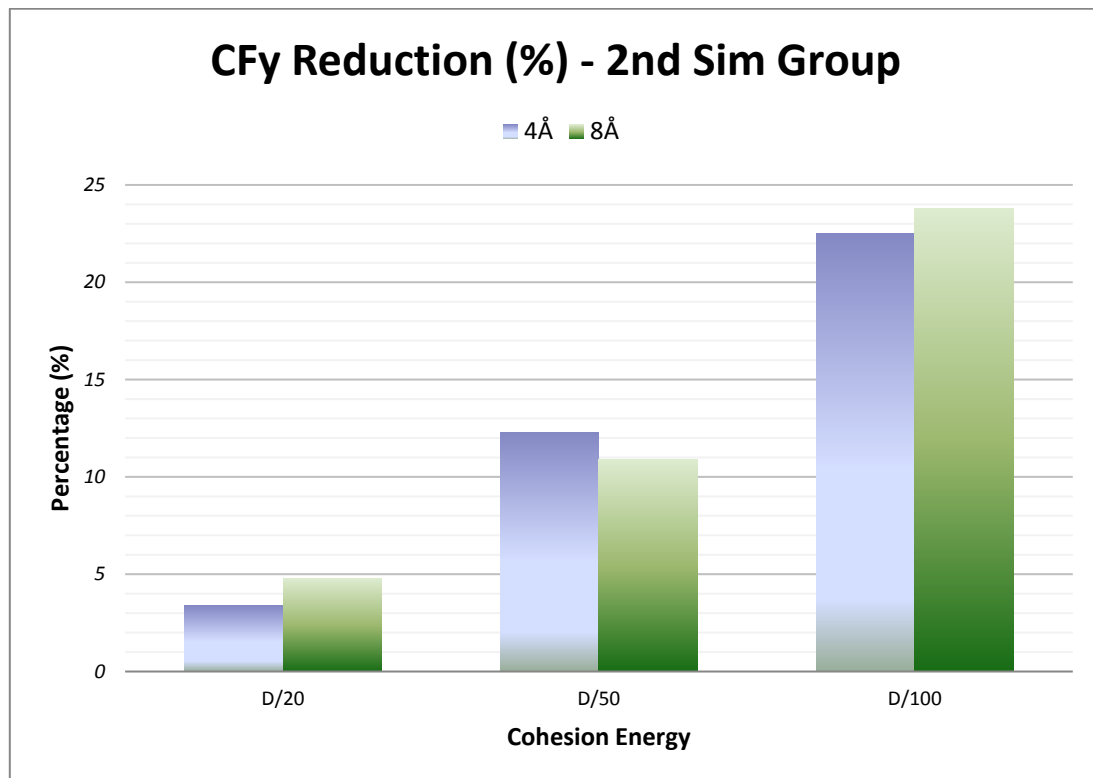
Στον άξονα y παρουσιάζεται ένα ενδιαφέρον φαινόμενο καθώς για ενέργεια συνοχής D/50, η μεταβολή/μείωση που παρατηρείται στο μικρότερο βάθος κοπής είναι μεγαλύτερη, αλλά αυξάνοντας τη φθορά κατά το διπλάσιο προκαλείται μεγαλύτερη επίπτωση στη δύναμη κοπής CF_y για το μεγαλύτερο βάθος κοπής.



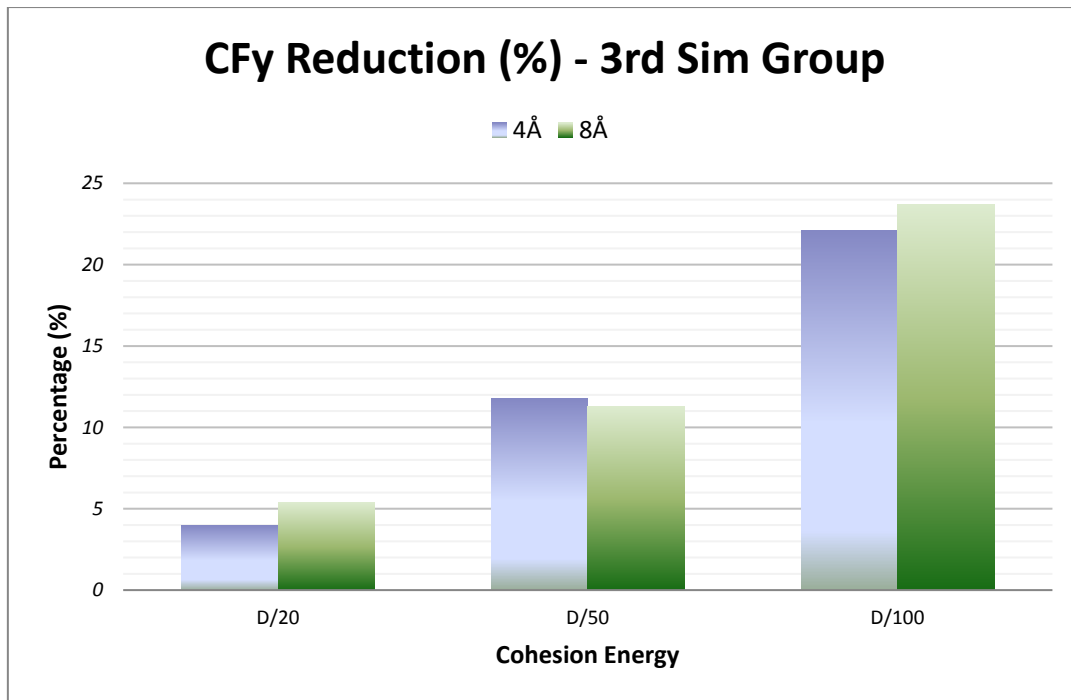
Εικόνα 4.107: Ποσοστιαία μεταβολή της μέσης δύναμης κοπής κατά τον άξονα x για την 2η σειρά Προσομοιώσεων



Εικόνα 4.108: Ποσοστιαία μεταβολή της μέσης δύναμης κοπής κατά τον άξονα x για την 3η σειρά Προσομοιώσεων

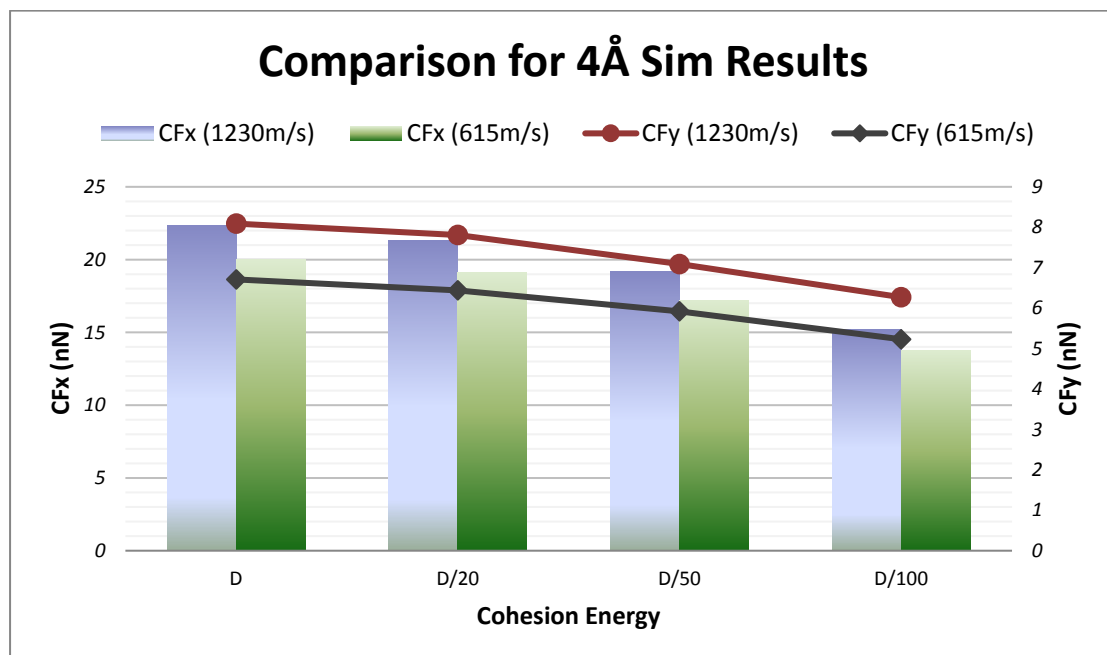


Εικόνα 4.109: Ποσοστιαία μεταβολή της μέσης δύναμης κοπής κατά τον άξονα y για την 2η σειρά Προσομοιώσεων

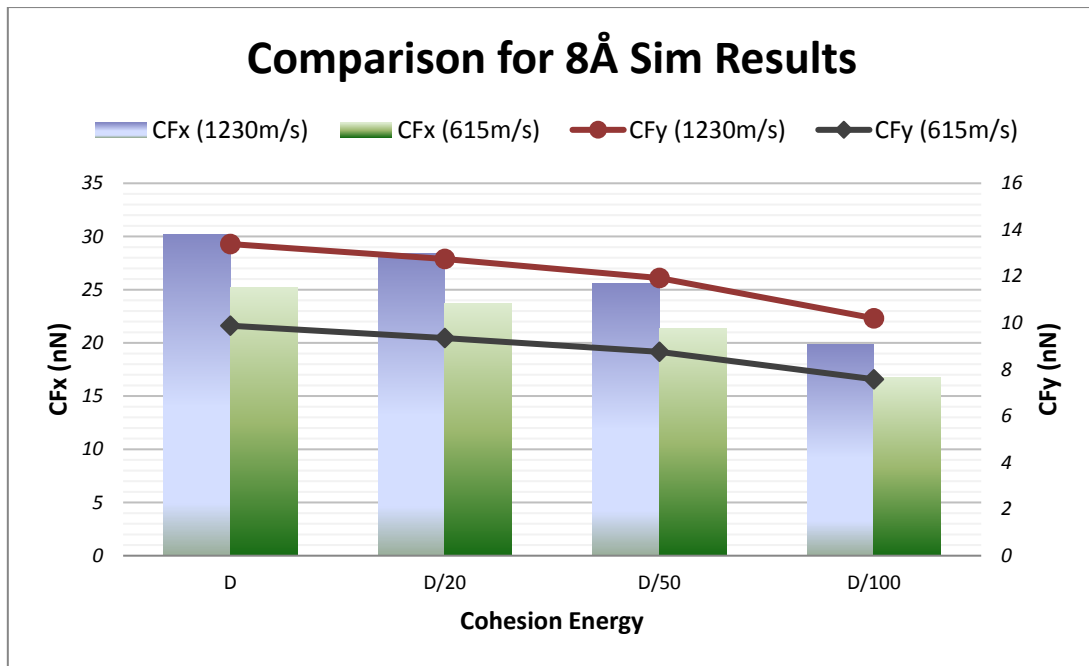


Εικόνα 4.110: Ποσοστιαία μεταβολή της μέσης δύναμης κοπής κατά τον άξονα y για την 3η σειρά Προσομοιώσεων

Στα παρακάτω διαγράμματα 4.111-4.112 γίνεται σύγκριση των αποτελεσμάτων ανά βάθος κοπής, ώστε να φανούν οι διαφορές που προκαλούνται στις δυνάμεις κοπής των δύο αξόνων λόγω της αλλαγής της ταχύτητας κατεργασίας. Παρατηρείται μείωση των συγκεκριμένων μεγεθών όσο μειώνεται η ταχύτητα.

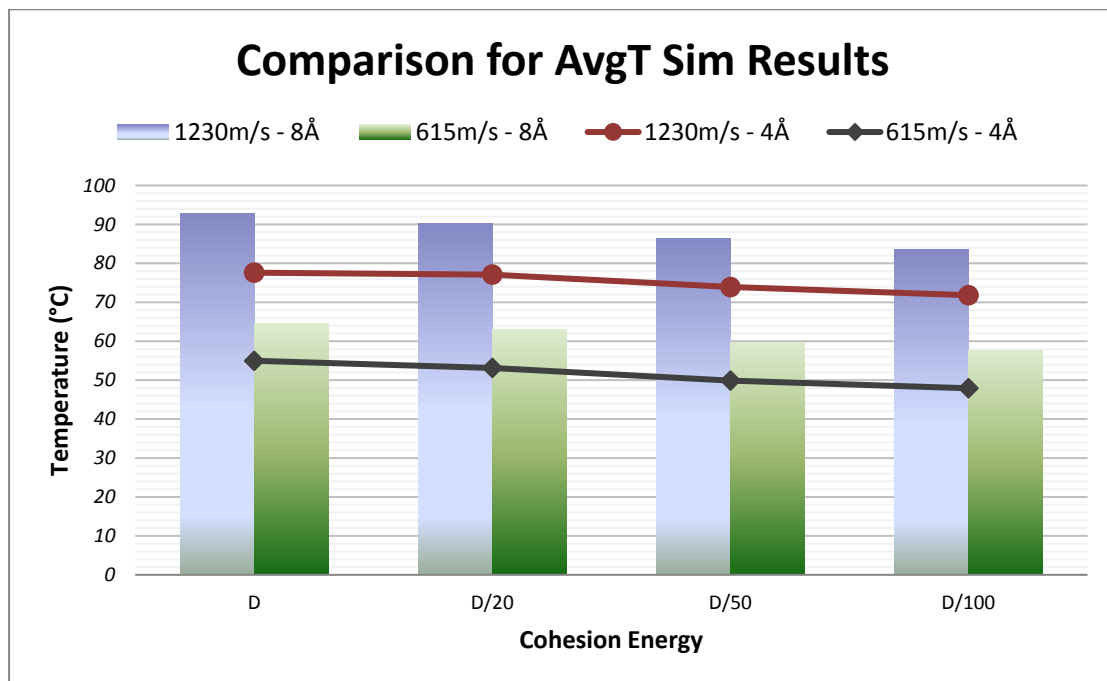


Εικόνα 4.111: Μέσες τιμές δυνάμεων κοπής σε άξονες x και y συναρτήσει της ταχύτητας κοπής για βάθος 4Å



Εικόνα 4.112: Μέσες τιμές δυνάμεων κοπής σε άξονες x και y συναρτήσει της ταχύτητας κοπής για βάθος 8Å

Τέλος, κρίνεται σκόπιμο (Εικόνα 4.113) να δούμε συγκεντρωτικά τις μέσες θερμοκρασίες που αναπτύχθηκαν σε κάθε σειρά δοκιμών για διαφορετικές ενέργειες συνοχής.



Εικόνα 4.113: Μέσες θερμοκρασίες χάλκινου υλικού ανά επίπεδο φθοράς και χαρακτηριστικά κατεργασίας

Κεφάλαιο 5

Συμπεράσματα και προτάσεις για περαιτέρω έρευνα

5.1 Συμπεράσματα

Από τις προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν μπορούν να προκύψουν αρκετά συμπεράσματα για την επίδραση της φθοράς του κοπτικού εργαλείου στην κατεργασία του υλικού, συμπεράσματα που είναι χρήσιμα καθώς οι συνθήκες στην πραγματική πρακτική των κατεργασιών δεν είναι ιδανικές, οπότε προσομοιώσεις που περιλαμβάνουν φαινόμενα όπως η φθορά του εργαλείου είναι πιο αντιπροσωπευτικές των πραγματικών περιπτώσεων που συναντάει κανείς σ' ένα μηχανουργείο.

Καταρχάς, μιας και αρχικό ερέθισμα αλλά και αντικείμενο μελέτης ήταν η δημοσίευση των Maekawa και Itoh για τις προσομοιώσεις νανοκοπής με φθορά εργαλείου, οφείλουμε να συγκρίνουμε τα αποτελέσματά μας με τα δικά τους. Υπενθυμίζουμε ότι στην έρευνά τους βρήκαν ότι η δύναμη κοπής στον οριζόντιο άξονα μειώνεται κατά 33% όταν προσομοιώνεται φθορά κοπτικού εργαλείου με τιμή $D/100$ φορές μικρότερη της ιδανικής. Παράλληλα, για τον κάθετο άξονα η μείωση αυτή κυμάνθηκε στο 20%.

Πράγματι, σε όλες μας τις προσομοιώσεις παρατηρήσαμε επί τω πλείστον παρόμοια τάξη μεγέθους στην ποσοστιαία μείωση της δύναμης κοπής τόσο του άξονα x όσο και του άξονα y . Για τον οριζόντιο άξονα, με $D/100$ λάβαμε αποτελέσματα από 28.5% έως 34.2% ενώ για τον κάθετο άξονα και την ίδια φθορά λάβαμε τιμές από 18.2% έως 23.8%. Συνυπολογίζοντας ότι πιθανότατα να παίζει ρόλο σ' αυτές τις μικρές διακυμάνσεις η γεωμετρία του κοπτικού εργαλείου ή το βάθος κοπής της κατεργασίας ή και η ταχύτητα αυτής, θεωρούμε ότι επιβεβαιώσαμε μέσω του κώδικα και των προσομοιώσεών μας το πόρισμα των δύο Ιαπώνων επιστημόνων.

Σε μια προσπάθεια εύρεσης διαφορετικών επιπέδων φθοράς για περαιτέρω μελέτη της θεωρίας που ξεκινά να ερευνηθεί εν λόγω δημοσίευση, δοκιμάσαμε μείωση της ενέργειας συνοχής της τάξης του 10%, 20%, 50% αλλά οι διακυμάνσεις των τιμών που λάβαμε δεν παρείχαν πρόσφορο έδαφος για σαφή συμπεράσματα. Κρίνοντας ότι η μελέτη αυτή κάνει σύγκριση τιμών που απέχουν μεταξύ τους 100 φορές, αντιληφθήκαμε πως μάλλον αυτή ήταν η εξήγηση για τις περίεργες τιμές με $D/2$ ή $D/4$. Οι τιμές που τελικά δοκιμάσαμε, δηλαδή $D/50$ και $D/20$ αποφασίστηκαν προκειμένου να δούμε ποια είναι η τάση που φέρνει τις διαφορές του 33% και 20% που προαναφέραμε, για $D/100$. Πράγματι, προοδευτικά από $D/20$ βλέπουμε μικρές διαφορές που όμως υποστηρίζουν τη θεωρία που υπάρχει από πίσω, ενώ πιο ξεκάθαρα για $D/50$ υπάρχει περαιτέρω μείωση των υπό εξέταση μεγεθών.

Αξίζει να σημειωθεί το συμπέρασμα που προκύπτει από τα βάθη κοπής που μελετήσαμε. Με βάση τα αποτελέσματα, παρατηρούμε ότι στο μεγαλύτερο βάθος κοπής η προσομοίωση της φθοράς αρχικά επιδρά λιγότερο στα μεγέθη που προκύπτουν, όμως

όσο η φθορά αυξάνεται, τόσο εντονότερες είναι οι διαφορές που δημιουργούνται. Χωρίς να επιβεβαιώνεται από 3-4 σημεία, για βάθος κοπής 4Å η μείωση δείχνει να είναι περίπου απλή αναλογική αλλά για βάθος κοπής 8Å έχει μια ελαφρά παραβολική συμπεριφορά.

Επίσης, από τα διαγράμματα που αναπαριστούν τις ποσοστιαίες μεταβολές των δυνάμεων κοπής παρατηρούμε ότι με τη μείωση της ταχύτητας ομαλύνεται και η μείωση των δυνάμεων. Στις προσομοιώσεις μας χρησιμοποιούμε speed-grinding άρα θα είχε ενδιαφέρον η μελέτη χαμηλότερων ταχυτήτων ώστε να κατανοηθεί καλύτερα η επίδραση της φθοράς συνολικά. Αυτό ισχύει και σε άλλα χαρακτηριστικά των προσομοιώσεων, όπως το σχήμα του κοπτικού υλικού. Είδαμε ότι η μετατροπή του εργαλείου σε ορθογωνικό κόκκο διαμαντιού άλλαξε κατά πολύ τα αποτελέσματα σε σύγκριση με το κοπτικό εργαλείο, ενώ και το βάθος κοπής παίζει το ρόλο του. Ουσιαστικά έχει να κάνει και με την επιφάνεια του εργαλείου που έρχεται σε επαφή με το τεμάχιο.

5.2 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 συννοριακών συνθηκών στη z διάσταση. Το τρισδιάστατο μοντέλο θα είχε τεράστιο ενδιαφέρον καθώς θα υπήρχε και η μελέτη της κοπτικής δύναμης στον άξονα z . Η λογική λέει ότι θα προέκυπταν μεγαλύτερες θερμοκρασίες λόγω της μεγαλύτερης επιφάνειας επαφής μεταξύ του εργαλείου και του τεμαχίου, μεγαλύτερες δυνάμεις και μεγαλύτερες φθορές. Θα είχε επίσης ενδιαφέρον ο σχηματισμός του απόβλιττου μιας και θα υπήρχαν 3 άξονες ελευθερίας.

Ενδιαφέρουσα μελέτη θα ήταν και ο προγραμματισμός της προσομοίωσης με τρόπο ώστε το εργαλείο να παραμορφώνεται και σχηματικά, και όχι μόνο θεωρητικά βάσει της εξίσωσης του δυναμικού Morse. Η δομή του εργαλείου θα πρέπει να ακολουθούσε τη λογική αυτής του τεμαχίου, αλλά δε θα ήταν το ίδιο ευάλωτο προφανώς αφού και πάλι οι συνεκτικές δυνάμεις μεταξύ των ατόμων του άνθρακα θα υπήρχαν. Έτσι όμως θα είχαμε και οπτικό αποτέλεσμα της παραπάνω έρευνας.

Πέρα από τη λείανση μπορούν να εξεταστούν περαιτέρω τύποι κατεργασιών, πχ τόννευση ή φρεζάρισμα, πάλι σε νανοκλίμακα, και να μελετηθούν εκεί οι διάφορες μεταβολές μεγεθών ανάλογα με το υλικό, την ταχύτητα καθώς και η μελέτη του σχηματισμού του απόβλιττου.

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. Σίγουρα είναι μια μέθοδος που θα μπορούσε να βοηθήσει στην τρισδιάστατη μελέτη που προαναφέραμε, μιας και με τον παρόντα κώδικα η μελέτη μιας και μόνο περίπτωσης θέλει τεράστια υπολογιστική ισχύ και είναι τρομερά χρονοβόρα προς το παρόν.

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: 110.
- 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 TipSubstrate 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.** RapepanPromyoo, 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 nanometerscale 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, $\hat{\uparrow}$, 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 dynamic 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. Sundaram. 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. *Ecole 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: 407410.
- 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.
- 97.** Σαββόπουλος Ιωάννης, Προσομοίωση της Λείανσης Χαλκού με Λειαντικούς Κόκκους Διαμαντιού σε Νανοκλίμακα με τη Μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής, Αθήνα, Ε.Μ.Π., 2015
- 98.** Χαμηλοθώρης Βασίλειος, Προσομοίωση της δράσης των κόκκων λειαντικού τροχού σε μικροσκοπικό επίπεδο με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής, Αθήνα, Ε.Μ.Π., 2015