



ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА  
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ  
**ГОСУДАРСТВЕННАЯ РЕГИСТРАЦИЯ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ**

Номер регистрации (свидетельства):  
2020661897

Дата регистрации: 01.10.2020

Номер и дата поступления заявки:  
2020660617 15.09.2020

Дата публикации и номер бюллетеня:  
01.10.2020 Бюл. № 10

Автор(ы):

Шмаков Игорь Александрович (RU),  
Иордан Владимир Иванович (RU)

Правообладатель(и):

федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего  
образования «Алтайский государственный  
университет» (RU)

Название программы для ЭВМ:

**Расчет профилей распределения температуры и плотности вещества вдоль направления движения волны горения в процессе СВС**

**Реферат:**

Программа предназначена для расчета профилей распределения температуры и плотности вещества вдоль направления движения волны горения в процессе самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) в смеси порошков металлов, керамики или металлокерамики на основе результатов молекулярно-динамического моделирования процесса СВС с использованием программного пакета LAMMPS. В дополнение к пакету LAMMPS программа расширяет его функциональные возможности при исследовании микрокинетики СВС и микроструктуры образующихся соединений и сплавов. А именно, рассчитанные программой наборы профилей температуры и плотности вещества позволяют распознавать в продуктах реакции СВС при определенных условиях ее инициирования различные структуры и соединения с более высокой степенью надежности и достоверности, что дает возможность управлять и поддерживать оптимальные режимы процесса СВС для получения материалов с заданными функциональными свойствами. Входные данные для программы, рассчитанные пакетом LAMMPS и сохраненные в виде текстового файла, представляют собой координаты расположения и энергии атомов в исследуемой структуре. Основными пользователями программы являются специалисты в области исследования СВС методом молекулярно-динамического моделирования. Тип ЭВМ: Персональный компьютер. ОС: Debian GNU/Linux.

Язык программирования: C++

Объем программы для ЭВМ: 168 Кб