Модуль проведения расчета деформации структур нанокомпозитов.

Данный модуль предназначен для проведения расчета процесса деформации модельной системы, получения и обработки данных, направленных на:

* определение зависимостей прочности и предела текучести от состава и структуры модельной системы;
* определение уровня напряжений и сопротивления нагрузке в процессе деформирования модельной системы;

В качестве входных параметров используются заданные оператором величины:

-величина конечной деформации в виде вектора (Δx, Δy, Δz), компоненты которого представляют итоговые значения относительного удлинения или сжатия линейных размеров ячейки

-полное время деформации в количестве шагов интегрирования (вещественное).

- временной шаг интегрирования в пикосекундах (вещественное).

-количество временных шагов, через которое будет происходить запись состояния модели в графический файл.

-давление и температура в системе.

Также к входным данным относится файл \_имя\_задачи\_.data\_relax, содержащий информацию о трехмерной структуре сгенерированного равновесного модельного образца. Данный файл генерируется модулем вывода модельной системы на равновесие при заданной температуре.

По окончании ввода и проверки данных на корректность производится автоматический запуск подсистемы, генерирующей программный файл инструкций на языке описания атомистических моделей MMPNC (Multiscale modelling of Polymer NanoComposites) с именем "in\_deform.\_имя\_задачи\_".

Модуль вывода проведения расчета деформации структур нанокомпозитов непосредственно использует интерфейс модуля взаимодействия с пакетом библиотек LAMMPS для запуска параллельного расчета с использованием суперкомпьютерных технологий MPI и CUDA (см. рис. 1 в «Описание Программы»).

Выходные данные модуля представляют собой массивы, содержащие информацию о расчетных значениях (итоговых или промежуточных), данные о состоянии модели в определенные моменты времени, а также информацию об изменении заданных интегральных параметров модели с течением времени.

Выходные данные модуля представляются оператору системы в специальных log-файлах и в виде графических файлов. Описание назначения соответствующих файлов приводится в документе «Комплекс Для Многоуровневого Компьютерного Моделирования Процессов Деформирования И Разрушения Полимерных Нанокомпозитов.Руководство оператора»