

Реализация нанотехнологии в материаловедении невозможна без широкого использования современных методов исследования структуры и свойств. Вычислительные эксперименты позволяют сделать выводы о структурообразовании строительной композиции при различных сочетаниях рецептурных и технологических факторов.

Конечным результатом вычислительных экспериментов могло бы быть определение функциональных зависимостей между рецептурно-технологическими факторами – такими, как температура совмещения компонентов, режимы гомогенизации и уплотнения, объемные доли дисперсных фаз – и показателями макроскопических свойств: прочностью, модулем, ударной вязкостью, трещиностойкостью, пористостью, газо- и паропроницаемостью, морозостойкостью. К сожалению, результаты анализа литературных источников свидетельствуют, что на современном этапе такая задача не может быть решена.

Поэтому цель вычислительных экспериментов – *сформулировать на основе результатов моделирования практические рекомендации, следуя которым на этапе поисковых исследований можно сократить число варьируемых рецептурно-технологических факторов и конкретизировать диапазоны их варьирования*. Решение указанной задачи уменьшает затраты времени и материальных ресурсов при разработке материала.

Сотрудниками научно-образовательного центра по направлению «нанотехнологии» – подразделения Московского государственного строительного университета – на протяжении длительного времени решаются подобные задачи. При этом вычислительные эксперименты выполняются преимущественно на авторском программном обеспечении.

В зависимости от характерного масштабного уровня исследования алгоритмы моделирования опираются на методы классической механики, геометрические и вероятностные представления. Начиная с наноразмерного уровня нами используется *метод частиц*, оперирующий с дифференциальным уравнением основного закона динамики. Применение метода частиц позволяет исследовать как установившееся состояние строительной композиции, так и кинетические закономерности ее структурообразования.

Моделирование методом частиц фактически сводится к решению задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Поэтому известно большое число пакетов программ и наборов библиотечных функций, реализующих расчетные алгоритмы метода. В то же время, существующее программное обеспечение преимущественно ориентировано на задачи биохимии и не позволяет использовать модели, адекватные структуре строительных материалов. По указанной причине нами разрабатывается специализированное программное обеспечение, предназначенное для моделирования структуры и свойств строительных материалов.

В результате вычислительного эксперимента формируется база данных, содержащая подробную статистическую информацию о структурообразовании строительной композиции. Для визуализации результатов могут быть использованы любые доступные третьесторонние программные инструменты, в

том числе – свободные. Результаты исследований позволяют сделать выводы о влиянии рецептурных и технологических факторов на кинетические закономерности структурообразования композиции и однородность ее структуры.

Нами результаты численных экспериментов были использованы при оценке границ рецептурно-технологических факторов изготовления наномодифицированных строительных композитов, выполненной в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 годы», ГК № 16.518.11.7080. В результате выполнения НИР созданы наномодифицированные полимерные композиты и наномодифицированные композиты на термопластической матрице. Эти композиты могут быть использованы для изготовления ограждающих конструкций, эксплуатирующихся в условиях воздействия агрессивных сред. На разработанные наномодифицированные композиты поданы две заявки на патент.

На реализации ключевых алгоритмов разработанного программного обеспечения *получены свидетельства о государственной регистрации*. Вычислительные модули программного обеспечения распространяется свободно и являются кроссплатформенными – могут быть использованы в среде различных операционных систем. Кроссплатформенная реализация и отказ от графического интерфейса пользователя открывают возможность выполнения распределенных вычислительных экспериментов, при которых расчет запускается на удаленных вычислительных машинах. В то же время необходимость использования программ без графического интерфейса пользователя повышает начальный порог использования. Поэтому наиболее эффективной формой сотрудничества с заказчиками мы считаем не распространение и даже не техническую поддержку разработанного программного обеспечения, а *поддержку вычислительной инфраструктуры* на базе нашего подразделения. Такая поддержка подразумевает решение нами конкретных задач строительного материаловедения; в процессе решения могут использоваться и вычислительные эксперименты.

а) текст и презентация:

<http://files.nocnt.ru/conf/2012/kazan/mnogomasshtabnoje-modelirovanije.doc>

<http://files.nocnt.ru/conf/2012/kazan/mnogomasshtabnoje-modelirovanije.pdf>

б) исходник:

<http://files.nocnt.ru/conf/2012/expopri/2posters.doc>