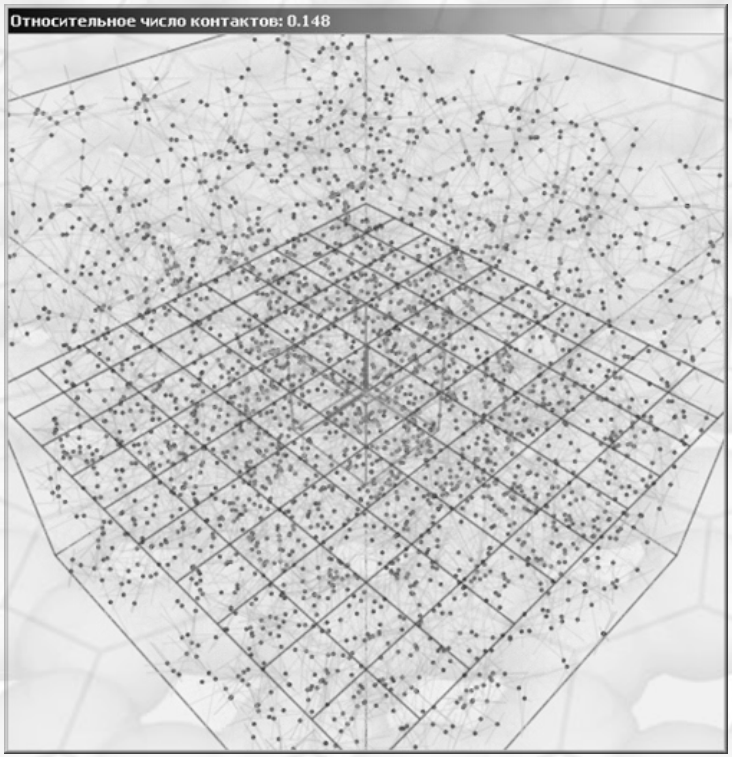
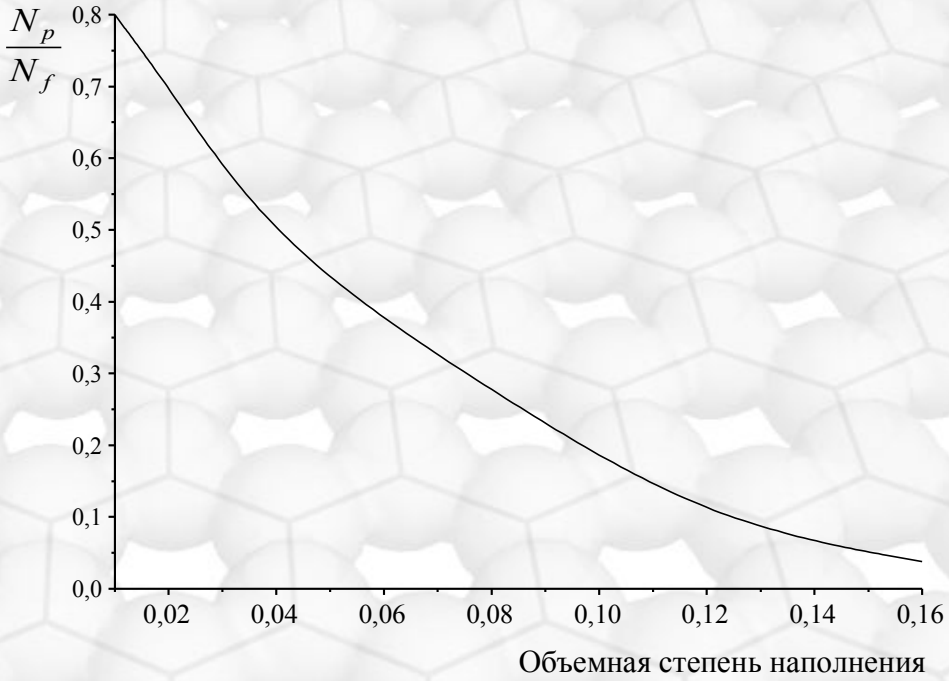
Многомасштабное моделирование





Достижения и перспективы

Масштабные уровни

Характерный масштаб	Характеристика уровня	Модели и методы	Степень их разработки
Не определен (как правило, макрообъекты фиксированной геометрии)	Уровень, на котором можно пренебречь гетерогенной структурой материала	Модели сплошной среды и основанные на них алгоритмы	Детально проработаны; известны коммерческие (ANSYS, LS-DYNA, Nastran, Лира) и свободные (FreeFEM, Z88) реализации
Более 0,1 мм	Уровень макроструктуры: гравитационные эффекты доминируют над поверхностными	Геометрические и вероятностные модели; специальные разновидности метода частиц	Модели (геометрические) укладки частиц известны; необходима разработка и реализация алгоритмов метода частиц
0,1...100 мкм	Уровень микроструктуры: поверхностные явления являются определяющими	Метод частиц в классическом виде, геометрические и вероятностные модели	Известны многочисленные реализации метода частиц; необходима разработка вероятностных моделей
10...100 нм	Область проявления *размерных эффектов*: выражена зависимость свойств от дисперсности	Допустимо совместное использование методов квантовой химии и метода частиц; опыт применения геометрических и вероятностных моделей ограничен	Отдельные модели разработаны, алгоритмы нуждаются в разработке и реализации
0,1...10 нм	Атомно-молекулярный уровень:	Квантовомеханическое описание: методы квантовой (вычислительной) химии.	Модели и алгоритмы детально проработаны; известны реализации, допускающие удаленный доступ

Атомно-молекулярный уровень

Модели – уравнения квантовой механики.

Методы численного исследования: метод функционала плотности, метод Хартри-Фока.

Результаты моделирования дают возможность прогноза термодинамических и оптических свойств, а также реакционной способности объектов, размер которых составляет 1…10 нм.

Известны свободные реализация вычислительных алгоритмов квантовой химии. Одним из наиболее известных является квантовомеханический пакет
The General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS)

Область размерных эффектов

Область 10…100 нм соответствует выраженной зависимости свойств (механических, оптических и др.) от размера.
Эта зависимость является одной из причин повышенного интереса к свойствам и способам практического использования наноразмерных систем.

Для исследования могут применяться:
- метод частиц (метод молекулярной динамики);
- метод стохастического моделирования (метод Монте-Карло) в совокупности с выбранной геометрической моделью.

Известны многочисленные программные реализации алгоритмов молекулярной динамики, в т.ч. свободные (LAMMPS). Реализация выбранного метода стохастического моделирования почти полностью определяется геометрией расчетной области; по этой причине известные реализации использовать затруднительно.

Микроструктура

Структурными единицами моделирования считаются не отдельные атомы и молекулы, а частицы микрометрических размеров, взаимодействующие друг с другом через центрально-симметричные силовые поля (метод частиц в «классической» форме).

Модель – система уравнений основного закона динамики:

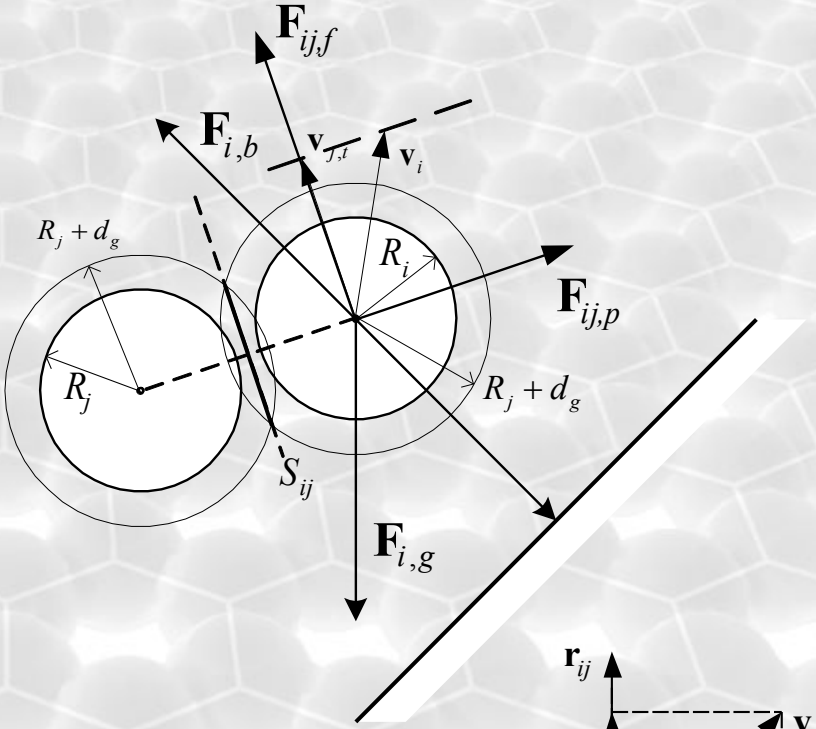
$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i - k_i\left(\dot{\mathbf{r}}_i - \mathbf{v}_i\right) = -\nabla U_i,$$

где m_i – масса i-й частицы; $\mathbf{r}_i = \left(x_i; y_i; z_i\right)$ – ее координаты; k_i – коэффициент, определяемый диссипативными свойствами дисперсионной среды; $\mathbf{v}_i$ – скорость дисперсионной среды в точке $\mathbf{r}_i$; U_i – потенциал в точке $\mathbf{r}_i$ (зависящий от характеристик дисперсионной среды, а также от характеристик и взаимного расположения всех остальных частиц системы).

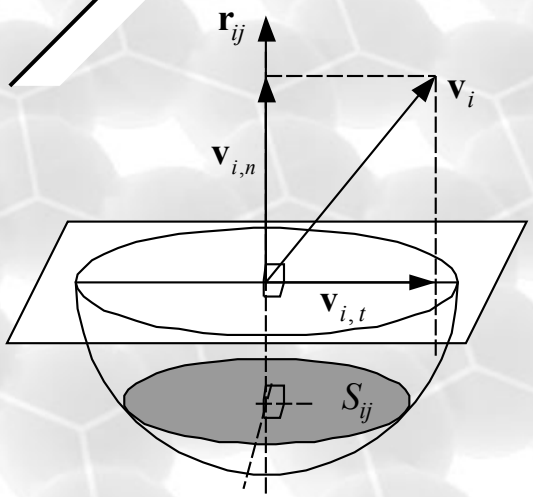
Модель содержит единственное слагаемое, представляющее не потенциальную силу вязкого трения, действующую на частицу со стороны дисперсионной среды.

Макроструктура

Для сохранения применимости метода частиц модель (система уравнений основного закона динамики) может быть модифицирована. Учет сил, действующих вдоль касательных к поверхности взаимодействующих частиц, производится дополнительным слагаемым:



$$m_i\ddot{\mathbf{r}}_i - k_i\left(\dot{\mathbf{r}}_i - \mathbf{v}_i\right) = -\nabla U_i + \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} \mathbf{T}_{ij} \ ,$$



где $\mathbf{T}_{ij}$ – сумма тангенциальных сил, действующих на i-ю частицу со стороны всех остальных частиц.

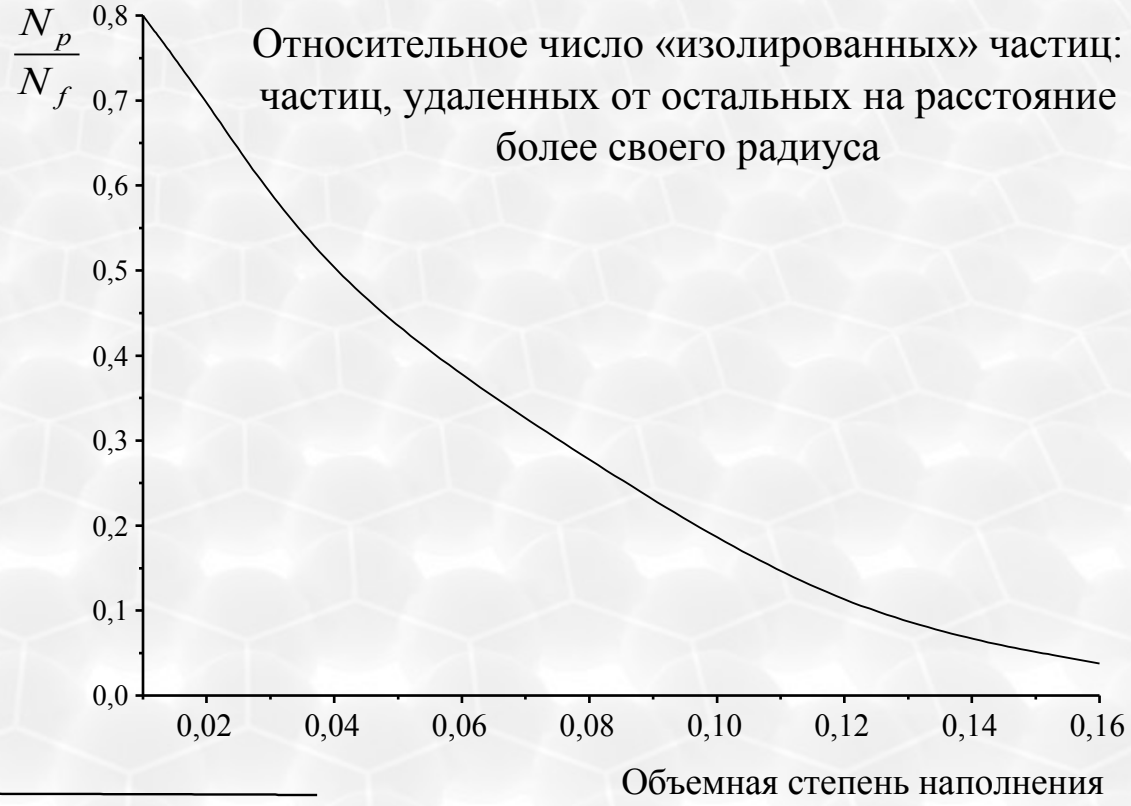
Многомасштабный характер

Проявляется двумя обстоятельствами:

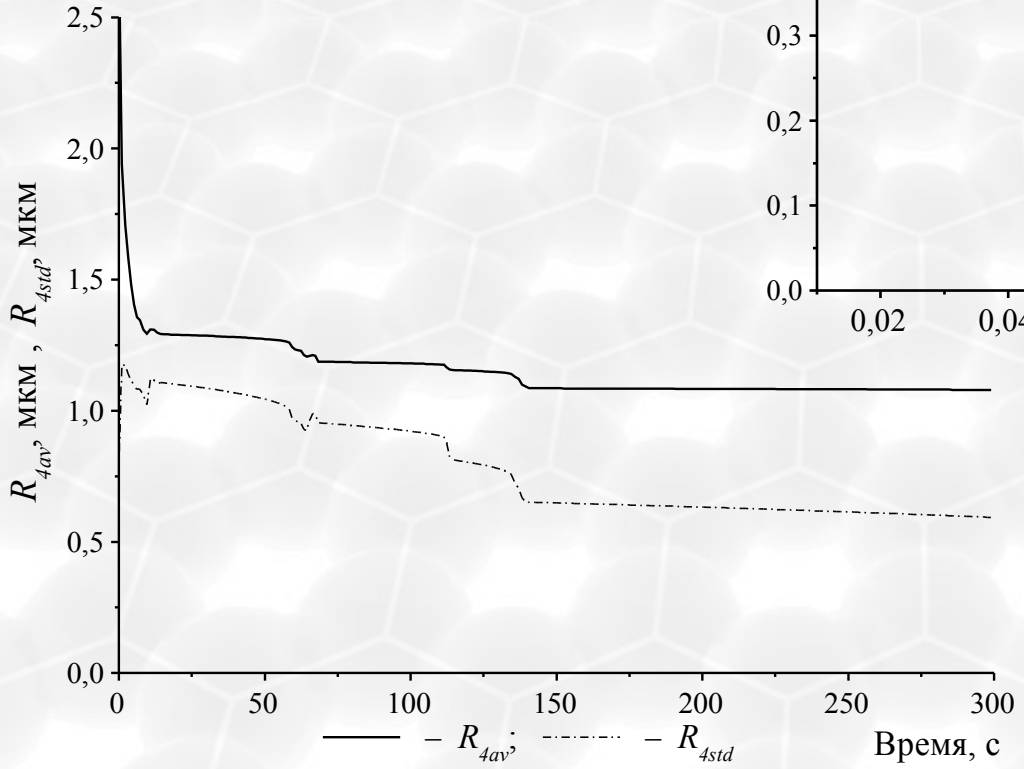
- пересечением размерных диапазонов применимости методов;
- возможностью использования результатов, полученных на нижнем масштабном уровне, в качестве начальных и граничных условий при моделировании на последующем верхнем уровне.

Как метод частиц, так и метод стохастического моделирования являются универсальными: они могут быть использованы на всех уровнях от области размерных эффектов до уровня макроструктуры композиционного материала.

Динамические модели микроструктуры



Относительное число «изолированных» частиц: частиц, удаленных от остальных на расстояние более своего радиуса



Динамические модели макроструктуры

Динамика структурных единиц макроуровня

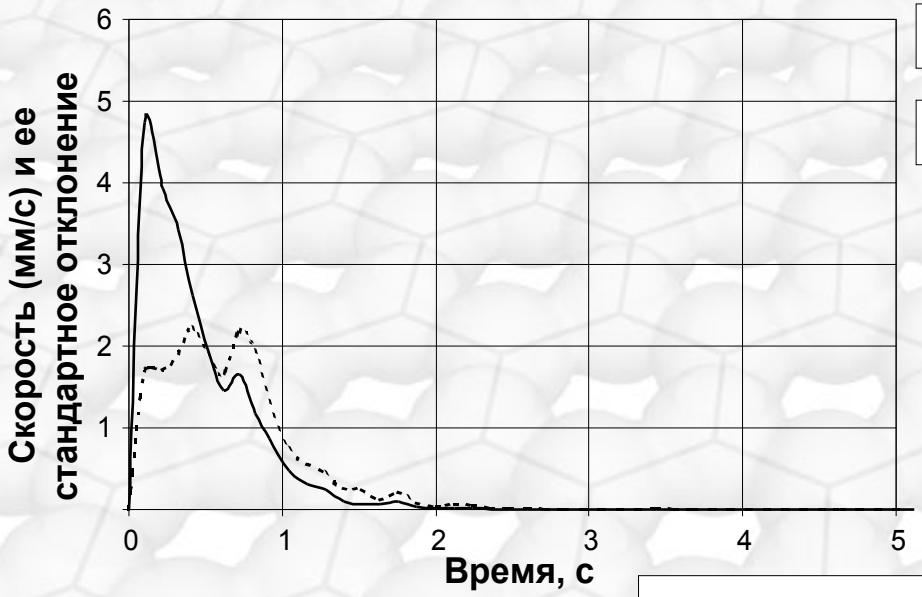
Параметры состояния материала крупнопористого каркаса и технологические режимы уплотнения → **Модель крупнопористого каркаса** ← Технологические свойства клеевой композиции

↓

Вычислительный эксперимент

↓

Фильтрационная способность каркаса



Метод сглаженных частиц

Фильтрационная способность каркаса и технологические режимы пропитки → **Модель процесса пропитки** ← Технологические свойства пропиточной композиции

↓

Вычислительный эксперимент

↓

Фазовый состав композиционного материала

Геометрические и вероятностные модели

Частицы имеют линейную форму (длина l, диаметр d – константы или случайные величины). Метод оперирует с модельным объемом $V >> l^3$.

Алгоритм включает два этапа:

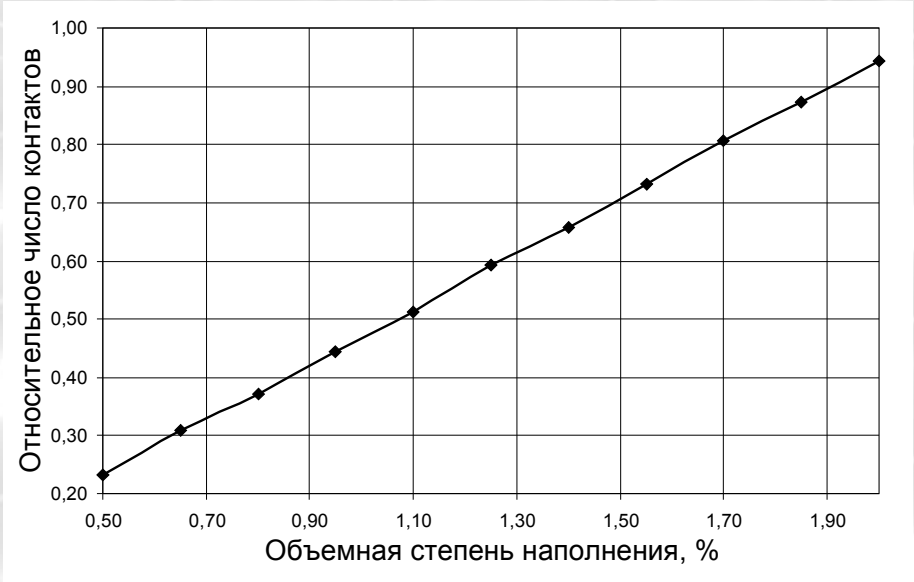
– распределение частиц в модельном объеме;

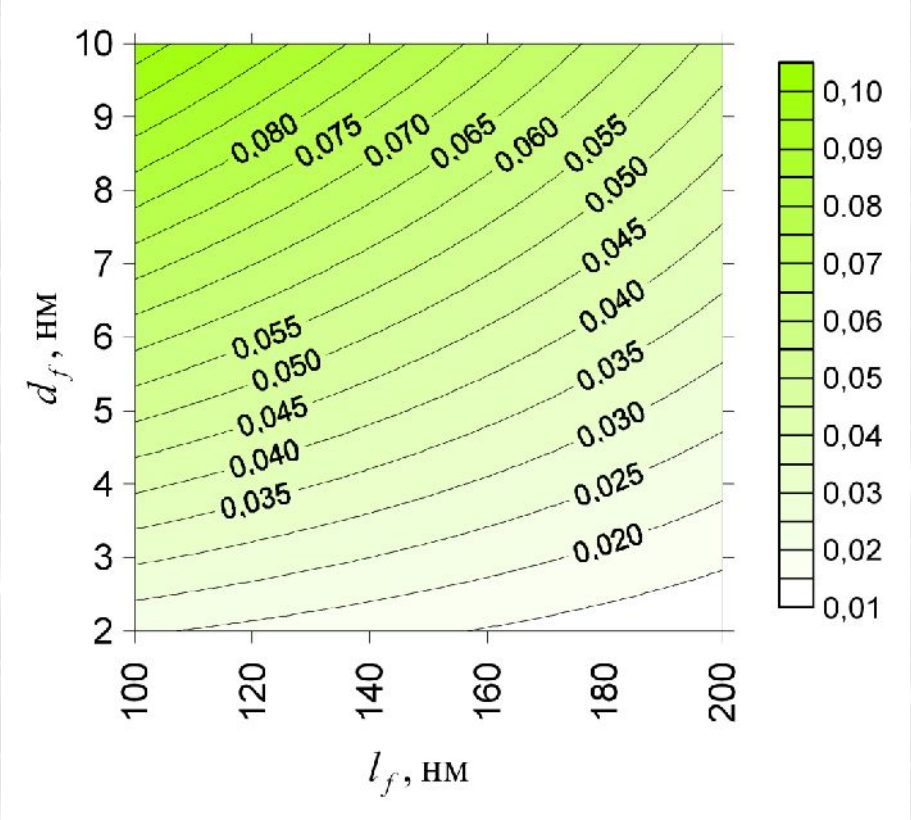
– оценка значения объемного содержания частиц, при котором возможно формирование непрерывного перколяционного кластера.

Результатом выполнения второго этапа алгоритма является массив данных, включающий:

– число N_c контактов между частицами;

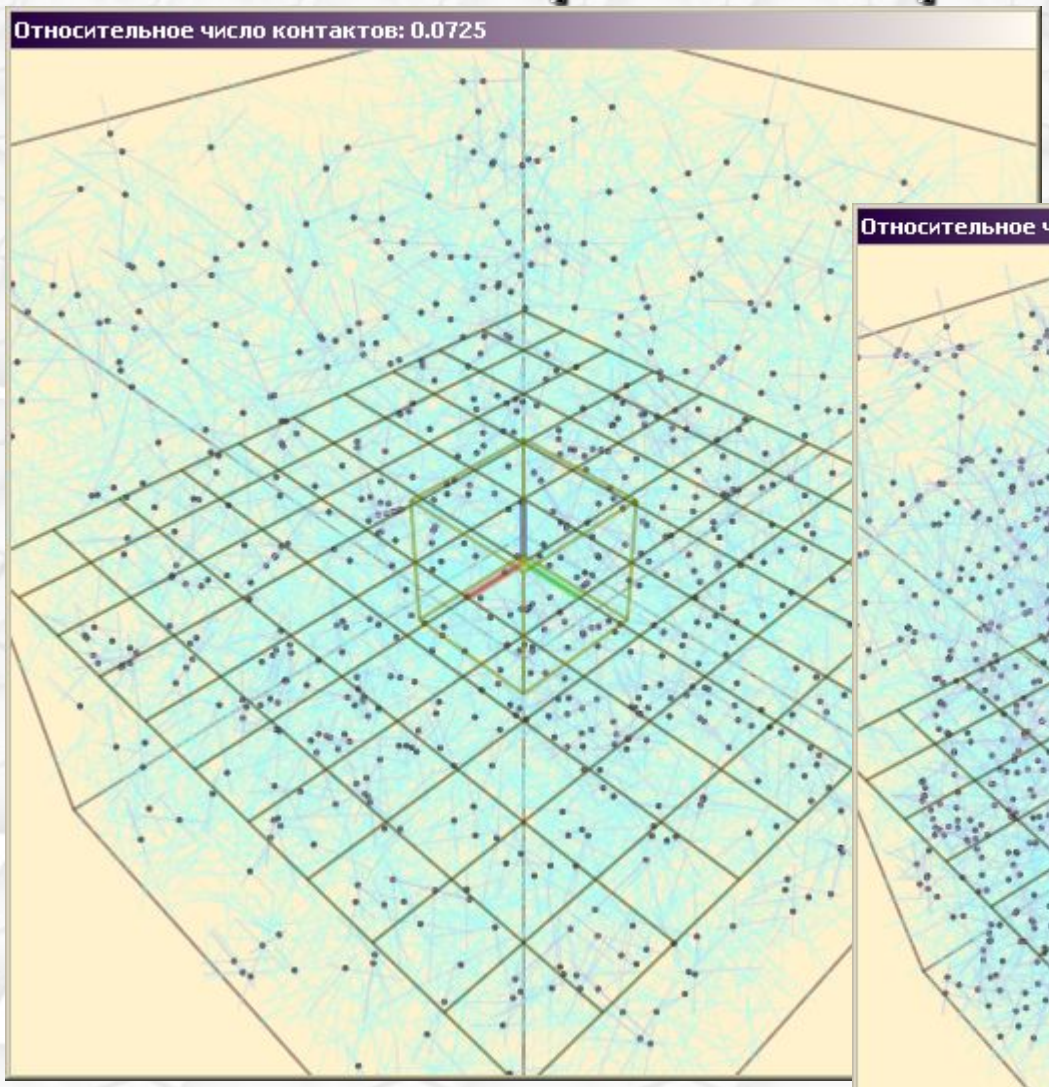
– координаты центров и длины общих перпендикуляров, восстановленных к главным осям частиц.



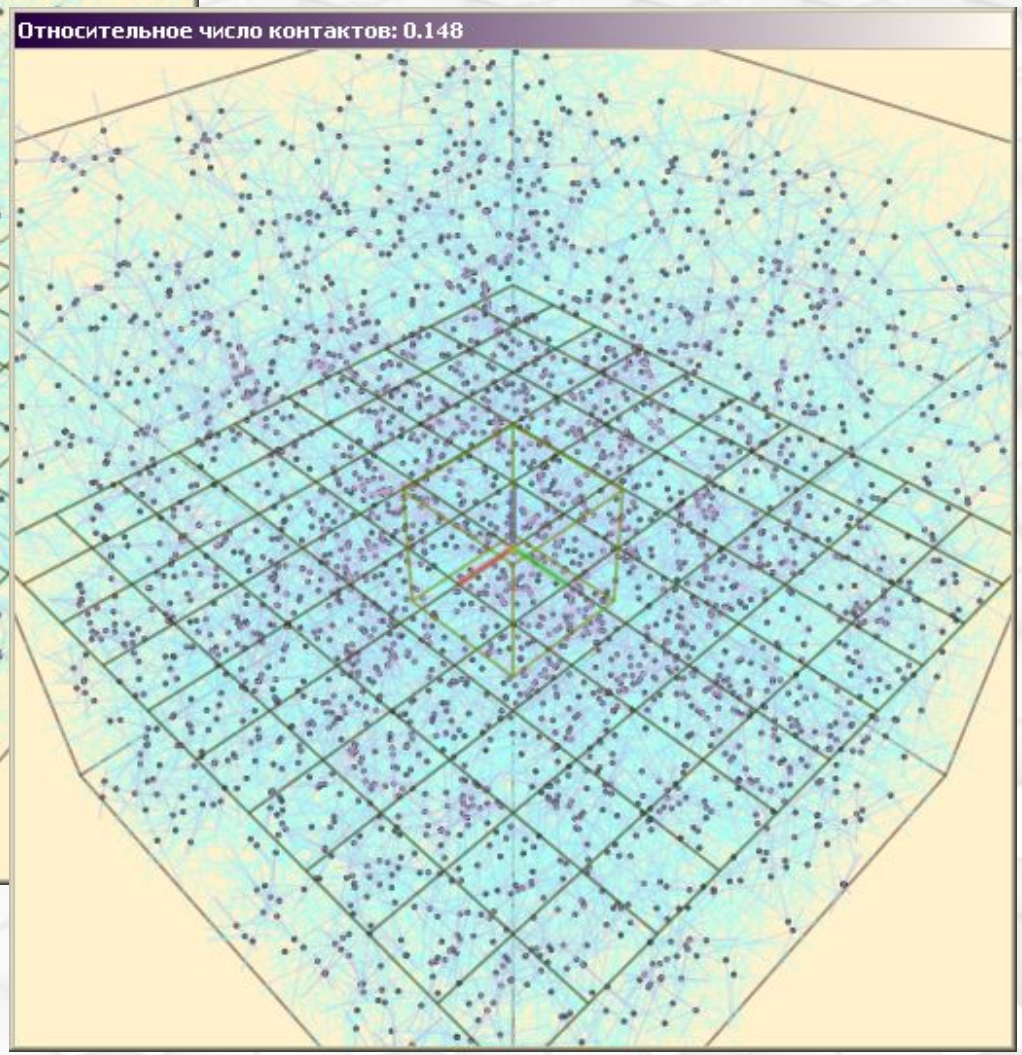


Изолинии объемной степени наполнения, соответствующей равным числам частиц и контактов

Область размерных эффектов



$v_f \approx 2 \cdot 10^{-3}$



$v_f \approx 10^{-3}$

Инструментальные средства

Корректная последовательность операций при моделировании:
– разработка модели;
– выбор алгоритмов моделирования;
– выбор реализации алгоритмов;
– выбор программного инструмента;
– выбор вычислительной платформы.

На практике эта последовательность часто обращается, а ее первый этап игнорируется.

Указанное заставило представителей научной школы, занимающихся изложенными здесь проблемами, обратиться к разработке авторского программного обеспечения.

www.nocnt.ru
www.libv.org

Перспективы развития методов

1. **Выражения потенциала парного взаимодействия из первых принципов** повысят адекватность моделирования в области размерных эффектов и на уровне микроструктуры.
2. **Учет вращательных степеней свободы**, вместе с учетом тангенциальных сил повысит адекватность результатов моделирования на верхних масштабных уровнях.
3. **Дополнение метода частиц вероятностными моделями** откроет возможность исследования устойчивости технологических параметров на показатели макроскопических свойств.
4. В рамках выбранной модели распределения частиц в области размерных эффектов **допустимо усложнение формы структурных единиц**.
5. Разрабатываемые инструментальные средства в перспективе должны войти в одну из существующих инфраструктур **распределенных вычислений**.

Спасибо за внимание!