

РЕФЕРАТ

Отчет 339 с., 43 рис., 15 источников, 7 таблиц, 4 приложения

МНОГОУРОВНЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ПОЛИМЕРНЫЕ
НАНОКОМПОЗИТЫ, МЕЖЧАСТИЧНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ,
МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА, СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ
СВЕРХМАСШТАБИРУЕМЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ, ДЕФОРМАЦИЯ И
РАЗРУШЕНИЕ ПОЛИМЕРОВ, АСИММЕТРИЧНЫЕ ВКЛЮЧЕНИЯ,
ГЕНЕРАЦИЯ ДЕФЕКТОВ, ОГРУБЛЕННАЯ МЕЗОСКОПИЧЕСКАЯ
МОДЕЛЬ, ЭНЕРГИЯ КОГЕЗИИ, НАНОТРУБКИ, ВОЛОКНА,
ХАОТИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ, РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЕ

Объектом разработки является многоуровневая модель полимерных нанокомпозитов, основанная на атомистическом описании материала и предназначенная для расчета характеристик процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов с использованием сверхмасштабных вычислений на суперкомпьютерах.

Целями работы являются: разработка научно-технического задела в области программного обеспечения для современных высокопроизводительных вычислительных технологий (MPI, OpenMP, CUDA) для многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластиначатые включения); ускорение и оптимизация процесса разработки многокомпонентных полимерных материалов с заданными деформационно-прочностными свойствами за счет повышения точности прогнозирования структуры и свойств полимерных композитов; повышение эффективности использования современных высокопроизводительных вычислительных систем для компьютерного моделирования и проектирования новых полимерных материалов и элементов конструкций из них; Разработка

методики проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

Основными методами, использованными на отчетном этапе, являются: компьютерное моделирование материалов и протекающих в них процессов; разработка компьютерных программ и программной документации; методы экспериментального исследования физико-механических и трибологических свойств полимерных композиционных материалов; обобщение и оценка научно-технических результатов.

Основные результаты, полученные на отчетном этапе: создана программная реализация разработанных на предыдущем этапе алгоритмов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, разработана соответствующая програмная документация; проведены экспериментальные исследования, осуществлена демонстрация соответствия результатов теоретических исследований требованиям технического задания и возможности проведения предусмотренных им многоуровневых вычислений; дан анализ механизмов деформирования и разрушения рассмотренных полимерных нанокомпозитов на основе результатов проведенного численного моделирования и анализ эффективности предложенных методик моделирования с точки зрения их использования для разработки новых полимерных композитов с повышенной жесткостью и вязкостью разрушения; проведено обобщение и оценка результатов исследований, показано, что полученные результаты соответствуют мировому уровню, а по ряду параметров превышают его; даны рекомендации по использованию результатов в реальном секторе экономики, а также в дальнейших исследованиях и разработках; разработана методика проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения;

проведены экспериментальные исследования модельных образцов полимерных нанокомпозитов, дан сравнительный анализ результатов теоретических и экспериментальных исследований.

Основные конструктивные, технологические и технико-эксплуатационные характеристики разрабатываемые математических методов, моделей и алгоритмов заключаются в том, что математические модели многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластиинчатые включения) позволяют моделировать процессы деформирования и разрушения хаотически наполненных нанокомпозитов с матрицами на основе полимеров, в широком диапазоне исходных параметров системы, таких, как свойства полимеров и наполнителей, геометрия наполнителей, температура среды^{1,2}.

Область применения результатов работы - проведение прикладных НИР, направленных на создание нового поколения полимерматричных композиционных материалов, армированных наноразмерными частицами (нанотрубками, волокнами, частицами), обладающих высокими физико-механическими, теплофизическими характеристиками для авиационной, космической техники, химического и нефтегазового машиностроения.

Экономическая эффективность и значимость проведенных исследований подтверждается, с одной стороны, востребованностью продуктов – аналогов, с другой стороны – тем, что созданные в рамках настоящей НИР технические решения соответствуют мировому уровню в области моделирования полимерных нанокомпозитов и опережают его по некоторым параметрам. Основной особенностью, определяющей

¹ Степень внедрения не указана, так как внедрение результатов работ в рамках настоящей НИР не предусмотрено

² Внедрение результатов работ в рамках настоящей НИР не предусмотрено

экономическую эффективность и значимость разработанных решений, является модульная архитектура программного обеспечения, позволяющая быстро адаптировать программную реализацию под новые методики параллельных вычислений, появление которых ожидается в ближайшие несколько лет.

Развитие объекта исследования, в том числе вывод его на конкурентные позиции по отношению к имеющимся аналогам, предполагается осуществлять силами консорциума из 3-4 ВУЗов или других научно-исследовательских организаций России, с учетом возможности использования доступного программного обеспечения с открытым кодом.

СОДЕРЖАНИЕ

НОРМАТИВНЫЕ ССЫЛКИ	11
ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ	12
ВВЕДЕНИЕ	13
1 Создание программной реализации разработанных алгоритмов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластиинчатые включения)	22
1.1 Выводы по разделу	24
2 Разработка программной документации на программную реализацию разработанных алгоритмов	25
2.1 Выводы по разделу	28
3 Проведение экспериментальных исследований в соответствии с ПМЭИ	29
3.1 Демонстрация соответствия результатов теоретических исследований требованиям настоящего технического задания	30
3.2 Демонстрация возможности проведения многоуровневых вычислений, объединяющих молекулярный и мезоуровни в задачах деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные нанотрубки или пластиинчатые включения)	35
3.3 Выводы по разделу	42
4 Анализ механизмов деформирования и разрушения рассмотренных полимерных нанокомпозитов на основе результатов проведенного численного моделирования	44
4.1 Выводы по разделу	50
5 Анализ эффективности предложенных методик моделирования с точки зрения их использования для разработки новых полимерных композитов с повышенной жесткостью и вязкостью разрушения	52
5.1 Выводы по разделу	55

6 Обобщение и оценка результатов исследований	56
6.1 Обобщение результатов исследований	56
6.2 Анализ выполнения требований ТЗ на НИР	60
6.3 Оценка полноты решения задач и достижения поставленных целей НИР	70
6.4 Оценка эффективности полученных результатов в сравнении с современным научно-техническим уровнем	78
6.5 Выводы по разделу	90
7 Разработка рекомендаций по использованию результатов проведенных НИР в реальном секторе экономики, а также в дальнейших исследованиях и разработках	91
7.1 Разработка рекомендаций, предложений по использованию результатов проведенных НИР	91
7.2 Проведение технико-экономической оценки рыночного потенциала полученных результатов	95
7.3 Разработка проекта ТЗ для проведения последующих прикладных НИР	98
7.4 Выводы по разделу	100
8 Разработка методики проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов содержащих асимметричные включения	102
8.1 Выводы по разделу	112
9 Экспериментальные исследования модельных образцов полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластинчатые включения) согласно ПМЭИ	113
9.1 Экспериментальные исследования модельных образцов, содержащих короткие волокна	113

9.2 Экспериментальные исследования модельных образцов, содержащих многостенные трубы	118
9.3 Экспериментальные исследования модельных образцов, содержащих пластинчатые включения	121
9.4 Выводы по разделу	129
10 Сравнительный анализ результатов теоретических и экспериментальных исследований (результатов моделирования с экспериментальными данными)	130
10.1 Выводы по разделу	134
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	136
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	139
ПРИЛОЖЕНИЕ А - Протоколы испытаний	141
ПРИЛОЖЕНИЕ Б - Технико-экономическое обоснование технико-экономической оценки рыночного потенциала созданных моделей и компьютерных решений	222
ПРИЛОЖЕНИЕ В - Проект технического задания на проведение прикладной НИР	224
ПРИЛОЖЕНИЕ Г - Программная документация	232
ПРИЛОЖЕНИЕ Г.1 – ЭО «POLYCOMP». Описание применения	233
ПРИЛОЖЕНИЕ Г.2 – ЭО «POLYCOMP». Руководство системного программиста	248
ПРИЛОЖЕНИЕ Г.3 – ЭО «POLYCOMP». Руководство программиста	263
ПРИЛОЖЕНИЕ Г.4 – ЭО «POLYCOMP». Руководство оператора	276
ПРИЛОЖЕНИЕ Г.5 – ЭО «POLYCOMP». Описание логической и физической структуры	293
ПРИЛОЖЕНИЕ Г.6 – ЭО. ПМ «ПМПИ». Описание программы	304
ПРИЛОЖЕНИЕ Г.7 – ЭО. ПМ «ПМГПСПМ». Описание	

программы	311
ПРИЛОЖЕНИЕ Г.8 – ЭО. ПМ «ПМВыМС». Описание программы	318
ПРИЛОЖЕНИЕ Г.9 – ЭО. ПМ «ПМПРД». Описание программы	324
ПРИЛОЖЕНИЕ Г.10 – ЭО. ПМ «ПМВзПБ». Описание программы	331
ПРИЛОЖЕНИЕ Г.11 - ЭО. Тексты программ	337

НОРМАТИВНЫЕ ССЫЛКИ

В настоящем отчете о НИР использованы ссылки на следующие стандарты:

- 1) ГОСТ 15.101-98 Система разработки и постановки продукции на производство. Порядок выполнения научно-исследовательских работ;
- 2) ГОСТ 2.111-68 Единая система конструкторской документации. Нормоконтроль;
- 3) ГОСТ 7.32-2001. Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Отчет о научно-исследовательской работе. Структура и правила оформления.

ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

MD	– молекулярная динамика
LAMMPS	– универсальный высокоуровневый язык описания атомистических моделей и проведения соответствующих суперкомпьютерных сверхмасштабируемых вычислений
DFT	– теория функционала (электронной) плотности (Density Functional Theory)
GPU	– графический ускоритель (Graphical Processing Unit)

ВВЕДЕНИЕ

Оценка современного состояния решаемой проблемы. Достигнув по прочностным характеристикам уровня сталей и других металлических сплавов, и превосходя их по удельной прочности и коррозионной стойкости, полимерные композитные материалы могут обладать преимуществами перед традиционно использующимся ещё и по динамическим характеристикам, таким, как трещиностойкость, ударная вязкость, сопротивление усталости. Композиционные материалы способны сочетать такие недостижимые в однородном материале свойства, как, например: прочность и пластичность, износостойкость и эластичность, хорошие антифрикционные свойства и прирабатываемость трущихся поверхностей. Развитие композиционных материалов идет по пути усложнения их состава и комбинирования схем армирования. Современный полимерный композиционный материал содержит в себе сочетания практически всех классических схем наполнения, при этом широкое распространение получили дисперсно-наполненные полимеры с неравноосными хаотически или упорядоченно распределенным наполнителем.

Современное состояние проблемы характеризуется разнородностью применяемых моделей и методов, как правило, реализуемых на отдельных масштабных уровнях. На низшем уровне используются квантовые методы и методы молекулярной динамики. На высоких уровнях – огрубленные модели. Также активно применяются экспериментальные методы, однако практически значительное количество возможных вариантов армирования делает экспериментальный подбор оптимальных вариантов композитов практически бессмысленной задачей. Аналитические способы расчета прочностных характеристик композиционных материалов в лучшем случае позволяют качественно объяснить экспериментальные зависимости свойств для композитов с относительно простым заполнением (один тип наполнителя, строго определенная ориентация наполнителя, однородная

структурой матрицы). Применение подобных приближений к реальным, имеющим перспективу практического применения, материалам, является некорректным. Более того, расчеты с использованием простых моделей, пригодные для реализации с применением общедоступных вычислительных средств, также неизбежно используют ряд приближений, делающих их применение к реальным сложнонаполненным материалам не совсем адекватным. Поэтому, безусловно, **актуальности и новизна** задачи заключается в проведении многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов с применением суперкомпьютеров.

Основание и исходные данные для разработки темы. Основанием для выполнения настоящей поисковой научно-исследовательской работы является государственный контракт № 14.514.11.4053 от «01» марта 2013 г. Исходными данными для разработки темы являются наработки в области моделирования нанокомпозитного полимерного материала на мезоуровне и на микроуровне, программы для решения задач генерации начальных структур, переноса данных между масштабными уровнями, обработки данных, описания молекулярных и мезоскопических моделей, подготовленные модельные образцы полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы, пластинчатые включения) для верификации результатов моделирования. Существует **связь данной работы** с другими НИР, выполненными Исполнителем. Наиболее близкой является НИР «Разработка методов создания сложнонаполненных высокопрочных антифрикционных композиционных материалов для космической техники» (гос. контракт № 16.513.11.3029 от «12» апреля 2011 г.).

Обоснование необходимости проведения НИР. Проведение НИР необходимо для обоснования выбора направления и методики исследований в области деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные

трубки или пластиинчатые включения), разработки математических и имитационных моделей для многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных композитов, а также их программной реализации.

Планируемый научно-технический уровень. Разрабатываемые математические методы, модели и алгоритмы должны быть предназначены для разработки программного обеспечения многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных композитов с использованием современных высокопроизводительных вычислительных технологий (MPI, OpenMP, CUDA).

Целью этапа 1 выполнения НИР было создание задела в области многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластиинчатые включения). На этапе 1 НИР были выполнены следующие работы:

а) Был выполнен аналитический обзор информационных источников по теме работы. Было показано, что методы классической молекулярной динамики, совмещенные с последующим привлечением огрубленных моделей, позволяют производить исследования микроструктуры нанокомпозитов и с достаточной точностью оценивать их макромасштабные свойства, связанные с прочностью данных материалов и влиянием на нее широкого спектра факторов. Анализ литературных источников показал значительный объем накопленного опыта по моделированию полимерных нанокомпозитов на основе атомистических и многомасштабных подходов.

б) Были проведены патентные исследования и сделаны выводы о техническом уровне исследуемой области, о тенденциях развития исследуемой области. Установлено, что область разработки полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения, находится на достаточно высоком техническом уровне, а область компьютерного моделирования имеет достаточно высокий научно-технический уровень.

Однако направление компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов имеет недостаточный уровень развития, о чем свидетельствует небольшое количество патентной документации. Отмечено, что разработка объекта исследования, производимая при выполнении работ по настоящему Государственному контракту, является актуальной.

в) Были проведены исследования существующих методов многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, показано, что построение иерархии элементарных процессов на различных масштабных уровнях и их объединение на основе расчета определенных параметров (data flow) является магистральным направлением развития математического моделирования в материаловедении и лежит в основе настоящей НИР.

г) Было дано обоснование выбора направления и методики исследований в области моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные нанотрубки или пластинчатые включения). Показано, что необходимость прослеживать многомасштабную иерархию физических процессов, в своей совокупности описывающих отклик материала на внешнее воздействие, до атомистического уровня классических и квантовых моделей межатомного и межмолекулярного взаимодействия, является ключевым вопросом современного материаловедения, связанного теснейшим образом с областью нанотехнологий и управлением свойствами материала путем изменения деталей его атомного строения. При огрублении атомистического уровня путем введения некоторых усредненных параметров и характеристик теряется возможность описывать подобные детали. Ценность подобного последовательного с физической точки зрения подхода определяется тем, что основанные на нем многоуровневые модели могут иметь не только описательную, но и прогностическую силу, что чрезвычайно важно для

решения задачи о создании материале с заданными свойствами и для разработки его состава *in silico*.

д) Осуществлена разработка математических моделей и имитационных моделей для многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных композитов. Разработка основана на детальном анализе свойств полимерной матрицы и моделей, которые могут их воспроизводить. Описаны два типа силовых полей (потенциалов) DREIDING и AIREBO, первое из них является универсальным и может быть использовано для различных полимерных матриц, а второе является специфическим для углеводородов и хорошо подходит для описания полиэтиленовой матрицы. Сформулированы свойства, которые должны приниматься во внимание при разработке многомасштабной модели полимерной матрицы (структура полимера, диффузионные характеристики). Разработаны методы генерации начальных структур: 1. Метод генерации произвольного числа полимерных цепей и их укладки в объем, содержащий включения. 2. Метод генерации нанотрубок произвольной хиральности, включая многостенные. 3. Метод генерации двухкомпонентной системы «полиэтилен - углерод» для моделирования трибологических и адгезионных характеристик.

е) Осуществлена разработка алгоритмов проведения масштабируемых вычислений в задачах деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные нанотрубки или пластинчатые включения). Рассмотрены варианты реализации распараллеливания в решении задач молекулярной динамики, рассмотрены перспективы развития аппаратного обеспечения, показано, что дальнейший путь наращивания производительности лежит на следующем масштабном уровне объединения сотен тысяч отдельных вычислительных элементов в системы, содержащие миллионы вычислительных ядер. Проведенные тесты масштабируемости атомистических моделей созданных по технологии LAMMPS показывают

отличную параллельную эффективность в случае использования MPI-параллелизма. Показано, что применение гибридных технологий на основе CUDA дает значительный дополнительный выигрыш в производительности.

ж) Разработана программа и методики экспериментальных исследований (ПМЭИ). Составлена и утверждена ПМЭИ, устанавливающая требования к программной реализации разработанных математических и имитационных моделей, а также к порядку проведения экспериментальных исследований по п. 2.3 КП ГК, с целью обеспечения выполнения требований п. 6.3 ТЗ ГК. Кроме того, ПМЭИ устанавливает объем и порядок проведения экспериментального исследования модельных образцов полимерных нанокомпозитов по п. 2.9 КП ГК, обеспечивающие верификации результатов, полученных с использованием ПМЭИ.

и) Проведено численное моделирование деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластинчатые включения). Показана возможность перенесения разработанной схемы на последующие мезоуровни, в частности, возможность построения огрубленной многоуровневой (coarse-grained) модели разрушения нанокомпозита. Для единичных МД-расчетов характерное число атомов в системе может превышать несколько сотен тысяч, что потенциально позволяет включить в расчетную ячейку ансамбль более крупных многостенных углеродных нанотрубок произвольной пространственной конфигурации и заметно увеличить размер полимера. Описанная схема позволяет осуществлять генерацию произвольной матрицы, состоящей из углеродных нанотрубок, с фиксированным числом стенок (значение ограничено лишь линейными размерами расчетной ячейки), генерацию методом случайных невозвратных блужданий молекул полимера фиксированной длины, проведение МД расчета деформации полученного нанокомпозита вдоль произвольного направления при фиксированной начальной температуре и плотности.

к) Изготовлены модельные образцы полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластинчатые включения), для верификации результатов, полученных с использованием ПМЭИ. Изготовление образцов осуществлялось путем твердофазного деформационного синтеза с последующим компактированием методом термического прессования. Проведено исследование структуры полученных экспериментальных образцов, показано, что образцы, содержащие короткие волокна, характеризуются хаотическим распределением наполнителя в матрице, образцы же, содержащие пластинчатые включения, имеют ориентированную структуру. Образцы, содержащие многостенные трубы, исходно имеют хаотическое распределение наполнителя в матрице, ориентирование может быть достигнуто приложением одноосной растягивающей нагрузки.

Задачами отчетного этапа 2 НИР являются:

1) Создание программной реализации разработанных алгоритмов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластинчатые включения);

2) Разработка программной документации на программную реализацию разработанных алгоритмов;

3) Проведение экспериментальных исследований в соответствии с ПМЭИ, в том числе:

а) демонстрация соответствия результатов теоретических исследований требованиям технического задания;

б) демонстрация возможности проведения многоуровневых вычислений, объединяющих молекулярный и мезоуровни в задачах деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные нанотрубки или пластинчатые включения).

4) Анализ механизмов деформирования и разрушения рассмотренных полимерных нанокомпозитов на основе результатов проведенного численного моделирования.

5) Анализ эффективности предложенных методик моделирования с точки зрения их использования для разработки новых полимерных композитов с повышенной жесткостью и вязкостью разрушения.

6) Обобщение и оценка результатов исследований:

- а) обобщение результатов исследований;
- б) анализ выполнения требований ТЗ на НИР;
- в) оценка полноты решения задач и достижения поставленных целей НИР;

г) оценка эффективности полученных результатов в сравнении с современным научно-техническим уровнем.

7) Разработка рекомендаций по использованию результатов проведенных НИР в реальном секторе экономики, а также в дальнейших исследованиях и разработках:

- а) разработка рекомендаций, предложений по использованию результатов проведенных НИР;
- б) проведение технико-экономической оценки рыночного потенциала полученных результатов;
- в) разработка проекта ТЗ для проведения последующих прикладных НИР.

8) Разработка методики проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов содержащих асимметричные включения.

9) Экспериментальные исследования модельных образцов полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластинчатые включения) согласно ПМЭИ.

10) Сравнительный анализ результатов теоретических и экспериментальных исследований (результатов моделирования с экспериментальными данными).

1 Создание программной реализации разработанных алгоритмов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластиинчатые включения)

Разработанная программа предназначена для проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов содержащих асимметричные включения.

Программная реализация многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения обеспечивает:

- 1) проведение расчетов полимерных нанокомпозитов, как на вычислительных системах начального уровня, так и на высокопроизводительных вычислительных комплексах;
- 2) проведении многоуровневых вычислений, объединяющих молекулярный и мезоуровни;
- 3) определение зависимостей прочности и предела текучести от состава и структуры полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения;
- 4) определение уровня напряжений и сопротивления нагрузке в процессе деформирования полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения;
- 5) моделирование процессов деформации, текстурирования, эволюции микроструктуры под действием напряжений в нанокомпозиционных материалах содержащих в качестве упрочняющих элементов волокна, нанотрубки, дискретные частицы различной формы.

Логическая схема программы и принципы взаимодействия между ее модулями показаны на рисунке 1.1.

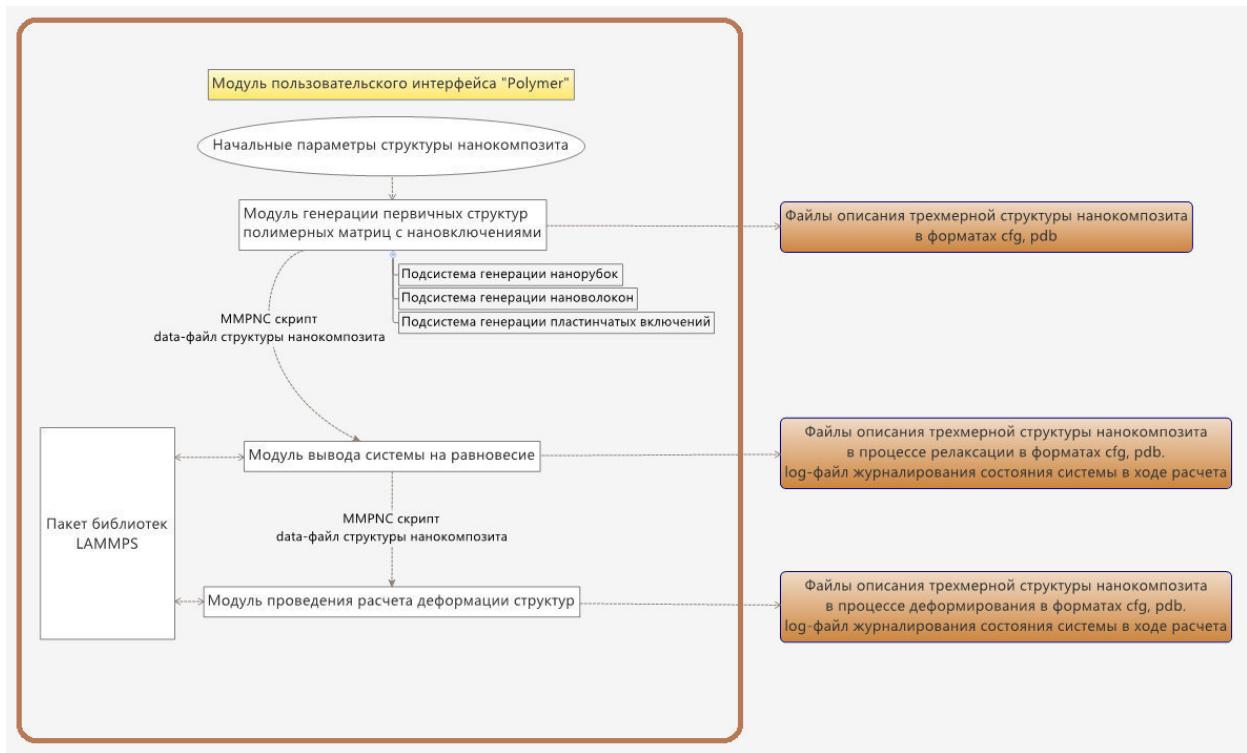


Рисунок 1.1 - Структура программного комплекса и принципов взаимодействия между модулями

Программа позволяет решать широкий класс задач, связанных с изучением деформационного поведения вплоть до разрушения нанокомпозитных материалов на основе полимеров с различными типами асимметричных включений в условиях механического нагружения. В частности, возможно достаточно подробно в динамике описывать механизмы атомного уровня, ответственные за генерацию дефектов структуры, а также их эволюцию. На макроскопическом уровне модуль позволяет описывать распределение напряжений и деформаций.

В отношении изучения и формирования функциональных свойств нанокомпозитных материалов на основе полимеров с различными типами асимметричных включений программа обеспечивает:

- 1) возможность расчета прочностных параметров (модуль упругости, предел упругости, предел текучести)
- 2) расчет уровня напряжений и сопротивления нагрузке в процессе деформирования полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения
- 3) графическое представление структуры нанокомпозитных материалов на основе полимеров с различными типами асимметричных включений.

1.1 Выводы по разделу

Разработанная методика проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих ассиметричные включения соответствует требованиям Технического задания как по набору моделируемых структур полимерных композитов, так и по набору рассчитываемых свойств.

2 Разработка программной документации на программную реализацию разработанных алгоритмов

Подготовленная программная документация включает в себя следующие документы:

- а) ЭО «POLYCOMP». Описание применения (приложение Г.1);
- б) ЭО «POLYCOMP». Руководство системного программиста (приложение Г.2);
- в) ЭО «POLYCOMP». Руководство программиста (приложение Г.3);
- г) ЭО «POLYCOMP». Руководство оператора (приложение Г.4);
- д) ЭО «POLYCOMP». Описание логической и физической структуры (приложение Г.5);
- е) ЭО. ПМ «ПМПИ». Описание программы (приложение Г.6);
- ж) ЭО. ПМ «ПМГПСПМ». Описание программы (приложение Г.7);
- и) ЭО. ПМ «ПМВыМС». Описание программы (приложение Г.8);
- к) ЭО. ПМ «ПМПРД». Описание программы (приложение Г.9);
- л) ЭО. ПМ «ПМВзПБ». Описание программы (приложение Г.10);
- м) ЭО. ПМ «ПМВзПБ». Текст программы (приложение Г.11);
- н) ЭО. ПМ «ПМВыМС». Текст программы (приложение Г.11);
- п) ЭО. ПМ «ПМГПСПМ». Текст программы (приложение Г.11);
- р) ЭО. ПМ «ПМПИ». Текст программы (приложение Г.11);
- с) ЭО. ПМ «ПМПРД». Текст программы (приложение Г.11).

Программная реализация позволяет решать следующий набор задач:

Моделирование процессов деформации, текстурирования, эволюции микроструктуры и дислокационной структуры под действием напряжений в нанокомпозитных материалах, содержащих в качестве упрочняющих элементов волокна, нанотрубки, дискретные частицы различной формы.

При разработке новых нанокомпозитных материалов, а так же для оптимизации структуры и свойств существующих материалов целесообразно

проводить компьютерное моделирование процессов их механического поведения при различных внешних воздействиях. В частности, для полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения необходимо уметь моделировать процессы деформирования, текстурирования, эволюции микроструктуры и дислокационной структуры под действием напряжений.

Определение зависимости прочности и предела текучести от состава и структуры полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

Здесь реализована задача аккумулирования результатов ранее произведенных расчетов и результатов экспериментов для определения свойств (прочность, пластичность) деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (многостенные нанотрубки, волокна или пластиинчатые включения), путем интенсивной деформации.

Определение уровня напряжений в процессе деформирования полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

Здесь реализована задача аккумулирования результатов ранее произведенных расчетов и результатов экспериментов для определения уровня напряжений в процессе деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (многостенные нанотрубки, волокна или пластиинчатые включения), путем интенсивной деформации.

Программная реализация позволяет использовать следующие методы решения:

Моделирование процессов деформации, текстурирования, эволюции микроструктуры и дислокационной структуры под действием напряжений в нанокомпозитных материалах, содержащих в качестве упрочняющих элементов волокна, нанотрубки, дискретные частицы различной формы.

Основу составляют методы классической и огрубленной молекулярной

динамики. На низшем по длине и времени уровне используются метод классической молекулярной динамики. Этот метод предполагают наличие дискретной, атомарной структуры вещества. На более высоких мезо-уровнях используются так называемые огрубленные («coarse-grained») модели.

В основе метода молекулярной динамики, наиболее часто используемого для моделирования нанокомпозитов, лежит численное интегрирование классических уравнений движения Ньютона для системы частиц. Траектория движения отдельных атомов рассчитывается на основе эмпирических и полуэмпирических потенциалов взаимодействия. Физические свойства системы рассчитываются по формулам статистической физики, путем усреднения по числу частиц и времени.

В мезо- и макро моделях составные части нанокомпозитов представлены в упрощённой геометрии, межфазные явления не учитываются. Основной идеей метода является объединение нескольких маленьких частиц (групп атомов) в один большой блок (супер-атом) и использование общих силовых постоянных и геометрических параметров, основанных на простых соображениях гибридизации, вместо отдельных силовых постоянных и геометрических параметров, зависящих от конкретной комбинации атомов с учетом особенностей связи, валентных и торсионных углов.

Связь масштабов обеспечивается передачей параметров структуры нанокомпозитного материала между уровнями. Ценность подобного последовательного с физической точки зрения подхода определяется тем, что основанные на нем многоуровневые модели могут иметь не только описательную, но и прогностическую силу, что чрезвычайно важно для решения задачи о создании материале с заданными свойствами и для разработки его состава *in silico*.

Высокая параллельная эффективность комплекса в случае MPI обеспечивается за счет использования технологии LAMMPS. Применение гибридных технологий на основе CUDA также дает значительный дополнительный выигрыш в производительности

Определение зависимости прочности и предела текучести от состава и структуры полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

Методы классической молекулярной динамики, совмещенные с последующим привлечением огрубленных моделей, позволяют производить исследования микроструктуры нанокомпозитов и с достаточной точностью оценивать их макромасштабные свойства, связанные с прочностью данных материалов и влиянием на нее широкого спектра факторов, включающих в себя аспекты структуры (тип полимера, тип и концентрация нановключений), скорость деформирования, температуру образца.

Определение уровня напряжений в процессе деформирования полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

В ходе компьютерного расчета физические свойства системы, такие как температура, тензор напряжений, рассчитываются по формулам статистической физики, путем усреднения по числу частиц и времени. Эти параметры записываются в специальные лог-файлы на протяжении всего расчета, что позволяет впоследствии проводить последовательный многофакторный анализ всех стадий процесса деформирования.

2.1 Выводы по разделу

В соответствии с Техническим заданием была разработана Программная документация на программную реализацию методики проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих ассиметричные включения.

3 Проведение экспериментальных исследований в соответствии с ПМЭИ

Для проведения проверки работоспособности программной реализации (ПрР) программного комплекса (ПрК) для многоуровневого компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения на соответствие ПМЭИ использовался два вычислительных кластера.

Первый кластер имел следующие спецификации:

- 1) QC SUSE LINUX Enterprise Server 10 for X86 and for AMD64 & Intel EM64T
- 2) High Performance Computing 1-Node up to 2-CPU Full-term Upgrade Protection e-License.
- 3) Программное обеспечение: Microsoft Windows Compute Cluster Server 2003 в режиме Dual Boot

Второй кластер гибридной архитектуры следующей конфигурации:

- 1) Шлюзовая машина кластера
- 2) Дисковый массив 10 Терабайт
- 3) Кластер содержит 5 вычислительных узлов. Из них 3 узла снабжены графическими ускорителями GPU (по 2 шт. на узел). Один узел используется как хранилище
- 4) Каждый узел основан на 2-х процессорной 4-6 ядерной архитектуре, имеет 20 Gb оперативной памяти
- 5) Для связи узлов используется быстрая коммутационная сеть Infiniband.
- 6) Для сервисных целей используется сеть Gigabit Ethernet.

7) Один вычислительный узел:

- а) Два процессор Eight-Core AMD Opteron 6128
- б) Материнская плата Supermicro H8DG6
- в) Две видеокарты GeForce GTX 480 1536 DDR5
- г) 8 модулей по 4Gb DDR3 1333MHz ECC REG
- д) HDD 500Gb

Для запуска ПрР использовалась комбинация «рабочее место оператора – суперкомпьютер». Использовалось следующее программное обеспечение:

1) Операционная система Linux, например:

- а) Red Hat Enterprise Linux 6.

2) Компилятор языка C/C++, например:

- а) GCC версии 4.6.4.

3) wget – консольная программа для загрузки файлов по сети;

4) GNU Bourne-Again Shell 4;

5) Архиваторы tar и gzip версии 1.6;

6) Библиотека MPI MPICH версии 1.5;

7) SSH-клиенты Putty 0.62 и WinSCP 5.1.5.

3.1 Демонстрация соответствия результатов теоретических исследований требованиям технического задания

В соответствии с ПМЭИ была произведена проверка характеристик (нумерация согласно разработанному ПМЭИ), перечисленных в таблице 1. Протоколы испытаний приведены в приложении А.

Таблица 1 - Список характеристик, по которым проводилась проверка демонстрации соответствия результатов теоретических исследований требованиям технического задания с нумерацией согласно ПМЭИ

№ п/п	Номер согласно ПМЭИ	Характеристика
1	4.1	Проверка на соответствие комплектности и оценка качества ПД
2	4.2	Проверка комплектности программной реализации, ее соответствия ПД
3	4.3	Проверка комплектности и качества ЭД
4	4.4	Испытания отдельных программных компонент программной реализации
5	4.4.1	Испытания логики
6	4.4.2	Проверка зависимости прочности от состава и структуры полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения – углеродными нанотрубками длиной не более 5 мм, диаметром не более 50 нм
7	4.4.3	Проверка зависимости прочности от состава и структуры полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения - волокнами диаметром не более 10 мкм, длиной не более 500 мкм
8	4.4.4	Проверка зависимости прочности от состава и структуры полимерных нанокомпозитов содержащих

		ассиметричные включения - дискретными частицами с размерами по любой из осей не более 50 мкм
9	4.4.5	Проверка зависимости предела текучести от состава и структуры полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения – углеродными нанотрубками длиной не более 5 мм, диаметром не более 50 нм
10	4.4.6	Проверка зависимости предела текучести от состава и структуры полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения – волокнами диаметром не более 10 мкм, длиной не более 500 мкм
11	4.4.7	Проверка зависимости предела текучести от состава и структуры полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения – дискретными частицами с размерами по любой из осей не более 50 мкм
12	4.4.8	Проверка точности определения технической характеристики материала - предел прочности
13	4.4.9	Проверка точности определения технической характеристики материала - предел текучести
14	4.4.10	Проверка точности определения технической характеристики материала - относительного удлинения при растяжении
15	4.4.11	Проверка точности определения технической характеристики материала - модуля упругости
16	4.4.12	Проверка точности определения технической

		характеристики материала - критической величины геометрических параметров включений
17	4.4.13	Проверка диапазона температур, для которых проводится моделирование свойств
18	4.4.14	Проверка диапазона плотности полимера, для которых проводится моделирование свойств
19	4.4.15	Проверка диапазона числа атомов в молекуле моделируемого полимера
20	4.4.16	Проверка диапазона температур плавления моделируемого полимера
21	4.4.17	Проверка диапазона предела текучести моделируемого полимера
22	4.4.18	Проверка диапазона модуля упругости моделируемого полимера
23	4.4.19	Проверка диапазона удлинения при разрыве моделируемого полимера
24	4.4.20	Проверка диапазона коэффициента термического линейного расширения моделируемого полимера
25	4.4.21	Проверка количества слоев моделируемых многослойных углеродных нанотрубок
26	4.4.22	Проверка допустимого значения диаметра цилиндрического сечения углеродных волокон
27	4.4.23	Проверка допустимого значения предела прочности

		моделируемых углеродных волокон
28	4.4.24	Проверка допустимого значения модуля упругости моделируемых углеродных волокон
29	4.4.25	Проверка допустимого значения деформации разрушения моделируемых углеродных волокон
30	4.4.26	Проверка допустимого значения коэффициента термического линейного расширения моделируемых углеродных волокон
31	4.4.27	Проверка допустимого значения плотности моделируемых асимметричных включений
32	4.4.28	Проверка допустимого значения модуля упругости моделируемых асимметричных включений
33	4.4.29	Проверка допустимого значения коэффициента термического линейного расширения моделируемых асимметричных включений
34	4.4.30	Проверка диапазона напряжений, в котором производится расчет деформированного состояния
35	4.4.31	Проверка степени совпадения значений параметров объекта и значений тех же параметров, рассчитанных с помощью модели
36	4.4.32	Проверка погрешности отражения заданных свойств объекта от экспериментальных значений
37	4.5	Проверка связей между программами комплекса

38	4.6	Испытание интеграции комплекса с минимальной комплектацией аппаратных средств
----	-----	---

3.2 Демонстрация возможности проведения многоуровневых вычислений, объединяющих молекулярный и мезоуровни в задачах деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные нанотрубки или пластинчатые включения)

Ниже приводятся примеры примеры консольного вывода результатов моделирования деформации на трех масштабных уровнях (полноатомная модель, огрубленная модель DREIDING, огрубленная мезоскопическая модель):

1. Случай полноатомной модели (1 миллион шагов интегрирования по времени для вывода системы на равновесие).

```

units          real
atom_style    full
boundary      p p p

pair_style    hybrid/overlay hbond/dreiding/lj 2 6 6.5 90 lj/cut 8.50000
bond_style    harmonic
angle_style   harmonic
dihedral_style none
improper_style none

read_data polyeth_dreiding_250_atoms_15_mol.data

1 = max bonds/atom
1 = max angles/atom
0 = max dihedrals/atom
orthogonal box = (-26 -26 -26) to (26 26 26)

```

```

2 by 4 by 5 MPI processor grid

3780 atoms

3765 bonds

3750 angles

0 dihedrals

2 = max # of 1-2 neighbors

2 = max # of 1-3 neighbors

4 = max # of 1-4 neighbors

6 = max # of special neighbors


pair_coeff * * hbond/dreiding/lj 1 i 9.5 2.75 4 9.0 11.0 90.0

pair_coeff * * lj/cut    0.095100000500679          3.472990412772877

timestep      0.1


thermo 500

fix      1 all nvt temp 100 300 1

dump 2 all cfg 10000 PE_press_dr.*.cfg id type xs ys zs

run 1000000

Memory usage per processor = 4.4552 Mbytes

Step Temp E_pair E_mol TotEng Press

      0          0      58425.333     48359.243     106784.58     118988.23
      500        99.73039     1728.3144     18090.821     20942.546    -18821.458
     1000       100.07356     -604.12573     7229.1112     7752.2622    -14839.643
     1500       100.24097     -1634.3872     2425.2163     1919.9916    -7877.738
     2000       100.37095     -2278.6856     635.53255     -512.5264    -3321.0739
     2500       100.49171     -2679.9162     282.75068     -1265.1785   -1348.2501
     3000       100.59862     -2872.0305     257.59673     -1481.2426   -1426.8872
     3500       100.69956     -2947.2448     254.80035     -1558.1162   -2565.4787
     4000       100.79833     -2982.8297     261.60198     -1585.7868   -3361.9441
     4500       100.90323     -3015.3751     296.8372     -1581.9153   -3285.6546
     5000       100.99979     -3061.3725     282.97781     -1640.6845   -2824.9792
     5500       101.10166     -3106.1393     311.04654     -1656.2349   -2532.4463
     6000       101.1996      -3157.1466     309.54513     -1707.6405   -2564.3158

.....

```

```

999000    298.91047    -5228.59     2577.9829    716.46429   -593.1312
999500    304.28396    -5200.237     2584.701     812.0649    68.819902
1000000   298.06912    -5173.0233    2590.6518    775.22246   -727.42651

```

Loop time of 24462.2 on 40 procs for 1000000 steps with 3780 atoms

```

Pair  time (%) = 8513 (34.8006)
Bond  time (%) = 12.4469 (0.0508821)
Neigh  time (%) = 1.98633 (0.00812001)
Comm  time (%) = 13846.1 (56.602)
Outpt  time (%) = 9.77916 (0.0399766)
Other  time (%) = 2078.89 (8.49838)

```

```

Nlocal:    94.5 ave 212 max 0 min
Histogram: 16 0 0 1 2 3 5 3 2 8
Nghost:    1873.05 ave 2706 max 1023 min
Histogram: 8 8 0 0 0 0 8 8 0 8
Neighs:    19644.8 ave 54538 max 0 min
Histogram: 16 1 3 5 2 2 3 0 1 7
FullNghs:  39289.6 ave 106539 max 0 min
Histogram: 16 0 2 4 5 3 2 0 1 7

```

```

Total # of neighbors = 1571582
Ave neighs/atom = 415.762
Ave special neighs/atom = 5.95238
Neighbor list builds = 1219
Dangerous builds = 0

```

2. Случай огрубленной модели DREIDING (500 тыс. шагов интегрирования по времени после вывода системы на равновесие).

```

atom_style      atomic
boundary        p p p

pair_style      airebo 1.5

read_data       polyeth_dreiding_1000_atoms_5_mol_AA.data

```

```

orthogonal box = (-51 -101 -101) to (51 101 101)
2 by 3 by 4 MPI processor grid
15010 atoms

pair_coeff * * CH.airebo C H

timestep      0.0001

thermo 100
thermo_style    custom step temp  etotal vol press pe epair xlo xhi pxx pyy pzz

fix      1 all nvt temp 1 300 0.01
dump      2 all cfg 20000 test_airebo.*.cfg id type xs ys zs
dump_modify 2 element C H
run      100000

Memory usage per processor = 4.44756 Mbytes

Step Temp TotEng Volume Press PotEng E_pair Xlo Xhi Pxx Pyy Pzz
      0          0   -1035.1281     4162008   90784.471  -1035.1281  -
1035.1281        -51           51   94437.139   93621.525   84294.747
      100        127.74574  -52507.131     4162008   10525.167  -52754.966  -
52754.966        -51           51   10372.052   10066.853   11136.595
      200        75.596471  -56503.829     4162008   5957.4573  -56650.491  -
56650.491        -51           51   5538.8051   5395.1329   6938.4338
      300        57.021938  -58875.368     4162008   4275.3133  -58985.995  -
58985.995        -51           51   3894.8667   3813.1391   5117.9341
      400        32.222237  -60238.421     4162008   3388.8783  -60300.935  -
60300.935        -51           51   3130.187   3105.1724   3931.2756
      500        16.909235  -60777.596     4162008   2839.2959  -60810.401  -
60810.401        -51           51   2681.2362   2693.7951   3142.8565
      600        12.618775  -61044.583     4162008   2418.8342  -61069.064  -
61069.064        -51           51   2306.6553   2328.5021   2621.3451
      700        10.544803  -61228.151     4162008   2100.8794  -61248.608  -
61248.608        -51           51   2012.4799   2030.3667   2259.7916
      800        9.3731793  -61368.897     4162008   1867.2114  -61387.081  -
61387.081        -51           51   1792.418   1806.0666   2003.1497
      900        8.5140995  -61484.22    4162008   1686.4448  -61500.737  -
61500.737        -51           51   1623.6437   1629.0129   1806.6778
      1000       8.0431996  -61581.707     4162008   1541.2025  -61597.311  -
61597.311        -51           51   1487.4747   1485.3666   1650.766
      1100       7.698789  -61667.645     4162008   1419.5367  -61682.582  -
61682.582        -51           51   1372.2032   1366.5048   1519.9019
      1200       7.2671119  -61743.419     4162008   1312.5275  -61757.517  -
61757.517        -51           51   1268.132   1260.3184   1409.1322
      1300       7.0631613  -61810.05    4162008   1218.5054  -61823.753  -
61823.753        -51           51   1177.2315   1165.6931   1312.5917
      1400       6.920861  -61870.609     4162008   1136.4698  -61884.036  -
61884.036        -51           51   1096.4287   1085.2042   1227.7764

```

1500	7.0129988	-61926.533	4162008	1063.8012	-61940.139	-
61940.139	-51	51	1024.8486	1014.7702	1151.7848	
1600	6.9509736	-61978.928	4162008	996.31578	-61992.414	-
61992.414	-51	51	958.72641	949.77027	1080.4507	
1700	7.0897265	-62028.435	4162008	932.94796	-62042.189	-
62042.189	-51	51	897.30771	888.2901	1013.2461	
1800	6.9017537	-62074.499	4162008	873.87345	-62087.889	-
62087.889	-51	51	841.42794	828.66451	951.52789	
1900	6.9259574	-62116.183	4162008	820.12696	-62129.62	-
62129.62	-51	51	788.94608	777.1728	894.26198	
2000	7.3466817	-62155.71	4162008	772.41924	-62169.963	-
62169.963	-51	51	741.42479	732.678	843.15492	
....						
799000	1220.6833	-58140.446	1597132.8	285.93801	-60508.651	-
60508.651	-499.104	499.104	224.53322	533.16615	100.11465	
799100	1211.8842	-58139.6	1597419.5	125.37855	-60490.735	-
60490.735	-499.1936	499.1936	213.40642	57.242949	105.48628	
799200	1210.8837	-58139.002	1597706.2	-95.259497	-60488.196	-
60488.196	-499.2832	499.2832	94.746807	-142.73401	-237.79129	
799300	1211.1834	-58138.508	1597993	180.49439	-60488.284	-
60488.284	-499.3728	499.3728	304.8941	11.294543	225.29452	
799400	1208.3405	-58137.853	1598279.7	44.394291	-60482.112	-
60482.112	-499.4624	499.4624	95.217376	-131.51504	169.48054	
799500	1205.1681	-58137.359	1598566.4	-28.045041	-60475.465	-
60475.465	-499.552	499.552	-369.86486	43.356755	242.37298	
799600	1215.3641	-58136.951	1598853.1	-10.357049	-60494.837	-
60494.837	-499.6416	499.6416	-280.92075	304.71119	-54.861592	
799700	1212.1863	-58136.341	1599139.8	226.17084	-60488.062	-
60488.062	-499.7312	499.7312	51.191605	257.59143	369.72948	
799800	1206.7687	-58135.861	1599426.6	58.53003	-60477.071	-
60477.071	-499.8208	499.8208	159.02197	35.136384	-18.56826	
799900	1208.2481	-58135.407	1599713.3	219.5512	-60479.487	-
60479.487	-499.9104	499.9104	418.24716	79.960968	160.44546	
800000	1217.4101	-58135.657	1600000	16.000368	-60497.513	-
60497.513	-500	500	95.797028	-293.61292	245.817	

Loop time of 5084.98 on 24 procs for 500000 steps with 15010 atoms

Pair time (%) = 2740.38 (53.8917)
 Neigh time (%) = 92.5779 (1.82062)
 Comm time (%) = 1908.49 (37.5319)
 Outpt time (%) = 4.81317 (0.0946546)
 Other time (%) = 338.719 (6.66117)

Nlocal: 625.417 ave 1279 max 26 min
 Histogram: 9 2 1 0 0 0 0 1 6 5
 Nghost: 3979.62 ave 7374 max 598 min
 Histogram: 12 0 0 0 0 0 0 0 0 12

```

Neighs:      0 ave 0 max 0 min
Histogram: 24 0 0 0 0 0 0 0 0 0
FullNghs:   81542.2 ave 173317 max 1617 min
Histogram: 11 1 0 0 0 0 0 0 7 5

Total # of neighbors = 1957012
Ave neighs/atom = 130.381
Neighbor list builds = 5906
Dangerous builds = 0

```

3. Случай огрубленной мезоскопической модели (400 тыс. шагов расчета деформации).

```

atom_style      full
boundary        p p p

pair_style      lj/cut 8.50000

bond_style      harmonic
angle_style     harmonic
dihedral_style none
improper_style none

#read_data
/home/vpisar/nanocomposites/lj/polyeth_lj_5000_atoms_10_mol.data
read_restart
/home/vpisar/nanocomposites/lj/RESTART/PE_lj_5000atoms_10mol_250K_53.restart
orthogonal box = (-53 -53 -53) to (53 53 53)
2 by 4 by 4 MPI processor grid
50020 atoms
50010 bonds
50000 angles
2 = max # of 1-2 neighbors
2 = max # of 1-3 neighbors
4 = max # of 1-4 neighbors
6 = max # of special neighbors

#pair_coeff      * * hbond/dreiding/lj 1 i 9.5 2.75 4 9.0 11.0 90.0
pair_coeff * * 0.113266 4.28

#velocity        all create 500.0 87498

neighbor 2.0 bin

```

```

neigh_modify      every 10 check yes

fix           1 all nve
#fix        2 all deform 1 x final -53.0 53.0 y final -53.0 53.0 z final -53.0
53.0 units box
fix          4 all deform 1 x erate 0.001
fix          3 all temp/rescale 10 250.0 250.0 10 1.0

dump         2 all cfg 1000 /home/vpisar/nanocomposites/lj/DUMP/0.001/*.cfg id
type xs ys zs

timestep 0.001
thermo_style          custom step temp pe ke etotal press xlo xhi pxx pyy
pzz
thermo          1000
run            4000000
Memory usage per processor = 5.70486 Mbytes
Step Temp PotEng KinEng TotEng Press Xlo Xhi Pxx Pyy Pzz
      301000          250    26777852    37274.284    26815127    4355274.5
-53      53          4280715.1    4266034.2    4519074.2
      302000          250    26558803    37274.284    26596077    4310779.5    -
53.053   53.053    4226609.5    4227375.9    4478353.1
      303000          250    26342137    37274.284    26379411    4267179.1    -
53.106   53.106    4174224.8    4189198.3    4438114.2
      304000          250    26127862    37274.284    26165136    4224505.2    -
53.159   53.159    4123615.9    4151522.5    4398377.2
      305000          250    25915918    37274.284    25953192    4182710.2    -
53.212   53.212    4074622.6    4114355.3    4359152.7
      306000          250    25706251    37274.284    25743525    4141743.5    -
53.265   53.265    4027088.4    4077697.8    4320444.4
      4289000         259.72064   -21957.529    38723.605    16766.076   -74.635078    -
264.364   264.364   -192.14063    24.200062   -55.964668
      4290000         259.74502   -21952.088    38727.238    16775.15   -74.535179    -
264.417   264.417   -191.47774    23.861879   -55.989681
      4291000         259.76673   -21946.279    38730.475    16784.197   -74.378152    -
264.47    264.47    -190.82591    23.631999   -55.940548
      4292000         259.7867   -21939.999    38733.453    16793.454   -74.143423    -
264.523   264.523   -190.1666    23.517271   -55.780935
      4293000         259.80576   -21934.091    38736.296    16802.205   -73.834333    -
264.576   264.576   -189.54628    23.534881   -55.491596
      4294000         259.82464   -21927.753    38739.11     16811.357   -73.420086    -
264.629   264.629   -188.96321    23.713444   -55.010493
      4295000         259.84382   -21922.351    38741.969    16819.619   -72.922936    -
264.682   264.682   -188.45322    24.025404   -54.340993
      4296000         259.86359   -21916.262    38744.917    16828.655   -72.301533    -
264.735   264.735   -187.99594    24.526029   -53.434688
      4297000         259.88403   -21910.572    38747.965    16837.393   -71.580165    -
264.788   264.788   -187.61429    25.189226   -52.31543
      4298000         259.90511   -21905.159    38751.108    16845.949   -70.759668    -
264.841   264.841   -187.30652    26.003127   -50.975614
      4299000         259.92671   -21899.126    38754.329    16855.203   -69.826891    -
264.894   264.894   -187.04386    26.979098   -49.415912

```

```

        4300000      259.94873     -21893.712      38757.612      16863.9      -68.820003      -
264.947      264.947     -186.85215      28.073676     -47.681534
        4301000      259.97116     -21888.196      38760.956      16872.761      -67.735031
-265      265     -186.68135      29.27339     -45.797132

Loop time of 32266.7 on 32 procs for 4000000 steps with 50020 atoms

Pair   time (%) = 8210.59 (25.446)
Bond   time (%) = 1408 (4.36363)
Neigh   time (%) = 2.36599 (0.00733261)
Comm   time (%) = 21324.5 (66.0882)
Outpt   time (%) = 435.325 (1.34914)
Other   time (%) = 885.949 (2.74571)

Nlocal:    1563.12 ave 2166 max 500 min
Histogram: 1 1 0 0 5 6 6 7 3 3
Nghost:    3879.78 ave 4770 max 3203 min
Histogram: 6 4 3 2 3 4 2 4 1 3
Neighs:    48782.4 ave 80317 max 16259 min
Histogram: 2 0 2 5 9 3 3 6 0 2

Total # of neighbors = 1561036
Ave neighs/atom = 31.2082
Ave special neighs/atom = 5.9976
Neighbor list builds = 466
Dangerous builds = 0

#restart 100 /home/vpisar/nanocomposites/lj/RESTART/200K/*.restart

write_restart
/home/vpisar/nanocomposites/lj/RESTART/PE_lj_5000atoms_10mol_250K_deform_0.001
.restart

```

3.3 Выводы по разделу

Проведенные испытания показали соответствие разработанной методики проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения и ее программной реализации требованиям Технического задания. Показана возможность проведения многоуровневых

вычислений, объединяющих молекулярный и мезоуровни в задачах деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные нанотрубки или пластинчатые включения).

4 Анализ механизмов деформирования и разрушения рассмотренных полимерных нанокомпозитов на основе результатов проведенного численного моделирования

В рамках отчета за этап 1 был описан метод генерации начальных полноатомных структур. Использование данного подхода позволяет подобрать параметры огрубленной мезоскопической модели, которые обеспечивают те же значения энергии когезии нановключений и полимерной матрицы. После выбора параметров CG-потенциала можно проводить расчет деформации в огрубленной модели нанокомпозита.

Проиллюстрируем такой расчет на двух примерах:

1) В случае отсутствия в полимерной матрице включений ее прочность понижается. Предельным случаем является случай полимера с высокой степенью ориентации полимерных цепей. В этом случае отклик системы на растягивающую деформацию определяется в первую очередь взаимным «трением» молекул полимера друг о друга. Микроскопические силы обеспечивающие подобное «трение» соответствуют слабому Ван-дер-Ваальсовскому взаимодействию и не способны обеспечить высокую прочность (см. рисунок 4.1). При увеличении длины цепей начинает проявляться фактор перепутывания цепей и соответствующий энтропийный эффект модифицирует природу отклика полимера на внешнее воздействие. Даже для коротких полимерных цепей (как показано на рисунке 4.1 для полиэтилена) наблюдается два участка на зависимости «напряжение - деформация»: участок А-Б соответствует упругой деформации и первой стадии «распутывания» цепей, последующий участок Б-В соответствует относительно стационарному режиму пластического течения полимера.

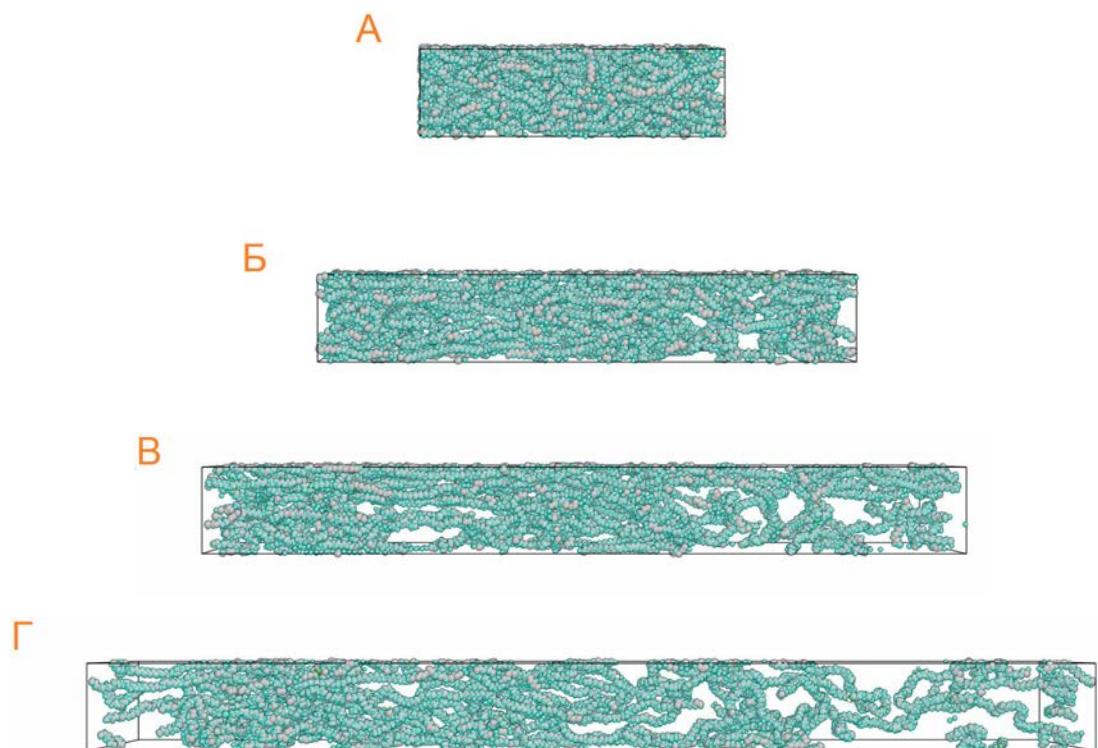
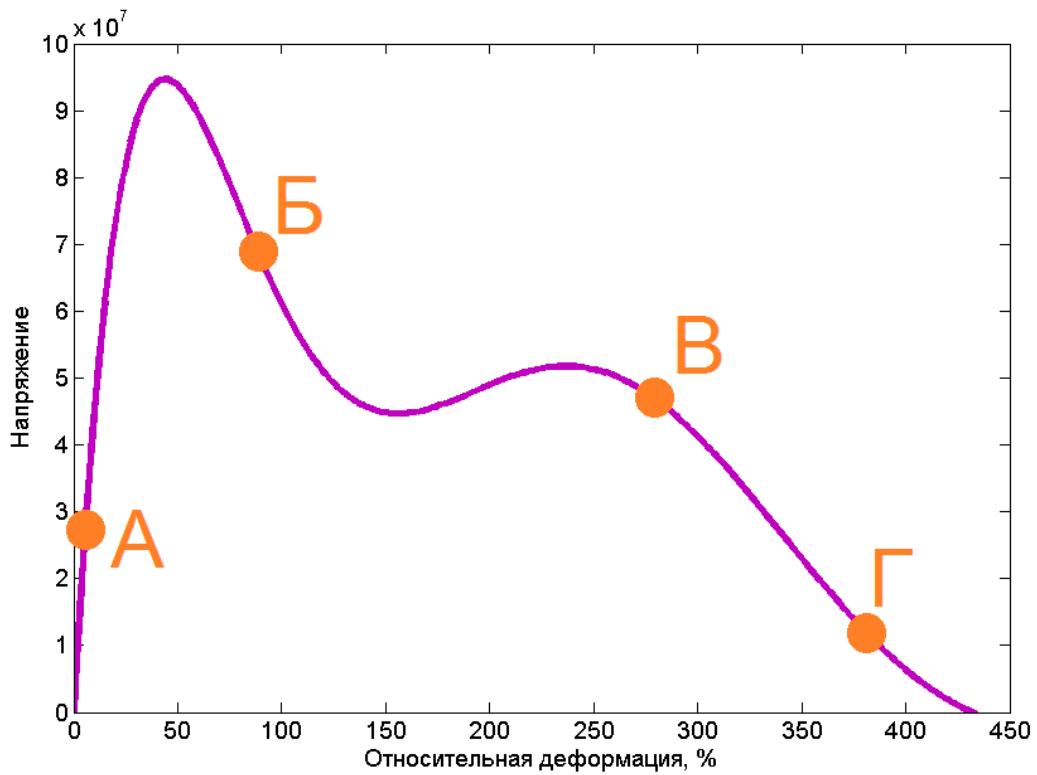


Рисунок 4.1 - отклика полимера на внешнее воздействие для полиэтилена с высокоориентированными цепями с молекулярной массой меньше M_e (напряжение представлено в относительных единицах). Показаны структуры, соответствующие различным стадиям процесса растяжения

2) Добавление включений изменяет механические свойства материала.

Проводится расчет coarse-grained (мезоскопической) модели. Моделировалась полиэтиленовая матрица, состоящая из 10 молекул полиэтилена из 5000 мономеров CH_2 . В coarse-grained модели полимер состоит из супер-атомов, которые представляют мономеры CH_2 (рисунок 4.2)

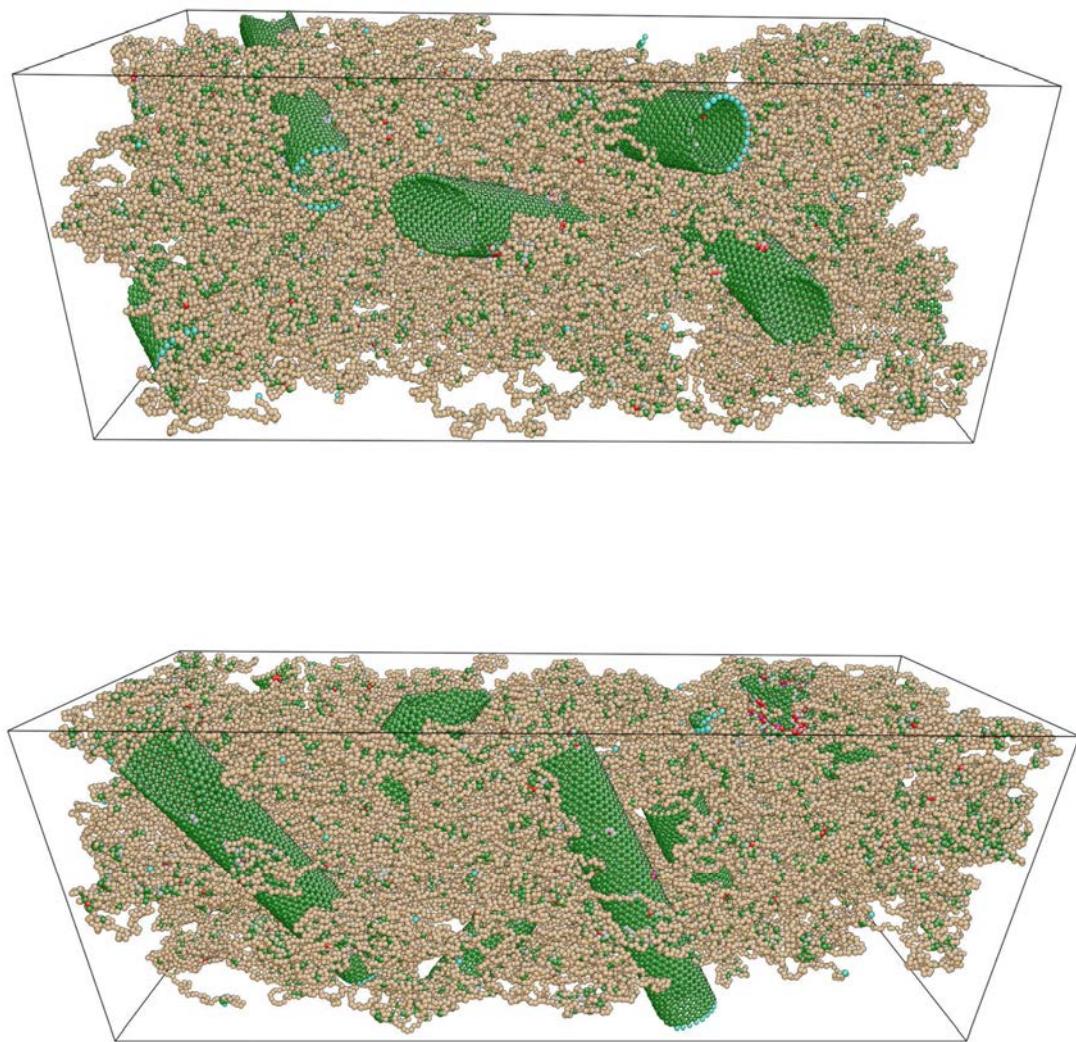


Рисунок 4.2 - Пример огрубленной модели с углеродными нанотрубками

Для молекулярно-динамического расчета используется комбинация гармонического потенциала, потенциала валентного угла и потенциала Леннарда-Джонса благодаря своей простоте и универсальности. Полная энергия полимера состоит из следующих частей:

- а) Гармонический потенциал между соседними супер-атомами, соединенными химической связью:

$$U_{bond}(r) = \frac{1}{2} k_r (r - r_0)^2$$

$$k_r = 700 \text{ ккал/моль}, r_0 = 1.557 \text{ \AA}.$$

- б) Потенциал, зависящий от изменения валентного узла между соседними супер-атомами:

$$U_{angle}(\theta) = \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2$$

$$k_\theta = 112 \text{ ккал/моль}, \theta_0 = 112 \text{ град}$$

- в) Потенциал Леннарда-Джонса для описания Ван-дер-Ваальсовского взаимодействия между атомами, не связанными химической связью:

$$U(r) = 4u \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)$$

$$u = 0.113266 \text{ ккал/моль}, \sigma = 4.28 \text{ \AA}.$$

Для ускорения генерации полиэтиленовой матрицы при плотности $\sim 1 \text{ г/cm}^3$ сначала создавалась матрица плотностью 0.074375 г/cm^3 , и в молекулярно-динамическом расчете производилось 3х-осное сжатие до плотности 0.97 г/cm^3 при 500 K . Затем в течение 0.3 пс температура понижалась до 250 K для получения стеклообразного состояния полиэтилена.

Примеры начальных структур показаны на рисунках 4.2 и 4.3.

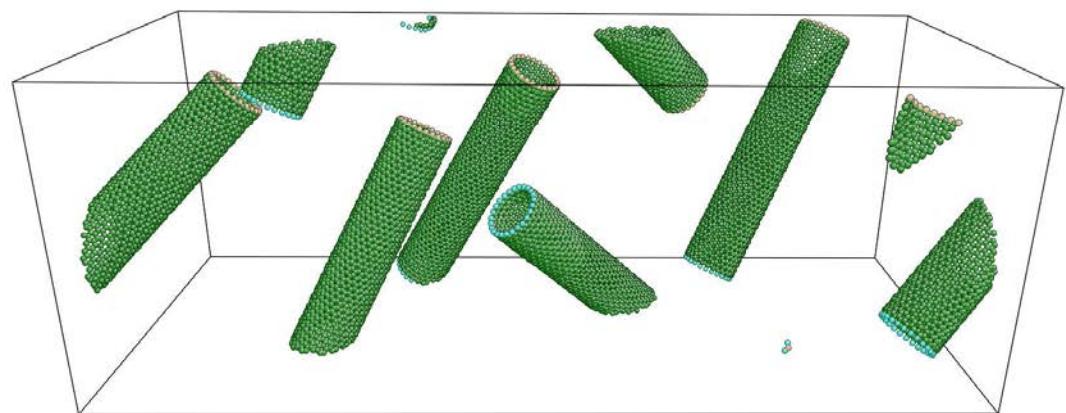
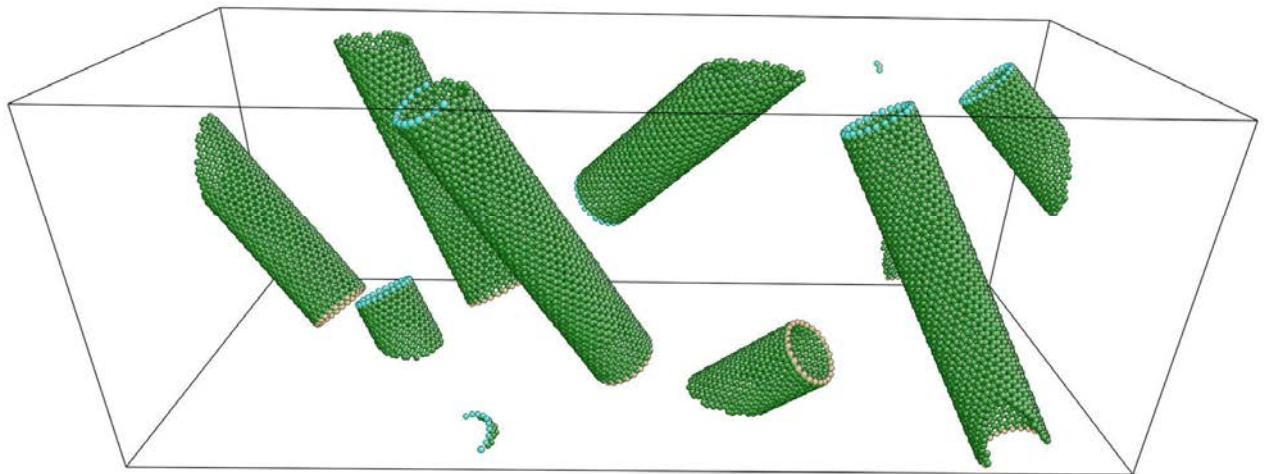


Рисунок 4.3 - Пример огрубленной модели с углеродными нанотрубками,
молекулы полимера не показаны

Деформирование образца моделировалось путем одноосного растяжения с различными скоростями (рисунок 4.4).

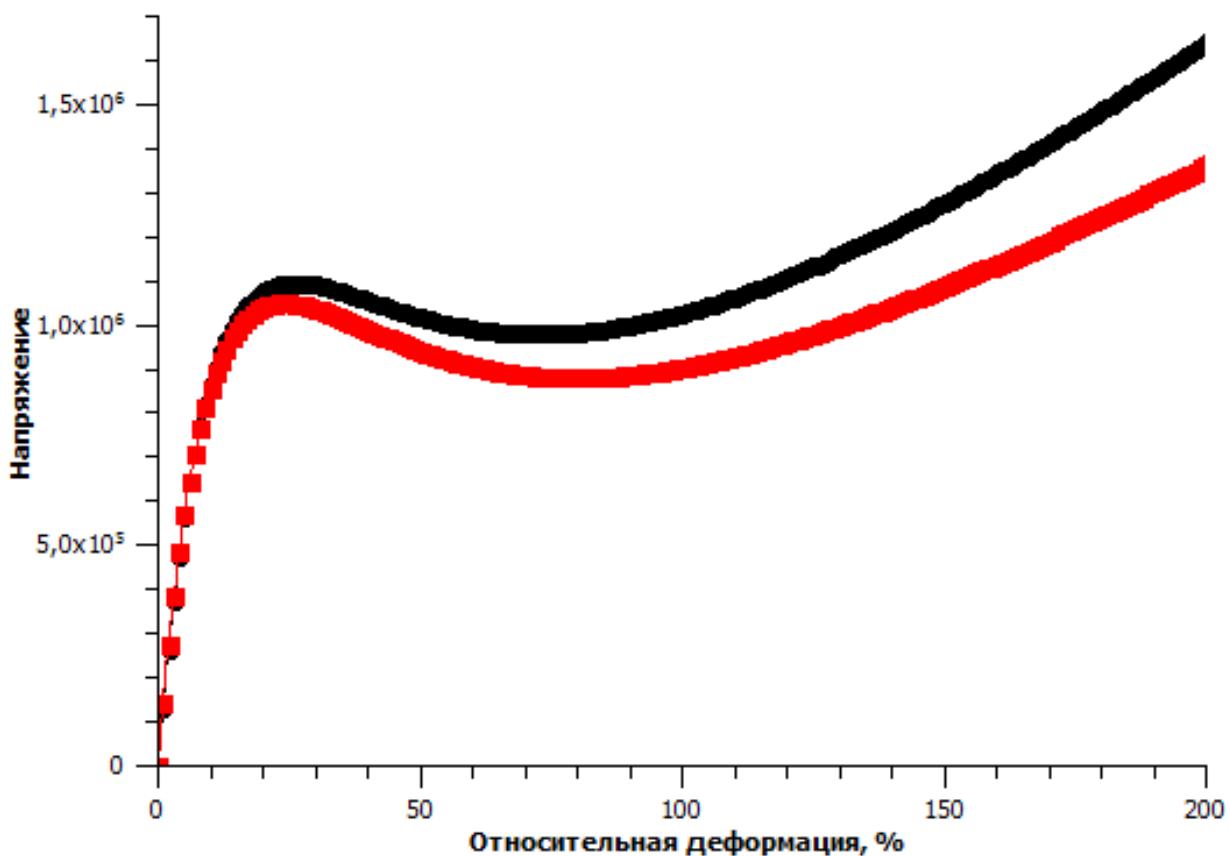


Рисунок 4.4 - Зависимость напряжения в образце от величины относительной деформации. Напряжение дано в относительных единицах. Для используемой модели CG-потенциала 10^6 отн. ед. = 20 МПа. Черная и красная линия соответствуют скоростям растяжения, отличающимся на порядок величины

Результаты показывают наличие слабой зависимости от скорости растяжения (рисунок 4.4). Однако ее влияние не превышает требуемого уровня точности для расчета (как в данном примере) предела текучести нанокомпозитного материала (10%).

На рисунке 4.5 показан пример сравнения одноосного деформирования чистого полимера и нанокомпозитного материала. Результаты показывают повышение прочностных свойств композита по сравнению с исходной матрицей.

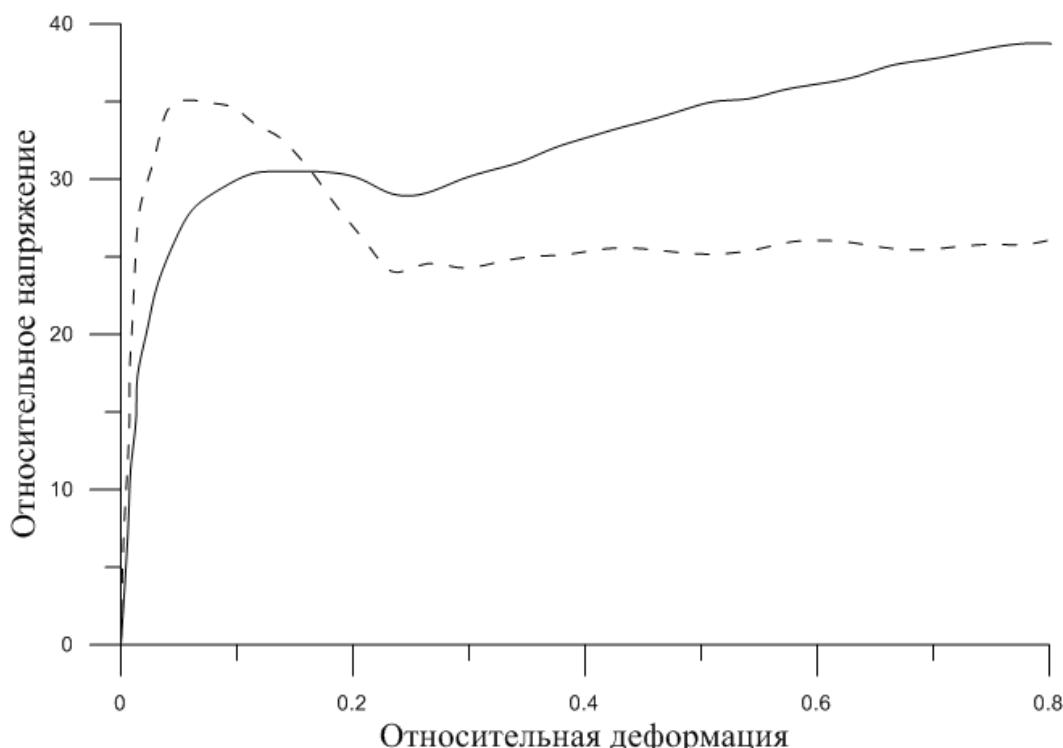


Рисунок 4.5 - Зависимость напряжения в образце от величины относительной деформации. Пунктирная линия соответствует чистому полимеру, сплошная линия – образцу с нановключениями. Напряжение дано в относительных единицах

В рамках данной работы были проведены расчеты структурно изоморфных моделей методом конечных элементов с использованием OpenFoam (бесплатный пакет с открытым кодом). Полученные результаты свидетельствуют о преимуществе огрубленных моделей с явным учетом микроструктуры. Использование специализированного конечно-элементного кода Palmyra (см. Раздел 8) в рамках данного проекта не было запланировано.

4.1 Выводы по разделу

Расчеты кривых напряжение-деформация подтверждают влияние нановключений и скорости деформации на механические свойства

полимерных нанокомпозитов и демонстрируют эффект упрочнения материала. При моделировании деформирования критически важным является скорость деформации. Проверка показала, что добиться сходимости результатов по этому параметру возможно (т.е. показать, что зависимость «напряжение - деформация» пренебрежимо мало зависит от величины данной скорости). Перенос данных в рамках многомасштабной модели идет по следующей последовательности: межатомные потенциалы – огрубленные потенциалы – энергии когезии для континуальной модели. Использование энергий когезии и механических свойств полимерной матрицы и материала включения недостаточно для адекватного моделирования больших степеней деформации. Огрубленное атомистическое описание в данный момент превосходит конечно-элементные подходы по степени детализации и представляет собой наиболее перспективную методику проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

5 Анализ эффективности предложенных методик моделирования с точки зрения их использования для разработки новых полимерных композитов с повышенной жесткостью и вязкостью разрушения

Использование предсказательного математического моделирования для создания новых композитных материалов является единственным последовательным направлением последовательно совершенствования структуры материала. Естественно, каждый новый шаг в развитии методов моделирования должен сопровождаться значимой экспериментальной поддержкой для валидации и верификации. Однако без адекватных и детальных моделей микроструктуры полимерных нанокомпозитов развитие материаловедения в данной области просто не возможно.

В то же время прогресс в данной области моделирования подвигается весьма не быстро из-за принципиально многомасштабного характера стоящих задач. Одним из обзоров по данной теме является работа G. Allegra с соавторами [1], опубликованная в 2008 году. В работе приводится обзор всех существующих методов, начиная с методов статистики и заканчивая методами прямого МД моделирования, близкими к работе по данному проекту.

Сложность построения мезоскопических полимерных нанокомпозитов вызвана принципиальной неоднородностью материала и необходимостью явного учета большого числа специфических случаев взаимного расположения молекул полимера и включений, модифицирующих свойства чистой матрицы (см. рисунок 5.1).

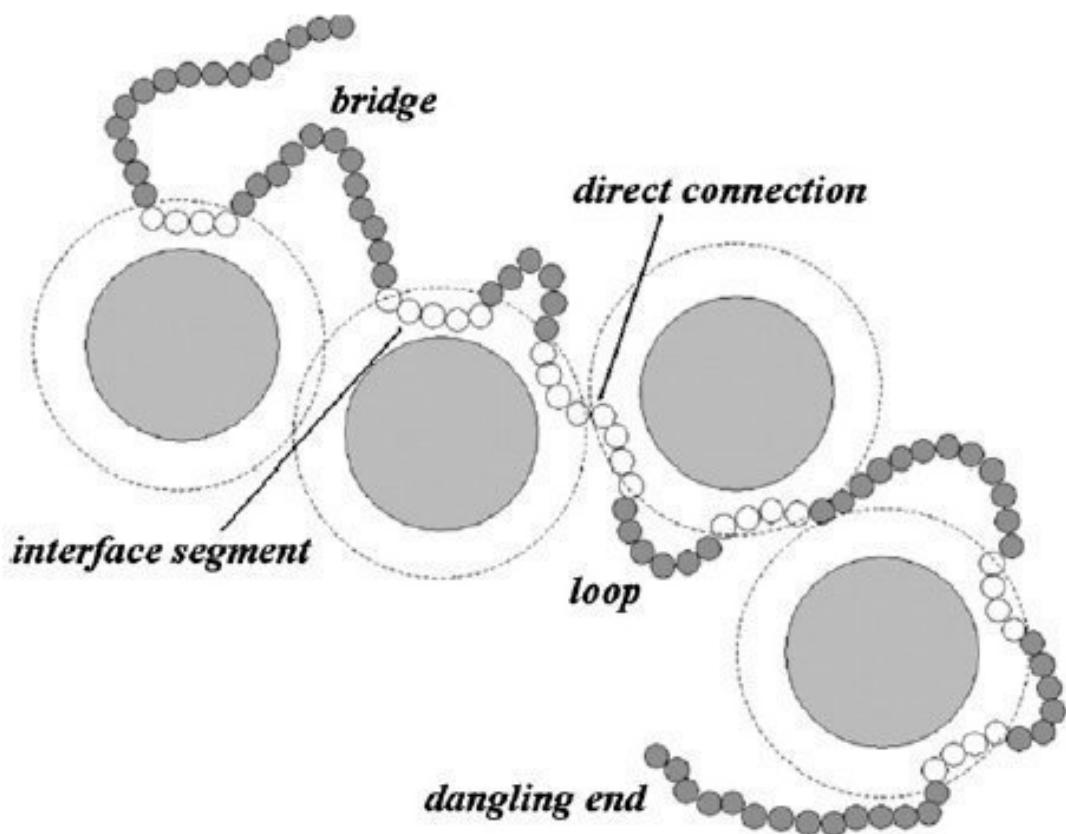


Рисунок 5.1 - Различные случаи взаимного расположения молекул полимера и включений

Введение потенциалов среднего поля сопряжено с рядом трудностей в связи с тем, что вид потенциала должен быть специфичен для каждой рассматриваемой структуры нанокомпозита (см. рисунки 5.2 и 5.3). Поэтому использование относительно простых аналитических теорий может обеспечивать в лучшем случае лишь качественное описание процессов деформации нанокомпозитного материала. Поэтому использование методики, предложенной в данном проекте, является наиболее эффективным методом с точки зрения их использования для разработки новых полимерных композитов с повышенной жесткостью и вязкостью разрушения.

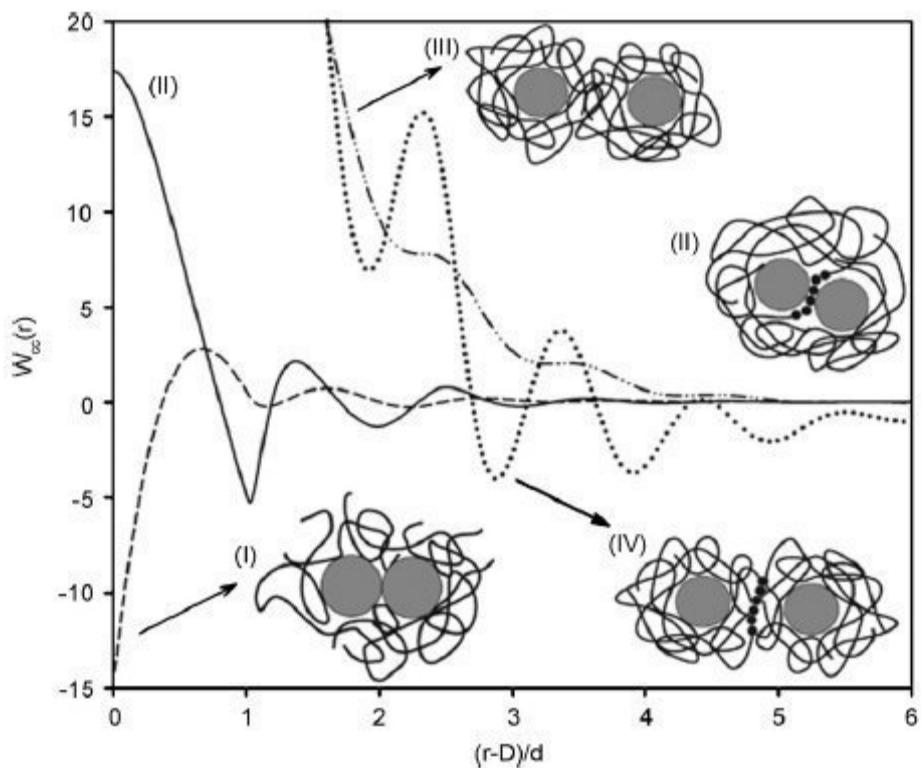


Рисунок 5.2 - Различные варианты потенциала среднего поля для разных типов агрегирования нанокомпозитного материала

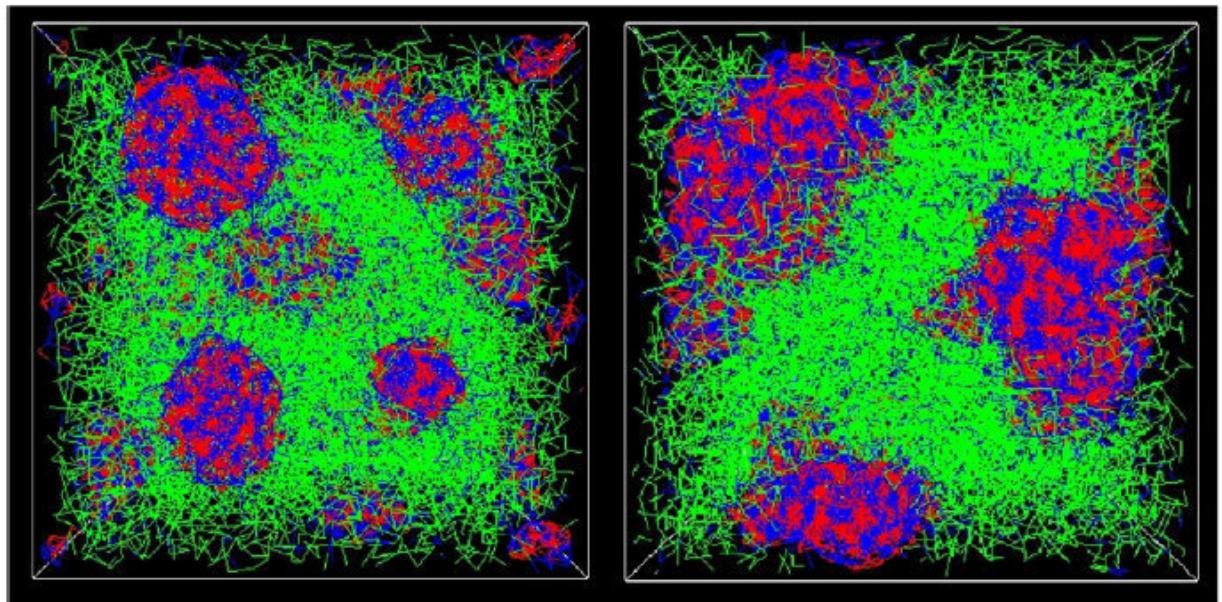


Рисунок 5.3 - Различные варианты агрегирования нанокомпозитного материала в огрубленной атомистической модели

5.1 Выводы по разделу

Разработанные в данной НИР методика и алгоритмы лежат в магистральном направлении развития теоретико-вычислительных методов в материаловедении полимерных композитов. Важнейшим преимуществом полимерных композитов является возможность получения нужных свойств материала путем влияния на его структуру. Это влияние складывается из деталей межатомного взаимодействия составляющих композитного материала. Поэтому статистические подходы, в том числе и методы среднего поля, имеют вспомогательное значение. Лишь движение в направлении максимума детализации динамики структуры материала позволит систематически повышать точность соответствующих математических моделей. Это не значит, что необходимо отказаться от огрубленного описания – огрубленное описание является неотъемлемой частью любой многомасштабной модели. Однако специфика (математическая модель и параметризация) огрубленного описания должна исходить лишь из моделей на полноатомном уровне, а не из умозрительных априорных предположений.

6 Обобщение и оценка результатов исследований

6.1 Обобщение результатов исследований

Полимеры по ряду признаков могут претендовать на то, чтобы считаться особой фазой вещества. Смысл подобного заявления в том, что важнейшие свойства полимерных материалов определяются длиной полимерной цепи (см. рисунок 6.1). Тип полимера (т.е. то, из каких мономеров он образован) имеет, в определенном смысле, меньшее значение.

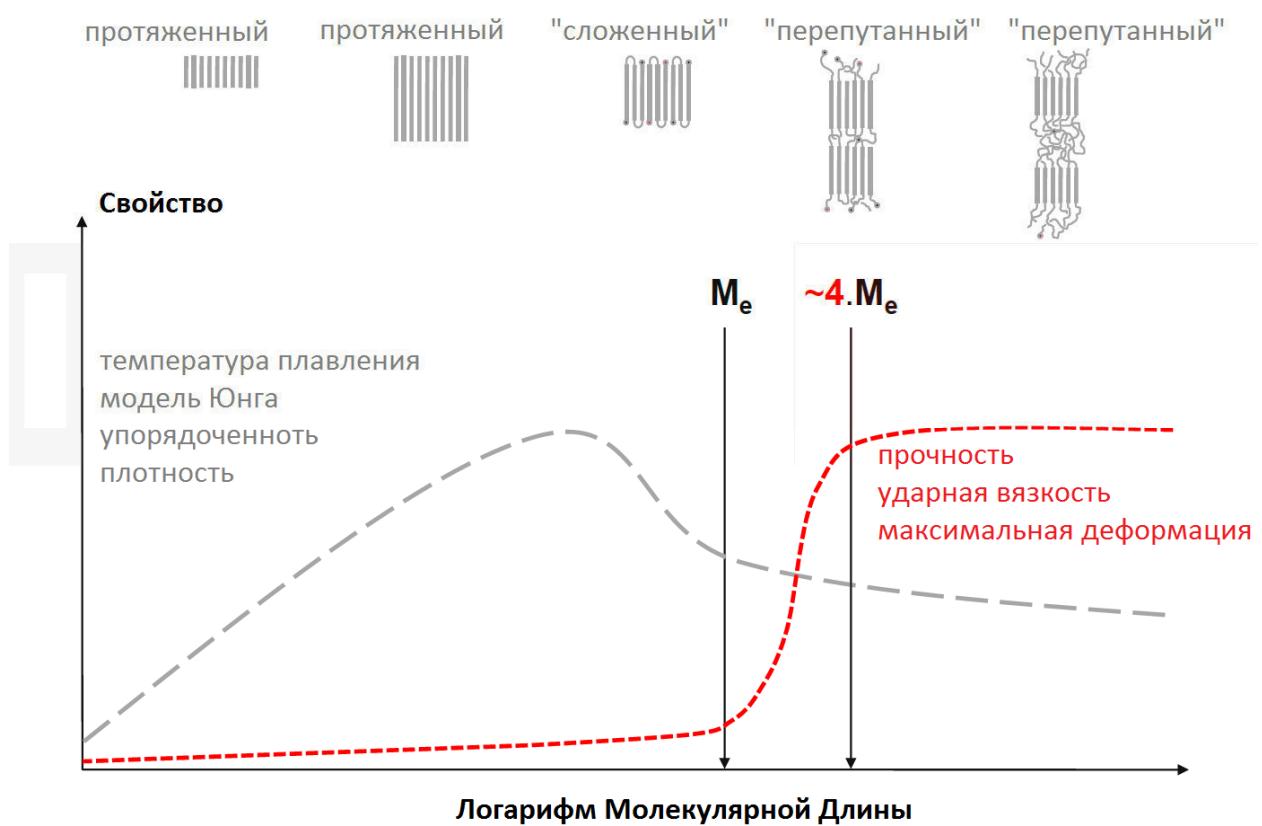


Рисунок 6.1 – Схема зависимости свойств полимерной матрицы от длины полимерной цепи ее элементов (M_e – средняя длина полимерной цепи до первого переплетения)

Такая ситуация приводит к возможности построения огрубленных атомистических моделей, в которых один или даже несколько мономеров объединяются в одну частицу, которая является силовым центром для эффективного межчастичного взаимодействия. Такие частицы-«бусинки» объединяются в цепи и образуют структуру полимера (см. рисунок 6.2).

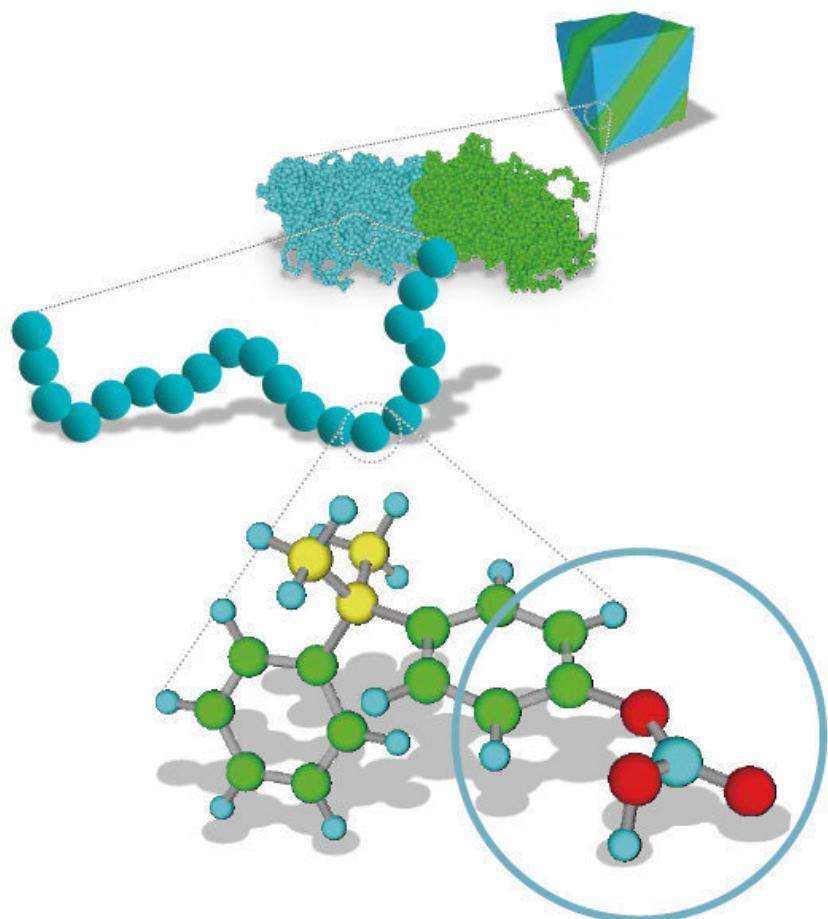


Рисунок 6.2 – Схема зависимости свойств полимерной матрицы от длины полимерной цепи ее элементов (M_e – средняя длина полимерной цепи до первого переплетения)

Данный метод огрубления успешно развивается последние десятилетия и показал свою эффективность для построения многомасштабных моделей полимерных материалов.

Однако в случае полимерных композитов непосредственное использование указанной техники огрубления осложняется тем, что оказываются необходимы модели взаимодействия молекул полимера с включениями (волокнами, нанотрубками, пластинчатыми включениями и т.п.) При взаимодействии полимерной матрицы с включениями межфазная и межкомпонентная граница играет ключевую роль. Размер, распределение по материалу и свойства самих включений также очень важны, однако не являются абсолютно определяющими.

В рамках данной методики передача данных между огрубленным атомистическим и континуальным уровнями заключалась в определении поверхностной контактной энергии на границе раздела «полимер - включение». Химический состав и функционализация поверхности включений существенным образом влияют на величину контактной энергии. Их определение требует весьма трудоемких полноатомных расчетов (см. Раздел 5.3.3 отчета за этап 1). При этом неизбежна слабо контролируемая потеря точности в связи с тем, что число структурных сочетаний «полимер - поверхность» очень велико, и все они не могут быть исчерпывающим образом быть рассмотрены при расчете поверхностной контактной энергии для континуального расчета (рисунок 6.3).

Кроме того, усредненное описание на континуальном уровне испытывает значительные трудности при описании больших деформаций полимерной матрицы. Имеющиеся определяющие соотношения для режима вязко-пластического деформирования полимерной матрицы в режиме больших деформаций не описывают изменение микроструктуры материала. В связи с этим калибровка данных определяющих соотношений в параметрах «деформация - микроструктура» представляет собой сложную нерешенную на сегодняшний день проблему. При этом заметим, что конечно-элементные модели хорошо работают для небольших деформаций (см. Раздел 6.4).

По этим причинам огрубленное атомистическое описание полимерных композитов представляется наилучшей физико-математической моделью для описания деформации и разрушения данного вида материалов.

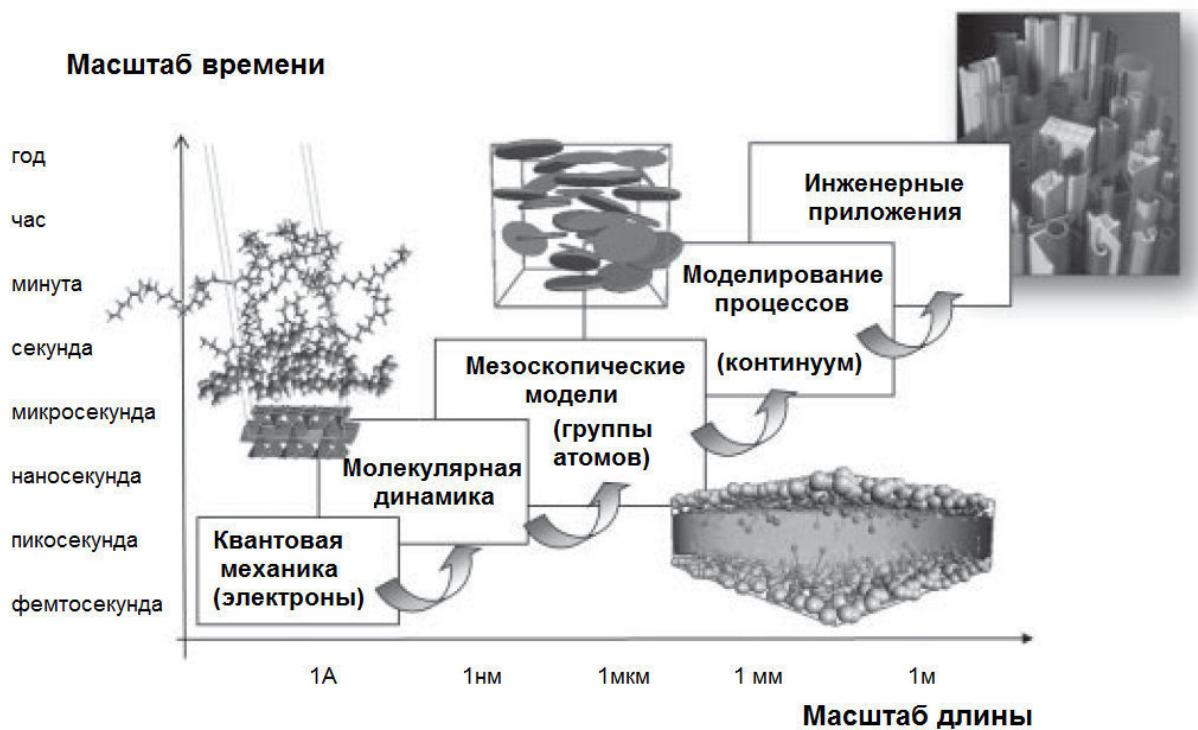


Рисунок 6.3 – Принципиальная схема физико-математических моделей, из которых могут быть составлены многомасштабные модели полимерных композитов

С вычислительной точки зрения особенно важным преимуществом огрубленных атомистических моделей полимерных композитов является то, что для большинства прикладных задач не требуется включение электростатической задачи, т.к. компоненты системы являются незаряженными. Поэтому межатомное и межчастичное взаимодействие в материала является локальным по пространству. Это особенность существенно ускоряет расчеты и улучшает их масштабируемость на параллельных вычислительных системах. Быстрый рост суперкомпьютерных мощностей и переход в экзафлопсную эру позволит вывести огрубленные

атомистические модели на микронные масштабы, что позволит проводить моделирования полимеров, со сверхвысокими молекулярными массами в больших расчетных ячейках. Созданная методика предполагает модульную архитектуру программного обеспечения. Основные программные компоненты используют для ускорения вычислений параллельные технологии MPI и CUDA. При этом модульная структура позволяет быстро адаптировать программную реализацию под новые методики параллельных вычислений, появление которых ожидается в ближайшие несколько лет.

Таким образом, разработанная методика проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных композитов сочетает в себе все современные теоретико-физические представления о структуре данного типа материалов и использует вычислительные параллельные алгоритмы, находящиеся на переднем крае развития суперкомпьютерных технологий. Данная методика и программная реализация демонстрируют адекватное описание модельных и тестовых систем. Требуется совершенствование подходов по описанию связи огрубленного атомистического и континуального уровня при описании больших степеней деформации и разрушения полимерных композитов.

6.2 Анализ выполнения требований ТЗ на НИР

Техническим заданием на НИР предписывалось достижение определенных технических требований. В ходе выполнения НИР все эти требования были успешно выполнены. Сведения о выполнении требований технического задания сведены в таблицу 2.

Для расчетов использует коммерческое программное обеспечение:

1) Materials Studio (v 5.5, Accelrys, USA) - лицензия: 10 000 Долл. США в год.

2) Palmyra (v. 2.5, MatSim, Zurich, CH) - лицензия: 30 000 Евро в год.

Рассматриваются следующие полимерные матрицы:

1) Полипропилен (ПП).

2) Нейлон (полиамид) (ПА).

3) Термопластичный полиуретан (ТПУ).

И следующие типы включений:

1) Диски (монтмориллонит, гидратальцит).

2) Волокна (сепиолит).

Суть работы заключается в использовании указанного программного обеспечения для прохождения всех масштабных «рубежей» от атомного до континуального уровней. Принципиальная схема расчетов показана на рисунке 6.4. Авторы указывают на сложность решения проблемы описания контактных границ «The thickness and the properties for the resulting interphase have not been indisputably unveiled so far» (п. 3.4 статьи).

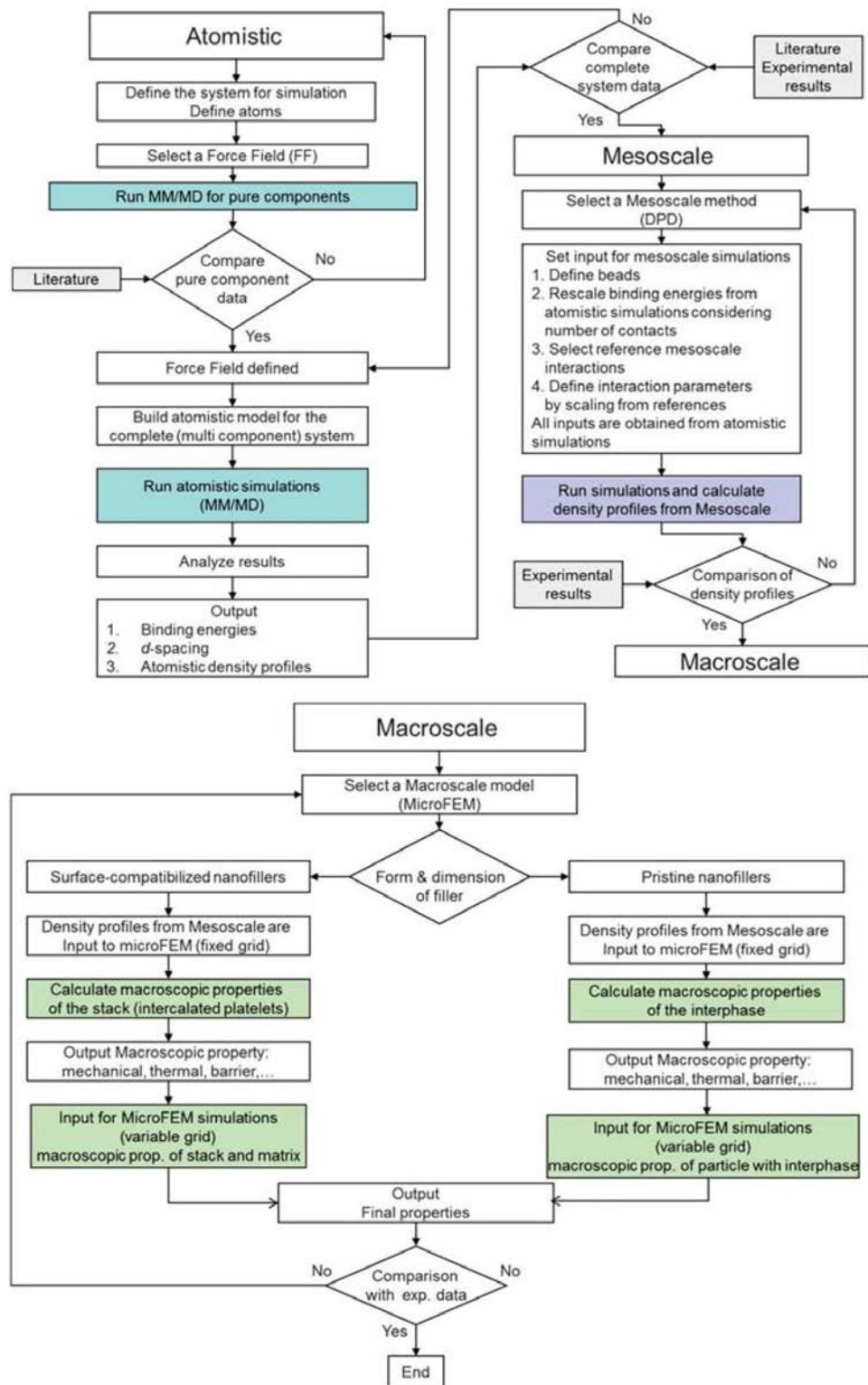


Рисунок 6.4 – Объединение атомистического, мезо- и макро-масштабов в работе [2]

Для того, чтобы как-то обойти эту трудность авторы используют модель псевдо -«ядро в оболочке» (pseudo “core-shell” model).

На рисунках 6.5 и 6.6 показаны примеры мезоскопических структур и соответствующих конечно-элементных сеток, использующихся в указанной работе для моделирования.

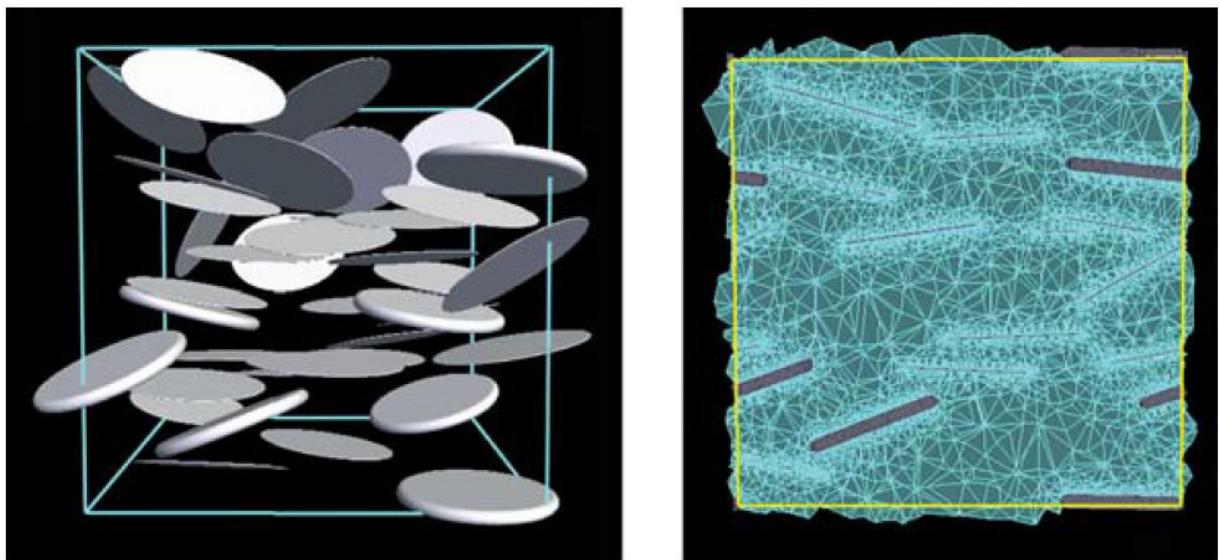


Рисунок 6.5 - Мезоскопическая структура и конечно-элементная сетка для моделирования системы «полипропилен-гидротальцит»

Основным результатом работы является расчет конечно-элементным кодом Palmyga для 10 сочетаний «полимер - включение» значения модуля Юнга, теплопроводности и проницаемости для молекул кислорода. Все расчеты проведены для нормальных недеформированных условий.

Сравнение с экспериментальными данными проводится по i) некоторым параметрам структуры композита (межплоскостное расстояние при «смачивании» полимером двух параллельных поверхностей материала включений) и ii) по относительному повышению модуля Юнга за счет введения нановключений в материал матрицы. Типичные значения данного изменения составляют около 30-50%, что находится в согласии с

экспериментальными данными. В работе не проводится сравнения с упругими свойствами нанокомпозитного материала по абсолютным значениям величины.

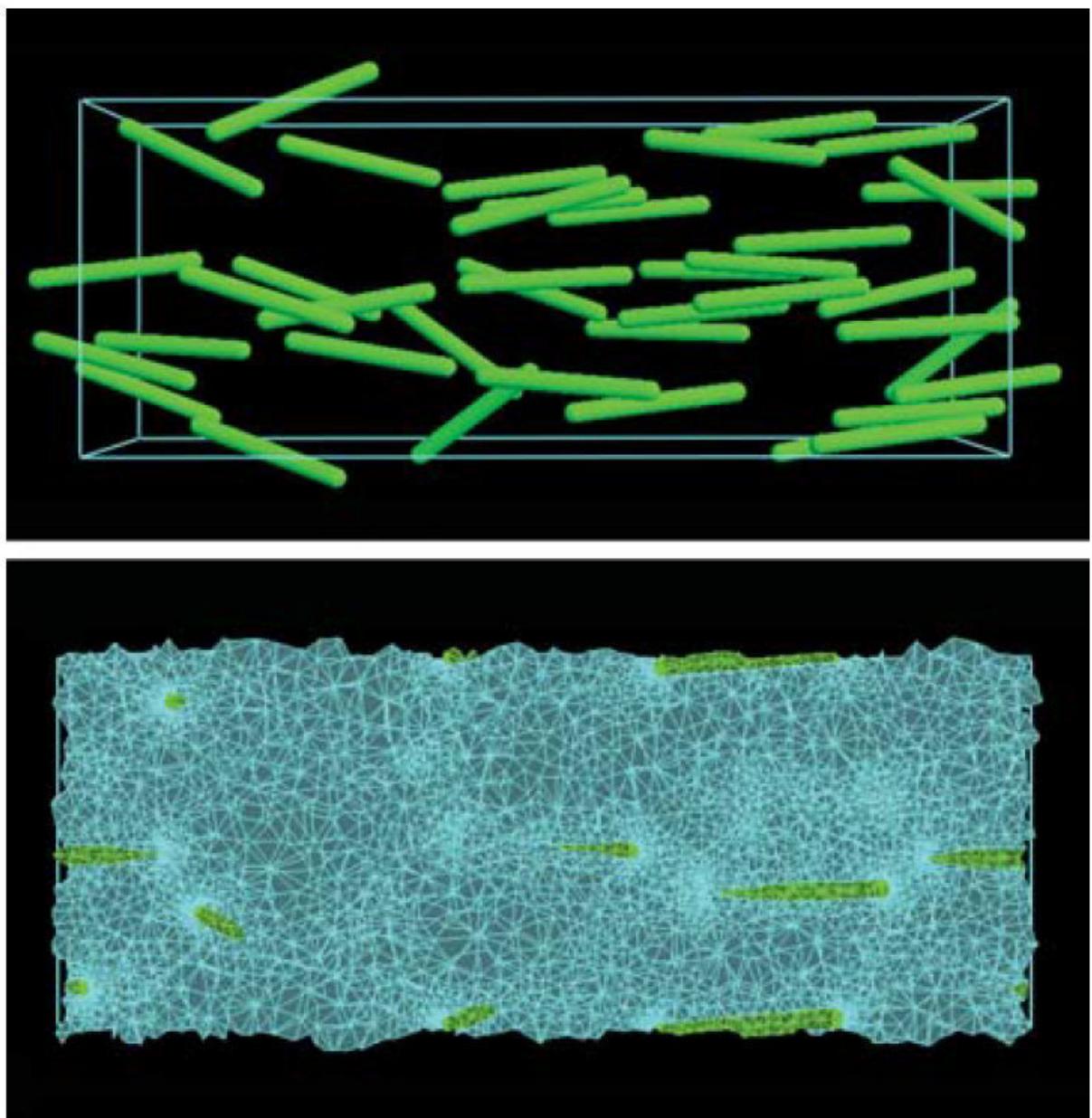


Рисунок 6.6 - Мезоскопическая структура и конечно-элементная сетка для моделирования системы «полипропилен-сепиолит»

В заключении отмечается, что наличие модификаторов поверхности включений сильно влияет на взаимодействие между материалом матрицы и включением, в том числе и на морфологию равновесной структуры

композита. Однако если структура композита задана, то поверхностные физико-химические характеристики включений являются менее важными с точки зрения результатов моделирования. Здесь можно отметить, что в указанной работе не рассматриваются процессы деформации и разрушения. В этих процессах роль границ опять выходит на первый план из-за непрерывного изменения структуры материала.

Кроме того, используемое программное обеспечение не ориентировано на проведение сверхмасштабируемых вычислений. Уровень вычислительной сложности представленных результатов соответствует терафлопсному уровню производительности (т.е. небольшому современному вычислительному кластеру без GPU-ускорителей).

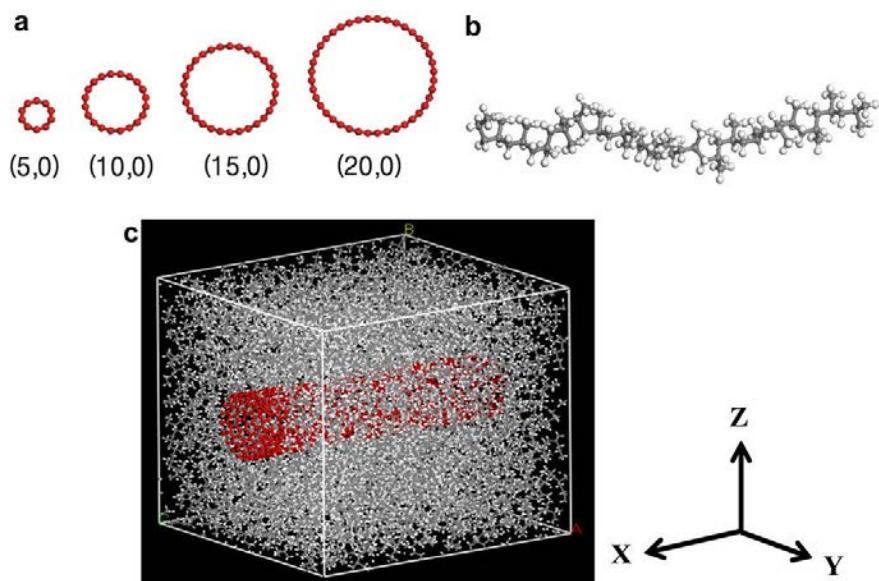


Рисунок 6.7 - Молекулярная структура а) трубок типа зигзаг, б) молекулы полипропилена, с) нанокомпозита «полипропилен-нанотрубка»

В работе [3] рассмотрены полимерный композит с включениями типа нанотрубка. В рамках модели одиночной нанотрубки (рисунок 6.7) в матрице проведены молекулярно-динамические расчеты упругих свойств системы и построена микромеханическая континуальная модель (рисунок 6.8).

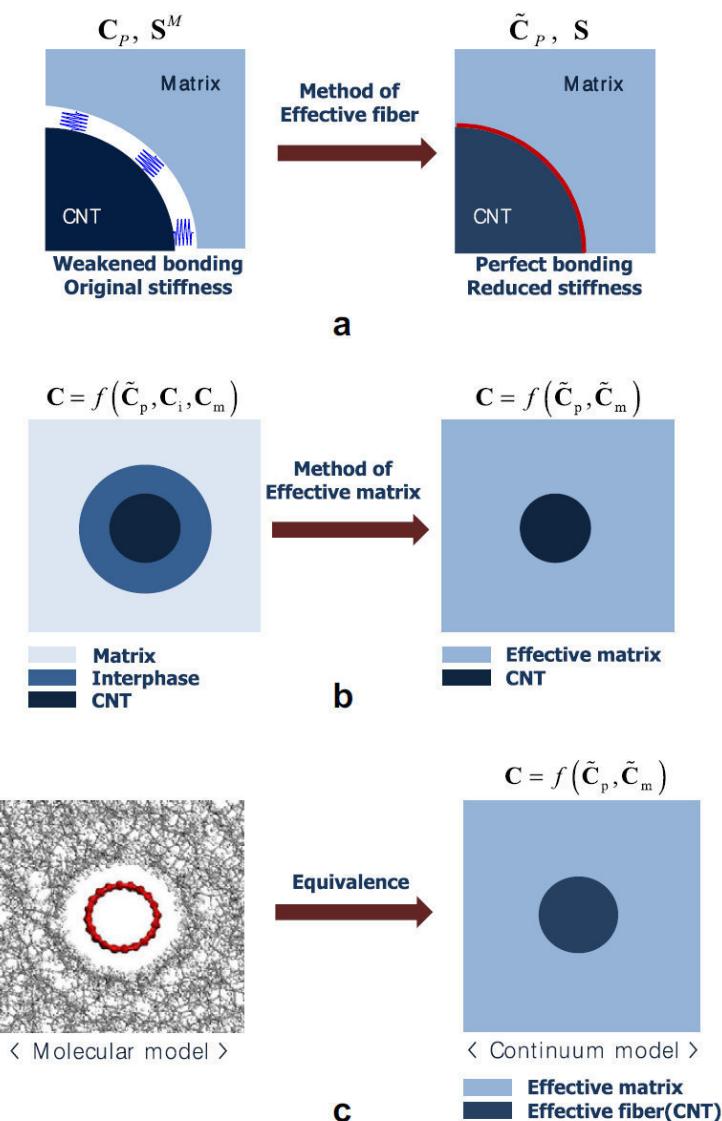


Рисунок 6.8 - Иллюстрация двухфазной эквивалентной континуальной модели: а) метод эффективного волокна, б) метод эффективной матрицы, в) полная континуальная модель

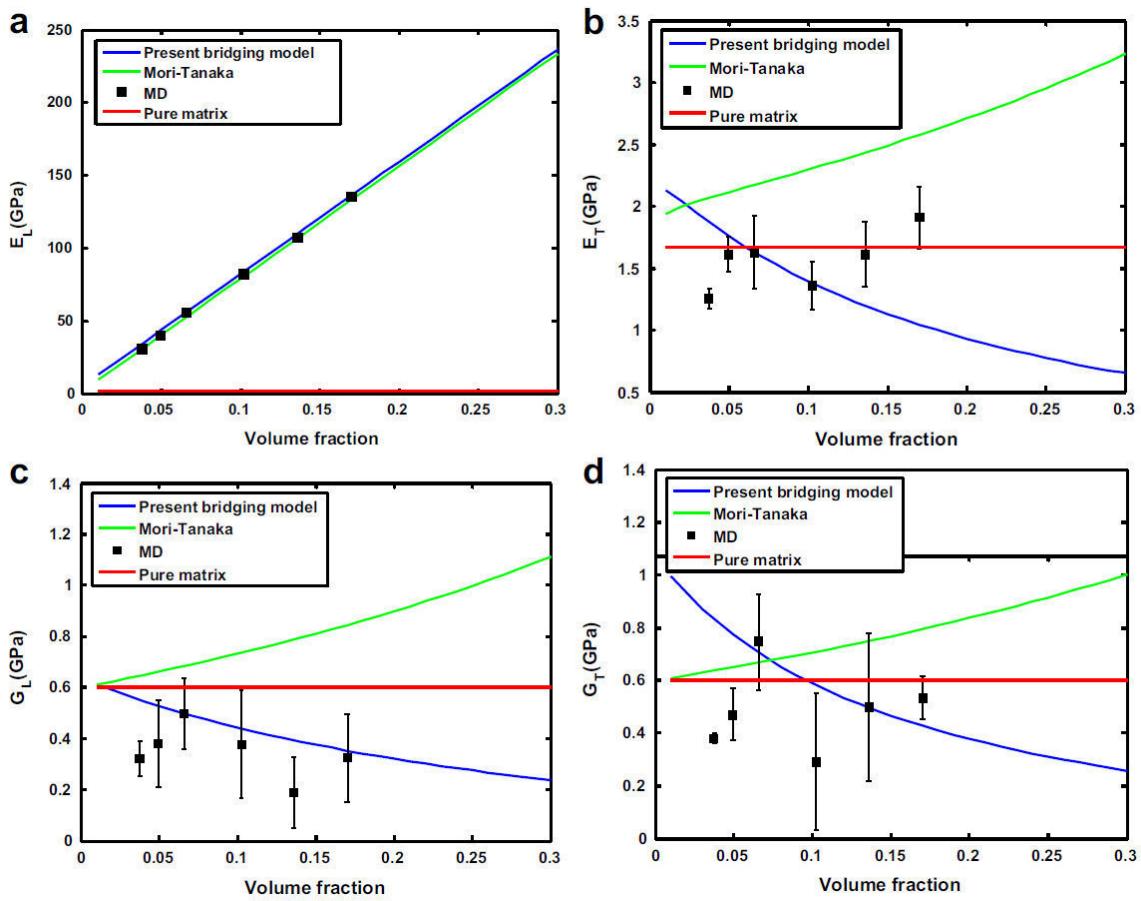


Рисунок 6.9 - Значения продольных и поперечных упругих модулей, рассчитанные в рамках молекулярно-динамической модели и континуальных подходов

В работе показано соответствие результатов предложенной континуальной модели результатам молекулярно-динамических расчетов. Тем самым предложенная континуальная модель была верифицирована, и было показано ее преимущество с точки зрения точности по сравнению с моделью Мори-Танака. Расчеты проведены для различных степеней заполнения, что определяется по части полного объема системы, приходящегося на нанотрубку.

В работе не рассматривается деформация или разрушения полимерного нанокомпозита. Для расчетов не используются сверхмасштабируемые параллельные вычисления.

В работе [4] рассмотрен процесс кавитации в модельной системе молекул полиэтилена. Это, по-видимому, первая работа в которой последовательно рассмотрен процесс кавитации при растяжении полимерной структуры, т.е. элементарное событие процесса разрушения материала. Работа выполнена как часть проекта HPC-EUROPA2 и при поддержке Dutch Polymer Institute (Нидерланды).

Рассматриваемая система состоит из 128 молекул полиэтилена, каждая из которых содержит по 201 «объединенному атому». В работе рассмотрены как небольшие степени деформации (см. рисунок 6.10), так и значительные деформации (см. рисунок 6.11), при максимальных значениях которых наступает кавитация.

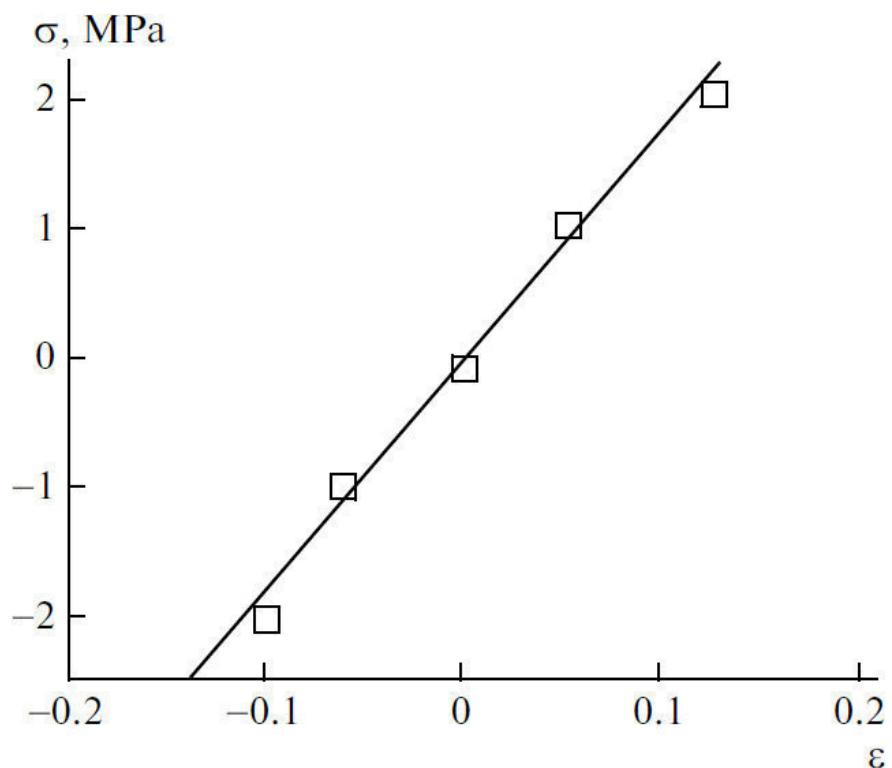


Рисунок 6.10 – Напряжение (отрицательное давление) как функция деформации

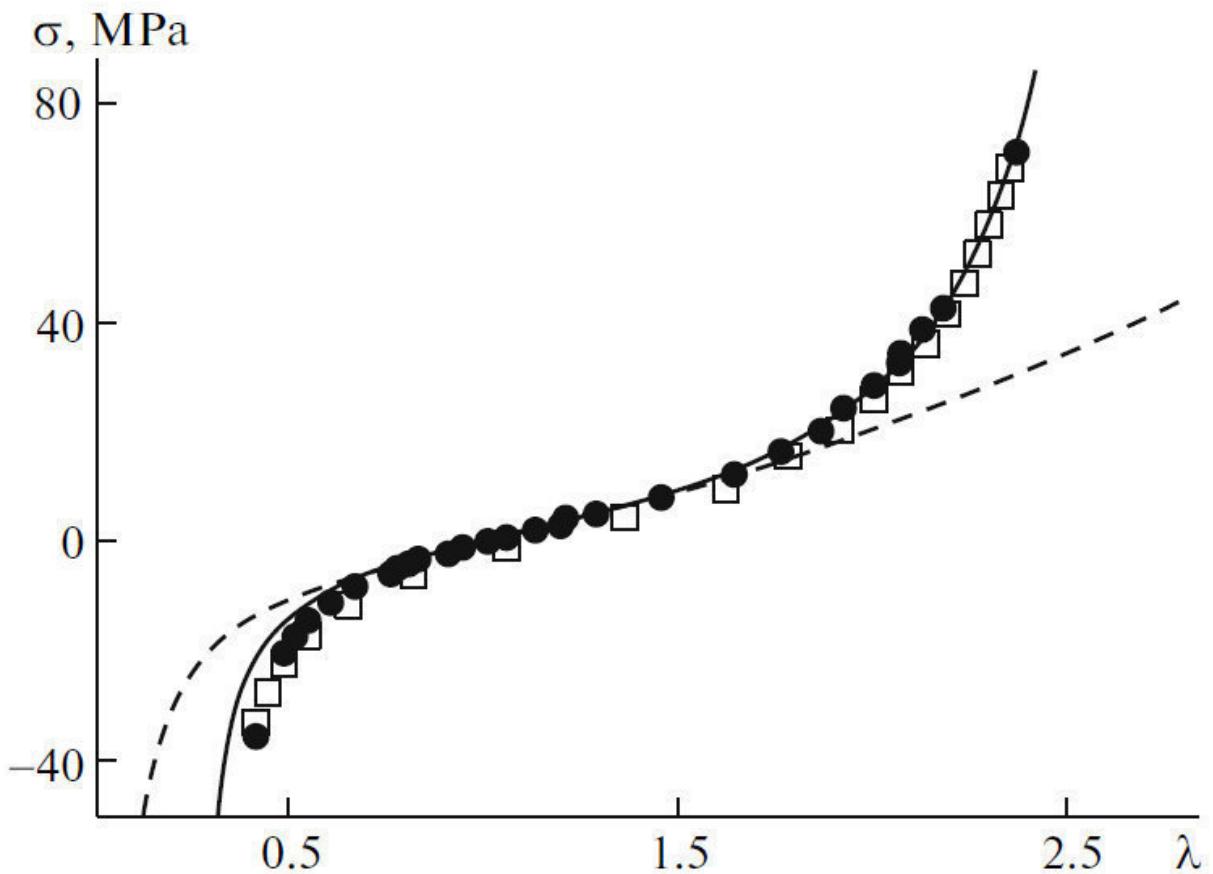


Рисунок 6.11 – Напряжение (отрицательное давление) как функция удлинения $\lambda = l/l_0$. Заполненные кружки соответствуют одиночным статическим расчетам по 6 нс каждый. Незакрашенные квадраты соответствуют динамической разгрузке от 70 МПа до -35 Мпа со скоростью 1.31 МПа/нс. Сплошная линия рассчитана по модели Гента, предложенной в 2005 г. Пунктир – аппроксимация определяющим соотношением для неогуковских материалов (классические резины).

На рисунке 6.12 показаны два независимых набора точек «давление - объем», соответствующие сжатию (черный квадраты) и расширению (белые квадраты) системы. Отмечены теоретический предел механической устойчивости P_s и напряжения наступления кавитации P_{cav} . Показан «гистерезис» метастабильных состояний, реализующихся при сжатии и расширении. P_{cl} – напряжение схлопывания полостей при сжатии.

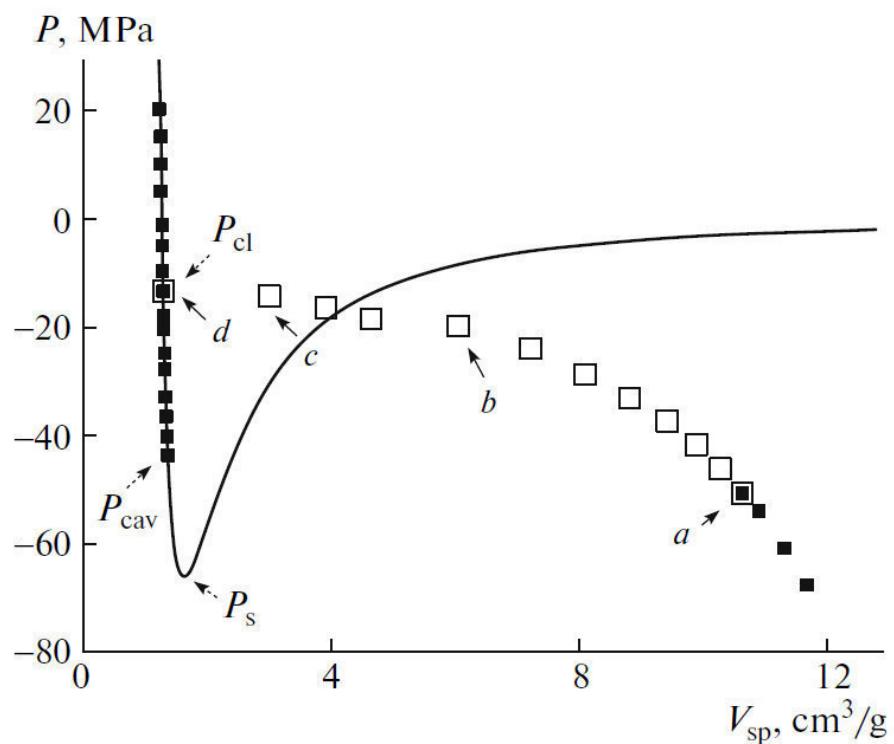


Рисунок 6.12 – Давление как функция удельного объема при трехстороннем (гидростатическом) растяжении модельного полимера

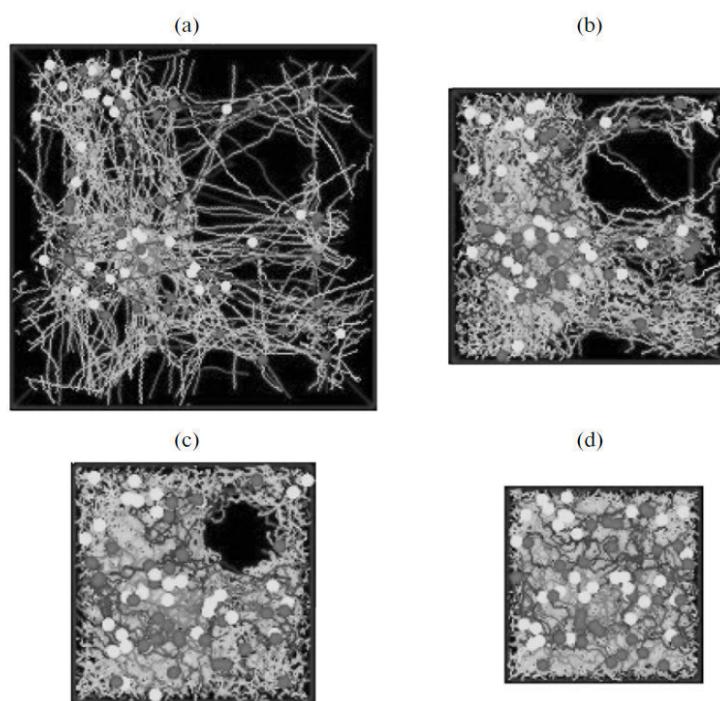


Рисунок 6.13 – Структуры полимерной системы в расчетной ячейке, соответствующие состояниям а, б, с, и д на рисунке 6.12

В работе [4] не рассматривались вопросы влияния включений на прочность полимерных композитов. Данная работа показывает, что вопросы моделирования разрушения даже чистых полимеров в модельных системах только начитаются исследоваться в настоящее время.

Таким образом, опубликованные в 2012-2013 годов работы показывают, что результаты настоящей НИР соответствуют мировому уровню в области моделирования полимерных нанокомпозитов и опережают его по некоторым параметрам. Перенос описания структуры с атомистического на континуальный уровень, показанный в работе [2], превосходит достигнутый в данной работе по уровню проработки деталей. Однако, авторы [2] используют коммерческое программное обеспечение, не поддерживающее сверхмасштабируемых параллельных расчетов. Что особенно существенно, авторы [2] не рассматривают и не обсуждают модели деформации и разрушения.

В работе [3] в деталях разработана микромеханическая континуальная модель, которая позволяет с минимальной потерей точности переносить результаты атомистической модели на макромасштаб. Однако, основа этой модели – одиночная нанотрубка в полимерной матрице. Следовательно, эффекты влияния структуры полимерного композита на его свойства остаются за пределами пригодности представленных подходов.

Работа [4] является, по-видимому, первым систематическим исследованием разрушения полимерных сред на основе математического моделирования с учетом их атомистической структуры. Однако, в [4] рассматривается идеализированная матрица чистого полиэтилена без включений.

На основе указанных фактов можно сделать вывод о том, что применение методики и программной реализации, развитых в настоящей НИР, позволит в ближайшее время получить целый ряд принципиально новых результатов в области изучения свойств полимерных композитов.

6.5 Выводы по разделу

Проведенная работа по обобщению и оценке результатов исследований показала, что разработанная методика проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных композитов сочетает в себе все современные теоретико-физические представления о структуре данного типа материалов и использует вычислительные параллельные алгоритмы, находящиеся на переднем крае развития суперкомпьютерных технологий. Данная методика и программная реализация демонстрируют адекватное описание модельных и тестовых систем. Требуется совершенствование подходов по описанию связи огрубленного атомистического и континуального уровня при описании больших степеней деформации и разрушения полимерных композитов.

Показано, что объем работ и технические требования, предусмотренные ТЗ ГК, успешно достигнуты. Оценка полноты решения задач и достижения поставленных целей НИР показала, что все задачи, заявленные и согласованные в Государственном контракте, Техническом задании к НИР и Календарном плане проведения НИР, выполнены полностью, в требуемые сроки, и с обеспечением инициативного перспективного задела по разрабатываемой тематике.

Оценка эффективности полученных результатов в сравнении с современным научно-техническим уровнем показала, что результаты настоящей НИР соответствуют мировому уровню в области моделирования полимерных нанокомпозитов и опережают его по некоторым параметрам. Сделан вывод о том, что применение разработанных методики и программной реализации позволит в ближайшее время получить целый ряд принципиально новых результатов в области изучения свойств полимерных композитов.

7 Разработка рекомендаций по использованию результатов проведенных НИР в реальном секторе экономики, а также в дальнейших исследованиях и разработках

7.1 Разработка рекомендаций, предложений по использованию результатов проведенных НИР

Разработанная программная реализация методики многоуровневого моделирования полимерных нанокомпозитов позволяет производить расчет характеристик процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов. Основная задача данного комплекса - осуществление диагностики поведения и структуры нанокомпозитов в процессе деформирования на пространственных и временных масштабах, труднодоступных экспериментальным методам. В первую очередь это относится к вопросам изучения эволюции микроструктуры и дислокационной структуры нанокомпозитов под действием напряжений.

Использование предсказательного математического моделирования для создания новых композитных материалов является направлением последовательного совершенствования структуры материала. Естественно, каждый новый шаг в развитии методов моделирования должен сопровождаться экспериментальной поддержкой для валидации и верификации. Однако без адекватных и детальных моделей микроструктуры полимерных нанокомпозитов развитие материаловедения в данной области невозможно. Именно использование подобного комплексного подхода, объединяющего экспериментальные методы исследований с данными расчетов, должно обеспечить возможность создания полимерных нанокомпозитов с уникальными свойствами.

Разработанная методика также позволяет с хорошей точностью проводить оценку прочностных свойств нанокомпозитов, таких как предел текучести и модуль упругости, в случае отсутствия подходящей экспериментальной базы или в случае нецелесообразности проведения затратных экспериментов в данной области.



SPP1369

Program Objectives

The focus of the priority programme is the investigation of dense amorphous polymer phases at or near a solid surface. Particular attention is given to the so-called interphase, i.e. the region of the polymer phase where its properties have not quite reached their bulk values. The thickness of the interphase depends not only on the type of polymer and solid and on their interactions, but also on the property under investigation. The mass density, for example, reaches its bulk value much earlier than the cross-link density of a reactive system. Polymer-solid contacts play an important role in technology, from adhesion and coatings to nanocomposites. Yet, the research of the priority programme 1369 is aimed at the fundamental understanding of the interface and interphase, and not at particular material combinations for particular applications. The investigations are to be carried out using modern methods of preparation, characterization and theory.

Research Areas

The 23 research projects fall into two main research areas.

Рисунок 7.1 – Веб-сайт проекта Германского Исследовательского Общества (DFG), направленного на исследование контактов между полимерными средами и поверхностями <http://www.dfg-spp1369.de/spp1369.html>

Создание многоуровневых моделей различных систем, объединяющих молекулярный и мезоуровни, позволяет перейти к моделированию больших по размерам систем в течение более длинного промежутка времени. Уже сейчас осуществимы расчеты полимерных структур, обеспечивающие выход на масштабы до микрометров. Несмотря на критику закона Мура, мы по-прежнему можем наблюдать экспоненциальный рост мощностей

вычислительной техники, который, несмотря на ряд физических ограничений, в последние годы во многом обеспечивается внедрением параллелизма. Таким образом, технологическое развитие высокопроизводительных вычислительных комплексов должно в обозримом будущем существенно раздвинуть рамки пространственных и временных ограничений в задачах компьютерного моделирования, сделав молекулярное моделирование еще более доступным и универсальным методом исследований.

Как показано на примерах в Разделе 8, в настоящее время имеется большой спрос в мировой промышленности на математическое моделирование композитных материалов. Поэтому дальнейшее развитие и внедрение предложенной методики имеет хорошие перспективы.

Зарубежный опыт в области физики полимеров и композитов характеризуется масштабными проектами, объединяющими усилия больших коллабораций. Внимание уделяется широкому спектру специфических проблем многомасштабной теории полимерных композитов.

На рисунке 7.1 приведен проект Германского Исследовательского Общества (DFG), направленный на исследование контактов между полимерными средами и поверхностями. В рамках этого достаточно узкого направления (тематически представленного в данной работе – см. Раздел 5.3.3 Отчета по I этапу). Данный проект DFG объединяет 23 направления исследований, при этом 12 исследований (т.е. больше половины) напрямую связано с математическим моделированием (отмечены в списке звездочкой):

- 1) *A1 - Correlation between structure, dynamics and elasticity of polymer films in the interphase close to solid substrates
- 2) A3 - AFM-based determination of interface and interphase interactions
- 3) A4 - Nanoscopic mechanical tests for characterizing forces during UV-initiated mass transport in photosensitive polymer films
- 4) *A6 - A coupled MD-FE simulation method accounting for interphases in nanoparticle filled thermoplastics

- 5) *A7 - The formation of a polymer interphase near a solid boundary during the curing of a reactive system simulated by reactive molecular dynamics
- 6) A8 - Polymer dynamics in solid-state matrices studied by field-cycling NMR
- 7) *A9 - Simulations to probe Structure and Mobilities of Polyelectrolyte Multilayer Systems of variable Size
- 8) *A10 - Structure of homopolymer and random block copolymer melts at solid substrates
- 9) *B1 - The Impact of a Solid Surface on the Structure and Dynamics of Polymer Melts
- 10) *B2 - Interfacial dynamics of polymers in interaction with solid substrates
- 11) B3 - Polymeric Interphases in Self-Ordered Porous Alumina: NMR Investigations of the Chain Dynamics
- 12) B4 - Adhesion in Model Polymer-Solid Interphases: Relation between the Nanoscopic Interphase and Macroscopic Adhesion
- 13) B5 - The Influence of Surfaces and Confinement on the Dynamics of Polymer Melts
- 14) B5,1 - Segment Density and Coil Dimensions of Polymer Chains Anchored to Solid Surfaces
- 15) *B8 - Polymer dynamics in the polymer-solid interphase: molecular dynamics simulations of 1,4-polybutadiene at graphite and alumina surfaces
- 16) *B9 - Entanglements and Dynamics in the Interphase Region
- 17) B10 - Influence of non-linear mechanical stress on the molecular dynamics of composite materials via simultaneous Rheo-NMR and Rheo-SAXS characterisation
- 18) C1 - Tailoring Epoxy / Glass Composites: Characterization of Interphase Properties
- 19) *C2 - Influence of nanoparticles on the polymer chain dynamics in model polymer nanocomposites

- 20) *C3 - Investigation polymer-filler interphase dynamics of reinforced elastomers: experiments, modelling and theory
- 21) C6 - Free volume distribution at polymer-solid interfaces
- 22) *C7 - Finite element-based micromechanical modelling of phase interactions in filler reinforced elastomers
- 23) C8 - Effect of the Interactions between Polymers and Solid Fillers on the Structure of Polymer-Filler Interfaces, Polymer-Mediated Forces, and Rheological Properties of Filled Polymers.

Таким образом, развитие созданной в рамках данной работы методики проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов лежит на магистральном прорывном направлении современного материаловедения. В России развитие подобных работ представляет особую актуальность, так как количество отечественных коллективов, занимающихся исследованием механических свойств полимерных материалов, не соответствует требованиям времени.

7.2 Проведение технико-экономической оценки рыночного потенциала полученных результатов

Возможность коммерциализации программного продукта на основе разработанных в результате выполнения настоящей НИР моделей и технических решений безусловно велика: с одной стороны, востребованность продуктов – аналогов чрезвычайно высока (см. ниже, раздел 8), с другой стороны, созданные в рамках настоящей НИР технические решения соответствуют мировому уровню в области моделирования полимерных нанокомпозитов и опережают его по некоторым параметрам. Решающим моментом, который должен определить коммерческую успешность программного продукта, является модульная архитектура программного обеспечения, позволяющая быстро адаптировать программную реализацию

под новые методики параллельных вычислений, появление которых ожидается в ближайшие несколько лет.

Для обеспечения конкурентоспособности и востребованности, программный продукт должен обеспечивать решение следующих задач:

1) Выполнение расчетов параметров микроструктуры и механического поведения полимерных нанокомпозитов с различными схемами наполнения, в том числе:

а) Моделирование эволюции микроструктуры полимерных нанокомпозитов под действием различных видов нагружения;

б) Расчёт вклада различных структурных параметров в прочностные и пластические свойства полимерного нанокомпозита.

в) Микромеханическое описание процессов разрушения полимерных нанокомпозитов.

г) Расчёт влияния межфазного взаимодействия в нанокомпозитах на его механические, термические характеристики с целью создания новых конструкционных материалов с повышенными жесткостью и вязкостью разрушения.

2) Проведение многоуровневого моделирования зарождения и развития деформации и повреждений в полимерных нанокомпозитах при сложном механическом нагружении, обеспечивающее, в том числе:

а) Возможность использования парных и многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия для моделирования на микроуровне.

б) Возможность использования многочастичного взаимодействия в методе подвижных клеточных автоматов для моделирования на мезо- и макроуровне.

в) Возможность распараллеливания вычислительного процесса для проведения расчетов на высокопроизводительных кластерах.

г) Возможность варьирования параметров нагружения, ответственных за сжатие и растяжение моделируемого образца в различных режимах механического нагружения.

д) Возможность анализа распределения полей смещений, скоростей и сил в различные моменты времени на основе графического интерфейса.

3) Моделирование многокомпонентной диффузии в полимерных нанокомпозитах, основанного на разностных методах, обеспечивающее, в том числе:

а) Возможности изучения диффузии через границу раздела «матрица-наполнитель» в рамках одномерной модели;

б) Возможности изучения диффузии с учетом взаимовлияния механических напряжений и концентрационных полей.

в) Возможности использования парных и многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия для моделирования на микроуровне;

г) Возможности использования многочастичного взаимодействия в методе подвижных клеточных автоматов для моделирования на мезо- и макроуровне;

построения функций отклика подвижных автоматов в зоне деформации на основе расчетов на микроуровне методом молекулярной динамики;

д) Возможности распараллеливания вычислительного процесса для проведения расчетов на высокопроизводительных кластерах;

4) Для моделирования упругопластического и псевдопластического поведения в полимерных нанокомпозитах, и реализации частично-обратимого формовосстановления в макрообразцах, обеспечивающее:

а) определение реологии материала в зависимости:

1) От номинального состава композита;

2) От положения критических точек, соответствующих температурам плавления и кристаллизации матричного полимера;

3) От теоретического (кристаллографического) ресурса обратимой деформации;

4) От исходных напряжений первого и второго рода;

5) От температурно-силовых условий наведения (восстановления) деформации;

б) Расчет частично-обратимого формовосстановления в макрообразцах в условиях равновероятной кристаллографической ориентировки кристаллитов матричного полимера.

Коммерциализация результатов НИР возможна после стадии выполнения ОТР по разработке предназначенного для широкого круга пользователей программного продукта, предназначенного для расчета прочностных характеристик сложнонаполненных полимерных композитов, и могла бы быть проведена в рамках комплексного проблемно-ориентированного проекта. Стадии ОТР должно предшествовать проведение прикладных НИР по теме: «Численное моделирование и экспериментальное исследование структуры и свойств модельных полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения», см. ниже, раздел 7.3. Технико-экономическая оценка рыночного потенциала полученных в ходе выполнения НИР результатов приведена в приложении В.

7.3 Разработка проекта ТЗ для проведения последующих прикладных НИР

Развитие композиционных материалов идет по пути усложнения их состава и комбинирования схем армирования. Современный полимерный композиционный материал содержит в себе сочетания практически всех классических схем наполнения, при этом широкое распространение получили дисперсно-наполненные полимеры с неравноосными хаотически или упорядоченно распределенным наполнителем. Практически неограниченное количество возможных вариантов армирования делает экспериментальный подбор оптимальных вариантов композитов практически бессмысленной задачей. Аналитические способы расчета прочностных характеристик композиционных материалов в лучшем случае позволяют качественно объяснить экспериментальные зависимости свойств для композитов с относительно простым заполнением (один тип наполнителя,

строго определенная ориентация наполнителя, однородная структура матрицы). Применение подобных приближений к реальным, имеющим перспективу практического применения, материалам, является безусловно некорректным. Более того, расчеты с использованием простых моделей, пригодные для реализации с применением общедоступных вычислительных средств, также неизбежно используют ряд приближений, делающих их применение к реальным сложнополненным материалам не совсем адекватным. Поэтому, задача проведения многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов с применением суперкомпьютеров является безусловно актуальной.

В рамках настоящей НИР создан научно-технический задел в части разработки модели многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластиначатые включения), и ее программной реализации. Усовершенствование разрабатываемых моделей, распространение их на более широкий круг полимерных нанокомпозитов и протекающих в них явлений предполагается провести в рамках прикладных НИР по теме: «Численное моделирование и экспериментальное исследование структуры и свойств модельных полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения», разработка проекта технического задания на проведение таких НИР предусмотрена п. 7.4 ТЗ на настоящую НИР. Разработка методики применения возможностей суперкомпьютеров для многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов находится в соответствии с основной задачей ТП «Национальная Суперкомпьютерная Технологическая Платформа» в части обеспечения субъектов процесса модернизации экономики эффективным, действенным, в точности отвечающим их потребностям инструментом повышения конкурентоспособности продукции, создания новых продуктов и услуг. Предлагаемые прикладные НИР находятся в

полном соответствии с перечнем задач, требующих приложения суперЭВМ [5] в части создания наноматериалов с заранее заданными механическими и электромагнитными свойствами. Проведение прикладных НИР должно обеспечить переход разработок на этап ОТР непосредственно после их завершения.

Приложение В содержит проект технического задания на прикладные НИР по теме: «Численное моделирование и экспериментальное исследование структуры и свойств модельных полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения».

7.4 Выводы по разделу

Были разработаны рекомендации по использованию результатов проведенных НИР в реальном секторе экономики, а также в дальнейших исследованиях и разработках. Показано, что развитие созданной в рамках данной работы методики проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов лежит на магистральном прорывном направлении современного материаловедения. В России развитие подобных работ представляет особую актуальность, так как количество отечественных коллективов, занимающихся исследованием механических свойств полимерных материалов, не соответствует требованиям времени.

Проведена технико-экономическая оценка рыночного потенциала полученных результатов. Показано, что возможность коммерциализации программного продукта на основе разработанных в результате выполнения настоящей НИР моделей и технических решений подтверждается, с одной стороны, востребованностью продуктов – аналогов, с другой стороны – тем, что созданные в рамках настоящей НИР технические решения соответствуют мировому уровню в области моделирования полимерных нанокомпозитов и

опережают его по некоторым параметрам. Решающим моментом, который должен определить коммерческую успешность программного продукта, является модульная архитектура программного обеспечения, позволяющая быстро адаптировать программную реализацию под новые методики параллельных вычислений, появление которых ожидается в ближайшие несколько лет.

Усовершенствование разрабатываемых моделей, распространение их на более широкий круг полимерных нанокомпозитов и протекающих в них явлений предполагается провести в рамках прикладных НИР по теме: «Численное моделирование и экспериментальное исследование структуры и свойств модельных полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения», выполнена разработка проекта технического задания на проведение таких НИР. Разработка методики применения возможностей суперкомпьютеров для многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов находится в соответствии с основной задачей ТП «Национальная Суперкомпьютерная Технологическая Платформа» в части обеспечения субъектов процесса модернизации экономики эффективным, действенным, в точности отвечающим их потребностям инструментом повышения конкурентоспособности продукции, создания новых продуктов и услуг.

8 Разработка методики проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов содержащих асимметричные включения

Для того, чтобы дать адекватное описание по разработке методики проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения, нужно предварительно кратко описать существующие в настоящее время аналоги подобных подходов. В рамках данной работы были найдены и исследованы наиболее перспективные программно-вычислительные решения для моделирования композитных материалов.

Обзор такого рода программного обеспечения основан на четырех продуктах: OCTA, Accelrys Materials Studio, MatSim Palmyra и eXstream.

1) OCTA – это набор свободно распространяемых программно-вычислительных компонент, предназначенных для моделирования полимерных материалов на различных масштабах (см. рисунок 8.1). Путем комбинирования его составных элементов можно создавать многомасштабные модели различных материалов, относящихся к категории т.н. «мягкой материи» (soft matter). Входящие в состав OCTA модули соответствуют всем ступеням многомасштабной теории для описания мягкой материи. Имеются молекулярно-динамические модели в полноатомном и в огрубленном представлении (COGNAC), статистические модели для расчета реологических свойств (PASTA), модели поверхностного взаимодействия полимера с поверхностью (SUSHI) и конечно-элементный решатель для континуального моделирования (MUFFIN). В состав комплекса входит

специализированный пакет для визуализации (GOURMET) и подсистема ввода-вывода.

[TOP](#) | [What is OCTA](#) | [FAQ](#) | [Download](#) | [OCTA BBS](#) | [Examples](#) | [LINK](#)
[COGNAC](#) | [PASTA](#) | [SUSHI](#) | [MUFFIN](#) | [GOURMET](#)

Contents of the OCTA System

Programs

OCTA is an integrated simulation system for soft materials. It consists of four simulation programs (COGNAC, PASTA, SUSHI, MUFFIN), one graphical user interface program (GOURMET) and an I/O interface library.

1 Simulation programs

Coarse-grained molecular dynamics simulator -- COGNAC: COGNAC is a program of molecular dynamics. It covers a large class of molecular models, ranging from full atomistic models to bead-spring models, under various conditions(equilibrium and nonequilibrium). In addition to the usual function of molecular dynamics program, COGNAC has a special function, called zooming, which generates the equilibrium molecular configuration for given density profile of atoms

Rheology simulator -- PASTA: PASTA calculates the rheological properties of polymeric liquids from a knowledge of the molecular weight distribution and branching structure. It is based on the slip-link model, in which polymer molecules interact through the creation and release of binary entanglements. PASTA can handle polydisperse linear and star polymers, and can predict various linear and nonlinear rheological properties.

Interfacial dynamics simulator -- SUSHI: SUSHI calculates the equilibrium and non-equilibrium structures in polymer blends and block copolymers by solving the self-consistent Edwards equation. SUSHI can deal with a variety of polymers; linear polymer, branched polymers with any topology, copolymers with any monomer sequences (block, random, tapered-random) and the polymers grafted on a solid surface. SUSHI can be used to study the surface modification caused by polymer grafting or polymer adsorption, and the self-assembly of block polymers (micellar formation).

Continuum dynamics simulator -- MUFFIN: MUFFIN is a general solver for the continuum models for the dynamics of soft materials based on finite difference method (FDM) or finite element method (FEM). MUFFIN includes six packages, Elastica, ElaDyna, GelDyna, Electrolyte, MEMFluid and PhaseSeparation, and can deal with various problems in soft materials, such as the elasticity of multi-phase materials, swelling and deswelling of gels, ion transport in charged colloids, reaction and diffusion in narrow channels, phase separation and droplets deformation in shear and electric field.

Рисунок 8.1 - Веб-страница набора программ OCTA <http://octa.jp>

Программный комплекс OCTA распространяется в исходных кодах и бесплатно (по запросу головным разработчикам в Университет г. Нагоя, Япония).

Данный комплекс развивается консорциумом научно-исследовательских организаций уже более 10 лет. Внимания заслуживает

список разработчиков комплекса. В данном списке фигурируют как университеты, так и организации промышленности и индустрии. Причем последние – в большем числе. В списке показан год вхождения организации в проект и год выхода (если организация вышла из участников консорциума разработчиков ОСТА):

Takeshi Aoyagi (Asahi Kasei Corporation) 2002-
Takashi Honda (ZEON Corporation) 2002-
Junichi Takimoto (Yamagata Univ.) 2002-
Toshihiro Kawakatsu (Tohoku Univ.) 2002-
Takashi Taniguchi (Kyoto Univ.) 2002-
Yuichi Masubuchi (Kyoto Univ.) 2002-
Ryoichi Yamamoto (Kyoto Univ.) 2013-
Hiroshi Morita (AIST) 2002-
Daisuke Sashie (AIST) 2010-
Hiroya Kodama (Mitsubishi Chemical) 2002-
Tatsuya Yamaue (Kobelco Research Institute, inc.) 2002-
Taku Ozawa (JSOL Corporation) 2003-
Masahiro Nishimoto (JSOL Corporation) 2002-
Yuzo Nishio (JSOL Corporation) 2002-
Hideyo Yoshida (JSOL Corporation) 2012-
Makoto Sasaki (Japan Research Institute, ltd.) 2002-2003
Hisahiro Ito (Toyota Motor Corporation) 2004-2005
Hiroshi Teranishi (Toyota Motor Corporation) 2003-2005

Параллельно с открытой и бесплатной версией комплекса ОСТА существует и его коммерческая адаптация J-ОСТА, разрабатываемая японской фирмой JSOL Corp. Эта адаптация содержит тот же функционал, что и базовый комплекс ОСТА. Однако в коммерческую адаптацию включены множество информационных средств для упрощения и ускорения решения прикладных задач (см. рисунок 8.2). Отметим, что J-ОСТА позволяет интегрировать ее компоненты с конечно-элементным кодом LS-

DYNA, являющимся одним из стандартных инструментов промышленного проектирования.

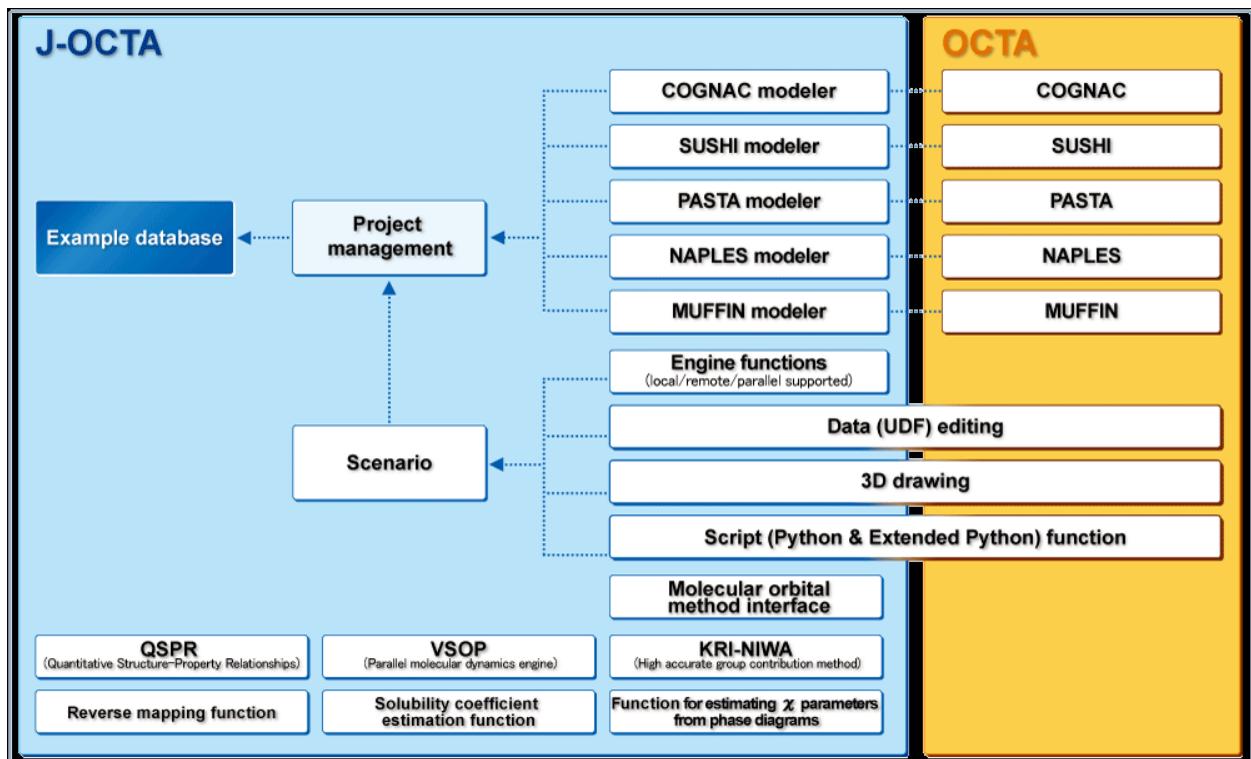


Рисунок 8.2 – Сравнение возможностей комплекса ОСТА и его коммерческой адаптации J-ОСТА

2) Коммерческий пакет Accelrys Mesoprop является компонентом программного комплекса Accelrys Materials Studio и позволяет производить перенос данных с огрубленного атомистического масштаба на конечно-элементный уровень (рисунок 8.3).

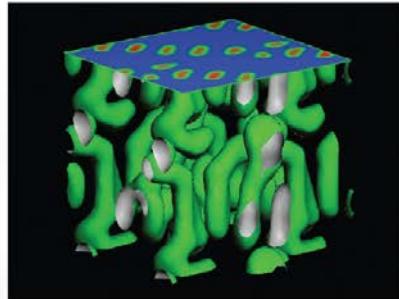
MESOPROP

MesoProp is a new research tool which is used to predict the bulk properties of multicomponent nanostructured materials systems. The research applications for MesoProp include studies of polymers, surfactants and continuous phases which are fundamental to the development of surface coatings, adhesives, sealants, elastomers, cements, composite materials, gels, and laminates.

MesoProp is a fully integrated research tool which links the properties of pure components to complex blends. Applications include formulation and simulation studies of block copolymers, polymer surfactants, nanostructured polymer blends, and physical effects at interfaces such as membranes.

MesoProp offers:

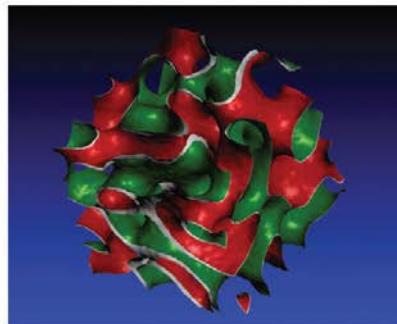
- Predictive studies to streamline research projects and save costs
- Faster product development and shorter time to market
- A business tool for cost engineering: optimizing raw materials usage and reducing formulation costs
- A systematic approach to process and product development, a wide range of input and output information can be captured and held for future use or later inspection.



accelrys.com

HOW DOES MESOPROP WORK ?

MesoProp uses the complex phase morphologies from the MS Modeling MesoDyn and DPD codes to give a dynamic simulation of complex fluid systems at the mesoscale level. The researcher then selects input data of pure components from the MesoProp database. MesoProp then introduces property calculations using Finite Element Analysis algorithms to produce visual models and output data.



The core algorithms and input databases include:

- Elastic constants (stiffness and compliance)
- Thermal expansion coefficients
- Thermal conductivity
- Electrical conductivity
- Dielectric constants
- Gas diffusion constants.

1

Рисунок 8.3 – Иллюстрационный материал по пакету Mesoprop.

Функционал пакета Mesoprop интегрирован с функционалом других частей Accelrys Materials Studio. Так входные данные могут поступать из компонент, ориентированных на оргубленную динамику полимеров MesoDyn

и DPD. Модуль для конечно-элементных расчетов не входит в Accelrys Materials Studio. Поэтому имеет возможность интеграции с различными конечно-элементными пакетами.

The screenshot shows the e-Xstream website for the DIGIMAT software. At the top, there is a logo for 'e-Xstream ENGINEERING MSC Software Company' and a navigation bar with links for Home, Advanced Materials, Nano Composites, etc. The main content area is titled 'The Material Modeling Company' and features a sub-section for 'NANO COMPOSITES'. It highlights that 'DIGIMAT software platform functionalities to model composite materials have been extended to handle specific and exceptional nano-effects.' Below this, it says 'DIGIMAT offers fast, accurate and complementary tools to help engineers and scientists model nano-composite materials, whether they deal with mechanical, thermo-mechanical, electrical or thermal analyses.' A section titled 'DIGIMAT Tools for Nanocomposites Materials & Parts' describes the software's capabilities for modeling 'nano-effects': interface between matrix and nano-filler, size effect, clustering, and size distribution of clusters, interaction between filler particles, and effective particle. It also mentions 'Digimat-MF', 'Digimat-FE', and 'Digimat-CAE' tools. A sidebar on the left provides links to e-Xstream engineering, Digimat Software, Advanced Materials (which is selected), Industries, Services, Support, Workshops and Events, and DIGIMAT Users Meeting 2013. A 'REQUEST INFO' form at the bottom allows users to enter their email address and click a 'GO' button.

Рисунок 8.5 – Веб-страница комплекса DIGIMAT

<http://www.e-xstream.com/en/advanced-materials/nano-composites.html>

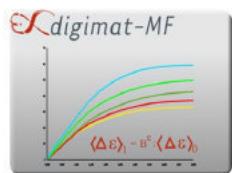
3) Коммерческий программный комплекс бельгийской компании eXtreme DIGIMAT позволяет моделировать композитные полимеры на мезо- и континуальном масштабах (рисунок 8.4). Область применения его функциональности близка к возможностям пакета Accelrys Mesoprop.

Модуль мезоскопического моделирования Digimat-MF основан на полуаналитической гомогенизационной теории среднего поля. Он может

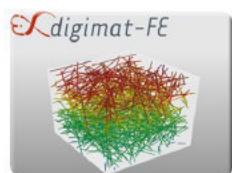
описывать межфазные границы вплоть до наномасштаба и процессы, связанные с электронным переносом.



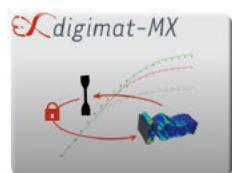
Release 4.5.1 – July 2013



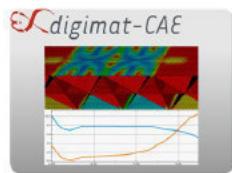
digimat-MF
For a fast & accurate prediction of the nonlinear behavior of multi-phase materials using Mean-Field homogenization technology.



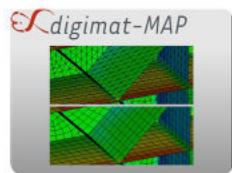
digimat-FE
For an accurate prediction of the local/global nonlinear behavior of multi-phase materials using FEA of realistic Representative Volume Element (RVE).



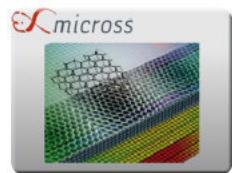
digimat-MX
For the preparation, storage, retrieval and secure exchange of Digimat material models between material suppliers and users, while protecting Intellectual Property.



digimat-CAE
Interfaces to process and structural FEA codes for an accurate prediction of composite materials and reinforced plastics parts performance using nonlinear multi-scale modeling approach.



digimat-MAP
For an efficient mapping of scalar & tensorial data between dissimilar shell and solid FE meshes.



micross
For an easy and efficient design of honeycomb sandwich panels using state-of-the-art micromechanical material modeling technology.

e-Xstream engineering
For material suppliers and end-users who suffer from long and costly development cycles, e-Xstream engineering offers Digimat, The nonlinear multi-scale material & structure modeling platform, an innovative and efficient suite of software to accurately predict the nonlinear behavior of composite materials and structures used across the industries.



Рисунок 8.6 - Специализация продуктов компании eXtreme Digimat.

Специальный модуль Digimat-FE предназначен для генерации наноструктур, кластерных включений и переколяционных структур. А модуль

Digmat-CAE позволяет пользователю включить мезоскопические модели в конечно элементные расчеты и, таким образом, создать многомасштабную модель полимерного нанокомпозита. Поддерживается интеграция со многими конечно-элементными кодами, включая широко распространенные ANSYS, LS-DYNA и ABAQUS.

Рисунок 8.6 иллюстрирует специализацию продуктов компании eXtreme Digimat на моделировании композитных материалов. Заметим, что линейка данных программных решений не включает средств моделирования на атомистическом полноатомном и огрубленном уровне.



Рисунок 8.7 - Palmyra, MatSim

4) Коммерческий пакет Palmyra швейцарской компании MatSim предназначен для конечно-элементного моделирования полимерно-композитных материалов.

Формовка полимерных материалов является одним из самых перспективных технологий для получения легких и прочных деталей разнообразной формы. В процессе формовки в полимерном нанокомпозите появляется структура с сильно гетерогенным распределением ориентации волокон. Для описании подобных случаев необходим учет гетерогенности распределения локальных упругих констант материала. Это может быть реализовано в рамках конечно-элементного подхода при условии, что известны значения упругих констант во всех точках системы.

В коде Palmyra была впервые воплощена данная методика на основе периодической многоволоконной Монте Карло модели с заранее определенной степенью ориентации. Методика зарекомендовала себя как очень надежный способ описания коротковолокнистых полимерных композитов и их компьютерного дизайна.

Текущая версия пакета Palmyra позволяет рассчитывать следующие свойства нанокомпозитных материалов:

- 1) Упругие константы и жесткость;
- 2) Коэффициент теплового расширения;
- 3) Коэффициент теплопроводности;
- 4) Диэлектрические свойства;
- 5) Электросопротивление;
- 6) Оптические свойства (коэффициент преломления);
- 7) Транспортные свойства (проницаемость и коэффициент диффузии).

Представленный обзор передового программного и математического обеспечения для моделирования полимерных композитов показывает, что на данный момент являются доступными несколько альтернативных

программных комплексов для построения многомасштабных моделей. Обзор свидетельствует о наличии спроса на данное программное обеспечение со стороны промышленности.

Все приведенные программные продукты являются результатом разработки на протяжении более 10 лет коллективом передовых специалистов мирового уровня. Под разработкой следует понимать развитие физико-химических моделей, математических методов, вычислительных алгоритмов и, собственно, программного обеспечения.

В рамках данной работы был разработан прототип методики пред назначенной для многомасштабного суперкомпьютерного моделирования деформации и разрушения полимерных нанокомпозитов. Преимуществами данного подхода являются:

1) Использование технологий сверхмасштабируемых суперкомпьютерных расчетов (перечисленные коммерческие решения J-OSTA, Digimat, Palmyra и др. не ориентированы на сверхмаштабируемость).

2) Принципиальное внимание уделено моделированию деформации и разрушения, что представляет собой особенно сложную задачу, т.к. параметры моделей параметризуются под данную микроструктуру. При деформации микроструктура меняется «на лету», и поэтому необходимо непрерывно адаптировать параметры модели.

Для успешной реализации предложенной программной методики (т.е. для вывода ее на конкурентные позиции по отношению к имеющимся аналогам) требуется 2-3 года работы консорциума из 3-4 ВУЗов или других научно-исследовательских организаций России. Данная оценка учитывает возможность использования для указанных целей доступного программного обеспечения с открытым кодом, примером которого является, в частности, комплекс ОСТА.

Комплекс ОСТА может служить хорошим примером организации разработки методики пред назначенной для многомасштабного суперкомпьютерного моделирования деформации и разрушения полимерных

нанокомпозитов. В частности, чрезвычайно перспективной представляется модель, в рамках которой научное развитие открытого продукта проходит в рамках консорциума со смешанным финансированием (государство + промышленность), а полностью прикладная коммерческая версия создается отдельно на ее основе.

8.1 Выводы по разделу

Показано, что разработка методики проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов должна включать в себя работу 2-4 коллективов по набору моделей композитных материалов от атомистического до континуального уровней. Каждый коллектив, должен развивать 2-3 перекрывающиеся по масштабу модели. Разработка должна проводиться в рамках концепции программного обеспечения с открытым кодом. Чрезвычайная востребованность программного обеспечения в данной области для нужд промышленности убедительно свидетельствует о хороших перспективах последующей коммерциализации данного продукта.

9 Экспериментальные исследования модельных образцов полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластиинчатые включения) согласно ПМЭИ

В соответствии с требованиями ТЗ ГК, были проведены исследования модельных образцов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластиинчатые включения). Исследования проводились на модельных образцах, изготовленных на этапе 1 настоящей работы (см. отчет за этап 1, раздел 9 и приложение В). Исследования проводились в соответствии с методиками, приведенными в ПМЭИ, см. отчет за этап 1, приложение Б.

9.1 Экспериментальные исследования модельных образцов, содержащих короткие волокна

Результаты трибологических испытаний композитов с различной степенью наполнения приведены на рисунке 9.9.1. Для исходного, ненаполненного СВМПЭ установившееся значение коэффициента трения μ составляет 0.25, добавление 2 масс. % углеродного волокна (УВ) в полимерную матрицу приводит к некоторому снижению коэффициента трения до значения 0.22. Несмотря на то, что при добавлении 4 масс.% углеродных волокон наблюдается увеличение коэффициента трения до 0.28, дальнейшее увеличение степени наполнения позволяет заметно улучшить трибологические характеристики материала, так, например, коэффициент трения композита содержащего 14 масс. % УВ на 65% ниже, чем у исходного СВМПЭ.

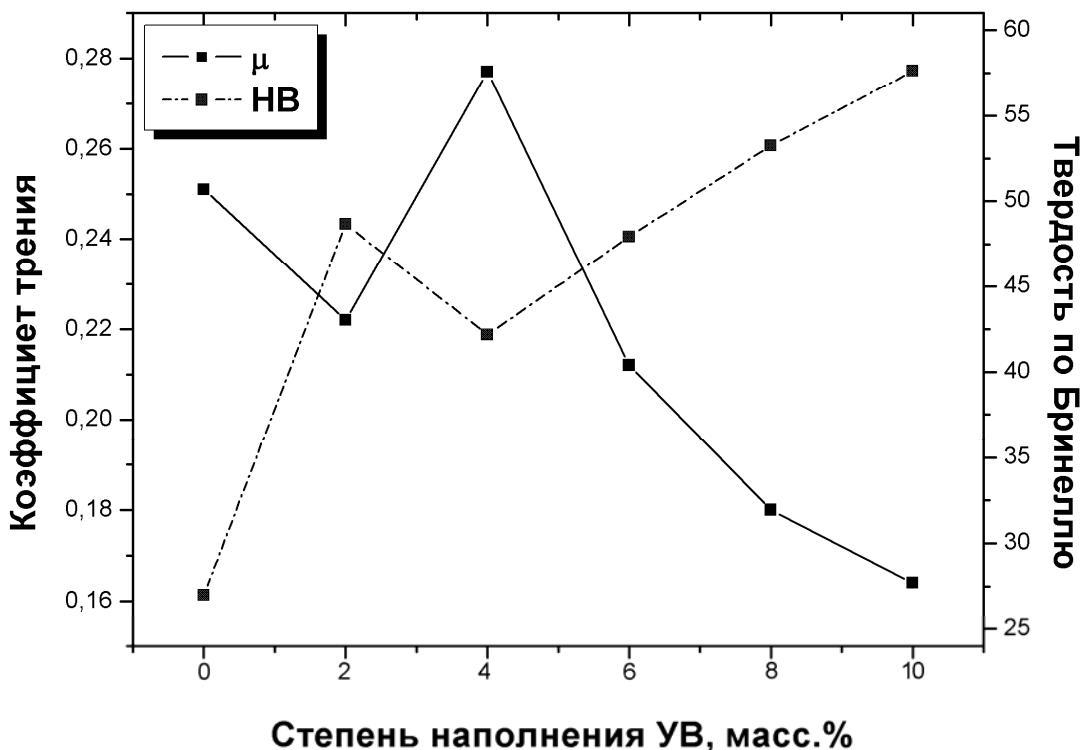


Рисунок 9.1 – Коэффициент трения и твердость композитов на основе СВМПЭ в зависимости от степени наполнения

Если сопоставить коэффициент трения твердость по Бринеллю, рассчитанной по отпечаткам после вдавливания шарика диаметром 9,6 мм нагрузкой 7,1 кг и продолжительностью ее действия 1,5 минуты, наблюдается обратная зависимость между μ и HB. Из рисунка 9.9.1 видно, что добавление в СВМПЭ 2 масс. % УВ увеличивает твердость со значения 27 HB до 48 HB, при этом наблюдается уменьшение коэффициента трения. Для образца, содержащего 4 масс.% УВ твердость падает, а коэффициент трения повышается, дальнейшее увеличение степени наполнения волокном приводит к увеличению твердости композитов до 58 HB, при армирование 10 масс.% УВ, что сопровождается уменьшением коэффициента трения до значения 0.16.

Известно, что коэффициент трения имеет двойственную молекулярно-механическую природу, адгезионная составляющая коэффициента трения складывается из отношения прочности на сдвиг адгезионных связей τ_0 к истинному давлению на контакте p_r . Деформационная составляющая коэффициента трения зависит от относительного внедрения h/r более жесткой поверхности контртела (h – глубина, r – радиус внедрившегося элемента). Тогда, коэффициент трения можно выразить следующим образом:

$$f = \frac{\tau_0}{p_r} + \beta + 0,55\alpha_r \sqrt{\frac{h}{r}}, \quad (1)$$

где α_r - коэффициент гистерезисных потерь, β - пьезокоэффициент, характеризующий увеличение прочности адгезионных связей от нормального давления.

Эта зависимость охватывает два частных случая: закон трения Б.В.Дерягина (адгезионная, или молекулярная, слагаемая коэффициента

трения) $\left(\frac{\tau_0}{p_r} + \beta \right)$ и закон трения Гранвуане — Горячкина (деформационная,

или механическая, слагаемая коэффициента трения $0,55\alpha_r \sqrt{\frac{h}{r}}$). В полимерах адгезионная составляющая коэффициента трения не столь значительна и в суммарной силе трения преобладающую роль играет деформационная составляющая [6]. А чем больше твердость поверхности образцов, тем меньше величина относительного внедрения (отношение h/r), и, согласно (1), меньше и коэффициент трения. Следовательно, такой характер изменения коэффициента трения углероднаполненных композитов является результатом влияния наполнителей на твердость поверхностного слоя образцов.

Предварительные исследования механических свойств при растяжении армированных углеродными волокнами композитов показали незначительное увеличение прочности при добавлении волокон по

сравнению с чистым СВМПЭ. Это связано с недостаточно хорошей адгезией на границе волокно – матрица, в связи с чем матрица не в состоянии в полной мере передавать всю прикладываемую на композит нагрузку, обладающим более высокими прочностными характеристиками, волокнам и возникающие в объеме материала напряжения идут на разрушение межфазной границы, в то время как волокна сохраняют свою целостность. Плохая смачиваемость волокон полимерной матрицей может являться причиной возникновения макро- и микро дефектов в композите, которые являются центрами зарождения трещин, следовательно, прочностные характеристики материала будут сильно зависеть от того, насколько прочная граница образовалась между волокном и полимерной матрицей.

Для улучшения взаимодействия на границе раздела волокно-полимер была проведена окислительная модификация углеродных волокон, заключавшая в окислении кислородом воздуха из газовой фазы при повышенных температурах. Согласно [7, 8] окисление при температуре 500 С в течение 10 минут является наиболее оптимальным режимом модификации карбонизированных углеродных волокон, обеспечивающий образование хорошо развитой поверхности углеродных волокон с характерными канавками травления.

Исследования механических характеристик образцов композиционных материалов, наполненных углеродными волокнами марки УКН-5000 в состоянии поставки и подвергнутых термическому окислению при температуре 500 °С в течении 10 минут показали, что при армировании волокнами, не подвергнутых поверхностной модификации, наблюдается рост значений модуля Юнга с увеличением степени наполнения со значения 0,75 ГПа для чистого, ненаполненного СВМПЭ, до значения 1,54 ГПа при наполнении 10 масс.% УВ (рисунок 9.**Ошибка! Источник ссылки не найден.**). В случае использования термоокисленных волокон при степени наполнения 2 масс.% модуль Юнга достигает значения 1, 56 ГПа, а при 10

масс.% углеродных волокон – 4,1 ГПа, что в 5,5 раз больше чем у исходного СВМПЭ и 2,5 раза больше, чем при армировании немодифицированными волокнами. Следовательно, в случае армирования модифицированными волокнами достигается необходимый уровень адгезии между компонентами композита и достаточно прочная граница раздела, способная передавать прикладываемую нагрузку на волокна.

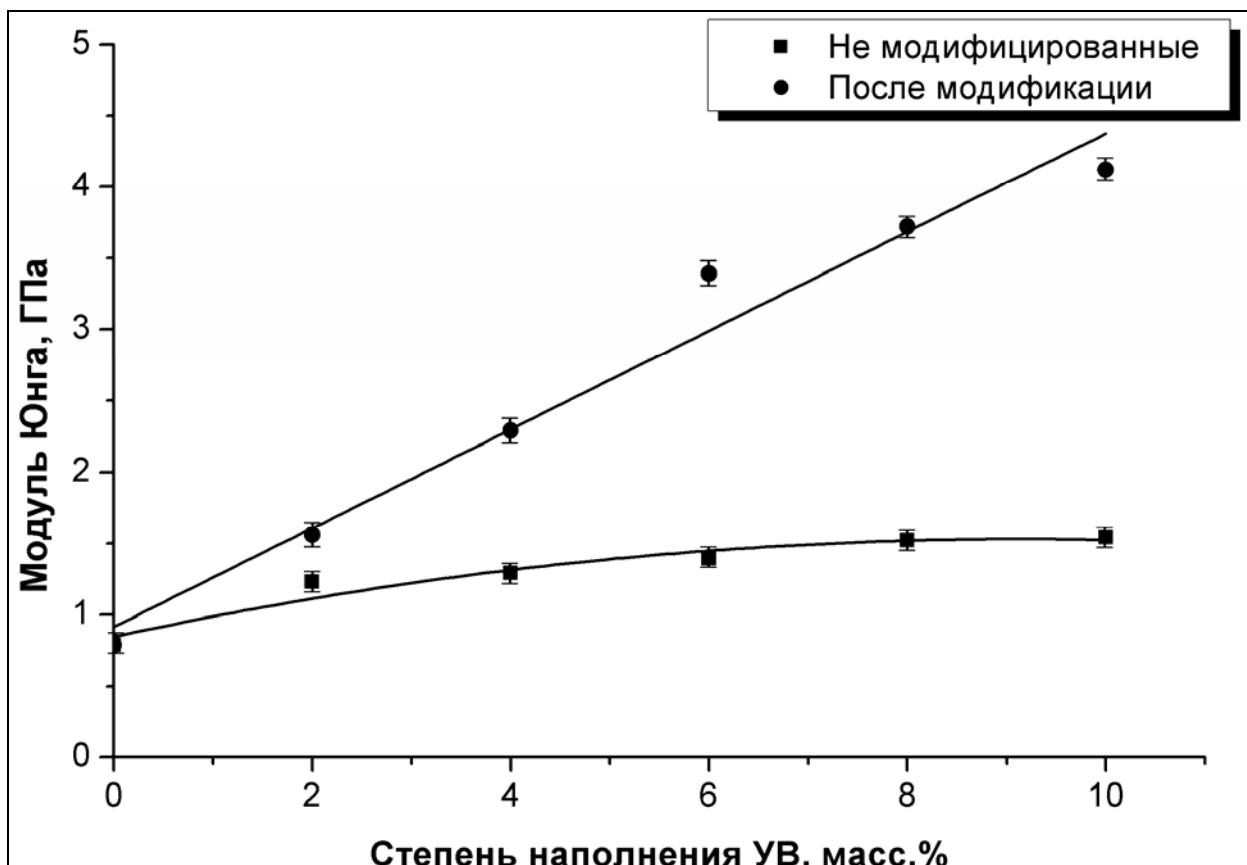


Рисунок 9.2 – Зависимость модуля Юнга композитов от степени наполнения волокнами УКН-5000 в состоянии поставки и после термического окисления (500 °C, 10 мин.)

9.2 Экспериментальные исследования модельных образцов, содержащих многостенные трубы

Результаты механических испытаний на растяжение нанокомпозитов СВМПЭ/МУНТ (многостенные углеродные нанотрубки) представлены на рисунках 9. и **Ошибка! Источник ссылки не найден.**. При добавлении углеродных нанотрубок наблюдается увеличение прочности в среднем на 13-17 % по сравнению с прочностью исходной матрицы. Предел текучести незначительно снижается или остаётся на том же уровне. Модуль упругости, как видно из рисунка **Ошибка! Источник ссылки не найден.**, монотонно возрастает с увеличением концентрации МУНТ, и при концентрации 4 масс. % МУНТ достигает максимального увеличения на 87 %. Относительное удлинение нанокомпозитов с увеличением содержания МУНТ имеет тенденцию к снижению, рисунок **Ошибка! Источник ссылки не найден.**. При добавлении 1 масс. % и 2 масс. % МУНТ относительное удлинение снижается не значительно, до 210 % и 200 % соответственно. При добавлении 4 масс. % МУНТ относительное удлинение нанокомпозита падает до 153 %.

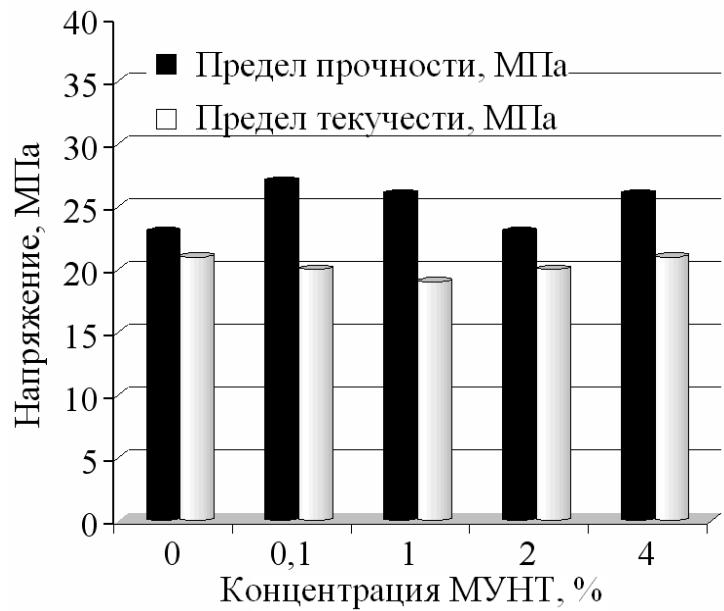


Рисунок 9.3 - Зависимость предела прочности и предела текучести, для изотропных нанокомпозиционных материалов СВМПЭ/МУНТ, от концентрации наполнителя

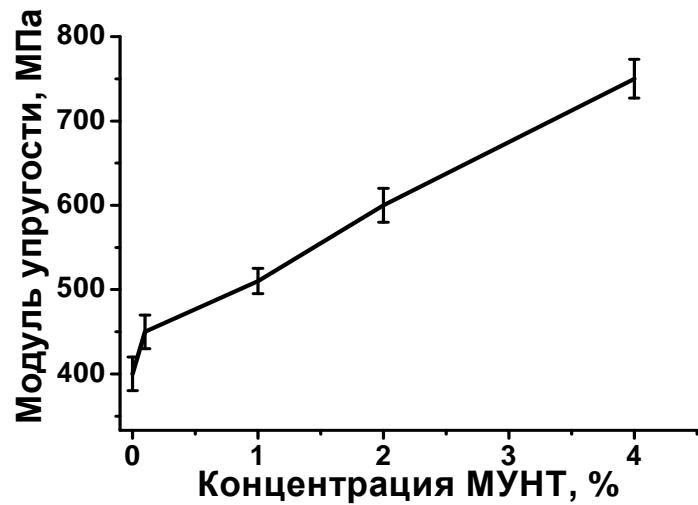


Рисунок 9.4 – Зависимость модуля упругости для нанокомпозиционных материалов СВМПЭ/МУНТ от концентрации наполнителя

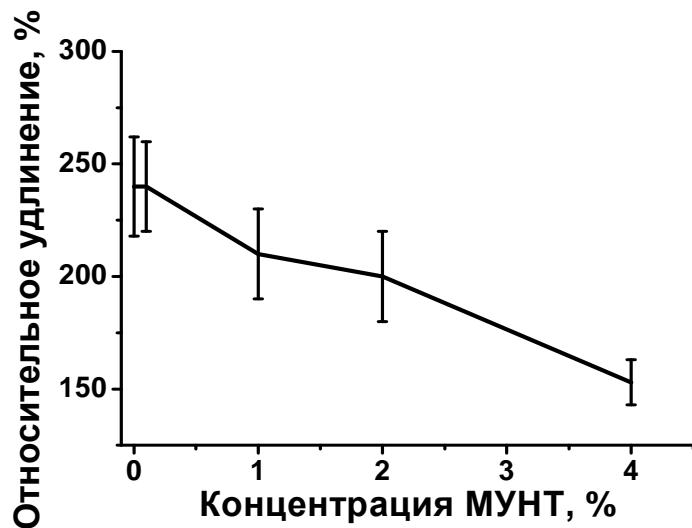


Рисунок 9.5 - Зависимость относительного удлинения для нанокомпозиционных материалов СВМПЭ/МУНТ от концентрации наполнителя

Зависимость коэффициента трения нанокомпозитов от концентрации МУНТ представлена на рисунке 9.6. Добавление МУНТ в СВМПЭ приводит к увеличению коэффициента трения с 0,24 до 0,27. Такое поведение наблюдается до концентрации МУНТ 1 масс. %. При дальнейшем увеличении содержания МУНТ коэффициент трения имеет тенденцию к снижению и при добавлении 2 масс. % МУНТ становится равным коэффициенту трения не наполненного полимера.

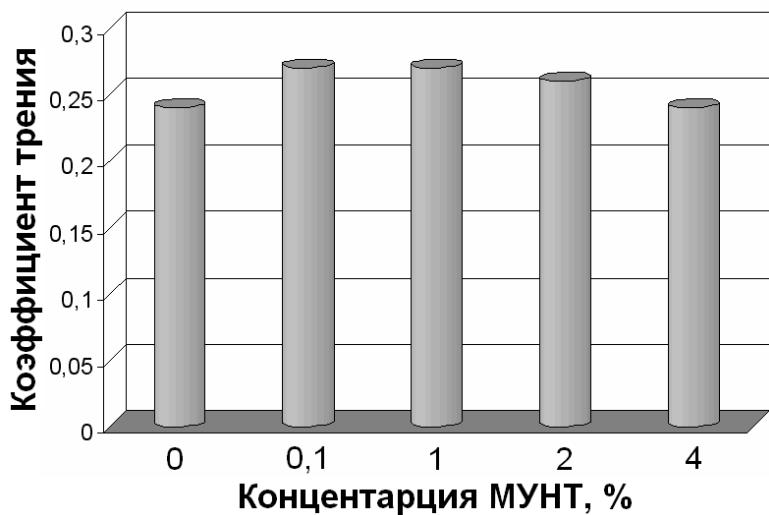


Рисунок 9.6 – Коэффициент трения нанокомпозитов СВМПЭ/МУНТ в зависимости от содержания МУНТ

Наблюдаемое (см. отчет за этап 1, раздел 9) распределение МУНТ в СВМПЭ сказывается на незначительном увеличении предела прочности и предела текучести у полученных нанокомпозиционных материалов СВМПЭ/МУНТ, рисунок 9.3. Большое же количество агломератов МУНТ в нанокомпозите приводит к значительному снижению относительного удлинения. С ростом концентрации МУНТ количество несвязанных агломератов увеличивается, что отражается на более интенсивном снижении относительного удлинения, рисунок 9.5. Полученные неудовлетворительные показатели коэффициента трения также являются следствием плохого взаимодействия МУНТ с полимерной матрицей, в результате которого было отмечено выкрашивание наполнителя. Как было отмечено в работе [9], выкрашивание УНТ из полимера приводит к увеличению шероховатости трущихся поверхностей композита, и как следствие к увеличению адгезионной и деформационной составляющих коэффициента трения, что отрицательно сказывается на поведении коэффициента трения. Подобная картина увеличения коэффициента трения, по сравнению с исходной матрицей, наблюдалась и в нашем случае для изотропных нанокомпозитов, рисунок 9.6.

В работах [10 – 12] отмечалось, что МУНТ благодаря своим уникальным трибологическим свойствам могут выступать в роли твёрдой смазки. Т.е. в процессе трения изотропных нанокомпозитов СВМПЭ/МУНТ наблюдается как минимум два конкурирующих процесса отвечающих за коэффициент трения: увеличение адгезионной и деформационной составляющих, и увеличение концентрации МУНТ в контактирующих поверхностях трения. При высоких концентрациях МУНТ, от 2 масс. %, рисунок 9.6, наблюдалось небольшое снижение коэффициента трения, что могло быть вызвано преобладанием процесса накопления МУНТ в зоне контакта, выступающих в роли твёрдой смазки.

9.3 Экспериментальные исследования модельных образцов, содержащих пластинчатые включения

На рисунке 9.7 представлена концентрационная зависимость предела прочности при растяжении. С увеличением концентрации наполнителя прочность сперва незначительно (на 2 – 3 МПа) возрастает, затем начинает снижаться, возвращаясь при содержании бронзы ~5 об. % к значениям, характерным для чистого СВМПЭ. Дальнейшее увеличение степени наполнения сопровождается плавным снижением предела прочности, и при содержании наполнителя 50 об. % его значения снижаются более чем в полтора раза относительно ненаполненного полимера.

Ход зависимости относительного удлинения при разрыве от концентрации схож с зависимостью для предела прочности, однако кривая для удлинения заметно сдвинута в сторону меньших концентраций (рисунок 9.8). С ростом содержания бронзы в композите относительное удлинение сперва возрастает, затем достаточно резко снижается, возвращаясь к характерным для чистого СВМПЭ значениям уже при содержании наполнителя ~2 об. %. При дальнейшем увеличении содержания наполнителя

относительное удлинение при разрыве продолжает снижаться, и при содержании бронзы ~15 об. % приближается к нулю, что отвечает потере материалом пластичных свойств.

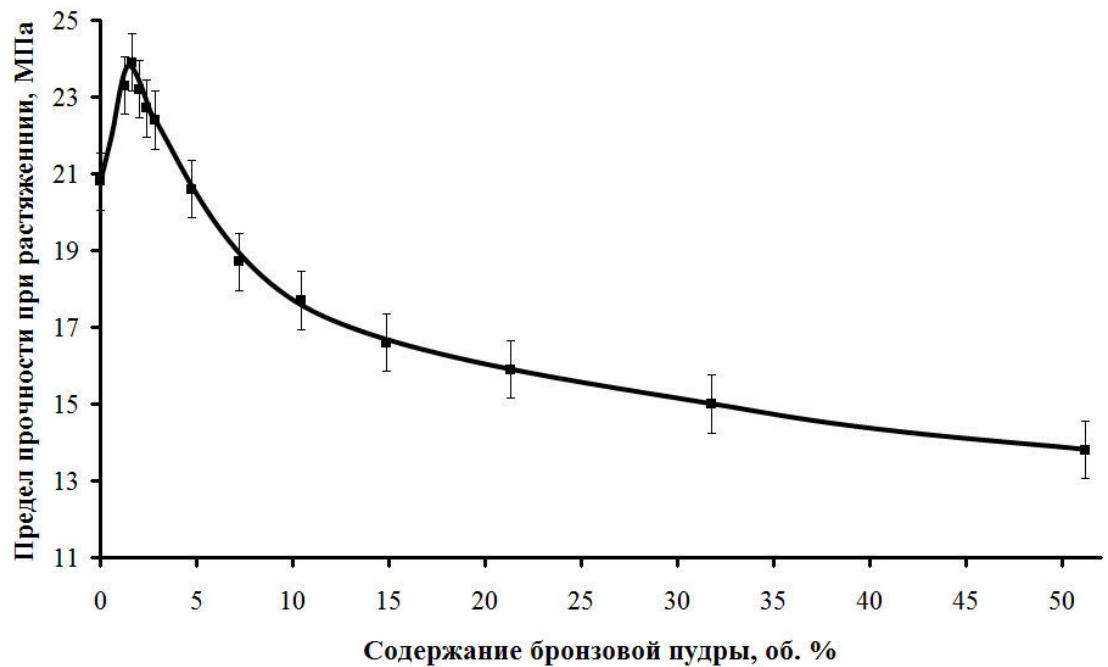


Рисунок 9.7 - Зависимость предела прочности при растяжении от содержания наполнителя в композите

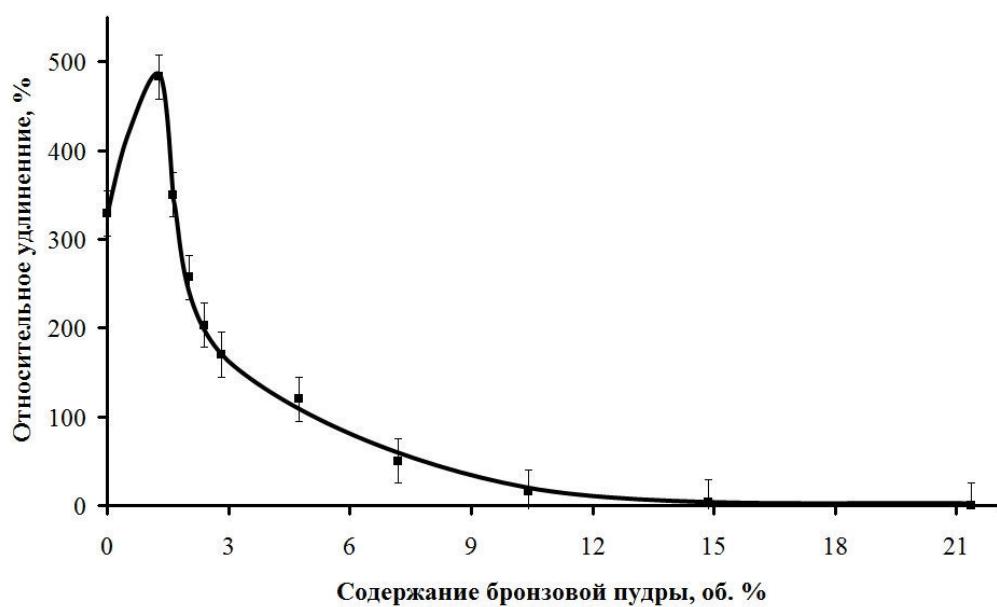


Рисунок 9.8 - Зависимость относительного удлинения при растяжении от содержания наполнителя в композите

Наблюдаемый при небольших концентрациях наполнителя рост механических свойств композита может быть объяснен сменой механизма разрушения [13]. Если для чистого полимера характерно однородное течение, то композиты, содержащие небольшое количество неорганического наполнителя, при растяжении разрушаются с неустойчивым формированием шейки; введение же в полимер значительного количества наполнителя сопровождается переходом к квазихрупкому разрушению с разрывом при формировании шейки.

На рисунке 9.9 представлена концентрационная зависимость модуля упругости при растяжении. С увеличением содержания наполнителя модуль монотонно возрастает, увеличиваясь почти в восемь раз относительно ненаполненного СВМПЭ при высоких концентрациях наполнителя. Монотонный рост модуля характерен для дисперсонаполненных композитов и отражает увеличение сопротивления деформированию образца за счет вклада твердого наполнителя [13, 14].

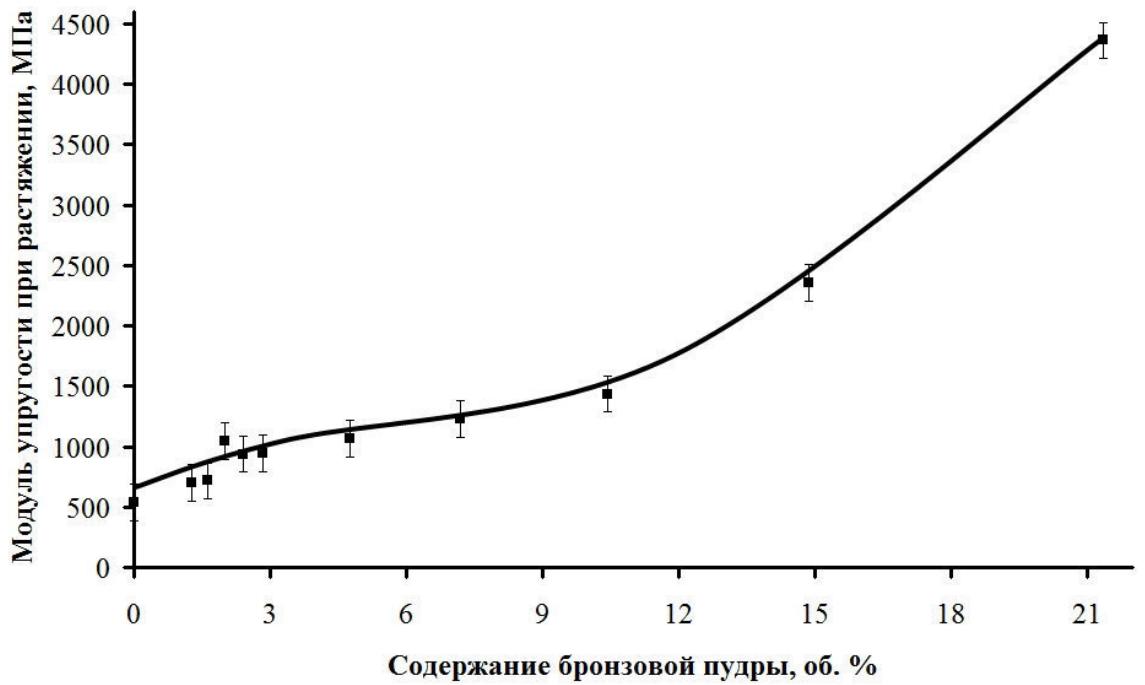


Рисунок 9.9 - Зависимость модуля упругости при растяжении от содержания наполнителя в композите

Трибологические испытания образцов состояли из трех серий. Первая серия испытаний трибологических свойств композитов проводилась при скорости скольжения $V=4,53$ м/с, максимальной нормальной нагрузке $P = 19,2$ Н и пути трения $L = 5,445$ км. Результаты этой серии экспериментов и измерения твердости образцов представлены на рисунках 9.10 и 9.11.

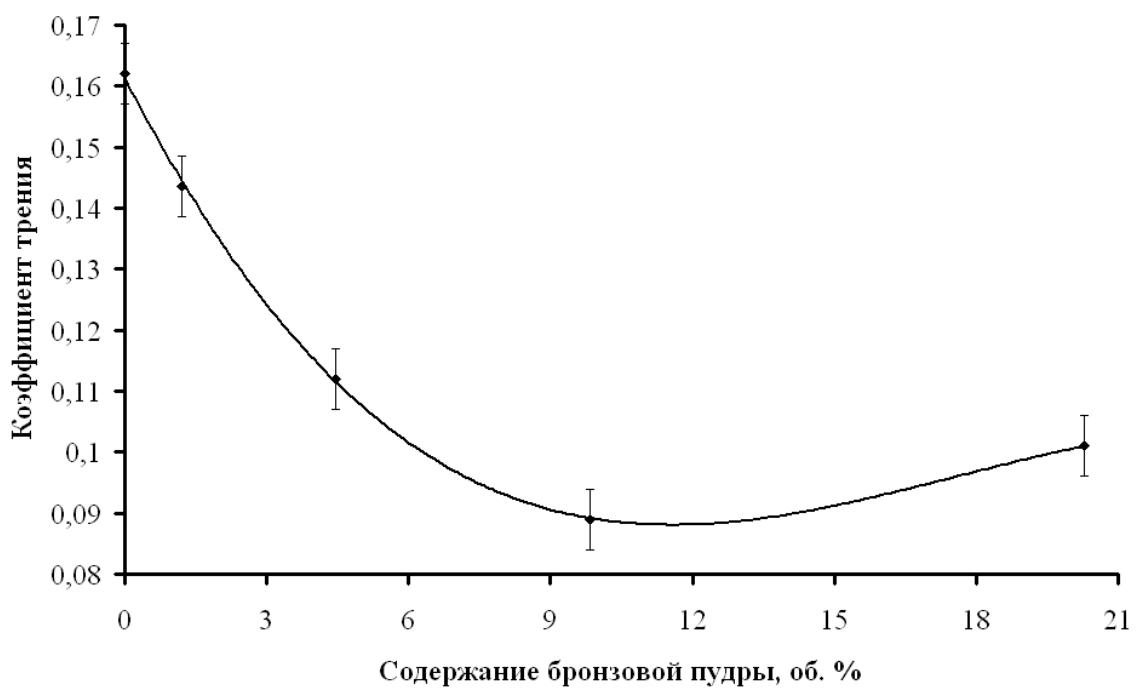


Рисунок 9.10 - Зависимость коэффициента трения от содержания наполнителя в композите

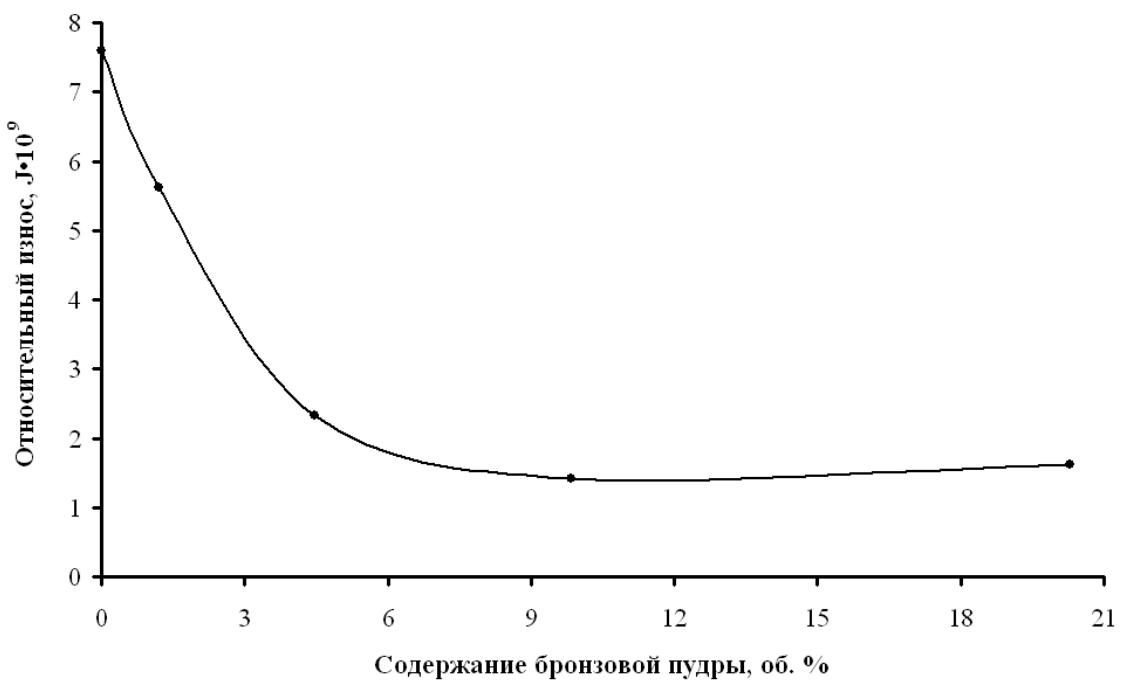


Рисунок 9.11 - Зависимость относительного износа от содержания наполнителя в композите

Интенсивность линейного изнашивания J представляет собой отношение линейного износа к пути трения. Линейный износ определялся по пятну износа композита в конце эксперимента. Из таблицы 4 следует, что оптимальной по износостойкости и антифрикционным характеристикам является композиция, содержащая около 10 об. % наполнителя.

Целью второй серии испытаний являлось определение антифрикционных свойств композитов для трех составов, испытанных в первой серии. Эта серия экспериментов проводилась на композитах, испытанных в первой серии на износ и при кратковременном приложении нагрузки. Таким образом, во второй серии испытаний сохранялся неизменным размер пятна контакта, сформированный в экспериментах на износ (первая серия испытаний). Для каждого образца эксперимент начинался с большей скорости, затем следовал эксперимент с меньшей скоростью, для каждой скорости проводилось ступенчатое повышение нагрузки. Результаты второй серии экспериментов сведены в таблицу 5. Видно, что антифрикционные характеристики композитов определяются в первую очередь скоростью скольжения, от величины же нагрузки на контакте коэффициент трения зависит слабо.

Таблица 4 - Трибологические свойства и твердость композитов в при различных концентрациях наполнителя, скорость скольжения 4,53 м/с, нормальная нагрузка 19,2 Н, путь трения 5,445 км

Параметр	Концентрация наполнителя, С об. %.				
	0	1,24	4,6	10,12	20,81
f_k	0,162	0,1436	0,112	0,089	0,101
$J \times 10^9$	7,6	5,62	2,33	1,424	1,613
H , МПа	67,7	60,3	66,4	73,2	86,9

Таблица 5 - Коэффициент трения композитов в зависимости от скорости скольжения и нормальной нагрузке на контакте

Скорость, м/с	Нормальная нагрузка, Н			
	9,64	12,83	16,0	19,2
Концентрация наполнителя С = 20,81 об. %				
6,2	0,104	0,104	0,1	0,111
2,62	0,156	0,156	0,165	0,144
Концентрация наполнителя С = 10,12 об. %				
6,2	0,109	0,103	0,115	0,117
2,62	0,147	0,177	0,178	0,163
Концентрация наполнителя С = 1,24 об. %				
6,2	0,1107	0,1145	0,1	0,1044
2,62	0,1172	0,1274	0,1413	0,1375

Контроль состояния поверхности трения контртела свидетельствует о фрагментальном переносе (намазывании) продуктов механо- и термодиструкции полимера и, вероятно, дисперсных частиц наполнителя. Этот процесс является более интенсивным при высоких концентрациях наполнителя и скоростях скольжения. Подобные фрагментальные участки слоев имеют низкое сопротивление сдвигу. Этим обстоятельством объясняются практически одинаковые значения коэффициенты трения при скорости скольжения, равной 6,2 м/с, способствующей образованию этих слоев.

Расчетная оценка интенсивности линейного износа композита, как следует из [15], базируется на учете механических и трибологических свойств композита и параметров, характеризующих нагруженность контакта и шероховатость истирающей металлической поверхности. Для получения элементного закона изнашивания композита с оптимальной концентрацией ($C = 10,12$ об. %) наполнителя проведена третья серия экспериментов при $V = 4,53$ м/с, $L = 5,445$ км и нормальной нагрузке $P = 7,1 - 19,2$ Н (таблица 5).

Обобщение результатов этих экспериментов позволило получить следующий элементный закон изнашивания:

$$J_p = 3,427 \cdot 10^{-9} (p \sqrt{1 + f^2} / H \varepsilon)^{0,8}, \quad (3)$$

где p – давление на контакте, МПа, H – твердость образца, МПа, ε – линейная деформация образца при прикладываемых нагрузках. В расчетах использовались значения $H = 73,2$ МПа и $\varepsilon = 0,07$. В таблице 6 представлены результаты сопоставления экспериментальных и расчетных значений интенсивности для трех величин нормальных нагрузок на контакте. Видно, что зависимость (3) хорошо описывает экспериментальные величины износа в использованном диапазоне нагрузок.

Таблица 6 - Результаты сопоставления экспериментальных J и расчетных J_p значений интенсивности линейного износа композита с оптимальной концентрацией наполнителя при $V = 4,53$ м/с, $L = 5,445$ км, нормальной нагрузке $P = 7,1 - 19,2$ Н, твердости поверхности $H = 73,2$ МПа и $\varepsilon = 0,07$

$P, \text{Н}$	7,1	12,83	19,2
$p, \text{МПа}$	0,986	1,527	2,041
f	0,134	0,122	0,11
$J \cdot 10^9$	0,95	1,297	1,613
$p/H \varepsilon$	0,1924	0,298	0,398
$p \sqrt{1 + f^2} / H \varepsilon$	0,1941	0,3004	0,3996
$J_p \cdot 10^9$	0,9232	1,3094	1,645
Отклонение J_p от J , %	- 2,9	+ 0,95	+ 1,99

9.4 Выводы по разделу

Были проведены исследования физико-механических и трибологических характеристик модельных образцов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластинчатые включения). Были получены концентрационные зависимости исследуемых характеристик, выявлены закономерности, определяющие изменение свойств полимера при введении в него наполнителей различной геометрии. Полученные характеристики и их зависимости предназначены для верификации результатов, полученных с использованием ПМЭИ.

10 Сравнительный анализ результатов теоретических и экспериментальных исследований (результатов моделирования с экспериментальными данными)

Разработанная методика проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных композитов и ее программная реализация позволяют проводить расчеты на пространственно-временных масштабах, приближающихся к экспериментальным. В то же время реалистичные модели полимерных композитов требуют использования супер-ЭВМ петафлопсного класса. Однако в рамках данного проекта после завершения основных работ по созданию программной реализации данной многомасштабной расчетной методики ее фактическое использование на максимально доступных для российских исследователей суперкомпьютерных мощностях уровня 0.1-1 ПФлопс не могло быть осуществлено. Поэтому сопоставление с экспериментальными данными по свойствам композитов проводилось путем экстраполяции результатов расчетов, выполненных с учетом физически обоснованных допущений, сокращающих вычислительную сложность модельных расчетов.

Два параметра имеют решающее значение в определении размера модельной системы и, соответственно, количества частиц в ней:

- 1) Длина полимерных цепей;
- 2) Объемная доля включений.

Композиты на основе СВМПЭ требуют для своего описания полимерных цепей, состоящих из 10^6 элементов. Прямое моделирование в рамках огрубленных атомистических моделей станет возможным только через несколько лет с появлением супер-ЭВМ экзафлопсного класса. Переход к конечно-элементным моделям хотя и радикально снижает

вычислительную сложность расчетов, но на текущем мировом уровне развития теории и математических моделей (включая разработанные в данном проекте) не является в достаточной степени адекватным задачам прогностического моделирования свойств полимерных композитов.

Рисунок 10.1 показывает сравнение результатов расчетов, выполненных при объемной доле включений 10-30% и экспериментальных данных, соответствующих существенно меньшим концентрациям включений. Видно качественное согласие результатов, допускающее непрерывную экстраполяцию.

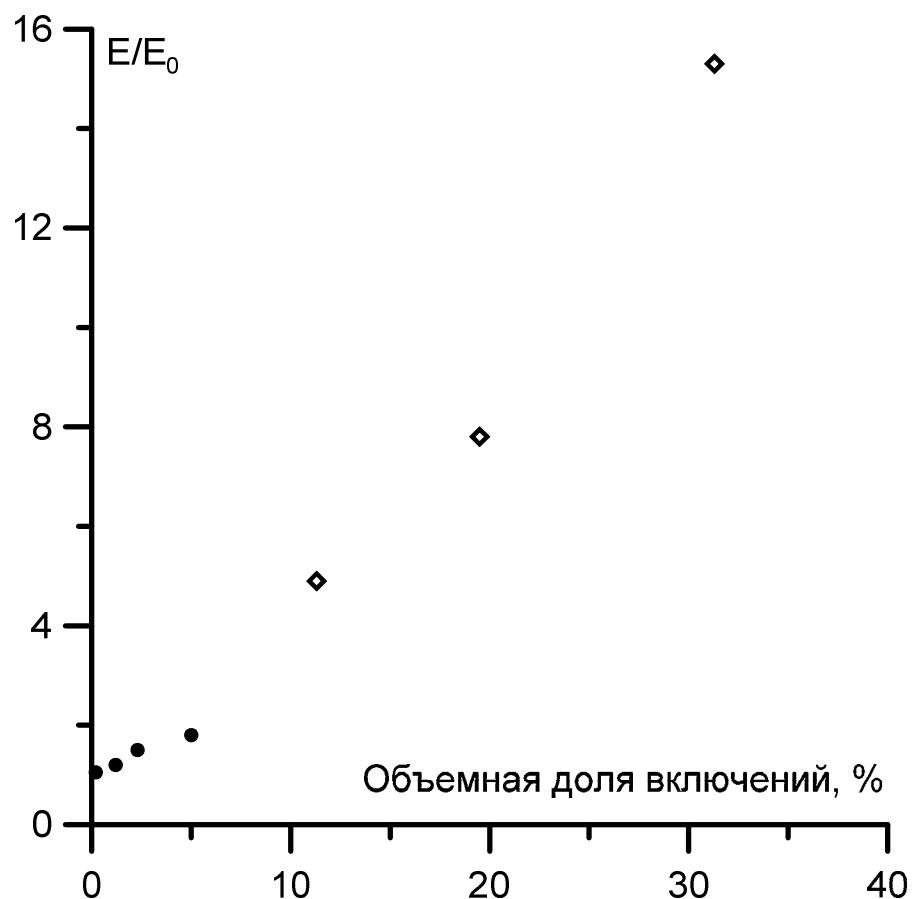


Рисунок 10.1 – Экспериментальные данные (кружки) и данные расчетов (ромбы) по относительному повышение предела упругости композитного материала на основе углеродных нанотрубок и полиэтилена

Рисунок 10.2 показывает сравнение результатов расчетов, выполненных при варьировании молекулярной массы полимерных цепей (полиэтилена). На имеющихся вычислительных мощностях можно проводить расчеты с использование созданной программной реализации для среднего размера молекул полиэтилена, составляющем 50-200 мономеров. Однако результаты расчетов предсказывают значение прочности композиты на основе СВМПЭ и углеродных нанотрубок с хорошей точностью, порядка 10%.

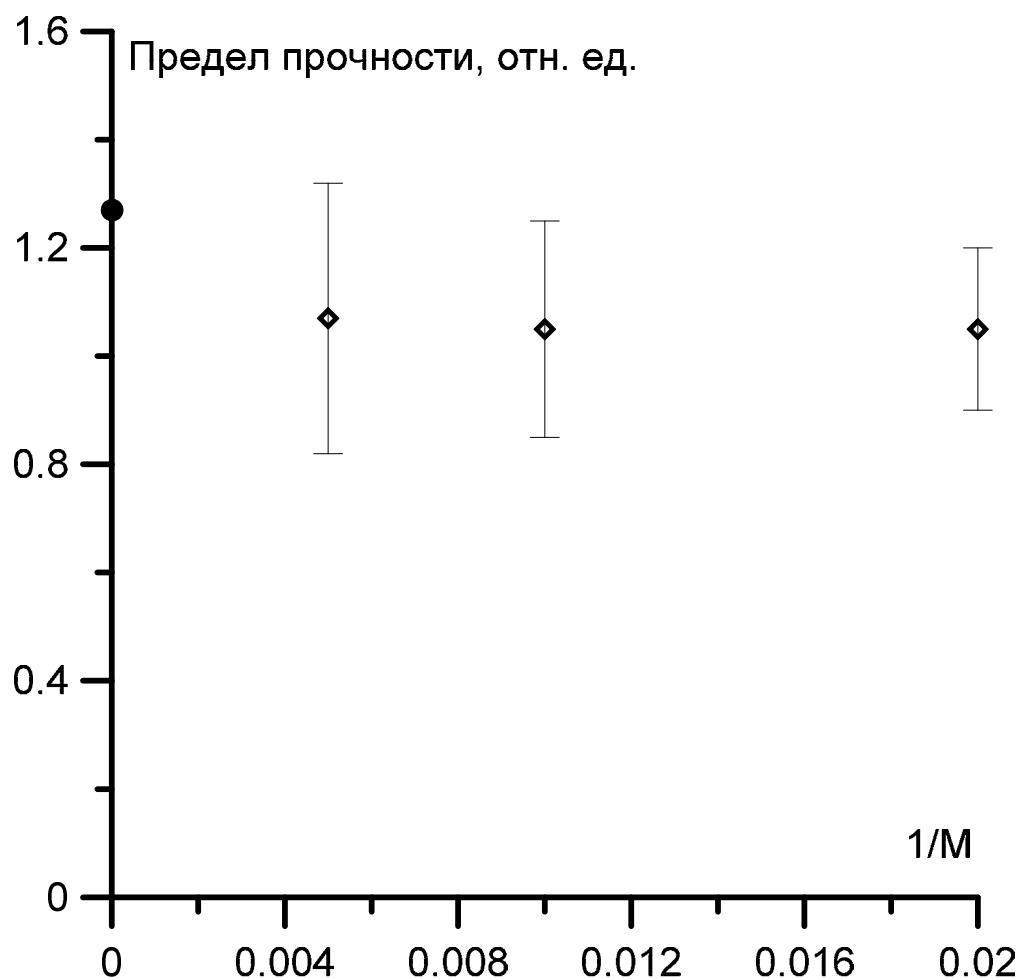


Рисунок 10.2 - Экспериментальные данные (круги) и данные расчетов (ромбы) по пределу прочности композитного материала на основе углеродных нанотрубок и полиэтилена (M – среднее число мономеров в молекулах полиэтилена)

Еще одним фактором, определяющим как точность расчетов, так и их вычислительную сложность, является время расчета. Для моделирования деформации и разрушения существенно, с какой скоростью будет происходить процесс деформации. Как было показано ранее, в рассмотренных при создании комплекса моделях удавалось добиваться сходимости при постепенном уменьшении скорости деформации. Тем не менее, при переходе к полимерным композитам с более высокой средней длиной полимерных цепей релаксационные времена, определяющие отклик системы на малую деформацию, будут возрастать. Данный вопрос можно будет решить только с использованием супер-ЭВМ экзафлопсного класса.

Для оценки ошибки модельного описания полимерных композитов с учетом указанных выше факторов, была проведена оценка вкладов в относительную погрешность каждого факторов с их последующим сложением:

$$(\Delta_{\text{полная}})^2 = (\Delta_{\text{объемная доля}})^2 + (\Delta_{\text{длина цепей}})^2 + (\Delta_{\text{скорость деформации}})^2.$$

В таблице 7 сведены основные экспериментально измеряемые характеристики полимерного нанокомпозита и приведена соответствующая полная относительная погрешность их определения.

Таблица 7 - Основные характеристики нанокомпозитов и ошибка их модельного описания

Параметр	Композиты, содержащие		
	волокна	нанотрубки	пластинчатые включения
Предел прочности МПа / доля от чистого полимера/ ошибка модельного описания	120 / 4,8 / 30	28 / 1,27 / 20	24 / 1,15 / 40
Предел текучести МПа / доля от чистого полимера/ ошибка модельного описания	40 / 2 / 20	19 / 0,9 / 15	15 / 0,75 / 35
Отн. удлинение % / доля от чистого полимера/ ошибка модельного описания	410 / 1,35 / 15	200 / 0,8 / 10	480 / 1,5 / 20
Модуль упругости ГПа / доля от чистого полимера/ ошибка модельного описания	3,5 / 3,5 / 15	0,6 / 1,5 / 10	1 / 2 / 20

10.1 Выводы по разделу

Проведен сравнительный анализ результатов теоретических и экспериментальных исследований. Показано, что разработанная методика проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных композитов обеспечивает требуемую точность

прогностического моделирования. Указано, что в условиях отсутствия доступа на параллельные вычислительные системы петафлопсного класса созданная программная реализация могла быть проверена только на тестовых случаях с последующей экстраполяцией результатов к параметрам экспериментально исследуемых композитов. Этот анализ показал применимость развитой методики и ее программной реализации. Указано, что ее эффективное использование для предсказания свойств полимерных композитов неразрывно связано с грядущим появлением параллельных вычислительных системы экзафлопсного класса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Краткие выводы по результатам НИР или отдельных ее этапов.

Выполнена разработка программной реализации многоуровневой модели полимерных нанокомпозитов, основанной на атомистическом описании материала и предназначеннной для расчета характеристик процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов с использованием суперкомпьютерных сверхмасштабируемых вычислений.

Разработана программная реализация и проведены тесты на соответствие программе и методике экспериментальных исследований.

На основе результатов расчетов проведен анализ механизмов деформирования и анализ эффективности предложенной методики.

Выполнена разработка программной реализации многоуровневой модели полимерных нанокомпозитов, основанной на атомистическом описании материала и предназначеннной для расчета характеристик процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов с использованием суперкомпьютерных сверхмасштабируемых вычислений.

Разработана программная реализация и проведены тесты на соответствие программе и методике экспериментальных исследований.

На основе результатов расчетов проведен анализ механизмов деформирования и анализ эффективности предложенной методики.

Разработан проект ТЗ на проведение прикладной НИР. Предлагаемые прикладные НИР находятся в полном соответствии с перечнем задач, требующих приложения суперЭВМ в части создания наноматериалов с заранее заданными механическими и электромагнитными свойствами. Проведение прикладных НИР обеспечит переход разработок на этап ОТР непосредственно после их завершения.

В рамках настоящей НИР создан научно-технический задел в части разработки модели многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих

асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластинчатые включения), и ее программной реализации. Разработка методики применения возможностей суперкомпьютеров для многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов находится в соответствии с основной задачей ТП «Национальная Суперкомпьютерная Технологическая Платформа» в части обеспечения субъектов процесса модернизации экономики эффективным, действенным, в точности отвечающим их потребностям инструментом повышения конкурентоспособности продукции, создания новых продуктов и услуг.

Оценка полноты решений поставленных задач.

Оценка полноты решения задач и достижения поставленных целей НИР проводится на основании п. 5.1 ТЗ ГК, устанавливающего основные требования к выполняемым работам. Все задачи, заявленные и согласованные в Государственном контракте, Техническом задании к НИР и Календарном плане проведения НИР, выполнены полностью, в требуемые сроки, и с обеспечением инициативного перспективного задела по разрабатываемой тематике.

Разработка рекомендаций и исходных данных по конкретному использованию результатов НИР.

Разработанная программная реализация методики многоуровневого моделирования полимерных нанокомпозитов позволяет производить расчет характеристик процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов. Основная задача данного комплекса - осуществление диагностики поведения и структуры нанокомпозитов в процессе деформирования на пространственных и временных масштабах, труднодоступных экспериментальным методам. В первую очередь это относится к вопросам изучения эволюции микроструктуры и дислокационной структуры нанокомпозитов под действием напряжений.

Разработанная методика также позволяет с хорошей точностью проводить оценку прочностных свойств нанокомпозитов, таких как предел текучести и модуль упругости, в случае отсутствия подходящей экспериментальной базы или в случае нецелесообразности проведения затратных экспериментов в данной области.

Результаты оценки технико-экономической эффективности внедрения.

Разрабатываемый программный комплекс для многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (короткие волокна, многостенные трубы или пластинчатые включения) будет использоваться научно-исследовательскими организациями и фирмами-производителями научноемкой продукции наноиндустрии. Проведенные оценки показывают, что внедрение комплекта программного обеспечения позволит экономить до 70% затрат при разработке новой продукции (изделия и технологии). В целом, оценки говорят, что емкость рынка позволяет рассчитывать на полную окупаемость проекта в ближайшие 3 года.

Результаты оценки научно-технического уровня выполненной НИР в сравнении с лучшими достижениями в данной области».

Оценка эффективности полученных результатов в сравнении с современным научно-техническим уровнем показала, что результаты настоящей НИР соответствуют мировому уровню в области моделирования полимерных нанокомпозитов и опережают его по некоторым параметрам. Сделан вывод о том, что применение разработанных методики и программной реализации позволит в ближайшее время получить целый ряд принципиально новых результатов в области изучения свойств полимерных композитов.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. G. Allegra et al. Theories and simulations of polymer-based nanocomposites. From chain statistics to reinforcement // Prog. Polymer. Sci. 2008. V. 33. P. 683-731.
2. R. Toth et al. Size and shape matter! A multiscale molecular simulation approach to polymer nanocomposites // J. Mat. Chem. 2012. V. 22. P. 5398.
3. S. Yang et al. Multiscale modeling of size-dependent elastic properties of carbon nanotube/polymer nanocomposites with interfacial imperfections // Polymer. 2012. V. 53. P. 623.
4. A. Morozinis et al. Atomistic Simulations of Cavitation in a Model Polyethylene Network // Polymer Science, Ser. C. 2013. V. 55. P. 212.
5. <http://www.hpc-platform.ru/tiki-index.php?page=basic-docs&structure=%D0%9A%D0%B0%D1%80%D1%82%D0%B0+%D1%81%D0%B0%D0%B9%D1%82%D0%B0>
6. Бартенев Г.М., Лаврентьев В.В. Трение и износ полимеров Ленинград, Химия, 1972. - 240 с.
7. D.I. Chukov, A.A. Stepashkin, M.V. Gorshenkov, V.V. Tcherdyntsev, S.D. Kaloshkin. Surface modification of carbon fibers and its effect on the fiber-matrix interaction of UHMWPE based composites // Journal of Alloys and Compounds. In Press, Corrected Proof, Available online 16 November 2012 <http://dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2012.11.048>.
8. A.A. Stepashkin, D.I. Chukov, M.V. Gorshenkov, V.V. Tcherdyntsev, S.D. Kaloshkin. Electron microscopy investigation of interface between carbon fiber and ultra high molecular weight polyethylene // Journal of Alloys and Compounds. In Press, Corrected Proof, Available online 20 December 2012 <http://dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2012.12.045>.
9. Zoo Y. S., An J. W., Lim D. P., Lim D. S. Effect of carbon addition on tribological behavior of UHMWPE // Tribology Letters. – 2004. – V. 16. - №. 4. – P. 305- 309.

10. Meng H., Sui G. X., Xie G. Y., Yang R. Friction and wear behavior of carbon nanotubes reinforced polyamide 6 composites under dry sliding and water lubricated condition // Composites Science and Technologi. – 2009. – V. 69. – P. 606-611.

11. Zhang L. C., Zarudi I., Xiao K. Q. Novel behavior of friction and wear of epoxy composites reinforced by carbon nonatubes // Wear. – 2006. – V. 261. – P. 806-811.

12. Johnson B. B., Santare M. H., Novothy J. E., Advani S. G. Wear behavior of carbon nanotube/high density polyethylene composites // Mechanics of materials. – 2009. – V. 41. – P. 1108-1115.

13. Полимерные композиционные материалы: Научное издание/ Баженов С. Л., Берлин А. А., Кульков А. А., Ошмян В. Г. – Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2010. – 352 с.

14. Композиционные материалы (справочник) // под ред. Д.М. Карпинosa – Киев: Наукова думка, 1985. – стр. 57-62

15. Чердынцев В.В., Калошкин С.Д., Сударчиков В.А., Дорофеев А.А., Данилов В.Д., Мочкина И.В., Юрьева Н.В. Свойства механоактивированного композита на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена, наполненного бронзовой пудрой // Материаловедение. 2008. № 11. С. 20 – 25.

ПРИЛОЖЕНИЕ Г
Программная документация

УТВЕРЖДЕНО

643.02066500.40530-01 31 01 -ЛУ

ЭО «POLYCOMP». Описание применения

Описание применения

643.02066500.40530-01 31 01

Листов 15

Инв. № подл.	Подпись и дата	Взам. инв. №	Инв. № дубл.	Подпись и дата

2013

АННОТАЦИЯ

В данном эксплуатационном документе приведено описание применения программной реализации (ПрР) программного комплекса (ПрК) для многоуровневого компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения, а также термических, механических свойств полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

В разделе «Назначение программы» приведено описание ПрР, ее возможности, а также ее основные характеристики и ограничения, накладываемые на область ее применения.

В разделе «Условия применения» указаны условия, необходимые для выполнения ПрР (требования к необходимым для данной ПрР техническим средствам, и другим программам, общие характеристики входной и выходной информации, а также требования и условия организационного, технического и технологического характера).

В разделе «Описание задачи» указаны определения задачи и методы ее решения.

В разделе «Входные и выходные данные» указаны сведения о входных и выходных данных.

Оформление программного документа «Описание применения» произведено по требованиям ЕСПД (ГОСТ 19.502-78).

СОДЕРЖАНИЕ

АННОТАЦИЯ.....	235
СОДЕРЖАНИЕ	236
1 НАЗНАЧЕНИЕ ПРОГРАММЫ.....	237
1.1 Назначение программы	237
1.2 Возможности программы.....	237
1.3 Основные характеристики программы.....	238
1.4 Ограничения, накладываемые на область применения программы.....	239
2 УСЛОВИЯ ПРИМЕНЕНИЯ.....	239
2.1 Требования к техническим (аппаратным) средствам.....	239
2.2 Требования к программным средствам (другим программам).....	239
2.3 Общие характеристики входной информации.....	240
2.4 Общие характеристики выходной информации.....	241
2.5 Требования и условия организационного характера	241
2.6 Требования и условия технического характера.....	241
2.7 Требования и условия технологического характера	241
3 ОПИСАНИЕ ЗАДАЧИ.....	242
3.1 Определение задачи.....	242
3.2 Методы решения задачи.....	243
4 ВХОДНЫЕ И ВЫХОДНЫЕ ДАННЫЕ	245
4.1 Сведения о входных данных.....	245
4.2 Сведения о выходных данных	245
ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ	247

1 НАЗНАЧЕНИЕ ПРОГРАММЫ

1.1 Назначение программы

ПрР предназначена для многоуровневого компьютерного моделирования процессов деформации нанокомпозитных материалов на основе полимеров с различными типами асимметричных включений.

ПрР позволяет осуществлять генерацию структур нанокомпозитных материалов на основе полимеров с различными типами асимметричных включений, в частности с многостенными нанотрубками, короткими волокнами и пластинчатыми включениями.

ПрР позволяет осуществлять проведение расчетов деформации полимерных нанокомпозитов, объединяя молекулярный и мезоуровни.

ПрР позволяет определять параметры микроструктуры и механического поведения нанокомпозитных материалов при высокой степени деформации вплоть до разрушения образца.

ПрР позволяет определять зависимость прочности и предела текучести от состава и структуры полимерных нанокомпозитов, содержащих ассиметричные включения.

1.2 Возможности программы

Разработанная ПрР предназначена для проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов содержащих асимметричные включения.

Программная реализация ПрК для многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения обеспечивает:

1) проведение расчетов полимерных нанокомпозитов, как на вычислительных системах начального уровня, так и на высокопроизводительных вычислительных комплексах;

- 2) проведении многоуровневых вычислений, объединяющих молекулярный и мезоуровни;
- 3) определение зависимостей прочности и предела текучести от состава и структуры полимерных нанокомпозитов содержащих асимметричные включения;
- 4) определение уровня напряжений и сопротивления нагрузке в процессе деформирования полимерных нанокомпозитов содержащих асимметричные включения;
- 5) моделирование процессов деформации, текстурирования, эволюции микроструктуры под действием напряжений в нанокомпозиционных материалах содержащих в качестве упрочняющих элементов волокна, нанотрубки, дискретные частицы различной формы.

1.3 Основные характеристики программы

ПрР позволяет решать широкий класс задач, связанных с изучением деформационного поведения вплоть до разрушения нанокомпозитных материалов на основе полимеров с различными типами асимметричных включений в условиях механического нагружения. В частности, возможно достаточно подробно в динамике описывать механизмы атомного уровня, ответственные за генерацию дефектов структуры, а также их эволюцию. На макроскопическом уровне ПрР позволяет описывать распределение напряжений и деформаций.

В отношении изучения и формирования функциональных свойств нанокомпозитных материалов на основе полимеров с различными типами асимметричных включений ПрР обеспечивает:

- 1) возможность расчета прочностных параметров (модуль упругости, предел упругости, предел текучести)
- 2) расчет уровня напряжений и сопротивления нагрузке в процессе деформирования полимерных нанокомпозитов содержащих асимметричные включения
- 3) графическое представление структуры нанокомпозитных материалов на основе полимеров с различными типами асимметричных включений.

1.4 Ограничения, накладываемые на область применения программы

Функциональные ограничения разработанной ПрР во многом определяются возможностями вычислительных систем, на которых будут проводиться расчеты. Как правило, современные вычислительные комплексы ограничивают расчеты наносекундным временным интервалом и нанометровым пространственным диапазоном при моделировании на микроскопическом (атомном) уровне, и общим количеством частиц порядка миллиона при проведении расчетов на мезо- и макроуровне.

2 УСЛОВИЯ ПРИМЕНЕНИЯ

2.1 Требования к техническим (аппаратным) средствам

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации суперкомпьютерной части:

- 1) Процессоры архитектуры x86-64, не менее 2-х ядер, с тактовой частотой не ниже 3 ГГц.
- 2) Оперативная память не менее 1 Гбайт на 1 ядро.
- 3) Объем свободного дискового пространства не менее 100 Гбайт.

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации локальной части:

- 1) Процессор Intel Pentium или AMD с тактовой частотой не ниже 2 ГГц.
- 2) Оперативная память не менее 1 Гбайт.
- 3) Объем свободного дискового пространства не менее 1 Гбайт.

2.2 Требования к программным средствам (другим программам)

Минимальный состав используемых программных средств для эксплуатации на суперкомпьютере

- 1) Операционная система Linux, например:

- a) Debian GNU/Linux 6.0 или 7.0;
 - б) Red Hat Enterprise Linux 6;
 - в) SUSE Linux Enterprise Server 11.
- 2) Компилятор языка C/C++, например:
- а) GCC версии 4.6.4, или выше;
 - б) Intel C++ Composer XE 2013;
 - в) PGI 2013 версия 13.7 или выше.
- 3) wget – консольная программа для загрузки файлов по сети;
- 4) интерпретатор языка Python версии 2.6.5 и выше;
- 5) GNU Bourne-Again Shell 4 и более поздние версии;
- 6) Архиваторы tar и gzip версии 1.6 или выше;
- 7) Библиотека MPI для запуска параллельной версии программы, например
- а) MPICH версии 1.5 или выше;
 - б) Intel MPI версии 4.1 или выше;
 - в) MVAPICH2 версии 1.9 или выше;
 - г) Open MPI версии 1.7.2 или выше.

Минимальный состав используемых программных средств для эксплуатации на локальном компьютере:

- 1) операционная система Microsoft Windows, GNU Linux или Mac OS X.
- 2) SSH-клиент для доступа к суперкомпьютеру (например, Putty 0.62 или WinSCP 5.1.5 для Microsoft Windows, OpenSSH для GNU Linux и Mac OS X)

2.3 Общие характеристики входной информации

Для многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения входные данные для расчетного ядра вводятся оператором непосредственно в командной строке пользовательского интерфейса. Они включают в себя:

- 1) геометрические параметры модельного образца (размеры расчетной ячейки);
- 2) структурные параметры нановключений (количество, тип, размеры);

- 3) структурные параметры полимерного наполнителя (тип, количество и размеры полимерных нитей);
- 4) параметры проведения расчета (продолжительность расчета, температура, давление);
- 5) параметры процесса деформации (скорость, направление).

Файлы с промежуточными данными, требуемые для обеспечения связи между различными модулями программы, генерируются в автоматическом режиме, не требуя вмешательства оператора.

2.4 Общие характеристики выходной информации

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

2.5 Требования и условия организационного характера

ПрР не требует обеспечения каких либо требований и условий организационного характера.

2.6 Требования и условия технического характера

Для повышения эффективности работы ПрР, работающей в параллельном режиме требуется обеспечение как можно большего объема оперативной памяти и процессоров типа Intel Xeon.

2.7 Требования и условия технологического характера

ПрР не требует обеспечения каких-либо требований и условий технологического характера.

3 ОПИСАНИЕ ЗАДАЧИ

3.1 Определение задачи

Моделирование процессов деформации, текстурирования, эволюции микроструктуры и дислокационной структуры под действием напряжений в нанокомпозитных материалах, содержащих в качестве упрочняющих элементов волокна, нанотрубки, дискретные частицы различной формы.

При разработке новых нанокомпозитных материалов, а так же для оптимизации структуры и свойств существующих материалов целесообразно проводить компьютерное моделирование процессов их механического поведения при различных внешних воздействиях. В частности, для полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения необходимо уметь моделировать процессы деформирования, текстурирования, эволюции микроструктуры и дислокационной структуры под действием напряжений.

Определение зависимости прочности и предела текучести от состава и структуры полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

Здесь реализована задача аккумулирования результатов ранее произведенных расчетов и результатов экспериментов для определения свойств (прочность, пластичность) деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения (многостенные нанотрубки, волокна или пластиинчатые включения), путем интенсивной деформации.

Определение уровня напряжений в процессе деформирования полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

Здесь реализована задача аккумулирования результатов ранее произведенных расчетов и результатов экспериментов для определения уровня напряжений в процессе деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих

асимметричные включения (многостенные нанотрубки, волокна или пластинчатые включения), путем интенсивной деформации.

3.2 Методы решения задачи

Моделирование процессов деформации, текстурирования, эволюции микроструктуры и дислокационной структуры под действием напряжений в нанокомпозитных материалах, содержащих в качестве упрочняющих элементов волокна, нанотрубки, дискретные частицы различной формы.

Основу составляют методы классической и огрубленной молекулярной динамики. На низшем по длине и времени уровне используются метод классической молекулярной динамики. Этот метод предполагают наличие дискретной, атомарной структуры вещества. На более высоких мезо-уровнях используются так называемые огрубленные («coarse-grained») модели.

В основе метода молекулярной динамики, наиболее часто используемого для моделирования нанокомпозитов, лежит численное интегрирование классических уравнений движения Ньютона для системы частиц. Траектория движения отдельных атомов рассчитывается на основе эмпирических и полуэмпирических потенциалов взаимодействия. Физические свойства системы рассчитываются по формулам статистической физики, путем усреднения по числу частиц и времени.

В мезо- и макро моделях составные части нанокомпозитов представлены в упрощённой геометрии, межфазные явления не учитываются. Основной идеей метода является объединение нескольких маленьких частиц (групп атомов) в один большой блок (супер-атом) и использование общих силовых постоянных и геометрических параметров, основанных на простых соображениях гибридизации, вместо отдельных силовых постоянных и геометрических параметров, зависящих от конкретной комбинации атомов с учетом особенностей связи, валентных и торсионных углов.

Связь масштабов обеспечивается передачей параметров структуры нанокомпозитного материала между уровнями. Ценность подобного последовательного с физической точки зрения подхода определяется тем, что

основанные на нем многоуровневые модели могут иметь не только описательную, но и прогностическую силу, что чрезвычайно важно для решения задачи о создании материала с заданными свойствами и для разработки его состава *in silico*.

Высокая параллельная эффективность комплекса в случае MPI обеспечивается за счет использования технологии LAMMPS. Применение гибридных технологий на основе CUDA также дает значительный дополнительный выигрыш в производительности

Определение зависимости прочности и предела текучести от состава и структуры полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

Методы классической молекулярной динамики, совмещенные с последующим привлечением огрубленных моделей, позволяют производить исследования микроструктуры нанокомпозитов и с достаточной точностью оценивать их макромасштабные свойства, связанные с прочностью данных материалов и влиянием на нее широкого спектра факторов, включающих в себя аспекты структуры (тип полимера, тип и концентрация нановключений), скорость деформирования, температуру образца.

Определение уровня напряжений в процессе деформирования полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

В ходе компьютерного расчета физические свойства системы, такие как температура, тензор напряжений, рассчитываются по формулам статистической физики, путем усреднения по числу частиц и времени. Эти параметры записываются в специальные лог-файлы на протяжении всего расчета, что позволяет впоследствии проводить последовательный многофакторный анализ всех стадий процесса деформирования.

4 ВХОДНЫЕ И ВЫХОДНЫЕ ДАННЫЕ

4.1 Сведения о входных данных

В качестве геометрических параметров модельного образца выступают следующие величины:

- 1) геометрические размеры расчетной ячейки (в ангстремах);
- 2) среднее значение и дисперсия распределения длин полимерных молекул
- 3) размеры, тип и количество нановключений.

Физико-механические свойства материала должны описываться следующими вещественными величинами:

- 1) плотность в г/см³.

Вид и параметры нагружения моделируемого образца определяются следующими величинами:

- 1) величина конечной деформации в виде вектора (Δx , Δy , Δz), компоненты которого представляют итоговые значения относительного удлинения или сжатия линейных размеров ячейки;
- 2) полное время деформирования в количестве шагов интегрирования (вещественное);
- 3) временной шаг интегрирования в пикосекундах (вещественное).

Частота записи выходных данных расчета определяется следующими величинами типа целое:

- 1) количество временных шагов, через которое будет происходить запись данных для построения диаграммы нагружения (напряжение–деформация);
- 2) количество временных шагов, через которое будет происходить запись состояния модели в графический файл.

4.2 Сведения о выходных данных

Все выходные данные ПрР могут быть условно разбиты на четыре группы:

- 1) состояние модели в заданные моменты времени в виде файла описания молекулярной структуры (в формате cfg или pdb);
- 2) временные зависимости заданных интегральных параметров в виде файла в простом текстовом формате;
- 3) отчет о ходе процесса моделирования в виде файла в простом текстовом формате;

Выходные данные расчетного ядра включают в себя полное описание состояния расчётной системы и интегральные параметры.

Интегральные характеристики системы (температура, кинетическая и потенциальная энергии, внутреннее давление и т.д.) записываются в текстовых файлах как вещественные значения.

К выходным данным можно отнести специальную сигнальную индикацию о качестве решения или сообщения о рекомендуемых значениях переменных для ввода.

Часть промежуточных выходных данных (структуры полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения, сохраняемые в промежуточных data-файлах) может быть использована в качестве входных (необходимых) данных для других последующих задач.

УТВЕРЖДЕНО

643.02066500.40530-01 32 01 -ЛУ

ЭО «POLYCOMP». Руководство системного программиста

643.02066500.40530-01 32 01

Листов 15

2013

АННОТАЦИЯ

В данном эксплуатационном документе приведено руководство системного программиста по настройке и использованию программной реализации (ПрР) программного комплекса (ПрК) для многоуровневого компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

В данном документе, в разделе «Общие сведения о программе» указаны назначение и функции ПрР и сведения о технических и программных средствах, обеспечивающих выполнение данной ПрР, а также требования к персоналу.

В разделе «Структура программы» приведены сведения о структуре ПрР, ее составных частях, о связях между составными частями и о связях с другими программами.

В разделе «Настройка программы» приведено описание действий по настройке ПрР на условия конкретного применения (настройка на состав технических и программных средств, выбор функций и др.).

В разделе «Проверка программы» приведено описание способов проверки, позволяющих дать общее заключение о работоспособности ПрР (контрольные примеры, методы прогона, результаты).

Оформление программного документа «Руководство системного программиста» произведено по требованиям ЕСПД (ГОСТ 19.503-79).

СОДЕРЖАНИЕ

АННОТАЦИЯ.....	250
СОДЕРЖАНИЕ	Ошибка! Закладка не определена.
1 Общие сведения о программе.....	Ошибка! Закладка не определена.
1.1 Назначение и функции программы.....	Ошибка! Закладка не определена.
1.2 Минимальный состав технических средств	Ошибка! Закладка не определена.
1.3 Минимальный состав программных средств.....	Ошибка! Закладка не определена.
1.4 Требования к персоналу(системному программисту)	Ошибка! Закладка не определена.
2 Структура программы.....	Ошибка! Закладка не определена.
3 Настройка программы.....	Ошибка! Закладка не определена.
3.1 Настройка на состав технических средств ..	Ошибка! Закладка не определена.
3.2 Настройка на состав программных средств	Ошибка! Закладка не определена.
3.3 Запуск программы.....	Ошибка! Закладка не определена.
4 Проверка программы	Ошибка! Закладка не определена.
4.1 Описание способов проверки	Ошибка! Закладка не определена.
4.2 Методы прогона	Ошибка! Закладка не определена.
4.2.1 Проверка работоспособности базовой функциональности программы и генератора начальных структур	Ошибка! Закладка не определена.
4.2.2 Проверка работоспособности модели по выводу модельной системы на равновесие при заданной температуре	Ошибка! Закладка не определена.
4.2.3 Проверка работоспособности модуля проведения расчета деформации структур нанокомпозитов	Ошибка! Закладка не определена.
5 Сообщения системному программисту	260
ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ	Ошибка! Закладка не определена.

1.Общие сведения о программе

1.1 Назначение и функции программы

Разрабатываемая ПрР предназначена для проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов содержащих асимметричные включения.

ПрР ПрК для многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения обеспечивает:

- 1) проведение расчетов полимерных нанокомпозитов, как на вычислительных системах начального уровня, так и на высокопроизводительных вычислительных комплексах;
- 2) проведении многоуровневых вычислений, объединяющих молекулярный и мезоуровни;
- 3) определение зависимостей прочности и предела текучести от состава и структуры полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения;
- 4) определение уровня напряжений и сопротивления нагрузке в процессе деформирования полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения;
- 5) моделирование процессов деформации, текстурирования, эволюции микроструктуры под действием напряжений в нанокомпозиционных материалах содержащих в качестве упрочняющих элементов волокна, нанотрубки, дискретные частицы различной формы.

1.2 Минимальный состав технических средств

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации суперкомпьютерной части:

- 1) Процессоры архитектуры x86-64, не менее 2-х ядер, с тактовой частотой не ниже 3 ГГц;
- 2) Оперативная память не менее 1 Гбайт на 1 ядро;
- 3) Объем свободного дискового пространства не менее 100 Гбайт.

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации локальной части:

- 1) Процессор Intel Pentium или AMD с тактовой частотой не ниже 2 ГГц;
- 2) Оперативная память не менее 1 Гбайт;
- 3) Объем свободного дискового пространства не менее 1 Гбайт.

1.3 Минимальный состав программных средств

Минимальный состав используемых программных средств для эксплуатации на суперкомпьютере

Операционная система Linux, например:

Debian GNU/Linux 6.0 или 7.0;
Red Hat Enterprise Linux 6;
SUSE Linux Enterprise Server 11.

Компилятор языка C/C++, например:

GCC версии 4.6.4, или выше;
Intel C++ Composer XE 2013;
PGI 2013 версия 13.7 или выше.

WGET – консольная программа для загрузки файлов по сети.

GNU Bourne-Again Shell 4 и более поздние версии

Архиваторы tar и gzip версии 1.6 или выше

Библиотека MPI для запуска параллельной версии программы, например:

MPICH версии 1.5 или выше;
Intel MPI версии 4.1 или выше;
MVAPICH2 версии 1.9 или выше;
Open MPI версии 1.7.2 или выше.

Минимальный состав используемых программных средств для эксплуатации на локальном компьютере:

- 1) операционная система Microsoft Windows, GNU Linux или Mac OS X;
- 2) SSH-клиент для доступа к суперкомпьютеру (например, Putty 0.62 или WinSCP 5.1.5 для Microsoft Windows, OpenSSH для GNU Linux и Mac OS X).

1.4 Требования к персоналу (системному программисту)

Системный программист должен иметь высшее техническое образование и обладать навыками администрирования операционных систем класса Unix/Linux.

В перечень задач, выполняемых системным программистом, должны входить:

- а) Задача поддержания работоспособности технических средств, задействованных в работе программы.
- б) Задача поддержания работоспособности программных средств, задействованных в работе программы, включая инсталляцию, настройку и восстановление системного программного обеспечения.
- в) Задача установки и поддержания работоспособности составляющих программного модуля.

2 Структура программы

На вычислительном кластере в директории программы размещаются следующие модули:

Модуль пользовательского интерфейса (ПМПИ).

Модуль генерации первичных структур полимерных матриц с нановключениями, обеспечивающий генерацию нанотрубок, нановолокон, пластинчатых включений (ПМГПСПМ).

Модуль вывода модельной системы на равновесие при заданной температуре (ПМВыМС).

Модуль проведения расчета деформации структур нанокомпозитов (ПМПРД).

Модуль взаимодействия с пакетом библиотек LAMMPS (ПМВзПБ).

3 Настройка программы

3.1 Настройка на состав технических средств

Для функционирования ПрР требуется произвести стандартную настройку технического оснащения и сетевого оборудования.

3.2 Настройка на состав программных средств

Программа требует предварительной настройки LAMMPS. Для этого на удаленном суперкомпьютере требуется произвести следующие действия:

Скачать программный продукт LAMMPS

```
$ wget http://lammps.sandia.gov/tars/lammps.tar.gz
```

Разархивировать архив командой

```
$ tar -xzvf lammps.tar.gz
```

Перейти в поддиректорию src и выполнить команду make:

```
$ cd lammps/src
```

```
$ make yes-manybody
```

Настроить Makefile для установки LAMMPS. Для этого перейти в поддиректории MAKE выбрать наиболее подходящий Makefile и создать на его основе файл Makefile.foo (`$ cp Makefile.* Makefile.foo`) и открыть его для редактирования

Присвоить переменной CC имя используемого компилятора, правильно установить флаги компилятора CCFLAGS.

Присвоить переменной LINK имя используемого компоновщика, правильно установить флаги компоновщика LINKFLAGS.

Если выполнение кода на конкретной машине требует дополнительных библиотек, то их надо перечислить как часть переменной LIB.

Присвоить переменной MPI_INC путь к файлу mpi.h, переменной MPI_PATH путь к библиотекам MPI, переменной MPI_LIB названия используемых библиотек MPI

В директории src выполнить команду \$make foo. В случае успеха появится файл lmp_foo

Специальная настройка программных средств на локальном компьютере не требуется.

3.3. Запуск программы

Для запуска ПрР открыть командную строку и в директории программы запустить оболочку пользовательского интерфейса командой

`python Polymer.py`

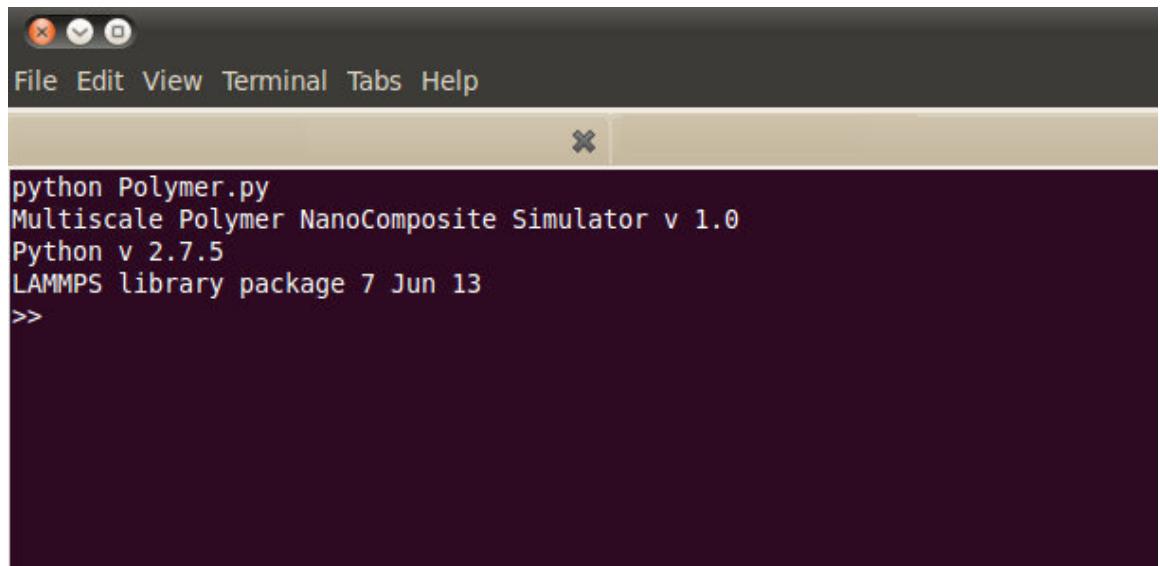


Рисунок 1 – Приветствие пользовательского интерфейса программы.

На рисунке 1 представлено приветствие пользовательского интерфейса программы, отображающее версию программы, версию интерпретатора языка Python, а также версию библиотек LAMMPS.

4 Проверка программы

4.1 Описание способов проверки

Проверка работоспособности ПрР осуществляется прогоном ряда тестовых расчетов, входящих в состав программной реализации.

4.2 Методы проверки работоспособности

4.2.1 Проверка работоспособности базовой функциональности программы и генератора начальных структур

4.2.1.1. Открыть командную строку

4.2.1.2. В директории программы запустить оболочку командой
`python Polymer.py`

Для запуска скрипта-генератора ввести команду:

`start generation`

Для запуска скрипта со значениями по умолчанию ввести команду:

`start generation default`

При этом, минуя пункты 4.2.1.3-4.2.1.4, на экран выводятся значения параметров "по умолчанию".

4.2.1.3. После соответствующего приглашения командной строки, ввести имя задачи, состоящее из букв латинского алфавита и цифр и нажать "Enter".

4.2.1.4. После соответствующих приглашений командной строки, ввести следующие параметры:

- 1) продольные размеры расчетной ячейки;
- 2) тип нановключений;
- 3) размеры и количество нановключений;
- 4) среднее значение и дисперсия распределения длин полимерных молекул;
- 5) плотность нанокомпозита,

завершая ввод каждого из параметров нажатием "Enter". По окончании ввода и проверки данных на корректность производится автоматический запуск скрипта,

генерирующего исходную структуру и соответствующий ей data-файл.

4.2.1.5. После завершения работы скрипта-генератора удостовериться в наличии файла `_имя_задачи_.data` в рабочем каталоге. Также в рабочем каталоге должны присутствовать dump-файлы с именами `_имя_задачи_.cfg` и `_имя_задачи_.pdb`, позволяющие построить визуальную трехмерную модель полимерной матрицы с нановключениями. Для большего удобства создаются дополнительные dump-файлы, описывающие структуры полимера и включений раздельно.

4.2.1.6. Для визуализации трехмерных моделей структур из соответствующего cfg или pdb-файла ввести команду

```
visualize _имя_файла_
```

Для этого в системе должна обладать предустановленной оконной системой X Window System.

4.2.1.7. Убедиться в соответствии расчетной модели заданным параметрам (размерам ячейки, количеству нановключений и т.д.)

4.2.2. Проверка работоспособности модели по выводу модельной системы на равновесие при заданной температуре

4.2.2.1. После проведения процедуры, описанной в пп. 4.2.1.1-4.2.1.7 ввести команду

```
start relaxation
```

Для запуска скрипта со значениями по умолчанию ввести команду:

```
start relaxation default
```

4.2.2.2. После соответствующих приглашений командной строки, ввести следующие параметры:

- 1) путь расположения data-файла, полученного согласно пп. 4.2.1.1-4.2.1.7;
- 2) типы межчастичных потенциалов;
- 3) время расчета;
- 4) равновесные значения температуры и давления;

5) частота генерации промежуточных графических файлов, завершая ввод каждого из параметров нажатием "Enter". По окончании ввода и проверки данных на корректность производится автоматический запуск скрипта, генерирующего программный файл инструкций на языке описания атомистических моделей MMPNC (Multiscale modelling of Polymer NanoComposites) с именем "in_relax._имя_задачи_".

4.2.2.3. Удостовериться в наличии файла с именем "in_relax._имя_задачи_" в рабочей директории.

4.2.2.4. Запустить расчет релаксации заданной структуры командой:

`mpirun -np X __ придумать имя __ in_relax._имя_задачи_`

X соответствует значению выделенных под задачу ядер процессора.

В зависимости от специфики установленного на вычислительной машине программного обеспечения процедура запуска и постановки в очередь параллельного расчета может существенно различаться. В наиболее общем случае запуск производится с помощью shell-скрипта `mpirun`. Синтаксис и подробное описание команды приведено в официальной документации. Список параметров можно получить, выполнив команду `mpirun -h`.

4.2.2.5. После успешного завершения расчета удостовериться в наличии в папке задачи log-файла "имя_задачи_relax.log", содержащего данные об изменении значений температуры, объема и компонент тензора напряжения в ячейки в ходе расчета.

4.2.3. Проверка работоспособности проведения расчета деформации структур нанокомпозитов

4.2.3.1. Для запуска расчета деформации нанокомпозита после проведения процедуры, описанной в пп. 4.2.2.1-4.2.2.5 в командной строке пользовательского интерфейса ввести команду:

`start deformation`

Для запуска скрипта со значениями по умолчанию ввести команду:

start deformation default

4.2.3.2. После соответствующих приглашений командной строки, пользователем производится интерактивный ввод параметров расчета:

- 1) путь расположения data-файла структуры, выведенной на равновесие;
- 2) время расчета. По умолчанию: 1000000 шагов;
- 3) величина конечной деформации в виде вектора (Δx , Δy , Δz), компоненты которого представляют итоговые значения относительного удлинения или сжатия линейных размеров ячейки. По умолчанию: $\Delta x=1$, $\Delta y=0$, $\Delta z=0$;
- 4) набор дополнительных параметров, вывод которых необходимо обеспечить в log-файл.

4.2.3.3. Генерация скрипта MMPNC

После успешного заполнения параметров расчета запускается скрипт-транслятор. На основе полученных данных генерируется программный файл инструкций на языке описания атомистических моделей MMPNC с именем "in_deform._имя_задачи_".

4.2.3.4. Запуск расчета релаксации заданной структуры осуществляется командой:

```
run -np X relaxation in_deform._имя_задачи_
```

X соответствует значению выделенных под задачу ядер процессора.

4.2.3.5. После успешного завершения расчета удостовериться в наличии в папке задачи log-файла "_имя_задачи_deform.log", содержащего данные об изменении значений температуры, объема и компонент тензора напряжения в ячейки в ходе расчета.

5. Сообщения системному программисту

При проведении установки могут возникать следующие ошибки:

```
$ make[1]: gcc: Command not found
```

Выбран неправильный компилятор. Необходимо изменить значение переменной CC в Makefile.foo

\$ make[1]: *** No rule to make target `angle_charmm.o', needed by `../lmp_foo'. Stop.

Файл Makefile.foo поврежден или содержит недопустимую информацию.

\$ make[1]: *** Can't find 'mpi.h', needed by `../lmp_foo'. Stop.

Неправильно установлены переменные MPI_INC, MPI_LIB, MPI_PATH

\$ make[1]: can't find files with a "*" in their names

На компьютере нет поддержки файлов со * в имени, необходимо использовать gmake вместо make

\$make[1]: identifier "atoll" is undefined'

На компьютере нет поддержки целых чисел формата long long. Необходимо добавить в Makefile.foo опцию -DLAMMPS_LONGLONG_TO_LONG

При запуске могут возникать следующие ошибки, связанные с неправильным компилированием программы:

MPI_LMP_BIGINT and bigint in lmptype.h are not compatible

Размер типа данных bigint MPI не совпадает с размером bigint LAMMPS.

Необходимо изменить настройки компиляции

MPI_LMP_TAGINT and tagint in lmptype.h are not compatible

Размер типа данных tagint MPI не совпадает с размером tagint LAMMPS.

Необходимо изменить настройки компиляции

Bigint setting in lmptype.h is invalid

Ошибка в исходном коде, необходимо обновить версию LAMMPS

Size of bigint is less than size of tagint.

Ошибка в исходном коде, необходимо обновить версию LAMMPS

Bigint setting in lmptype.h is not compatible

Ошибка в исходном коде, необходимо обновить версию LAMMPS Accelerator sharing is not currently supported on system

Установленный ускоритель не поддерживается

УТВЕРЖДЕНО

643.02066500.40530-01 33 01 -ЛУ

ЭО «POLYCOMP». Руководство программиста

643.02066500.40530-01 33 01

Инв. № подл.	Подпись и дата	Взам. инв. №	Инв. № дубл.	Подпись и дата

Листов 12

2013

АННОТАЦИЯ

В данном эксплуатационном документе приведено руководство программиста по настройке и использованию программной реализации (ПрР) программного комплекса (ПрК) для многоуровневого компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

В данном документе, в разделе «Назначение и условия применения программы» указаны назначение и функции ПрР и сведения о технических и программных средствах, обеспечивающих выполнение данной ПрР, а также требования к персоналу.

В разделе «Характеристика программы» приведены сведения о структуре ПрР, ее составных частях.

В разделе «Обращение к программе» приведено описание действий по запуску ПрР.

В данном эксплуатационном документе, в разделе «Входные и выходные данные» приведено описание организации используемой входной и выходной информации.

В разделе «Сообщения» указаны тексты сообщений, выдаваемых программисту в ходе выполнения ПрР.

Оформление программного документа «Руководство программиста» произведено по требованиям ЕСПД (ГОСТ 19.504-79).

СОДЕРЖАНИЕ

АННОТАЦИЯ.....	265
СОДЕРЖАНИЕ	265
1 Назначение и условия применения программы.....	267
1.1 Назначение программы	Ошибка! Закладка не определена. 7
1.2 Функции, выполняемые программой	Ошибка! Закладка не определена. 7
1.3 Условия, необходимые для выполнения программы	Ошибка! Закладка не определена.7
1.3.1 Требования к средствам вычислительной техники (СВТ)	Ошибка! Закладка не определена.7
1.3.2 Требования к составу и параметрам периферийных устройств.	268
1.3.3 Требования к программному обеспечению	268
1.3.4 Требования к персоналу (программисту).....	269
2 Характеристика программы	269
3 Обращение к программе	271
4 Входные и выходные данные.....	271
4.1 Организация используемой входной информации	271
4.2 Организация используемой выходной информации.....	272
5 Сообщения	272
ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ	275

1 Назначение и условия применения программы

1.1 Назначение программы

ПрР предназначена для проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

1.2 Функции, выполняемые программой

Организация программы соответствует следующей структуре:

Модуль пользовательского интерфейса (ПМПИ).

Модуль генерации первичных структур полимерных матриц с нановключениями, обеспечивающий генерацию нанотрубок, нановолокон, пластинчатых включений (ПМГПСПМ).

Модуль вывода модельной системы на равновесие при заданной температуре (ПМВыМС).

Модуль проведения расчета деформации структур нанокомпозитов (ПМПРД).

Модуль взаимодействия с пакетом библиотек LAMMPS (ПМВзПБ).

1.3 Условия, необходимые для выполнения программы

Для работы ПрР не предъявляются специальные технические требования. Требования к необходимому дополнительному программному обеспечению приведены в соответствующем разделе настоящего руководства. Доступ к удаленному суперкомпьютеру должен быть обеспечен через сеть Интернет.

1.3.1 Требования к средствам вычислительной техники (СВТ)

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации суперкомпьютерной части:

- 1) Процессоры архитектуры x86-64, не менее 2-х ядер, с тактовой частотой не ниже 3 ГГц;
- 2) Оперативная память не менее 1 Гбайт на 1 ядро;
- 3) Объем свободного дискового пространства не менее 100 Гбайт;

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации локальной части:

- 1) Процессор Intel Pentium или AMD с тактовой частотой не ниже 2 ГГц;
- 2) Оперативная память не менее 1 Гбайт;
- 3) Объем свободного дискового пространства не менее 1 Гбайт.

1.3.2 Требования к составу и параметрам периферийных устройств.

Требований к составу периферийных устройств для функционирования суперкомпьютерной части не предъявляются.

Состав периферийных устройств для функционирования локальной части программы:

- 1) Стандартная клавиатура 102 клавиши.
- 2) Стандартный манипулятор типа «мышь».
- 3) Монитор SVGA или SXGA и выше.

1.3.3 Требования к программному обеспечению

Минимальный состав используемых программных средств для эксплуатации на суперкомпьютере:

- 1) Операционная система Linux, например:
 - a) Debian GNU/Linux 6.0 или 7.0.
 - б) Red Hat Enterprise Linux 6.
 - в) SUSE Linux Enterprise Server 11.
- 2) Компилятор языка C/C++, например:

- а) GCC версии 4.6.4, или выше
 - б) Intel C++ Composer XE 2013
 - в) PGI 2013 версия 13.7 или выше
- 3) wget – консольная программа для загрузки файлов по сети.
- 4) GNU Bourne-Again Shell 4 и более поздние версии
 - 5) Архиваторы tar и gzip версии 1.6 или выше
 - 6) Библиотека MPI для запуска параллельной версии программы, например
 - а) MPICH версии 1.5 или выше
 - б) Intel MPI версии 4.1 или выше
 - в) MVAPICH2 версии 1.9 или выше
 - г) Open MPI версии 1.7.2 или выше

Минимальный состав используемых программных средств для эксплуатации на локальном компьютере:

- 1) Операционная система Microsoft Windows, GNU Linux или Mac OS X.
- 2) SSH-клиент для доступа к суперкомпьютеру (например, Putty 0.62 или WinSCP 5.1.5 для Microsoft Windows, OpenSSH для GNU Linux и Mac OS X)

1.3.4 Требования к персоналу (программисту)

Программист должен иметь высшее техническое образование и обладать навыками администрирования операционных систем класса Unix/Linux.

2 Характеристика программы

Разработанная ПрР предназначена для проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов содержащих асимметричные включения.

ПрР ПрК для многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения обеспечивает:

- 1) проведение расчетов полимерных нанокомпозитов, как на вычислительных системах начального уровня, так и на высокопроизводительных вычислительных комплексах;
- 2) проведение многоуровневых вычислений, объединяющих молекулярный и мезо уровни;
- 3) определение зависимостей прочности и предела текучести от состава и структуры полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения;
- 4) определение уровня напряжений и сопротивления нагрузке в процессе деформирования полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения;
- 5) моделирование процессов деформации, текстурирования, эволюции микроструктуры под действием напряжений в нанокомпозиционных материалах содержащих в качестве упрочняющих элементов волокна, нанотрубки, дискретные частицы различной формы.

ПрР предусматривает необходимость сопровождения системным программистом.

Основными средствами контроля работоспособности ПрР являются системные инструменты операционной системы Unix/Linux. Отсутствие сообщений о критических ошибках указывает на правильность работы.

3 Обращение к программе

Процедура запуска ПрР требует участия системного программиста и подробно описана в ЭО «POLYCOMP». Руководство системного программиста (643.02066500.40530-01 32 01).

Процедура запуска ПрР описана в документе ЭО «POLYCOMP». Руководство оператора (643.02066500.40530-01 34 01).

Отдельные модули программы запускаются непосредственно из командной строки пользовательского интерфейса и не требуют дополнительного участия системного программиста. Процедура их запуска описана в документе ЭО «POLYCOMP». Руководство оператора (643.02066500.40530-01 34 01).

Программа может завершаться либо по получению соответствующих сигналов из консоли операционной системы, отправляемой системным программистом, либо при возникновении системной или аппаратной ошибки (аварийное завершение). В случае аппаратного или системного сбоя, необходимо произвести перезапуск процессов ПК.

4 Входные и выходные данные

4.1 Организация используемой входной информации

Входные данные формируются путем ручного ввода информации в командной строке пользовательского интерфейса и поступают в программу на протяжении всего времени выполнения.

Полученные данные, сохраняются в log-файлы программы и перенаправляются для дальнейшей обработки в соответствующий модуль расчета. Формат данных, передаваемых в модуль, зависит от его типа. Это может быть как скрипт MMPNC (Multiscale modelling of Polymer NanoComposites) или data-файл с информацией о пространственной структуре нанокомпозита, так и набор численных значений, задаваемых оператором.

4.2 Организация используемой выходной информации

Результаты выполнения расчетов из программных модулей сохраняются непосредственно в директории текущей задачи. В зависимости от типа, это могут быть dump-файлы в форматах cfg и pdb, позволяющие построить визуальную трехмерную модель полимерной матрицы с нановключениями или log-файлы, содержащие данные об изменении основных параметров модели: значений температуры, объема и компонент тензора напряжения в ячейки в ходе расчета

Более детальная информация, касающаяся форматов обмена данными для отдельных модулей, представлена в документах «Описание программы» для соответствующих модулей программы.

5 Сообщения

В процессе работы программы оператор может получать следующие типы сообщений: сообщения об ошибках (ERROR) или предупреждения о событиях (WARNING) при работе программы. Сообщения появляются в виде текста в log-файле или на экране.

ERROR: All masses are not set

Масса атомов задана неправильно

ERROR: All pair coeffs are not set

Не установлены коэффициенты парного взаимодействия

ERROR: Angle atoms %d %d %d missing on proc %d at step %ld

Потерян атом на данном процессоре. Необходимо изменить параметры и перезапустить расчет

ERROR: Angle coeffs are not set

Неправильно заданы коэффициенты углов

ERROR: Bonds assigned incorrectly

Неправильно задана топология связей

ERROR: Bonds defined but no bond types

Неправильно заданы типы связей

ERROR: Both sides of boundary must be periodic

Неправильно заданы периодические граничные условия

ERROR: Cannot open * potential file %s

Неправильно задано имя файла с потенциалом взаимодействия

ERROR: Cannot open input script %s

Невозможно открыть файл с входным скриптом

ERROR: Cannot open log.lammps

Невозможно открыть файл стандартный лог-файл. Необходимо проверить права на запись в текущей директории.

ERROR: Cannot open logfile

Невозможно открыть файл лог-файл, заданный из командной строки. Необходимо проверить права на запись в текущей директории.

ERROR: Cannot open logfile %s

Невозможно открыть файл лог-файл, заданный во входном скрипте. Необходимо проверить права на запись в текущей директории.

ERROR: Illegal ... command

Неправильная команда во входном скрипте. Необходимо проверить файл на наличие ошибок.

ERROR: Incorrect args for angle coefficients

Неправильные данные для угловых коэффициентов. Проверьте входные файлы.

ERROR: Incorrect args for bond coefficients

Неправильные данные для коэффициентов связей. Проверьте входные файлы.

ERROR: Incorrect args for pair coefficients

Неправильные данные для парных коэффициентов. Проверьте входные файлы.

ERROR: Incorrect args in pair_style command

Неправильные аргументы в команде pair_style. Проверьте входные файлы.

ERROR: Incorrect atom format in data file

Число значений в строке файла данных не совпадает с выбранным способом описания атомов. Проверьте входные файлы.

ERROR: Invalid atom ID in Angles section of data file

Номер атома должен быть положительным целым числом и лежать в диапазоне допустимых значений

ERROR: Invalid atom ID in Atoms section of data file

Номер атома должен быть положительным целым числом и лежать в диапазоне допустимых значений

ERROR: Invalid atom ID in Bodies section of data file

Номер атома должен быть положительным целым числом и лежать в диапазоне допустимых значений

ERROR: Invalid atom ID in Bonds section of data file

Номер атома должен быть положительным целым числом и лежать в диапазоне допустимых значений

ERROR: Invalid atom ID in Velocities section of data file

Номер атома должен быть положительным целым числом и лежать в диапазоне допустимых значений

УТВЕРЖДЕНО

643.02066500.40530-01 34 01 -ЛУ

ЭО «POLYCOMP». Руководство оператора

643.02066500.40530-01 34 01

Инв. № подл.	Подпись и дата	Взам. инв. №	Инв. № дубл.	Подпись и дата

Листов 16

2013

АННОТАЦИЯ

В данном программном документе приведено руководство оператора по применению и эксплуатации программной реализации (ПрР) программного комплекса (ПрК) для проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов содержащих асимметричные включения. В разделе «Назначение программы» указаны сведения о назначении ПрР и информация, достаточная для понимания функций программы и его эксплуатации.

В разделе «Условия выполнения программы» указаны условия, необходимые для выполнения ПрР (минимальный состав аппаратных и программных средств и т.п.).

В разделе «Выполнение программы» указана последовательность действий оператора, обеспечивающих загрузку, запуск, выполнение и завершение программы, приведено описание функций, формата и возможных вариантов команд, с помощью которых оператор осуществляет загрузку и управляет выполнением программы, а также ответы программы на эти команды.

В разделе «Сообщения оператору» приведены тексты сообщений, выдаваемых в ходе выполнения ПрР, описание их содержания и соответствующие действия оператора (действия оператора в случае сбоя, возможности повторного запуска программы и т.п.).

Оформление программного документа «Руководство оператора» произведено по требованиям ЕСПД (ГОСТ 19.505-79).

СОДЕРЖАНИЕ

АННОТАЦИЯ.....	278
СОДЕРЖАНИЕ	279
1 НАЗНАЧЕНИЕ ПРОГРАММЫ.....	280
1.1 Функциональное назначение программы.....	280
1.2 Эксплуатационное назначение программы.....	280
1.3 Функциональный состав программы.....	281
2 УСЛОВИЯ ВЫПОЛНЕНИЯ ПРОГРАММЫ Ошибка! Закладка не определена.	
2.1 Минимальный состав аппаратных средств . Ошибка! Закладка не определена.	
2.2 Минимальный состав программных средств.....	282
2.3 Требования к персоналу (пользователю) Ошибка! Закладка не определена.	
3 ВЫПОЛНЕНИЕ ПРОГРАММЫ.....	282
3.1 Загрузка и запуск программы	282
3.2 Выполнение программы..... Ошибка! Закладка не определена.	
3.2.1 Модуль для генерации исходных структур нанокомпозитов	Ошибка!
3.2.2 Модуль вывода модельной системы на равновесие при заданной	
температуре	286
3.2.3 Модуль проведения расчета деформации структур нанокомпозитов.....	287
3.3 Завершение работы	289
СООБЩЕНИЯ ОПЕРАТОРУ..... Ошибка! Закладка не определена. 0	
ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ	292

1 НАЗНАЧЕНИЕ ПРОГРАММЫ

1.1 Функциональное назначение программы

Разрабатываемая ПрР предназначена для проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов содержащих асимметричные включения. Программная реализация (ПрР) программного комплекса (ПрК) многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения обеспечивает:

- 1) проведение расчетов полимерных нанокомпозитов, как на вычислительных системах начального уровня, так и на высокопроизводительных вычислительных комплексах;
- 2) проведении многоуровневых вычислений, объединяющих молекулярный и мезоуровни;
- 3) определение зависимостей прочности и предела текучести от состава и структуры полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения;
- 4) определение уровня напряжений и сопротивления нагрузке в процессе деформирования полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения;
- 5) моделирование процессов деформации, текстурирования, эволюции микроструктуры под действием напряжений в нанокомпозиционных материалах содержащих в качестве упрочняющих элементов волокна, нанотрубки, дискретные частицы различной формы.

1.2 Эксплуатационное назначение программы

Эксплуатационное назначение состоит в:

- 1) проведении многоуровневых вычислений, объединяющих молекулярный и

- мезоуровни;
- 2) определении зависимостей прочности и предела текучести от состава и структуры полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения;
- 3) определении уровня напряжений и сопротивления нагрузке в процессе деформирования полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения;
- 4) моделировании процессов деформации, текстурирования, эволюции микроструктуры под действием напряжений в нанокомпозиционных материалах содержащих в качестве упрочняющих элементов волокна, нанотрубки, дискретные частицы различной формы.

1.3 Функциональный состав программы

На вычислительном кластере в директории программы размещаются следующие модули:

Модуль пользователяского интерфейса (ПМПИ).

Модуль генерации первичных структур полимерных матриц с нановключениями, обеспечивающий генерацию нанотрубок, нановолокон, пластинчатых включений (ПМГПСПМ).

Модуль вывода модельной системы на равновесие при заданной температуре (ПМВыМС).

Модуль проведения расчета деформации структур нанокомпозитов (ПМПРД).

Модуль взаимодействия с пакетом библиотек LAMMPS (ПМВзПБ).

2 УСЛОВИЯ ВЫПОЛНЕНИЯ ПРОГРАММЫ

2.1 Минимальный состав аппаратных средств:

- 1) Процессор Intel Pentium или AMD с тактовой частотой не ниже 2 ГГц.
- 2) Оперативная память не менее 1 Гбайт.
- 3) Объем свободного дискового пространства не менее 1 Гбайт.

4) Технические средства для выхода в Интернет на скорости от 1Мбит/с.

2.2 Минимальный состав программных средств

Минимальный состав программных средств, необходимых для работы программы:

- 1) Операционная система Microsoft Windows, GNU Linux или Mac OS X.
- 2) SSH-клиент для доступа к суперкомпьютеру (например, Putty 0.62 или WinSCP 5.1.5 для Microsoft Windows, OpenSSH для GNU Linux и Mac OS X)

2.3 Требования к персоналу (пользователю)

Пользователь должен обладать знаниями в области физики твердого тела, физики материаловедения, обладать навыками работы на суперкомпьютерах, иметь соответствующую квалификацию не ниже бакалавра.

3 ВЫПОЛНЕНИЕ ПРОГРАММЫ

3.1 Загрузка и запуск программы

На вычислительном кластере в директории программного модуля размещаются следующие модули:

Модуль пользовательского интерфейса (ПМПИ).

Модуль генерации первичных структур полимерных матриц с нановключениями, обеспечивающий генерацию нанотрубок, нановолокон, пластинчатых включений (ПМГПСПМ).

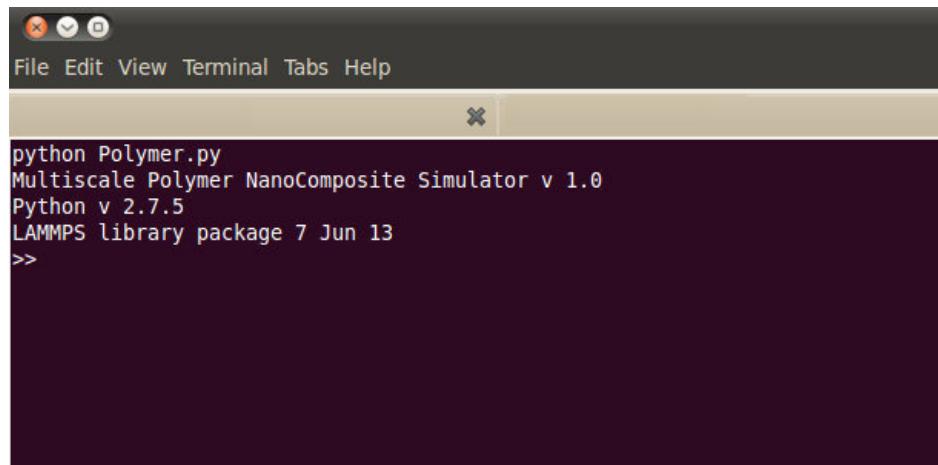
Модуль вывода модельной системы на равновесие при заданной температуре (ПМВыМС).

Модуль проведения расчета деформации структур нанокомпозитов (ПМПРД).

Модуль взаимодействия с пакетом библиотек LAMMPS (ПМВзПБ).

Для запуска программы открыть командную строку и в директории программы запустить оболочку пользовательского интерфейса командой

```
python Polymer.py
```



```
python Polymer.py
Multiscale Polymer NanoComposite Simulator v 1.0
Python v 2.7.5
LAMMPS library package 7 Jun 13
>>
```

Рисунок 1 – Приветствие пользовательского интерфейса программы.

На рисунке 1 представлено приветствие пользовательского интерфейса программы, отображающее версию программы, версию интерпретатора языка Python, а также версию библиотек LAMMPS.

3.2 Выполнение программы

3.2.1 Генерация исходных структур нанокомпозитов

3.2.1.1. Для запуска скрипта-генератора в пользовательском интерфейсе необходимо вести команду:

```
start generation
```

3.2.1.2 Для запуска скрипта со значениями по умолчанию ввести команду:

```
start generation default
```

При этом, минуя пункты 3.2.1.3-3.2.1.4, на экран выводятся значения параметров "по умолчанию".

3.2.1.3. После соответствующего приглашения командной строки пользовательского интерфейса, необходимо ввести имя задачи, состоящее из букв латинского алфавита и/или цифр и нажать "Enter".

3.2.1.4. Затем, после соответствующих приглашений командной строки пользовательского интерфейса, вводятся следующие параметры:

- 1) продольные размеры расчетной ячейки. По умолчанию: 200x200x200 Å.
- 2) тип нановключений (по умолчанию нанотрубки)
- 3) размеры и количество нановключений. По умолчанию: 10 шт. длиной 100

Å.

4) среднее значение и дисперсия распределения длин полимерных молекул. По умолчанию: 5000 мономеров каждая.

- 5) плотность нанокомпозита. По умолчанию: 0.8 г/см³

Ввод каждого из параметров завершается нажатием "Enter". По окончании ввода и проверки данных на корректность производится автоматический запуск скрипта, генерирующего исходную структуру и соответствующий ей data-файл.

3.2.1.5. После завершения работы скрипта-генератора удостовериться в наличии файла _имя_задачи_.data в рабочем каталоге. Также в рабочем каталоге должны присутствовать dump-файлы с именами _имя_задачи_.cfg и _имя_задачи_.pdb, позволяющие построить визуальную трехмерную модель полимерной матрицы с нановключениями. Для большего удобства создаются дополнительные dump-файлы, описывающие структуры полимера и включений раздельно.

3.2.1.6. Для визуализации трехмерных моделей структур из соответствующего cfg или pdb-файла ввести команду

visualize _имя_файла_

Для этого в системе должна обладать предустановленной оконной системой X Window System.

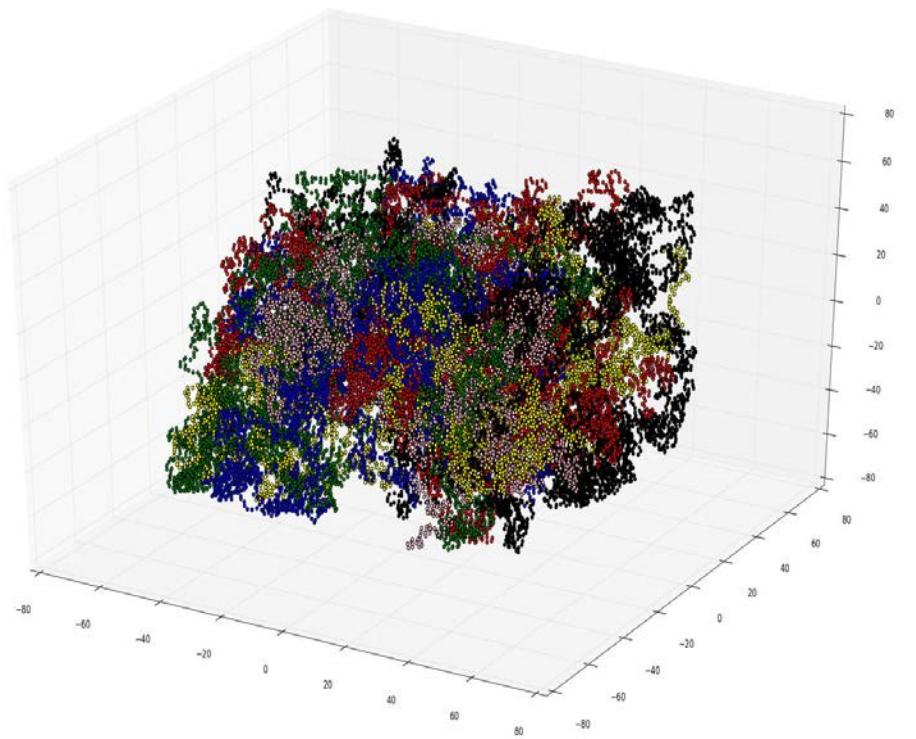


Рисунок 2 – Пример окна визуализации полимерной структуры без нановключений

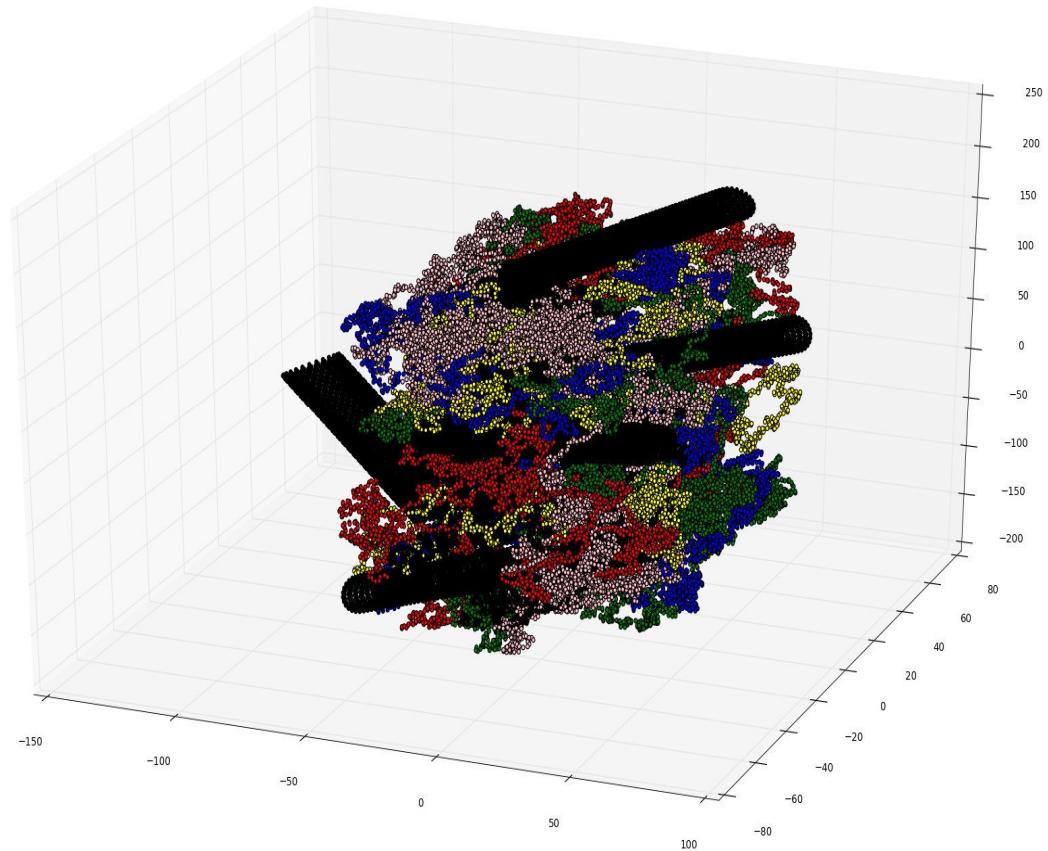


Рисунок 3 – Пример окна визуализации полимерной структуры с хаотически расположенными многостенными нанотрубками в качестве нановключений

На рисунке 2 и 3 представлены примеры визуализации полимерной структуры с нановключениями и без. Цветом обозначены различные молекулы полимерных цепей. Черные цилиндры соответствуют нанотрубкам.

3.2.2 Вывод модельной системы на равновесие при заданной температуре

3.2.2.1. Для запуска вывода модельной системы на равновесие после проведения процедуры, описанной в пп. 3.2.1.1-3.2.1.7 в командной строке пользовательского интерфейса ввести команду

`start relaxation`

Для запуска скрипта со значениями по умолчанию ввести команду:

`start relaxation default`

3.2.2.2 После соответствующих приглашений командной строки, оператором вводятся следующие параметры:

- 1) путь расположения data-файла, полученного согласно пп. 3.2.1.1-3.2.1.7.
- 2) время расчета. По умолчанию: 1000000 шагов.
- 3) шаг численного интегрирования. По умолчанию: 0.005
- 4) равновесные значения температуры и давления. По умолчанию: T=300 K
 $P=1$ атм.
- 5) частота генерации промежуточных графических файлов. По умолчанию: каждые 10000 шагов.

Ввод каждого из параметров завершается нажатием "Enter". По окончании ввода и проверки данных на корректность производится автоматический запуск модуля, генерирующего программный файл инструкций на языке описания атомистических моделей MMPNC (Multiscale modelling of Polymer NanoComposites) с именем "`in_relax._имя_задачи_`".

3.2.2.3 Удостовериться в наличии файла с именем "`in_relax._имя_задачи_`" в рабочей директории.

3.2.2.4 Запуск расчета релаксации заданной структуры осуществляется командой:

```
run -np X relaxation in_relax_имя_задачи_
```

Х соответствует значению выделенных под задачу ядер процессора.

3.2.2.5 После успешного завершения расчета в папке задачи генерируется log-файл "_имя_задачи_relax.log", содержащий данные об изменении значений температуры, объема и компонент тензора напряжения в ячейки в ходе расчета.

3.2.3 Проведение расчета деформации структур нанокомпозитов

3.2.3.1. Для запуска расчета деформации нанокомпозита после проведения процедуры, описанной в пп. 3.2.2.1-3.2.2.5 в командной строке пользовательского интерфейса ввести команду

```
start deformation
```

Для запуска скрипта со значениями по умолчанию ввести команду:

```
start deformation default
```

3.2.3.2 После соответствующих приглашений командной строки, пользователем производится интерактивный ввод параметров расчета:

1) путь расположения data-файла структуры, выведенной на равновесие

2) время расчета. По умолчанию: 1000000 шагов.

3) величина конечной деформации в виде вектора (Δx , Δy , Δz), компоненты которого представляют итоговые значения относительного удлинения или сжатия линейных размеров ячейки. По умолчанию: $\Delta x=1$, $\Delta y=0$, $\Delta z=0$.

4) набор дополнительных параметров, вывод которых необходимо обеспечить в log-файл

3.2.3.3 Генерация скрипта MMPNC

После успешного заполнения параметров расчета запускается скрипт-транслятор. На основе полученных данных генерируется программный файл инструкций на языке описания атомистических моделей MMPNC с именем "in_deform_имя_задачи_".

3.2.3.4 Запуск расчета релаксации заданной структуры осуществляется командой:

```
run -np X relaxation in_deform_имя_задачи_
```

Х соответствует значению выделенных под задачу ядер процессора.

3.2.3.5. После успешного завершения расчета удостовериться в наличии в папке задачи log-файла "_имя_задачи_deform.log", содержащего данные об изменении значений температуры, объема и компонент тензора напряжения в ячейки в ходе расчета.

Файл "_имя_задачи_deform.log" содержит данные об изменении значений температуры, объема и компонент тензора напряжения в ячейки в ходе расчета. Эти данные позволяют построить зависимости относительного удлинения образца от величины напряжения (рис. 4).

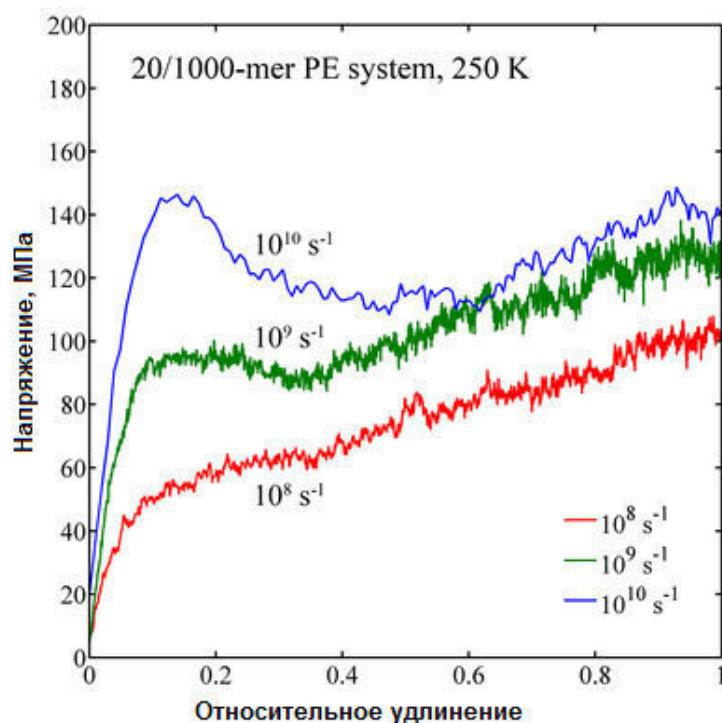


Рисунок 4 – Пример график зависимости относительного удлинения образца от величины напряжения.

Анализ данных, получаемых на данном этапе, позволяет определить степень совпадения значений следующих параметров расчетной модели с экспериментальными данными:

- 1) предел прочности нанокомпозитного материала;

- 2) предел текучести;
- 3) модуль упругости.

3.3 Завершение работы

Для завершения работы программы в командной строке пользовательского интерфейса ввести команду

`exit`

СООБЩЕНИЯ ОПЕРАТОРУ

Вывод специальных сообщений осуществляется в интерактивном режиме в командной строке пользовательского интерфейса. Кроме этого, на каждом этапе выполнения расчета (генерация структур, вывод системы к равновесной температуре, деформация нанокомпозита) сообщения об ошибках заносятся в соответствующие log-файлы. При возникновении нештатных ситуаций генерируются сообщение в формате «<Function> Error», где <Function> имя функции, в которой произошла ошибка, «Error» – текст сообщения. Описание сообщений дано в разделе 5 документа «Руководство программиста».

В случае генерации первичных структур полимерных матриц с нановключениями для оператора генерируются и выводятся следующие сообщения:

«Generation Started. Parameters:<system parameters>» – при запуске процесса генерации начальной структуры, где <system parameters> - список значений параметров структуры, заданных пользователем перед началом генерации;

«<Function> Error», где <Function> имя функции, в которой произошла ошибка, «Error» – текст сообщения;

«_имя_задачи_ Generation Completed» – при успешном завершении задачи.

В случае вывода модельной системы на равновесие при заданной температуре для оператора генерируются и выводятся следующие сообщения:

«Relaxation Started. Parameters:<system parameters>» – при запуске процесса генерации начальной структуры, где <system parameters> - список значений параметров структуры, заданных пользователем перед началом вывода системы на равновесие;

«<Function> Error», где <Function> имя функции, в которой произошла ошибка, «Error» – текст сообщения;

«_имя_задачи_ Relaxation Completed» – при успешном завершении задачи.

В случае проведения расчета деформации структур нанокомпозитов для оператора генерируются и выводятся следующие сообщения:

«Deformation Started. Parameters:<system parameters>» – при запуске процесса генерации начальной структуры, где <system parameters> - список значений параметров структуры, заданных пользователем перед началом расчета деформации;

«<Function> Error», где <Function> имя функции, в которой произошла ошибка, «Error» – текст сообщения;

«_имя_задачи_ Deformation Completed» – при успешном завершении задачи.

УТВЕРЖДЕНО

643.02066500.40530-01 13 01 -ЛУ

**ЭО «POLYCOMP». Описание логической и физической
структурь**

643.02066500.40530-01 13 01

Инв. № подп.	Подпись и дата	Взам. инв. №	Инв. № дубл.	Подпись и дата

Листов 10

2013

АННОТАЦИЯ

В данном программном документе приведено описание структуры программной реализации (ПрР) программного комплекса (ПрК) для многоуровневого компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

Оформление программного документа «Описание логической и физической структуры» произведено по требованиям ЕСПД (РД 50-34.698-90).

СОДЕРЖАНИЕ

АННОТАЦИЯ.....	295
СОДЕРЖАНИЕ	296
1 ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ.....	297
1.1 Обозначение и наименование программы	297
1.2 Языки программирования, на которых написана программа	297
1.3 Программное обеспечение, необходимое для функционирования программы	297
2 ФУНКЦИОНАЛЬНОЕ НАЗНАЧЕНИЕ.....	298
2.1 Назначение и классы решаемых задач	298
2.2 Сведения о функциональных ограничениях на применение	299
3 ОПИСАНИЕ ЛОГИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ.....	299
4 ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА.....	301
5 ВЫЗОВ И ЗАГРУЗКА.....	301
6 ВХОДНЫЕ ДАННЫЕ.....	301
7 ВЫХОДНЫЕ ДАННЫЕ	302
ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ	303

1 ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ

1.1 Обозначение и наименование программы

Программная реализация (ПрР) программного комплекса (ПрК) для многоуровневого компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов содержащих асимметричные включения – «POLYCOMP».

1.2 Языки программирования, на которых написана программа

ПрР объединяет в себе модули, написанные на языке Python 2.6.5 и пакет библиотек LAMMPS, компилируемый из исходных файлов, написанных на языке C++. Для работы программного комплекса необходимо наличие:

- 1) Компилятора языка C/C++, например:
 - a) GCC версии 4.6.4, или выше;
 - б) Intel C++ Composer XE 2013;
 - в) PGI 2013 версия 13.7 или выше.
- 2) интерпретатора языка Python версии 2.6.5 и выше.

1.3 Программное обеспечение, необходимое для функционирования программы

Минимальный состав используемых программных средств для эксплуатации на суперкомпьютере

- 1)Операционная система Linux, например:
 - a) Debian GNU/Linux 6.0 или 7.0.
 - б) Red Hat Enterprise Linux 6.
 - в) SUSE Linux Enterprise Server 11.
- 2)Компилятор языка C/C++, например:

- а) GCC версии 4.6.4, или выше
 - б) Intel C++ Composer XE 2013
 - в) PGI 2013 версия 13.7 или выше
- 3) wget – консольная программа для загрузки файлов по сети.
 - 4) интерпретатор языка Python версии 2.6.5 и выше.
 - 5) GNU Bourne-Again Shell 4 и более поздние версии
 - 6) Архиваторы tar и gzip версии 1.6 или выше
 - 7) Библиотека MPI для запуска параллельной версии программы, например
 - а) MPICH версии 1.5 или выше
 - б) Intel MPI версии 4.1 или выше
 - в) MVAPICH2 версии 1.9 или выше
 - г) Open MPI версии 1.7.2 или выше

Минимальный состав используемых программных средств для эксплуатации на локальном компьютере:

Операционная система Microsoft Windows, GNU Linux или Mac OS X.

SSH-клиент для доступа к суперкомпьютеру (например, Putty 0.62 или WinSCP 5.1.5 для Microsoft Windows, OpenSSH для GNU Linux и Mac OS X)

2 ФУНКЦИОНАЛЬНОЕ НАЗНАЧЕНИЕ

2.1 Назначение и классы решаемых задач

Разработанная ПрР предназначена для проведения на суперкомпьютерах сверхмасштабируемых вычислений в задаче многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов содержащих асимметричные включения.

Программная реализация (ПрР) программного комплекса (ПрК) для многоуровневого моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения обеспечивает:

- 1) проведение расчетов полимерных нанокомпозитов, как на вычислительных системах начального уровня, так и на высокопроизводительных вычислительных комплексах;
- 2) проведении многоуровневых вычислений, объединяющих молекулярный и мезоуровни;
- 3) определение зависимостей прочности и предела текучести от состава и структуры полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения;
- 4) определение уровня напряжений и сопротивления нагрузке в процессе деформирования полимерных нанокомпозитов содержащих ассиметричные включения;
- 5) моделирование процессов деформации, текстурирования, эволюции микроструктуры под действием напряжений в нанокомпозиционных материалах содержащих в качестве упрочняющих элементов волокна, нанотрубки, дискретные частицы различной формы.

2.2 Сведения о функциональных ограничениях на применение

Функциональные ограничения разработанной ПрР во многом определяются возможностями вычислительных систем, на которых будут проводиться расчеты. Как правило, современные вычислительные комплексы ограничивают расчеты наносекундным временным интервалом и нанометровым пространственным диапазоном при моделировании на микроскопическом (атомном) уровне, и общим количеством частиц порядка миллиона при проведении расчетов на мезо- и макроуровне.

3 ОПИСАНИЕ ЛОГИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

3.1. Структура программного комплекса с описанием функций составных частей и связи между ними представлена на рисунке 1.

На вычислительном кластере в директории программного комплекса размещаются следующие модули:

Модуль пользовательского интерфейса (ПМПИ).

Модуль генерации первичных структур полимерных матриц с нановключениями, обеспечивающий генерацию нанотрубок, нановолокон, пластинчатых включений (ПМГПСПМ).

Модуль вывода модельной системы на равновесие при заданной температуре (ПМВЫМС).

Модуль проведения расчета деформации структур нанокомпозитов (ПМПРД).

Модуль взаимодействия с пакетом библиотек LAMMPS (ПМВзПБ).

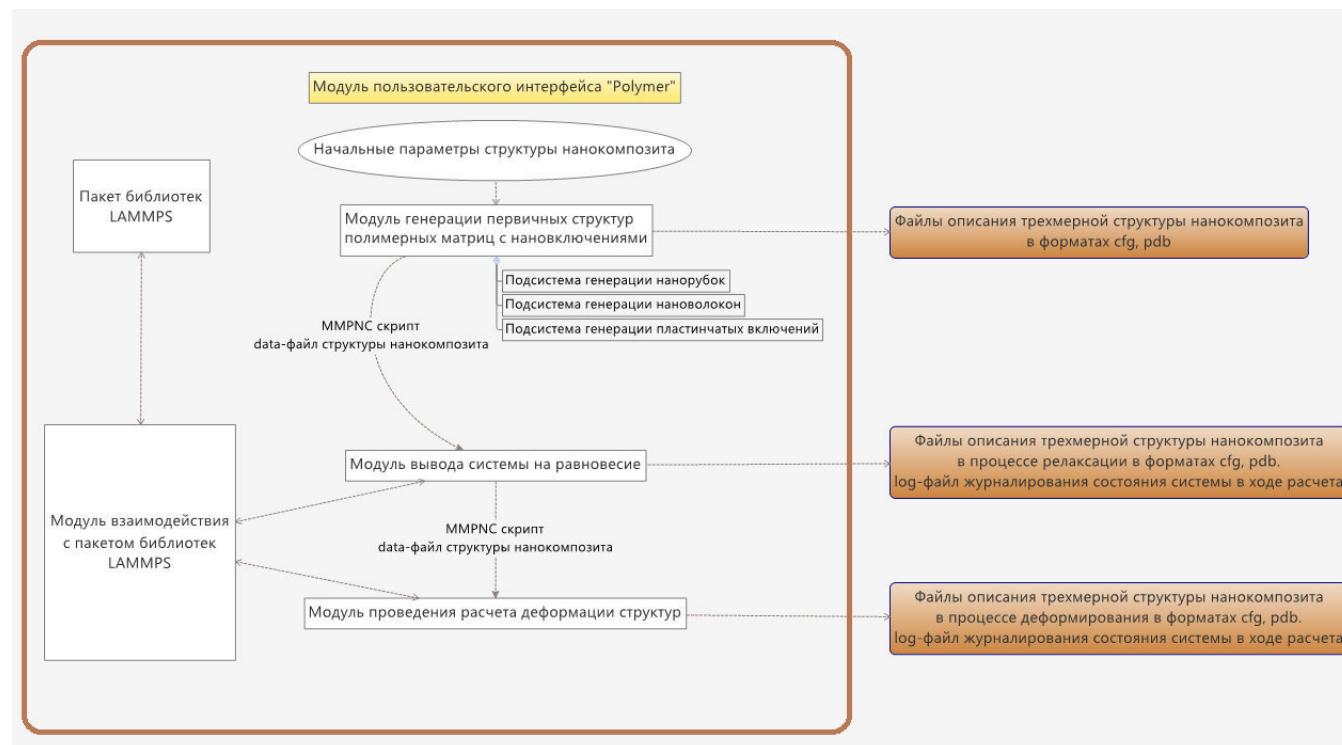


Рисунок 1 - Структура программного комплекса и принципов взаимодействия между модулями

4 ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации суперкомпьютерной части

- 1) Процессоры архитектуры x86-64, не менее 2-х ядер, с тактовой частотой не ниже 3 ГГц.
- 2) Оперативная память не менее 1 Гбайт на 1 ядро.
- 3) Объем свободного дискового пространства не менее 100 Гбайт.

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации локальной части:

- 4) Процессор Intel Pentium или AMD с тактовой частотой не ниже 2 ГГц.
- 5) Оперативная память не менее 1 Гбайт.

Объем свободного дискового пространства не менее 1 Гбайт.

5 ВЫЗОВ И ЗАГРУЗКА

Вызов и загрузка программного комплекса сводится к запуску скрипта пользовательского интерфейса. Для запуска комплекса необходимо открыть командную строку и в директории программного комплекса запустить оболочку пользовательского интерфейса командой:

`python Polymer.py`

6 ВХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Входные данные программы вводятся оператором системы с использованием экранных форм ввода. Описание соответствующих экранных форм приводится в документе ЭО «POLYCOMP». Руководство оператора (643.02066500.40530-01 34 01).

7 ВЫХОДНЫЕ ДАННЫЕ

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 некоторых интегральных параметров модели с течением времени.

Выходные данные программного комплекса представляются оператору системы в экранах формах, отображаемых в окне пользовательского интерфейса, в специальных log-файлах и в виде графических файлов. Описание соответствующих экранах форм приводится в документе ЭО «POLYCOMP». Руководство оператора (643.02066500.40530-01 34 01).

УТВЕРЖДЕНО

643.02066500.40531-01 13 01 -ЛУ

ЭО. ПМ «ПМПИ». Описание программы

643.02066500.40531-01 13 01

Инв. № подп.	Подпись и дата	Взам. инв. №	Инв. № дубл.	Подпись и дата

Листов 10

2013

АННОТАЦИЯ

В данном программном документе приведено описание программного модуля пользовательского интерфейса (ПМПИ) программной реализации (ПрР) программного комплекса (ПрК) для многоуровневого компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

Оформление программного документа ЭО. ПМ «ПМПИ». Описание программы произведено по требованиям ЕСПД (ГОСТ 19.402-78).

1 ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ

1.1 Обозначение и наименование программы

Программный модуль пользовательского интерфейса (ПМПИ) служит для запуска программного комплекса и обеспечения интерактивного диалога между оператором и вычислительной составляющей комплекса, который осуществляется с использованием возможностей командной строки.

1.2 Языки программирования, на которых написана программа

Программный модуль написан на языке Python 2.6.5. Для его работы необходимо наличие:

- 1) интерпретатора языка Python версии 2.6.5 и выше.

2 ФУНКЦИОНАЛЬНОЕ НАЗНАЧЕНИЕ

Модуль пользовательского интерфейса осуществляет ввода данных и управление расчетами, а также вывод данных.

Кроме того модуль осуществляет визуализацию данных для оценки деформационного поведения и влияния микроструктуры на прочность нанокомпозитных материалов.

3 ОПИСАНИЕ ЛОГИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Структурно программный модуль выполнен как единый программный компонент.

4 ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации суперкомпьютерной части

- 1)Процессоры архитектуры x86-64, не менее 2-х ядер, с тактовой частотой не ниже 3 ГГц.
- 2) Оперативная память не менее 1 Гбайт на 1 ядро.
- 3) Объем свободного дискового пространства не менее 100 Гбайт.

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации локальной части:

- 4) Процессор Intel Pentium или AMD с тактовой частотой не ниже 2 ГГц.
- 5) Оперативная память не менее 1 Гбайт.

Объем свободного дискового пространства не менее 1 Гбайт.

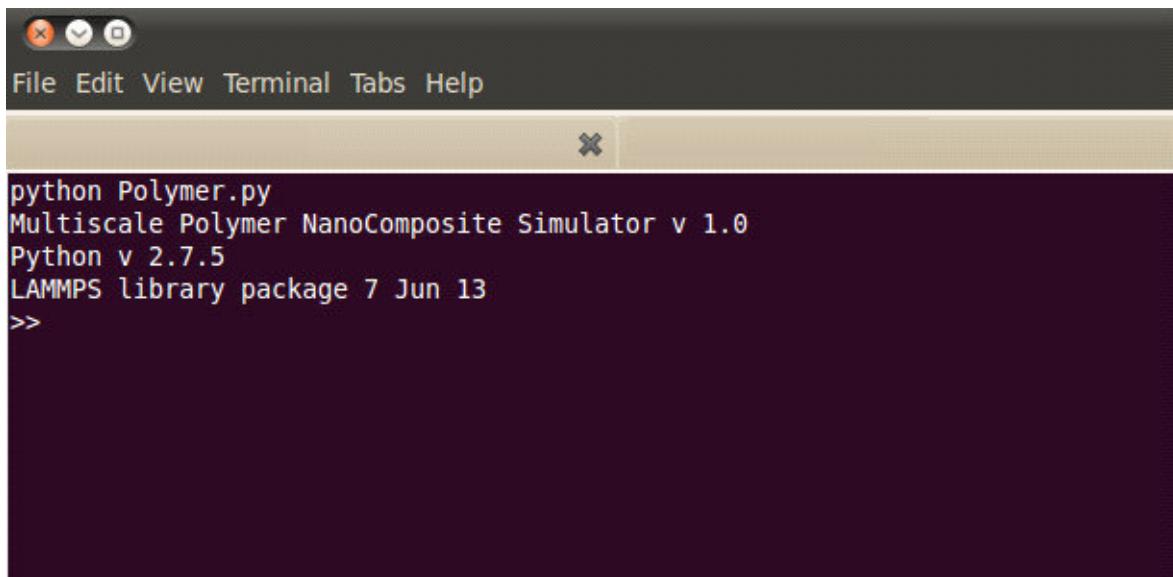
5 ВЫЗОВ И ЗАГРУЗКА

Вызов и загрузка программного комплекса сводится к запуску скрипта пользовательского интерфейса. Для запуска комплекса необходимо открыть командную строку и в директории программного комплекса запустить оболочку пользовательского интерфейса командой

`python Polymer.py`

6 ВХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Входные данные программного комплекса вводятся оператором системы с использованием экранных форм ввода. Описание соответствующих экранных форм приводится в документе ЭО «POLYCOMP». Руководство оператора.



```
python Polymer.py
Multiscale Polymer NanoComposite Simulator v 1.0
Python v 2.7.5
LAMMPS library package 7 Jun 13
>>
```

Рисунок 1 - Приветствие пользовательского интерфейса программного комплекса

На рис. 1 представлено приветствие пользовательского интерфейса программного комплекса, отображающее версию программного комплекса, версию интерпретатора языка Python, а также версию библиотек LAMMPS.

Пользователю предлагается ввести ряд параметров (также возможен выбор тестового расчета, при котором величины параметров автоматически задаются согласно значениям по умолчанию)

В качестве геометрических параметров модельного образца выступают следующие величины:

- 1) геометрические размеры расчетной ячейки (в ангстремах)
- 2) среднее значение и дисперсия распределения длин полимерных молекул
- 3) размеры, тип и количество нановключений

Физико-механические свойства материала должны описываться следующими вещественными величинами:

- 1) плотность в г/см³;

Вид и параметры нагружения моделируемого образца определяются следующими величинами:

- 1) величина конечной деформации в виде вектора (Δx , Δy , Δz), компоненты которого представляют итоговые значения относительного удлинения или сжатия линейных размеров ячейки;
- 2) полное время деформирования в количестве шагов интегрирования (вещественное);
- 3) временной шаг интегрирования в пикосекундах (вещественное).

После проверки корректности введенных данных, полученные параметры последовательно передаются на вход следующим модулям программного комплекса:

Модуль генерации первичных структур полимерных матриц с нановключениями.

Модуль вывода модельной системы на равновесие при заданной температуре.

Модуль проведения расчета деформации структур нанокомпозитов.

7 ВЫХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Частота записи выходных данных расчета определяется следующими величинами типа целое:

- 1) количество временных шагов, через которое будет происходить запись данных для построения диаграммы нагружения (напряжение–деформация);
- 2) количество временных шагов, через которое будет происходить запись состояния модели в графический файл.

Хранение и передача пользовательских параметров обеспечивается классом «Inp()».

УТВЕРЖДЕНО

643.02066500.40532-01 13 01 -ЛУ

ЭО. ПМ «ПМГПСПМ». Описание программы

643.02066500.40532-01 13 01

Инв. № подп.	Подпись и дата	Взам. инв. №	Инв. № дубл.	Подпись и дата

Листов 10

2013

АННОТАЦИЯ

В данном программном документе приведено описание программного модуля генерации первичных структур полимерных матриц с нановключениями, обеспечивающий генерацию нанотрубок, нановолокон, пластинчатых включений (ПМГПСПМ) программной реализации (ПрР) программного комплекса (ПрК) для многоуровневого компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

Оформление программного документа ЭО. ПМ «ПМГПСПМ». Описание программы произведено по требованиям ЕСПД (ГОСТ 19.402-78).

1 ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ

1.1 Обозначение и наименование программы

Программный модуль ПМГПСПМ служит для генерации первичных структур полимерных матриц с нановключениями в виде нанотрубок, нановолокон, пластинчатых включений.

1.2 Языки программирования, на которых написана программа

Программный модуль ПМГПСПМ написан на языке Python. Для его работы необходимо наличие интерпретатора языка Python версии 2.6.5 и выше.

2 ФУНКЦИОНАЛЬНОЕ НАЗНАЧЕНИЕ

Основной задачей модуля является создание файлов, описывающих структуру полимерного нанокомпозитного материала, содержащего асимметричные включения. Модуль генерации первичных структур полимерных матриц с нановключениями предоставляет оператору возможность управления значениями следующих параметров расчетной ячейки и модельного образца:

- 1) геометрические размеры расчетной ячейки (в ангстремах);
- 2) среднее значение и дисперсия распределения длин полимерных молекул;
- 3) размеры, тип и количество нановключений;
- 4) плотность моделируемого нанокомпозитного материала в г/см³.

Широкий набор входных параметров делает модуль достаточно универсальным в задачах генерации, как различного рода полимерных цепей, так и наноструктур вида нанотрубок или нановолокон.

3 ОПИСАНИЕ ЛОГИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Основной класс модуля Chain(), обеспечивающий создание в объеме расчетной ячейки физически правдоподобной полимерной структуры, содержит набор методов:

generate() - инициализация построения новой полимерной цепи в случайно выбранной пространственной координате расчетной ячейки;

check_angle(), check_empty(), check_border() - ряд методов, обеспечивающих построение физически разумной структуры с заданным распределением углов и расстояний между соседними звеньями цепи;

add_bead() - добавление очередного звена в полимерную цепь;

add_hydr() - добавление органических остатков в структуру каждого из звеньев полимерной цепи (в случае построения полноатомной, а не CG модели).

4. ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации суперкомпьютерной части

- 1) Процессоры архитектуры x86-64, не менее 2-х ядер, с тактовой частотой не ниже 3 ГГц.
- 2) Оперативная память не менее 1 Гбайт на 1 ядро.
- 3) Объем свободного дискового пространства не менее 100 Гбайт.

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации локальной части:

- 4) Процессор Intel Pentium или AMD с тактовой частотой не ниже 2 ГГц.
- 5) Оперативная память не менее 1 Гбайт.

Объем свободного дискового пространства не менее 1 Гбайт.

5. ВЫЗОВ И ЗАГРУЗКА

Вызов и загрузка модуля сводится к запуску скрипта на Python 2.6.5.

Полученный результирующий файл `_имя_задачи_.data` передаётся модулю вывода модельной системы на равновесие для обеспечения релаксации структуры.

6. ВХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Входные данные программного модуля передаваемые из программного модуля ЭО. ПМ «ПМПИ»:

- 1) геометрические размеры расчетной ячейки (в ангстремах);
- 2) среднее значение и дисперсия распределения длин полимерных молекул;
- 3) размеры, тип и количество нановключений;
- 4) плотность моделируемого нанокомпозитного материала в г/см³.

7. ВЫХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Выходные данные модуля представляют собой массивы, содержащие информацию о трехмерной структуре сгенерированного модельного образца. Для последующей передачи расчетным модулям, содержимое записывается в файл `_имя_задачи_.data` в рабочем каталоге. Также по завершении работы модуля в рабочем каталоге создаются dump-файлы с именами `_имя_задачи_.cfg` и `_имя_задачи_.pdb`, позволяющие построить визуальную трехмерную модель полимерной матрицы с нановключениями. Для большего удобства создаются дополнительные dump-файлы, описывающие структуры полимера и включений раздельно.

Полученный файл `_имя_задачи_.data` передаётся модулю вывода модельной системы на равновесие для обеспечения релаксации структуры.

Подробности взаимодействия с модулем генерации первичных структур полимерных матриц с нановключениями описаны в документе «Комплекс Для Многоуровневого Компьютерного Моделирования Процессов Деформирования И Разрушения Полимерных Нанокомпозитов.Руководство оператора»

УТВЕРЖДЕНО

643.02066500.40533-01 13 01 -ЛУ

ЭО. ПМ «ПМВыМС». Описание программы

643.02066500.40533-01 13 01

Инв. № подп.	Подпись и дата	Взам. инв. №	Инв. № дубл.	Подпись и дата

Листов 10

2013

АННОТАЦИЯ

В данном программном документе приведено описание программного модуля вывода модельной системы на равновесие при заданной температуре (ПМВыМС) программной реализации (ПрР) программного комплекса (ПрК) для многоуровневого компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

Оформление программного документа ЭО. ПМ «ПМВыМС». Описание программы произведено по требованиям ЕСПД (ГОСТ 19.402-78).

1 ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ

1.1 Обозначение и наименование программы

Программный модуль ПМВыМС предназначен для проведения процесса релаксации, получения равновесной структуры модельной системы и последующей передачи данных в модуль проведения расчета деформации.

1.2 Языки программирования, на которых написана программа

Программный модуль ПМВыМС написан на языке Python. Для его работы необходимо наличие интерпретатора языка Python версии 2.6.5 и выше.

2 ФУНКЦИОНАЛЬНОЕ НАЗНАЧЕНИЕ

Основной задачей модуля является создание файлов, описывающих структуру полимерного нанокомпозитного материала, содержащего асимметричные включения. Модуль генерации первичных структур полимерных матриц с нановключениями предоставляет оператору возможность управления значениями следующих параметров расчетной ячейки и модельного образца:

- 1) геометрические размеры расчетной ячейки (в ангстремах);
- 2) среднее значение и дисперсия распределения длин полимерных молекул;
- 3) размеры, тип и количество нановключений;
- 4) плотность моделируемого нанокомпозитного материала в г/см³.

Широкий набор входных параметров делает модуль достаточно универсальным в задачах генерации, как различного рода полимерных цепей, так и наноструктур вида нанотрубок или нановолокон.

3 ОПИСАНИЕ ЛОГИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Структурно программный модуль выполнен как единый программный компонент.

4. ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации суперкомпьютерной части

- 1) Процессоры архитектуры x86-64, не менее 2-х ядер, с тактовой частотой не ниже 3 ГГц.
- 2) Оперативная память не менее 1 Гбайт на 1 ядро.
- 3) Объем свободного дискового пространства не менее 100 Гбайт.

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации локальной части:

- 4) Процессор Intel Pentium или AMD с тактовой частотой не ниже 2 ГГц.
- 5) Оперативная память не менее 1 Гбайт.

Объем свободного дискового пространства не менее 1 Гбайт.

5. ВЫЗОВ И ЗАГРУЗКА

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_relax._имя_задачи_".

Модуль вывода модельной системы на равновесие непосредственно использует интерфейс модуля ПМВзПБ для взаимодействия с пакетом библиотек LAMMPS для запуска параллельного расчета с использованием

суперкомпьютерных технологий MPI и CUDA (см. рис. 1 в ЭО «POLYCOMP»- Описание логической и физической структуры).

6. ВХОДНЫЕ ДАННЫЕ

В качестве входных параметров используются заданные оператором величины:

- полное время релаксации 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, содержащий информацию о трехмерной структуре сгенерированного неравновесного модельного образца. Данный файл генерируется модулем генерации первичных структур полимерных матриц с нановключениями.

7. ВЫХОДНЫЕ ДАННЫЕ

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 ЭО «POLYCOMP». Руководство оператора».

УТВЕРЖДЕНО

643.02066500.40534-01 13 01 -ЛУ

ЭО. ПМ «ПМПРД». Описание программы

643.02066500.40534-01 13 01

Инв. № подп.	Подпись и дата	Взам. инв. №	Инв. № дубл.	Подпись и дата

Листов 10

2013

АННОТАЦИЯ

В данном программном документе приведено описание программного модуля проведения расчета деформации структур нанокомпозитов (ПМПРД) программной реализации (ПрР) программного комплекса (ПрК) для многоуровневого компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

Оформление программного документа ЭО. ПМ «ПМПРД». Описание программы произведено по требованиям ЕСПД (ГОСТ 19.402-78).

1 ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ

1.1 Обозначение и наименование программы

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

- 1) определение зависимостей прочности и предела текучести от состава и структуры модельной системы;
- 2) определение уровня напряжений и сопротивления нагрузке в процессе деформирования модельной системы.

1.2 Языки программирования, на которых написана программа

Программный модуль ПМПРД написан на языке Python. Для его работы необходимо наличие интерпретатора языка Python версии 2.6.5 и выше.

2 ФУНКЦИОНАЛЬНОЕ НАЗНАЧЕНИЕ

Основными задачами модуля являются:

- 1) определение зависимостей прочности и предела текучести от состава и структуры модельной системы;
- 2) определение уровня напряжений и сопротивления нагрузке в процессе деформирования модельной системы.

3 ОПИСАНИЕ ЛОГИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Структурно программный модуль выполнен как единый программный компонент.

4. ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации суперкомпьютерной части:

- 1) Процессоры архитектуры x86-64, не менее 2-х ядер, с тактовой частотой не ниже 3 ГГц.
- 2) Оперативная память не менее 1 Гбайт на 1 ядро.
- 3) Объем свободного дискового пространства не менее 100 Гбайт.

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации локальной части:

- 1) Процессор Intel Pentium или AMD с тактовой частотой не ниже 2 ГГц.
- 2) Оперативная память не менее 1 Гбайт.

Объем свободного дискового пространства не менее 1 Гбайт.

5. ВЫЗОВ И ЗАГРУЗКА

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 (ПМВзПБ) для запуска параллельного расчета с

использованием суперкомпьютерных технологий MPI и CUDA (см. рис. 1 в ЭО «POLYCOMP»- Описание логической и физической структуры).

6. ВХОДНЫЕ ДАННЫЕ

В качестве входных параметров используются заданные оператором величины:

- 1) величина конечной деформации в виде вектора (Δx , Δy , Δz), компоненты которого представляют итоговые значения относительного удлинения или сжатия линейных размеров ячейки
- 2) полное время деформации в количестве шагов интегрирования (вещественное).
- 3) временной шаг интегрирования в пикосекундах (вещественное).
- 4) количество временных шагов, через которое будет происходить запись состояния модели в графический файл.
- 5) 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.

7. ВЫХОДНЫЕ ДАННЫЕ

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 ЭО «POLYCOMP». Руководство оператора».

УТВЕРЖДЕНО

643.02066500.40535-01 13 01 -ЛУ

ЭО. ПМ «ПМВзПБ». Описание программы

643.02066500.40535-01 13 01

Инв. № подп.	Подпись и дата	Взам. инв. №	Инв. № дубл.	Подпись и дата

Листов 10

2013

АННОТАЦИЯ

В данном программном документе приведено описание программного модуля взаимодействия с пакетом библиотек LAMMPS (ПМВзПБ) программной реализации (ПрР) программного комплекса (ПрК) для многоуровневого компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих асимметричные включения.

Оформление программного документа ЭО. ПМ «ПМВзПБ». Описание программы произведено по требованиям ЕСПД (ГОСТ 19.402-78).

1 ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ

1.1 Обозначение и наименование программы

Программный модуль ПМВзПБ предназначен для взаимодействия с пакетом библиотек LAMMPS. Он служит для запуска и управления расчетами в среде LAMMPS и используется модулем вывода системы на равновесие (ПМВыМС) и модулем проведения деформации структур (ПМПРД) (см. рис. 1 в ЭО «POLYCOMP»- Описание логической и физической структуры).

1.2 Языки программирования, на которых написана программа

Программный модуль ПМВзПБ написан на языке Python. Для его работы необходимо наличие интерпретатора языка Python версии 2.6.5 и выше.

2 ФУНКЦИОНАЛЬНОЕ НАЗНАЧЕНИЕ

Модуль взаимодействия с пакетом библиотек LAMMPS (ПМВзПБ) включает в себя ряд базовых инструкций, обеспечивающих работу интерфейса между программной частью комплекса, написанной на языке python и программным продуктом LAMMPS, обеспечивающим поддержку проведения высокомасштабируемых расчетов с использованием суперкомпьютерных технологий MPI и CUDA.

3 ОПИСАНИЕ ЛОГИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Структурно программный модуль выполнен как единый программный компонент.

4. ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации суперкомпьютерной части

- 1)Процессоры архитектуры x86-64, не менее 2-х ядер, с тактовой частотой не ниже 3 ГГц.
- 2)Оперативная память не менее 1 Гбайт на 1 ядро.
- 3)Объем свободного дискового пространства не менее 100 Гбайт.

Минимальный состав используемых технических средств для эксплуатации локальной части:

- 1) Процессор Intel Pentium или AMD с тактовой частотой не ниже 2 ГГц.
- 2) Оперативная память не менее 1 Гбайт.

Объем свободного дискового пространства не менее 1 Гбайт.

5. ВЫЗОВ И ЗАГРУЗКА

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 (ПМВзПБ) для запуска параллельного расчета с

использованием суперкомпьютерных технологий MPI и CUDA (см. рис. 1 в ЭО «POLYCOMP»- Описание логической и физической структуры).

6. ВХОДНЫЕ ДАННЫЕ

В качестве входных параметров модулю передаются скрипты, содержащие инструкции MMPNC (Multiscale modelling of Polymer NanoComposites) - высокоуровневого языка описания атомистических моделей и проведения соответствующих суперкомпьютерных сверхмасштабируемых вычислений. Данные скрипты на различных этапах расчета генерируются одним из двух модулей:

- 1) Модуль вывода модельной системы на равновесие при заданной температуре (ПМВыМС);
- 2) Модуль проведения расчета деформации структур нанокомпозитов (ПМПРД).

7. ВЫХОДНЫЕ ДАННЫЕ

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 ЭО «POLYCOMP». Руководство оператора».

ПРИЛОЖЕНИЕ Г.11
к программной документации

CD-диск, содержащий

- а) ЭО. ПМ «ПМВзПБ». Текст программы;
- б) ЭО. ПМ «ПМВыМС». Текст программы;
- в) ЭО. ПМ «ПМГПСПМ». Текст программы;
- г) ЭО. ПМ «ПМПИ». Текст программы;
- д) ЭО. ПМ «ПМПРД». Текст программы.