

УДК: 519.876.5

Модель деформации полимерных нанокompозитов на основе клеточных автоматов

С. И. Иванов, А. В. Матасов, Н. В. Меньшутина

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева,
Россия, 125480, г. Москва, ул. Героев Панфиловцев, 20

E-mail: chemcom@muctr.ru

*Получено 21 июня 2013 г.,
после доработки 15 января 2014 г.*

Данная статья посвящена моделированию процесса деформации полимерных нанокompозитов, содержащих «жесткие» и «мягкие» включения, с использованием клеточных автоматов и параллельных вычислений. В статье описан алгоритм расчета по модели, приведены сравнения с экспериментальными данными и описан программный комплекс для проведения численного эксперимента.

Ключевые слова: клеточные автоматы, параллельные вычисления, деформация, моделирование

Deformation model of polymer nanocomposites based on cellular automata

S. I. Ivanov, A. V. Matasov, N. V. Menshutina

MUCTR, 20 Geroev Panfilovtsev st., Moscow, 125480, Russia

Abstract. — This paper discusses the modeling of the deformation of polymer nanocomposites containing "hard" and "soft" inclusions, using cellular automata and parallel computing. The paper describes an algorithm based on the model, a comparison with experimental data is shown, software for the numerical experiment is described.

Keywords: cellular automata, parallel computing, deformation, simulation

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2014, vol. 6, no. 1, pp. 131–136 (Russian).

Введение

На текущий момент в Российской Федерации многие исследования проводятся с использованием вычислительных экспериментов. Вычислительные эксперименты осуществляются, как правило, на персональных компьютерах, использование которых для решения подобных задач либо невозможно, либо неэффективно.

Современные суперкомпьютеры позволяют решить многие задачи методом параллельных вычислений.

Для поиска составов новых композиционных материалов актуальной задачей являются разработка математических и имитационных моделей и реализация их с использованием высокопроизводительных вычислений. В данной статье будет рассмотрена математическая модель процесса деформации композиционных материалов, которая является развитием [Федорук и др., 2008] и классической модели Халпина–Тцая, основанной на допущении о возможности предсказания механических свойств композита на основании пропорциональных соотношений [Zeng et al., 2008].

Объект исследований

В качестве объекта исследований был выбран полимерный нанокомпозит на основе бисфенолглицидилметакрилата и триэтиленгликольдиметакрилата. Нанокомпозит содержит три типа компонентов:

- 1) «жесткие» включения (наполнитель);
- 2) «мягкие» включения (модификатор);
- 3) матрица.

«Жесткие» включения состоят из 2-х различных типов частиц:

- 1) шаровидные частицы размером 40 нм (аэросил);
- 2) шаровидные частицы наполнителя размером 0.7 мкм;

Вид распределения компонентов показан на рисунке 1.

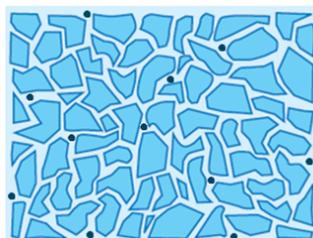


Рис. 1. Распределение компонентов. Жесткие включения: ■ наполнитель, — аэросил; □ полимерная матрица; ● мягкие включения

Концентрация компонентов лежит в интервале от общей массы:

- 1) «жесткие» включения — 75–80 %;
- 2) «мягкие» включения — 0–10 %;
- 3) Матрица — 10–25 %

Математическая модель

Математическая модель процесса деформации твердых нанокомпозитных полимерных тел построена на основе клеточного автомата.

У модели приняты следующие допущения:

- 1) поле клеточного автомата состоит из клеток с линейным размером l ;

- 2) в каждой клетке может находиться только одно вещество;
- 3) клеточный автомат является синхронным;

Модель основана на уравнениях макромеханики для расчета удлинения тела при растяжении и сжатии, а также расчета эффективного модуля упругости, которые применяются к каждой клетке автомата итеративно до тех пор, пока клеточный автомат перестанет изменять свое состояние. Расчет локальных удлинений проводится для каждой клетки клеточного автомата. Иллюстрация сил, действующих на клетку, приведена на рисунке 2.

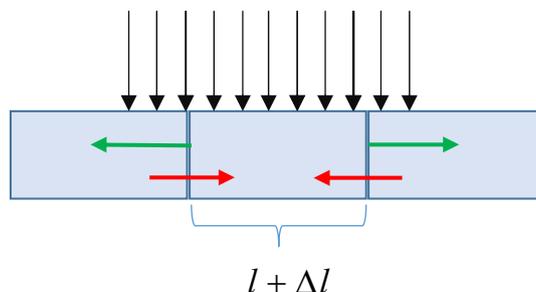


Рис. 2. Направление сил, действующих на клетку

Алгоритм расчета по модели:

- 1) исходя из приложенных сил вычисляется напряжение в каждой клетке;
- 2) рассчитывается локальное удлинение клеток;
- 3) рассчитывается равнодействующая сила, действующая на каждую клетку, исходя из удлинений клетки и ее соседей;
- 4) корректируется удлинение клетки;
- 5) пункты 3 и 4 повторяются до тех пор, пока клеточный автомат не перестанет изменять свое состояние.

Расчет сил, действующих на клетку, проводится по каждой координатной оси. Алгоритм расчета представлен на рисунке 3. В разработанном алгоритме были выделены блоки двух типов. Блоки первого типа являются «затратными» с точки зрения количества вычислений. Блоки второго типа являются более простыми в вычислительном плане по сравнению с блоками первого типа, однако при большой размерности задачи расчет этих блоков может занимать длительное время. Параллельные вычисления применяются для расчетов по блокам первого типа.

Обозначения, принятые в алгоритме: i, j, k — переменные, используемые для перечисления клеток по координатным осям; индексы x, y, z — показывают, в направлении какой оси определяется та или иная характеристика; l_0 — начальная длина клетки; Δl — локальное удлинение клетки; Δl_p — итоговое удлинение клетки на итерации; F — сила, действующая на материал в клетке; F_p — результирующая сила, действующая на материал в клетке; E — модуль упругости материала в клетке; n — линейный размер клеточного автомата; σ — напряжение материала в клетке.

Данная модель позволяет моделировать следующие случаи:

- 1) приложение силы под углом к поверхности тела;
- 2) приложение нескольких сил в разных точках тела;
- 3) приложение силы в одной точке — моделирование измерения микротвердости тела.

Состояние клеток на текущей итерации зависит от состояния клеток на предыдущей итерации, что позволяет рассчитывать новое состояние поля клеточного автомата параллельно. Параллельные вычисления позволяют значительно повысить скорость расчета, использовать клеточные автоматы больших размеров и, как следствие, увеличить точность расчета. Для параллельного расчета применялась технология MPI [Топорков, 2004]. Программный комплекс был реализован на языке C++.

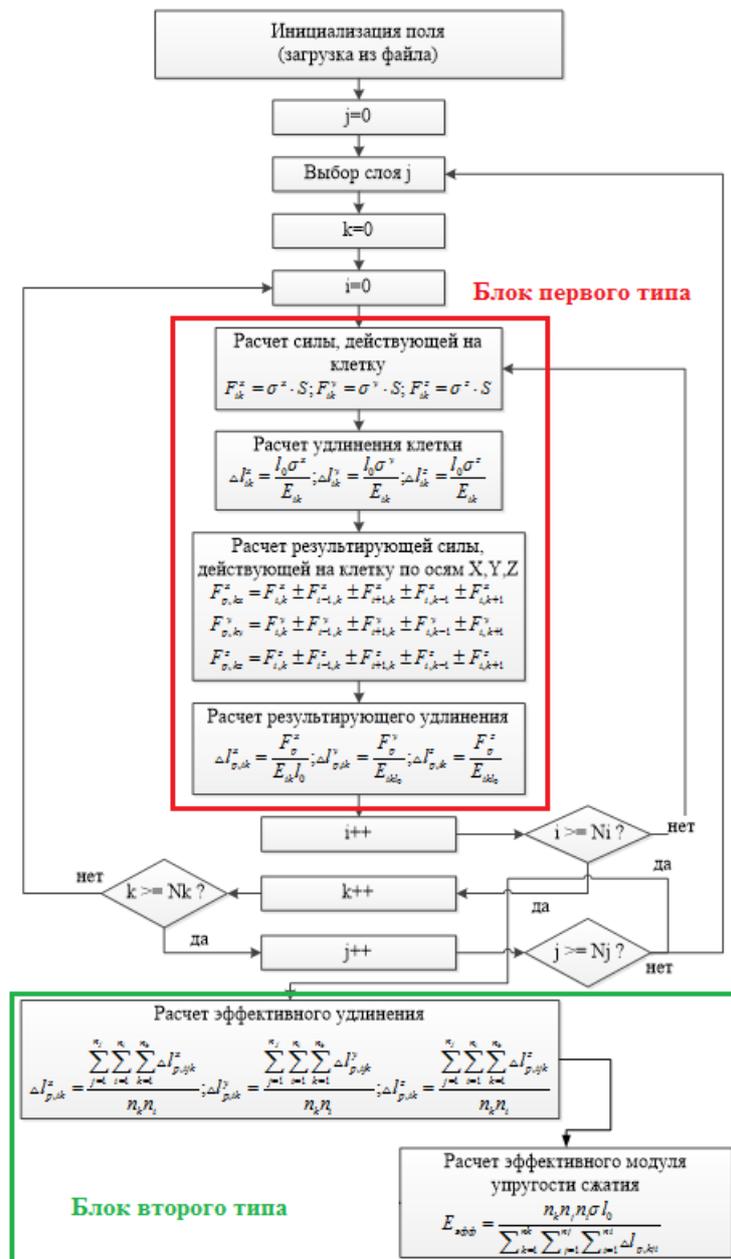


Рис. 3. Алгоритм расчета по модели

Проверка адекватности модели

Было проведено сравнение расчетных и экспериментальных данных. На рисунке 4 представлено сопоставление результатов эксперимента и численного моделирования процесса деформации твердого тела.

Ошибка расчета удлинения тела составила не более 6 %, что говорит о высокой адекватности модели. После разработки модели был создан программный комплекс, реализующий заданную модель. На рисунке 5 продемонстрирована деформация тела при приложении разных сил к разным плоскостям тела. Разными цветами показано распределение локальных удлинений твердого тела от максимального (красный цвет) до минимального (синий цвет). Кроме этого, имеется возможность приложения силы к одной точке, что соответствует моделированию про-

цесса измерения микротвердости тела. В данном случае микротвердость будет вычисляться из минимальной силы, которая вызовет локальное изменение длины твердого тела.

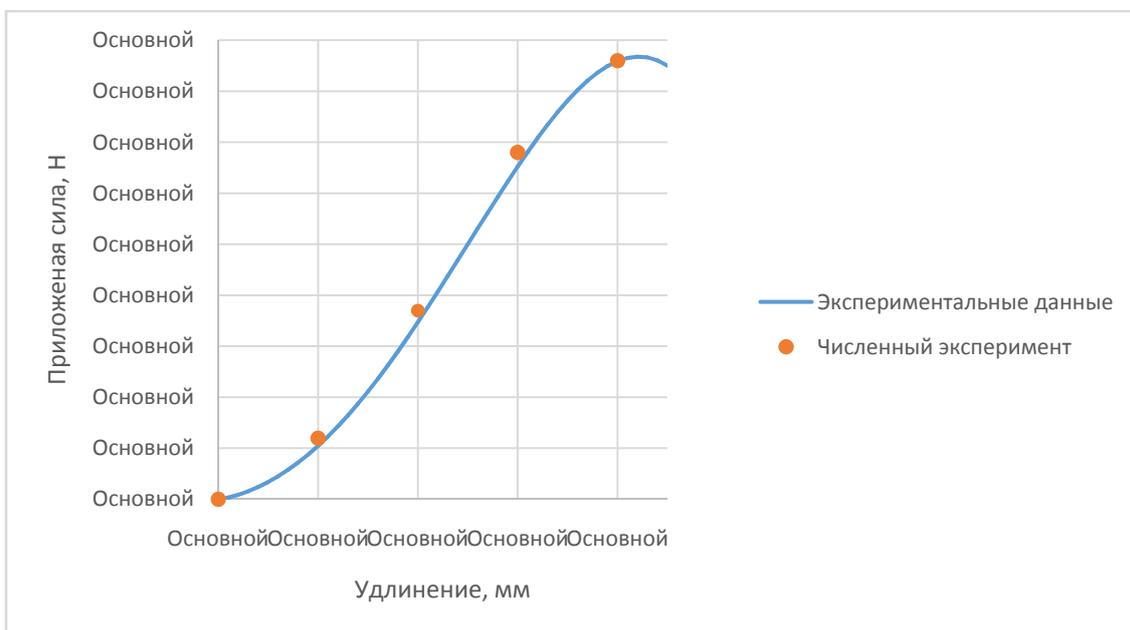


Рис. 4. Сравнение экспериментальных и расчетных значений

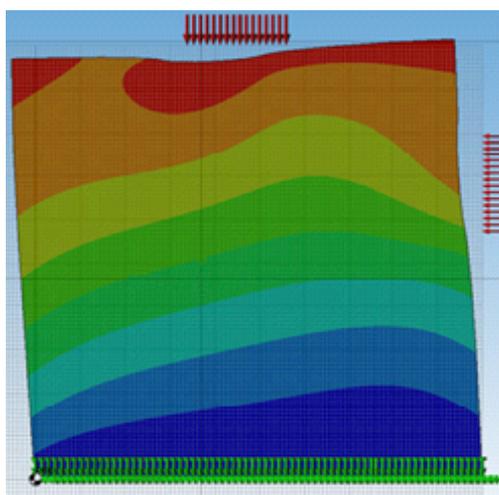


Рис. 5. Результат визуализации процесса деформации

Программный комплекс позволяет задавать произвольное место приложения сил к исследуемому образцу, что дает возможность численно проводить такие эксперименты, как исследование поведения твердых тел при растяжении и сжатии.

Заключение

В данной статье была рассмотрена модель деформации нанокомпозитных твердых тел на основе клеточного автомата. Модель позволяет предсказывать деформацию твердых тел в зависимости от их состава и приложенных сил. На основе модели разработан программный комплекс с модулем визуализации результатов расчета. Программный комплекс позволяет проводить численные эксперименты по растяжению/сжатию твердых тел и определению их микро-

твердости, что позволяет ускорить процесс поиска новых полимерных композиционных материалов. Данная модель реализована с помощью технологий параллельных вычислений, что позволяет сократить время и увеличить точность расчета.

Список литературы

- Топорков В. В.* Модели распределенных вычислений. — М.: Физматлит, 2004. — 315 с.
- Федорук В. А., Рогачёв Е. А., Суриков В. И.* Трёхмерная модель структурных процессов в композиционных материалах на основе клеточных автоматов // Композиционные материалы в промышленности: Материалы Двадцать восьмой международной конференции. — Ялта, Крым, 2008. — С. 440–442.
- Zeng Q. H., Yu A. B., Lu G. Q.* Multiscale modeling and simulation of polymer nanocomposites // Prog. Polym. Sci. — 2008. — Vol. 33. — P. 191–269.