







# РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО ПАКЕТА **MULTICOMP** ДЛЯ МНОГОУРОВНЕВОГО ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОКОМПОЗИТОВ С ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЕЙ

<u>Комаров П.В.</u> <sup>3,4</sup>, Гусева Д.В.<sup>3</sup>, Рудяк В.Ю.<sup>2</sup>, Халатур П.Г.<sup>3</sup>

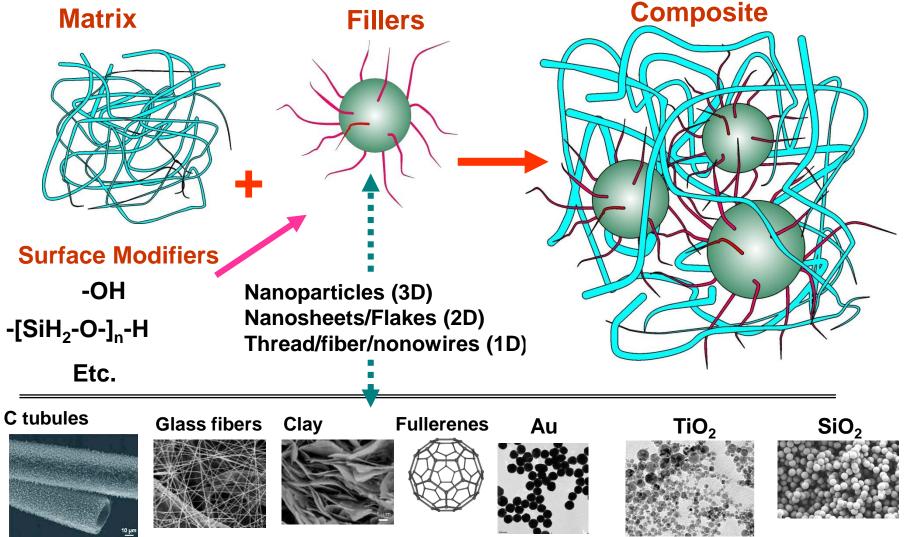
Ахуков М.А. $^1$ , Скоморохов А.С. $^1$ , Книжник А. А. $^1$ , Ширабайкин Д. Б. $^1$ , Хорьков В.А. $^1$ , Окунь М.В. $^1$ , Потапкин Б. В. $^1$ 

# СОДЕРЖАНИЕ

- НАНОКОМПОЗИТЫ
- КОНЦЕПЦИЯ МНОГОМАСШТАБНОСТИ
- ПАКЕТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОМАТЕРИАЛОВ
- ПАКЕТ МУЛЬТИКОМП
- ПЛАНЫ ПО ПРОДОЛЖЕНИЮ РАЗРАБОТКИ КОМПЛЕКСА
- ВЫВОДЫ

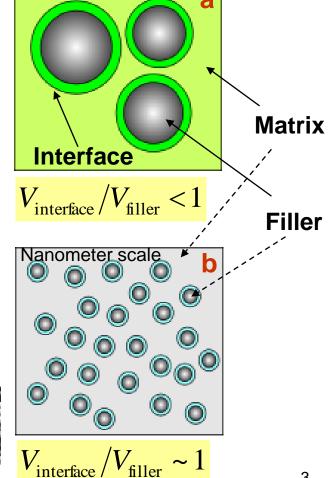
### WHAT IS POLYMER NANOCOMPOSITES?

Combination of a polymer matrix and filler that have at least one dimension (i.e. length, width, or thickness) in the nanometer size range (1 nm =  $10^{-9}$  m)

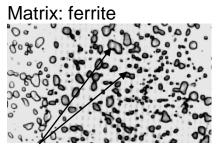


• Композиты - это материалы состоящие из двух или более физически различных фаз, комбинация которых приводит к появлению новых уникальных свойств, отличных от характеристик исходных компонентов

Micrometer scale



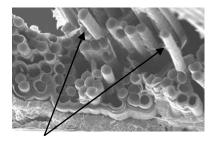
#### **Steel**



Particles Fe<sub>3</sub>C

#### **Carbide**

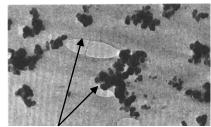
Matrix: calcium aluminosilicate



Particles: SiC continuous fibers

#### Rubber

Matrix: polybutadiene



Particles: carbon black

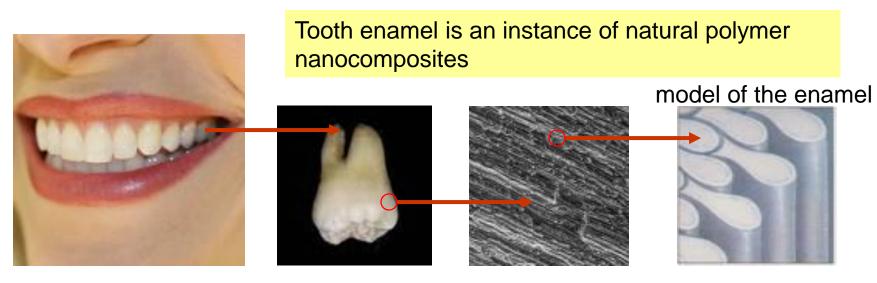
## SIMPLE CLASSIFICATION

- Metal Matrix Composites

   ceramics and metals, such as cemented carbides
   and other cermets
- 2. <u>Ceramic Matrix Composites</u>  $Al_2O_3$  and SiC imbedded with fibers to improve properties, especially in high temperature applications
- 3. <u>Polymer Matrix Composites</u> material consisting of a *polymer matrix* combined with some reinforcing dispersed phase

# WHY POLYMER NANOCOMPOSITES?

- Possible to achieve combinations of properties not attainable with metals, ceramics, or polymers alone
- The key problem of polymers is low elastic modulus (polymers ~2GPa, glasses ~80, metals ~100GPa), low termostability and etc.
- The nanoparticle provide reinforcement of polymer matrix
  - Example: tooth enamel (largely calcium phosphate) has the elastic modulus 83GPa



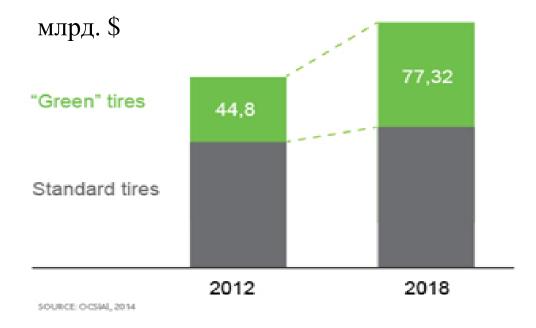
## НАНОКОМПОЗИТЫ В МАШИНОСТРОЕНИИ

Детали автомобиля, содержащие полимерные нанокомпозиты

Соотношение «зелёных» и обычных шин

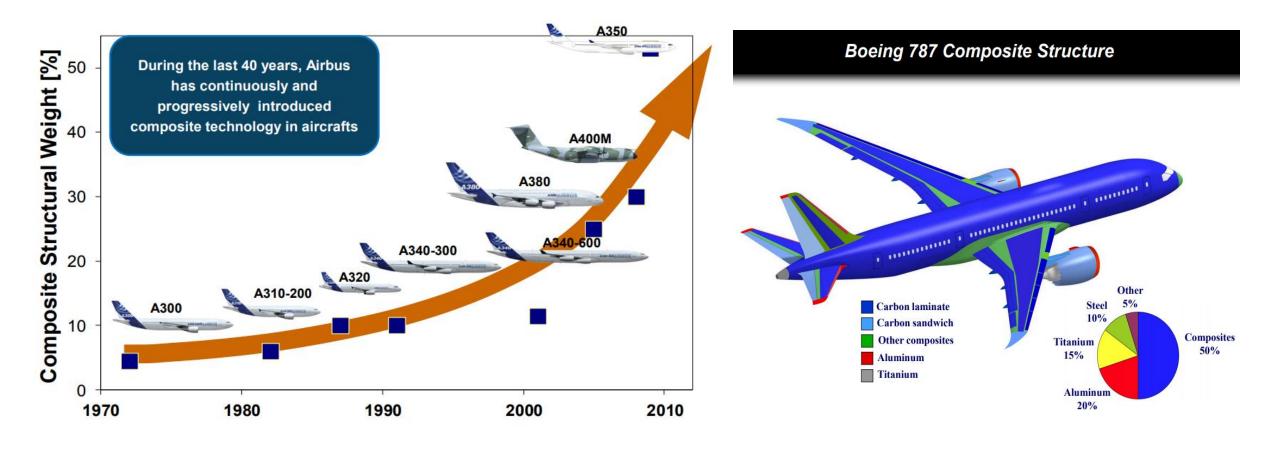


#### "GREEN" TIRE MARKET



# НАНОКОМПОЗИТЫ В АВИАЦИИ

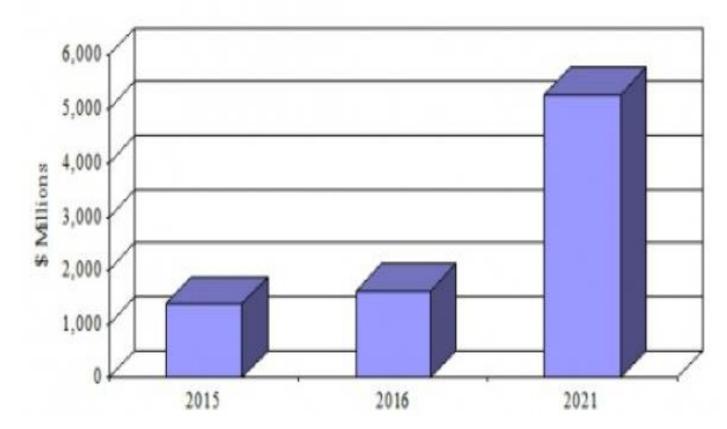
Рост доли композитов самолетах Airbus за 1970-2010 годы % Структура материалов в самолете Boeing 787, %



# НЕОБХОДИМОСТЬ ПРОВЕДЕНИЯ РАБОТ ПО ТЕМЕ

- Разработка методов многомасштабного моделирования и виртуального проектирования наноструктурированных материалов определяется их общей целью создания комплекса физико-химических моделей и программ, позволяющих исследовать новые явления и процессы нанотехнологий
- Программный пакет должен обладать гибкими возможностями для относительно быстрого построения различных вариантов образцов наноматериалов в зависимости от вводимых параметров

#### Объем мирового рынка нанокомпозитов в 2015-2022 гг., млн. \$



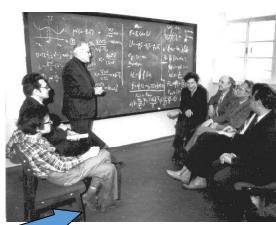
# РОЛЬ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В РАЗРАБОТКЕ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

#### Моделирование



Эксперимент





Теория

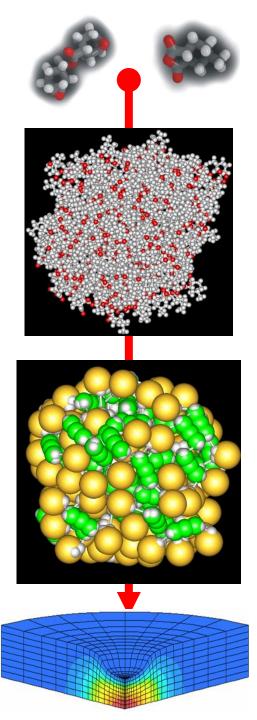
Что позволяет делать компьютерное моделирование?

#### <u>Input</u>

Химическое строение, Количественные соотношения, Физическое окружение Моделирование

#### **Output**

Структурные и физические свойства



# ОСНОВНЫЕ "УРОВНИ" ОРГАНИЗАЦИИ НАНОКОМПОЗИТОВ И МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

#### Квантово-механический Уровень

- О Решение уравнения Шредингера
- О Учитывается электронная структура атомов
- О Дает информацию о межатомных и межмолекулярных силах и физико-химических свойствах

#### Молекулярно-механический уровень

- О Законы классической механики и статистической физики
- О Наименьший элемент структуры атом
- О Требуется параметризация валентно-силового поля
- О Дает информацию о физических свойствах

#### Мезоскопический

- О Законы классической физики, интегральные уравнения
- О Упрощенное представления о молекулах
- О Требуется параметризация валентно-силового поля

#### Континуальный

- О Решение краевой задачи
- О Механика сплошных сред, гидродинамика
- Теория упругости и т.д.

# **КОНЦЕПЦИЯ МНОГОМАСШТАБНОСТИ**

**1A** 

1нм

 $1\mu M$ 

# Технологический уровень изучаемого процесса массообмен раствор растворитель коагулянт профиль концентраций растворительное профиль концентраций растворитель коагулянт профиль концентраций растворительное профиль концентраций

Характерные

масштабы

Направленное создание подобных материалов и устройств с требуемыми свойствами и параметрами невозможно без предварительного моделирования соответствующих структур и процессов с использованием теоретических методов расчета

• Для наноматериалов и наноустройств характерно существование иерархии масштабов от частиц с размерами порядка нескольких нанометров до собственно материалов и устройств, имеющих макроскопические размеры

# **Характерные времена**

ГОД

час

минута

секунда

микросекунда

наносекунда

пикосекунда

фемтосекунда



**1**MM

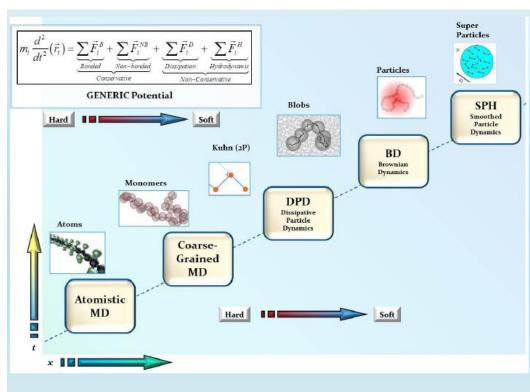
метр

# СУЩЕСТВУЮЩИЕ ПРОГРАММНЫЕ ПАКЕТЫ

(freeware)

- **PACKMOL** (<a href="http://www.ime.unicamp.br/~martinez/packmol/home.shtml">http://www.ime.unicamp.br/~martinez/packmol/home.shtml</a>) позволяет создавать начальные конфигурации для моделирования в рамках молекулярной динамики путем упаковки молекул в определенных областях пространства (freeware)
- **OCTA Project** (<a href="http://octa.jp/">http://octa.jp/</a>) пакет многоуровневого моделирования с простейшими средствами манипулирования молекулами
- **CASTEP** (<a href="http://www.castep.org/">http://www.castep.org/</a>) код, разработанный академическими группами из Великобритании, для моделирования материалов из первых принципов и квантово-механического описания электронов и ядер методами плоско-волнового базисного множества и псевдопотенциалов
- LAMMPS (<a href="https://lammps.sandia.gov/">https://lammps.sandia.gov/</a>) программный пакет для моделирования в рамках классической молекулярной динамики на атомистическом и мезомасштабном уровне полимерных, биологических и металлических систем с использованием методов силовых полей и граничных условий
- SCD Materials Modeling Software пакет программ, разработанный в лаборатории Дарсбери, включающий инструменты для различных уровней моделирования: квантово-химического, молекулярного (DL\_POLY), мезоскопического (DL MESO, поддерживает методы DPD и LBE)
- Computational Soft Materials (COMSOFT) Workbench ПО, разработанное при участии NIST, ITL и MLL, в ходе проекта по разработке программной инфраструктуры для многоуровневого (атомистического и крупнозернового) моделирования «мягких» материалов (полимеры, полимерные композиты, коллоиды, и гели) для Инициативы по исследованию материала генома

#### Уровни моделирования COMSOFT



#### **Multiscale Modeling**

Atoms to Component Description of Materials

# СУЩЕСТВУЮЩИЕ ПРОГРАММНЫЕ ПАКЕТЫ

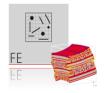
(коммерческие)

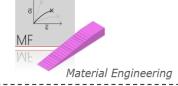
- Materials Studio (BIOVIA)
   (https://www.3dsbiovia.com/products/collaborative-science/biovia-materials-studio/)
- DIGIMAT (MC Software)
- Materials Science Suite (Schrodinger LLC)
- GeoDict (Math2Market Gmbh)
- COMSOL Multiphysics (COMSOL)
- MAPS (Material and Process Simulation) (Scienomics)
- ADF Modeling Suite (Software for Chemistry & Materials B.V. (SCM))
- Mode A Software (Materials Design Inc.)
   <a href="https://www.materialsdesign.com/?ct=t%28EMAIL CAMPAIGN 2020 Webinar Medea VASP 03 20%29">https://www.materialsdesign.com/?ct=t%28EMAIL CAMPAIGN 2020 Webinar Medea VASP 03 20%29</a>

#### Уровни моделирования DIGIMAT

#### **MICRO LEVEL**

- Virtual Material
  - Direct Engineering





← experiments

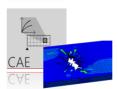
#### **MACRO LEVEL**

Structural Engineering

- Data management
  - Reverse Engineering

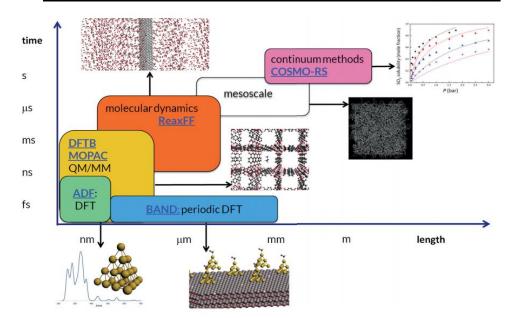


Mapping

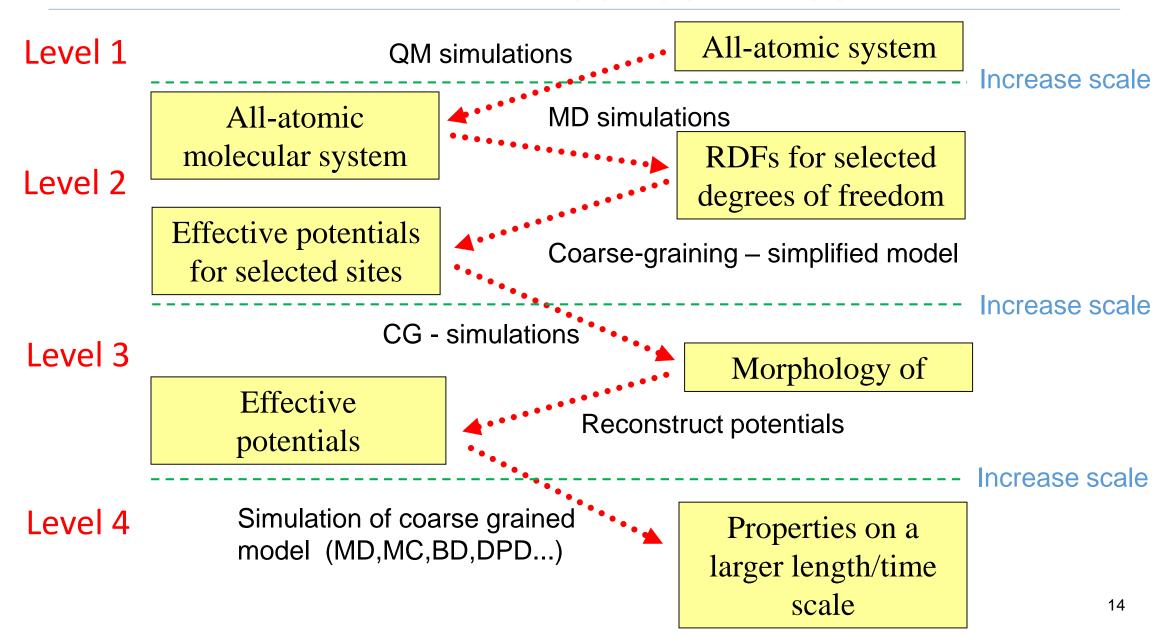




#### Уровни моделирования ADF Modeling Suite



# МНОГОМАСШТАБНЫЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ



# **MULTICOMP** - ПРОГРАММНЫЙ ПАКЕТ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

#### Назначение пакета Multicomp

- ▶Применяется для многоуровневого предсказательного моделирования морфологии, тепловых и механических свойств нанокомпозитов с полимерной матрицей
- Пакет разработан специально для высокопроизводительного скрининга материалов на основе суперЭВМ
- Позволяет предсказывать свойства материала:
  - структурные
  - механические
  - термофизические
  - транспортные

#### Преимущества пакета Multicomp

- 1. Эффективная система управления научными расчетами (scientific workflow) для автоматизации вычислений
- 2. Интеграция моделей расчета свойств нанокомпозитов с микро-,мезо- и макроуровней
- 3. Клиент-серверная архитектура для использования удаленных высокопроизводительных вычислительных ресурсов (НРС)
- 4. Поддержка различных систем управления задачами
- 5. Коллективная работа:
  - многопользовательская коллаборация
  - возможность обмен данными пользователями
- 5. Открытая архитектура: можно добавлять, модифицировать и заменять вычислительные модули без помощи разработчиков
- 6. Гибкость в адаптации и конфигурации
- 7. Удобный графический интерфейс пользователя
- 8. Наглядная 1D-2D-3D-визуализация расчетов <sub>15</sub>

# КОНЦЕПЦИЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ *MULTICOMP*

#### Рабочая станция

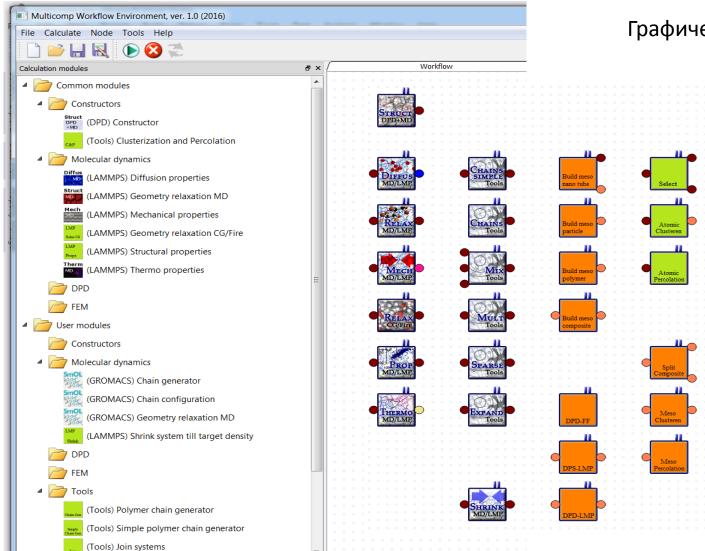


#### Кластер

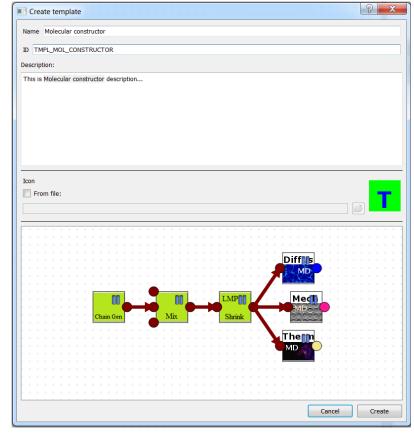


- может запускаться на пользовательских рабочих станциях под управлением ОС Windows 7 или старше, а также ОС Linux
- имеет серверную часть, которая может устанавливаться на Linux кластерах

# МОДУЛИ И ШАБЛОНЫ, ДОСТУПНЫЕ ДЛЯ КОНСТРУИРОВАНИЯ WORKFLOW, В ВИДЕ ДЕРЕВА



Графическое окно создания шаблона или комплексного модуля (вложенного workflow)



# Набор модулей

#### КОНСТРУКТОРЫ

Nano/Meso tube Generator

**Atomistic Constructor (K23)** 

**Linear Meso-polymer Generator and Mixer** 

<u>ИНСТРУМЕНТЫ</u>

**Simple Polymer Chain Generator** 

**Polymer Chain Generator** 

Multiply System by copying

**Expand System by translation** 

Join Systems.

**Sparse System into Separate Molecules** 

Mix Systems

**Select and Split** 

#### РЕАЛИЗАЦИЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ

**Geometry relaxation CG/Fire** 

**Geometry relaxation MD** 

**Shrink system till target density** 

**Meso Structure Relaxation MD** 

**Meso Structure Relaxation CG** 

РАСЧЕТ И АНАЛИЗ СВОЙСТВ

**Mechanical properties** 

Thermo properties

**Diffusion properties** 

**Structural properties** (плотность, RDF, XRD, SAED,

пористость)

Clusterization

**Percolation** 

**Atomic Percolation** 

**Mesoscopic Percolation** 

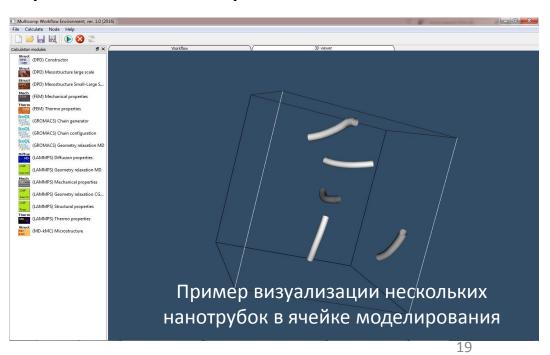
### ОТОБРАЖЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

- Отображение результатов производится с помощью модуля интерактивной 1D/2D/3D визуализации состоящего из 2x блоков: 1D визуализации и 2D/3D визуализации
- Блок 1D визуализации состоит из встраиваемого окна отображения функциональных зависимостей, отдельной формы, содержащей окно отображения и панель инструментов, окна настройки параметров отображения и вспомогательных окон
- Блок 2D/3D визуализации состоит из встраиваемого окна отображения 2D/3D объектов и сеток и отдельной формы, содержащей окно отображения, главное меню и панель инструментов

#### Встраиваемое окно отображения функциональных зависимостей

# Radial Distribution Function (RDF) Radial Distribution Function (

#### Встраиваемое окно отображения 2D/3D объектов и сеток



# НАБОР РАСЧЕТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ДЛЯ ПОЛИМЕРОВ И НАНОКОМПОЗИТОВ

- 1	Структурные характеристики	
	Свойство	Пост обработчик
1	Радиальные функции распределения g(r)	
2	Структурный фактор S(q)	рассеяние излучения – рентген, рассеяние излучения –нейтроны
3	Микропористость	средний размер сечения пустот, распределение по размерам пустот
4	Пространственное распределение наночастиц	перколяция, кластеризация
5	Топология полимерной сетки	mesh size, среднее расстояние между сшивками, распределение сшивок по объему, число проходных цепей на разных сечениях ячейки, число циклов и деревьев в сетке
Ш	Механические свойства (рассчитываются при 1,2х осных растяжениях/сжатиях, 3х осных сжатиях)	
1	Распределение напряжений в объеме материала	
2	Кривая stress/strain	
3	Модуль Юнга, Poisson ratio	
4	Модуль динамических потерь	
Ш	Теплофизические свойства	
1	Кривая плотность/температура	
2	Tg, коэф. линейного и объемного расширения	
3	Теплопроводность	
IV	Диффузия	
1	Коэф. диффузии для O2,N2,CO,CO2,NH4,Ar	20
2	Растворимость	20

#### ФОРМАТ ХРАНЕНИЯ ДАННЫХ

- Исходя из анализа разработки и применения существующих пакетов многомасштабного моделирования, разработчиками пакета сделан вывод о том, что наиболее удобным способом хранения и обмена данными в процессе многоуровневого моделирования является XML формат
- Данные в рамках комплекса хранятся в структурированном виде и сохраняются в XML формате
- Графический пользовательский интерфейс комплекса позволяет просматривать и редактировать эти данные, а также добавлять новые
- Кроме того, через интерфейс возможен импорт данных в комплекс из выходных файлов внешних программ

```
<species_molecule_name01 units="A">
    <Cell a1="4.5000e+001" b2="4.500e+001" c3="4.5000e+001"/>
    <Atoms>
     <a href="Atom"></a> name="C" number="0" back bone="true" charge="7.0200002193450928e-001">
      <XYZ>1.18043 2.35885 0.106786 </XYZ>
     </Atom>
     <Atom name="C" number="1" charge="-5.2999999374151230e-002">
      <XYZ>-0.170752 1.68774 -0.205387 </XYZ>
     </Atom>
     <Atom name="C" number="2" charge="-1.0599999874830246e-001">
      <XYZ>-1.26897 2.1346 0.765265 </XYZ>
     </Atom>
     <Atom name="C" number="3" charge="-1.0599999874830246e-001">
      <XYZ>-2.58008 1.41118 0.391131 </XYZ>
     </Atom>
     <Atom name="C" number="4" charge="-5.2999999374151230e-002">
      <XYZ>-2.3097 -0.0672599 0.0422251 </XYZ>
     </Atom>
     <Atom name="C" number="5" charge="-5.2999999374151230e-002">
      <XYZ>0.118611 0.21141 0.134914 </XYZ>
     </Atom>
     <a href="Atom name="C" number="6" charge="-1.0599999874830246e-001">
      <XYZ>-1.06686 -0.484611 0.837552 </XYZ>
     </Atom>
     <Atom name="O" number="7" back bone="true" charge="-3.4200000762939453e-001">
      <XYZ>2.14333 1.60069 0.988769 </XYZ>
     </Atom>
    </Atoms>
    <Bonds>
     <Bond atom1="4" atom2="6"/>
     <Bond atom1="0" atom2="1"/>
     <Bond atom1="5" atom2="6"/>
     <Bond atom1="1" atom2="5"/>
     <Bond atom1="1" atom2="2"/>
     <Bond atom1="0" atom2="7"/>
     <Bond atom1="3" atom2="4"/>
     <Bond atom1="2" atom2="3"/>
    </Bonds>
                                                                           21
   </species molecule name01>
```

# АРІ ДЛЯ ИНТЕГРАЦИИ МОДУЛЕЙ В ПРОГРАММНЫЙ ПАКЕТ

#### Module integration requires:

- 1) Module description using xml-file
- 2) J-script codes for input file generation and parsing of output files (optional)

#### Module description xml-file includes description of:

- unique module name, id, icon, hints, etc
- input/output files
- input/output ports
- module input parameters
- module visualization in GUI
- run module cases

#### J-script code in generator and parser has access to:

- input/output files
- input/output ports
- parameters in module
- built-in data converter

The set of predefined data types is provided for input parameters together with corresponding GUI primitives.

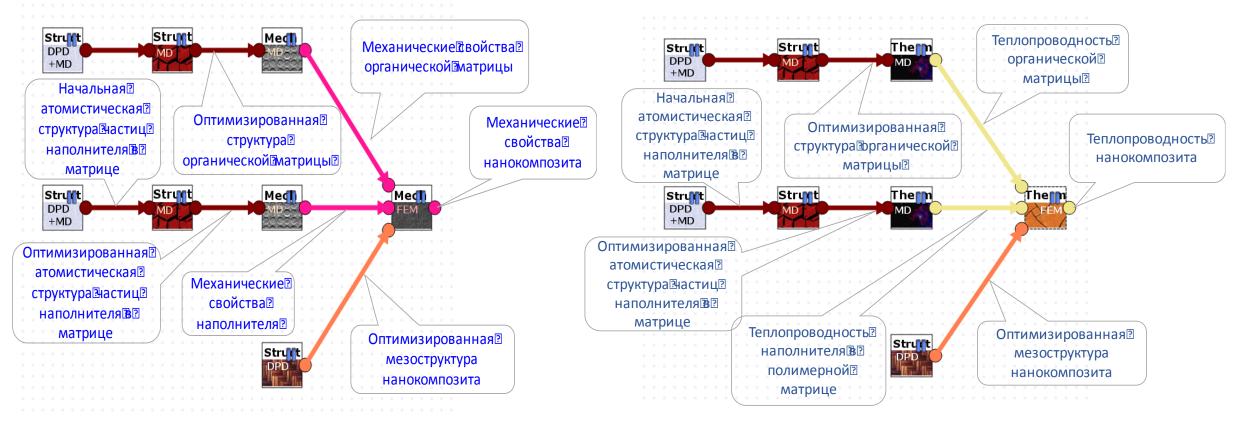
The set of predefined result data types is provided for output of calculation and presented in "Result and Logs" GUI system.

# СХЕМА ПЕРЕДАЧИ ДАННЫХ МЕЖДУ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫМИ МОДУЛЯМИ

Схема передачи данных между вычислительными модулями для расчета механических свойств композита

Схема передачи данных между вычислительными модулями для расчета теплопроводности композита

23



• Схемы передача данных обеспечивают возможность проведения многоуровневых расчетов физических свойств нанокомпозитов посредством передачи результатов расчетов между различными уровнями моделирования. При этом используются форматы передачи данных, разработанные на предыдущем этапе.

# СХЕМА ОБМЕНА ДАННЫМИ В ПАКЕТЕ



- Расчетные модули могут напрямую поддерживать XML формат файла сценария расчета пакета в качестве формата своих входных и выходных файлов.
- Для вычислительных модулей, не поддерживающих XML формат, осуществляется преобразование входных/выходных данных из формата пакета в формат модуля с применением комплектов программ управления преобразованием (скриптов).
- Для работы скриптов генерации и считывания файлов модуль обмена предоставляет соответствующий API.

# МОДУЛЬ ОБМЕНА ДАННЫМИ

#### Модуль обмена данными

Блок анализа управляющих параметров

Блок работы со сценариями

Блок описания модулей Адаптер выполнения скриптов

API для интеграции модулей

#### Конверторы

- MSI
- PDB
- DPD

- Модуль обмена данными предназначен для генерации входных файлов расчетных модулей на основе данных сценария расчета, считывания выходных файлов расчетных модулей в сценарий расчета и считывания данных из выходных файлов внешних программ в сценарий расчета.
- Модуль может работать в следующих режимах:
  - Подготовка
  - Генерация
  - Считывание
  - Ошибка
  - Журналирование
- При работе в составе пакета модуль обмена данными в режиме считывания результатов расчетных модулей работает в автоматическом (без участия пользователя) режиме.

## СИСТЕМА ЗАПУСКА РАСЧЕТНЫХ МОДУЛЕЙ

Модуль системы запуска расчетных модулей состоит из следующих блоков:

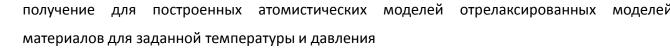
- блок считывания файла описания расчетных модулей
- блок считывания файла проекта
- блок подготовки детального сценария расчета
- блок универсального диспетчера задач
- блок взаимодействия с модулем обмена данных
- блок проверки статуса расчета
- блок тестирования сценария расчета

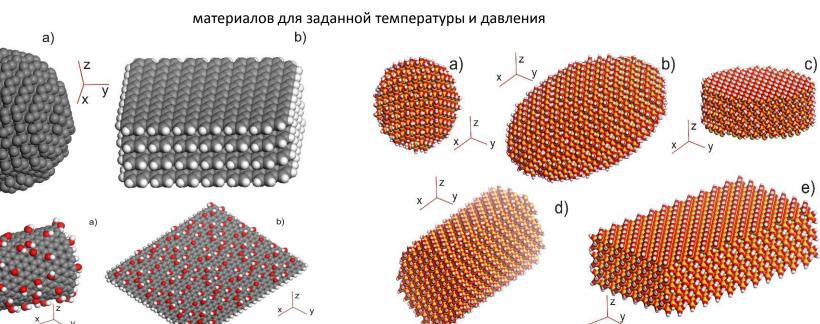
#### Функциональные возможности

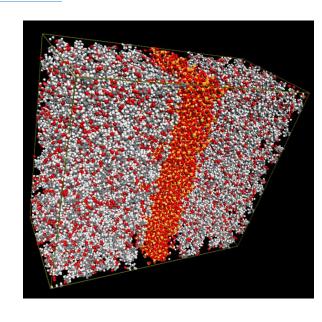
- обеспечение возможности сценариев расчета;
- обеспечение возможности запуска расчета либо на локальных, либо на удаленных вычислительных системах;
- обеспечение возможности работы с удаленными файловыми системами;
- обеспечение возможности проверки статуса расчета;
- обеспечение возможности остановки и возобновления расчета;
- обеспечение возможности повторения расчета.
- Поддержка различных систем управления задачами:
  - системы управления расчетами SLURM (https://slurm.schedmd.com/),
  - системы управления расчетами PBS (http://pbspro.org/),
  - командной оболочки bash и csh операционной системы Linux;
  - командной оболочки операционной системы Windows;
  - системы удаленного запуска ssh/rsh;
  - системы передачи данных ssh/scp;

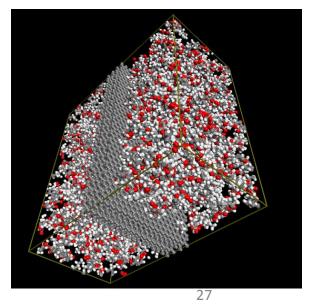
# КОНСТРУКТОР ПОЛИМЕРНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ К23

- Модуль КММ предназначен для работы в составе пакета Multicomp. Конструктор построен из связанного набора программ, созданных на основе единой многомасштабной схемы, и предназначен для выполнения следующих задач:
  - автоматическое создание атомистических моделей следующих наноматериалов:
    - і) наночастиц
    - іі) чистых полимерных матриц (расплавов мономеров, густо- и редкосшитых сеток)
    - ііі) полимерных матриц заключенных между твердыми поверхностями
    - iv) полимерных матриц с внедренными дискретными частицами наполнителя

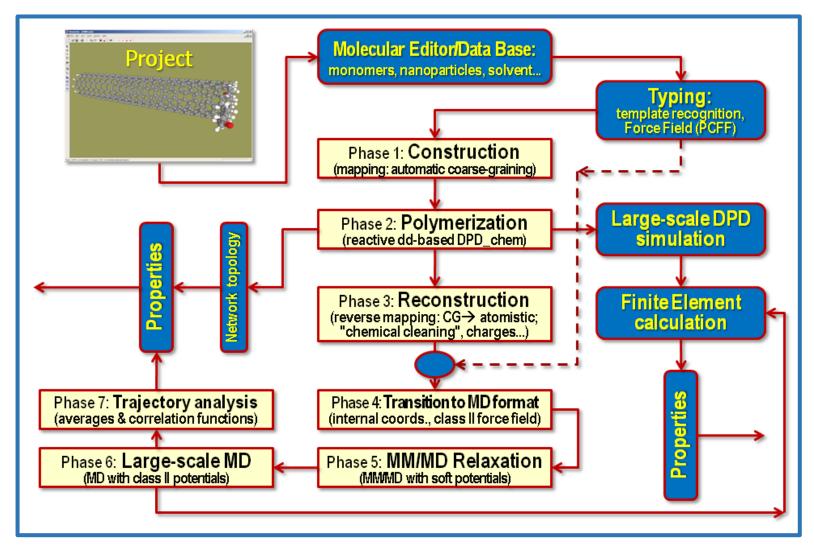








#### ЛОГИЧЕСКАЯ СХЕМА КОНСТРУКТОРА ПОЛИМЕРНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ



Автором концепции данного конструктора и его программной реализации является проф. П.Г. Халатур (ИНЭОС РАН)

# ИСПОЛЬЗУЕМОЕ ВАЛЕНТНО-СИЛОВОЕ ПОЛЕ

- Молекулярная механика + BCП PCFF
- PCFF базируется на расширенной версии CFF91 и принадлежит к семейству силовых полей CFF
- На основе PCFF разработано BCП COMPASS (которое, по сути, является новой версией PCFF)
- PCFF хорошо воспроизводит свойства углеводородов, белков, белок-лигандных взаимодействий
- PCFF может быть использовано для прогнозирования: колебательных частот, конформационной энергии, торсионных барьеров, кристаллических структур, плотность энергии когезии, энергии сублимации и др.
- PCFF содержит такие атомы основные легкие атомы (H, C, Si, N, P, O, S, F, Cl, Br, I, He, Ne, Kr, Xe.), ионы галогенов, катионы щелочных металлов и несколько биохимически важных двухвалентных металлических катионов

#### polymer-consistent force field (PCFF)

H. Sun

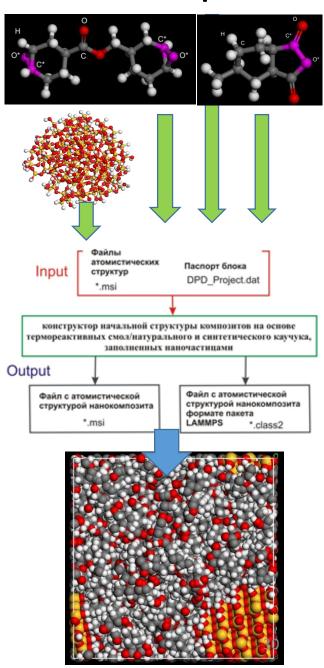
Macromolecules, 1995, 28 (3), 701-712 - DOI: 10.1021/ma00107a006

$$\begin{split} E_{\text{total}} &= \sum_{b} \left[ k_{2} (b - b_{\circ})^{2} + k_{3} (b - b_{\circ})^{3} + k_{4} (b - b_{\circ})^{4} \right] + i. \\ &\sum_{\theta} \left[ k_{2} (\theta - \theta_{\circ})^{2} + k_{3} (\theta - \theta_{\circ})^{3} + k_{4} (\theta - \theta_{\circ})^{4} \right] + ii. \\ &\sum_{\theta} \left[ k_{1} (1 - \cos \phi) + k_{2} (1 - \cos 2\phi) + k_{3} (1 - \cos 3\phi) \right] + iii. \\ &\sum_{\chi} k_{2} \chi^{2} + \sum_{b,b'} k(b - b_{\circ})(b' - b'_{\circ}) + iii. \\ &\sum_{\chi} k_{2} \chi^{2} + \sum_{b,b'} k(b - b_{\circ})(b' - b'_{\circ}) + iii. \\ &\sum_{\chi} k_{1} (b - b_{\circ})(\theta - \theta_{\circ}) + \sum_{\chi} (b - b_{\circ}) \left[ k_{1} \cos \phi + k_{2} \cos 2\phi + k_{3} \cos 3\phi \right] + \sum_{\theta,\phi} (\theta - \theta_{\circ}) \left[ k_{1} \cos \phi + k_{2} \cos 2\phi + k_{3} \cos 3\phi \right] + \sum_{\theta,\phi} k(\theta' - \theta'_{\circ})(\theta - \theta_{\circ}) + iii. \\ &\sum_{\chi} k_{1} (\theta - \theta_{\circ})(\theta' - \theta'_{\circ})\cos \phi + \sum_{\chi} \frac{q_{1}q_{1}}{r_{y}} + iii. \\ &\sum_{\chi} k_{1} (\theta - \theta_{\circ})(\theta' - \theta'_{\circ})\cos \phi + \sum_{\chi} \frac{q_{1}q_{1}}{r_{y}} + iii. \\ &\sum_{\chi} \epsilon_{ij} \left[ 2 \left( \frac{r_{ij}}{r_{ij}} \right)^{9} - 3 \left( \frac{r_{ij}}{r_{ij}} \right)^{6} \right]_{\chi} iii. \end{split}$$

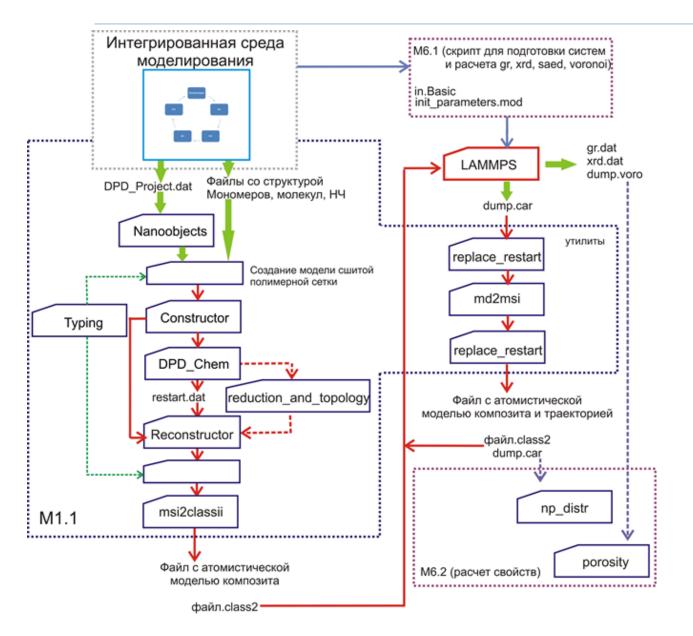
# ВВОД/ВЫВОД КОНСТРУКТОРА К23

- Взаимодействие КММ с другими компонентами пакета Мультикомп происходит через обмен файлами данных фиксированного формата. Управление конструктором выполняется посредством передачи параметров через графический пользовательский интерфейс
- В настоящее время базовой программой молекулярно-динамического моделирования, которая может использоваться для релаксации образцов микроскопических и мезоскопических моделей молекулярных систем, является программный пакет LAMMPS
- Связи между перечисленными программами определяются сценариями запуска. На данном этапе разработки предусмотрены два основных сценария выполнения блока:
  - создание модели композита без релаксации. В этом случае предполагается последовательный вызов следующих программ: Nanoobjects  $\rightarrow$  Typing  $\rightarrow$  Constructor  $\rightarrow$  DPD\_Chem  $\rightarrow$  Reconstructor  $\rightarrow$  Typing  $\rightarrow$  Msi2classII
  - создание модели композита с последующей релаксацией. Предполагается последовательный вызов следующих программ: Nanoobjects → Typing → Constructor → DPD\_Chem → Reconstructor → Typing → Msi2classII → Md\_class2 (режим ММ минимизации) → Replace\_restart → Md\_class2 (режим МД минимизации) → Replace\_restart → Md2msi

#### Паспорт



## ЛОГИЧЕСКАЯ СХЕМА КОНСТРУКТОРА К23

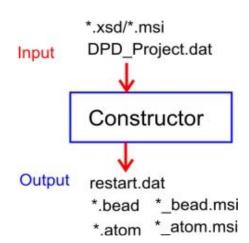


- Nanoobjects программа автоматического построения наночастиц
- Typing программа распознавания типов атомов содержащихся в ВСП РСFF
- *Constructor* программа построения огрубленных моделей молекулярных структур
- DPD\_Chem программа моделирования химических реакций на основе метода диссипативной динамики частиц
- Reconstructor программа восстановление атомистической структуры
- Msi2classII программа формирования входных файлов для моделирования в рамках метода атомистической молекулярной механики и молекулярной динамики (ММ/МД)
- Md\_class2 программа ММ/МД, моделированная на основе кода пакета LAMMPS
- Replace\_restart программа перезаписи входных данных для Md\_class2 из результирующих файлов моделирования
- Md2msi программа создания файлов визуализации из результирующих файлов программы Md\_class2

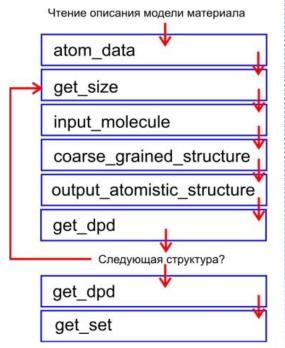
# ПРИМЕРЫ ПОСТРОЕНИЯ НЕКОТОРЫХ МОДУЛЕЙ В СОСТАВЕ К23

#### **Constructor**

Входные/выходные файлы модуля

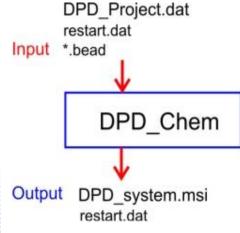


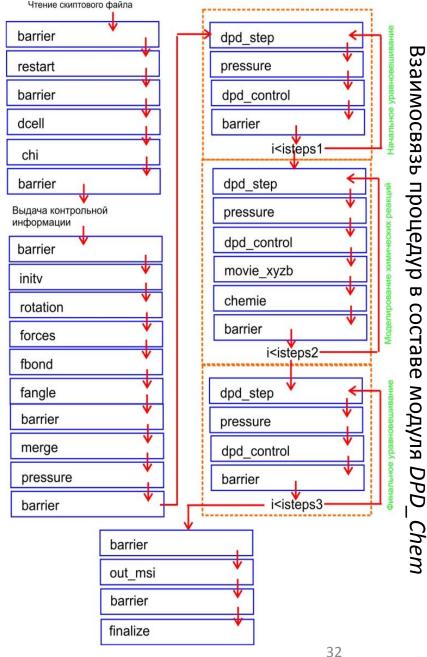
Взаимосвязь процедур в составе модуля



#### **DPD** Chem

Файлы ввода/вывода модуля





• # CONSTRUCTOR section:

Паспорт

Nanoobjects

Constructor

Reconstructor

replace restart

replace restart

md2msi

mpiexec -localonly 2 DPD Chem

mpiexec -localonly 2 Md\_class2 < in.MD\_RELAX

mpiexec -localonly 2 Md class2 < in.MD SIMUL

**FFTyping** 

**FFTyping** 

msi2classII

Вызов модулей

project name Epoxy SWNT

• species molecule cacb 0.60

• species molecule ep\_2 0.30

• species particle cnt 0.10 1 8.7 50.3

• system density 1.200

• cg\_level 1.0

• box size 45.0 45.0 45.0

# DPD CHEM section:

periodic\_box 3

time\_step 0.01

relaxation\_time\_1 10000

reaction\_time 40000

reaction\_frequency 200

relaxation time 2 10000

output\_frequency 1000

• dpd\_parameters 11 25.0 0.0100

dpd\_parameters 2 2 25.0 0.0000

dpd\_parameters 3 3 120.0 0.0000

• dpd\_parameters 1 2 25.0 0.1000

dpd\_parameters 1 3 120.0 0.0000

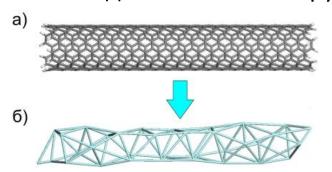
• dpd\_parameters 2 3 120.0 0.0000

xyzb\_movie

end

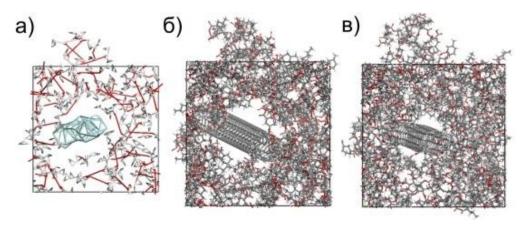
# ПРИМЕР АВТОНОМНОЙ РАБОТЫ КОНСТРУКТОРА К23

#### Одностенная нанотрубка



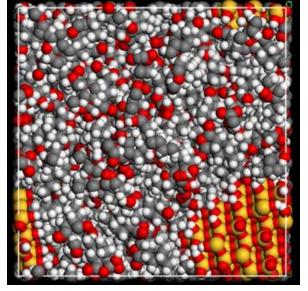
- a) Атомистическая модель одностенной углеродной нанотрубки (построенная программой Nanoobjects);
- б) СG-модель нанотрубки. В паспорте DPD- частицам модели наночастицы соответствует номер 3

#### Модель нанокомпозита



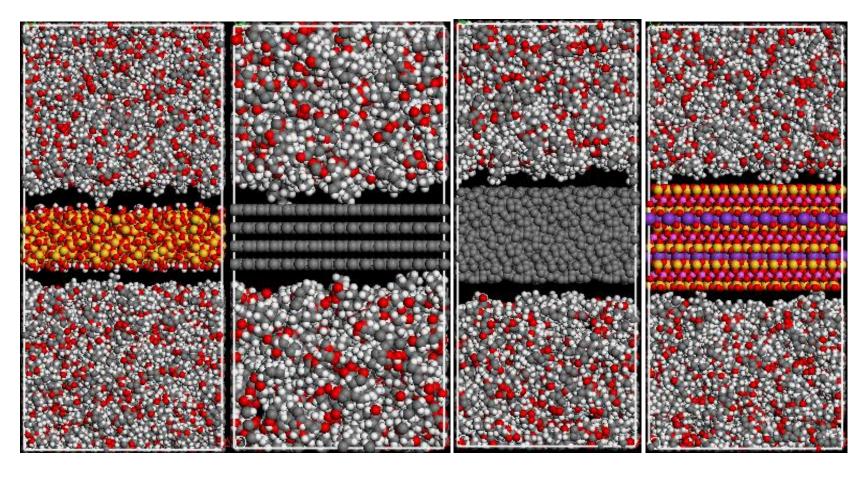
Модель матрицы эпоксидной смолы (получаемой из мономеров 3,4-эпоксициклогексилметил-3,4-эпоксициклогексан-карбоксилата и отвердителя 4-ангидрида метилгексагидрофталевой кислоты) с одностенной углеродной нанотрубкой. а) СG-модель, б) восстановленная атомистическая модель, в) модель после процедуры релаксации

Эластомер+SWNT



Эпоксидная смола +SiO2

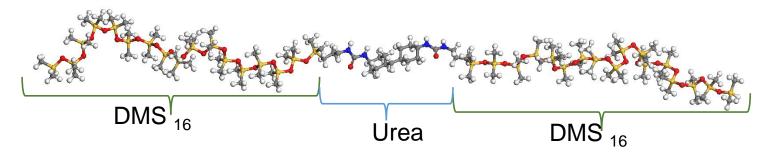
# ПРИМЕРЫ ПОСТРОЕННЫХ ОБРАЗЦОВ ПОЛИМЕРНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ



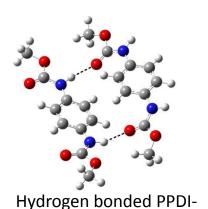
Эпоксидная смола на различных подложках

# ПРИМЕР РАСЧЕТА СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ СИЛИКОН-МОЧЕВИННОГО БЛОК-СОПОЛИМЕРА

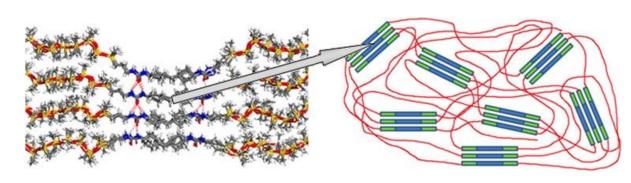
Силикон-мочевинный блоксополимер (TPSU), содержащий неполярные блоки из полидиметилсилоксана (PDMS) и полярные блоки на основе бис(4-изоцианатоциклогексил)метана (HMDI)



Модель формирования межцепных ассоциатов по литературным данным



urethane dimer

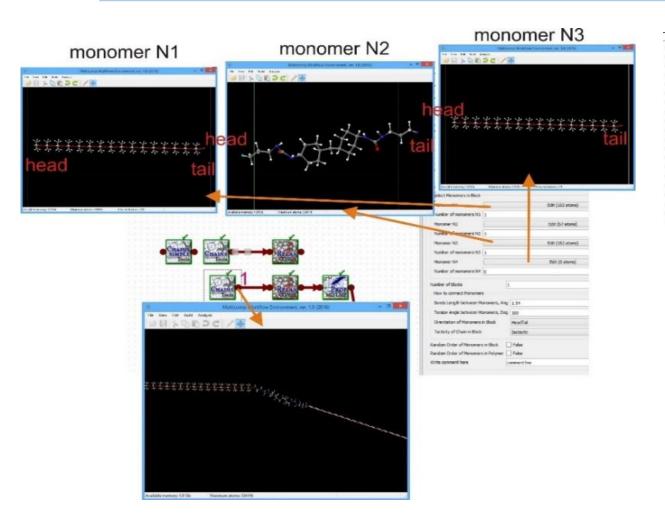


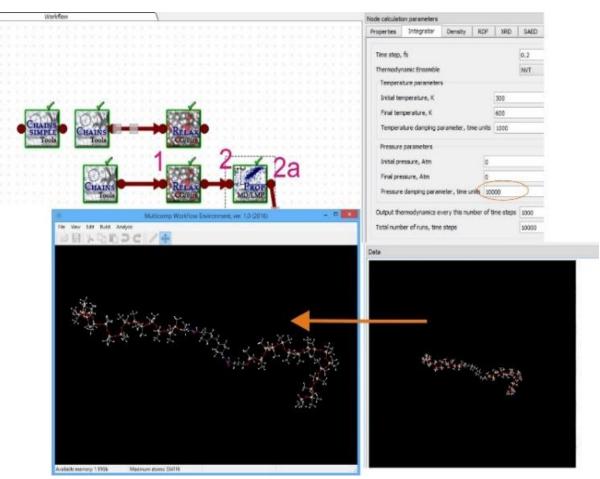
Aggregation of the hard segments as a result of H-bonding

Aggregation of urea hard segments in the PDMS matrix

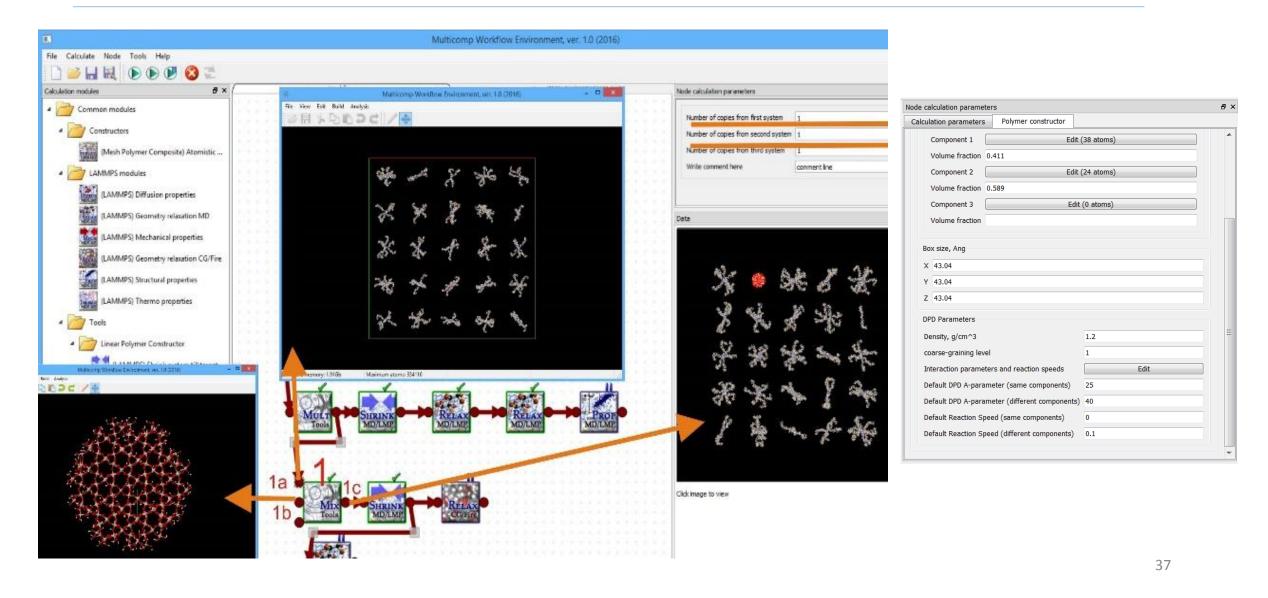


# ПОСТРОЕНИЯ ЦЕПИ PDMS $_{16}$ —HMDI—PDMS $_{16}$ ИЗ ДВУХ ПРЕДВАРИТЕЛЬНО ПОДГОТОВЛЕННЫХ СОМОНОМЕРОВ PDMS $_{16}$ И HMD

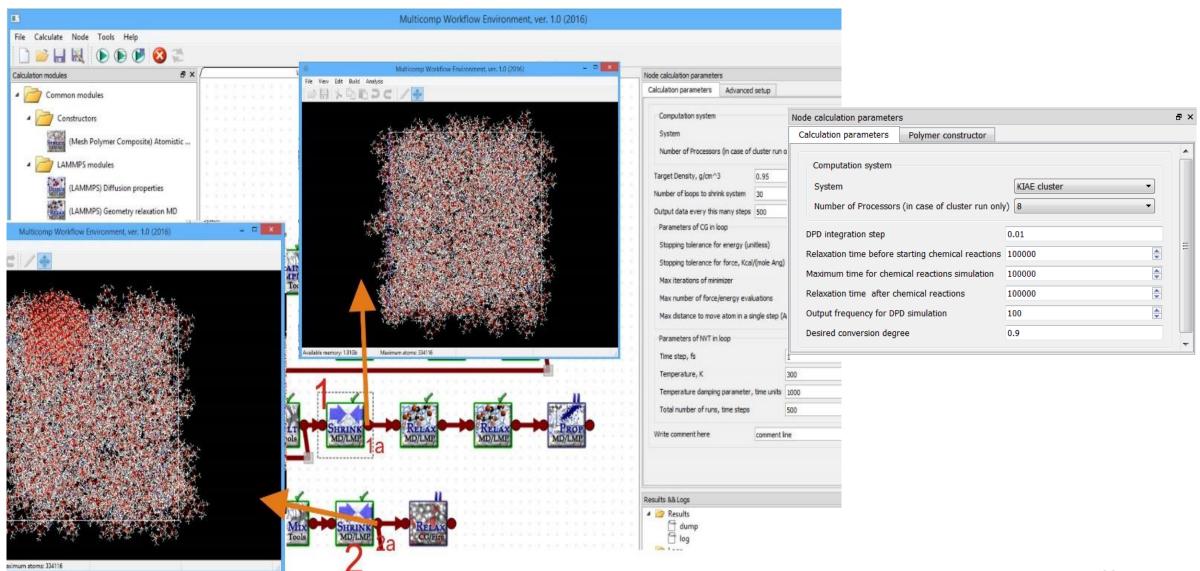




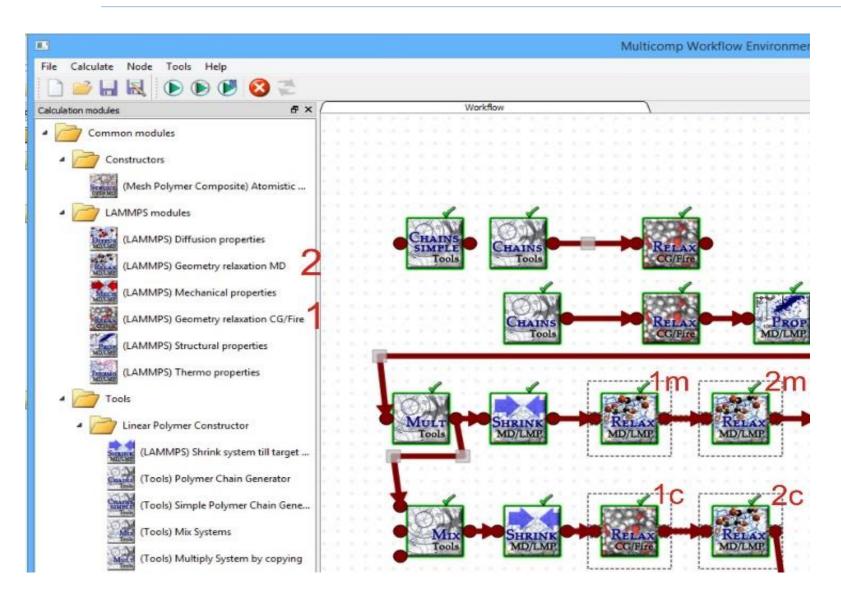
### КОМБИНИРОВАНИЕ МАТРИЦЫ И НАНОЧАСТИЦЫ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ С ПОМОЩЬЮ ИНСТРУМЕНТА MIX SYSTEM



## СЖАТИЕ ОБРАЗЦОВ МАТРИЦЫ И НАНОКОМПОЗИТА ДО ЗАДАННЫХ ПЛОТНОСТЕЙ ИНСТРУМЕНТОМ SHRINK SYSTEM BY TARGET DENSITY

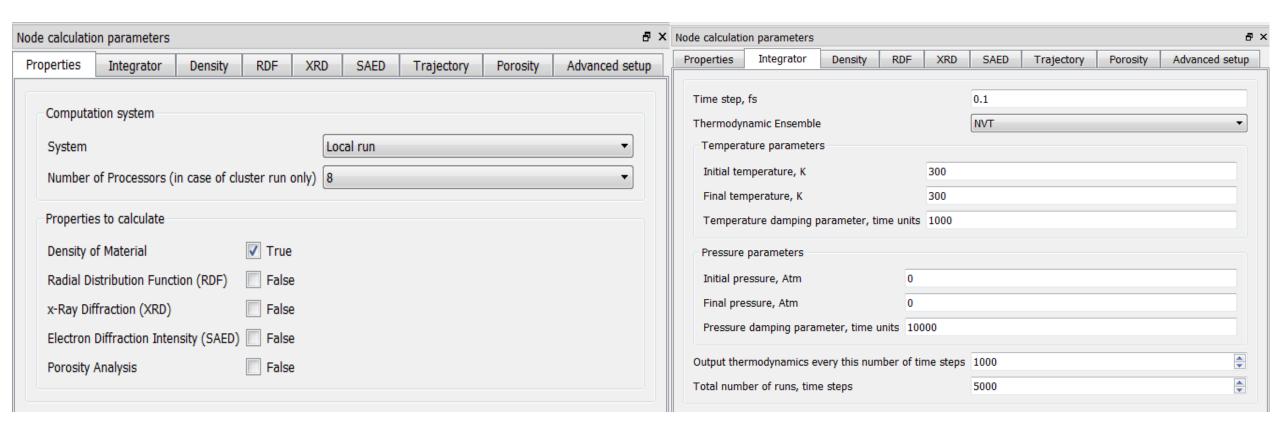


## РЕЛАКСАЦИЯ ОБРАЗЦОВ МАТРИЦЫ И НАНОКОМПОЗИТА С ПОМОЩЬЮ ИНСТРУМЕНТОВ GEOMETRY RELAXATION CG/FIRE (1) И GEPMETRY RELAXATION MD (2)

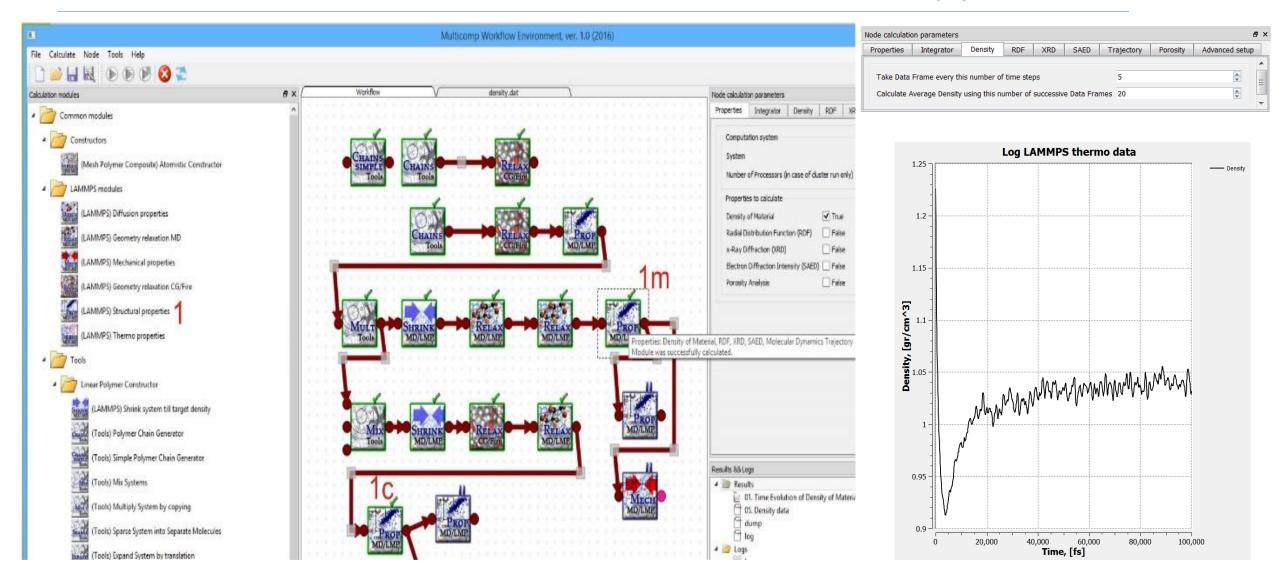


Node calculation parameters				₽×
Calculation parameters Advanced setup				
Computation system				
System	Local r	un	•	
Number of Processors (in case of cluster rur			<b>-</b>	
Time day fo				
Time step, fs Ensemble	0.1		<b>-</b>	
Temperature parameters	INVI			
Initial temperature, K	300			
Final temperature, K	300			=
Temperature damping parameter, time units	s 1000			
Pressure parameters				
Initial pressure, Atm 0				
Final pressure, Atm 0				
Pressure damping parameter, time units 10	0000			
Output thermodynamics every this time steps 1000				
Total number of runs, time steps	1000		<u> </u>	
Total number of runs, time steps	1000		₩.	-
Node calculation parameters				₽×
Calculation parameters Advanced setup				
Computation system				
System		Local run	•	]
Number of Processors (in case of cluster run only) 8				
Minimizer C	c			-
,	nit cell is fixe	a .		_
Parameters of Algorithm				
Stopping tolerance for energy (unitless)		0.0001		
Stopping tolerance for force, Kcal/(mole Ang)		0.0001		
Max iterations of minimizer		2000	*	
Max number of force/energy evaluations		2000	<u> </u>	
Max distance to move atom in a single step (Ang)		1) 0.01		
		,,		
Output data every this many steps 10				<b>-</b>
			39	

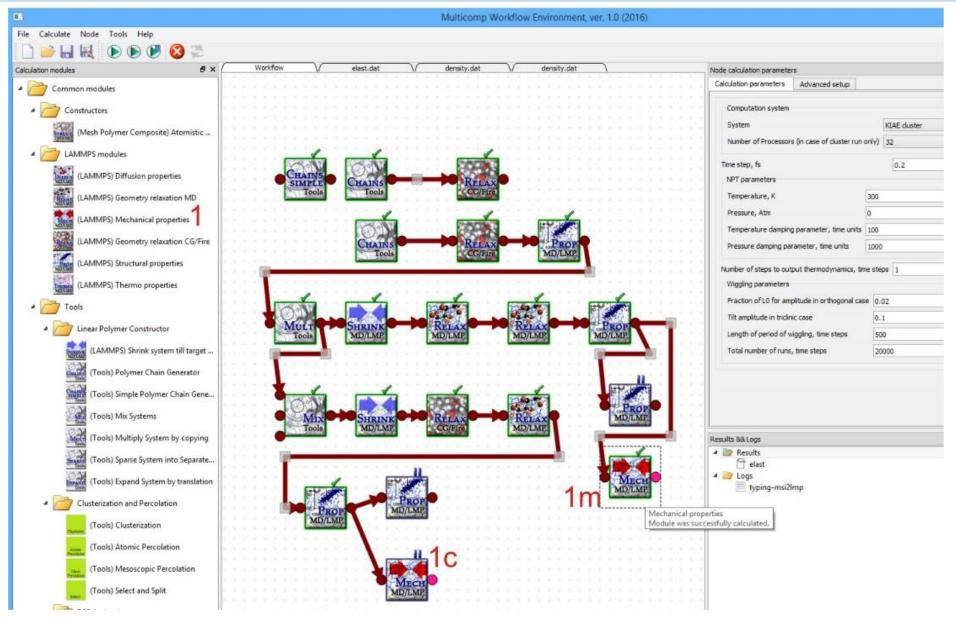
### ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ОБРАЗЦОВ МАТРИЦЫ И НАНОКОМПОЗИТА



## ОЦЕНКА ПЛОТНОСТИ ОБРАЗЦОВ МАТРИЦЫ И НАНОКОМПОЗИТА С ПОМОЩЬЮ ИНСТРУМЕНТА STRUCTURAL PROPERTIES (1)



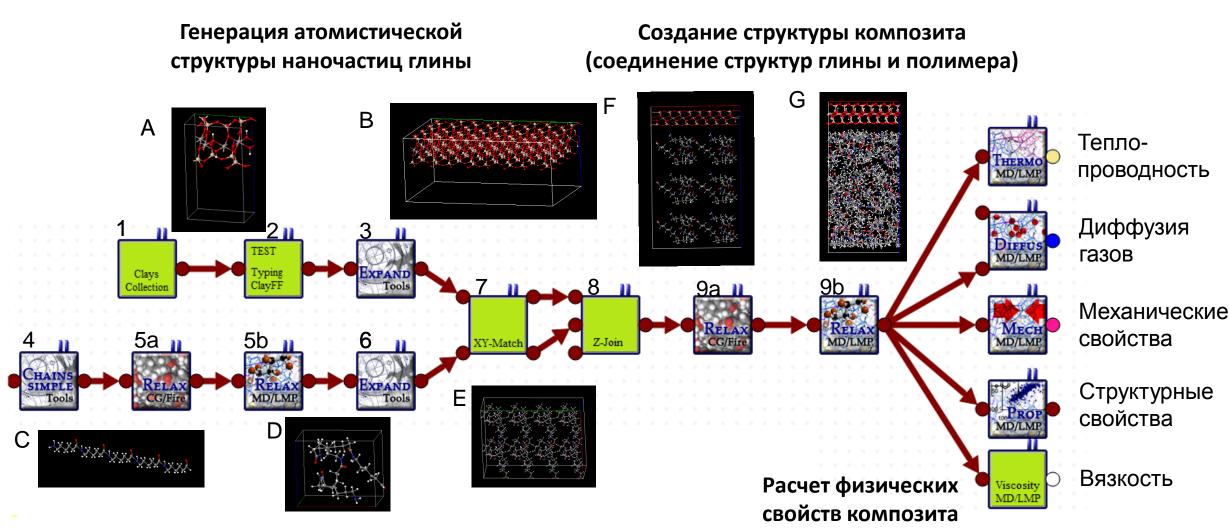
# РАСЧЕТ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОБРАЗЦОВ МАТРИЦЫ И НАНОКОМПОЗИТА С ПОМОЩЬЮ ИНСТРУМЕНТА MECHANICAL PROPERTIES (1)



## ЧТО ДАЛЬШЕ?

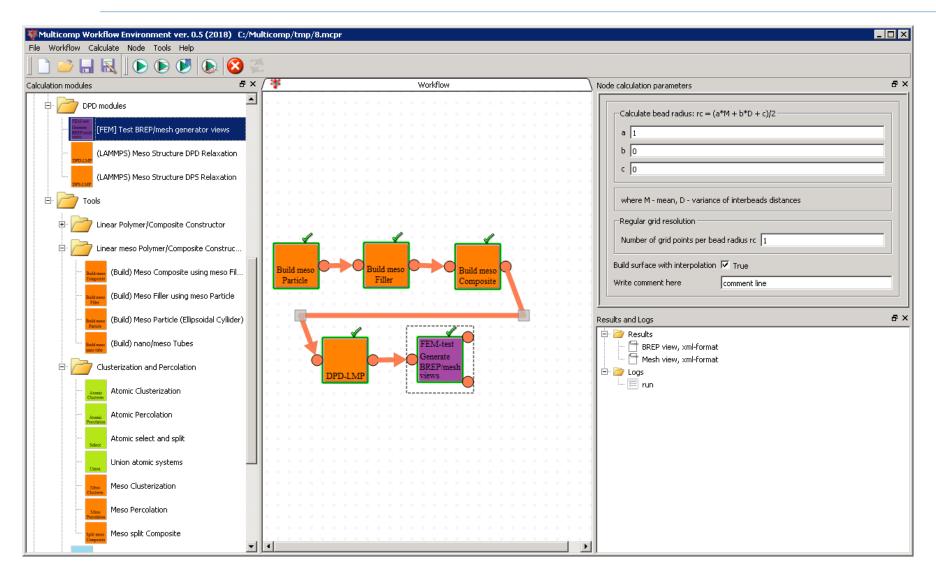
- ОПИСАНИЕ, ДОКУМЕНТАЦИЯ
- ДОРАБОТКА
  - ПОДДЕРЖКА НЕСКОЛЬКИХ ВСП
  - ПОДДЕРЖКА КОМБИНИРОВАННЫХ ВСП
  - СОПРЯЖЕНИЕ С FEM
  - БАЗА ДАННЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР

# РАСЧЕТ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИАМИДА-6 И НАНОЧАСТИЦ ГЛИНЫ (МОНТМОРИЛОНИТ)



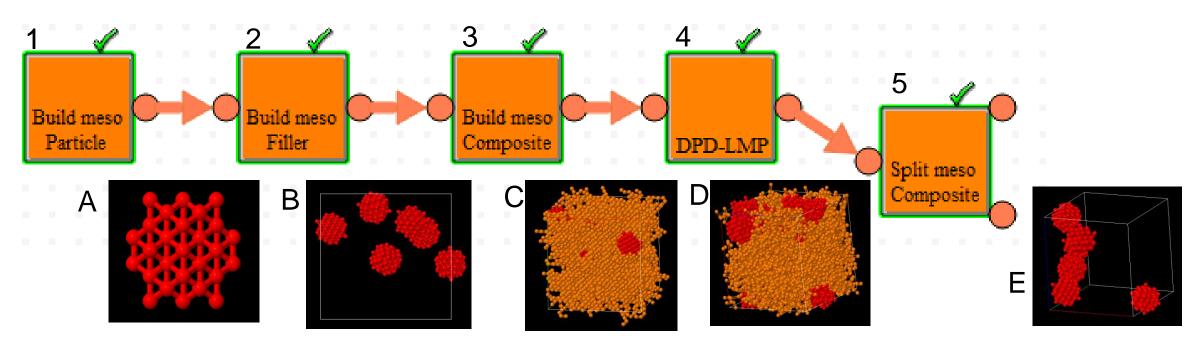
Генерация атомистической структуры полимерной матрицы

# ПРИМЕР: ПОСТРОЕНИЕ ME3OCTPУКТУРЫ ДЛЯ DPD И ГЕНЕРАЦИЯ СЕТОК ДЛЯ FEM



- 1) Build meso particle
- 2) Distribute meso particles in unit cell
- 3) Fulfil empty space of unit cell by linear meso polymer
- 4) Relax geometry using DPD Lammps
- 5) Convert DPD structure to Boundary Representation (BRep)

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСПЕРГИРОВАНИЯ HAHOЧАСТИЦ SIO2 В ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЕ НА ME3OYPOBHE METOДOM DPD

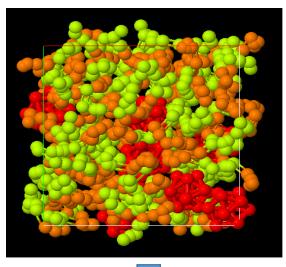


Генерация мезоструктуры наполнителя

Генерация мезоструктуры нанокомпозита и релаксация ее методом DPD

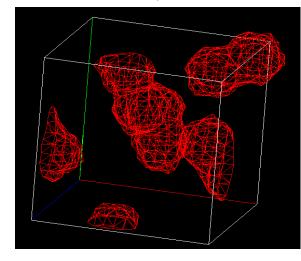
**Анализ диспергирования наночастиц** 

# ПЕРЕДАЧА ДАННЫХ ОТ МЕЗОУРОВНЯ К МАКРОУРОВНЮ: ПОСТРОЕНИЕ СЕТОК ДЛЯ FEM ИЗ МЕЗОСТРУКТУРЫ



DPD mesostructure





BREP for FEM mesh generation

Определение границ наполнителя при помощи построения изоповерхности вокруг частиц наполнителя



Применение алгоритма marching cubes для триангуляции этой изоповерхности (задание наполнителя при помощи boundary representation, BREP)



Построение 3D сетки вокруг триангулированной поверхности наполнителя

## ВЫВОДЫ

- Программный пакет *MULTICOMP* обеспечивает возможность предсказательных расчетов свойств полимерных матричных нанокомпозитов на основе многоуровневого моделирования
- Пакет *MULTICOMP* позволяет создавать гибкие сценарии расчетов с использованием высокопроизводительных вычислительных ресурсов, обеспечивая автоматическую передачу данных и контроль за выполнением расчетов
- Программный пакет *MULTICOMP* является открытой платформой, реализующей концепцию *Scientific Workflow*, и позволяет пользователям создавать свои сценарии расчета и добавлять новые расчетные модули

### ОБЛАСТИ ПРАКТИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ MULTICOMP

- Предсказание свойств полимерных матриц в зависимости от химического строения мономеров
- Предсказание изменения температуры стеклования полимерной матрицы при внедрении наноразмерного наполнителя
- ▶Предсказание изменения механических свойств полимерных матриц при внедрении наноразмерного наполнителя (упрочнение пластика, изменение свойств резиновых изделий)
- Предсказание изменения теплопроводности полимерных матриц при внедрении наноразмерного наполнителя (изолирующие материалы, мембраны)
- Предсказание изменения газовой проницаемости полимерных матриц при внедрении наноразмерного наполнителя (пленки, мембраны).

### ПРИМЕНЕНИЕ MULTICOMP В ОБРАЗОВАНИИ

- ▶Разработанный Пакет может быть использован как для практической разработки новых материалов, так и для обучения студентов методам вычислительного материаловедения
- ▶С помощью MULTICOMP студенты могут осваивать основы атомистического и мезоскопического моделирования полимерных систем без необходимости изучения конкретных программ моделирования и прямой работы с удаленными вычислительными ресурсами (создание компьютерных классов)
- ➤ На основе MULTICOMP могут быть разработаны лабораторные практикумы по введении в физику и химию композиционных материалов на основе полимерных матриц с органическими и неорганическими наполнителями
- ▶Также данный Пакет может быть полезен для преподавания основ многоуровневого моделирования композиционных материалов (сквозное моделирование от атомистики до макроуровня)

### БЛАГОДАРНОСТИ

### Данная работа выполнена:

- при финансовой поддержке European Union's Seventh Framework Programme for research, technological development and demonstration (проект ERA-RUS-14891 (0021028))
- с использованием высокопроизводительных вычислительных ресурсов:
  - федерального центра коллективного пользования в НИЦ «Курчатовский институт», <a href="http://computing.kiae.ru/">http://computing.kiae.ru/</a>
  - суперкомпьютерного комплекса Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова

#### RECEIVATE TO THE PROPERTY OF T



经路路路路

### СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2018615740

#### Multicomp

Правообладатель: Общество с ограниченной ответственностью «Лаборатория Кинтех» (RU)

Авторы: см. на обороте

遊遊



Заявка № 2018613030

Дата поступления 28 марта 2018 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 15 мая 2018 г.

Руководитель Федеральной службы по интеллектуальной собственности

Tellesse

Г.П. Ивлиев

Авторы: Потапкин Борис Васильевич (RU), Ахуков Михаил Александрович (RU), Белоусов Сергей Алексеевич (RU), Искандарова Инна Марсовна (RU), Книжник Андрей Александрович (RU), Комаров Павел Вячеславович (RU), Лебедев Александр Владимирович (RU), Окунь Михаил Владимирович (RU), Полынская Юлия Геннадьевна (RU), Рудяк Владимир Юрьевич (RU), Халатур Павел Геннадьевич (RU), Хохлов Алексей Ремович (RU), Хорьков Василий Андреевич (RU), Ширабайкин Денис Борисович (RU)



http://www.kintechlab.com/ru/

#### Контакты

ООО "Кинтех Лаб"

3-я Хорошевская ул. дом 12, 123298, Москва, Россия *Телефон:* +7 (499) 704 2581

E-mail:

support@kintech.ru : для вопросов, касающихся

программного обеспечения Кинтех Лаб

info@kintech.ru: для связи по остальным вопросам

### СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ

- Контакты
- ООО "Кинтех Лаб" 3-я Хорошевская ул. дом 12, 123298, Москва, Россия
- Телефон: +7 (499) 704 2581

E-mail:

<u>support@kintech.ru</u>: для вопросов, касающихся программного обеспечения Кинтех Лаб

info@kintech.ru: для связи по остальным вопросам

 WWW http://www.kintechlab.com/ru

