

Колесніков В.О., к.т.н., доц.; Нестеров А.О., Глюзицький О.О.

ЗАСТОСУВАННЯ МОЖЛИВОСТЕЙ ОБЧИСЛЮВАЛЬНОГО МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА ТА ІТ ТЕХНОЛОГІЙ ДЛЯ РОЗРОБКИ АВТОМОБІЛЬНИХ ДЕТАЛЕЙ

В роботі в стислій формі на основі аналізу доступних даних, намагались провести зв'язок між сучасними тенденціями, щодо розвитку в автомобілебудуванні, ІТ технологіями та впровадженням нових матеріалів.

Стрімке виснаження природних ресурсів, а також розвиток науки і техніки сприятиме створенню нових матеріалів, що володіють більш високим комплексом властивостей в порівнянні з вже існуючими. Одним з пріоритетні наукових напрямків в цій галузі є обчислювальне матеріалознавство (computational materials science) [1 - 4]. Даний науковий напрям об'єднує в собі цілий комплекс взаємопов'язаних напрямків: фізичне матеріалознавство, інформатику, фізику, хімію. Причому розвиток нанотехнологій зумовило розвиток такого напрямку, як обчислювальна хімія (computational chemistry). Обчислювальна хімія фактично являє собою новий спосіб проведення наукових досліджень в хімії - комп'ютерний експеримент і комп'ютерне моделювання. Традиційно експериментатори проводять хімічні експерименти з реальними хімічними системами, а потім теоретики пояснюють результати цих експериментів в рамках розвинених моделей і теорій. Такий підхід до останнього часу був успішним. Сьогодні ми знаємо основні закони, що описують хімічні явища і процеси. Однак часто їх точний аналітичний опис можливо тільки в разі дуже простих моделей. Наближені аналітичні методи дозволяють розширити набір вирішуваних завдань. Розвиток комп'ютерів протягом останніх 60 років дав можливість вирішувати багато проблем не тільки в разі спрощених моделей, але і для реальних хімічних процесів і структур [5].

Метою роботи було зробити аналіз існуючих даних, стосовно можливостей сучасних ІТ технологій та прикладного матеріалознавства для застосування в автомобілебудуванні.

Існує два підходи до проблем хімії: обчислювальна квантова хімія і необчислювальна квантова хімія. Обчислювальна квантова хімія має справу з чисельними обчисленнями електронних структур молекулярних систем *ab initio* і напівемпіричні методи, а необчислювальна квантова хімія з отриманням аналітичних виразів для властивостей молекулярних структур і хімічних реакцій. Журнали по обчислювальній хімії: *Reviews in Computational Chemistry* <http://www.chem.iupui.edu/rcc/rcc.html>, а також *Journal of Theoretical and Computational Chemistry* <http://www.worldscinet.com/jtcc/jtcc.shtml>. Наукові та технічні досягнення в цій галузі обчислювального матеріалознавства висвітлюються в періодичному журналі «*Computational Materials Science*» видавництва ELSIVIER (www.elsevier.com).

Ab initio (лат. Від початку) в фізиці - рішення задачі з перших основних принципів без залучення додаткових емпіричних припущень. Зазвичай мається на увазі пряме рішення рівнянь квантової механіки. Незважаючи на назву при цьому часто робляться будь-які припущення та спрощення. Дані спрощення дозволяють розраховувати системи з великим числом атомів або атоми, що має більше число електронів. Прикладом такого спрощення є використання PAW-потенціалів. Термін фактично називає один із напрямів сучасної теоретичної фізики твердого тіла. Це означає сукупність фізичних наближень, процедур обчислення і оптимізації, що використовуються для розрахунку електронних і фононних спектрів з метою знаходження термодинамічних і кінетичних характеристик матеріалу, таких як коефіцієнт теплового розширення, електрична провідність та інші. Наприклад, для розрахунку енергії сублімації атома використовується різниця енергій атома в кристалічному стані і ізолюваного атома, поміщеного в осередок великого розміру (що аналогічно вільному атому). Першими з серйозних досягнень в цьому напрямку можна вважати концепцію Гартрі

поля і рівняння Хартрі і їх прямі уточнення, рівняння Хартрі-Фока. Ці рівняння з різними варіаціями є основою обчислювальних методів в квантовій хімії.

Останнім часом все більшого поширення у фізиці твердого тіла набувають методи ab initio розрахунків, засновані на використанні методу функціонала щільності.

Перевагою розрахунків з перших принципів є точний опис атомної взаємодії з урахуванням квантових ефектів. Недоліком - неможливість розрахунку за розумний час систем з досить великим числом атомів (на практиці рідко більше 100). Якщо розташувати сучасні методи моделювання, які використовуються у фізиці, за зростанням розмірів модельованих систем і часу моделювання, то картина вийде наступною:

1. Ab initio методи, які не використовують наближень.
2. Ab initio методи, які використовують наближення.
3. Методи молекулярної динаміки, що використовують полуемпіричні потенціали;
4. Метод Монте-Карло.
5. Методи кінцевих елементів.

Аналогічно від 1-5 збільшується кількість спрощень і наближень, які можуть впливати на коректність одержуваного результату [6].

Наведемо короткий перелік комп'ютерних програм і додатків, що стосуються розглянутих вище наукових напрямків: Gaussian, GAMESS, HONDO, MOLCAS, MOLPRO, MPQC, NAMD, Priroda, PQS, PSI, Q-Chem, TURBOMOLE, GROMACS, FANTOM, Ascalaph Designer, NWCHEM, CPMD, ABINIT, VASP, WIEN2K, ORCA, CRYSTAL, PC GAMESS.

Професор факультету наук про Землю і факультету фізики і астрономії Університету штату Нью-Йорк Оганов Артем у 2006 р спільно з Коліном Гласом створив новий метод, названий USPEX (Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography), що дозволяє розрахувати структуру мінералу для заданих температури і тиску виходячи тільки з хімічного складу [7, 8]. Комп'ютерна програма USPEX дозволяє передбачити структуру мінералу тільки за хімічною формулою, при будь-яких значеннях температури і тиску, з практично гарантованим, достовірним результатом, що відкриває просто неймовірні горизонти в синтезі нових речовин з абсолютно новими властивостями. В галузі матеріалознавства команда А. Оганова намагається прийти до нових надтвердих (в ідеалі - твердіші за алмаз) і надпровідних матеріалів, а також до вивчення нових матеріалів для водневої енергетики [9].

Якщо ви знаєте кристалічну структуру, то не становить труднощів з допомогою сучасних методів прорахувати навіть дуже складні властивості речовини і зрозуміти, чи буде ця речовина корисною для вас чи ні. Зазвичай експериментатори йдуть в лабораторію, створюють нові з'єднання під різними температурами і тисками, кожен раз вимірюють властивості, кожен раз вимірюють структуру - і після 10 тисяч спроб можуть виявити один цікавий матеріал. Але, як ви дізнаєтеся структуру речовини, якщо вона ще не синтезована? Метод застосовує рідкісну сітку всій області пошуку. Розрахунок розуміє, де найбільш вигідна область, і все більше і більше структур випробують саме цю низьку енергетичних областей до тих пір, поки найстійкіша структура не буде знайдена [10].

Широке застосування отримали методи: клітинних автоматів (cellular auto-mata), динаміки дислокацій (dislocation dynamics), Мережеві методи або вузлові моделі (network (vertex) models), метод молекулярної динаміки [3].

Ці три методи мають такі загальні особливості:

- 1) моделювання здійснюється чисельним рішенням системи диференціальних-рівнянь з використанням методу скінченних різниць;
- 2) вони дискретні як у просторі, так і в часі;
- 3) мікроскопічний підхід, заснований на диференційно різницевих рівняннях, які описують статистичні і динамічні властивості елементарних дефектів кристалічної будови;
- 4) вони моделюють мікроструктуру, описуючи і пояснюючи багато явищ взаємодії (взаємодія дефектів на кордоні зерна, домішок, сегментів дислокацій і т.д.);
- 5) застосовуються детерміновані і статистичні методи моделювання.

Наведемо приклад обчислювального пошуку нових органічних напівпровідників [10]. Основою дослідження стали опубліковані статті японських учених з Університету Хіросіми, які показали відносно простий спосіб отримання органічного напівпровідника, що позначається як дінафто [2,3-б: 2', 3'-f] тієно [3,2-б] тіофен (на малюнку нижче він відзначений цифрою 1) і оцінили перспективи його застосування в польових транзисторах. Як з'ясувалося, з'єднання 1 забезпечує хорошу рухливість і, що важливо, демонструє високу високу стійкість на повітрі. Остання властивість вигідно відрізняє дінафто [2,3-б: 2', 3'-f] тієно [3,2-б] тіофен від відомого і поширеного органічного напівпровідника пентацена.

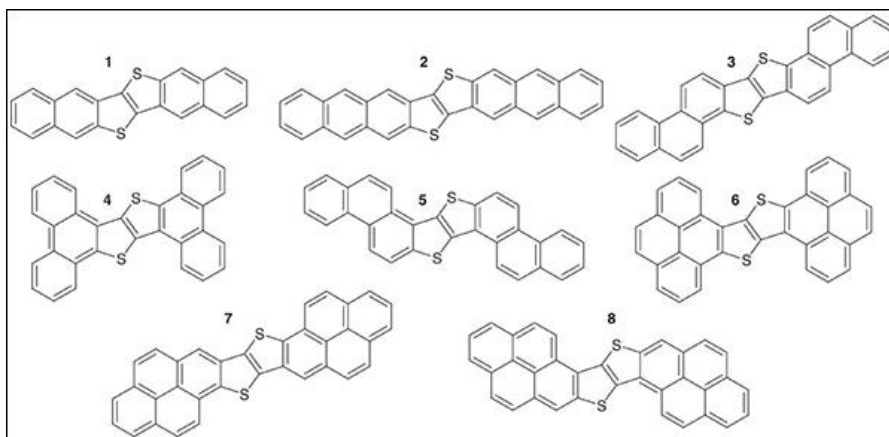


Рис. 1 – Структури дінафто [2,3-б: 2', 3'-e] тієно [3,2-б] тіофену і семи його похідних (ілюстрація з журналу Nature Communications)

Автори, продовживши роботу колег, намагалися відшукати похідні сполуки 1, які мали б ще більш привабливі характеристики. Використовуючи квантові і молекулярно-механічні моделі, вони протестували сім кандидатів, а потім вибрали одне з'єднання, яке виявилось найперспективнішим. Синтезувати його було нескладно, оскільки загальну технологію вже випробували японці.

Спочатку американці створили на базі отриманого напівпровідника тонкоплівкові транзистори з 40-нанометровим шаром [4] і золотими електродами стоку і витоку. У наступних експериментах було зареєстровано відношення струмів в відкритому і закритому стані, приблизно рівне $4 \cdot 10^6$, де середня рухливість носіїв в $0,51 \pm 0,06 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$, причому шестимісячне зберігання на відкритому повітрі ніяк не позначилося на параметрах транзисторів. Зазначена рухливість невелика, що пояснюється недостатньо високим ступенем очищення матеріалу.

Після цього вчені приступили до випробувань польових транзисторів на монокристалах. Тут рухливість носіїв доходила вже до 12,3 в режимі насичення і $16,0 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ в лінійному режимі, що можна назвати чудовим результатом: далеко не всі органічні напівпровідники дають рухливість вище $10 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Шестимісячне витримування таких пристроїв на повітрі призводило до зниження рухливості, але зміни становили менше 10%. Аналогічні обчислювальні методи хіміки використовують для відбору органічних молекул, які могли б знадобитись виробникам сонячних елементів. Дослідники планують розглянути близько 3,5 млн з'єднань, відзначити тисячу найцікавіших і опублікувати відповідні тисячі даних розрахунків.

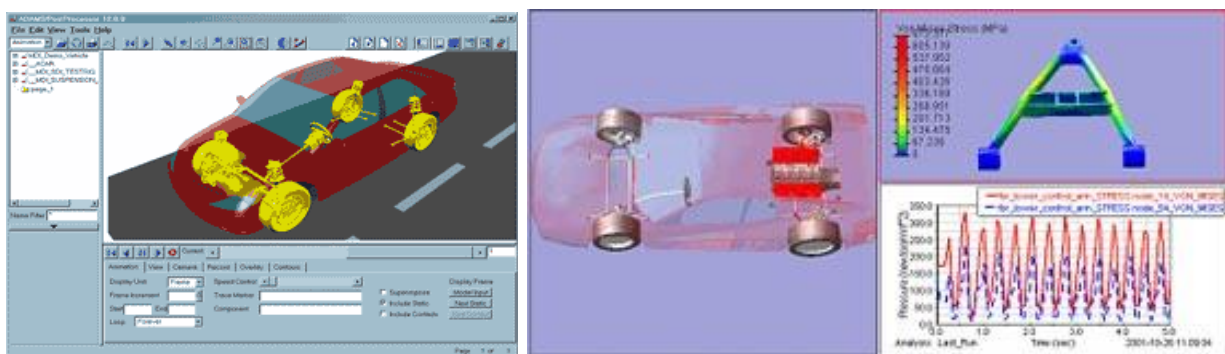
Значних результатів в області обчислювального матеріалознавства можна досягти завдяки ґрід-обчисленням. Ґрід-обчислення (англ. Grid - решітка, мережа) - це форма розподілених обчислень, в якій «віртуальний суперкомп'ютер» представлений у вигляді кластерів, з'єднаних за допомогою мережі, слабозв'язаних, гетерогенних комп'ютерів, що працюють разом для виконання величезної кількості завдань (операцій, робіт). Ця технологія застосовується для вирішення наукових, математичних задач, що вимагають значних обчислювальних ресурсів. Наприклад, Ґрід-система ЦЕРНу, призначена для обробки даних,

одержуваних з Великого адронного колайдера, має ієрархічну структуру. Сама верхня точка ієрархії, нульовий рівень - CERN (отримання інформації з детекторів, збір «сирих» наукових даних, які будуть зберігатися до кінця роботи експерименту).

Розвиток комп'ютерних технологій дозволяє проводити моделювання мікроструктури на різних рівнях ієрархії, враховувати вплив легуючих елементів на міцність і фізико-механічні властивості як матеріалу, так і деталі і самої конструкції, враховувати вплив різних середовищ (наприклад, воденьвмісних) [13 - 16].

В теперішній час застосування нових технологій дозволяє проводити деякі розрахунки властивостей майбутніх матеріалів. Так Біл Гейтс є одним з співзасновників компанії Terra. Він стверджує, що сьогодні компанія здатна проводити розрахунки матеріалів, які ще не створені. Також для прикладу відзначимо, що дослідники з університету Кентуккі (University of Kentucky, UK), лише за допомогою комп'ютерного моделювання, створили новий матеріал, що складається з суміші кремнію, азоту і бору, яка утворює гексагональну структуру товщиною в один атом, дуже схожу на графен. Всі розрахунки проведені лише теоретично. Зараз команда працює з дослідниками в Університеті Луїсвілл (University of Louisville, UL), США, щоб створити матеріал в лабораторних умовах [17]. Таким чином ми можемо також пропонувати спочатку проводити розрахунки матеріалу за допомогою сучасних комп'ютерних програм, а вже потім їх реалізовувати на практиці.

Наведемо невеликий перелік пакетів комп'ютерних програм [18], що можуть бути використані для розрахунку властивостей деталей в період експлуатації автомобіля. Так за заявкою виробника MSC.ADAMS - це найкраща на ринку програмна система, призначена для віртуального моделювання складних машин і механізмів (рис. 2).



а)

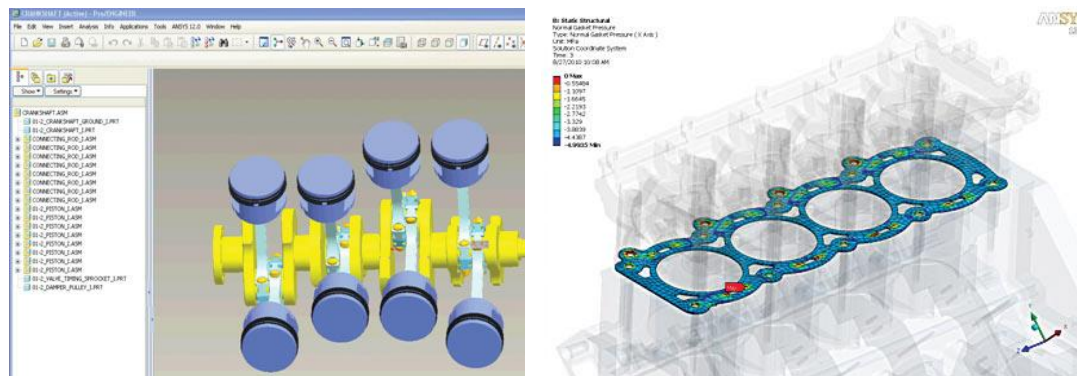
б)

Рис. 2 – Інтерфейс програми MSC.ADAMS – (а), моделювання навантаження елементів підвіски легкового автомобіля в повній нелінійній постановці – (б) [18]

Нові можливості реалізовані в лінійці програмних продуктів ANSYS 13.0 [19].

Головною перевагою роботи з геометрією в ANSYS є її сумісність з PDM-системою Teamcenter Engineering і сучасними CAD-редакторами, такими як Pro / ENGINEER, SolidWorks, Solid Edge, CATIA, Autodesk Inventor, NX Siemens, і ін. У 13-й версії з'явилися не тільки інтерфейси для останніх релізів цих CAD-систем, але і підтримка читання нових форматів, наприклад геометрії з баз даних GAMBIT, JT Open від Siemens PLM і файлів Pro / ENGINEER, читання яких не вимагає установки самої програми.

У новій версії з'явилася повноцінна підтримка асоціативних копій елементів геометрії (Instance), яка значно підвищує продуктивність і скорочує час створення сітки кінцевих елементів, так як вона є однаковою для всіх копій (рис. 3 а). Тепер асоціативні копії можна не тільки імпортувати з CAD-редактора, але і призначати в самому DesignModeler.

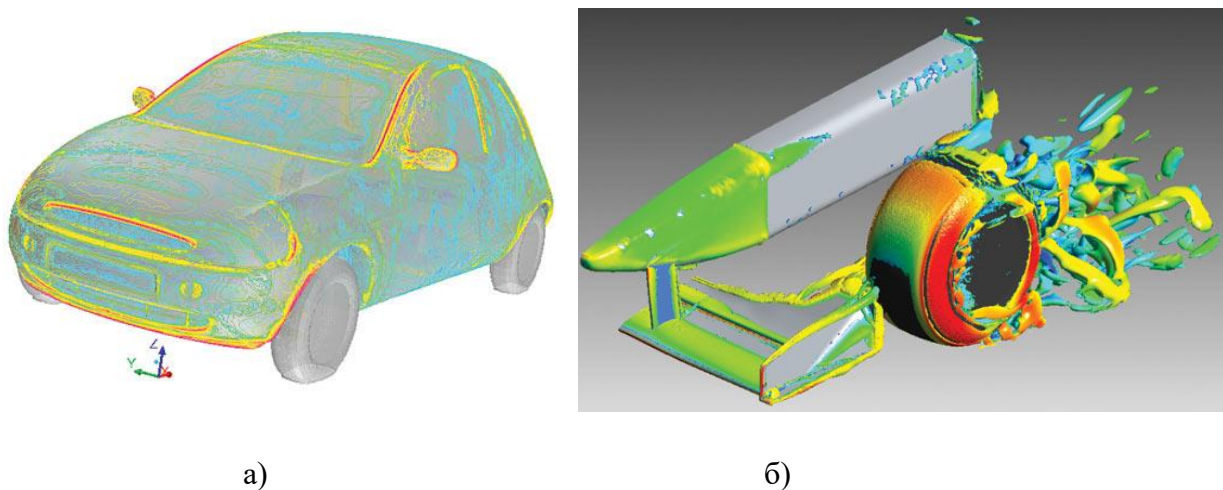


а)

б)

Рис. 3 – Приклад використання асоціативних копій – (а), модель ущільнення в блоці циліндрів – (б) [19]

Одним з важливих моментів в 13-й версії є поява двох методів оптимізації рішення. Перший метод - TBD - шляхом переміщення вузлів сіткової моделі в ході рішення змінює геометрію розрахункової області так, щоб поліпшити задану характеристику (цільову функцію). Другий метод - Adjoint Solver - дозволяє отримати інформацію про те, як слід змінити форму обтічного тіла або форму стінок проточної частини, щоб зменшити лобовий опір або гідравлічні втрати. Розширення можливостей FLUENT торкнулося також моделювання турбулентності. Нова «вбудована» E-LES-модель дозволяє вирішувати великі турбулентні вихори тільки в заданій частині розрахункової області, в той час як в решти пунктів області турбулентні ефекти враховуються як "осереднені" за допомогою RANS-моделей. Інтерфейс між RANS і LES становить зміна від стаціонарної (змодельованої) турбулентності до нестаціонарної (розрахованої) турбулентності (рис. 4 а, б).



а)

б)

Рис. 4 – Зони рекомендованої корекції форми кузова за критерієм лобового опору – (а), застосування SAS-моделі. Вихрові структури за колесом боліда F1 – (б) [19]

У FLUENT тепер доступна модель турбулентності адаптуемого масштабу (SAS). Дана модель, більш продуктивна за часом в порівнянні з іншими моделями вихорів (LES / DES), дозволяє отримати якісні результати для відривних течій, коли використання стандартних RANS-моделей в нестаціонарної постановки некоректно.

Вперше з'явилася можливість моделювання систем з циклічною симетрією. Тепер можна проводити модальний аналіз з урахуванням гармонік коливань в рамках Workbench без використання спеціальних команд.

Для роботи з композитами компанія ANSYS представила новий метод VCCT, призначений для моделювання механіки тріщин, який на даний момент підтримує плоске і осесиметричне ПДВ.

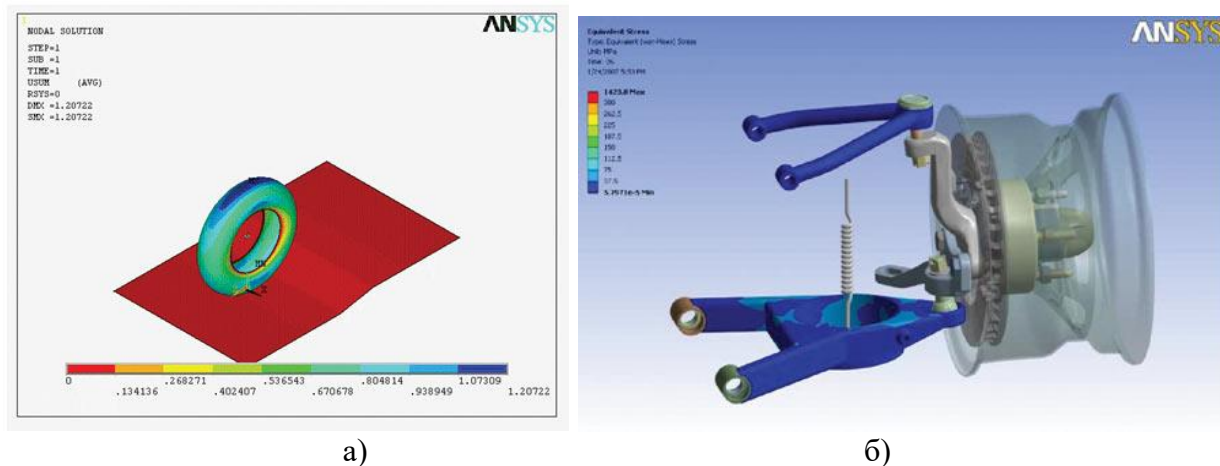


Рис. 5 – Модель автомобільного колеса з використанням нового елемента HSFLD241- (а), жорсткості та деформуємі деталі підвіски автомобіля в модулі Rigid Dynamics – (б)

Крім того, ANSYS представила кілька нових типів кінцевих елементів, які роблять його ще більш універсальним інструментом.

Висновки. Обчислювальне матеріалознавство буде розвиватися паралельно з такими напрямками, як обчислювальна хімія, інформаційні технології і т.д. Підвищити ефективність розрахунку властивостей нових матеріалів можна завдяки застосуванню ґрид-обчислень. В цілому це дозволить створювати нові матеріали, минаючи «проміжні сплави», що не володіють необхідним комплексом властивостей, що має істотно відбитися як на економічній, так і на екологічній складових наукових проєктів. Можливості ІТ технологій дозволяють проводити моделювання нових матеріалів, деталей, вузлів, механізмів, які знайдуть широке застосування в автомобільній галузі.

Список літературних джерел

1. В.А. Колесников, А.И. Балицкий, О.А. Погорелов, В.В. Кузнецов, А.В. Калинин Краткий обзор новых достижений в области вычислительного материаловедения // Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля № 9 (180) Ч.2. 2012. - С. 58 – 63.
2. Аптекарь М.Д., Колесников В.А., Кузнецов В.В. Краткий обзор новых достижений в области вычислительной химии и материаловедения, как инструмента экологической безопасности // Вісник СХУ ім. В. Даля № 2 (173) 2012 – с. 279 – 284.
3. Кундас С. П. Вычислительное материаловедение – современное состояние и перспективы развития XLIII Международная конференция «Актуальные проблемы прочности» 27 сентября – 1 октября 2004 г., Витебск, Беларусь. С. 3 – 10.
4. Dierk Raabe Computational materials science, Wiley-VCH, 1998 – 380 p.
5. Вычислительная химия. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <http://ru.wikipedia.org/wiki>.
6. Ab initio. [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <http://ru.wikipedia.org/wiki>.

7. Артем Оганов – в рейтинге 50-и россиян, добившихся успеха за пределами России. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.yerkramas.org/2011/10/24>.
8. Oganov A.R., Glass C.W. Crystal structure prediction using evolutionary algorithms: principles and applications // J. Chem. Phys. 2006. No. 124, art. 244704.
9. USPEX Артема Оганова. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.scientific.ru/trv/2008/004/ogonov_uspex.html.
10. Как научить компьютер открывать новые материалы. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://polit.ru/article/2011/08/18/ogonov2011txt>.
11. Вычислительный поиск новых органических полупроводников. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.nanonewsnet.ru/news/2011>.
12. Грид. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://ru.wikipedia.org/wiki>.
13. Верительник Е.А., Колесников В.А., Колесникова Е.Б. Новые компьютерные программы для расчета прочностных свойств материалов и конструкций. ЧАСТЬ 1. // Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля // Вид-во СХУ ім. В.Даля, 2010. – № 9(151). – Частина 2. – с.11 - 15.
14. Колесников В.А. Развитие новых компьютерных технологий в Германии // Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля // Вид-во СХУ ім. В.Даля, 2008. – № 6(124). Частина 2. – С.170-175.
15. Тупельняк О. Л., Колесников В.А., Савченко Е. А., Курылёв В. О. Краткий обзор возможностей компьютерного атомно-кристаллического моделирования материалов // тезисы доповідей Міжнародна науково-практична конференція "Комп'ютерні науки для інформаційного суспільства", 22-23 грудня 2010 року, м. Луганськ. – С. 78. – 80.
16. Колесніков В.О., Дев'яткін Ю. С., Дев'яткін Д. С. Комп'ютерне моделювання сплавів з урахуванням впливу водню / XXI відкрита науково-технічна конференція молодих науковців і спеціалістів КМН – 2009 // Фізико-механічний інститут ім. Г.В. Карпенка НАН України. – Львів. – 2009. – С. 258 – 261.
17. Винайдено матеріал, який побив рекорди графена. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://weua.biz/tech/vinajdeno-material-yakij-pobiv-rekordi-grafena/8598/>.
18. САПР для машиностроения и промышленного производства / Инженерные расчеты и моделирование технологических процессов / MSC.ADAMS. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.cad.ru/ru/software/detail.php?ID=3183>.
19. Новые возможности ANSYS 13.0. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.sapr.ru/Article.aspx?id=22141>.

Колесніков Валерій Олександрович – к.т.н., м.н.м. сумісник лабораторії водневої стійкості конструкційних сплавів відділу фізичних основ руйнування та міцності матеріалів в агресивних середовищах Фізико-механічного інституту ім. Г.В. Карпенка Національної академії наук України; доцент кафедри технологій виробництва і професійної освіти ДЗ "Луганський національний університет ім. Тараса Шевченка", м. Старобільськ.

Нестеров Артем Олександрович – магістрант кафедри технологій виробництва і професійної освіти ДЗ "Луганський національний університет ім. Тараса Шевченка", м. Старобільськ.

Глюзицький Олександр Олександрович – магістрант кафедри технологій виробництва і професійної освіти ДЗ "Луганський національний університет ім. Тараса Шевченка", м. Старобільськ.