

## Анализ функциональных возможностей виртуальной лаборатории by PRACE

*Гезихаджиев Магомед Асланович*

*Студент (бакалавр)*

Чеченский государственный университет, Факультет математики и компьютерных технологий, Грозный, Россия

*E-mail: gezihadjievmagomed@gmail.com*

Теоретическая механика - это наука про общие законы и механических взаимодействий их между материальными точками, твердыми телами и долями механических систем, и также про общих законах и движения тел по отношению их друг к другу.

Лекция теоретической механики, преподаваемой студентам в вузах, включает в себя три основных раздела это - кинематику, статику и динамику.

Кинематика - это часть теоретической механики, которая изучают зависимости между самими величинами и характеризующие её состояние и движения систем, но она не рассматривает причины, вызывающие в ней изменение состояния движения.

Статика - это учение о равновесии совокупности тел некоторой системы отсчета. В этом разделе теоретической механики студентами изучаются методы расчета реакций опор твердых тел и составных конструкций.

Динамика - заключительная, третья часть теоретической механики, в которой рассматривается влияние сил на состояние движения систем материальных объектов.

И для изучения этих разделов нужно практические и лабораторные занятия проводить в лабораториях по механике. Одним из вариантов решения проблемы отсутствия лаборатории, это использование в педагогической практике виртуальные лаборатории. Виртуальная лаборатория имеет большой функционал и удобную панель для пользования

Суперкомпьютеры могут использоваться для моделирования материалов в самых разных масштабах, от потока воздуха мимо крыла самолета до движения электронов вокруг отдельных атомов. Различные области длины и масштаба времени предоставляют различные уровни информации, но в настоящее время мало что известно о том, как эти уровни информации связаны. Профессор Питер Ковени из Университетского колледжа Лондона возглавляет долгосрочную программу, направленную на соединение масштабов, связывая поведение атомов и молекул с материальными свойствами на макроуровне.

В конце 1980-х годов исследователи из Toyota продемонстрировали, что путем армирования полимеров, таких как нейлон, глиной на наноуровне можно добиться значительного улучшения широкого спектра инженерных свойств. Известные как глинисто-полимерные нанокompозиты, эти материалы имеют очень низкую плотность, но также прочны и прочны - идеальные свойства для строительства транспортных средств.

С тех пор ведутся обширные исследования этих материалов, и хотя были достигнуты некоторые успехи в поиске полезных новых композитов, это оказалось трудным делом. Те же исследователи, которые сделали первоначальное открытие, работая в Toyota, недавно написали об относительной нехватке таких открытий с момента их прорыва почти тридцать лет назад, сославшись на трудоемкий пробный и ошибочный характер необходимых исследовательских экспериментов, а также на фундаментальное непонимание того, как и почему такие материалы, как глинисто-полимерные нанокompозиты обладают такими аномальными свойствами.

Профессор Питер Ковени из Университетского колледжа Лондона в сотрудничестве со своими коллегами доктором Джеймсом Сутером и доктором Дерекком Гроном работает

над способами соединения различных представлений материи вместе, что, по его мнению, является первым шагом к ускорению процесса открытия новых и полезных материалов. - Представьте себе, например, материал, который раскололся. На молекулярном уровне это проявляется как разрыв химических связей электронами, движущимися между атомами, тогда как проявление в большем масштабе было бы разрушением компонента, изготовленного из этого материала. Это очень разные представления одного и того же события, но оба одинаково верны. Смоделировать это событие отдельно в разных масштабах относительно легко. Что не так просто, так это соединить их - экстраполировать макроскопические свойства материала на его химический состав

Создание описания материала, который работает во всех масштабах без необходимости вводить специальные параметры на более высоких уровнях, является решающим шагом на пути к открытию материалов *silico*. Чтобы осуществить "многомасштабное моделирование", как известно, параметры самого низкого уровня должны быть чрезвычайно точными, а для выполнения моделирования необходимы самые мощные компьютеры. Но награда за успех в этой задаче велика; если можно предсказать полезные физические свойства материала по его молекулярной структуре, то дорогостоящие и трудоемкие эксперименты методом проб и ошибок могут быть исключены из процесса открытия.

В феврале 2015 года журнал *Advanced Materials* опубликовал статью Сутера, Груна и Ковени, в которой обсуждаются свойства ряда глинополимерных нанокompозитов. Однако не конкретные материалы делают статью такой интересной, а новаторские методы исследования. В статье описан метод, который может быть использован для расчета свойств глинополимерных нанокompозитов с использованием многомасштабного моделирования. Единственными входными данными, необходимыми для этой «виртуальной лаборатории», являются химический состав, молекулярная структура, и условия обработки, и взамен она предоставляет информацию, которая в значительной степени никогда не была показана раньше ни в каком моделировании, не говоря уже об эксперименте.

«Соединив все шкалы вместе в многомасштабную модель, мы смогли показать процесс попадания полимеров внутрь слоев глины - как это происходит и сколько времени это занимает», - говорит Ковени. «Глина существует естественным образом в виде сложенных листов, называемых тактоидами. Когда вы добавляете полимер, он разрушает эту естественную конфигурацию - инкапсулирует, отшелушивает или интеркалирует стеки. Наше моделирование показало, что композит затем располагается в определенной ориентации, так что свойства материала начинают сильно отличаться от того, что вы могли бы предсказать из линейной комбинации свойств глины и полимера».

Статья была признана настолько важной *Advanced Materials*, что впервые за всю свою историю журнал *high impact* опубликовал расширенную статью, чтобы можно было полностью объяснить методы, лежащие в основе работы. "Способность моделировать и моделировать свойства материала таким образом открыла дверь для предсказаний, которые могли бы значительно ускорить многие процессы научных открытий, а не только в области глинисто-полимерных на композитов", - объясняет Ковени.

Например, Графен - это материал, который уже давно рекламируется как современный чудо-материал, который в конечном итоге произведет революцию во многих областях исследований. Однако практическое применение Графена оказалось затруднительным, не в последнюю очередь из-за проблем с его производством в достаточно больших количествах. Многомасштабное моделирование может быть использовано для моделирования промышленного производства графена путем отслаивания 2D-листов графена от графита - процесс, довольно похожий на отслаивание глинистых тактоидов при производстве глинисто-полимерных нанокompозитов.

Ковени и его исследователи широко использовали суперкомпьютеры PRACE уровня

0, в том числе 40,5 миллионов часов ядра на JUGENE BlueGene / P в FZJ. "Проведение многомасштабных симуляций относится к области того, что мы называем «героическими вычислительными задачами», - говорит он. «Я лично считаю, что будущее материаловедения заключается в правильном понимании композитов, и это во многом зависит от высокой точности наших моделей и симуляций. Суперкомпьютеры уровня 0, подобные тем, которые предоставляет PRACE, абсолютно необходимы для проведения этих симуляций в возможные периоды времени, и поэтому успех нашей работы и любой будущей работы, которая использует наши методы, зависит от доступа исследователей к этим ценным ресурсам».

В краткосрочной перспективе методы команды могут ускорить научные открытия и понимание. В долгосрочной перспективе материаловедение изменится к лучшему, устранив множество проб и ошибок, которые в настоящее время преследуют разработку полезных материалов.

### Источники и литература

- 1) 1. Зеньковский, В. 3D-моделирование на базе Vue xStream: Учебное пособие / В. Зеньковский. - М.: Форум, 2011. - 384 с.
- 2) 2. Зеньковский, В.А. 3D моделирование на базе Vue xStream: Учебное пособие / В.А. Зеньковский. - М.: ИД Форум, НИЦ Инфра-М, 2013. - 384 с.
- 3) 3. Расуев У.А. Исаев М.И., Алдамов А.И. Использование 3-х мерной модели в изучении математических дисциплин / Современная математика и ее приложения: сборник материалов II Международной научно-практической конференции (г. Грозный, 22-24 октября 2021 г.) – Издательство Чеченского государственного педагогического университета, Махачкала «Алеф», 2021. – 424 с.
- 4) 4. Расуев У.А., Алдамов А.И., Исаев М.И. Использование виртуальных лабораторий в изучении дисциплины «Теоретическая механика» / Тенденции развития естественных наук в современном информационном пространстве и их применение в агробιοтехнологиях. Сборник статей I студенческой научно-практической конференции (22 октября 2021 г.). – Грозный: Издательство ФГБОУ ВО «Чеченский государственный университет им. А.А. Кадырова», 2021. – 61 с