

ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЦИФРОВЫХ ДВОЙНИКОВ СТРУКТУР ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНОГО ПОДХОДА

И.В. Лебедев, А.А. Уварова, Н.В. Меньшутина

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, ул. Героев Панфиловцев, 20, Москва, Российская Федерация, 125480
E-mail: igor170491@yandex.ru, anastasia.uvarova2@yandex.ru, chemcom@muctr.ru

Разработан информационно-аналитический комплекс для создания цифровых двойников структур пористых материалов. Информационно-аналитический комплекс содержит несколько расчетных модулей, которые содержат модели, реализующие клеточно-автоматный подход к моделированию. Информационно-аналитический комплекс позволяет подбирать модель, которая точно воспроизводит структуры пористых материалов – аэрогелей, по которой можно прогнозировать их свойства – создавать цифровой двойник. Кроме того, информационно-аналитический комплекс содержит модели для расчета различных свойств аэрогелей по их структуре такие, как распределение пор по размерам и механические свойства. Реализованы модели, которые позволяют описывать различные процессы в пористых структурах – гидродинамика многокомпонентных систем, тепло- и массообменные процессы, растворение, сорбция и десорбция. Кроме того, информационно-аналитический комплекс содержит удобный пользовательский визуальный интерфейс, что позволяет осуществлять работу с ним широкому кругу пользователей без специальной технической подготовки, а также удобные средства визуализации. Расчетные модули информационно-аналитического комплекса реализованы с использованием высокопроизводительных параллельных вычислений, что существенно повышает скорость расчетов. Программная архитектура информационно-аналитического комплекса имеет модульную структуру, что позволяет расширять его с помощью новых моделей, а также интегрировать модели друг с другом, описывая несколько процессов в одном модуле и осуществляя мультимасштабный подход к моделированию. Предлагаемый информационно-аналитический комплекс будет полезен в качестве инструмента моделирования при разработке новых пористых функциональных материалов (аэрогелей), частично заменяя натурные эксперименты вычислительными, что позволит ускорить и удешевить разработку аэрогелей с требуемыми свойствами, а также при обучении специалистов соответствующего профиля.

Ключевые слова: информационно-аналитический комплекс, моделирование, клеточные автоматы, цифровые двойники, пористые материалы, аэрогели

INFORMATION-ANALYTICAL SOFTWARE FOR DEVELOPING DIGITAL TWINS OF POROUS STRUCTURES MATERIALS USING A CELLULAR AUTOMATA APPROACH

I.V. Lebedev, A.A. Uvarova, N.V. Menshutina

The Department of Chemical and Pharmaceutical Engineering, Mendeleev University of Chemical Technology or Russia, Geroev Panfilovtsev str., 20, Moscow, Russian Federation, 125047
E-mail: igor170491@yandex.ru, anastasia.uvarova2@yandex.ru, chemcom@muctr.com

An information-analytical software has been developed for creating digital twins of the structures of porous materials. The information-analytical software contains several computational modules that contain models that implement a cellular automata approach to modelling. The

information-analytical software allows you to select a model that accurately reproduces the structures of porous materials - aerogels, by which you can predict their properties - create a digital twin. In addition, the information-analytical software contains models for calculating various properties of aerogels based on their structure, such as pore size distribution and mechanical properties. Models have been implemented that allow describing various processes in porous structures - hydrodynamics of multicomponent systems, heat and mass transfer processes, dissolution, sorption and desorption. In addition, the information and analytical software contains a convenient user visual interface, which allows a wide range of users to work with it without special technical training, as well as convenient visualization tools. The calculation modules of the information-analytical software are implemented using high-performance parallel computing, which significantly increases the speed of calculations. The software architecture of the information-analytical software has a modular structure, which allows it to be expanded with new models, as well as to integrate models with each other, describing several processes in one module and implementing a multiscale approach to modeling. The proposed information-analytical software will be useful as a modeling tool in the development of new porous functional materials (aerogels), partially replacing full-scale experiments with computational ones, which will speed up and reduce the cost of developing aerogels with the required properties, as well as in training specialists in the relevant field.

Key words: information-analytical software, modelling, cellular automata, digital twins, porous materials, aerogels

Для цитирования:

Лебедев И.В., Уварова А.А., Меньшутина Н.В. Информационно-аналитический комплекс для создания цифровых двойников структур пористых материалов с использованием клеточно-автоматного подхода. *Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва)*. 2023. Т. LXVII. № 2. С. 52–58. DOI: 10.6060/RCJ.2022672.6.

For citation:

Lebedev I.V., Uvarova A.A., Menshutina N.V. Information-analytical software for developing digital twins of porous structures materials using a cellular automata approach. *Ros. Khim. Zh.* 2023. V. 67. N 2. P. 52–58. DOI: 10.6060/RCJ.2022672.6.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время разработка новых материалов с требуемыми свойствами является актуальной задачей в различных областях науки и промышленности. Однако, конечные свойства материала зависят от множества параметров, что ведет к необходимости проведения большого количества экспериментальных исследований, что, в свою очередь влечет существенные затраты ресурсов и замедляет скорость разработки нового материала.

Решить эту проблему может помочь использование современных методов моделирования и обработки данных. Современные методы компьютерного моделирования позволяют получать цифровые копии реальных структур материалов, которые будут отражать основные свойства и особенности исследуемых структур – создавать цифровые двойники материалов. Это позволяет частично заменить натурные эксперименты вычислительными и уменьшить затраты при разработке новых материалов.

В рамках работы предложен программно-аналитический комплекс по созданию цифровых двойников пористых материалов – аэрогелей.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Аэрогели представляют собой высокопористые материалы с большой площадью внутренней поверхности, малой плотностью, низкой теплопроводностью, отличными сорбционными свойствами, что позволяет использовать их в качестве композиционных и функциональных. Аэрогели бывают неорганические, органические и гибридные.

Главной особенностью структуры аэрогелей является сеть открытых пор, объединенных в единую систему. Поэтому при моделировании аэрогелей необходимо учитывать гетерогенность их структуры, состоящей из твердого каркаса и пор, заполненных воздухом. В таких случаях применимы мезоуровневые модели.

На мезоуровне система достаточно мала, чтобы рассматривать ее на макроуровне, где структура становится однородной, но достаточно крупная для того, чтобы выделить основные структурные особенности образца. На мезоуровне система имеет размеры от сотен до тысяч нанометров. Это подходящий масштаб для моделирования аэрогелей, основной вклад в свойства которых вносят мезопоры диаметром от 2 до 50 нм. На мезоуровне

при моделировании аэрогелей представляется перспективным использование клеточно-автоматного (КА) подхода.

Суть клеточно-автоматного подхода состоит в том, что исследуемая система разбивается на одинаковые клетки – элементарные объемы (или площади для двухмерного случая). В каждый момент времени каждая клетка имеет одно конкретное состояние из множества. Состояние каждой клетки зависит от состояния соседних клеток (окрестности). Клетка меняет свое состояние каждый дискретный шаг по времени на основании локальных правил перехода. Локальность правил позволяет учитывать неоднородность структуры, когда состав и геометрия материала оказывает существенное влияние на его свойства. Правила перехода могут быть основаны на теоретических или статистических зависимостях [1].

Преимуществами клеточно-автоматного подхода являются простота и локальность правил эволюции исследуемой системы во времени и возможность организации высокопроизводительных параллельных вычислений, что позволяет существенно ускорить проведение расчетов при моделировании.

Еще одним преимуществом клеточно-автоматного подхода является легкость его объединения с другими моделями. В [2] КА-подход применялся в сочетании с методом решеточных уравнений Больцмана. КА-модели удобны при масштабировании и для создания мультимасштабных моделей.

При моделировании пористых материалов на мезоуровне широкое распространение получили методы агрегации. В методах агрегации элементарной сущностью модели является частица материала. Суть работы методов агрегации состоит в том, что в пространстве размещаются частицы материала, которые двигаются и агрегируют в единый кластер, образуя каркас пористого материала. Методы агрегации разделяются на «частица-кластер», когда подвижные частицы агрегируют с неподвижным центром кластеризации и «кластер-кластер», когда все частицы в системе являются подвижными и агрегируют друг с другом, образуя локальные подвижные кластеры, которые затем агрегируют в единую структуру [3].

Методы агрегации могут быть успешно реализованы с использованием клеточно-автоматного подхода.

Принцип работы моделей класса «частица-кластер» состоит в следующем: на поле размещаются один или несколько неподвижных центров кластеризации, после чего в случайном месте поля

генерируется подвижная частица, которая совершает случайное движение до тех пор, пока не окажется рядом с кластером. После этого происходит агрегация – подвижная частица сама становится частью кластера и генерируется новая подвижная частица [4–7]. Процесс осуществляется до тех пор, пока структура не достигнет заданной пористости.

Принцип работы моделей класса «кластер-кластер» состоит в следующем: на поле размещается заданное количество подвижных частиц, определяемое пористостью структуры. Частицы начинают хаотичное движение, агрегируя в единый кластер при столкновении. Кластеры, состоящие из нескольких частиц, продолжают движение. Процесс осуществляется до тех пор, пока все частицы не объединятся в единый кластер [8, 9].

Рассмотренные модели хорошо подходят для структур, которые образованы шарообразными глобулами, однако для описания структур, образованных волокнами, они обладают недостаточной точностью. Описание волокнистых структур возможно с помощью модели, основанной на кривых Безье.

Кривые Безье широко используются в задачах проектирования изделий заданной формы, например, корпусов автомобилей, а также в ряде математических задач таких, как расчет траектории движения [10, 11]. Применение кривых Безье при моделировании пористых материалов позволяет получать цифровые структуры пористых материалов, каркас которых состоит из нано-размерных волокон. К таким материалам относятся аэрогели на основе хитозана и целлюлозы.

Принцип работы модели на основе кривых Безье состоит в следующем: на поле моделирования строится кривая Безье, после чего на тех участках, через которые проходит кривая, строится волокно. Кривые Безье строятся до тех пор, пока цифровая структура не достигнет заданной пористости.

Кривые Безье строятся по опорным точкам, которых может быть две и более. Количество заданных опорных точек определяет порядок кривой. Две опорные точки задают кривую Безье как линейную кривую (кривую первого порядка – прямую), три опорные точки – как квадратичную (кривую второго порядка), четыре – как кубическую (кривую третьего порядка) и так далее. В разработанном ИАК для определения формы волокна используются кривые Безье третьего порядка:

$$B(t) = (1 - t)^3 P_0 + 3t(1 - t)^2 P_1 + 3t^2(1 - t) P_2 + t^3 P_3, t \in [0, 1],$$

где P_0, P_1, P_2, P_3 – опорные точки, каждая из которых содержит набор из трех пространственных координат, а t – шаг.

P_0 и P_3 – начало и конец кривой, эти точки выбираются в случайных местах на разных гранях поля. P_1 и P_2 – точки в случайных местах на поле между P_0 и P_3 . При этом кривая проходит через P_0 и P_3 , но не проходит через P_1 и P_2 .

В связи с вышеперечисленным представляется перспективным создание информационно-аналитического комплекса (ИАК), объединяющего различные методы агрегации, клеточно-автоматный подход для разработки новых пористых материалов – аэрогелей, анализа их свойств, проведения различных процессов с их использованием.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Целью разработки ИАК является создание удобного и эффективного средства моделирования структур и свойств пористых материалов, которыми может пользоваться широкий круг пользователей, не владеющих навыками программирования. На рис. 1 представлена структура разработанного ИАК.

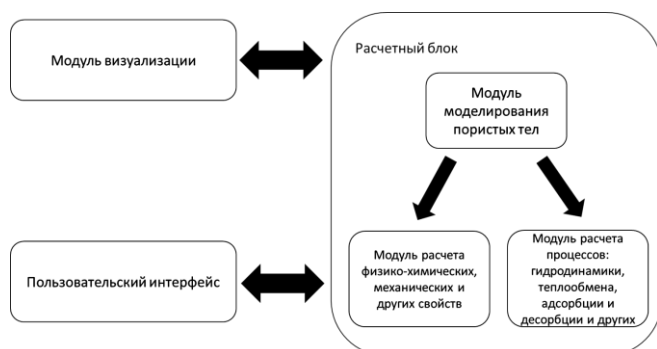


Рис. 1. Структура ИАК

Расчетный блок содержит модуль для моделирования пористых тел, который содержит основные агрегационные методы с использованием клеточно-автоматного подхода: агрегация, ограниченная диффузией (diffusion-limited aggregation, DLA), агрегация, ограниченная реакцией (reaction-limited aggregation, RLA), агрегация с множеством центров кластеризации – multiDLA), кластер-кластерная агрегация, ограниченная диффузией (diffusion-limited cluster aggregation, DLCA), метод случайного блуждания (random walker, RW). Кроме того, в нем реализована оригинальная клеточно-автоматная модель волокнистых пористых структур, основанная на построении кривых Безье [12].

Модуль расчета физико-химических, механических и других свойств содержит модели, позволяющие рассчитывать свойства аэрогелей по их цифровой структуре, например, распределение пор по размерам и прочностные свойства.

Модуль расчета процессов позволяет использовать сгенерированные цифровые структуры для расчета различных процессов в них – гидродинамики, массообмена и другие.

Ниже будут рассмотрены лишь некоторые примеры моделирования в рамках ИАК.

Моделирование пористых тел. Модуль для моделирования пористых тел состоит из нескольких подмодулей: частица-кластер, кластер-кластер, модель на основе кривых Безье. Каждый из них имеет отдельное окно интерфейса и предназначен для моделирования пористых тел с различными характеристиками.

Модуль частица-кластер позволяет моделировать пористые тела, образованные в результате золь-гель процессов и процесса сверхкритической сушки, представляющие собой сетку из шарообразных глобул или волокон.

В качестве входных параметров модуль принимает геометрический размер поля моделирования, диаметр частицы, количество центров кластеризации (в этом случае реализуется агрегация с множеством центров кластеризации – multiDLA), вероятность агрегации при столкновении (если она меньше 100%, то реализуется метод RLA) и пористость структуры. Для генерации структуры методом случайного блуждания RW необходимо выставить отдельный параметр в настройках генерации.

Кроме того, можно выбрать типы окрестности клетки – фон Неймана и Мура. В случае выбора окрестности Мура клетка может двигаться и агрегировать по диагонали, в случае выбора окрестности фон Неймана не может [13].

Модуль кластер-кластер позволяет моделировать пористые тела, образованные шарообразными глобулами. Такую структуру имеют неорганические аэрогели на основе диоксида кремния, гибридные аэрогели на основе кремний-резорцинол-формальдегида, органические аэрогели на основе яичного белка.

В качестве входных параметров модуль использует геометрический размер поля моделирования, диаметр частицы и пористость конечной структуры.

Как и в случае с модулем частица-кластер можно выбрать различные окрестности клетки (фон Неймана и Мура), а также диаметр частиц.

Модуль кривых Безье реализует клеточно-автоматную модель на основе кривых Безье. В качестве входных параметров модуль принимает геометрический размер поля моделирования, целевую пористость материала и диаметр поперечного сечения волокна.

Результатом работы всех рассмотренных моделей является цифровая дискретная пористая структура, которая может быть сохранена в файл и загружена позднее. Все модули ИАК интегрированы друг с другом, благодаря чему файлы структуры, сгенерированные в одном модуле, могут быть загружены в любом другом. ИАК позволяет получать как двухмерные, так и трехмерные структуры и осуществлять визуализацию в реальном времени. На рис. 2 представлены примеры трехмерных и двухмерных пористых структур аэрогелей, полученные с помощью различных моделей.

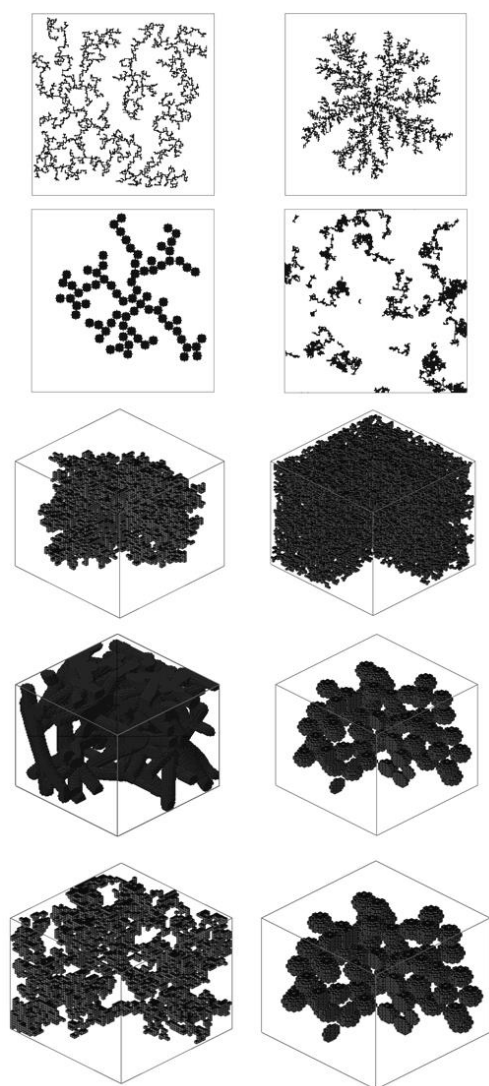


Рис. 2. Примеры цифровых пористых структур аэрогелей, полученных с помощью различных КА-моделей

ИАК позволяет моделировать структуры с помощью различных моделей и варьировать их параметры, давая возможность подбирать наиболее подходящую модель и параметры для конкретного типа материала.

Расчет свойств аэрогелей. Распределение пор по размерам является одной из важнейших характеристик аэрогеля, так как напрямую влияет на его свойства такие, как сорбционная емкость и теплопроводность. Поэтому, для возможности сравнения цифровых структур и экспериментальных образцов был реализован модуль для расчета распределения пор по размерам цифровых структур.

Суть его работы заключается в том, что в каждую точку цифровой структуры последовательно вписываются поры всех возможных диаметров от большего к меньшему. Если пору удалось вписать внутрь структуры, то происходит запись ее диаметра и объема. Результатом работы алгоритма является кривая распределения пор по размерам.

При совпадении экспериментальной и расчетной кривой распределения пор по размерам можно сделать вывод о соответствии сгенерированной структуры и экспериментального образца, то есть, получении цифрового двойника материала. Данная цифровая структура может быть использована далее при прогнозировании свойств образца таких, как теплопроводность, механические и сорбционные свойства.

Расчет процессов. В разработанном программном комплексе реализована возможность моделирования гидродинамики с помощью метода решеточных уравнений Больцмана.

Особенностью метода решеточных уравнений Больцмана является то, что он не использует уравнения Навье-Стокса, а моделирует течение ньютоновской жидкости с помощью дискретной формы уравнения Больцмана [14, 15].

Основная идея метода решеточных уравнений Больцмана состоит в том, что система разделена на одинаковые ячейки. Каждая ячейка представляет собой объем моделируемой жидкости, содержащей частицы жидкости. Частицы жидкости могут перемещаться только между ячейками, и за один дискретный временной шаг частица может перемещаться только в соседнюю ячейку. Каждый временной шаг делится на фазу распространения потоков, когда частицы жидкости перемещаются в соседние ячейки, и фазу столкновения, когда происходит расчет столкновения частиц внутри клетки в соответствии с дискретной формой уравнения Больцмана [16].

Метод решеточных уравнений Больцмана хорошо зарекомендовал себя при моделировании многокомпонентных систем, а также при моделировании течения жидкости в пористых средах [17–20].

Разработанный модуль позволяет моделировать многокомпонентные системы. Кроме того, могут быть загружены ранее полученные структуры, что позволяет проводить моделирование массообменных процессов внутри пористых образцов (рис. 3).

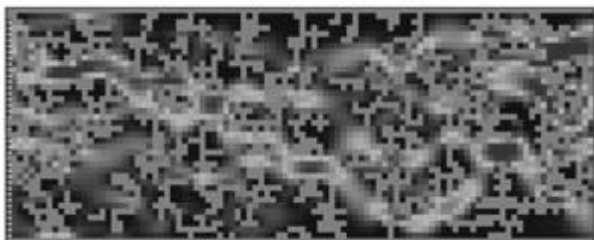


Рис. 3. Расчет гидродинамики в пористой структуре, полученной методом DLA

На рис. 3 градиентом от темного к светлому показана относительная сила течения от слабого к сильному соответственно.

Модуль позволяет осуществлять интерактивное взаимодействие с полем моделирования, создавая произвольные структуры или изменяя существующие, в том числе непосредственно в ходе моделирования (рис. 4).

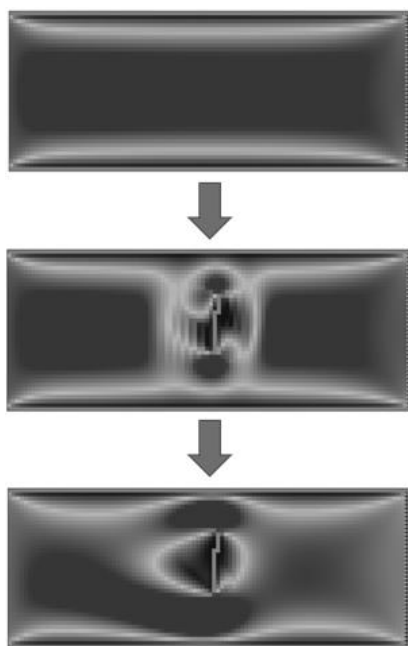


Рис. 4. Интерактивное изменение поля моделирования в процессе расчета

Разработанный ИАК реализован на языке C# на фреймворке .NET. Для ускорения расчетов все рассмотренные модули были реализованы с использованием высокопроизводительных параллельных вычислений.

ВЫВОДЫ

В рамках работы был разработан информационно-аналитический комплекс (ИАК) по созданию цифровых двойников пористых материалов. Предложенный ИАК позволяет осуществлять моделирование пористых структур аэрогелей с помощью различных моделей. Модели реализованы с возможностью широкого варьирования входных параметров, что позволяет подбирать модель для каждого типа аэрогеля, а также исследовать зависимость различных свойств материала от его структуры и прогнозировать свойства материала по его цифровой структуре – создавать цифровой двойник.

Кроме того, разработанный программный комплекс позволяет моделировать процессы, например, гидродинамику внутри цифровых пористых структур с помощью метода решеточных уравнений Больцмана. Метод решеточных уравнений Больцмана может быть объединен с клеточно-автоматными моделями, что позволит прогнозировать различные процессы внутри пористых структур такие, как сорбция, массообменные процессы, растворение.

Модули ИАК реализованы с использованием высокопроизводительных параллельных вычислений, что существенно повышает скорость расчетов.

Разработанный ИАК позволит сократить количество натуральных экспериментов путем частичной замены натуральных экспериментов вычислительными, что сократит время и затраты при создании новых материалов с требуемыми свойствами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, соглашение от 27.07.2022 № 22-71-00055 (РНФ).

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

The authors declare the absence a conflict of interest warranting disclosure in this article.

ЛИТЕРАТУРА REFERENCES

1. Menshutina N.V., Kolnoochenko A.V., Lebedev E.A. *Annu Rev Chem Biomol Eng.* 2020. V. 11. N 1. P. 87-108. DOI: 10.1146/annurev-chembioeng-093019-075250.
2. Lebedev I., Uvarova A., Mochalova M., Menshutina N. *Computation.* 2022. V. 10. N 8. P. 1-20. DOI:10.3390/computation10080139.
3. Lin M.Y., Lindsay H.M., Weitz D.A., Klein R., Ball R.C., Meakin P. *Journal of Physics: Condensed Matter.* 1990. V. 2. N 13. P. 3093-3113. DOI: 10.1088/0953-8984/2/13/019.

4. Meakin P. Phys Rev Lett. 1983. V. 51. N 13. P. 1119-1122. DOI: 10.1103/PhysRevLett.51.1119.
5. Polimeno M., Kim C., Blanchette F. ACS omega. 2022. V. 2. N 45. P. 40826-40835. DOI: 10.1016/j.jheatmasstransfer.2018.08.135.
6. Guo X., Wang J. Journal of Molecular Liquids. 2021. V. 324. P. 114692. DOI: 10.1016/j.molliq.2020.114692.
7. Baki M. A., Badr L. Chaos, Solitons & Fractals. 2021. V. 143. P. 110586. DOI: 10.1016/j.chaos.2020.110586.
8. Jing D., Hu S., Zhang Y., Luo J. Journal of Physics D: Applied Physics. 2019. V. 52. N. 45. P. 455305. DOI: 10.1088/1361-6463/ab37dc.
9. Jungblut S., Joswig J. O., Eychmüller A. Physical Chemistry Chemical Physics. 2019. V. 21. N. 10. P. 5723-5729. DOI: 10.1039/C9CP00549H.
10. Louzazni M., Al-Dahidi S. Renew Energy. 2021. V. 174. P. 715-732. DOI: 10.1016/j.renene.2021.04.103.
11. Chen C., He Y., Bu C., Han J., Zhang X. Quartic Bézier curve based trajectory generation for autonomous vehicles with curvature and velocity constraints. IEEE International Conference on Robotics and Automation (ICRA). 2014. P. 6108-6113 DOI: 10.1109/ICRA.2014.6907759.
12. Lebedev I., Lovskaya D., Mochalova M., Mitrofanov I., Mentshutina N. Polymers. 2021. V. 13. N 15. P. 1-20. DOI: 10.3390/polym13152511.
13. Wolfram S. Commun Math Phys. 1984. V. 96. N 1. P. 15-57. DOI: 10.1007/BF01217347
14. Shan X., Yuan X.F., Chen H. J Fluid Mech. 2006. V. 550 N 1. P. 413. DOI: 10.1017/S0022112005008153.
15. McDonough J. M. Lectures in elementary fluid dynamics: physics, mathematics and applications. Engineering Textbook Gallery. Publisher: University of Kentucky USA. 2009. P. 164.
16. Qian Y.H., D'Humières D., Lallemand P. Europhysics Letters (EPL). 1992. V. 17(6). P. 479-484. DOI: 10.1209/0295-5075/17/6/001.
17. He Y. L., Liu Q., Li Q., Tao W. Q. International Journal of Heat and Mass Transfer. 2019. V. 129. P. 160-197. DOI: 10.1016/j.jheatmasstransfer.2018.08.135.
18. Liu H., Sun S., Wu R., Wei B., Hou J. Water Resources Research. 2021. V. 57. P. e2020WR029219. DOI: 10.1029/2020WR029219.
19. Parvan A., Jafari S., Rahnema M., Raoof A. Advances in Water Resources. 2020. V. 138. P. 103530. DOI: 10.1016/j.advwatres.2020.103530.
20. Wang W., Wang H., Su Y., Tang M., Xu J., Zhang Q. Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers. 2021. V. 121. P. 128-138. DOI: 10.1016/j.jtice.2021.03.044.

Поступила в редакцию 14.12.2022

Принята к опубликованию 06.03.2023

Received 14.12.2022

Accepted 06.03.2023