

**Abstract.** The article reviews the literature on computer simulation methods using for design of composite materials with desired properties. Methods for creating new coatings based on physics and mechanical properties tabular data, experimental research results and computational methods are analyzed. The classification of computer-aided design methods for materials is carried out, according to which three main groups are established: approaches in which for selected values of functional properties materials selection process is based on a combinatorial search in the experimental database; computer design based on computational methods and theoretical foundations of physical materials science, as well as materials modeling methods based on the integration of computational stimulation, system engineering, production and design. Such information is extremely important both from the point of view of the fundamental computer modeling problems, and from the developing recommendations for practical use.

**Keywords:** computer design, composite coatings, computational methods, modeling of material properties, theory of physical materials science

УДК 539.21; 539.12.64

Союза М.<sup>1</sup>, Байшоланова К.<sup>2</sup>, Яр-Мухамедов Е.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Университет Порто, г. Порто, Португалия

<sup>2</sup> Казахский национальный университет им. Аль-Фараби,  
г. Алматы, Казахстан

E-mail: baisholanova.k@gmail.com

## СОСТОЯНИЕ ПРОБЛЕМЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ ПОКРЫТИЙ С ЗАДАНЫМИ СВОЙСТВАМИ

**Аннотация:** В статье проводится обзор литературы по применению методов компьютерного моделирования для дизайна композиционных материалов с заданными свойствами. Анализируются способы создания новых покрытий на базе использования табличных данных физико-механических свойств, экспериментальных результатов исследований и вычислительных методах. Проведена классификация методов компьютерного дизайна материалов, по которой установлены три основные группы: подходы, в которых для выбранных значений функциональных свойств процесс отбора материалов базируется на комбинаторном поиске в базе экспериментальных данных; компьютерный дизайн, основанный на вычислительных методах и теоретических основах физического материаловедения, а также способы моделирования материалов, основанные на интегрировании вычислительной стимуляции, системного инжиниринга, производства и дизайна. Такая информация крайне важна как с точки зрения

фундаментальных проблем компьютерного моделирования, так и с позиции выработки рекомендаций для практического использования.

**Ключевые слова:** компьютерный дизайн, композиционные покрытия, вычислительные методы, моделирование свойств материалов, теория физического материаловедения

В области материаловедения исторически процесс отбора защитных покрытий проводился на базе использования табличных данных о механических, физических и др. свойствах [1]. Современный тренд сместился в сторону композиции материалов и соединения микроструктуры и свойств компонентов системы. Целью является создание композиционных покрытий с различными специальными, порой противоречащими друг другу, свойствами [2]. В прошлом новые композиционные покрытия разрабатывались долго и с большим количеством усилий: экспериментаторы получали защитные покрытия при различных режимах, изучали их свойства, отбирали из сотен образцов наилучшие [3-7]. Затем пытались разработать технологию формирования композиций с заданными свойствами. Этот процесс занимал десятилетия и зачастую требовал больших материальных затрат. Поэтому появилась необходимость создания такой технологии, которая могла бы делать безошибочное прогнозирование свойств. То есть не экспериментировать в лабораториях, а давать задачу компьютеру предсказать, какое покрытие, с каким композиционным составом и микроструктурой будет иметь нужные свойства при определенных эксплуатационных условиях [8-10].

За последнюю декаду возникло несколько новых направлений в сфере разработки материалов. Процесс отбора материалов для композиционных покрытий акцентируется на конструировании и комбинаторном поиске в базе данных свойств и характеристик, которые наиболее подходят для выбранных значений функциональных свойств [4]. Другой класс подходящий для компьютерного дизайна покрытий - это базирующийся на вычислительных методах и теоретических основах физического материаловедения [5]. Для ускорения открытия новых материалов используется вычислительная структура и подход «снизу-вверх», включающий квантовое и молекулярное моделирование [6].

Целью настоящей работы является обзор современных способов многофункционального дизайна материалов, и установить подходы, основанные на многомасштабных недетерминированных анализах, которые можно использовать для моделирования композиционных покрытий.

### **Технология компьютерного прогнозирования свойств покрытий**

По мнению авторов, [7-10] главная задача заключается в прогнозировании кристаллической структуры композиционных покрытий, которая определяет механические свойства, тепло- и электропроводность. Методика заключается в пошаговом апробировании кристаллических

структур, начиная с небольшой случайной выборки. Далее ранжируют всевозможные решения, наихудшие из которых отбрасывают, а из наилучших производят дочерние варианты путем различных рекомбинаций и мутаций. После этого производят оценку по физическим свойствам, химическому составу и устойчивости. Наиболее выгодные отбирают и комбинируют, производя следующее поколение. Так шаг за шагом приближаются к оптимальному для них материалу с точки зрения данного физического свойства. Этот эволюционный метод был запатентован А.Огановым и в настоящее время широко используется такими компаниями, как «Intel», «Toyota» и «Fujitsu» для изобретения новых материалов. Основным выводом эволюционного метода является утверждение о том, что, как и в природе, так и на компьютере новый материал можно получить только из двух исходных: не трех, четырех и более [11]. Однако данный метод не адаптирован для композиционных покрытий.

Используя алгоритм эволюционной оптимизации, реализованный в программе предикторов кристаллов USPEX, и первые принципы расчета полной энергии, были рассчитаны фазовые диаграммы состава для систем из Al-Sc и Al-Ta сплавов при нулевой температуре и давлении [12]. В дополнение к известным бинарным интерметаллическим фазам в области фазовой диаграммы Al-бедных были обнаружены новые потенциально стабильные сплавы  $AlSc_3$  и  $AlTa_7$ . Динамическая и термическая стабильность их решеток была подтверждена из вычисленных спектров колебательных нормальных мод в гармоническом приближении. На рисунках 1 и 2 представлены примеры исследования термодинамически стабильных бинарных фаз сплава Al с Sc и Al с Ta.

Автор [13] описывает подход моделирования материалов, основанный на интегрировании вычислительной стимуляции, системного инжиниринга, производства и дизайна. Эта идея развита в иерархической концепции Олсона (рисунок 3), а также рассматривается в работах [14-16]. Преимуществами данного подхода является применение моделирования и стимуляции, что обеспечивает дизайн стабильных структур материалов, обладающих заданными свойствами. К недостаткам можно отнести отсутствие разработок для композиционных защитных покрытий на металлической основе.

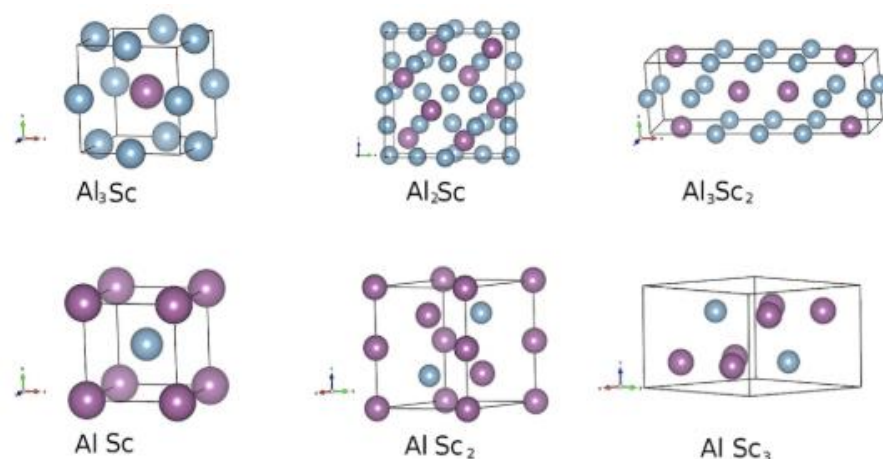


Рисунок 1 – Оценка стабильности новых интерметаллидных сплавов Al-Sc [12]

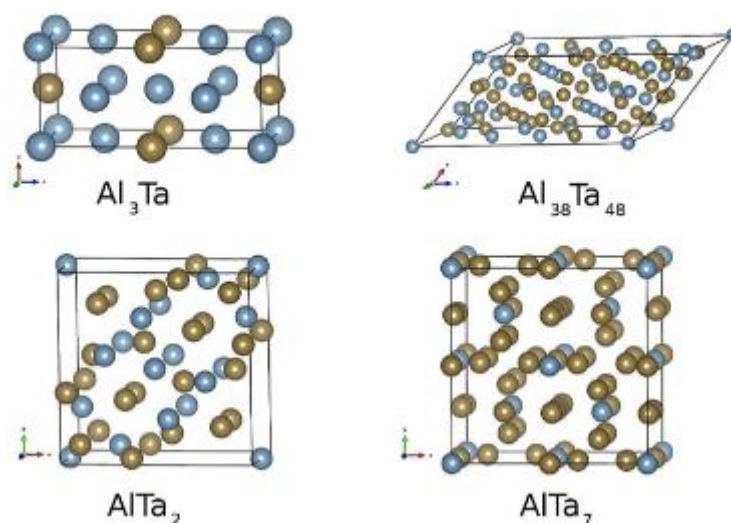


Рисунок 2 – Оценка стабильности новых интерметаллидных сплавов Al с Ta [12]

Для поиска экспериментальных и теоретических данных традиционно используются базы данных больших масштабов. В статье [17] для иллюстрации применения статистических методов рассматриваются три разных случая. В первом для поиска образцов визуализируется полная крупномасштабная база данных расплавленных солей. Во втором случае из экспериментальной и теоретической базы данных разработана виртуальная комбинаторная библиотека халькопиритовых полупроводников. Данный метод предполагает выбор статистически подходящих параметров, основанных на физике материалов. В третьем случае для базы цеолитов разработаны «вторичные» дескрипторы, чтобы подробнее понять топологию мезопористых структур при проектировании материалов. Эти примеры служат для демонстрации того, как базы данных могут использоваться для

определения важных комбинаций параметров, относящихся к комбинаторному экспериментированию.

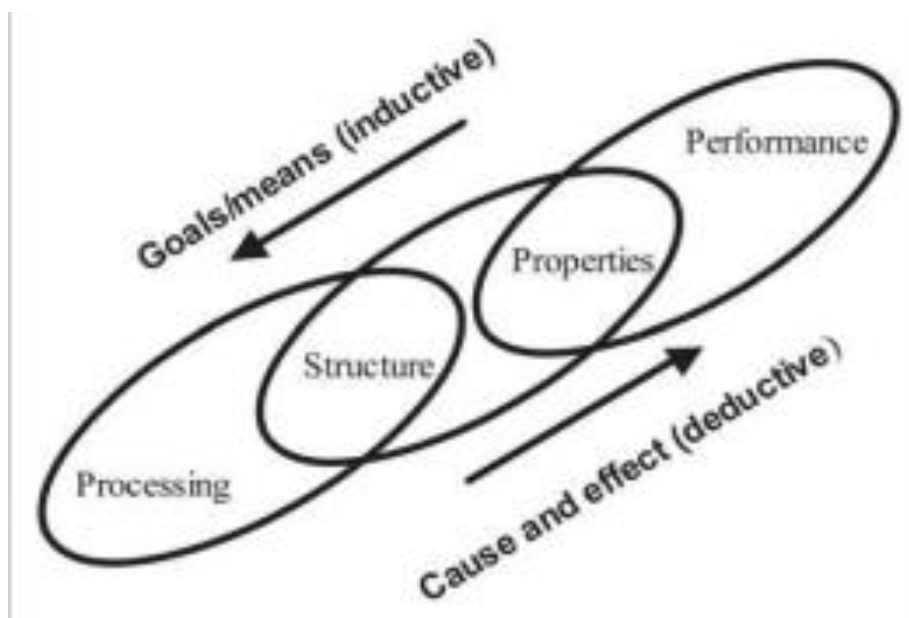


Рисунок 1. Иерархическая концепция Олсона [13]

Связь между явно разрозненными наборами данных является критическим компонентом интерпретации поведения материалов, особенно с точки зрения оценки влияния микроскопических характеристик материалов на их макроскопическое или инженерное поведение. В работе [18] демонстрируется значение анализа основных компонент данных свойств, связанных с высокотемпературной сверхпроводимостью, для изучения статистического воздействия собственных характеристик материалов на высокотемпературное сверхпроводящее поведение. Авторами [19] рассматривается взаимосвязь между микроскопическими характеристиками материалов и их макроскопическими свойствами. В этой статье демонстрируется анализ основных свойств, связанных с высокотемпературной сверхпроводимостью.

В работах [20-21] рассмотрен подход разработки программного обеспечения, позволяющий отбирать материал по функциональным свойствам. Сама процедура использует экспериментально полученные графики и методы оптимизации для моментального отбора одновременно материала и формы.

### **Заключение**

Анализ литературных данных показал, что способы компьютерного моделирования материалов можно разделить на 3 основные группы.

1. Подходы, в которых для выбранных значений функциональных свойств процесс отбора материалов базируется на комбинаторном поиске в базе экспериментальных данных.

2. Компьютерное моделирование, базирующееся на вычислительных методах и теоретических основах физического материаловедения, где для ускорения открытия новых материалов используется подход «снизу-вверх», включающий квантовое и молекулярное моделирование.

3. Способы моделирования материалов, основанные на интегрировании вычислительной стимуляции, системного инжиниринга, производства и дизайна.

В то же время все перечисленные подходы разработаны для объемных материалов и не адаптированы для защитных покрытий. Поэтому создание методики моделирования компьютерного дизайна композиционных покрытий с заданными функциональными свойствами является актуальной задачей в области информационных систем.

### **Признательность**

Работа выполнена при поддержке проекта AP05130069 «Разработка нанотехнологии синтеза функциональных гальванических покрытий для комплектующих электрооборудования» научно-исследовательского института экспериментальной и теоретической физики Казахского Национального университета им. аль-Фараби.

### **Литература**

1. David L. McDowell. Simulation-assisted materials design for the concurrent design of materials and products // *Journal of The Minerals*, Volume 59, № 9, - pp 21–25.

2. Dong X., Oganov A.R., Brazhkin V.V., Wang Q, Zhang J, Davari M, Zhou X.-F., Wu F., and Zhu Q. Boron oxides under pressure: Prediction of the hardest oxides.// *Phys. Rev. B*. 98, 174109. (2018).

3. Yar-Mukhamedova G. Nano-composition Ti-Co(Mn) coatings investigation // G.Yar-Mukhamedova, N. Sakhnenko, M.Ved', I. Yermolenko, R. Atchibayev // 18-th International Multidisciplinary Scientific Geo-Conference & EXPO – SGEM. - Bulgaria: Albena, 2018.- Pp. 267-274.

4. Yar-Mukhamedova G. Research on the improvement of mixed titania and Co(Mn) oxide nano-composite coatings // G.Yar-Mukhamedova, N. Sakhnenko, M.Ved', I. Yermolenko, R. Atchibayev / *Global Conf. on Polymer and Composite Materials* - Japan: Kitakusu, 2018.- P. 69-74.

5. Ved' M. Composition and Corrosion Behavior of Iron-Cobalt-Tungsten // M.Ved', N. Sakhnenko, I. Yermolenko, G.Yar-Mukhamedova, R. Atchibayev / *Eurasian Chemico-Technological Journal*. 2018.- Vol.20, №3.- Pp. 145-152.

6. Yar-Mukhamedova, G. Electrodeposition and properties of binary and ternary cobalt alloys with molybdenum and tungsten/ G.Yar-Mukhamedova, M.Ved', N.Sakhnenko, T.Nenastina // *Applied Surface Science*, 445 (2018) 298-307.

7. Ternary cobalt-molybdenum-zirconium coatings for alternative energies/ Yar-Mukhamedova G., Sakhnenko N., Ved' M. et. al. // *Applied Surface Science*.- 2017.- V.421.- P.68-76.
8. Kruglov I.A., Kvashnin A.G., Goncharov A.F., Oganov A.R., Lobanov S.S., Holtgrewe N., Jiang S., Prakapenka V.B., Greenberg E., Yanilkin A.V. Uranium polyhydrides at moderate pressures: Prediction, synthesis, and expected superconductivity. *Sci. Adv.*, 4, eaat9776. (2018).
9. Drozdov P., Eremets M. I., Troyan I. A., Ksenofontov V., Shylin S. I., Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system. *Nature* 525, 73–76 (2015).
10. Le Guyadec F., Génin X., Bayle J. P., Dugne O., Duhart-Barone A., Ablitzer C., Pyrophoric behaviour of uranium hydride and uranium powders. *J. Nucl. Mater.* 396, 294–302 (2010).
11. R. Orr, H. Godfrey, C. Broan, D. Goddard, G. Woodhouse, P. Durham, A. Diggle, J. Bradshaw, Kinetics of the reaction between water and uranium hydride prepared under conditions relevant to uranium storage. *J. Alloys Compd.* 695, 3727–3735 (2017).
12. Bilić, A., Gale, J. D., Gibson, M. A., Wilson, N., & McGregor, K. (2015). Prediction of novel alloy phases of Al with Sc or Ta. *Scientific Reports*, 5, 9909 (link).
13. David L. McDowell. Simulation-Assisted Materials Design for the Concurrent Design of Materials and Products // *Symposium JJ – Combinatorial and Artificial Intelligence Methods in Materials Science II*. (2003) Vol. 804. – pp.21-28.
14. Le Ferrand H. Multi-material 3D printing produces expandable microlattices // *Data-Centric Science for Materials Innovation*. Vol.43, № 9. – Pp. 649-650 (2018)
15. Lee H. Thermoelectrics: Design and Materials (2018). *MRS Bulletin*, 43(9), 712-713.
16. Seko, A., Toyoura, K., Muto, S., Mizoguchi, T., & Broderick, S. (2018). Progress in nanoinformatics and informational materials science. *MRS Bulletin*, 43(9), 690-695.
17. Suh Ch, Rajagopalan A., Li X., Rajan K. Combinatorial Materials Design through Database Science // *Symposium JJ – Combinatorial and Artificial Intelligence Methods in Materials Science II*, Vol. 804 (2003).
18. Rajagopalan A., Xiang Li, Krishna R. The application of Principal Component Analysis to materials science data // *Applied Catalysis A: General*, 254, №1 (2003).
19. Ashby M., Cebon D. Materials selection in mechanical design. *Journal de Physique IV Colloque*, Vol. 701. - pp.C7-1-C7-9. (1993).
20. Ward, L., Aykol, M., Blaiszik, B., Foster, I., Meredig, B., Saal, J., & Suram, S. (2018). Strategies for accelerating the adoption of materials informatics. *MRS Bulletin*, 43(9), 683-689.
21. Chetwynd, D.G. (1987) *Precision Engineering*, 2, (1), 3.

**Соуса М.<sup>1</sup>, Байшоланова К.<sup>2</sup>, Яр-Мухамедов Е.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Порто Университеті, Порто қ., Португалия

<sup>2</sup> Аль-Фараби атындағы Казак Ұлттық университеті., Алматы қ., Қазақстан

**БЕРІЛГЕН ҚАСИЕТТЕРІ БАР КОМПОЗИТТІК ЖАБЫНДАРДЫ КОМПЬЮТЕРЛІК  
МОДЕЛЬДЕУ ПРОБЛЕМАСЫНЫҢ ҚАЗІРГІ ЗАМАНДАҒЫ ЖАЙ – КҮЙІ.**

**Резюме:** Корсетілген мақалада берілген қасиеттері бар композиттік материалдардың дизайнын пішіндеу үшін компьютерлік модельдеу әдістерін қолдану бойынша әдеби шолу жүргізілді. Физика-механикалық қасиеттердің, эксперименттік зерттеу нәтижелері мен есептеу әдістердің кестелік деректерін пайдалану негізінде жаңа жабындарды құру тәсілдері талданады. Материалдардың компьютерлік дизайнын жасау әдістерінің классификациясы өткізілді, ол бойынша үш негізгі топтары анықталды: таңдалған мәндері үшін функционалдық қасиеттері бар материалдарды іріктеу процесі эксперименттік деректер базасына кіретін комбинаторлы іздестіруге негізделді; компьютерлік дизайн физикалық материалтанудың теориялық негіздеріне және есептеу әдістеріне негізделген, сондай-ақ материалдарды модельдеу тәсілдері, есептеуіш ынталандыру интеграциясына, жүйелік инжинирингке, өндіріс және дизайнға негізделген. Мұндай ақпарат компьютерлік модельдеудің іргелі проблемалар тұрғысынан және практикалық пайдалану үшін ұсынымдарды әзірлеу позициялары өте маңызды.

**Түйін сөздер:** компьютерлік дизайн, композиттік жабындылар, есептеу әдістері, материалдардың қасиеттерін модельдеу, физикалық материалтану теориясы

**Sauces M.<sup>1</sup>, Baisholanova K.<sup>2</sup>, Yar-Mukhamedov E.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> University of Porto, Portugal, Porto

<sup>2</sup> al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty

**MODERN CONDITION OF THE PROBLEM OF COMPUTER MODELING OF  
COMPOSITE COATINGS WITH GIVEN PROPERTIES**

**Resume:** The article reviews the literature on computer simulation methods using for design of composite materials with desired properties. Methods for creating new coatings based on physics and mechanical properties tabular data, experimental research results and computational methods are analyzed. The classification of computer-aided design methods for materials is carried out, according to which three main groups are established: approaches in which for selected values of functional properties materials selection process is based on a combinatorial search in the experimental database; computer design based on computational methods and theoretical foundations of physical materials science, as well as materials modeling methods based on the integration of computational stimulation, system engineering, production and design. Such information is extremely important both from the point of view of the fundamental computer modeling problems, and from the developing recommendations for practical use.

**Keywords:** computer design, composite coatings, computational methods, modeling of material properties, theory of physical materials science