

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПОЗИЦИОННЫХ ПОКРЫТИЙ С ЗАДАНЫМИ СВОЙСТВАМИ

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

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

<sup>2</sup> КазНУ им. Аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы

В области материаловедения исторически процесс отбора защитных покрытий проводился на базе использования табличных данных о механических, физических и др. свойствах. 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. 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. 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.

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. Другой класс подходящий для компьютерного дизайна покрытий - это базирующийся на вычислительных методах и теоретических основах физического материаловедения. Для ускорения открытия новых материалов используется вычислительная структура и подход «снизу вверх», включающий квантовое и молекулярное моделирование.

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.

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.