

УДК 677.027.62:539.217.2

DOI 10.47367/0021-3497\_2022\_6\_215

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОПИТКИ  
ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ\***

**MODELING OF IMPREGNATION  
DURING THE FORMATION OF POLYMER COMPOSITE MATERIALS**

*А.Н. БИЗЮК, Н.Н. ЯСИНСКАЯ*

*A.N. BIZIUK, N.N. YASINSKAYA*

**(Витебский государственный технологический университет, Республика Беларусь)**

**(Vitebsk State Technological University, Republic of Belarus)**

E-mail: biziuk.andrei@gmail.com; yasinskaynn@rambler.ru

*Одним из способов формирования полимерных композиционных материалов является пропитка армирующей основы полимерным связующим. От эффективности пропитки зависят свойства готового композита. Для определения оптимальных режимов пропитки требуется провести компьютерное моделирование процесса. В данной работе описывается подход к моделированию процесса пропитки тканой армирующей основы композиционного материала с использованием методов молекулярной динамики. Метод молекулярной динамики позволяет смоделировать движение отдельных частиц вещества и их взаимодействие между собой и окружающей средой. За этим процессом можно наблюдать шаг за шагом, пока не будет достигнут желаемый результат. Метод молекулярной динамики используется для моделирования процесса течения жидкости в предварительно построенной модели текстильной основы. Модель текстильной основы получена в результате имитационного моделирования взаимодействия волокон между собой. Методы имитационного моделирования позволяют получить модели процессов и объектов в тех случаях, когда аналитическое моделирование слишком сложно или невозможно. Авторами разработано кроссплатформенное программное обеспечение, осуществляющее моделирование формирования текстильной основы и ее пропитки полимерным связующим.*

\* Статья подготовлена по материалам доклада Международной научно-технической конференции «Инновации в текстиле, одежде, обуви (ИСТАИ-2022)», которая состоялась 23-24 ноября 2022 года в учреждении образования «Витебский государственный технологический университет» (Республика Беларусь).

*One of the ways to form polymer composite materials is to impregnate the reinforcing base with a polymer binder. The properties of the finished composite depend on the effectiveness of impregnation. To determine the optimal impregnation modes, a computer simulation of the process is required. This paper describes an approach to modeling of impregnation process of a composite material woven reinforcing base using molecular dynamics methods. The method of molecular dynamics allows you to simulate the movement of individual particles of matter and their interaction with each other and the environment. This process can be observed step by step until the desired result is achieved. The molecular dynamics method is used to simulate the fluid flow process in a pre-constructed textile base model. The model of the textile base is obtained as a result of simulation modeling of the interaction of fibers with each other. Simulation modeling methods make it possible to obtain models of processes and objects in cases where analytical modeling is too difficult or impossible. The authors have developed a cross-platform software that simulates the formation of a textile base and its impregnation with a polymer binder.*

**Ключевые слова:** композиционные материалы, армирующие структуры, пропитка, компьютерное моделирование, метод молекулярной динамики.

**Keywords:** composite materials, reinforcing structures, impregnation, computer modeling, molecular dynamics method.

#### *Введение*

Задача моделирования пропитки армирующих текстильных основ композиционных материалов является актуальной, так как от качества пропитки зависят свойства готового материала. Существуют различные методы моделирования текстильных материалов [1], [2]. Наиболее часто используются методы конечных элементов. Однако текстильные материалы имеют очень сложную структуру и при использовании метода конечных элементов их внутреннюю структуру упрощают. В результате теряется информация об отдельных волокнах или даже нитях и результаты моделирования отражают усредненную картину. Авторами разработаны методы моделирования структуры текстильных материалов, учитывающие положение отдельных волокон, что позволяет использовать эти модели при исследовании процессов пропитки [3...5]. Моделирование пропитки текстильных материалов можно осуществить, используя методы молекулярной динамики [6...10].

#### *Методы*

Для определения оптимальных параметров процесса формирования компози-

ционного материала, с целью достижения желаемых физико-механических свойств, требуется провести моделирование адгезии между полимерным связующим и текстильной основой [11]. В качестве моделируемых физических законов выбраны силы Ван-дер-Ваальса и силы обменного взаимодействия между молекулами [6...9].

Силы Ван-дер-Ваальса представляют собой силы притяжения и отталкивания между атомами, молекулами и поверхностями и другие силы межмолекулярного взаимодействия. Силы межмолекулярного взаимодействия состоят из четырех основных компонентов.

1. Силы отталкивания, обусловленные принципом Паули, которые предотвращают столкновение молекул.

2. Электростатические силы притяжения или отталкивания между постоянными зарядами, диполями, мультиполями.

3. Индукция (поляризация) – сила притяжения между постоянной мультиполью в одной молекуле и поляризованной мультиполью в другой молекуле.

4. Дипольное взаимодействие. Сила притяжения между любой парой молекул,

включая неполярные атомы, возникающая из-за взаимодействий мультиполей.

Силы Ван-дер-Ваальса являются анизотропными, то есть они зависят от взаимного расположения молекул. Индукционные и дисперсионные взаимодействия всегда направлены на сближение молекул, независимо от ориентации, но электростатическое взаимодействие меняет направление в зависимости от вращения молекул. Когда молекулы находятся в температурном движении, как это происходит в газах и жидкостях, электростатические силы в значительной степени усредняются.

Для моделирования изотропной части общей (притягивающей и отталкивающей) силы Ван-дер-Ваальса как функции от расстояния часто используется модель потенциала Леннард-Джонса, которая достаточно реалистично передает свойства взаимодействия между частицами [10]. Потенциал Леннард-Джонса описывается следующей формулой:

$$U(r) = 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right), \quad (1)$$

где  $r$  – расстояние между центрами частиц;  $\epsilon$  – глубина потенциальной ямы;  $\sigma$  – расстояние, на котором достигается равновесие сил притяжения и отталкивания. Параметры  $\epsilon$  и  $\sigma$  являются характеристиками частиц взаимодействующих веществ и определяются экспериментально.

Свойства жидкостей и газов обусловлены взаимодействием молекул. Имитационное моделирование взаимодействия отдельных молекул возможно, но при необходимости изучения процессов пропитки текстильных материалов потребуется моделировать относительно большие объемы жидкости с огромным количеством молекул. Такая задача потребует слишком больших объемов оперативной памяти для хранения информации о молекулах, и вычислительная сложность этой задачи будет слишком высока. Решить эту проблему можно моделируя не отдельные молекулы, а частички жидкости большего размера. При этом их размер будет определять минимальный раз-

мер пор волокнистого материала, процесс пропитки которого мы будем изучать.

При моделировании поведения жидкости нужно учитывать:

- силы взаимодействия частичек между собой (притягивание, отталкивание);
- атмосферное давление, действующее на поверхность жидкости;
- взаимодействие частичек с волокнистым материалом;
- силу тяжести.

Как было указано ранее, взаимодействие молекул в жидкостях и газах достаточно хорошо описывается потенциалом Леннард-Джонса (1).

Эта формула позволяет определить силу, которая действует на частицу со стороны другой частицы, находящейся на расстоянии  $r$ . При больших значениях  $r$ , когда  $r > \sigma$ , частицы притягиваются, а при малых – отталкиваются.

Для имитационного моделирования взаимодействия частиц нужно задать ряд параметров:

- размеры частиц (радиусы  $R$ );
- начальное положение частиц;
- плотность вещества частиц  $\rho$ ;
- шаг времени моделирования  $dt$ ;
- параметры  $\epsilon$  и  $\sigma$  потенциала Леннард-Джонса.

Каждая частица характеризуется набором свойств:

- номер частицы  $i$ ;
- координаты в пространстве  $x, y, z$ ;
- проекции вектора скорости  $v_x, v_y, v_z$ .

Моделирование состоит в последовательном пересчете положения частиц в пространстве через равные интервалы времени  $dt$ . При расчете нового положения частицы в пространстве определяется воздействие каждой другой частицы на данную. Пусть мы рассчитываем новое положение частицы  $i$ .

1. Для каждой частицы  $j$ , при  $i \neq j$ , вычисляем  $r$ .

2. Вычисляем силу  $U(r)$  взаимодействия частиц по формуле потенциала Леннард-Джонса.

3. Вычисляем ускорение, сообщаемое этой силой частице за время  $dt$  по формуле  $a = U/m \cdot dt$ , где  $m$  – масса частицы.

4. Определяем вектор направления воздействия силы,  $V(x_j-x_i, y_j-y_i, z_j-z_i)$ . Нормализуем этот вектор,  $V = V/||V||$ .

5. Вычисляем изменение скорости частицы  $i$  за время  $dt$ .  $v_x = v_x - a \cdot xV$ ,  $v_y = v_y - a \cdot yV$ ,  $v_z = v_z - a \cdot zV$ .

6. После того как рассмотрены все частицы  $j$ , вычисляем новое положение частицы  $i$  в пространстве.  $x = v_x \cdot dt$ ,  $y = v_y \cdot dt$ ,  $z = v_z \cdot dt$ ,

Чем меньше значение  $dt$ , тем выше точность расчета, но тем больше объем вычислений, необходимый для моделирования заданного отрезка времени, так как требуется большее число шагов алгоритма

Атмосферное давление воздействует на те частички жидкости, которые непосредственно контактируют с воздухом. Результирующая сила воздействия атмосферного давления на частичку и направление этой силы зависят от того, какая часть поверхности частицы контактирует с атмосферой. Точный расчет площади контакта и направления воздействия для каждой частицы потребовал бы значительных ресурсов. Для практических целей моделирования рассматривались 12 возможных направлений воздействия силы атмосферного давления на частицу. Сила, действующая на частицу с каждого направления, выбиралась равной  $1/12$  от общей силы воздействия атмосферного давления на площадь поверхности частицы. Площадь поверхности частицы  $S$  зависит от ее радиуса  $R$  и равна  $S = 4\pi R^2$ . Атмосферное давление  $P$  выбрано равным  $P = 100000$  Па =  $100000$  Н/м<sup>2</sup>. Сила  $F$ , действующая на частицу с каждого из 12 направлений, равна  $F = P \cdot S/12$ ;

Направления воздействия атмосферного давления на частицу должны быть равномерно распределены по сферической поверхности частицы. Для достижения равномерного распределения воздействия был произведен расчет единичных векторов воздействия. Точки, равномерно распределенные по сфере, являются вершинами правильного многогранника. Правильным

многогранником с 12 вершинами является икосаэдр.

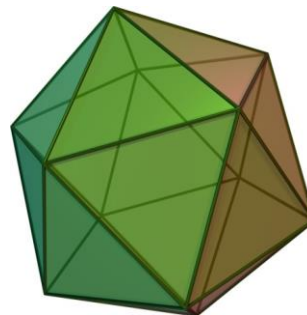


Рис. 1

Координаты вершин икосаэдра (рис. 1) с центром в точке 0 и длиной ребра 2 можно найти как циклические перестановки точки  $(0, \pm 1, \pm g)$ , где  $g = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$  – соотношение золотого сечения. Векторы, направленные из центра икосаэдра к его вершинам, будут иметь одинаковые с вершинами координаты. Для использования в качестве направлений воздействия атмосферного давления векторы нужно нормализовать, то есть изменить их длину до значения 1, сохранив направление. Нормализацию вектора можно осуществить, разделив каждую его координату на длину вектора. В результате расчетов получены следующие векторы (табл. 1):

Таблица 1

№	Вектор
1	(0, 0.525731, 0.850651)
2	(0, 0.525731, -0.850651)
3	(0, -0.525731, 0.850651)
4	(0, -0.525731, -0.850651)
5	(0.850651, 0, 0.525731)
6	(-0.850651, 0, 0.525731)
7	(0.850651, 0, -0.525731)
8	(-0.850651, 0, -0.525731)
9	(0.525731, 0.850651, 0)
10	(-0.525731, 0.850651, 0)
11	(0.525731, -0.850651, 0)
12	(-0.525731, -0.850651, 0)

Для определения, с каких направлений на частицу воздействует атмосферное давление, а с каких – нет, определяется направление к ближайшим частицам жидкости и расстояние до них. Если рядом с рассматриваемой частицей на расстоянии ближе, чем

минимальное пороговое расстояние, на котором частицы начинают притягиваться, находится другая частица, то некоторые направления воздействия атмосферного давления на рассматриваемую частицу будут заблокированы. Какие именно направления будут заблокированы, определяется в результате расчета косинусов углов между нормализованными векторами воздействия атмосферного давления и нормализованным вектором направления от рассматриваемой частицы к другой частице. Косинус угла между этими векторами можно получить, найдя их скалярное произведение. Если косинус угла превышает некоторое пороговое значение, то угол между векторами меньше некоторого порогового угла и это направление воздействия атмосферного давления будем считать заблокированным. Для моделирования был выбран угол 50 градусов.

Алгоритм расчета воздействия атмосферного давления на частицу жидкости с номером  $i$ :

1. Для каждой частицы  $j$ , при  $i \neq j$ , определяем расстояние  $r$  между частицами  $i$  и  $j$  и вектор направления  $v_{ij}$  от  $i$  к  $j$ .

2. Нормализуем вектор  $v_{ij}$ .

3. Определяем косинус угла между нормализованным вектором  $v_{ij}$  и каждым из векторов направлений воздействия атмосферного давления как их скалярное произведение.

4. Если для какого-либо вектора направления воздействия атмосферного давления косинус угла оказывается большим, чем  $\cos(50^\circ) = \cos(\pi/3.6)$ , то это направление считаем заблокированным.

5. Если после рассмотрения всех частиц  $j$  остались незаблокированные направления воздействия атмосферного давления, то вычисляем для них воздействие на скорость частицы  $i$  за время  $dt$ .  $v_x = v_x - F/m \cdot dt \cdot xVa$ ,  $v_y = v_y - F/m \cdot dt \cdot yVa$ ,  $v_z = v_z - F/m \cdot dt \cdot zVa$ , где  $xVa$ ,  $yVa$ ,  $zVa$  – компоненты незаблокированного вектора воздействия атмосферного давления.

Взаимодействие частичек жидкости с частичками твердого вещества достаточно точно описывается потенциалом Леннарда-Джонса в форме 9-3:

$$U(r) = \frac{3\sqrt{3}}{2} \varepsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r} \right)^9 - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^3 \right). \quad (2)$$

Процедура расчета взаимодействия частичек жидкости с волокнистым материалом аналогична описанной ранее, за исключением того, что используется потенциал Леннарда-Джонса в форме 9-3 и рассматривается воздействие частичек волокнистого материала (находящихся вблизи) на частичку жидкости.

При пропитке волокнистого материала жидкостью сила тяжести, действующая на жидкость, может оказать заметное влияние на этот процесс. Модель должна учитывать эффект, оказываемый силой тяжести.

Для моделирования воздействия силы тяжести на жидкость рассчитывается изменение скорости каждой отдельной частички под действием силы тяжести за время  $dt$ .

$$\begin{aligned} v_x &= v_x + g V_{xg} dt, \\ v_y &= v_y + g V_{yg} dt, \\ v_z &= v_z - g V_{zg} dt, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $v(v_x, v_y, v_z)$  – вектор скорости частицы;  $g$  – ускорение свободного падения;  $Vg(V_{xg}, V_{yg}, V_{zg})$  – вектор направления силы тяжести.

#### Результаты и обсуждения

Метод, описанный в статье, реализован авторами в программном продукте, позволяющем сформировать модель текстильного материала по заданным параметрам (линейная плотность, тип волокон, текстильное переплетение и др.) и смоделировать процесс пропитки этого материала жидкостью. На рис. 2 представлен интерфейс программы с загруженной трехмерной моделью участка ткани, а также проникновение частичек жидкости между волокнами материала.

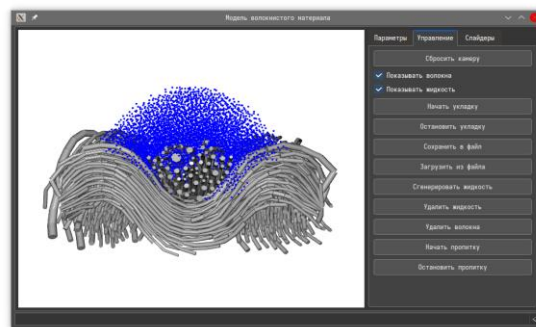


Рис. 2

Разработанный метод может быть применен при решении задач проектирования композиционных текстильных материалов. Разработанное программное обеспечение подтверждает работоспособность метода моделирования.

## ВЫВОДЫ

Проведено компьютерное моделирование процесса пропитки армирующей ткани полимерным связующим для прогнозирования оптимальных режимов технологического процесса формирования композиционных материалов. Использован метод молекулярной динамики, позволяющий смоделировать движение отдельных частиц вещества и их взаимодействие между собой и окружающей средой. Разработано кроссплатформенное программное обеспечение, осуществляющее моделирование формирования тканого армирующего материала и его пропитки полимерным связующим.

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Chen X.* Modelling and predicting textile behaviour. – Cambridge: Woodhead Publishing, 2010.
2. *Севостьянов П.А., Забродин Д.А., Дасюк П.Е.* Компьютерное моделирование в задачах исследования текстильных материалов и производств. – М.: "Тисо Принт", 2014.
3. *Ясинская Н.Н., Бизюк А.Н., Разумеев К.Э.* Моделирование структуры текстильных материалов для формирования слоистых композитов // Изв. вузов. Технология текстильной промышленности. – 2018, №6. С. 273...277.
4. *Bizyuk A. N., Yasinskaya N. N.* Development of a Method for the Experimental Study of the Capillary-Porous Structure of Yarn Filaments // Fibre Chemistry. – 2021. V. 52. P. 435...438.
5. *Biziuk A., Yasinskaya N.* A new approach to modeling reinforcing textile structures for composite materials // AIP Conference Proceedings. – 2022. V. 2430.
6. *Каплан И.Г., Безруков Д.С., Рябинкин И.Г.* Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы / Под ред. Степанова Н.Ф. – 3-е изд. – М.: Лаборатория знаний, 2017.
7. *Rapaport D. K.* Искусство молекулярной динамики. – Ижевск: ИКИ, 2012.

8. *Frenkel D., Smit B.* Understanding Molecular Simulation. – 2001.
9. *Griebel M., Knapek S., Zumbusch G.* Numerical Simulation in Molecular Dynamics. – Berlin, Heidelberg: Springer, 2007.
10. *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer Simulation of Liquids. – Oxford University Press, 1990.
11. *Королев П.В., Матрохин А.Ю., Шилов М.А., Королева С.В.* Моделирование адгезионного контакта в однонаправленных композитах // Изв. вузов. Технология текстильной промышленности. – 2021, №6. С. 44...50.

## REFERENCES

1. *Chen X.* Modelling and predicting textile behaviour. – Cambridge: Woodhead Publishing, 2010.
  2. *Sevostyanov P. A., Zabrodin D. A., Dasyuk P. E.* Computer modeling in the problems of research of textile materials and industries. – Moscow: Tiso Print, 2014.
  3. *Yasinskaya N. N., Bizyuk A. N., Razumaev K. E.* Modeling of textile materials structure for forming layered composites // // Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Seriya Tekhnologiya Tekstil'noi Promyshlennosti. – 2018, № 6. P. 273...277.
  4. *Bizyuk A. N., Yasinskaya N. N.* Development of a Method for the Experimental Study of the Capillary-Porous Structure of Yarn Filaments // Fibre Chemistry. – 2021. V. 52. P. 435...438.
  5. *Biziuk A., Yasinskaya N.* A new approach to modeling reinforcing textile structures for composite materials // AIP Conference Proceedings. – 2022. V.2430.
  6. *Kaplan I. G., Bezrukov D.S., Ryabinkin I.G.; Ed. Stepanov N.F.* Intermolecular interactions. Physical interpretation, computer calculations and model potentials / 3rd ed. – Moscow: Laboratory of Knowledge, 2017.
  7. *Rapaport D. K.* The art of molecular dynamics. – Izhevsk: IKI, 2012.
  8. *Frenkel D., Smit B.* Understanding Molecular Simulation, 2001.
  9. *Griebel M., Knapek S., Zumbusch G.* Numerical Simulation in Molecular Dynamics. – Berlin, Heidelberg: Springer, 2007.
  10. *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer Simulation of Liquids. – Oxford University Press, 1990.
  11. *Korolev P.V., Matrokhin A.YU., Shilov S.V., Koroleva S.V.* Modeling of adhesive cutting in one-directional composites // Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Seriya Tekhnologiya Tekstil'noi Promyshlennosti. – 2021, № 6. P. 44...50.
- Рекомендована организационным комитетом Международной научно-технической конференции "Инновации в текстиле, одежде, обуви (ICTAI-2022)". Поступила 31.10.22.