

### Conceptual Principles of Integration of Open Virtual Laboratory Complexes

The integration of virtual laboratory complexes to conduct remote experiments with computer models and their management is impossible without use of an automated system (AS). A model of the laboratory complexes formation in accordance with open systems technology and conceptual approaches to the AS architecture design is proposed.

**Key words:** information systems, mathematical modeling, virtual experiment.

УДК 51-74:519.711:519.714:666.972.7

**А. Н. Бормотов**, кандидат технических наук, доцент, Пензенская государственная технологическая академия  
**И. А. Прошин**, доктор технических наук, профессор, Пензенская государственная технологическая академия  
**А. В. Васильков**, ОАО «Научно-производственное предприятие «Рубин», Пенза

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ЛИОФИЛЬНЫХ СИСТЕМ ПРИ НАЛИЧИИ СОЛЬВАТНЫХ СЛОЕВ\*

Предлагается система компьютерного и имитационного моделирования композитов, включающая в себя методики проведения численного и натурального эксперимента, методы моделирования структурообразования, алгоритмы и комплекс программ, позволяющая установить влияние основных рецептурно-технологических факторов на процесс структурообразования лиофильных дисперсных систем при наличии сольватных слоев и подтверждающая адекватность полученных качественных аналитических решений.

**Ключевые слова:** математические модели, моделирование, компьютерное моделирование, управление качеством, многокритериальный синтез, структурообразование, композиционные материалы.

Для моделирования дисперсных систем, состоящих из частиц, на поверхности которых находятся сольватные слои дисперсионной среды, потенциал парного взаимодействия представлен суммой выражения функции потенциала Леннарда – Джонса с функцией Гаусса [1]:

$$U(r_{ij}) = U_0 \left( \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^6 + e^{-(r_{ij}-r_0)^2} \right),$$

где  $r_{ij}$  – модуль расстояния между  $i$ -й и  $j$ -й частицами;  $U_0$  – константа ( $U_0 = 10^{-23}$  Дж).

Потенциал имеет три участка монотонности. Между участками убывания расположен участок возрастания. При выбранном выражении потенциала силы притяжения действуют между частицами, находящимися на расстояниях от  $r_0$  до  $r_1 = 1,464r_0$ . Другие значения расстояний соответствуют силам отталкивания (рис. 1). Образование флокул возможно при преодолении частицами потенциального барьера, образованного сольватным слоем.

Для исследования эволюции дисперсных систем разработано не имеющее аналогов ПО. Программный продукт является автономным (не требует для работы других пакетов численного анализа) и реализован на стандартном языке ANSI C (ANSI X3.158-1989) для операционных систем Windows NT/2000/XP, а также POSIX-совместимых вычислительных платформ.

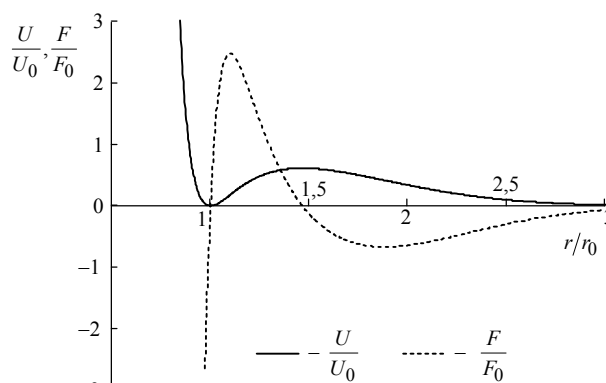


Рис. 1. Потенциал и сила парного взаимодействия для лиофильных систем при наличии сольватных слоев на поверхности частиц

Исполнение ПО начинается с синтаксического анализа командной строки, в которой передается имя управляющей программы.

Управляющая программа содержит текстовое описание моделируемой системы, в котором, в свою очередь, должны быть определены общие параметры системы (число сферических частиц, распределение их по размерам и плотности), начальные условия (пространственное распределение частиц), расположение и вид границ (плоскости, сферы), вид функций парного взаимодействия и взаимодействия с границами, численные значения коэффициентов, входя-

сих в выражения для функций взаимодействия. Данная информация инкапсулируется в объекте, содержащем описание системы частиц.

Процесс моделирования начинается с создания объекта мониторинга, один из методов которого периодически вызывается в процессе решения. В данном объекте реализованы, в частности, процедуры статистического анализа и графического отображения результатов.

Текущее значение состояния дисперсной системы используется для графического представления результатов расчета, а также для автоматической генерации программ на входном языке пакета 3D Studio MAX. После завершения расчета полученные программы используются для создания растрового изображения моделируемой дисперсной системы.

Графические представления взаимного расположения частиц достаточно наглядны, однако не позволяют сделать выводы относительно значений характерного времени структурообразования и характерных перемещений частиц в процессе эволюции дисперсной системы. Оценить указанные параметры можно только на основе статистического анализа изменения положений частиц.

Для этого целесообразно использовать следующие показатели:

$$R_{4av} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N R_{4i}; \quad R_{4std} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (R_{4i} - R_{4av})^2};$$

$$Nn_{av} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Nn_i; \quad Nn_{std} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (Nn_i - Nn_{av})^2};$$

$$Ns_{av} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^K Ns_k; \quad Ns_{std} = \sqrt{\frac{1}{K-1} \sum_{k=1}^K (Ns_k - Ns_{av})^2},$$

где  $R_{4i}$  – расстояния от поверхности  $i$ -й частицы ( $i = \overline{1, N}$ ,  $N$  – число частиц) до поверхности четырех ближайших частиц (для  $i$ -й частицы усреднение проводится по числу ближайших);  $R_{4av}$ ,  $R_{4std}$  – соответственно, оценки среднего и среднего квадратичного отклонения расстояния от  $i$ -й частицы ( $i = \overline{1, N}$ ) до четырех ближайших к ней;  $Nn_i$  – число частиц, расстояние до поверхности которых (от поверхности  $i$ -й частицы) не превышает заданного значения;  $Nn_{av}$ ,  $Nn_{std}$  – соответственно, оценки среднего и среднего квадратичного отклонения числа частиц, расстояние до которых от данной не превышает заданного значения;  $Ns_k$  – число частиц, находящихся в  $k$ -й подобласти ( $k = \overline{1, K}$ ,  $K$  – число подобластей) выпуклой оболочки всех  $N$  частиц;  $Ns_{av}$ ,  $Ns_{std}$  – соответственно, оценки среднего и среднего квадратичного отклонения числа частиц, находящихся в  $k$ -й подобласти ( $k = \overline{1, K}$ ) выпуклой оболочки всех частиц;  $K$  – число подобластей.

Для нахождения числа частиц  $Ns_k$  производилось построение ограничивающего прямоугольного параллелепипеда, который затем разделялся на 27 равных подобластей.

Численный эксперимент был выполнен для семи систем. Диаметр частиц составлял 1 мкм, вязкость дисперсионной среды –  $10^{-8}$  Па·с. Частицы распределялись внутри сферы радиусом 10 мкм, начальное распределение частиц подчинено закону равномерной плотности. Число частиц  $N_f$  связано с объемной степенью заполнения  $v_f$  выражением

$$N_f = v_f \left( R_b / R_f \right)^3, \text{ где } R_b \text{ – радиус сферы, в объеме которой распределены частицы (} R_b = 10 \text{ мкм); } R_f \text{ – радиус частиц (} R_f = 1 \text{ мкм).}$$

В системах № 1...6 граничные поверхности отсутствовали. В системе № 7 граничной поверхностью являлась сфера радиусом 15 мкм.

Наличие на зависимости  $U = U(r_{ij})$  участка возрастания вносит существенные особенности в характер эволюции моделируемых систем. Доминирующее влияние на окончательную конфигурацию частиц оказывает начальное значение объемной степени заполнения.

Характеристики систем приведены в таблице.

#### Характеристики моделируемых систем

№ системы	$N_f$	$v_f$
101-BND_0_24	10	0,01
202-BND_0_12	20	0,02
303-BND_0_06	40	0,04
404-BND_0_03	80	0,08
505-BND_0_01	120	0,12
6	160	0,16
7	80	0,08

С увеличением  $v_f$  возрастает число частиц, которые в исходном состоянии расположены на расстояниях  $r \in (r_0, r_1)$ , соответствующих возрастанию потенциала. В системе № 1 таких частиц четыре, и в процессе эволюции образуются две двухчастичные флокулы (рис. 2).

При увеличении количества частиц, входящих в состав флокул, изменяется их строение. В системах № 1...3 образуются только линейные флокулы (рис. 2–4 и рис. 8); в системе № 4, наряду с линейными, образуются двумерные флокулы (рис. 5 и 9, а). В системах № 5 и 6 большая часть частиц входит в трехмерные флокулы (рис. 6 и 7, рис. 9, б и рис. 10).

В системе № 6 практически все частицы в исходном состоянии расположены таким образом, что для каждой из них существует по меньшей мере одна, находящаяся от нее на расстоянии меньшем  $r_1$ . Поэтому система № 6 распадается на небольшое число флокул так, что в пределах каждой флокулы возможен переход между двумя любыми частицами по цепочке, частицы на которой находятся ближе, чем  $r_1$  (рис. 7).

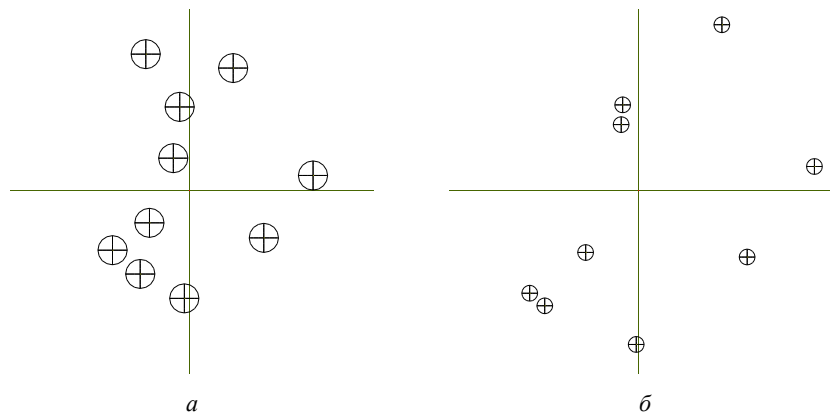


Рис. 2. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 1

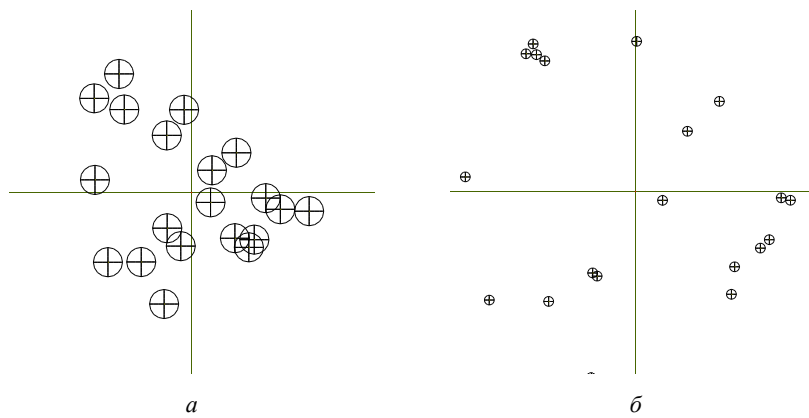


Рис. 3. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 2

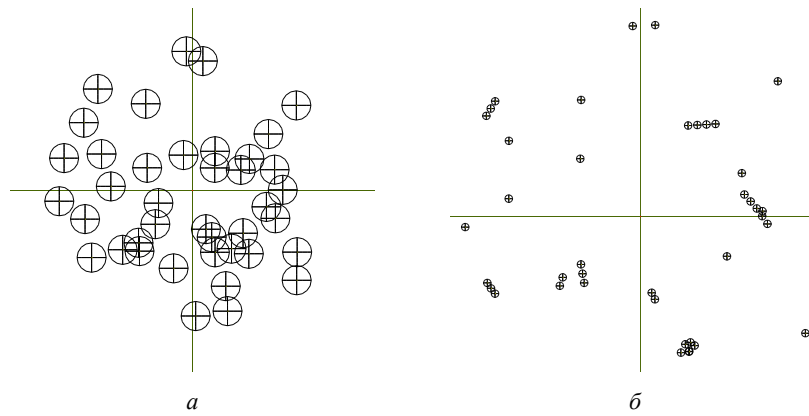


Рис. 4. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 3

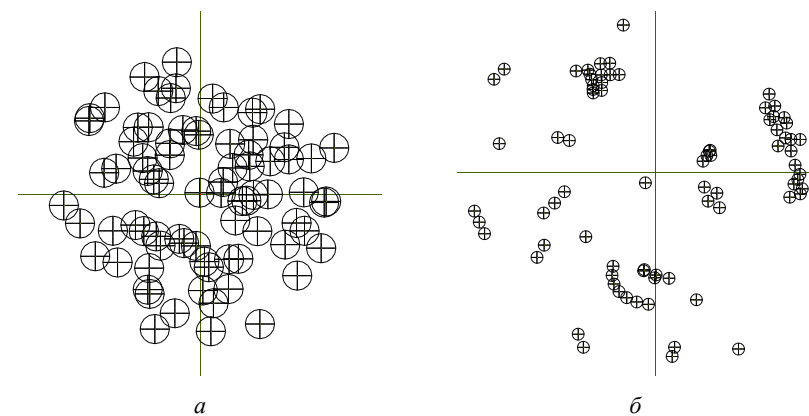


Рис. 5. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 4

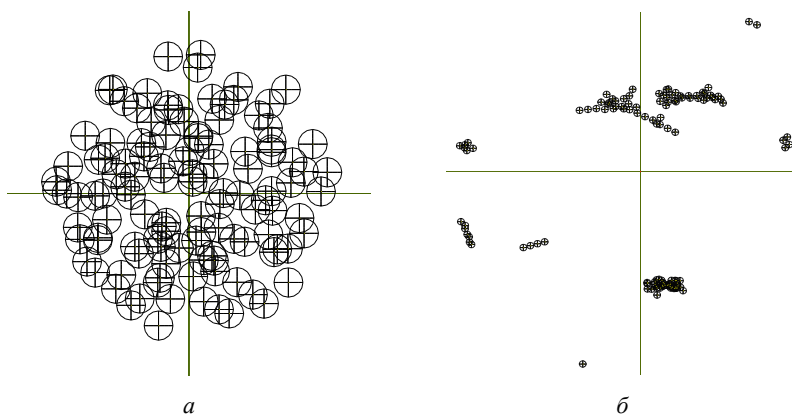


Рис. 6. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 5

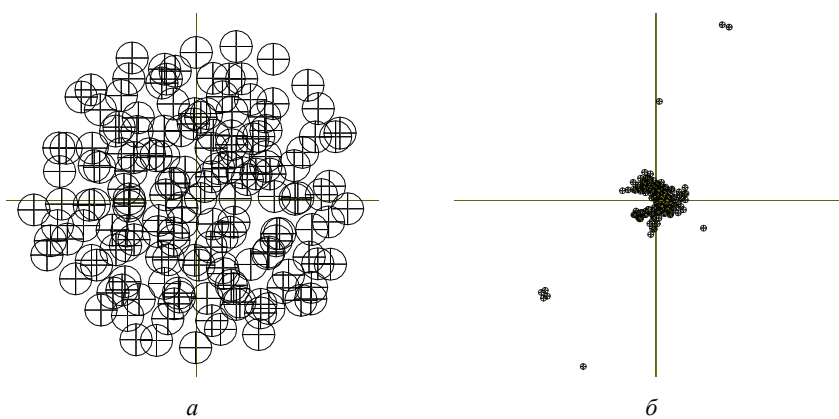


Рис. 7. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 6

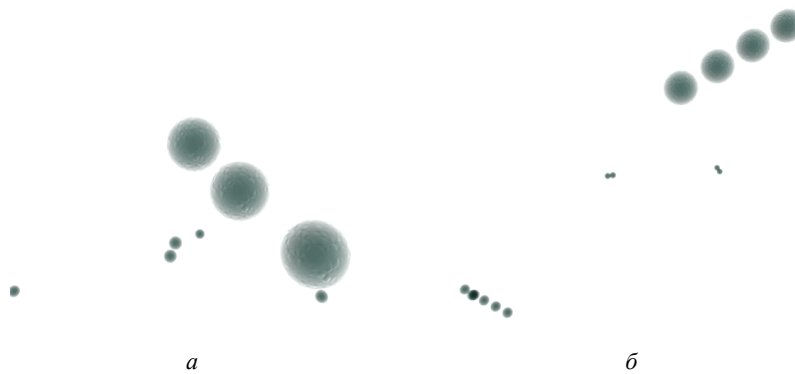


Рис. 8. Линейные флокулы в системах № 2 (а) и № 3 (б)

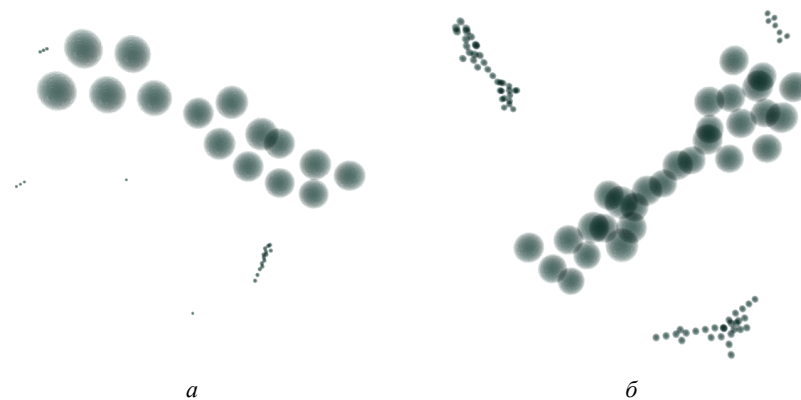


Рис. 9. Двумерные флокулы в системах № 4 (а) и № 5 (б)

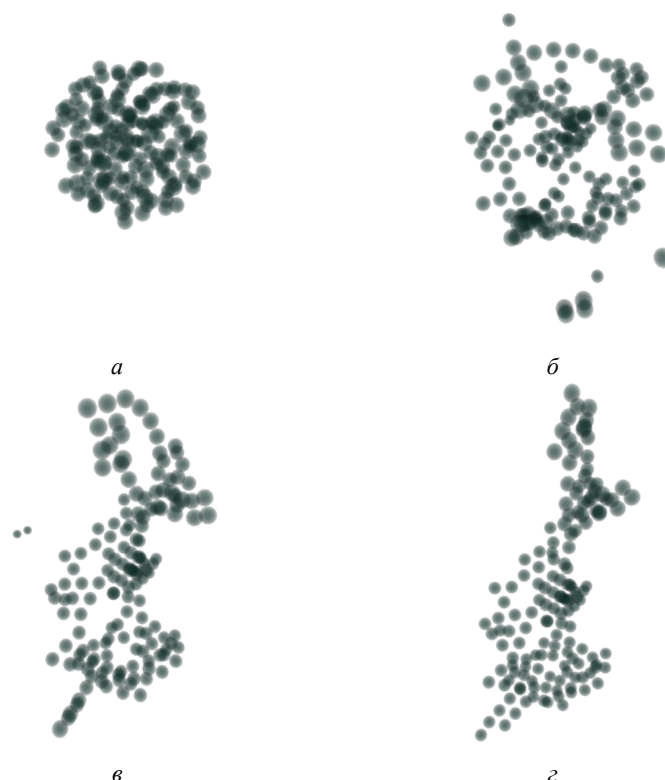


Рис. 10. Эволюция центральной флокулы в системе № 6:  
 а – начальное распределение частиц; б – распределение частиц через 10 с; в – распределение частиц через 30 с;  
 г – окончательная конфигурация (время 300 с)

Полученные данные показывают, что в малых областях внутри флокул средние расстояния между ближайшими частицами неизменны, поэтому параметр  $R_4$  непригоден для адекватного описания эволюции в локальных областях. Причины этого различны для мало- и высоконаполненных систем.

В малонаполненных системах среднее число частиц, находящихся от данной на расстоянии меньшем  $r_1$ , близко к единице, меняется от нуля для изолированной частицы до двух для частицы в линейной флокуле.

При увеличении объемной степени наполнения число изолированных флокул уменьшается. В системах № 5 и 6 среднее число частиц, находящихся от данной на расстоянии меньше  $r_1$ , превышает 4. Однако формирование одиночной флокулы, в состав которой входят практически все частицы системы, затруднено, так как сложение потенциалов отдельных частиц приводит к возникновению центрального поля сил отталкивания значительной интенсивности. Поэтому если в системе имеется хотя бы одна изолированная частица (или флокула), движение этой частицы в поле сил отталкивания приводит к быстрому возрастанию среднего  $R_{4av}$  и в особенности  $R_{4std}$ .

Для системы № 1 доля частиц, вошедших во флокулярные образования, незначительна, поэтому  $N_{S_{std}}$  практически не изменяется со временем. Увеличение объемной степени наполнения при переходе к системе № 2 сопровождается возрастанием  $N_{S_{std}}$ , однако окончательное значение только на 25 % превышает

первоначальное. В этом отношении характер эволюции исследованных систем аналогичен характеру эволюции лиофильных систем без сольватных слоев.

Влияние сольватных слоев на однородность системы в целом наиболее ярко выражено при больших значениях объемной доли дисперсной фазы. В процессе эволюции системы № 5 ее неоднородность возрастает в пять раз, а неоднородность системы № 6 – более чем на порядок. Столь существенное изменение однородности не является характерным даже для лиофобных систем.

Для системы № 6 показатель  $N_{S_{std}}$  практически достигает установившегося значения. Асимптотический характер изменения неоднородности связан с тем, что уже на начальных стадиях эволюции линейные размеры выпуклой оболочки всех частиц более чем в три раза превышают размеры центральной флокулы.

Значение показателя  $N_{S_{std}}$ , характеризующего неоднородность системы в целом, также определяется исходным значением объемной степени наполнения.

Особенности процесса эволюции лиофильных систем при наличии сольватных слоев позволяют в качестве наиболее адекватной характеристики их структуры принять отношение числа  $N_p$  изолированных образований к общему числу частиц  $N_f$ .

Зависимость  $\frac{N_p}{N_f}$  имеет обратный характер, по-

этому с увеличением  $v_f$  относительное число изолированных образований снижается. При объемной

доле дисперсной фазы, равной  $v_f = 0,16$ , доля таких образований пренебрежимо мала; практически все частицы входят в состав единой флокулы, имеющей достаточно сложную пространственную конфигурацию.

Наличие в системе № 7 граничной поверхности изменяет характер эволюции: движение частиц приобретает финитный характер и параметр  $R_{dav}$  асимптотически приближается к значению, которое несущественно отличается от первоначального. Установившееся значение  $R_{std}$  для системы № 7 примерно в три раза выше, чем для соответствующей по степени наполнения лиофобной системы.

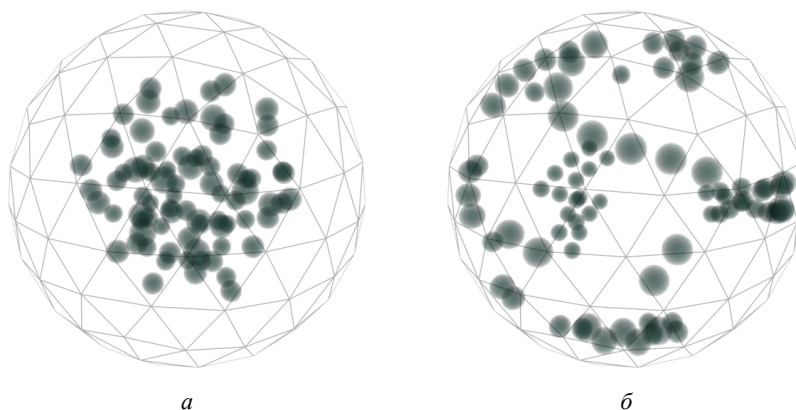


Рис. 11. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 7

Таким образом, анализ результатов численного моделирования процесса структурообразования в дисперсных системах показывает, что время их эволюции под действием сил парного взаимодействия определяется характерным расстоянием  $r_0$ , соответствующим экстремальному значению потенциала взаимодействия. В моделируемых системах  $r_0$  было принято равным радиусу частиц дисперсной фазы, поэтому время эволюции сопоставимо со временем твердения вяжущего.

В реальных дисперсных системах расстояние  $r_0$  существенно меньше размера частиц, и время эволюции под действием сил парного взаимодействия на несколько порядков превышает время твердения вяжущего [2].

Это является следствием формирования в системе № 7 отдельных изолированных линейных флокул (в случае лиофобных систем флокулы имеют развитую пространственную структуру). При этом эволюция системы № 7 на начальном этапе сопровождается незначительными флуктуациями однородности.

В отличие от лиофобной системы поле граничной поверхности не оказывает значительного влияния на флокулообразование в лиофильной системе № 7. Высокая устойчивость флокул в указанной системе объясняется завершенностью процессов структурообразования на начальных этапах эволюции. Достигая границы, флокулы распределяются по ее поверхности, не претерпевая существенных изменений (рис. 11).

Предложенный метод численного моделирования и анализа позволил установить влияние основных рецептурных факторов на процесс структурообразования лиофильных дисперсных систем при наличии сольватных слоев и подтвердил адекватность полученных аналитических решений.

#### Список литературы

1. Моделирование процессов структурообразования дисперсных систем / Бормотов А. Н. [и др.] // Тр. Междунар. конф. «Идентификация систем и задачи управления» SICPRO'05 / Ин-т пробл. упр. – М., 2005. – С. 700–724.
2. Полимерные композиционные материалы для защиты от радиации / Бормотов А. Н. [и др.] – М.: Палеотип, 2006. – 270 с.

*A. N. Bormotov*, Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, Penza State Technological Academy

*I. A. Proshin*, Doctor of Technical Sciences, Professor, Penza State Technological Academy

*A. V. Vasilkov*, JSC Research and Development Enterprise “Rubin”, Penza

#### Computer Modeling of Liophilic Systems Structurization Evolution at Presence of Solvate Layers

*The system of computer and imitating modeling of composites, including techniques of realization of numerical and full-scale experiments, methods of modeling of structurization, algorithms and a complex of the programs is offered. The system allows establishing influence of the basic prescription and technology factors on the process of liophilic disperse systems structurization in the presence of solvate layers. The adequacy of the received qualitative analytical solutions is confirmed.*

**Key words:** mathematical models, modeling, quality management, computer modeling, multicriterion synthesis, structurization, composite material.