

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 НПП «Рубин», Пенза

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ЛИОФИЛЬНЫХ СИСТЕМ*

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 и подтверждающая адекватность полученных качественных аналитических решений.

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

Для лиофильных систем потенциал парного взаимодействия и потенциал взаимодействия с граничными поверхностями являются монотонно убывающими функциями (рис. 1): между частицами действуют только силы отталкивания [1]. Финитное движение частиц обеспечивается взаимодействием с граничными поверхностями.

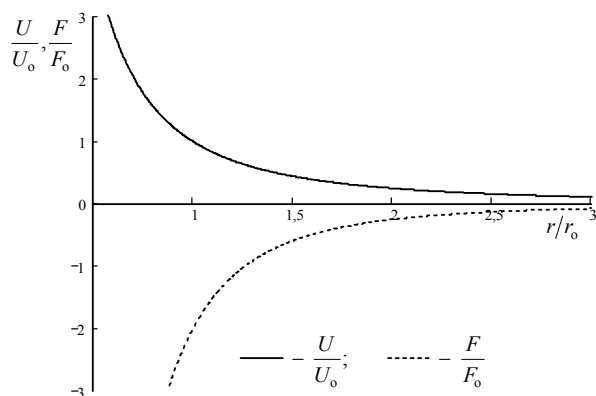


Рис. 1. Потенциал взаимодействия в лиофильных системах

Число частиц во всех системах было выбрано равным 100. Диаметр частиц составлял 1 мкм, вязкость дисперсионной среды — 10^{-8} Па·с. Начальное распределение частиц подчинено закону равномерной плотности. Частицы распределялись внутри сферы радиусом 6,4 мкм (начальное значение объемной доли дисперсной фазы $v_f = 0,37$). Радиус граничных сфер R_b связан с объемной степенью наполнения выражением (1).

Потенциал взаимодействия выбран в виде

$$U(r) = \frac{k}{r}, \quad (1)$$

где k — константа ($k = 2 \cdot 10^{-27}$ Дж·м); r — модуль межчастичного расстояния и расстояния до граничной поверхности.

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.

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, входящих 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 выполнен для пяти лиофильных дисперсных систем, характеристики которых приведены в таблице.

В результате выполненных численных экспериментов установлено, что однородность лиофильной системы в целом не только не изменяется с течением

времени (рис. 2–7), но и не зависит от объемной доли дисперсной фазы. Уменьшение v_f до 0,01 при переходе от системы № 1 к системе № 5 не влияет на Ns_{av} и Ns_{std} .

Характеристики моделируемых лиофильных систем

№ системы	R_b , мкм	v_f
101-BND_0_24	7,5	0,24
202-BND_0_12	9,5	0,12
303-BND_0_06	11,9	0,06
404-BND_0_03	15,0	0,03
505-BND_0_01	21,6	0,01

Характер эволюции лиофильных дисперсных систем требует привлечения дополнительных статистических показателей. В качестве подобного показателя, усредняемого по всем частицам в системе, можно принять число частиц Nn_i , находящихся от i -й на фиксированном расстоянии r_d *

Сходство в характере изменения величин R_4 и Nn для всех исследованных лиофильных систем позволяет выделить *три стадии их эволюции*.

На первой стадии доминирующее влияние оказывают силы парного взаимодействия. Движение под действием сил отталкивания сопровождается монотонным увеличением расстояния R_{4av} и монотонным уменьшением числа частиц Nn_{av} . Экстремальные значения R_{4av} и Nn_{av} соответствуют завершению первой стадии.

Движение частиц в течение первой стадии имеет макрокогерентный характер: значительные перемещения частиц относительно граничной сферы сопровождаются малым перераспределением частиц между центром и периферийными областями (рис. 4, а, б; рис. 7, а, б). Поэтому в момент времени, соответствующий максимальному значению R_{4av} , глобальный минимум суммарной потенциальной энергии не достигается.

Избыток потенциальной энергии системы является причиной перераспределения частиц на второй стадии процесса эволюции (рис. 4, б, в; рис. 7, б, в). Диссипация энергии сопровождается уменьшением R_{4av} . В процессе рассеивания энергии однородность локальных участков системы невысока: величина R_{4std} сохраняет примерно постоянное значение. Максимум R_{4std} соответствует завершению второй стадии (рис. 5).

Длительность процесса перераспределения частиц возрастает с уменьшением объемной доли дисперсных частиц, изменяясь от 50 с для системы № 1 до 250 с для системы № 5 (рис. 2, 7).

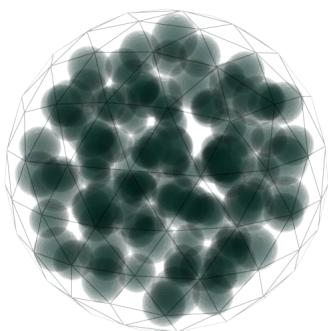
В течение третьей стадии наблюдаются малые перемещения частиц, сопровождающиеся увеличением однородности локальных участков систем; перераспределения частиц между центральными и периферийными областями не происходит (рис. 4, в, г; рис. 6, рис. 7, в, г).

Однородность систем № 1 и 2 практически монотонно возрастает с течением времени (уменьшение Nn_{std}). При объемной степени наполнения $v_f \leq 0,12$

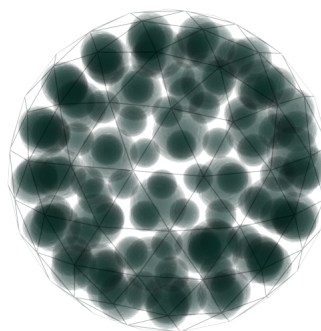
* В данной работе для исследования эволюции лиофильных систем значение rd принято равным $2Rf$.

наибольшая однородность системы в целом соответствует окончанию первой стадии. Для системы № 5

показатель однородности $Nn_{std} = 0$ как в конце первой, так и в конце третьей стадий (рис. 7).

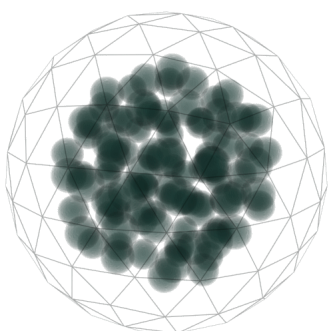


a

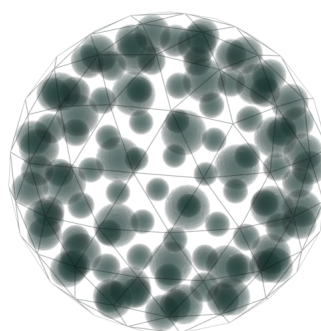


б

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

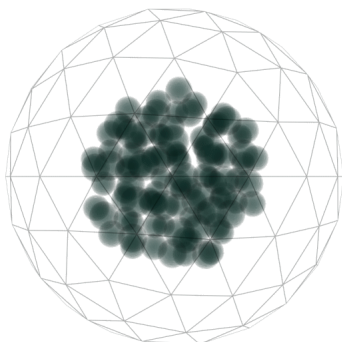


a

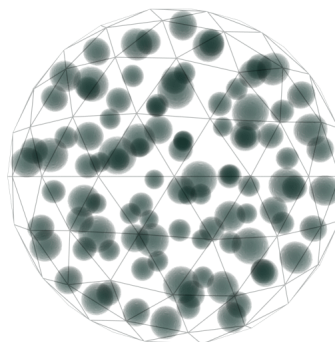


б

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

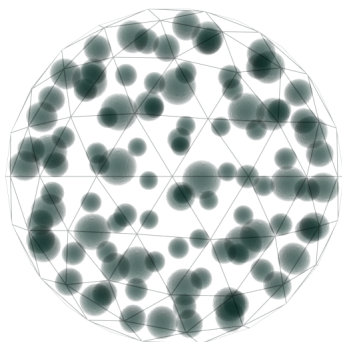


a

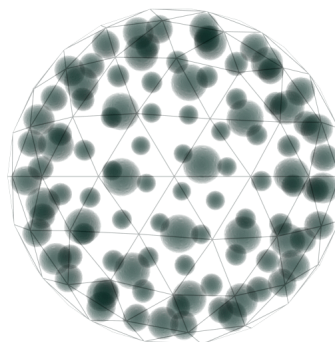


б

Рис. 4. Конфигурация частиц в системе № 5 (начало): *a* – исходная; *б* – завершение первой стадии (60 с)



в



г

Рис. 5. Конфигурации частиц в системе № 5 (окончание): *в* – завершение второй стадии (130 с); *г* – окончательная

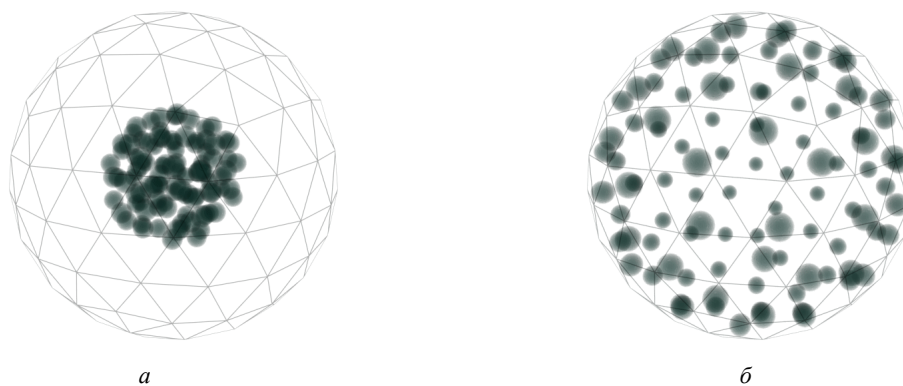


Рис. 6. Исходная (а) и окончательная (б) конфигурации частиц в системе № 4

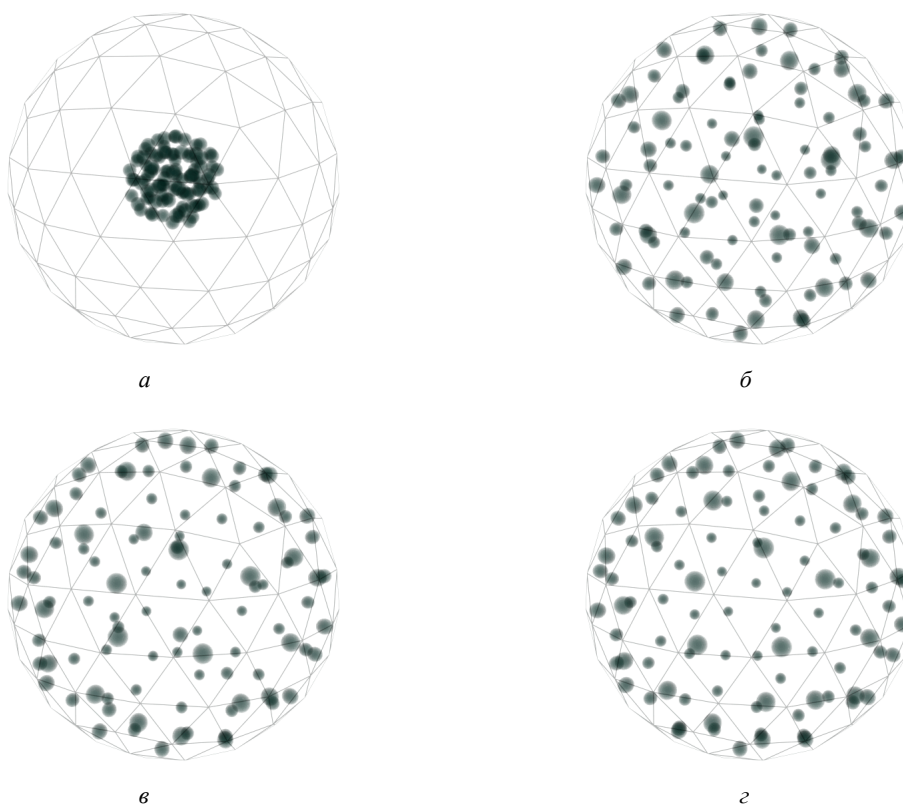


Рис. 7. Конфигурации частиц в системе № 5:
а – исходная; б – завершение первой стадии (300 с); в – завершение второй стадии (550 с); г – окончательная

Полученные результаты свидетельствуют о меньшем влиянии стесненных условий на эволюцию лиофильных систем. Значительные относительные перемещения частиц наблюдаются для всех рассмотренных лиофильных систем (объемная доля наполнителя $v_f \leq 0,24$), в то время как эволюция лиофобных систем приобретает локальный характер при $v_f > 0,1$ [2].

Предложенный метод численного моделирования и анализа позволил установить влияние основных рецептурных факторов на процесс структурообразо-

вания лиофильных дисперсных систем и подтвердил адекватность полученных аналитических решений.

Библиографические ссылки

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

Computer Modeling of Evolution of Liophilic Systems Structurization

The system of computer and imitating modeling of the composites, including techniques of realization of numerical and natural experiment, methods of modeling of structurization, algorithms and a complex of the programs is offered. The system allows establishing influence of the basic recipe and technology factors on process of liophilic disperse systems structurization and confirming adequacy of the received qualitative analytical decisions.

Key words: mathematical models, modeling, quality management, computer modeling, multicriterion synthesis, structurization (structure-forming), composite materials.

УДК 519.717.2:514.122.2

А. Г. Ложкин, кандидат технических наук, доцент, Ижевский государственный технический университет

ПРОДУКЦИЯ ЗНАНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АВТОМОРФИЗМОВ

Кратко рассматривается современное состояние продукции знаний. На основе бинарных автоморфизмов пространства дается оп-ределение симметрии знаний. Кратко описаны правила, примеры и трудности употребления автоморфизма знаний.

Ключевые слова: искусственный интеллект, автоморфизм, уровень изучения, математическая лингвистика, булева алгебра.

Основные системы искусственного интеллекта (ИИ) включают в себя [1, с. 10–12]: разработку интеллектуальных систем, основанных на знаниях; нейросетевые и нейрокомпьютерные технологии; распознавание образов; компьютерная лингвистика; интеллектуальные роботы; компьютерные вирусы; интеллектуальное математическое моделирование. Продукция новых знаний считается при этом наиболее старой областью ИИ, уступающей по возрасту только компьютерной лингвистике. Считается, что современные нейронные методики ИИ включают в себя как продукцию знаний, так и связи между объектами. Таким образом, проводится искусственное разделение между знаниями и объектами. Мы же будем предполагать, что между знаниями и объектами нет принципиального различия, поэтому остановимся на классической модели получения знаний. Тем не менее несколько слов нельзя не посвятить работе А. А. Жданова «Автономный искусственный интеллект» [2].

Работа использует математический аппарат теории автоматов, в данной статье будем руководствоваться аппаратом дискретной математики и даже такой далекой от ИИ области данной науки, как геометрия. Несмотря на разницу математической теории, нельзя не отметить фундаментальные утверждения труда Жданова:

1. Различие базовых терминов в разных науках [2, с. 11].

2. Гипотеза о наличии единого механизма получения знаний [2, с. 17].

3. Главная задача ИИ – задача поиска самоопределения [2, с. 247].

Пусть имеется некоторая область знаний K . Предположим, что знания продуцируются на основе двух теорий: K'_1 и K'_2 . Теория K'_i обладает уровнями изучения L_{ij} , где i – номер теории; j – текущий номер уровней изучения. В общем случае мощность

уровней изучения может быть разной. Существующая методика приобретений знаний в K из K'_i осуществляется с помощью антологий, логического вывода и т. д. [1, 2].

Пусть применена некоторая нормализация $L'_{ij} = f(L_{ij})$, переводящая правило L_{ij} в бинарное правило L'_{ij} . Любое $L'_{ij} \in B$, где B – булева алгебра.

Тогда над уровнями изучения возможно применение структурной лингвистики [3]. Главным вопросом в теории K тогда будет вопрос о том, как соотносятся между собой L'_{1j} и L'_{2j} .

Симметрия согласно автоморфизмам Лейбница – Г. Вейля является основным свойством пространства. Понятие автоморфизма Лейбниц ввел для того, чтобы сформулировать правила самоопределения пространства. Ранее была сформулирована таблица бинарных симметрий евклидовой плоскости на основе трудов теоретических математиков в геометрии и теории множеств [4]. Применение правил структурного лингвистического анализа и реляционной алгебры позволили предложить окончательный вид таблицы [5]:

1. Автоморфизм существования (Цермело).
2. Автоморфизм существования отношения (Кодда).
3. Автоморфизм принадлежности множеству (А. Френкеля).
4. Автоморфизм существования математического множества.
5. Автоморфизм лингвистического порядка (Декарта).
6. Автоморфизм математического порядка (Кантора).
7. Автоморфизм перестановки.
8. Автоморфизм зеркальный.

Из работ теоретических математиков не следуют автоморфизмы с номерами 2 и 4. Если рассмотреть