

Распрацоўка праграмага забеспячэння для мадэлявання дысперсных матэрыялаў

Дзівінец А.А., Дзерачэннік С.С., Разумейчык В.С.

Брэсцкі дзяржаўны тэхнічны ўніверсітэт

A software system is presented, targeted at creating the disperse material models based on specific granulometric composition, as far at primary analysis of those models. Project is built on Mono platform under the GPL license. The main application area of the project is building industry.

Дысперсны матэрыял – прыватны выпадак гетэрагеннай сістэмы – разглядаецца намі як аб’ект з часціц двух або больш розных тыпаў, якія запаўняюць агульную сераду. Адна з фаз, якія складаюць такі аб’ект, утварае бесперапынную дысперсійную сераду, у аб’ёме якой размеркавана дысперсная фаза (або некалькі такіх фаз) у выглядзе дробных крышталяў, цвёрдых часціц або бурбалак. Тыповым прыкладам з’яўляецца кампазіцыйны матэрыял - штучны канструкцыйны матэрыял, вонкава маналітны, але неаднародны па структуры [1].

Часцей за ўсё спосабы даследавання дысперсных матэрыялаў грунтуюцца ў асноўным на эмпірычных даных і не даюць магчымасці прааналізаваць уплыў параметраў структуры на агульныя ўласцівасці матэрыялу. Аднак у многіх выпадках мадэляванне структуры кампазіцыйнага матэрыялу больш мэтазгодна, чым падбор аптымальнага складу шляхам эксперыментальнага змешвання кампанентаў, паколькі эканоміць грашовыя сродкі і час на стварэнне вопытных узораў з сумніўнымі ўласцівасцямі, якія адсякаюцца яшчэ на стадыі пабудовы мадэлі.

Рынак праграмага забеспячэння для пабудовы і аналізу геаметрычных дысперсных мадэляў ўяўляе сабой практычна абсалютны вакуум. У ходзе пошуку нам не ўдалося знайсці ніякай спецыялізаванай сістэмы, якая прызначана для гэтых мэтаў; магчымасці ўніверсальных пакетаў-монстраў, якія прадстаўляюць напрацоўкі на ўсе выпадкі жыцця, таксама нельга назваць арыентаванымі на гэту канкрэтную задачу. У выніку падобныя задачы часта даводзіцца вырашаць на ўніверсальных мовах праграмавання. Гэтая прычына і паслужыла заахвочвальным матывам для распрацоўкі дадзенага праекта. Праект распаўсюджваецца пад ліцэнзіяй GPL.

Код даступны па <https://github.com/alexcapricorn/granulometricanalyzer>.

Праект складаецца з двух праграмных модуляў: першы для генерацыі структуры гетэрагеннай сістэмы на аснове стахастычных метадаў (графічны інтэрфейс прадстаўлены на малюнку 1), другі - вызначэнне інтэгральных характарыстык мадэльнага аб’ёму (малюнак 2). Сувязь паміж модулямі ажыццяўляецца праз файлы.

На першым этапе на аснове зыходных даных адбываецца запаўненне мадэляванага аб’ёму сферычнымі часціцамі з дапамогай безрашоткавай

маделі випадкового розміщення часціц без перакрыцця [2]. На цяперашні момант зыходнымі данымі для маделі матэрыялу з'яўляюцца: грануламетрычны склад запаўняльніка, аб'ём мадэльнага куба, працэнт запаўнення мадэльнага куба сфэрычнымі часціцамі.

У ходзе другога этапа вызначаюцца характарыстыкі матэрыялу [3]. Для другога этапу мадэлявання быў распрацаваны алгарытм, які заснаваны на ідэях алгарытму Хошена-Копэльмана [4].

Асноўную частку падсістэмы мадэлявання займае заданне зыходнага грануламетрычнага складу. Даныя прадстаўляюцца ў таблічным выглядзе. У слупках «Радыус» паказваецца памер неабходных часціц, а ў слупках «Працэнт» запісваецца стаўленне гэтых часціц у мадэляваным аб'ёме ў дыяпазоне ад 0 да 100. Акрамя грануламетрычнага складу, ўваходнымі данымі для модуля з'яўляюцца:

- параметр «Працэнт запаўнення мадэльнага аб'ёму», які паказвае, як шмат месца ў мадэляваных кубе павінны займаць сфэрычныя часціцы;
- заданне выхаднага файла, у якім будзе ўтрымлівацца параметры размеркавання часціц ў прасторы;
- заданне файла падзей, які захоўвае інфармацыю аб створаным файле і дазваляе ацаніць, ці ўсё пачатковыя ўмовы былі выкананы ў ходзе стварэння імітацыйнай маделі.

Радыус	Процент	Радыус	Процент	Радыус	Процент
0	6.346	27	0	47	0
0.14	12.487	24	0	44	0
0.315	11.382	26	0	46	0
0.63	7.501	28	0	48	0
1.25	2.674	30	0	50	0
2.5	6.94	32	0	52	0
5	34.154	34	0	54	0
12.5	17.57	36	0	56	0
20	0.946	38	0	58	0
25	0	40	0	60	0
27	0	42	0	63	0

67.9 Процент заполнения модельного объема, %

Старт программы...
Конец программы.
Программа выполнена успешно!

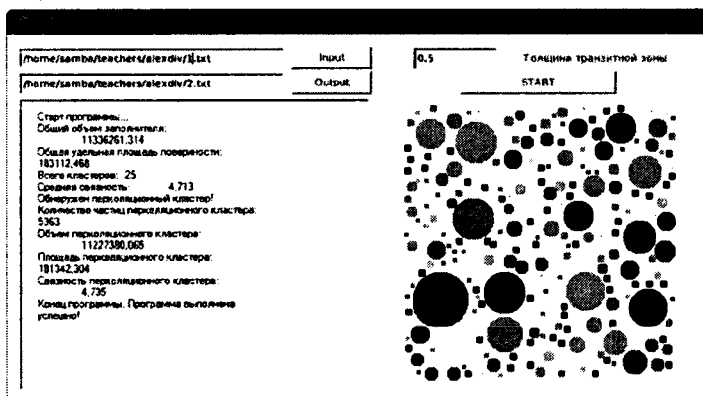
START

Малюнак 1 – Графічны інтэрфейс першага модуля

У выпадку паспяховага выканання будучь створаны два файлы: выхадны файл і файл падзей. Выхадны файл захоўвае інфармацыю аб усіх часціцах у мадэляваным кубе, а менавіта каардынаты кожнай сферы (x, y, z), а таксама яе радыус. Акрамя гэтага, паказваецца іх агульная колькасць.

Файл падзей захоўвае дадатковую інфармацыю аб выкананым мадэляванні: якія часціцы і ў якіх працэнтных суадносінах размяшчаюцца ў структуры. Таксама прысутнічае інфармацыя аб агульным працэнце запаўнення. Калі які-небудзь з гэтых параметраў не адпавядае пачатковым значэнняў, безрашоткавая мадэль выпадковага размяшчэння часціц без перакрыцця выканана з памылкамі. У гэтым выпадку неабходна запусціць праграмны модуль на выкананне яшчэ раз.

Падсістэма аналізу, таксама, як і падсістэма мадэлявання, складаецца з некалькіх функцыянальных частак. Ўваходнымі данымі з'яўляюцца выхадны файл, атрыманы на папярэднім этапе, і дадатковыя параметры, якія ўплываюць на якасць матэрыялу. На цяперашні момант у якасці дадатковых параметраў падтрымліваецца таўшчыня транзітнай зоны, мінімальная адлегласць, пры якім часціцы з'яўляюцца сувязнымі. Выхаднымі данымі будуць: файл з размеркаваннем часціц па кластарам і інфармацыйнае апісанне.



Малюнак 2 – Графічны інтэрфейс другога модуля

Пасля завяршэння ў інфармацыйным полі можна азнаёміцца з асноўнымі этапамі аналізу матэрыялу. Гэтак жа тут паведамляецца аб такіх характарыстыках, як агульны аб'ём запаўняльніка, агульная удзельная плошча паверхні, агульная колькасць кластараў, сярэдняя складнасць, наяўнасць/адсутнасць перкаляцыйнага кластара ў сістэме і інш.

Акрамя тэкставага аналізу сістэмы, праграмны модуль вырабляе візуалізацыю папярэчнага сячэння даследуемага куба у градацыях шэрага (чым бліжэй цэнтр сферы да эрэзу, тым бліжэй да чорнага выканана адлюстраванне сячэння і наадварот).

Чаканая вобласць прымянення праекта звязана перш за ўсё з будаўнічай галіной. Напрыклад, такая распрацоўка можа быць выкарыстана пры прагназаванні трываласці і даўгавечнасці бетону, а таксама для аптымізацыі склада бетоннай сумесі.

Спис крыніц:

1. Дивинец, А.А. Имитационное моделирование транзитной зоны в гетерогенных системах / А.А. Дивинец, В.С. Разумейчик, С.С. Дереченник // Сборник конкурсных научных работ студентов и магистрантов / БрГТУ; рецензент П.В. Шведовский. – Брест, 2014. – С. 56–60.
2. Разумейчик В.С. Стохастическая структурно-фазовая модель гидратирующих цементных систем: автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата технических наук: 05.23.05. – Брест: БрГТУ, 2012. – 25 с.
3. Дивинец, А.А. Анализ связности оболочек в случайном размещении сферических частиц / А.А. Дивинец, В.С. Разумейчик // Современные проблемы математики и вычислительной техники: сборник материалов VIII Республиканской научной конференции молодых ученых и студентов, БрГТУ, Брест, 21-23 ноября 2013 г. – Брест, БрГТУ, 2013. – С. 20-21.
4. Бузмакова, М.М. Перколяция сфер в континууме / М.М. Бузмакова // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика. – 2012. – Т. 12, № 2. – С. 48-56.