

This paper presents a method for calculating the approximate determination of the qualitative structure of dynamic systems solutions, which is the approximate construction of the "grid" trajectories. The specificity of the use of numerical methods in the qualitative study of dynamical systems and a method for proving the limit cycle by constructing arcs of trajectories are considered.

УДК 519.876:544.77.022:691.32

Дивинец А.А.

## РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИСПЕРСНЫХ МАТЕРИАЛОВ

**Введение.** Многообразные дисперсные материалы давно и успешно используются в различных областях промышленности. Известно, что подобные материалы представляют собой частный случай гетерогенной системы, то есть являются объектами, состоящими из частиц двух или более различных типов (то есть двух или более фаз), заполняющих общую среду. В результате, одна из составляющих такой объект фаз образует непрерывную дисперсионную среду, в объеме которой распределена дисперсная фаза (или несколько фаз) в виде мелких кристаллов, твердых частиц, пузырьков и др. [1].

Способы исследования дисперсных систем, широко распространенные на сегодняшний день, базируются в основном на эмпирических измерениях и не представляют возможности проанализировать влияние параметров их состава и структуры на общие свойства материала (например, в целях оптимизации состава). Вопросы, касающиеся влияния состава материала на его структуру и, опосредованно, на свойства, являются важными и до сих пор не до конца проясненными в материаловедении [2].

Компьютерное моделирование существенно снижает затраты времени и средств на создание опытных образцов, по сравнению с подбором оптимального состава путем экспериментального смешивания компонентов, исключая на ранней стадии варианты с «сомнительными» свойствами.

Рынок программного обеспечения для построения и анализа геометрических дисперсных моделей представляет собой довольно ограниченное количество решений. В ходе выполненного ранее поиска [3] нам не удалось найти ни одной специализированной системы, предназначенной для этих целей. Возможности универсальных пакетов-монстров, предоставляющих наработки на все случаи жизни, также нельзя назвать ориентированными на данную конкретную задачу. В результате был начат проект Granulometric Analyzer.

**Программный комплекс Granulometric Analyzer.** В совокупности, проект включает три программных модуля (рисунок 1): первый –

получение распределения гранулометрического состава дисперсного материала; второй – генерация структуры гетерогенной системы на основе стохастических методов, третий – определение интегральных характеристик модельного объема. Связь между модулями осуществляется через специализированные файлы.

Одним из ключевых элементов построения моделей дисперсных систем является выбор функции распределения размеров частиц при дроблении [4]. Он зависит от большого числа факторов, связанных с методом осколкообразования, используемым при подготовке компонентов смеси. Наиболее популярно представление измельчаемых материалов в рамках логарифмического или логнормального закона распределения частиц. Однако этот подход далеко не единственный, а во многих случаях еще и не слишком точный, поэтому в конкретных задачах часто альтернативные методы дают лучший результат.

Для описания гранулометрического состава дисперсного материала довольно часто используют распределение Вейбулла. Первые экспериментальная проверка применимости данного вида распределения была выполнена Л.И. Бароном [5].

Большим преимуществом такого распределения является то, что оно очень широко и содержит в себе как частные случаи, экспоненциальное распределение и распределение Релея, а также близко к гамма-распределению и логнормальному. При определенных значениях параметров распределение Вейбулла становится нормальным распределением.

Статистической проверкой гипотез было установлено, что распределение Вейбулла обеспечивает хорошую сходимость с экспериментальными данными о размерном (гранулометрическом) составе различных заполнителей [6]. Исходя из вышеперечисленных факторов, именно данный тип распределения был выбран для реализации процесса генерации гранулометрического состава дисперсных материалов. Графический интерфейс первого модуля представлен на рисунке 2.

Первый программный модуль разрабатываемого комплекса состоит из нескольких функциональных частей [7]. Входными данными

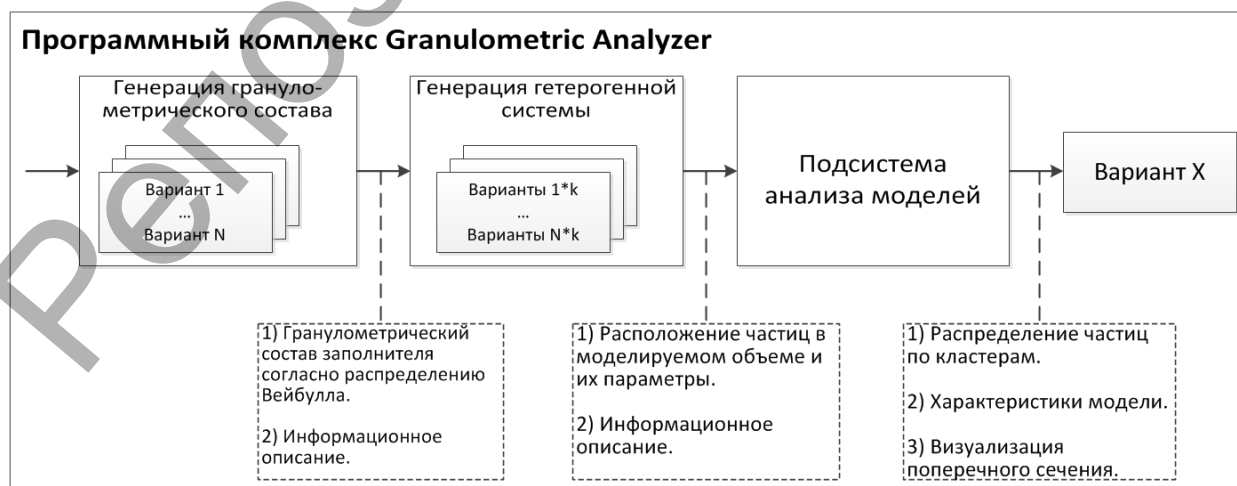


Рисунок 1 – Концепция моделирования

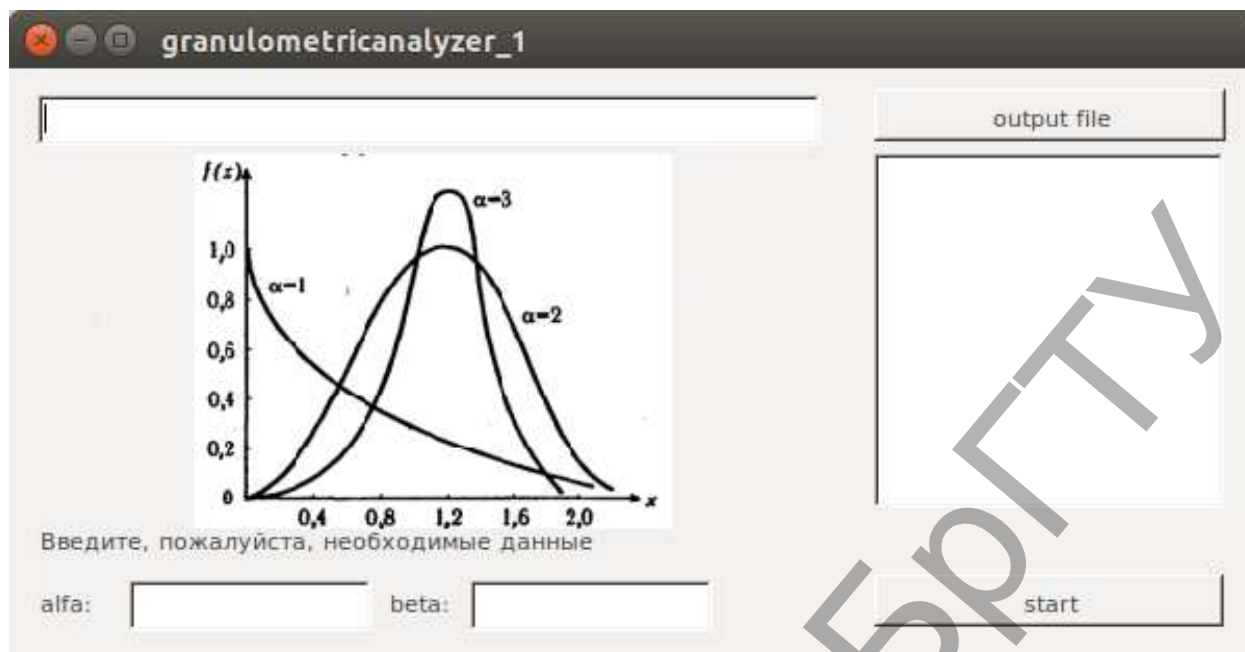


Рисунок 2 – Графический интерфейс первого модуля

являются:  $\beta$  – так называемый параметр формы, который характеризует способность дисперсной системы к измельчению;  $\alpha$  – параметр масштаба, который показывает степень измельчения того или иного материала. Помимо этого, корректная работа предполагает необходимость указания пути выходного файла. В случае успешного выполнения программы будут созданы следующие файлы: с гранулометрическим составом заполнителя и с информационным описанием.

По завершении выполнения в файле с информационным описанием можно ознакомиться с основными этапами функционирования модуля, а также узнать и исследовать причины возможных ошибок. Файл с гранулометрическим составом заполнителя служит в качестве одного из входных данных для следующей подсистемы.

Во второй части программного комплекса (графический интерфейс представлен на рисунке 3) на основе исходных данных происходит заполнение моделируемого объема сферическими частицами с помощью внерешеточной модели случайного размещения частиц без перекрытия [8]. На текущий момент исходными данными для модели материала являются: гранулометрический состав заполнителя, объем модельного куба, процент заполнения модельного куба сферическими частицами.

Основную часть интерфейса во время генерации гетерогенной системы занимает задание исходного гранулометрического состава. Данные представляются в табличном виде. В столбцах «Радиус» указывается размер необходимых частиц, а в столбцах «Процент» записывается отношение этих частиц в моделируемом объеме в диапазоне от 0 до 100. Помимо гранулометрического состава, входными данными для данного модуля являются:

- параметр «Процент заполнения модельного объема», показывающий размер пространства, который должны занимать сферические частицы в моделируемом кубе;
- выходной файл, в котором впоследствии будут содержаться параметры распределения частиц в пространстве;
- файл событий, целью которого является хранение информации о созданном файле и позволяющем оценить адекватность выполнения всех начальных условий в процессе создания имитационной модели.

В случае успешного выполнения программного модуля создаются два файла: выходной и событийный. Выходной файл осуществляет хранение информации о всех частицах в моделируемом кубе, а именно – координаты каждой сферы ( $x$ ,  $y$ ,  $z$ ), а также ее радиус  $R$ . Помимо этого, указывается их общее количество.

Файл событий содержит вспомогательную информацию о ходе выполненного моделирования, в частности, какие частицы и в каком процентном соотношении располагаются в структуре. Кроме того, присутствует информация об общем проценте заполнения. Если произошла ситуация, когда какой-то из вышеуказанных параметров не соответствует начальным значениям, следует вывод, что внерешеточная модель случайного размещения частиц без перекрытия выполнена с ошибками. В этом случае необходимо запустить программный модуль на выполнение еще раз.

В ходе функционирования третьего программного модуля разрабатываемого комплекса определяются характеристики материала [9]. Для данного этапа моделирования был предложен и разработан алгоритм, который основан на идеях алгоритма Хошена-Копельмана [10].

Подсистема анализа моделей (графический интерфейс представлен на рисунке 4), так же, как и подсистема для генерации гетерогенной системы, состоит из нескольких функциональных частей. Входными данными являются выходной файл, полученный на предыдущем этапе, и дополнительные параметры, влияющие на качество материала. На текущий момент в качестве дополнительного параметра поддерживается толщина транзитной зоны – минимальное расстояние, при котором частицы являются связными. Выходными данными являются следующие файлы: с распределением частиц по кластерам и с информационным описанием.

По завершении работы третьего модуля в информационном поле можно ознакомиться с основными характеристиками модели материала. В данном окне сообщается о таких характеристиках, как общий объем заполнителя, общая удельная площадь поверхности, общее количество кластеров, средняя связность, наличие/отсутствие перколяционного кластера в системе и др. Помимо этого, программный модуль производит визуализацию поперечного сечения исследуемого куба в градациях серого (чем ближе центр сферы к срезу, тем ближе к черному выполнено отображение сечения и наоборот). Частицы, принадлежащие перколяционному кластеру, выделяются красным цветом.

Отметим, что корректное функционирование второго и третьего модулей допускается без использования первого. Однако гранулометрический состав в таком случае необходимо жестко задавать табличными значениями (предположительно смоделированными либо позаимствованными из справочной литературы). При использовании проекта оказалось логичным автоматизировать эту часть работы – например, для массовой генерации вариантов состава, нацеленной на получение заданных свойств методом перебора вариантов.

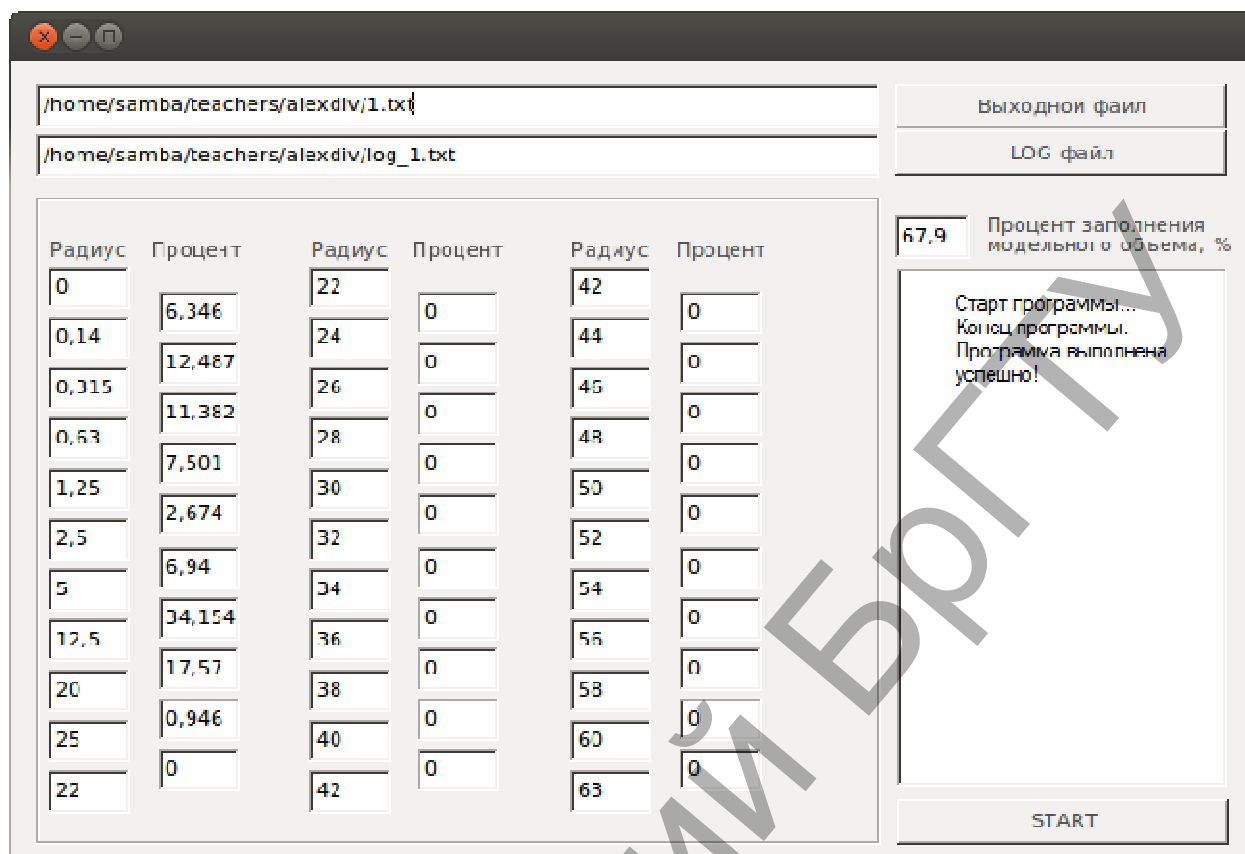


Рисунок 3 – Графический интерфейс второго модуля

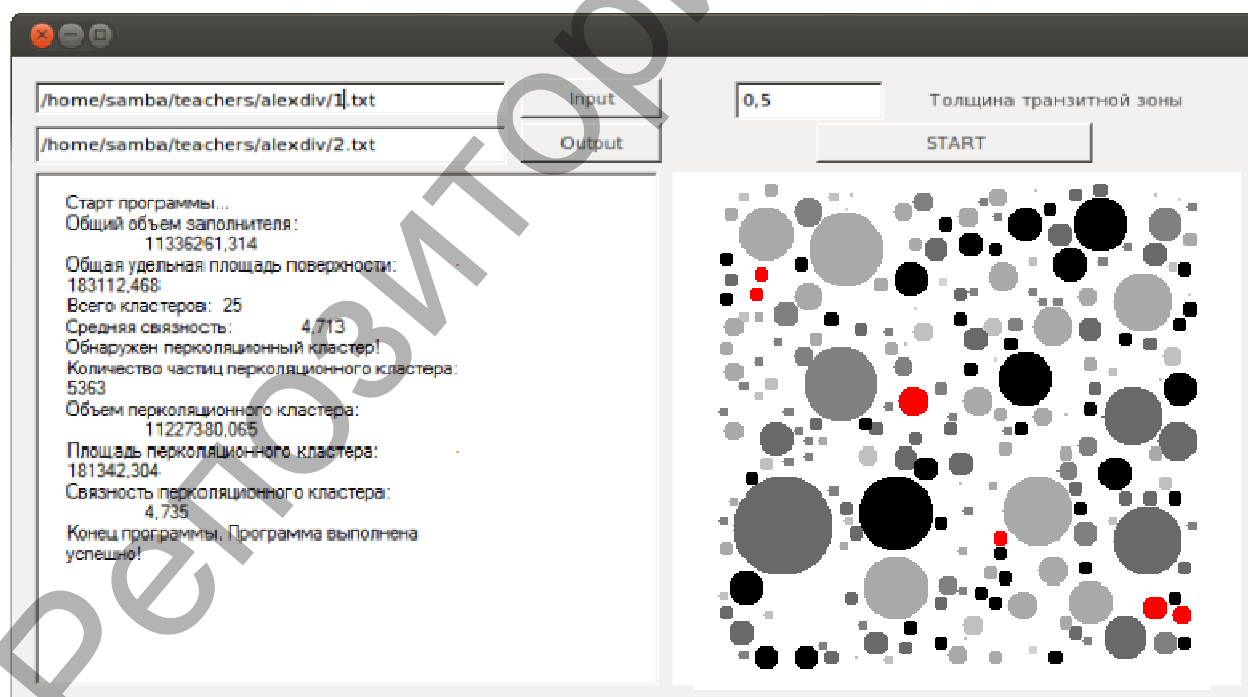


Рисунок 4 – Графический интерфейс третьего модуля

**Заключение.** Был разработан программный комплекс, состоящий из трех автономных модулей, позволяющий создавать и исследовать обширный ряд дисперсных систем, в частности, композиционных материалов. Ожидаемая область применения проекта связана прежде всего со строительной отраслью. Например, данная разработка может быть использована для оптимизации гранулометрического состава бетонной смеси в задачах прогнозирования прочности и долговечно-

сти бетона. Кроме того, программное обеспечение может применяться при исследовании характеристик транзитной зоны.

#### СПИСОК ЦИТИРОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Урьев, Н.Б. Структурированные дисперсные системы / Н.Б. Урьев // Соросовский образовательный журнал. – 1998. – №6. – С. 42–47.