

СИСТЕМНЫЙ ПОДХОД ПРИ МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ И МНОГОКРИТЕРИАЛЬНОМ СИНТЕЗЕ НАНОМОДИФИЦИРОВАННЫХ КОМПОЗИТОВ СПЕЦИАЛЬНОГО НАЗНАЧЕНИЯ

Бормотов А.Н.

ФГБОУ ВПО «Пензенский государственный технологический
университет»

Уникальный код статьи: 535789189baee

Аннотация. Композиционные материалы специального назначения представляются как объекты моделирования и управления. Предлагается новый подход к многокритериальному синтезу композиционных материалов как к задаче управления. На основе такого подхода предлагается методология алгоритмы моделирования и многокритериального синтеза свойств и структуры наномодифицированных композиционных материалов, обладающих повышенными защитными свойствами от воздействия ионизирующих излучений.

Введение.

Совершенствование традиционных и внедрение новых технологий, базирующихся на использовании более интенсивных физических воздействий и применении химически активных сред, требует привлечения новых эффективных и долговечных композиционных материалов (КМ), обеспечивающих экологическую безопасность и экономическую эффективность различных производств. В связи с этим приобрело чрезвычайную актуальность решение задач по обеспечению экологической безопасности сооружений подземного хранения и консервации радиоактивных отходов; локализации радиоактивного загрязнения при радиационных авариях; связыванию потенциально опасных отходов и футеровке ограждающих конструкций. Решение этих задач требует создания эффективных композиционных материалов специального назначения с заданными свойствами.

Подобная задача не может быть решена без учета множества критериев окружающей среды, эксплуатационных характеристик материалов, показателей структуры и свойств, учета рецептуры и технологии, т.е. композиционный материал необходимо рассматривать системно, как сложную техническую систему, испытывающую на себе

комплекс воздействий и имеющую целый ряд управляемых параметров. Такой подход требует обобщения научных основ математического моделирования и многокритериального синтеза радиационно-защитных композиционных материалов (РЗКМ), а также разработку и математического аппарата анализа и синтеза РЗКМ, программных комплексов и создания на их основе новых композиционных материалов со строго заданной структурой и свойствами.

Анализ современного состояния теории и практики построения математических моделей и их использования при управлении, прогнозе и изучении различных явлений природы и техники позволяет выбрать для моделирования композиционных материалов в качестве одних из основных – методы построения нелинейных моделей и расширение области использования нелинейных зависимостей, позволяющих расширить возможности, как по созданию и управлению различными структурами РЗКМ, так и провести более точные и детальные исследования различных КМ специального назначения.

Подход к синтезу материалов с точки зрения классической теории оптимального управления.

В теории оптимального управления существует следующая принятая последовательность этапов для решения технической задачи:

1. Техническая постановка задачи и выбор технического критерия оптимизации.

2. На основе технической постановки задачи строится математическая модель объекта управления в форме системы операторных уравнений (дифференциальных, интегральных, разностных, дифференциально-разностных, дифференциально-интегральных и т.д.). Далее делается оценка области применения математических моделей. Здесь же выбираются компоненты вектора управления, параметры системы и возмущения, устанавливаются фазовые координаты. При разработке оптимальных систем указываются ограничения на компоненты вектора управления и фазовые координаты. Так, ограничения на фазовые координаты могут дать принадлежность вектора состояния некоторому замкнутому множеству n -мерного пространства. Они могут определять прочность, жесткость объекта и т.д. Здесь же указываются ограничения на вектор управления (например, энергопотребление).

На этом же этапе определяются начальные или краевые условия, осуществляется выбор критерия для оценки качества управления.

3. В предположении полной формализации задачи выбирается метод оптимизации. Как правило, предполагается задание математической

модели объекта применительно к выбранному методу на его языке. Однако не исключается, когда модель подгоняется под выбранный метод оптимизации. Например, по системе дифференциальных уравнений линейного объекта может быть построен соответствующий функционал качества на основе корней характеристического полинома.

4. Выбор численных методов, реализующих метод оптимизации: методов решения систем дифференциальных уравнений, определения значений функционала качества и т.д.

5. Разработка и отладка программ для решения задачи оптимизации на ЭВМ, не исключая корректировку численных методов для повышения точности и вычислительной эффективности алгоритма.

6. Анализ полученных результатов оптимизации с возможной корректировкой и упрощением, как всей математической задачи, так и отдельных ее элементов. Результаты решения математической задачи являются исходной информацией для уточнения формулировки технической задачи, и итерационный процесс может повторяться до достижения заданной точности.

Практически без оговорок указанная последовательность может использоваться при синтезе КМ из условий получения требуемых кинетических процессов формирования физико-химических характеристик материалов (плотность, прочность, твердость, параметры тепловыделения, химическая и радиационная стойкость и т.д.).

Основные понятия и определения композиционного материаловедения легко интерпретируются в соответствующих терминах, принятых в теории систем управления.

Объектом исследования (ОИ) является композиционный материал для защиты от радиации, представляющий собой сложную техническую систему взаимосвязанных элементов, в которой протекают процессы структурообразования и деструкции, подлежащие изучению при помощи моделирования.

Моделирование КМ направлено на выявление его внутренних свойств, структуры и взаимосвязей элементов, составляющих ОИ, которые проявляются во взаимодействии композита с окружающей средой и субъектом [1].

В самом общем случае КМ со стороны окружающей среды находится под воздействием целого ряда факторов $Z(t)=[z_1(t), z_2(t), \dots, z_l(t)]^T$, часть из которых $Z_1(t)=[z_{11}(t), z_{12}(t), \dots, z_{1n}(t)]^T$ (контролируемые воздействия) может быть измерена, а часть $Z(t)=[z_{21}(t), z_{22}(t), \dots, z_{2l_2}(t)]^T$ (неконтролируемые воздействия) - не поддаются изменению или их влияние не существенно. Исследователя (субъекта) интересует

взаимосвязь выходных координат объекта (КМ) $X(t)=[x_1(t), x_2(t), \dots, x_k(t)]^T$, характеризующих свойства объекта исследования (ОИ) – РЗКМ, управляющих воздействий $U(t)=[u_1(t), u_2(t), \dots, u_p(t)]^T$, поступающих со стороны субъекта и возмущений $Z(t)$.

Существует множество понятий “модель объекта”. Примем подход, основанный на представлении объекта в виде кибернетической системы, определяемой множеством входных воздействий: $Y(t)=\{U(t), Z(t)\}=[y_1(t), y_2(t), \dots, y_r(t)]^T$, среди которых есть контролируемые Y^* и неконтролируемые E , и множеством характеристик и ограничений Q , действующих в системе и накладываемых на Y^* и E – $A=\{Y^*, E, Q\}$.

Математическая модель кибернетической системы устанавливает отображение F заданных множеств на множество выходных координат объекта $X(t)=[x_1(t), x_2(t), \dots, x_k(t)]^T$: $F:=\{Y^*, E, Q\} \rightarrow X$, то есть $X=F\{Y^*, E, Q\}$.

Основопологающим в моделировании КМ является принцип изоморфизма. Строгий изоморфизм между двумя системами означает наличие взаимно однозначного соответствия не только между входными воздействиями и характеристическими множествами Q_1 и Q_2 , но и между выходными координатами систем.

Данное утверждение находит подтверждение в работах И.А. Рыбьева [2] о теории искусственных конгломератов в части формулировки законов створа и конгруэнции, а также в работах В.И. Соломатова [3] о полиструктурной теории в части формулировки принципа полиструктурности композиционных материалов и закона подобия кластерных систем и некоторых других исследователей.

В практических исследованиях КМ предпринимаются попытки построить модель, изоморфную реальной задаче только в отношении ограниченного числа специфических свойств, то есть обладающую ограниченным изоморфизмом.

Создание математических моделей КМ проводят для следующих задач (рис.1): *управления объектом; прогноза выхода объекта; выявления механизма явлений*, протекающих в композите.

Управление объектом – композиционным материалом

При построении моделей КМ как сложных технических систем и других элементов систем управления предлагается использовать модели “вход – выход” и модели в пространстве состояний. Предлагаемая структура объекта управления (рис. 2) отражает оба эти подхода [4].

Изучение сложной технической системы КМ как объекта управления (ОУ) предполагает определение структуры технического объекта управления, т.е. выявление всех существующих входных (возмущающих, управляющих) воздействий, переменных состояния и выходных

координат, а также связи между ними.

Управление объектом	Получение строго заданных структур КМ: наноструктур, бесконечных кластеров, фракталов, сетчатых или линейных полимеров, объемных или каркасных решеток, определенного вида связей или сочетаний химических элементов и пр.
Прогноз выхода объекта	Получение заданных количественных и качественных эксплуатационных характеристик КМ специального назначения: радиационно-защитных, кислотостойких, жароупорных, биостойких и пр.
Выявление механизма явлений	Выявление механизма структурообразования КМ: полимеризация, поликонденсация, топомеханический, сквозь-растворный, смешанный и пр.

Рис.1. Систематизация задач, приводящих к построению математических моделей КМ

Модель системы КМ как объекта управления представляется в виде множества величин, описывающих функционирование реальной системы и объединяющих следующие подмножества (рис.2).

1. *Управляемые координаты* (управляемые переменные) – совокупность характеризующих поведение объекта управления выходных величин $X(t)$, текущими значениями которых требуется управлять для достижения поставленных целей. В модели управляемые координаты задают вектором управляемых переменных $X(t)=[x_1(t), x_2(t), \dots, x_k(t)]^T$. В физическом смысле – это комплекс физико-механических и эксплуатационных свойств КМ: прочность, плотность, морозостойкость, теплопроводность, водо- и атмосферостойкость, радиационная стойкость и т.д.

2. *Координаты состояния объекта* – внутренние переменные, характеризующие текущее поведение и состояние объекта в отдельные моменты времени. В модели координаты состояния задают вектором состояний $V(t)=[v_1(t), v_2(t), \dots, v_n(t)]^T$, т.е. совокупностью значений вектора состояний $V(t_1), V(t_2), \dots, V(t_i)$ в отдельные моменты времени t_1, t_2, \dots, t_i . Управляемые координаты $X(t)$ объекта формируются на основе координат его состояния $V(t)$. Размерность вектора управляемых координат k меньше или равна размерности вектора состояний n . В частном случае управляемые переменные объекта могут совпадать с координатами состояния. В физическом смысле – это параметры структуры КМ специального назначения: вид кристаллической решетки,

характер молекулярных связей и их энергетический потенциал, толщина матрицы вяжущего, вид упаковки частиц и их координатное число, гранулометрический состав и диаметры частиц, удельная поверхность наполнителя и заполнителя и пр.

3. *Управляющие воздействия* – совокупность входных величин $U(t) \in Y(t)$, изменением которых обеспечивают воздействия на объект с целью управления. В модели управляющие воздействия задают вектором $U(t)=[u_1(t), u_2(t), \dots, u_p(t)]^T$. В физическом смысле – это рецептурно-технологические условия: состав и соотношение компонентов КМ, последовательность совмещения компонентов КМ, определенные режимы обработки исходных компонентов или готовых смесей, режимы перемешивания или др. технологические операции.

4. *Возмущающие воздействия* – совокупность неуправляемых входных величин $Z(t) \in Y(t)$, изменения которых оказывают нежелательное влияние на состояние объекта $V(t)$ и его управляемые координаты $X(t)$. В модели возмущающие воздействия задают вектором $Z(t)=[z_1(t), z_2(t), \dots, z_r(t)]^T$. Вектор возмущающих воздействий, в свою очередь, можно разбить на две составляющие – *первую* можно измерить, а *вторую* – нельзя. Возможность измерения возмущающего воздействия позволяет ввести в систему регулирования дополнительный сигнал, что расширяет возможности систем регулирования. В физическом смысле – это действие окружающей среды и нормальные ошибки технологий: непостоянство температуры окружающей среды и исходных компонентов, нормальные ошибки дозирования и технологических переделов, неравномерность распределения физических и химических свойств исходных материалов, примеси, человеческий фактор и т.д.

5. *Внутренние (собственные) динамические параметры объекта* – совокупность величин $\Theta(t)$, характеризующих внутренние свойства и количественную причинно-следственную взаимосвязь входных и выходных переменных в математических моделях объекта. При рассмотрении технических объектов необходимо от внутренних параметров, характеризующих эксплуатационные свойства КМ или технологического процесса приготовления КМ, перейти к динамическим параметрам, предопределяющим внутренние свойства объекта как элемента системы управления с точки зрения динамики его поведения. К таким параметрам при представлении ММ РЗКМ в стандартной форме относятся коэффициенты характеристических уравнений динамических моделей кинетических процессов структурообразования композиционных материалов специального назначения, определяющие степень преобразования входной переменной элемента в выходную в

статическом режиме (выход на эксплуатационное значение свойства), и постоянные времени T , обуславливающие скорость кинетического процесса образования структурного элемента КМ или системы (структурного уровня КМ).

Композиционные материалы имеют несколько управляемых и управляющих переменных, совокупности которых в математических моделях могут быть заданы векторами. Совокупность управляющих $U(t)=[u_1(t), u_2(t), \dots, u_p(t)]^T$ и возмущающих $Z(t)=[z_1(t), z_2(t), \dots, z_l(t)]^T$ воздействий в модели может быть задана одним вектором входных воздействий $Y(t)=\{U(t), Z(t)\}=[y_1(t), y_2(t), \dots, y_r(t)]^T$.

Таким образом, и КМ, и технологический процесс синтеза КМ или любой элемент системы КМ рассмотреть как объект управления - это значит выделить часть пространства, в котором протекает процесс структурообразования композита, подлежащий управлению, то есть определить его как систему взаимосвязанных через внутренние динамические параметры ОУ переменных - координат состояния и управляемых координат, управляющих и возмущающих воздействий.

Следовательно, рассмотрение любого элемента структуры (системы) КМ как объекта управления предполагает следующие этапы:

- определение координат состояния объекта - переменных, характеризующих поведение объекта в пространстве состояний (параметры структуры КМ);
- выявление управляемых координат - выходных переменных, подлежащих в соответствии с технологией управлению (физико-механические и эксплуатационные свойства КМ);
- установление управляющих воздействий - величин, посредством которых может быть наиболее эффективно обеспечено управление в заданном диапазоне выходными координатами объекта управления (рецептурно-технологические условия изготовления КМ);
- нахождение возмущающих воздействий - входных величин ОУ, влияющих на его управляемые координаты, но которые не могут быть изменены с помощью управляющего устройства или управление которыми не целесообразно (действие окружающей среды и нормальные ошибки технологий);
- выявление внутренних параметров ОУ - величин, характеризующих статические и динамические свойства объекта (характеристики кинетических процессов структурообразования);
- установление критериев управления и ограничений на входные и выходные переменные, возможных пределов изменения под действием возмущений внутренних параметров объекта (синтез

рецептурно-технологических параметров и оптимизация структуры и свойств КМ).

В свете изложенного, можно выделить следующие этапы многокритериального синтеза РЗКМ как задачи управления:

- формулировка целей управления;
- определение объекта управления;
- создание модели объекта управления;
- синтез управления;
- реализация управления.

Создание модели объекта тесно связано с *проблемой идентификации*.

Под идентификацией в широком смысле понимается получение или уточнение по экспериментальным данным модели реального объекта, выраженной в тех или иных терминах.

Представим механизм идентификации модели как процесс повышения ранга R модели $M(R)$ - сокращения неопределённости модели посредством выбора из множества моделей $M=M(v)=\{M(v+1)\}_{v=0,3}$, требуемой за счёт привлечения дополнительной информации об объекте. Задача построения модели нетривиальна только в том случае, когда множество M содержит более одного элемента, т.е. имеется исходная неопределённость.

Наименьшая неопределённость при решении задачи идентификации соответствует моделям, заданным множеством полностью определённых моделей систем третьего ранга, когда известны: класс модели объекта; структура операторов элементов модели, а неопределены: параметры модели ОИ.

Таким образом, первая и наиболее простая задача - задача параметрической идентификации состоит в поиске параметров модели, удовлетворяющих заданным критериям, что соответствует повышению ранга неопределённости R модели системы со второго до третьего.

Элементы исходного множества M могут различаться структурами операторов и могут быть заданы моделями первого ранга неопределённости, т.е. множеством полностью определённых моделей систем второго ранга, когда известен класс модели и неопределены структура операторов модели; параметры модели.

В результате решения второй задачи - задачи структурной идентификации выбирается подмножество структур операторов (в частном случае - единственная структура), что соответствует повышению ранга неопределённости R модели с первого до второго.

Множество M может быть задано моделью нулевого ранга неопределённости (максимальная степень неопределённости), т.е.

множеством полностью определённых моделей систем первого ранга (множеством моделей различных классов), когда не определены: класс модели; структура операторов модели; параметры модели.

В результате решения третьей задачи выбирается подмножество классов (в частном случае – единственный класс), что соответствует повышению ранга неопределённости R модели с нулевого до первого.

Совокупность решаемых задач построения ММРЗКМ образует вложенную структуру, в которой выбор класса модели в качестве внутренних включает задачи структурной и параметрической идентификации. В свою очередь выбор структуры модели охватывает решение задач параметрической идентификации [4].

Заключение

На основе приведенного подхода к многокритериальной синтезу материалов как задаче управления осуществлялась разработка композиционного материала на основе серного и эпоксидного вяжущих, модифицированного наноразмерным модификатором, приотворенным на основе астраленов (наночастиц) и ПАВ неионогенного типа. В качестве наполнителей и заполнителей использовался размолотый бой оптических стекол (тяжелых флинтгов). РЗКМ данного типа обладают повышенными защитными свойствами от воздействия ионизирующих излучений [5-7]. Оптимизация структуры и свойств материала производилась на основе выбора параметров кинетических процессов формирования его физико-механических характеристик (плотности, прочности, радиационной стойкости, набора прочности, тепловыделения, усадки и др.), описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями. Характеристики ингредиентов и материала в целом определялись градиентными методами [8-11].

Дальнейшее исследование и промышленная апробация разработанных композиционных материалов, показали высокую эффективность разработанного подхода при решении задач моделирования, анализа, синтеза наномодифицированных композиционных материалов специального назначения, а также новых композиционных материалов для защиты от ионизирующих излучений.



Рис. 1. Структурная схема объекта управления – КМ

Литература

1. Самарский, А.А. Математическое моделирование / А.А. Самарский, А.П. Михайлов. - М.: Физматлит, 1997. - 184 с.
2. Рыбьев И.А. Строительное материаловедение: Учеб. пособие для строит. спец. вузов. - М.: Высш. шк., 2002. - 701 с.
3. Соломатов В. И. Полиструктурная теория композиционных строительных материалов. - В кн: Новые композиционные материалы в строительстве. - Саратов, СПИ, 1981. - 9 с.
4. Бормотов, А.Н. Математическое моделирование и многокритериальный синтез композиционных материалов специального назначения: дисс... док. техн. наук: 05.13.18: защищена 22.12.2011; утверждена 30.08.2012 / Бормотов Алексей Николаевич. - Пенза, 2011. - 316 с.
5. Строительный раствор [Текст]: пат. 2087448 РФ : МПК 6 С04В28/26, С04В111:20 / Бор-мотов А.Н. и др. ; заявитель и патентообладатель Пензенский инж. стоит. ин-т. - № 94006617/03 ; заяв л. 22.02.1994 ; опубл. 20.08.1997, Бюл. № 17. - 2 с. : ил.
6. Строительный полимерраствор для защиты от радиации [Текст]: пат. 2142439 РФ : . МПК6 С04В26/14, G21F1/10 / Бормотов А .Н. и др. ; заявитель и патентообладатель Пен-зенская госуд. ар хит. стоит. академия. - № 97114757/03 ; заявл. 02.09.1997 ; опу бл. 10.12.1999, Бюл. № 6. - 3 с. : ил.

7. Композиция для изготовления радиационно-защитных строительных материалов [Текст]: пат. 2319676 РФ : МПК C04B28/00 , G21F1/04 / Бормотов А.Н. и др. ; заявитель и патентообладатель Пензенский госуд. ун-тет. арх. и строит. – № 2006102633/03 ; заявл. 3 0.01.2006 ; опубл. 20.03.2008, Бюл. № 28. – 4 с.
8. Разработка и управление качеством строительных материалов с регулируемой структурой и свойствами для защиты от радиации. / Бормотов А.Н. и др. // Тр. Междунар. конф. «Идентификация систем и задачи управления» SICPRO '03. / Ин-т пробл. упр. – М., 2003. – С. 2437-2460.
9. Моделирование процессов структурообразования дисперсных систем. / Прошин А.П. и др. // Тр. Междунар. конф. «Идентификация систем и задачи управления» SICPRO`05 / Ин-т пробл. упр. □ М., 2004. □ С. 700-724.
10. The extra-heavy concrete for protection from radiation / Proshin A.P. et al. – В сборнике: Proceedings of the International Conference on Role of Concrete in Nuclear Facilities 2005 International Congress - Global Construction: Ultimate Concrete Opportunities. Сер. "Role of Concrete in Nuclear Facilities - Proceedings of the International Conference" sponsors: Institution of Civil Engineers, American Concrete Institute, Japan Society of Civil Engineers, University of Dundee, UK; editors: Dhir R.K., Paine K.A., Tang A.M.C., University of Dundee, Concrete Technology Unit. Dundee, Scotland, 2005. – P. 69-76.
11. Model of destruction and method for forecasting of composite materials resistance. / E.V. Korolev et al. – Proc. of the International Conference "Concrete Durability: Achievement and Enhancement", University of Dundee, UK. – HIS BRE Press, 2008. – P. 345-356.