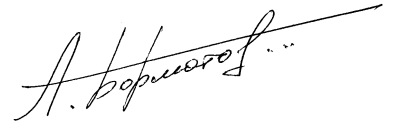


На правах рукописи



БОРМОТОВ Алексей Николаевич

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
И МНОГОКРИТЕРИАЛЬНЫЙ СИНТЕЗ
КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ
СПЕЦИАЛЬНОГО НАЗНАЧЕНИЯ**

Специальность 05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
доктора технических наук

П Е Н З А – 2011

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Пензенская государственная технологическая академия» на кафедре «Автоматизация и управление».

Научный консультант – доктор технических наук, доцент
Прошин Иван Александрович

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор
Львов Алексей Арленович
доктор технических наук, профессор
Камбург Владимир Григорьевич
доктор технических наук, профессор
Люпаев Борис Михайлович

Ведущая организация – ОАО «Научно-исследовательский и проектно-технологический институт химического машиностроения» (НИИПТхиммаш), г. Пенза

Защита состоится 22 декабря 2011 г. в 14 часов на заседании диссертационного совета Д 212.337.01 при Пензенской государственной технологической академии по адресу: 440039, г. Пенза, пр. Байдукова / ул. Гагарина, д.1а / 11, 1 корпус, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВПО «Пензенская государственная технологическая академия».

Автореферат разослан 2 ноября 2011 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Чулков В.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. 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. Решение этих задач невозможно без *создания эффективных композиционных материалов с заданными свойствами.*

Подобная задача не может быть решена без учёта множества критериев окружающей среды, эксплуатационных характеристик материалов, показателей структуры и свойств, учёта 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 и методологических основ математического моделирования и многокритериального синтеза КМ, разработки математического аппарата анализа и синтеза КМ, проблемно ориентированных программных комплексов и создания на их основе композиционных материалов с заданными свойствами.

Эксплуатационные свойства КМ описываются распределёнными нелинейными динамическими моделями, в то время как математическое описание всего конгломерата композита производится линейными кинетическими моделями, таким образом, имеется *проблема перехода от нелинейных моделей микроуровней к линейным моделям макроуровней композита.*

Разрешение перечисленных проблем лежит на пути поиска новых подходов к математическому моделированию структурообразования КМ, создание на базе принципов системного анализа теории и практики математического моделирования структурных уровней КМ и управляющих рецептурно-технологических воздействий, разработки программных комплексов, обеспечивающих решение задачи многокритериального синтеза КМ.

Цель работы – создание теоретических основ математического моделирования композитов специального назначения, исследование и оценка возможностей использования положений разработанной теории для многокритериального синтеза наномодифицированных композитов с заданными свойствами.

Задачи исследования.

1. Обоснование методологии математического моделирования композитов специального назначения.

2. Разработка математических методов моделирования композиционных материалов специального назначения.

3. Разработка аналитических методов исследования математических моделей структуры и свойств наномодифицированных композитов.

4. Разработка численных методов и алгоритмов синтеза адекватных математических моделей композитов по экспериментальным данным.

5. Комплексные исследования взаимосвязи между технологическими параметрами композитов и параметрами математических моделей структурных уровней композитов на основе функционалов качества.

6. Разработка комплекса программ моделирования композитов специального назначения, обеспечивающего решение задач математического моделирования и многокритериального синтеза композитов с заданными свойствами и параметрами структуры.

7. Создание системы компьютерного моделирования структурных уровней композитов и управляющих рецептурно-технологических воздействий, обеспечивающей получение эффективной технологии многокритериального синтеза композитов с заданными свойствами.

8. Опытная апробация предложенных методов моделирования и многокритериального синтеза при создании наномодифицированных композитов для защиты от радиации с заданными свойствами и параметрами структуры.

9. Разработка практических рекомендаций по применению разработанных методов математического моделирования, алгоритмов, численных методов и комплексов программ.

Объект исследования. Композиционные материалы специального назначения.

Предмет исследования. Математические методы моделирования, численные методы построения математических моделей структурных уровней и система компьютерно-имитационного моделирования и многокритериального синтеза композитов специального назначения.

Методы и методология проведения работы. Принципы и методы системного анализа, теория математического моделирования, теория вероятностей и математической статистики, теория подобия, численные методы, корреляционно-регрессионный анализ, теория планирования эксперимента и теория вычислительного эксперимента.

Научная новизна работы. Научная новизна работы заключается в создании теоретических основ математического моделирования композиционных материалов специального назначения, разработке численных методов структурно-параметрического синтеза математических моделей структурных уровней компо-

зитов и системы имитационного моделирования и многокритериального синтеза композитов с заданными параметрами структуры и свойств, объединяющих следующие положения.

1. Обоснование методологии математического моделирования композитов специального назначения, основанной на методах построения нелинейных математических моделей структурных уровней композита, обеспечивающей решение задач математического моделирования и многокритериального синтеза наномодифицированных композитов для защиты от радиации с уникальными свойствами.

2. Методы математического моделирования структурообразования композитов специального назначения, учитывающие особенности физико-химических взаимодействий при самоорганизации дисперсных систем и позволяющие установить закономерности влияния рецептурно-технологических факторов на процесс формирования структуры КМ.

3. Качественные аналитические методы исследования нелинейных многомерных многофакторных математических моделей структурных уровней композиционных материалов, состоящие в идентификации моделей по внутренней области факторного пространства состояний математическими моделями в преобразованных координатах, на основе которых синтезируются многофакторные модели, экстраполируемые в область предельных значений дробно-рациональными функциями из «пучка» функций по краевым точкам, что обеспечивает сокращение объёма натурального эксперимента и повышение точности моделирования.

4. Численные методы и алгоритмы структурно-параметрического синтеза математических моделей композитов по экспериментальным данным, основанные на многоуровневых преобразованиях и систематизации математических моделей по видам нелинейного преобразования координат, обеспечивающие повышение быстродействия и точности математического моделирования композитов.

5. Функционал качества структуры и свойств радиационно-защитного композита, позволяющий установить зависимости между технологическими параметрами и параметрами математических моделей структурных уровней композитов и выполнить многокритериальный синтез композитов с требуемыми свойствами и параметрами структуры.

6. Комплекс программ моделирования композитов специального назначения, объединяющий модули: обработки экспериментальных данных, синтеза наборов и пакетов нелинейных моделей структурных уровней композитов, анализа и оценки математических моделей, численной оптимизации, анализа результатов оптимизации с возможностью корректировки по критерию точности, обеспечивающий получение наномодифицированных композитов для защиты от радиации.

7. Система компьютерно-имитационного моделирования композитов, включающая методики проведения численного и натурального эксперимента, методы моделирования макроуровней композита с учётом моделирования микроуровней, а также алгоритмы и комплексы программ, обеспечивающие получение эффективной технологии синтеза наномодифицированных композитов для защиты от радиации.

Практическая значимость работы. Проведённые комплексные исследования позволили выработать практические рекомендации, разработать методики и алгоритмы математического моделирования наномодифицированных композитов специального назначения.

Разработана система компьютерного моделирования наномодифицированных композитов, обеспечивающая решение задачи многокритериального синтеза композитов с заданными свойствами и параметрами структуры.

Созданная система компьютерного моделирования внедрена на ФГУП ФНПЦ «ПО СТАРТ им. М.В. Проценко» при создании новых композитов для защиты персонала и оборудования от действия агрессивных сред при изготовлении ряда изделий.

Программные средства внедрены на ОАО НПП «РУБИН» при моделировании композиционных материалов корпусов изделий, обеспечивающих защиту электронных блоков от электромагнитного излучения.

Комплекс программ и методология моделирования внедрены при обучении студентов по направлению «Автоматизация технологических процессов и производств» в рамках интегрированного комплекса сетевых автоматизированных лабораторий (ИКСАЛ) и в работе НОЦ «Нанотехнологии» при ФГБОУ ВПО "Московский государственный строительный университет".

Реализация результатов работы. Научные и практические данные и закономерности, установленные и обобщённые в диссертационной работе, получены автором в период с 1993 по 2008 г. на кафедре строительных материалов Пензенского государственного университета архитектуры и строительства при выполнении госбюджетных и хоздоговорных НИР (НТП «Научные исследования высшей школы по приоритетным направлениям науки и техники», ЕЗН Минобразования РФ – № ГР 01200304422, 01200304423, 01950003617), грантов по фундаментальным исследованиям в области архитектуры и строительства (№ ГР 01200103656, 01200304422), межотраслевой программы сотрудничества Минобразования РФ и Спецстроя РФ «Наука, инновации, подготовка кадров в строительстве» на 2001 – 2005 гг. (№ ГР 01200216502, 01200307724), а также в период с 2008 по 2011 г. на кафедре автоматизации и управления Пензенской государственной технологической академии при выполнении НИР по Аналитической ведомственной целевой

программе «Развитие научного потенциала высшей школы (2009–2011 годы)» по проектам № 2.1.2/5688 и 2.1.2/11488 «Математическое моделирование и многокритериальный синтез строительных материалов специального назначения» и по Федеральной целевой программе «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы, в рамках реализации мероприятия № 1.2.2 Проведение научных исследований научными группами под руководством кандидатов наук по проекту ГК № 14.740.11.1066 от 24.05.2011 г. «Математическое моделирование и многокритериальный синтез наномодифицированных композиционных материалов».

Достоверность результатов работы. В диссертации обобщается передовой отечественный и зарубежный опыт, результаты исследований подтверждаются сходимостью большого количества экспериментальных данных, полученных с применением стандартных и высокоинформативных методов, положительными результатами внедрения алгоритмов, методик, программного обеспечения, составов и технологий.

Основные положения, выносимые на защиту.

1. Теоретические основы математического моделирования композиционных материалов специального назначения, включающие методологические принципы математического моделирования композиционных материалов, методы моделирования структурных уровней композита, численные и аналитические методы построения многофакторных моделей.

2. Методология математического моделирования композиционных материалов, объединяющая методы стратифицированного моделирования и построения многофакторных моделей на основе однофакторных моделей посредством многоуровневых преобразований.

3. Методы математического моделирования композитов на структурных уровнях, состоящие в идентификации моделей по внутренней области факторного пространства состояний математическими моделями в преобразованных координатах, на основе которых синтезируются многофакторные модели, экстраполируемые в область предельных значений дробно-рациональными функциями из «пучка» функций.

4. Численные методы и алгоритмы структурно-параметрического синтеза математических моделей композитов по экспериментальным данным, основанные на многоуровневых преобразованиях и систематизации математических моделей по видам нелинейного преобразования координат, обеспечивающие повышение быстродействия и точности математического моделирования композитов.

5. Система имитационного моделирования структурообразования дисперсных систем, учитывающая особенности физико-химических взаимодействий

в граничном слое, позволяющая проследить эволюцию дисперсных систем и установить закономерности влияния рецептурно-технологических факторов на процесс формирования структуры композитов.

6. Функционал качества композита, являющийся критерием качества при моделировании и многокритериальном синтезе и установленные на его основе зависимости между технологическими параметрами и параметрами математических моделей структурных уровней композитов специального назначения с заданными свойствами.

7. Система компьютерно-имитационного моделирования композитов в виде комплекса программ, обеспечивающая решение задач математического моделирования и многокритериального синтеза композитов с заданными свойствами и параметрами структуры.

Апробация работы. Основные положения и результаты диссертационной работы представлялись и докладывались на международных и всероссийских научно-практических конгрессах, симпозиумах, конференциях и совещаниях: «Экологические аспекты технологии производства строительных материалов» (С.-Петербург, 1992 г.), «Актуальные проблемы современного строительства» (Пенза, 1993–2010 гг.), «Экология, природопользование, охрана окружающей среды» (Пенза, 1996 г.), «Актуальные проблемы строительного материаловедения» (Саранск, 1997 г., Томск, 1997 г.), «Экологические проблемы хранения, переработки и использования вторичного сырья» (Лозанна, Швейцария, 1998 г.), «Современное строительство» (Пенза, 1998 г.), IV–X Академических чтениях РААСН «Современные проблемы строительного материаловедения» (Пенза, 1998 г.; Воронеж, 1999 г.; Иваново, 2000 г.; Белгород, 2001 г.; Самара 2004 г., Казань, 2006 г.; Пенза, 2008 г.), «Создание высококачественных строительных материалов и изделий, разработка ресурсосберегающих и экологически безопасных технологий в строительной индустрии» (Томск, 1999 г.), «City, ecology, construction. Program, report and information at the international scientific and practical conference» (Egypt, Cairo, 1999 г.), «Новое в экологии» (С.-Петербург, 1999 г.), «Первые научные чтения памяти Н.А. Воскресенского» (Казань, 1999 г.), «Композиционные строительные материалы. Теория и практика» (Пенза, 2000–2010 гг.), «Проблемы строительного материаловедения. Первые Соломатовские чтения» (Саранск, 2002 г.), «Ресурсо- и энергосбережение как мотивация творчества в архитектурно-строительном процессе» (Казань, 2003 г.), «Проблемы и перспективы архитектуры и строительства» (Лимассол, Кипр, 2003 г.), «Идентификация систем и задачи управления, SICPRO'03» (Москва, РАН, 2003 г.), «Системный подход в науках о природе, человеке и технике» (Таганрог, 2003 г.), «Problem of urban construction, engineering equipment, improvement and ecology» (Casablanca, Morocco, 2003 г.),

«Актуальные проблемы строительства. Вторые Соломатовские чтения» (Саранск, 2003 г.), «XXIV российская школа по проблемам науки и технологий, посвященная 80-летию со дня рождения академика В.П. Макеева» (Миасс, РАН, 2004 г.), «Образование, наука, производство и управление в XXI веке» (Старый Оскол, 2004 г.), «Наука и образование как фактор оптимизации среды жизнедеятельности» (Хаммамет, Тунис, 2004 г.), «Идентификация систем и задачи управления, SICPRO`05» (Москва, РАН, 2005 г.), «Совершенствование качества строительных материалов и конструкций» (Новосибирск, 2005 г.), «Новые научные направления строительного материаловедения» (Белгород, 2005 г.), «Наука и технологии. Избранные труды «К 79-летию Г.П. Вяткина» (Москва, РАН, 2005 г.), «Бетон и железобетон. Пути развития» (Москва, RILEM–FIB–ERMCO–ACI–НИИЖБ–РААСН, 2005 г.), «Композиты XXI века» (Саратов, 2005 г.), «Мировое строительство: бетоны специального назначения. Применение бетонов в атомной промышленности» (Данди, Шотландия, Великобритания, Лондон, 2005 г.), «Теория и практика повышения эффективности строительных материалов» (Пенза, 2006 г.), «XIII–й Международный семинар Азиатско-Тихоокеанской академии материалов» (Новосибирск, 2006 г.), «Теория и практика повышения эффективности строительных материалов» (Пенза, 2006 г.), «Concrete Durability: Achievement and Enhancement» (Данди, Шотландия, Великобритания, Лондон, 2008 г.), «Механика и процессы управления. Итоги диссертационных исследований» (Екатеринбург, УрО РАН, 2009 г.), «Космос и глобальная безопасность человечества» (Латвия, Рига, 2010 г.), «Фундаментальные исследования в Пензенской области: состояние и перспективы» (Пенза, Россия, 2010 г.), «Математические методы в технике и технологиях – ММТТ-24» (Россия – Украина, Саратов, Пенза, Киев, 2011 г.), «Проблемы управления, передачи и обработки информации – АТМ-2011» (Россия, Саратов, 2011 г.).

Результаты работы экспонировались на международных, всероссийских и региональных выставках и получили высокую оценку.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 64 работы, включая 22 статьи в журналах, рекомендованных ВАК, 5 монографий, 4 патента РФ, 2 отчёта о НИР.

Объём и структура диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, 6 глав, основных выводов, списка использованных источников и приложения. Содержит 316 страниц машинописного текста, в том числе 182 рисунка и 65 таблиц. Библиография включает 208 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении отражается актуальность проблемы математического моделирования композитов специального назначения, формулируются поставленная цель, задачи, научная новизна и практическая ценность исследований, основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе выполнен анализ тенденций развития и современного состояния теории и практики математического моделирования КМ.

Анализ становления теории моделирования КМ позволяет заключить, что к настоящему времени возникла необходимость обобщения и развития научных основ математического моделирования КМ, анализа и оценки возможностей разработанного математического аппарата и программных комплексов при многокритериальном синтезе КМ специального назначения.

Как объект математического моделирования КМ (рис. 1) представляет собой сложную техническую систему, имеющую три устойчивых самодостаточных структурных уровня, отличающихся друг от друга физическими параметрами и требующих принципиально разных подходов к их математическому моделированию.

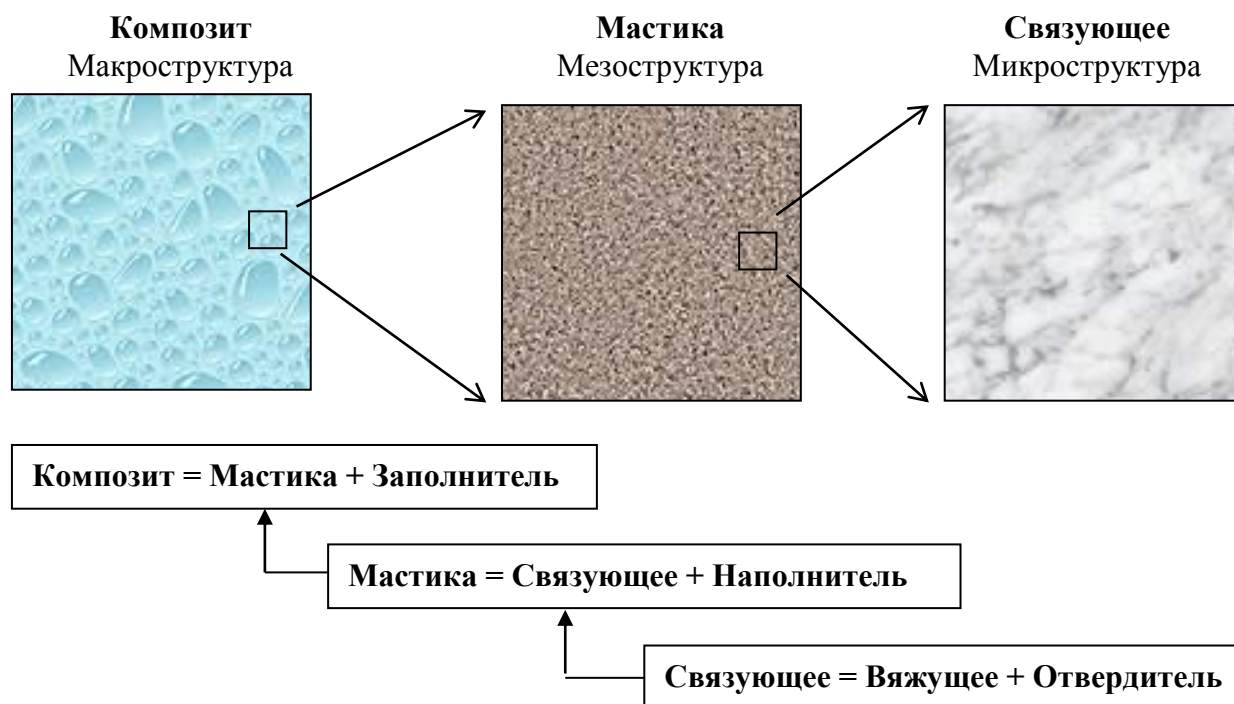


Рис. 1. Структурные уровни композитов

Для математического описания микроуровня КМ используются методы моделирования и получения математических моделей (ММ) в классе детерминированных моделей на основе фундаментальных физико-химических законов с использованием систем дифференциальных уравнений в частных производных

(ДУЧП), методов дифференциально-интегрального исчисления, векторного анализа, аппарата матричного исчисления.

На мезо- и макроуровне композита преобладают методы моделирования и получения ММ в классе стохастических моделей на основе экспериментально-статистических данных. За основу принимаются методы корреляционно-регрессионного анализа, численно-аналитические методы компьютерного моделирования. В общем случае кинетические закономерности реологических, механических, гравитационных, гидромеханических, тепловых, энергетических, массообменных и химических процессов формирования структуры КМ могут быть сформулированы в виде общего закона: скорость процесса прямо пропорциональна движущей силе и обратно пропорциональна сопротивлению.

В ходе сравнительного анализа рассмотрены программные комплексы: MS Excel с дополнением XLSTAT-Pro, SPSS, STATA, STATISTICA, JMR, SYSTAT, NCSS, MINITAB, VisSim; Simulink (MATLAB), SystemBuild (MATRIXx), MathCAD, Anylogic (Model Vision Studium), MBTY, 20-sim, ITI-SIM, DyMoLa, SIMPLORER, DYNAST, hAMSter, Easy5, DASE, AllFusion Process Modeler, Spartan '04 и др., которые изначально ориентированы на представление систем частиц и для расчета в реальном времени характеристик систем частиц, используемых в процессе визуализации специальных эффектов. Таким образом, характерные ограничения существующих пакетов ПО численного анализа не позволяют использовать их для проведения численных экспериментов при математическом моделировании и многокритериальном синтезе композитов с заданными свойствами и параметрами структуры, что обуславливает необходимость создания программных средств моделирования и синтеза композитов специального назначения.

Изучение теории и практики математического моделирования композитов свидетельствует, что в настоящее время существует необходимость разработки математических методов моделирования и многокритериального синтеза композитов специального назначения.

Вторая глава посвящена разработке методологии математического моделирования композиционных материалов специального назначения.

Как объект исследования (ОИ) композиционный материал – сложная техническая система взаимосвязанных элементов, в которой протекают процессы структурообразования и деструкции, подлежащие изучению при помощи моделирования (рис. 2).

Композит со стороны окружающей среды находится под воздействием целого ряда факторов, часть из которых (контролируемые воздействия) могут быть измерены, а часть (неконтролируемые воздействия) – не поддаются измерению или их влияние несущественно. В результате моделирования устанавливается

взаимосвязь выходных координат объекта $\bar{Y}(t) = [y_1(t), y_2(t), \dots, y_k(t)]^T$, характеризующих свойства ОИ, управляющих воздействий $\bar{U}(t) = [u_1(t), u_2(t), \dots, u_p(t)]^T$, поступающих со стороны субъекта и возмущений $\bar{Z}(t)$ (рис. 3).

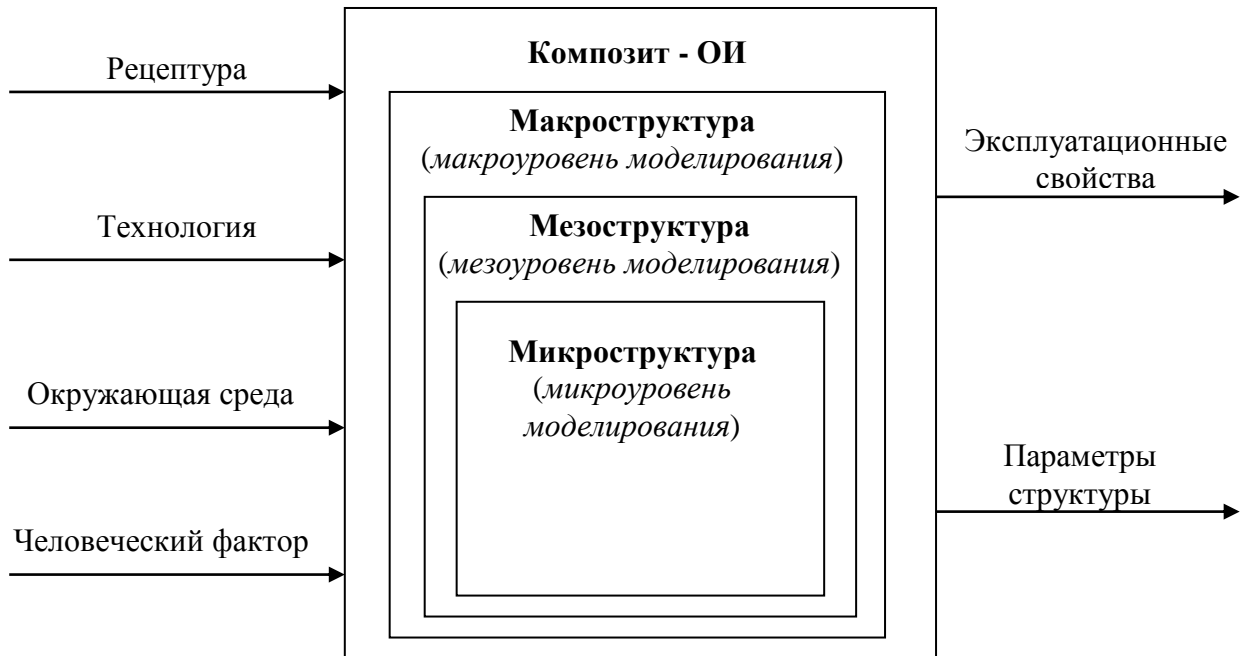


Рис. 2. Схема композита как объекта исследования

Принимаем подход, основанный на представлении объекта в виде кибернетической системы, определяемой множеством входных воздействий $\bar{X}(t) = \{\bar{U}(t), \bar{Z}(t)\} = [x_1(t), x_2(t), \dots, x_r(t)]^T$, среди которых есть контролируемые \bar{X}^* и неконтролируемые \bar{E} , и множеством характеристик и ограничений \bar{Q} , действующих в системе и накладываемых на \bar{X}^* и \bar{E} , $A = \{\bar{X}^*, \bar{E}, \bar{Q}\}$.

Математическая модель кибернетической системы устанавливает отображение F заданных множеств на множество выходных координат объекта $\bar{Y}(t) = [y_1(t), y_2(t), \dots, y_k(t)]^T$, $F := \{\bar{X}^*, \bar{E}, \bar{Q}\} \rightarrow \bar{Y}$, то есть $\bar{Y} = F(\bar{X}^*, \bar{E}, \bar{Q})$.

Механизм идентификации модели представляем 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. Классификация объектов по степени предварительной изученности и представление механизма построения

модели в виде вложенной структуры позволяет определить требования к методам автоматизированного построения моделей.

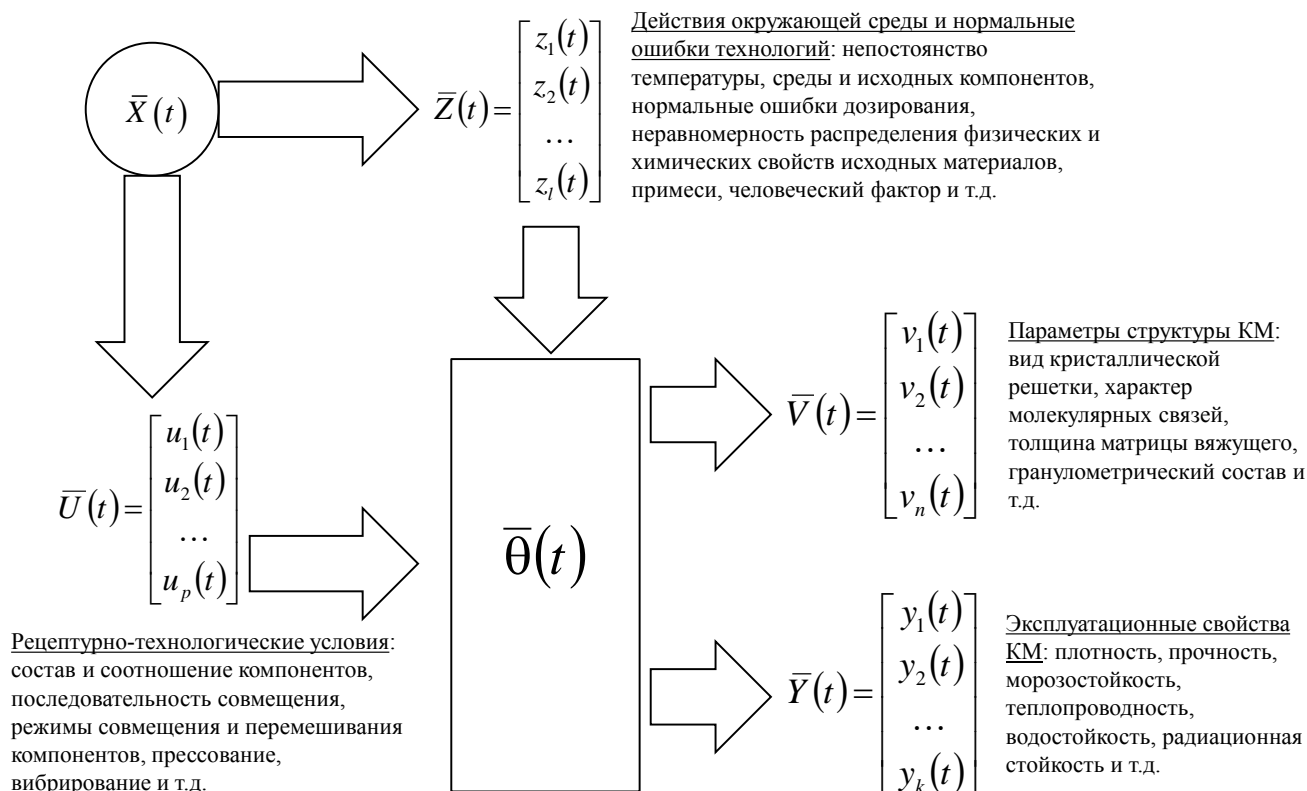


Рис. 3. Структурная схема объекта управления – КМ

При моделировании композитов математические модели предполагается создавать для решения следующих задач: управление структурой композита; прогноз выхода эксплуатационных свойств; выявление механизма явлений, протекающих в объекте.

Для решения задачи систематизации и обобщения теории и практики моделирования композиционных материалов предлагается **система компьютерно-имитационного моделирования композитов** (рис. 4), включающая в себя методологические принципы моделирования различных структур КМ, методики проведения численного и натурного эксперимента, методы моделирования макро-структуры композита с учётом моделирования микро-структуры, а также алгоритмы и комплексы программ, обеспечивающие получение эффективной технологии синтеза композитов с заданными свойствами и параметрами структуры.

В качестве основы построения системы компьютерного моделирования композита предлагается принять следующие методологические принципы.

1. Стратифицированного моделирования макро-структуры КМ на основе моделирования микро-структуры.
2. Моделирования нелинейных объектов КМ на основе многоуровневых нелинейных преобразований координат.

3. Многофакторного моделирования КМ на базе однофакторных моделей.



Рис. 4. Структура методологии математического моделирования КМ

Предложенные принципы образуют *единую целостную систему моделирования композиционных материалов* специального назначения. В соответствии с первым принципом КМ рассматривается на нескольких уровнях абстрагирования реальных процессов структурообразования, что позволяет проводить эффективное математическое моделирование и хорошо отражает объективные закономерности структурообразования и формирования свойств композитов.

Второй принцип дополняет методологию моделирования КМ в части моделирования нелинейных объектов при помощи многоуровневых нелинейных преобразований координат. Указанный принцип позволяет проводить обоснованный выбор функциональных зависимостей, описывающих процессы структурообразования и набора эксплуатационных свойств композитов, и преобразовывать их к виду, в котором в дальнейшем будем использовать их для получения многофакторных моделей описания образования макроструктуры композита и построения функционала качества.

Третий принцип многофакторного моделирования на базе однофакторных моделей позволяет сократить количество необходимых исследований, повысить точность ММ, а также даёт возможность использовать при построении многофак-

торных ММ уже накопленный однофакторный экспериментально-статистический материал.

На основе рассмотренных принципов в диссертационном исследовании предлагается *комплексный метод математического моделирования*, суть которого состоит в структурной идентификации моделей во внутренней области факторного пространства состояний математическими моделями в преобразованных координатах, на основе которых синтезируются многофакторные модели, экстраполируемые в область предельных значений дробно-рациональными функциями из «пучка» функций. Совокупность разработанных компонент обеспечивает отыскание функциональных зависимостей во внутренней области факторного пространства в преобразованных координатах и параметрическую идентификацию моделей на краях факторного пространства.

В третьей главе на базе предложенной методологии разработан *математический метод моделирования* КМ в многофакторном пространстве с использованием многоуровневого преобразования координат.

По результатам анализа методов математического моделирования и наборов функциональных зависимостей с позиций предложенного подхода систематизирован набор функций, описывающий основные параметры структуры и эксплуатационные свойства КМ для защиты от радиации, откуда видно, что практически все эксплуатационные свойства и процессы структурообразования КМ при однофакторном эксперименте с достаточной точностью могут быть описаны экспоненциальными зависимостями различного вида. Данный вид детерминированных аналитических зависимостей вытекает из природы физических процессов структурообразования и формирования эксплуатационных свойств.

По результатам анализа функциональных зависимостей в качестве базовых выбраны 5 основных преобразований: линейное, гиперболическое, логарифмическое, экспоненциальное, степенное и синтезирован набор из 25 линейно-независимых функций, который обеспечивает выбор ММ из ограниченного и в то же время функционально полного набора функций, исключающего сравнение одинаковых моделей с различной формой записи.

В результате поиска модели по разработанной методике находим преобразования координат, позволяющие приводить зависимость к линейному виду, что обеспечивает выбор преобразований координат при построении многофакторных моделей макроструктуры композита.

Моделирование на микроуровне процессов структурообразования и эксплуатационных свойств КМ проводится на базе аналитических и численных методов моделирования, позволяющих строить одно- и двухфакторные модели по данным натурального эксперимента. Определение оптимальных режимов синтеза КМ и кине-

тических параметров структуры и свойств КМ производится с учётом влияния всех структурообразующих факторов, что возможно проводить только на основе многофакторных математических моделей.

По результатам корреляционно-регрессионного анализа проводим обработку одно- и двухфакторных зависимостей и выбираем для каждого фактора (параметра) вид преобразования координат, приводящий исходные ММ к линейным. При этом вид преобразования выходной координаты (результативного признака y) выбираем одинаковым для всего семейства однофакторных зависимостей.

Исходя из условий экспериментального получения однофакторных зависимостей или удобства анализа, выбираем базисную точку $x_{10}, x_{20}, \dots, x_{no}$, по которой определяем значения коэффициентов модели. Принимая коэффициенты для каждого фактора многофакторных зависимостей равными соответствующим коэффициентам для однофакторных зависимостей, составляем многофакторную математическую модель.

Данный **численный метод** используется для построения многофакторных зависимостей на всех уровнях моделирования, а также при построении целевой функции и функционала качества КМ.

Разработанный метод имеет два аспекта реализации: построение многофакторных нелинейных моделей на основе многоуровневых преобразований и построение многофакторных нелинейных моделей на основе выбора моделей по крайним точкам.

Существенное расширение типов ММ достигается введением многоуровневого преобразования переменных x и y путём использования в качестве x и y различных функций. Многоуровневый подход состоит в многократном применении заданных функциональных преобразований к результативному и определённым признакам и сочетает в себе: синтез линейно-независимых ММ, на основе преобразования координат, выбор пакета линейно-зависимых ММ удовлетворяющих заданному критерию (минимуму остаточной дисперсии или относительной погрешности), нахождение из выбранного пакета математической модели с наиболее удобной формой записи.

Синтезированный функциональный набор обладает функциональной полнотой и линейной независимостью, а каждую модель из этого набора можно представить как пакет линейно-зависимых функций, т.е. функций, полученных на основе одинаковых преобразований. Такой подход позволяет учитывать в получаемых зависимостях природу моделируемого объекта, и в то же время исключает при выборе операцию сравнения одинаковых функций.

Аппроксимацию многих зависимостей свойств композитов от структурно-чувствительных факторов проводим с использованием преобразований над ре-

зультативным y и определённым признаком x в соответствии с выбранным функционально-полным набором. С целью обеспечения состоятельности, эффективности и несмещённости оценок синтезируемых моделей в работе предлагается **численный метод реверсивного преобразования координат** (РПК), который реализуется посредством следующего алгоритма: при весах p_i , равных единице, по методу наименьших квадратов в преобразованных координатах находим оценки параметров a_0, a_1 ; рассчитываем абсолютную погрешность Δ_i в преобразованных координатах $\Delta_i = abs(y_i - (a_0 + a_1 \cdot x_i))$ для каждой точки; учитывая преобразование координат, переводим значения результативного признака, рассчитанного по модели $\Psi(y_i^m) = a_0 + a_1 \cdot x_i$ и взятого из набора экспериментальных данных y в базис непреобразованных координат $y_i^m, \varphi(x_i)$ соответственно; вычисляем значения абсолютной погрешности в точках в непреобразованных координатах $\Delta_i^o = abs(\varphi(x_i) - y_i^m)$; по выражению $p_i = (\Delta_i / \Delta_i^o)^\gamma$ корректируем веса, подбирая значение степени γ в соответствии с минимумом квадратов отклонений экспериментальных данных от модели в непреобразованных координатах. Для нахождения степени можно воспользоваться любым из методов одномерной оптимизации (золотого сечения, Фибоначчи, дихотомии, последовательного поиска и др.); по методу наименьших квадратов, с учётом полученных весов, используя полученные выражения, находим скорректированные оценки параметров.

Эффективность предлагаемого метода построения стохастических математических моделей была проверена на примере зависимости средней плотности радиационно-защитного композита от степени наполнения. Остаточная дисперсия при статистической обработке методом МНК составляет 0,378, методом РПК – 0,015, а методом ПСПА – 0,014.

Как показывают расчёты, во всех случаях оценки, полученные с использованием предлагаемых методов, близки к точным и значительно превосходят по точности оценки, получаемые методом наименьших квадратов в преобразованных координатах, что свидетельствует об их высокой вычислительной эффективности.

В качестве заключительного этапа построения многофакторных моделей используется выбор моделей из «пучка» функций для отыскания функциональных зависимостей в области предельных значений независимых переменных или по краям факторного пространства.

В качестве основы моделирования приняты многофакторные модели, полученные в результате структурно-параметрического синтеза моделей по центральной части факторного пространства. Сопряжение с крайними точками проводим в

линеаризованном виде по результатам эксперимента в вершинах факторного пространства, с использованием планов эксперимента в виде дробно-рациональных функций.

На основе разработанных математических методов моделирования и алгоритмов предлагается *обобщённая схема построения моделей*, которая может быть использована для моделирования и многокритериального синтеза КМ специального назначения (рис. 5).

В четвёртой главе решаются задачи имитационного моделирования структурообразования композиционных материалов (блок 4, рис. 5).

Структура имитационного моделирования включает в себя систему модулей, решающих задачи математического моделирования и обоснованного выбора параметров вектора управляющих воздействий (рецептурно-технологические параметры) на основе системы специальных критериев качества (рис. 6).

Модуль выбора компонентов обеспечивает моделирование структурообразования микроструктуры и синтеза связующего. Состоит из модулей выбора наполнителей, вяжущего и модифицирующих добавок.

Для оценки технико-экономической эффективности при моделировании радиационно-защитных композитов предлагается использовать критерий, характеризующий относительное изменение массы конструкции:

$$\delta m_k = A \ln \left(\frac{B_{\text{эт}}}{B_{\text{н}}} \right) - M_{\text{н}} A \left[\left(\frac{\mu}{\rho} \right)_{\text{эт}} - \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_{\text{н}} \right], \quad (1)$$

где δm_k – относительное изменение массы конструкции защиты; B – фактор

накопления; $A = \left[M_{\text{эт}} \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_{\text{эт}} \right]^{-1}$; $\frac{\mu}{\rho}$ – массовый коэффициент ослабления излучения;

индексы эт, н – обозначения для базового и нового радиационно-защитного материала конструкции, соответственно.

Для оценки эффективности применения проектируемого материала на стадии проектирования предлагается использовать показатель q_{ef} , характеризующий полезный эффект от увеличения его себестоимости:

$$q_{ef} = \delta C \cdot \delta(\mu/\rho)^{-1}, \quad (2)$$

где δC , $\delta(\mu/\rho)$ – относительное изменение себестоимости и массового коэффициента ослабления, соответственно.

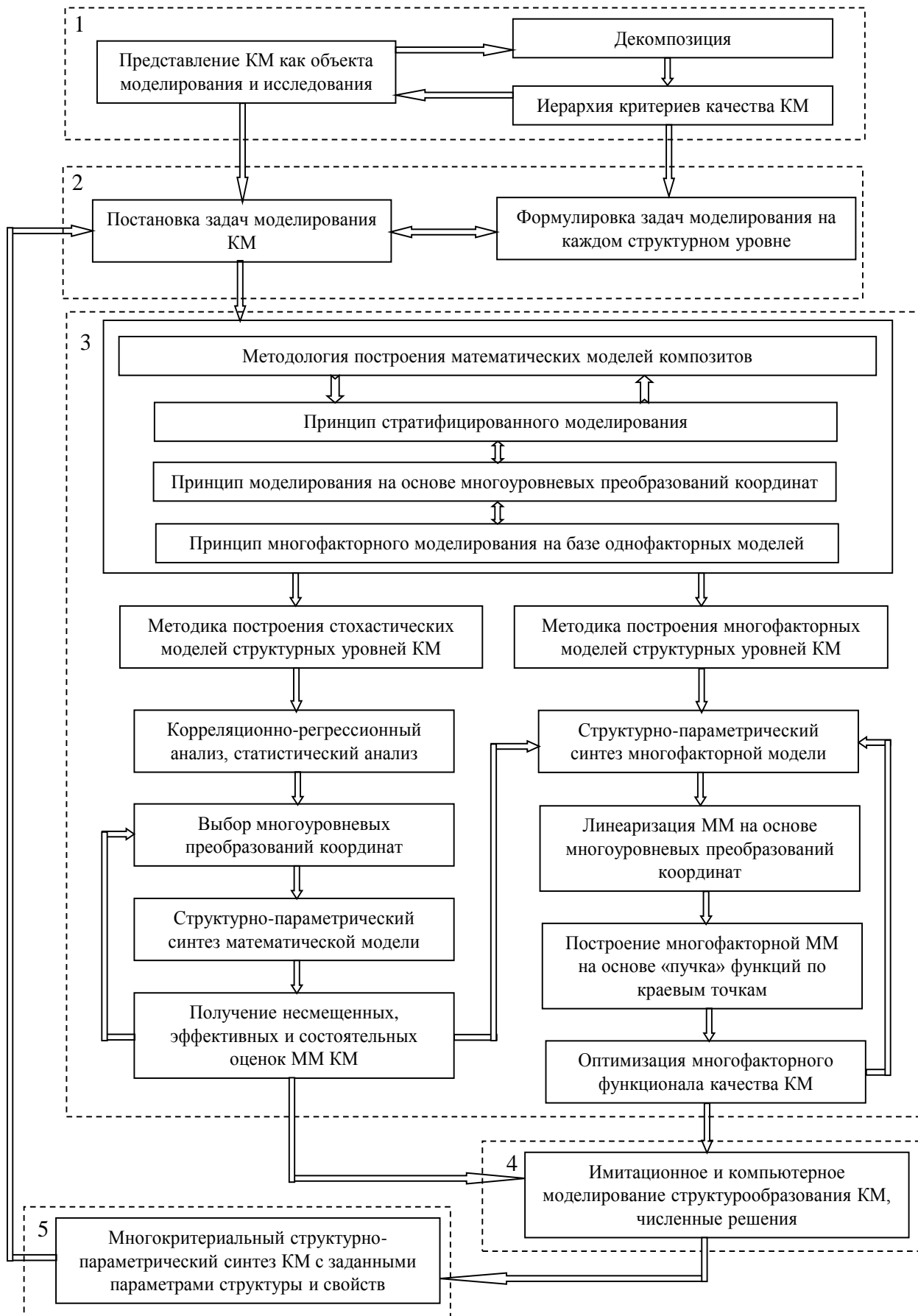


Рис. 5. Обобщённая схема построения математических моделей композитов

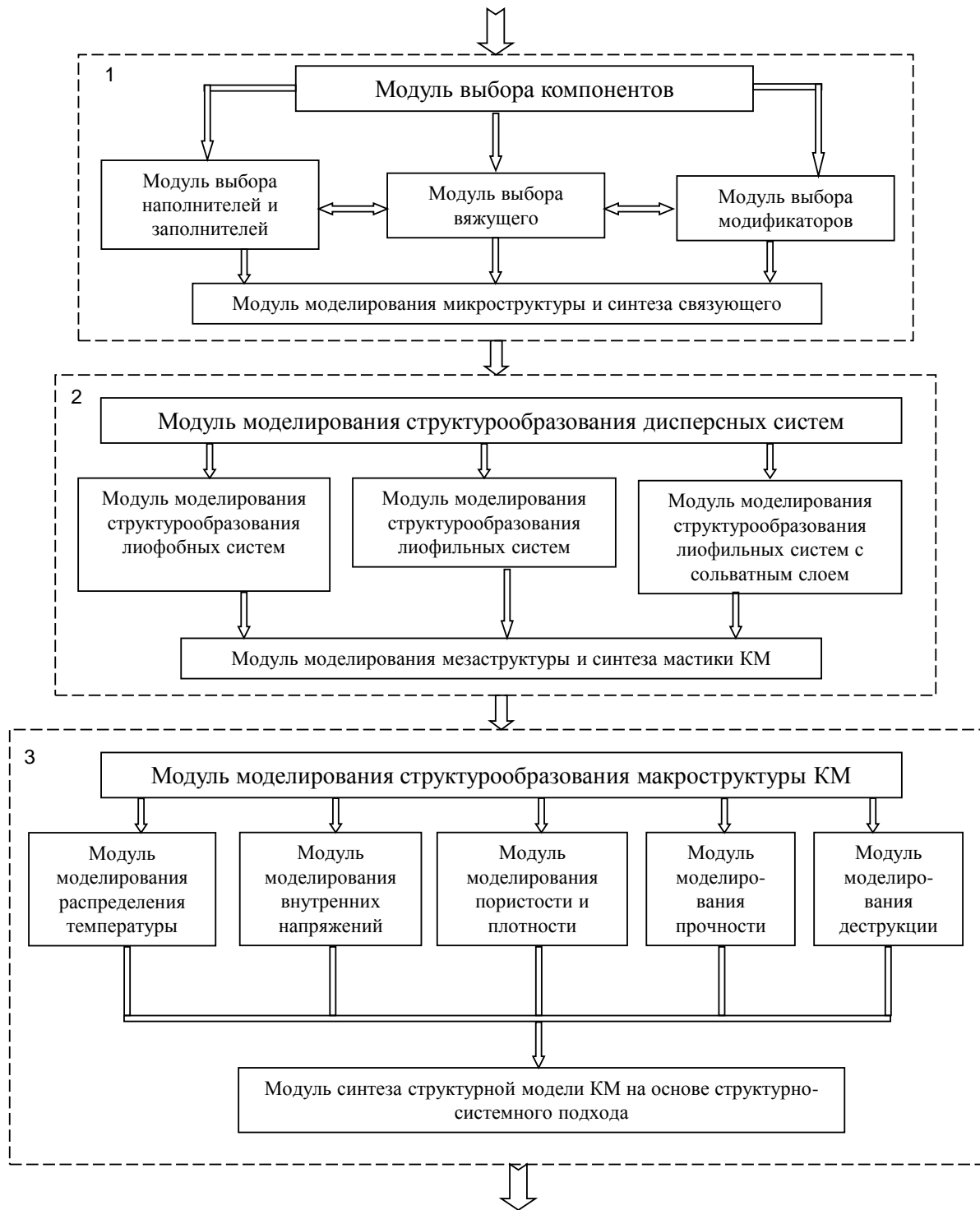


Рис. 6. Структура имитационного моделирования

Моделирование оценки эффективности композита при ограниченных геометрических размерах конструкции производим по критерию k_G , равному

$$k_G = h_n h_{эт}^{-1}, \quad (3)$$

где h_n , $h_{эт}$ – толщина защитного слоя, изготовленного, соответственно, из нового и базового материалов. Применение материала эффективно при условиях: $q_{ef} \leq 1$, $k_G \leq 1$.

В модуле выбора наполнителей КМ выбор оптимального наполнителя из группы функционально отобранных дисперсных фаз производится по величине скалярного мультипликативного критерия

$$k_f = k_R k_d k_v, \quad (4)$$

где k_R – коэффициент, учитывающий синергетический эффект в совместном влиянии основных характеристик наполнителя и композита ($k_R = \Delta R R_0^{-1}$, здесь ΔR – разность между эмпирической прочностью и значением, вычисленным по экспериментально-статистической модели $R = R(v_f, S_{\text{уд}})$ в точке, соответствующей наибольшему значению эмпирической прочности R_0 ; v_f – объёмная доля наполнителя; $S_{\text{уд}}$ – удельная поверхность наполнителя); k_d – коэффициент дисперсности ($k_d = d_f d_o^{-1}$, здесь d_o – граница дисперсности, отделяющая мелкий наполнитель от наполнителя; d_f – диаметр частицы наполнителя); k_v – концентрационный коэффициент ($k_v = v_f \eta_f^{-1}$, здесь η_f – максимальная плотность упаковки частиц наполнителя). Наполнитель выбирается из условия $k_f = \max$.

Использование разработанного математического метода моделирования микроструктуры композита позволило осуществить обоснование выбора компонентов для многокритериального синтеза наномодифицированных радиационно-защитных композитов.

Модуль моделирования структурообразования дисперсных систем решает задачи имитационного моделирования мезоструктуры композита и синтеза мастики для защиты от радиации на основе фундаментальных законов физики и химии, кибернетических имитационных моделей взаимодействий, динамических стохастических моделей кинетических процессов структурообразования, типовых математических моделей структуры потоков (диффузионных, смещения, вытеснения, ячеистых и т.д.).

В состав модуля входят подмодули, обеспечивающие имитационное моделирование эволюции термодинамического флокулообразования как основы физических механизмов структурообразования, обусловленных множеством сочетаний структурообразующих факторов: структурообразование дисперсных систем (лиофобных, лиофильных и лиофильных при наличии сольватных слоев) в зависимости от степени наполнения, «сквозь растворный» механизм структурообразования на основе химических реакций поликонденсации и полимеризации, а также топохимический механизм структурообразования на основе различных физико-химических процессов, происходящих на границе раздела твёрдой и жидкой фазы, оказывающие значительное влияние как на параметры структуры, так и на эксплуатационные свойства композиционных материалов.

Процесс флокуляции рассматривается как процесс разрушения дисперсной системы, протекающий как под действием гравитационных сил (седиментационная устойчивость), так и за счёт некомпенсированной поверхностной энергии (агрегативная устойчивость).

Для оценки возможности самоорганизации системы при моделировании вводим критерий, учитывающий экспорт и импорт энтропии в единицу времени:

$$dS < 0, \text{ или } |d_e S| > d_i S \geq 0, \quad (5)$$

где индексы e и i обозначают, соответственно, экспорт и импорт энтропии.

Выполненное моделирование и анализ показывают, что при подводе внешней энергии образование флокул термодинамически невозможно ($d_i S > d_e S$, $d_i S > 0$, $d_e S \approx 0$), что соответствует реально протекающим процессам, так как энергетический выигрыш от организации на поверхности дисперсной фазы сольватного слоя значительно меньше количества подводимой извне энергии, расходуемой на формирование системы с однородным распределением фаз.

Сопоставление модельных (расчётных) и натуральных значений энтропии указывает на адекватность моделирования.

Подмодули моделирования структурообразования дисперсных систем. В основу моделирования эволюции структурообразования дисперсных систем положены методы системного анализа, включающие в себя энергетический, кибернетический, информационно-аналитический и полиструктурный подходы, а также *совместное использование* аналитических зависимостей математического описания взаимодействий структурообразующих элементов и компьютерного моделирования множества сочетаний структурообразующих факторов.

При аналитическом моделировании рассматриваются *кинетические* и *динамические* процессы флокулообразования, а при имитационном моделировании – процессы образования кластеров в лиофобных, лиофильных и лиофильных при наличии сольватных слоёв системах.

Динамические процессы флокулообразования описываются системой уравнений:

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i - k_i (\dot{\mathbf{r}}_i - \mathbf{v}_i) = -\nabla U_i, \quad i = \overline{1, N}, \quad (6)$$

где m_i – масса i -й частицы; $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ – её координаты; N – количество частиц наполнителя; k – коэффициент, определяемый диссипативными свойствами дисперсионной среды, \mathbf{v}_i – скорость дисперсионной среды в точке \mathbf{r}_i ; U_i – потенциал в точке \mathbf{r}_i (в общем случае зависящий от характеристик дисперсионной среды, а также от характеристик и взаимного расположения всех остальных частиц системы).

Кинетические процессы моделируются в *стационарном* (при отсутствии подводимой в систему механической энергии) и *кинетическом* (при введении дополнительной механической энергии) режимах.

При моделировании стационарного режима за основу принят механизм коагуляции в результате броуновского движения частиц дисперсной фазы при их сближении на расстояние, соответствующее образованию устойчивой связи между частицами, а при моделировании кинетического режима механизм коагуляции определяется уровнем кинетической энергии, получаемой частицами от внешнего источника, необходимой для преодоления гидродинамического сопротивления при сближении частиц и расходуемой на образование устойчивой связи между ними.

Моделирование, проведённое по предложенным методам и моделям, показывает, что характерное время флокуляции значительно превышает продолжительность твердения мастик. В динамических условиях процесс флокуляции может протекать только в высоконаполненных мастиках, получаемых на основе грубодисперсных наполнителей. Такие мастики характеризуются седиментационной неустойчивостью, приводящей к расслоению материала и образованию локальных пространственных областей с повышенным содержанием дисперсной фазы. Эти области будем рассматривать как флокулы.

Для моделирования эволюции лиофильных, лиофобных и лиофильных с сольватным слоем дисперсных систем разработан комплекс программ для ЭВМ. Моделирование эволюции структурообразования производилось для систем, объёмная доля дисперсных частиц в которых варьировалась от 0,01 до 0,37. В качестве потенциалов парного взаимодействия были использованы: потенциал Леннарда – Джонса (модель лиофобной системы); потенциал Ми, представленный единственным слагаемым, характеризующим силы отталкивания (модель лиофильной системы); сумма потенциала Леннарда – Джонса с функцией Гаусса (модель лиофильной системы при наличии сольватных слоёв).

Модуль моделирования структурообразования макроструктуры КМ с позиций структурно-системного подхода решает задачи математического моделирования макроструктуры конгломерата и синтеза структурной модели композита для защиты от радиации.

В ходе компьютерного исследования технологических параметров композита предложен **метод моделирования реологии** и синтезирована модель композита, обеспечивающие исследование влияния степени наполнения материала и дисперсности наполнителя на количество энергии, затрачиваемой на перемещение дисперсной фазы в слое.

Модуль моделирования распределения температуры – программный модуль определения распределения температуры по сечению структурной модели КМ. Алгоритм определения распределения температуры по сечению структурной модели, реализованный в программном модуле, основывается на методе сеток.

Модуль моделирования внутренних напряжений. В работе определение влияния основных рецептурно-технологических факторов на напряжённое состояние материала проводили методом *имитационного моделирования* на примере серного композита. Для этого был разработан программный модуль, учитывающий изменение геометрических размеров модели и физических свойств компонентов. Количественную оценку влияния основных факторов проводили по показателю дефектности, равному отношению $D_{\sigma} = \sigma_m / E_m$ (здесь σ_m – напряжение; E_m – модуль упругости вяжущего). В результате моделирования внутренних напряжений синтезирована *структурная модель* серного композита.

Алгоритм расчёта внутренних напряжений, реализованный в программном модуле, следующий:

1) для температуры приготовления материала T_p и температуры окружающей среды T_o , определяем средние плотности материалов зерна и матрицы;

2) по известным значениям массовой степени наполнения материала, удельной поверхности наполнителя, T_p и T_o определяем коэффициент изменения средней плотности и радиусы модели при температурах T_p и T_o , соответственно, $R_{\text{мод}}^{T=T_p}$ и $R_{\text{мод}}^{T=T_o}$;

3) рассчитываем местоположение поверхности контакта, радиус частицы наполнителя и разность в удлинениях зерна и оболочки $\Delta \epsilon$.

Оценку внутренних напряжений, которые возникают в оболочке матрицы, проводили по показателю дефектности D_{σ} , чем больше значение которого, тем выше уровень развивающихся в оболочке матрицы напряжений и, следовательно, выше вероятность образования микротрещин, которые могут привести к снижению прочности композиционного материала.

Основа модулей моделирования плотности, пористости и прочности – **системно-структурный подход**, суть которого заключается в рассмотрении композита как трёхфазной дисперсной системы, состоящей из *вяжущего* (матрицы), *наполнителя* (дисперсной фазы твёрдых частиц) и *воздушных пор* (дисперсной фазы воздушных включений) и позволяющий смоделировать и проанализировать физическую картину поведения материала под нагрузкой и в агрессивных средах с погрешностью в пределах 15 %.

Согласно предлагаемому подходу основными типами разрушения неоднородных материалов являются разрушения типа МК (матрица + контактная зона), МКЗ (матрица + контактная зона + наполнитель), МЗ (матрица + наполнитель).

В ходе моделирования установлен экстремальный характер изменения прочности мастик от степени наполнения и удельной поверхности наполнителя. Такой характер изменения прочности материала хорошо объясняется изменением дефектности структуры композита.

Численный эксперимент показал, что в композите одновременно протекают процессы, приводящие к увеличению и снижению пористости, и получено уравнение, описывающее изменение пористости от степени наполнения

$$\Pi = \frac{a + bv_f}{1 + cv_f + dv_f^2}, \text{ где } v_f \text{ – объемная степень наполнения; } a, b, c, d \text{ – эмпирические коэффициенты.}$$

ские коэффициенты.

На основе полученных численно-аналитических решений разработан эффективный **компьютерный метод прогнозирования** пористости и средней плотности композитов. Метод позволяет провести оценку средней плотности материала с погрешностью до 3 %.

Для моделирования влияния структуры конгломерата на прочность материала предложен показатель K_{hom} , характеризующий однородность распределения фаз в композите:

$$K_{\text{hom}} = \frac{1 + 3\phi}{(1 + \phi)^3} \cdot \chi = \frac{1 + 3\phi}{(1 + \phi)^3} \cdot \frac{v_m - v_i}{v_m}, \quad (7)$$

где $\phi = hd_f^{-1}$; d_f – диаметр частицы наполнителя; h – толщина прослойки вяжущего между частицами наполнителя диаметром d_f ; χ – коэффициент, учитывающий разделение фаз в вяжущем; $v_m, v_{\text{п}}$ – соответственно, объемные доли вяжущего и пор в композите.

Модуль моделирования деструкции. В работе предложен **метод математического моделирования деструкции**, на основании которого синтезирована обобщённая модель деструкции композиционных материалов, основанная на представлении структуры материала как совокупности устойчивых связей, обеспечивающих целостность материала. Баланс между количеством напряжённых и разорванных связей и определяет этапы процесса деструкции материала. Динамика совместного изменения разорванных и напряжённых связей описывается системой уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dN_b}{dt} = \alpha N_b N_s \\ \frac{dN_s}{dt} = (\beta - \alpha N_b) N_s \end{cases}, \quad (8)$$

где N_s – количество напряжённых связей; N_b – количество разорванных связей; α, β – константы скорости разрыва связей и образования напряжённых связей, соответственно.

Для математического описания процесса деструкции предложена и обоснована степенная функция вида

$$k_{ст} = \left[1 - \frac{1-n}{F_0^{1-n}} k_d t \right]^{1-n}, \quad (9)$$

где $k_{ст}$ – коэффициент стойкости материала; F_0 – свойство, характеризующее изменение структуры материала в процессе воздействия эксплуатационной среды; t – время; n – константа; k_d – константа скорости деструкции.

Для оценки способности материала сопротивляться внешним воздействиям при моделировании вводится критерий

$$k_E = \frac{U}{|\Delta ST|}, \quad (10)$$

где ΔST – количество работы, совершаемой внешними источниками, для преобразования структуры материала; U – энергетический потенциал стойкости структуры композита к эксплуатационному воздействию.

Анализ результатов моделирования и вычислительного эксперимента показывает, что при $k_E > 1$ материал устойчив к эксплуатационному воздействию. Оптимизация функции качества даёт решение, что материал, обладающий высокой стойкостью, соответствует условиям: $k_E = \max$ и $\Delta S = \min$.

Для проверки адекватности и эффективности метода моделирования деструкции были проведены натурные эксперименты и расчёты кинетических и энергетических параметров процесса деструкции композитов, подвергнутых воздействию различных эксплуатационных сред: химические среды (вода, растворы солей и кислот), воздействию естественной атмосферы, нагреву, попеременному воздействию отрицательной температуры и попеременному воздействию паровоздушной среды. Сравнение результатов показало их высокую сходимость, что говорит об эффективности предложенного **метода моделирования деструкции**, который лёг в основу *программного модуля моделирования деструкции* композитов.

Модуль синтеза структурной модели КМ основывается на разработанном *методе компьютерного моделирования структурообразования КМ*, суть которого заключается в совместном решении двух взаимно противоположных задач оптимизации на основе моделирования количества наполнителя и реологических характеристик мастики, когда моделируется количество наполнителя в смеси с заданным значением предельного напряжения сдвига $\tau_{тр}$ по критерию

$$v_{f,c} = \eta_f \left[1 + \frac{U}{\tau_{тр} d_f^3} \right]^{-3}, \quad (11)$$

где $U = a d_f^3 (h/d_f)^{1-b}$ – энергия активации процесса течения смеси; a, b – эмпирические коэффициенты зависимости $\tau = f(h/d_f)$, и оценке объёмной доли наполнителя (с учётом его геометрических размеров и физических свойств) по структурному критерию ϕ_{ct} :

$$\phi_{ct} = \left[1 + r \left(\frac{\rho_{кр}}{\rho_{мл}} \right) \right] \left[\rho_{кр} (S_{кр} + r \cdot S_{мл}) \cdot (d_f + h_s) \cdot n \right]^{-1}, \quad (12)$$

где n – количество слоёв толщиной $d_t = d_f + h_s$; d_f – диаметр частицы наполнителя; h_s – толщина прослойки вяжущего между частицами наполнителя; $S_{кр}, S_{мл}$ – соответственно, удельная поверхность крупного и мелкого наполнителей; $\rho_{кр}, \rho_{мл}$ – их плотности; r – отношение масс мелкого и крупного наполнителей.

В качестве критерия оптимизации зерновой смеси предложен коэффициент эффективности

$$k_{эф} = \left[1 - \frac{\ln(N_k)}{N} \right], \quad (13)$$

где $N_k = \left(\sum_{i=1}^m n_i \right)! \cdot \left(\prod_{i=1}^m n_i! \right)^{-1}$ – количество возможных вариантов расположения n зёрен m фракций; N – общее количество зёрен наполнителя.

Моделирование и оптимизацию соотношения между крупным и мелким наполнителями предлагается проводить по критерию, учитывающему свойства мастики и конгломерата композита:

$$r = \frac{1 - n_{сл} (d_f + h_s) \frac{\rho_{н}}{\alpha} S_{кр} - \frac{\rho_{кр}}{\alpha \cdot \rho}}{n_{сл} (d_f + h_s) \frac{\rho_{н}}{\alpha} S_{мл} + \frac{\rho_{кр}}{\alpha \cdot \rho}}, \quad (14)$$

где $\rho_{кр}, \rho_{мз}$ – средняя плотность материала, соответственно, крупного и мелкого наполнителей; $S_{кр}, S_{мл}$ – удельные поверхности, соответственно, крупного и мел-

кого заполнителей; α – коэффициент раздвижки зёрен; d_f – диаметр частицы наполнителя; h_s – толщина слоя вяжущего между частицами наполнителя; $n_{\text{вб}}$ – количество слоёв вяжущего.

На основе проведённых исследований и численного эксперимента установлено, что для получения оптимальной зерновой смеси рационально использовать две фракции заполнителя, характеризующиеся соотношением диаметров зёрен $k \geq 8$. Сопоставление экспериментальных данных и расчётных значений свидетельствует об их хорошей корреляции и высокой вычислительной эффективности.

Для моделирования защитных свойств композитов предложен *экспериментально-теоретический метод моделирования* радиационного разогрева композитов, учитывающий геометрические параметры конструкции защиты, индивидуальные свойства источника излучения и физические свойства компонентов и композита:

$$T = T_c + \frac{A_o e_o}{4\pi R^2 \alpha} (1 - e^{-\mu x}) \left(1 - e^{-\frac{\alpha}{c_m \rho} \tau} \right), \quad (15)$$

где A_o – активность источника; e_o – усреднённое значение энергии γ -квантов; τ – время; α – коэффициент теплоотдачи; R – расстояние между слоем защиты и источником; c_m – теплоёмкость материала защиты; ρ – средняя плотность материала защитного слоя; μ – коэффициент линейного ослабления γ -излучения материалом защитного слоя, см^{-1} ; x – толщина защитного слоя.

С целью оценки адекватности имитационной модели были проведены экспериментальные исследования влияния ионизирующего излучения на свойства серных композитов. Установлено, что коэффициент линейного ослабления γ -излучения ($E_\gamma = 0,662$ МэВ) равен $0,18\text{--}0,75$ см^{-1} , а коэффициент радиационной стойкости (при поглощенной дозе 1 МГр) – $0,95\text{--}0,97$. Погрешность математического моделирования оценивалась на образцах после облучения их в Российском ядерном центре г. Снежинск, которая для разработанного метода не превышает 15% .

В пятой главе решаются задачи математического моделирования макроструктуры композита, технологических воздействий, эксплуатационных свойств на базе предложенной методологии многокритериального синтеза композиционных материалов специального назначения с заданными свойствами и параметрами структуры на основе функционалов качества КМ.

Отличительной особенностью моделирования композиционных материалов от моделирования механической смеси компонентов (свойства которой определяются как сумма свойств компонентов) является необходимость моделирования границы раздела фаз, определяющей интенсивность процессов структурообразо-

вания и свойства материала (системы). Проблема моделирования заключается в том, что на границе раздела фаз формируется контактный слой, обеспечивающий сцепление компонентов (адгезионную прочность) – *новое интегративное свойство*, которое является определяющим при формировании макроструктуры и обязательно должно быть учтено при моделировании.

Для оценки эффективности КМ при моделировании введен *критерий практической оптимальности*, основанный на аддитивном преобразовании:

$$E = \frac{b_1 y_1 + b_2 y_2 + \dots + b_n y_n}{C},$$

$$\eta = \sum_{i=1}^n b_i \bar{y}_i / \frac{C}{C_m} \sum_{i=1}^n b_i = k(b_1 \bar{y}_1 + b_2 \bar{y}_2 + \dots + b_n \bar{y}_n),$$
(16)

где $\bar{y}_i = y_{im}/y_i$ – относительное значение показателя i -го качества; y_i – абсолютное значение показателя; y_{im} – максимально допустимое значение показателя; C – стоимость системы; C_m – максимально допустимое значение стоимости; b_i – весовой коэффициент, который отражает полезность (ценность) i -го критерия при принятии решения о выборе альтернативы.

При правильной классификации систем по функциональным элементам и получении данных их средних стоимостей погрешность метода не выше 10 %.

Система имитационного моделирования включает в себя элементы конструирования КМ с использованием «полиструктурной» модели и модели «чёрного ящика», системы декомпозиции управляющих рецептурно-технологических факторов, стратифицированной системы критериев эффективности системы КМ, структуры микро-, мезо- и макроуровней КМ.

В процессе моделирования при переходе на следующий структурный уровень оптимизированные рецептура и технология предыдущего уровня уточняются. Поэтому последовательное совмещение уровней (от микро- до макроструктуры) требует выделения критериев (свойств), обеспечивающих получение качественного композиционного материала на уровне макроструктуры (продукта технологии).

Для топологически подобных структурных уровней, таким критерием является *подвижность смеси* и реализуется *принцип совмещения структур*, согласно которому оптимальный по выбранному показателю качества материал (структурный уровень) получают из неоптимальных предыдущих структурных уровней. Для материалов, не содержащих дисперсные фазы, оптимизацию рецептуры и технологии приготовления проводим по *прочности*.

Формирование критериев оптимальности и функционала качества композита обеспечивается видом кинетических процессов формирования основных физико-механических характеристик композиционных материалов (прочность, модуль

упругости, контракция и усадка, нарастание внутренних напряжений, химическая стойкость, водопоглощение и водостойкость и т.д.) на основе решения сначала общей, а затем частной задачи идентификации. Для построения целевой функции качества было выполнено объединение свойств КМ в функциональные группы, внутри которых свойства зависят от одних и тех же факторов, а между группами зависимость минимальна.

В основу построения *функционала качества* была положена идея о том, что свойства КМ, объединённые в группы А и С при своем увеличении вызывают увеличение качества всей системы, а свойства, объединённые в группу В, – снижение качества системы. Поэтому функционал Φ отыскиваем в виде дробно-рациональной функции, где в числителе находится совокупность многофакторных функций свойств групп А и С, а в знаменателе – функций свойств группы В. Функционал принимался в виде

$$\Phi = \frac{\alpha_1 \sum f(A_i) + \alpha_3 \sum (C_i)}{\alpha_2 \sum f(B_i)}. \quad (17)$$

Разработанный функционал качества КМ использовался при многокритериальном синтезе композитов для защиты от радиации, при котором при заданных физических и математических граничных условиях функционал исследовался на экстремум.

В шестой главе приводятся структура *интегрированной системы компьютерно-имитационного моделирования КМ*, алгоритмы, основные процедуры и архитектура программного комплекса, результаты многокритериального синтеза композитов и анализ полученных результатов.

Для моделирования эволюции лиофильных, лиофобных и лиофильных с сольватным слоем дисперсных систем разработан *комплекс программ*. Решение указанных задач моделирования теоретически возможно выполнить с использованием универсальных пакетов (Mathcad, MATLAB, Maple и др.), однако для подобного подхода характерна сравнительно невысокая вычислительная эффективность, низкая адаптивность и большая функциональная избыточность. Процесс реализации расчётной схемы моделирования флокулообразования в рамках универсальных пакетов по затратам времени превышает аналогичный процесс, реализованный в автономном комплексе программ.

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. Укрупнённая блок-схема программы приведена на рис. 7.



Рис. 7. Архитектура разработанного ПО численного анализа

Моделирование эволюции системы осуществляется в реальном времени, учитываются физические свойства компонентов, особенности взаимодействия на границе раздела фаз и с граничной поверхностью. Текущее значение состояния системы используется для графического представления результатов моделирования и статистического анализа.

В процессе моделирования выполняется следующий *вычислительный алгоритм*:

1. Определяют $\frac{N(N-1)}{2}$ значений сил парного взаимодействия:

$$\mathbf{F}_{ij} = -\mathbf{F}_{ji} = \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} F_{ij} (r_{ij} - R_i - R_j), \quad i = \overline{1, N-1}, \quad j = \overline{i+1, N}, \quad (18)$$

где \mathbf{F}_{ij} – модуль силы парного взаимодействия; \mathbf{r}_{ij} – вектор, соединяющий центры i -й и j -й частиц; R_i, R_j – радиусы i -й и j -й частиц, соответственно; N – число частиц.

2. Находят N значений силы тяжести $\mathbf{F}_{i,g} = m_i \mathbf{g}$, где m_i – масса i -й частицы.

3. Вычисляют N значений силы вязкого трения

$$\mathbf{F}_{i,e} = 6\pi\eta R_i (\mathbf{v} - \dot{\mathbf{r}}_i), \quad (19)$$

где η – вязкость среды; R_i , $\dot{\mathbf{r}}_i$ – радиус и скорость i -й частицы, соответственно; \mathbf{v} – скорость дисперсионной среды.

4. Определяют силы взаимодействия с границами.

Все граничные плоскости заданы уравнениями в нормальной форме:

$$\mathbf{n}_k \cdot \mathbf{r} - p_k = 0, \quad k = \overline{1, K}, \quad (20)$$

где \mathbf{n}_k – единичный вектор нормали k -й плоскости; $\mathbf{r} = (x, y, z)$ – радиус-вектор текущей точки; p_k – расстояние от начала координат до k -й плоскости; K – число граничных плоскостей.

Моделирование сил, действующих со стороны граничной плоскости, производится на основании соотношения

$$\mathbf{F}_{ik,b} = \mathbf{n}_k F_{ik,b} (d_{ik} - R_i) = \mathbf{n}_k F_{ik,b} (\mathbf{n}_k \cdot \mathbf{r}_i - p - R_i), \quad (21)$$

где d_{ik} – расстояние от i -й частицы до k -й плоскости; R_i – радиус i -й частицы.

Моделирование сил, действующих со стороны граничной сферы, производится на основании соотношения

$$\mathbf{F}_{il,b} = \frac{\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_i|} F_{il,b} (d_{il} - R_i) = \frac{\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_i|} F_{il,b} (R_l - |\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_i| - R_i), \quad (22)$$

где d_{il} – расстояние от i -й частицы до l -й сферы.

Моделирование результирующей силы, действующей на i -ю частицу и изменяющей её положение, производим на основании выражения, учитывающего сумму сил тяжести, вязкого трения, парного взаимодействия и взаимодействия с граничными поверхностями:

$$\mathbf{F}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \mathbf{F}_{ij} + m_i \mathbf{g} + \mathbf{F}_{i,e} + \sum_{k=1}^K \mathbf{F}_{ik,b} + \sum_{l=1}^L \mathbf{F}_{il,b}. \quad (23)$$

Полученные значения сил используются для коррекции модели состояния дисперсной системы в соответствии с выбранной расчётной схемой.

Текущее состояние модели дисперсной системы отражается с помощью автоматической генерации программ на входном языке пакета 3D Studio MAX. По результатам моделирования полученные программы формируют растровое изображение моделируемой дисперсной системы.

В качестве статистических показателей, характеризующих распределение частиц в моделируемой системе, используются: среднее и среднее квадратичное отклонение (СКО) расстояния от поверхности i -й частицы до поверхности четырех ближайших частиц (для i -й частицы усреднение проводится по числу ближайших); среднее и СКО числа частиц, расстояние до поверхности которых (от поверхности i -й частицы) не превышает заданного значения; среднее и СКО числа частиц, находящихся в k -й подобласти ($k = \overline{1, K}$, K – число подобластей) выпук-

лой оболочки всех N частиц. Для нахождения числа частиц производилось построение ограничивающего прямоугольного параллелепипеда, который затем разделялся на 27 равных подобластей.

Моделирование эволюции дисперсных систем, полученных на основе дисперсных фаз, имеющих различную смачивающую способность, обеспечивает исследование характерных особенностей (стадий) их структурообразования.

Предложенный *метод имитационного моделирования* обеспечивает исследование влияния основных рецептурных и технологических факторов на процесс структурообразования дисперсных систем. Адекватность полученных аналитических решений подтверждается численными решениями, полученными для известных композиционных материалов с погрешностью в пределах 10 %.

На рис. 8 приведена диаграмма активности программного комплекса. На рис. 9 – структура базы данных композитов, состоящая из групп данных: материалы; технологии; параметры структуры; свойства (материалов, структур, технологий); проект – полученные технологии, рецептуры, параметры структур.

Система компьютерного моделирования и программный комплекс, реализующие все предлагаемые в диссертационной работе методологические принципы, методы построения математических моделей и структурно-параметрического синтеза многофакторных моделей КМ на основе многоуровневых преобразований координат, представляют собой легко расширяемое и модернизируемое приложение, работающее в NT-совместимых операционных системах (рис. 10).

Высокая модульность приложения позволяет осуществлять лёгкую поддержку и обновление данной системы, а также облегчает распределение труда между группами разработчиков.

Приложение имеет трёхслойную структуру:

- слой нулевого уровня представлен расширяемой программной оболочкой (РПО), инкапсулирующей в себя основной «минимальный» набор функций, а также общий графический интерфейс, необходимый для функционирования;
- на первом уровне располагаются модули, представляющие графические и функциональные оболочки для дополнительных модулей второго уровня;
- второй уровень содержит модули с рабочими процедурами расчёта, которые активируются первым уровнем для выполнения общей «целевой» функциональности приложения.

Для полнофункциональной работы программного комплекса рекомендуется ЭВМ следующей комплектации: IBM-совместимый персональный компьютер, процессор типа P4 и выше, оперативная память не менее 128 МБ, жёсткий диск не менее 6 Гб. Операционная система Windows XP/Vista/7, Linux.

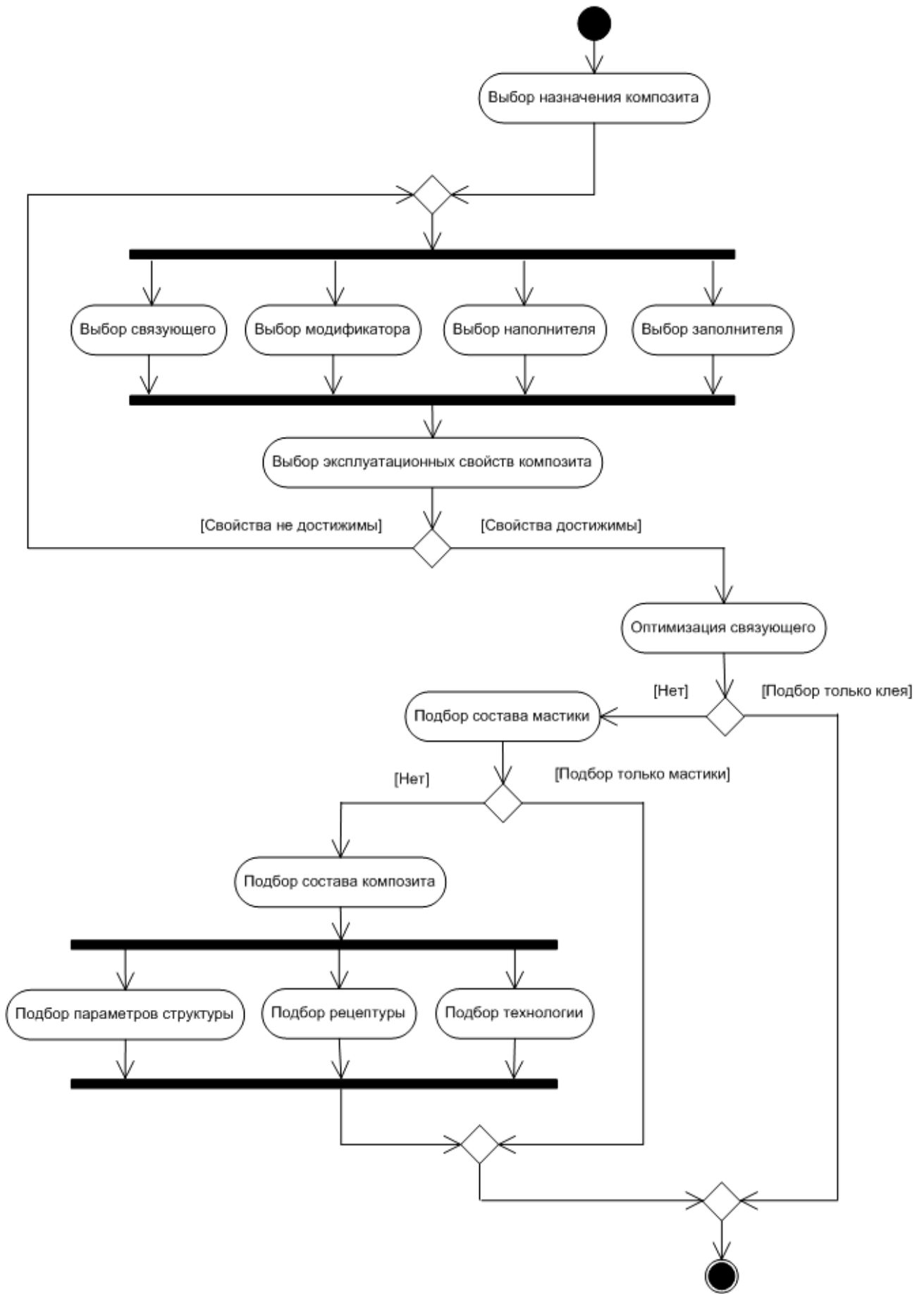


Рис. 8. Диаграмма активности программного комплекса

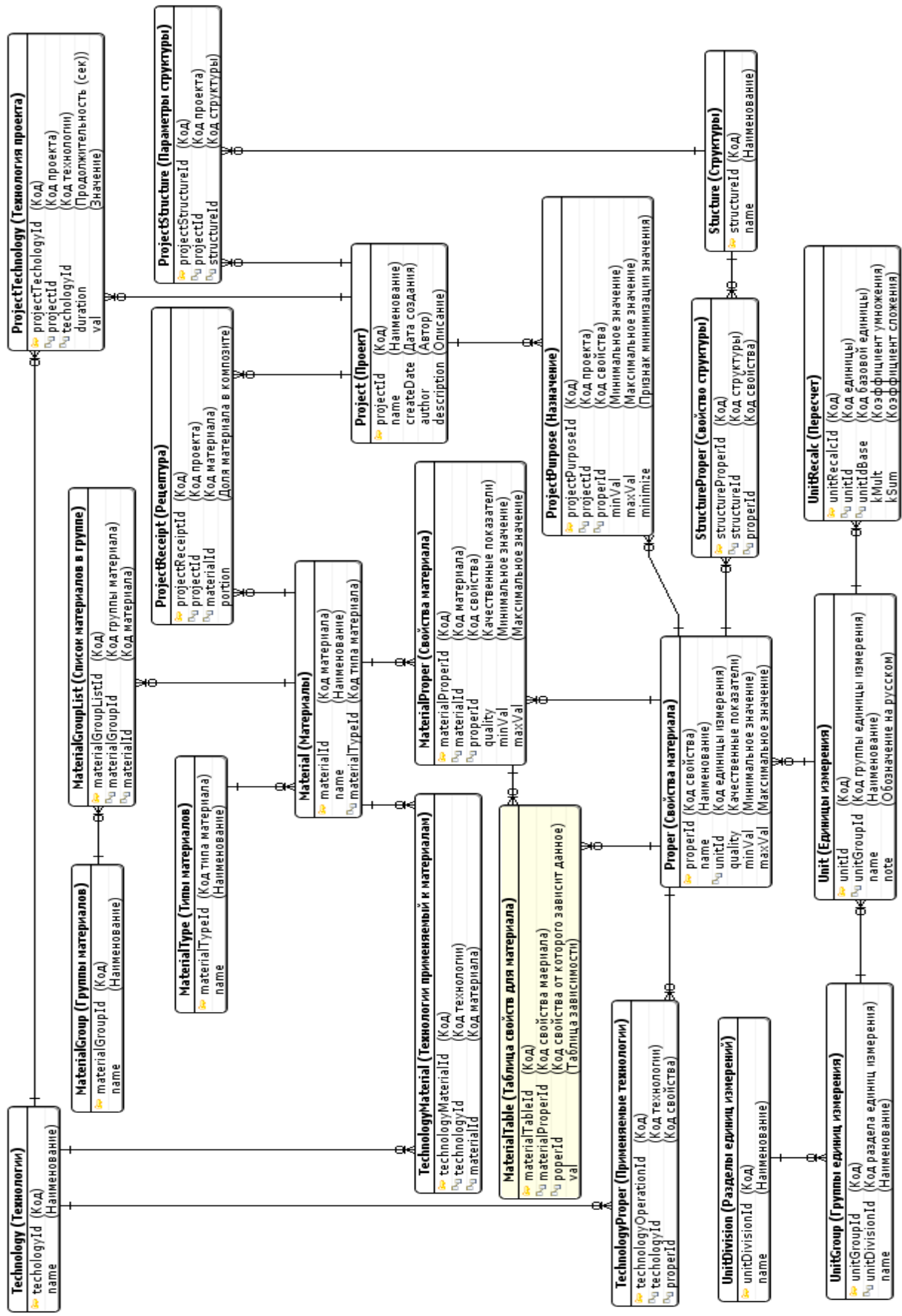


Рис. 9. Структура базы данных композита

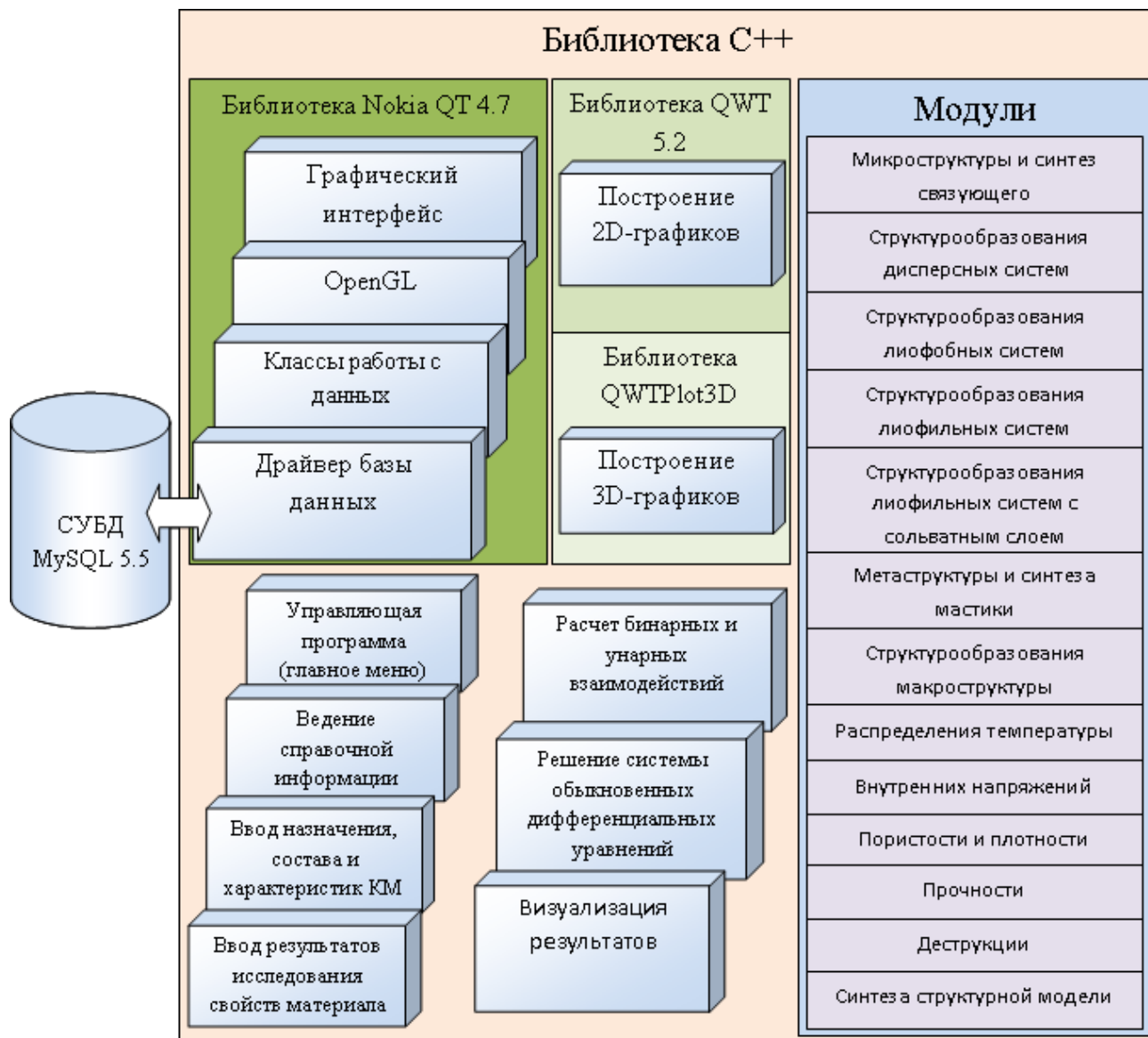


Рис. 10. Архитектура программного комплекса синтеза математических моделей композитов

Экранные формы программной оболочки показаны на рис. 11.

По результатам моделирования предложен следующий *алгоритм многокритериального синтеза* композиционных материалов с регулируемой структурой и свойствами специального назначения:

1. Техническая постановка и формализация задачи и выбор технического критерия оптимизации.
2. Построение математической модели объекта управления.
3. В предположении полной формализации задачи выбор метода оптимизации.
4. Выбор численных методов решения оптимизационных задач многокритериального синтеза.

5. Разработка и тестирование программ решения задачи оптимизации, включая корректировку численных методов для повышения точности и вычислительной эффективности алгоритма.

6. Синтез композитов с заданными параметрами (параметры структуры, виды и концентрации компонентов, технологические воздействия и т.д.).

7. Анализ результатов оптимизации и синтеза композитов. Результаты решения математической задачи являются исходной информацией для уточнения формулировки технической задачи, и итерационный процесс может повторяться до достижения заданной точности.

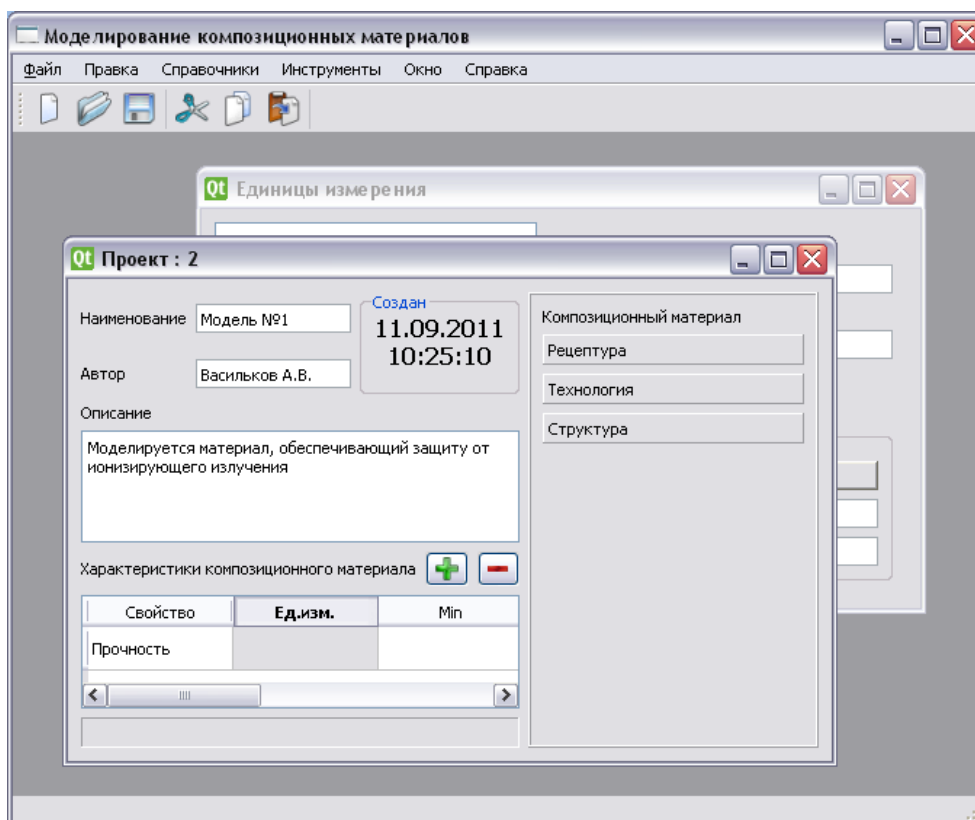


Рис. 11. Главное окно программы

Выполненный комплекс исследований на базе математического и имитационного моделирования по предложенным методикам и алгоритмам послужил основой для разработки оптимальных составов ряда композитов специального назначения, основные эксплуатационные свойства которых приведены в табл. 2.

В приложении приведены акты внедрения системы компьютерного моделирования композитов и новых синтезированных композитов специального назначения на предприятиях Пензенской области.

Основные свойства разработанных композитов

| Наименование показателя | Ед. измерения | Известный материал, тяжёлый бетон | Разработанные композиты | | |
|---|--------------------|--------------------------------------|---|--|--|
| | | | серное вяж. | эпоксидное вяж. | ГГЦ вяж. |
| Средняя плотность | кг/м ³ | 2500...2700 | 2200...7200 | 2750...4750 | 2500...7500 |
| Пористость | % | 7...12 | 2...10 | 2..4 | 4...6 |
| Предел прочности при сжатии | МПа | 20...25 | 23...50 | 120...140 | 30...40 |
| Предел прочности при изгибе | МПа | 8...12 | 6...37 | 75...80 | 15...20 |
| Сопrotивление удару | Дж/см ³ | 15...35 | 20...52 | 50...60 | 10...12 |
| Истираемость | г/см ² | 0,6...0,8 | 0,55...0,85 | 0,85...0,9 | 0,6...0,8 |
| Адгезионная прочность: – к бетонной поверхности – к металлической поверхности | МПа | 1,2...5,0 1,5...4,0 | 0,4...1,3 2,2...3,8 | 2...6 5...10 | 0,5...1,2 1,5...2,5 |
| Водопоглощение* | % | 7,0...10,0 | 0,15...0,3 | 0,1...0,2 | 0,4...0,6 |
| Максимальная рабочая температура | °С | 450 | 80 | 120 | 250 |
| Коэффициент атмосферостойкости* | | 0,6...0,8 | 0,95...0,96 | 0,95...0,98 | 0,95...0,96 |
| Термостойкость** | | 0,4...0,6 | 0,5...0,65 | 0,85...0,95 | 0,85...0,9 |
| Морозостойкость | Циклы | 50...200 | 50...350 | 350 | 250 |
| Коэффициент химической стойкости: – вода – 5%-ные р-ры NaCl и MgSO ₄ – р-ры HCl и KOH – 10...40% р-ры HF | | 0,7...0,8 0,8 0,8 0,4...0,6 | 0,75...0,95 0,6...0,9 0,74...0,92 0,94...1,0 | 0,85...0,95 0,95...0,96 0,8...0,85 0,6...0,85 | 0,75...0,85 0,85...0,95 0,7...0,8 0,6...0,7 |
| Коэффициент линейного ослабления | см ⁻¹ | 0,15 | 0,18...0,75 | 0,23...0,45 | 0,2...0,8 |
| Коэффициент радиационной стойкости | | 0,8 | 0,95...0,97 | 0,9...0,92 | 0,9...0,95 |

Примечания: * – показатели определены после 360 сут. экспозиции; ** – после 100 теплосмен (нагрев в паро-воздушной среде до $T = 80$ °С и охлаждение в воде с $T = 20$ °С). Наполнитель – полиминеральный отход производства оптического стекла ($\rho_{\text{ср}} = 5100$ кг/м³) и свинцовая дробь.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

Общий итог работы заключается в создании теоретических основ математического моделирования композиционных материалов специального назначения, объединяющие методологические принципы математического моделирования композиционных материалов, методы моделирования структурных уровней композита, численные и аналитические методы построения многофакторных моделей

и комплекс программ, обеспечивающий решение задач многокритериального синтеза композитов специального назначения.

При решении поставленных задач получены следующие результаты.

1. Обоснована методология математического моделирования композитов специального назначения, основанная на методах построения нелинейных математических моделей структурных уровней композита, обеспечивающая решение задач математического моделирования и многокритериального синтеза наномодифицированных композитов для защиты от радиации с уникальными свойствами.

2. Разработаны методы математического моделирования структурообразования композитов специального назначения, учитывающие особенности физико-химических взаимодействий в граничном слое дисперсных систем и позволяющие установить закономерности влияния рецептурно-технологических факторов на процесс формирования структуры КМ.

3. Разработаны методы математического моделирования композитов на структурных уровнях, состоящие в идентификации моделей по внутренней области факторного пространства состояний математическими моделями в преобразованных координатах, на основе которых синтезируются многофакторные модели, экстраполируемые в область предельных значений дробно-рациональными функциями из «пучка» функций по краевым точкам, что обеспечивает сокращение объёма натурального эксперимента и повышение точности моделирования.

4. Разработаны численные методы и алгоритмы структурно-параметрического синтеза математических моделей композитов по экспериментальным данным, основанные на многоуровневых преобразованиях и систематизации математических моделей по видам нелинейного преобразования координат, обеспечивающие повышение быстродействия и точности математического моделирования композитов.

5. Обоснован функционал качества радиационно-защитных композитов, являющийся критерием качества при моделировании и многокритериальном синтезе композитов с требуемыми свойствами и параметрами структуры, на основе которого установлены зависимости между технологическими параметрами композитов и параметрами математических моделей структурных уровней композитов.

6. Разработан комплекс программ моделирования композитов специального назначения, объединяющий модули: обработки экспериментальных данных, синтеза наборов и пакетов нелинейных моделей структурных уровней композитов, анализа и оценки математических моделей, численной оптимизации, обеспечивающий решение задач математического моделирования и многокритериального синтеза радиационно-защитных композитов с заданными свойствами и параметрами структуры.

7. Разработана система компьютерно-имитационного моделирования композитов, включающая в себя методики проведения численного и натурального эксперимента, методы моделирования макроуровней композита с учётом моделирования микроуровней, а также алгоритмы и комплексы программ, обеспечивающие получение эффективной технологии синтеза наномодифицированных композитов специального назначения.

8. В результате исследований установлено, что реализованные в системе компьютерно-имитационного моделирования принципы, методики и алгоритмы обеспечивают моделирование физико-химических процессов структурообразования в граничном слое дисперсных фаз композитов и позволяют в 3-5 раз сократить объём натурального эксперимента, в 2 раза повысить точность моделирования и использовать при моделировании уже накопленный однофакторный экспериментально-статистический материал.

9. Результаты математического моделирования многокритериального синтеза композитов специального назначения внедрены в учебном процессе и на предприятиях оборонного комплекса в виде методов и методик анализа и синтеза, пакетов прикладных программ и программных комплексов. Выполненные экспериментальные исследования, промышленная апробация и эксплуатация созданных методик и программных средств подтверждают высокую эффективность разработанных теоретических основ и методологии моделирования композиционных материалов специального назначения.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в журналах, рекомендованных ВАК:

1. Бормотов, А.Н. Исследование математических моделей структурообразования композиционных материалов аналитическими методами / А.Н. Бормотов, И.А. Прошин, А.В. Васильков // Вестник Брянского государственного технического университета. – 2011. – № 2. – С. 62 – 70.
2. Бормотов, А.Н. Методология построения математических моделей наномодифицированных композитов по экспериментальным данным / А.Н. Бормотов, И.А. Прошин, А.В. Васильков // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2011. – Т. 7. – № 6. – С. 28 – 34.
3. Бормотов, А.Н. Теоретические основы компьютерного моделирования структурообразования дисперсных систем / А.Н. Бормотов, И.А. Прошин, А.В. Васильков // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 2011. – Т. 17. – №. 2. – С. 542 – 551.
4. Бормотов, А.Н. Компьютерное моделирование эволюции структурообразования лиофильных систем при наличии сольватных слоев / А.Н. Бормотов, И.А. Прошин, А.В. Васильков // Вестник Ижевского государственного технического университета. – 2011. – № 2. – С. 198 – 203.
5. Бормотов, А.Н. Компьютерное моделирование эволюции структурообразования лиофобных систем / А.Н. Бормотов, И.А. Прошин, А.В. Васильков // Вестник Ижев-

- ского государственного технического университета. – 2011. – № 3. – С. 137 – 142.
6. Бормотов, А.Н. Имитационное моделирование деструкции и метод прогнозирования стойкости композиционных материалов / А.Н. Бормотов, И.А. Прошин, Е.В. Королёв // Вестник Ижевского государственного технического университета. – 2010. – № 4 – С. 113 – 118.
 7. Бормотов, А.Н. Многокритериальный синтез композита как задача управления / А.Н. Бормотов // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 2010. – Т. 16. – № 4. – С. 924 – 937.
 8. Бормотов, А.Н. Моделирование реологических процессов в глетглицериновых композитах / А.Н. Бормотов, И.А. Прошин, А.Ю. Кирсанов, Е.М. Бородин // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 2010. – Т. 16. – № 3. – С. 682 – 693.
 9. Бормотов, А.Н. Многокритериальный синтез сверхтяжелого композита / А.Н. Бормотов, И.А. Прошин // Вестник Брянского государственного технического университета. – 2009. – № 4. – С. 29 – 36.
 10. Бормотов, А.Н. Моделирование механизма управления качеством материала / А.Н. Бормотов, И.А. Прошин // Вестник Ижевского государственного технического университета. – 2009. – № 4. – С. 152 – 156.
 11. Бормотов, А.Н. Исследование реологических свойств композиционных материалов методами системного анализа / А.Н. Бормотов, И.А. Прошин // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 2009. – Т. 15. – № 12. – С. 916 – 926.
 12. Бормотов, А.Н. Глетглицериновые строительные материалы для защиты от радиации / А.Н. Бормотов, Е.В. Королёв, А.С. Иноземцев, С.С. Иноземцев // Строительные материалы. – 2009. – № 12. – С. 69 – 71.
 13. Бормотов, А.Н. Развитие научных основ методов синтеза композиционных материалов для защиты от радиации с регулируемой структурой и свойствами / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, А.М. Данилов // Известия ВУЗов. Строительство. – 2006. – № 1. – С. 24 – 29.
 14. Бормотов, А.Н. Сверхтяжелый бетон для защиты от радиации / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, Ю.М. Баженов, Е.В. Королёв, А.И. Еремкин // Строительные материалы. – 2005. – № 8. – С. 6 – 9.
 15. Бормотов, А.Н. Методологические принципы выбора оптимальных наполнителей композиционных материалов / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, Е.В. Королёв, А.М. Данилов, В.А. Смирнов // Журнал Известия вузов. Строительство. – 2004. – № 10. – С. 15 – 20.
 16. Бормотов, А.Н. Синтез сверхтяжелого бетона для защиты от радиации / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, Е.В. Королёв // Известия ТулГУ. Строительные материалы, конструкции и сооружения. – 2003. – № 4. – Тула : Изд-во ТулГУ. – С. 167 – 184.
 17. Бормотов, А.Н. Принцип Парето в управлении качеством материалов / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, А.М. Данилов, И.А. Гарькина // Известия ВУЗов. Строительство. – 2002. – № 11. – С. 42 – 51.
 18. Бормотов, А.Н. Теоретические аспекты применения современных методов планирования эксперимента при разработке композиционных материалов со специальными свойствами / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, А.М. Данилов, И.А. Гарькина // Известия ВУЗов. Строительство. – 2002. – № 4. – С. 15 – 22.
 19. Бормотов, А.Н. Синтез оптимальных управлений в задачах материаловедения / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, А.М. Данилов, И.А. Гарькина, В.И. Соломатов // Известия ВУЗов. Строительство. – 2001. – № 11. С. 23 – 34.
 20. Бормотов, А.Н. Теоретические аспекты пластификации особо тяжелых полимерных

композиционных материалов для защиты от радиации / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, А.М. Данилов, И.А. Гарькина // Известия ВУЗов. Строительство. – 2001. – № 11. – С. 31 – 36.

21. Бормотов, А.Н. Теоретические аспекты синтеза полимерных композиционных материалов для защиты от радиации / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, А.М. Данилов, И.А. Гарькина, В.И. Соломатов // Известия ВУЗов. Строительство. – 2001. – № 6. – С. 21 – 26.
22. Бормотов, А.Н. Теоретические аспекты оптимального синтеза композиционных материалов / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, А.М. Данилов, И.А. Гарькина // Известия ВУЗов. Строительство. – 2000. – № 6. – С. 31 – 36.

Монографии:

23. Бормотов, А.Н. Математическое моделирование и многокритериальный синтез композиционных материалов / А.Н. Бормотов, И.А. Прошин, Е.В. Королёв. – Пенза : ПГТА, 2011. – 352 с.
24. Бормотов, А.Н. Математическое моделирование и многокритериальный синтез строительных материалов специального назначения. Избранные труды Российской школы по проблемам науки и технологий / А.Н. Бормотов. – М. : РАН, 2009. – 56 с.
25. Бормотов, А.Н. Полимерные композиционные материалы для защиты от радиации / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, Ю.М. Баженов, А.М. Данилов, Ю.А. Соколова – М. : Палеотип, 2005. – 270 с.
26. Бормотов, А.Н. Разработка и управление качеством эпоксидных композитов для защиты от радиации / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, А.М. Данилов. – Пенза : ПГУАС, 2004. – 160 с.
27. Бормотов, А.Н. Применение математических методов в строительном материаловедении / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, А.М. Данилов, И.А. Гарькина. – Пенза : ПГАСА, 1999. – 205 с.

Прочие публикации:

28. Бормотов, А.Н. Повышение эффективности аэрокосмических тренажеров для подготовки космонавтов к действиям в чрезвычайных ситуациях / Б.В. Кузнецов, М.В. Серебряков, В.Н. Прошкин, А.Н. Бормотов // Космос и глобальная безопасность человечества: Международный симпозиум. – Рига, 2010 г. – С. 482 – 484.
29. Бормотов, А.Н. Математическое моделирование и многокритериальный синтез наномодифицированных композиционных материалов специального назначения / А.Н. Бормотов // Фундаментальные исследования в Пензенской области: состояние и перспективы: Сборник докладов I региональной научно-практической конференции. – Пенза, 2010. – С. 15 – 21.
30. Бормотов, А.Н. Имитационное моделирование дисперсно-наполненных композиционных материалов / А.Н. Бормотов, И.А. Прошин // Механика и процессы управления. Итоги диссертационных исследований: Сборник трудов, серия «Избранные труды Уральского семинара». – Екатеринбург : УрО РАН, 2009. – С. 13 – 20.
31. Model of destruction and method for forecasting of composite materials resistance. / A.N. Bormotov etc. // Concrete Durability: Achievement and Enhancement: Proc. of the International Conference, University of Dundee, Scotland, UK. – London : HIS BRE Press, 2008. – P. 345 – 356.
32. Бормотов, А.Н. Оптимизация структуры глетглицеринового цемента / А.Н. Бормотов, Е.В. Королев, С.С. Иноземцев, С.А. Иноземцев // Актуальные вопросы современного строительства: Материалы Международной научно-технической конференции. – Пенза : ПГУАС, 2007. – С. 66 – 71.

33. Бормотов, А.Н. Оптимизация реологических свойств глетглицериновых мастик специального назначения / А.Н. Бормотов, Е.В. Королев, О.В. Преснякова // *Материалы XIII-го Международного семинара Азиатско-Тихоокеанской академии материалов.* – Новосибирск, 2006. – С. 62 – 68.
34. Бормотов, А.Н. Язык обработки изображений и его приложения / А.Н. Бормотов, Е.В. Королев, А.М. Данилов, В.А. Смирнов, А.П. Прошин // *Идентификация систем и задачи управления SICPRO`06: Труды V Международной конференции.* – М. : Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН, 2006. – С. 2195 – 2208.
35. The extra-heavy concrete for protection from radiation / A.N. Bormotov etc. // *Global Construction: Ultimate concrete opportunities: Proc. 6th International Congress, University of Dundee, Scotland, UK.* – London : Thomas Telford Publishing, 2005. – P. 69 – 76.
36. Бормотов, А.Н. Развитие методологических основ синтеза композиционных материалов / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, Ю.М. Баженов // *Вестник ВРО РААСН.* – 2005. – № 8. – С. 82 – 89.
37. Бормотов, А.Н. Развитие научных основ и методов синтеза композиционных материалов специального назначения / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин // *Композиты XXI века: Доклады международного симпозиума восточно-азиатских стран по полимерным композиционным материалам и передовым технологиям.* – Саратов : СГТУ, 2005. – С. 15 – 22.
38. Бормотов, А.Н. Общий алгоритм синтеза композиционных материалов / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, Е.В. Королёв // *Наука и технологии. Избранные труды «К 79-летию Г.П. Вяткина».* – М. : РАН, 2005. – 707 с.
39. Бормотов, А.Н. Системные методологии практического применения математического аппарата теории управления в строительном материаловедении / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, А.М. Данилов, И.А. Гарькина // *Актуальные проблемы современного строительства: Материалы Международной научно-технической конференции.* – Пенза : ПГУАС, 2005. – С. 115 – 119.
40. Бормотов, А.Н. Новые подходы к синтезу сверхтяжелых бетонов с регулируемыми параметрами структуры и свойств / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, О.В. Преснякова // *Совершенствование качества строительных материалов и конструкций: Международный сборник научных трудов.* – Новосибирск : НГАУ, 2005. – С. 79 – 82.
41. Бормотов, А.Н. Исследование реологических свойств композиционных материалов специального назначения методами системного анализа / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, Е.В. Королев // *Вестник отделения строительных наук РААСН.* – 2004. – № 8. – М. : РААСН. – С. 327 – 335.
42. Бормотов, А.Н. Моделирование процессов структурообразования дисперсных систем / А.Н. Бормотов, Е.В. Королев, А.М. Данилов, В.А. Смирнов, А.П. Прошин // *Идентификация систем и задачи управления SICPRO`05: Труды IV Международной конференции.* – М. : Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН, 2004. – С. 700 – 724.
43. Бормотов, А.Н. Сверхтяжелые глетглицериновые бетоны для защиты от радиации / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, И.Ю. Евстифеева // *Образование, наука производство и управление в XXI веке: Материалы международной научной конференции, 20 – 22 октября, 2004 г.* – Старый Оскол : ООО «ТНТ», 2004. – Т. IV. – 386 с.
44. Бормотов, А.Н. Синергетический подход для выбора оптимальной дисперсности наполнителя композиционных материалов / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, Е.В. Королев, В.А. Смирнов // *Наука и образование как фактор оптимизации среды жизнедеятельности: Материалы научно-практической конференции-семинара.* – Хаммамет, Тунис, 2004. – С. 196 – 199.

45. Бормотов, А.Н. Синергетический подход при выборе оптимальных дисперсных наполнителей композиционных материалов / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, Е.В. Королёв, В.А. Смирнов // Современное состояние и перспектива развития строительного материаловедения: Материалы 8-х академических чтений отделения строительных наук РААСН. – Самара : СамГАСУ, 2004. – С. 367 – 373.
46. Бормотов, А.Н. Синтез строительных материалов на основе методов теории оптимального управления / А.Н. Бормотов // Проблемы и перспективы архитектуры и строительства: Доклады международной научно-технической конференции, Лимасол, Кипр, 2 – 9 ноября, 2003. – Томск : ТГАСУ, 2003. – С. 86 – 87.
47. Synthesis of building materials on the basic of method theories of optimum control / A.N. Bormotov // Problem of urban constraction, engineering equipment, improvement and ecology: Proc. of the International Conference, Casablanca, Morocco, 2003. – P. 24 – 25.
48. Бормотов, А.Н. Методология системного подхода в задачах синтеза строительных материалов специального назначения / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, А.М. Данилов, И.А. Гарькина // Системный подход в науках о природе, человеке и технике: Материалы международной конференции. – Таганрог, 2003. – С. 33 – 42.
49. Бормотов, А.Н. Применение методов математической статистики при изучении свойств полимерных композиционных материалов для защиты от радиации / А.Н. Бормотов // Актуальные проблемы современного строительства: Труды XXXII Всероссийской научно-технической конференции. – Пенза : ПГАСА, 2003. – С. 13 – 25.
50. Бормотов, А.Н. Анализ деформативных свойств полимерных композиционных материалов с помощью ранговых корреляций / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин // Ресурсо- и энергосбережение как мотивация творчества в архитектурно-строительном процессе: Труды годовичного собрания РААСН, 2003. – Казань : КазГАСА, 2003. – С. 308 – 314.
51. A.N. Bormotov, A.P. Proshin. Application methods of mathematical statistics at analysis properties of composite materials for protection from radiation // The Journal “Scientific Israel – Technological Advantages“, Vol. 5. 2003. – pp. 202 – 209.
52. Бормотов, А.Н. Разработка и управление качеством строительных материалов с регулируемой структурой и свойствами для защиты от радиации / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, Е.В. Королёв, А.М. Данилов, И.А. Гарькина // Идентификация систем и задачи управления SICPRO'03: Труды II Международной конференции. – М. : Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН, 2003. – С. 2437 – 2460.
53. Methodological principles of the development and quality control of special-purpose building materials / A. Bormotov, A. Proshin, E. Korolev, A. Danilov, I. Garkina // The Journal “Scientific Israel – Technological Advantages“, issue 3-4, 2002. Israel. – pp. 178 – 185.
54. Бормотов, А.Н. Многокритериальный синтез строительных материалов / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, А.М. Данилов, И.А. Гарькина, В.И. Соломатов // Вестник ВРО РААСН. – 2001. – № 5. – С. 318 – 324.
55. Бормотов, А.Н. Метод синтеза полимерных композиционных материалов / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, А.М. Данилов, И.А. Гарькина // Первые научные чтения памяти Н.А. Воскресенского. – Казань : КазГАСА, 1999. – С. 55 – 62.
56. Бормотов, А.Н. Исследование реологических свойств пластифицированных эпоксидных композитов повышенной плотности / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин, В.И. Соломатов // Известия ВУЗов. Строительство. – 1999. – № 1. – С. 12 – 24.
57. Bormotov, A.N. Epoxy composites with increased density for radiation protection / A.N. Bormotov, O.V. Bublik, A.P. Proshin // City, ecology, construction. Program, report and information at the international scientific and practical conference, Egypt, Cairo, 1999.
58. Бормотов, А.Н. Оптимизация структуры эпоксидных композитов повышенной плотности / А.Н. Бормотов, А.П. Прошин // Вестник ВРО РААСН. – 1999. – № 3. – Новгород : РААСН. – С. 123 – 129.

Патенты:

59. Строительный раствор [Текст]: пат. 2087448 РФ : МПК⁶ C04B28/26, C04B111:20 / Бормотов А.Н. и др. ; заявитель и патентообладатель Пензенский инж. стоит. ин-т. – № 94006617/03 ; заявл. 22.02.1994 ; опубл. 20.08.1997, Бюл. № 17. – 2 с. : ил.
60. Строительный полимерраствор для защиты от радиации [Текст]: пат. 2142439 РФ : . МПК⁶ C04B26/14, G21F1/10 / Бормотов А.Н. и др. ; заявитель и патентообладатель Пензенская госуд. архит. стоит. академия. – № 97114757/03 ; заявл. 02.09.1997 ; опубл. 10.12.1999, Бюл. № 6. – 3 с. : ил.
61. 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. 30.01.2006 ; опубл. 20.03.2008, Бюл. № 28. – 4 с.
62. Быстротвердеющие радиационно-защитные строительные композиты [Текст]: пат. 2319675 РФ : МПК C04B28/00, G21F1/04 / Бормотов А.Н. и др. ; заявитель и патентообладатель Пензенский госуд. ун-тет. арх. и строит. – № 2006102635/03 ; заявл. 30.01.2006 ; опубл. 20.03.2008, Бюл. № 28. – 4 с.

Отчеты по НИР:

63. Математическое моделирование и многокритериальный синтез строительных материалов специального назначения: заключительные отчёты по НИР №2.1.2/5688, №2.1.2/11488 «Математическое моделирование и многокритериальный синтез строительных материалов специального назначения» / АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы (2011 г.)»; рук. Бормотов А.Н. – Пенза : ПГТА, 2010 – 2011. – 278 с. – № ГР 01200951000.
64. Математическое моделирование и многокритериальный синтез наномодифицированных композиционных материалов: отчет по НИР (промежут.) ГК № 14.740.11.1066 от 24.05.2011 г. «Математическое моделирование и многокритериальный синтез наномодифицированных композиционных материалов» / ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 гг.; рук. Бормотов А.Н. – Пенза : ПГТА, 2011. – 138 с. – № ГР 01202173144.

Бормотов Алексей Николаевич
**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И
МНОГОКРИТЕРИАЛЬНЫЙ СИНТЕЗ
КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ
СПЕЦИАЛЬНОГО НАЗНАЧЕНИЯ**

05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

Автореферат

Редактор Л.Ю. Горюнова

Подписано к печати 22.09.2011 г. Формат 60×84 1/16

Бумага типогр. № 1. Печать трафаретная. Шрифт Times New Roman Сур.

Усл. печ. 2,4. Уч.-изд. 2,5. Тираж 150 экз. Заказ № 2070.

Пензенская государственная технологическая академия
440605, Россия, г. Пенза, пр. Байдукова / ул. Гагарина, 1а/11