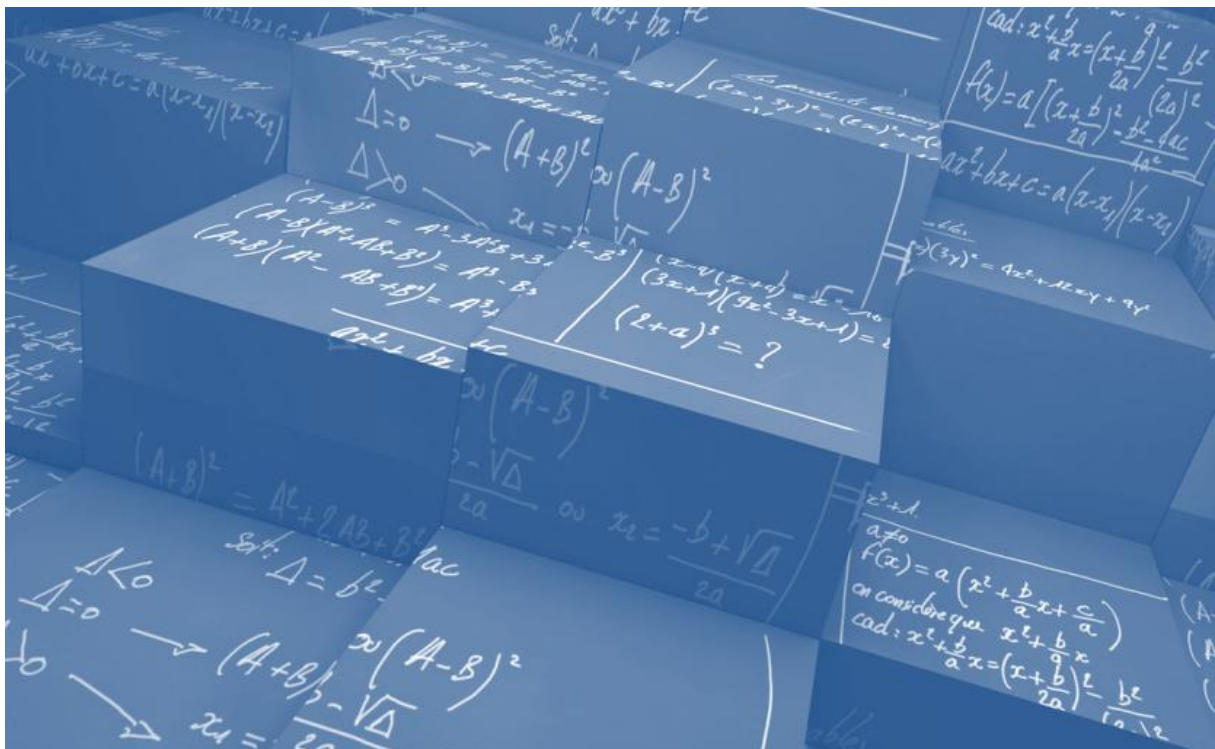


МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Тверской государственный технический университет»
(ТвГТУ)

В.В. Белов, И.В. Образцов, В.К. Иванов, Е.Н. Коноплев

КОМПЬЮТЕРНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ РЕШЕНИЯ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИХ И ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ЗАДАЧ



Учебное пособие

Тверь 2015

УДК
ББК

Белов, В.В. Компьютерная реализация решения научно-технических и образовательных задач: учебное пособие / В.В. Белов, И.В. Образцов, В.К. Иванов, Е.Н. Коноплев. Тверь: ТвГТУ, 2015. 102 с.

Учебное пособие является уникальной научно-методической разработкой сотрудников кафедр производства строительных изделий и конструкций и гидравлики, теплотехники и гидропривода, а также Центра научно-образовательных электронных ресурсов Тверского государственного технического университета. Пособие реализовано в виде совокупности электронных образовательных ресурсов, созданных с использованием современных технологий компьютерной трехмерной графики, и разделено на три тематических раздела, которые оснащены лекционным и методическим материалом, дополнительными инструкциями по работе с программами и прочими необходимыми для работы документами (рекомендуемыми формами лабораторных журналов и пр.).

В состав виртуального учебного комплекса входят мультимедийные практикумы по компьютерной реконструкции физических явлений и сред и компьютерному анализу и обработке экспериментальных данных, а также виртуальные тренажеры (лаборатории) для компьютерной визуализации и имитационного моделирования технического оборудования и устройств, оснащенные интерактивными структурно-имитационными моделями на основе систем частиц, подробным лекционным материалом, расчетно-аналитическими средствами для решения оптимизационных задач и дополнительными справочными материалами.

Предназначено для бакалавров, обучающихся по направлению «Строительство» при изучении дисциплин: «Методы и средства испытаний строительных материалов» и «Метрология, стандартизация, сертификация и контроль качества».

Рецензенты: заведующий кафедрой «Строительство, строительные материалы и конструкции» ТулГУ, советник РААСН, доктор технических наук, профессор Трещев А.А.; профессор кафедры технологии вяжущих веществ и бетонов МГСУ, доктор технических наук, профессор Бурьянов А.Ф.

ISBN

© Тверской государственный
технический университет, 2015
© Белов В.В., Образцов И.В.,
Иванов В.К., Коноплев Е.Н., 2015

ВВЕДЕНИЕ

Разработка, внедрение и совершенствование информационных технологий (программных комплексов, прикладных пакетов компьютерного моделирования, виртуальных лабораторий и учебных тренажеров) в нашем XXI веке – веке глобализации и компьютеризации, перестали быть технологиями завтрашнего дня, и, несомненно, внесут свой достойный вклад в формирование информационного общества в нашей стране. Данное учебное пособие освещает вопросы, связанные с некоторыми прикладными направлениями компьютерного моделирования в технических науках, функциональным устройством научно-образовательного программного обеспечения, принципами их разработки, а также эффективным применением виртуальных лабораторий и научно-прикладных приложений в техническом образовании. В виду многообразия решаемых прикладных задач и научных направлений современных информационных технологий, авторами данного учебного пособия выбраны три актуальных направления, в которых рассматриваются частные аспекты применения компьютерного и математического моделирования.

Первая глава учебного пособия посвящена вопросам компьютерной реконструкции физических явлений и сред. Рассматриваемые в данной главе задачи и некоторые методики их решения могут быть полезными в таких областях научного знания, как механика зернистых сред, материаловедение, физическая химия.

Вторая глава посвящена методам обработки экспериментальных данных, вопросам проектирования составов гранулированных материалов, а также математическому планированию экспериментов. В данных главах приводятся примеры реализации эффективных (с позиции быстродействия и степени достоверности) алгоритмических решений, и кратко описывается математическая основа алгоритмов.

Третья глава учебного пособия содержит сведения о современных методах обучения с применением виртуальных учебных тренажеров. Описаны характерные стороны процесса обучения с применением мультимедийного образовательного программного обеспечения. Рассмотрены основные подходы и этапы разработки обучающих средств. Представлены примеры виртуальных лабораторных практикумов по различным техническим дисциплинам, ориентированные на представителей технических учебных заведений высшего и среднего профессионального образования (ВУЗов, техникумов, колледжей), центров переподготовки и повышения квалификации персонала, центров дистанционного обучения и коллективного пользования информационными ресурсами.

Представленные в данном учебном пособии примеры компьютерных программ и имитационных моделей являются интеллектуальной собственностью Тверского государственного технического университета.

Глава 1. Компьютерная реконструкция физических явлений и сред

1.1. Понятия модели, физического явления и среды

Модель – это материальный или идеальный объект, замещающий исследуемую систему и адекватным образом отображающий ее существенные стороны. Модель объекта отражает его наиболее важные качества, пренебрегая второстепенными [21].

Компьютерная модель (англ. computer model), или численная модель (англ. computational model) – компьютерная программа, работающая на отдельном компьютере, суперкомпьютере или множестве взаимодействующих компьютеров (вычислительных узлов), реализующая представление объекта, системы или понятия в форме, отличной от реальной, но приближенной к алгоритмическому описанию, включающей и набор данных, характеризующих свойства системы и динамику их изменения со временем.

Говоря о компьютерной реконструкции, мы будем подразумевать разработку компьютерной модели определенного физического явления или среды.

Физическое явление – процесс изменения положения или состояния физической системы. Физическое явление характеризуется изменением определенных физических величин, связанных между собой. Например, к физическим явлениям относятся все известные виды взаимодействия материальных частиц.

На рисунке 1.1 представлена компьютерная имитационная модель течения воды в открытом русле, ограниченном стенками длинного стеклянного лотка.

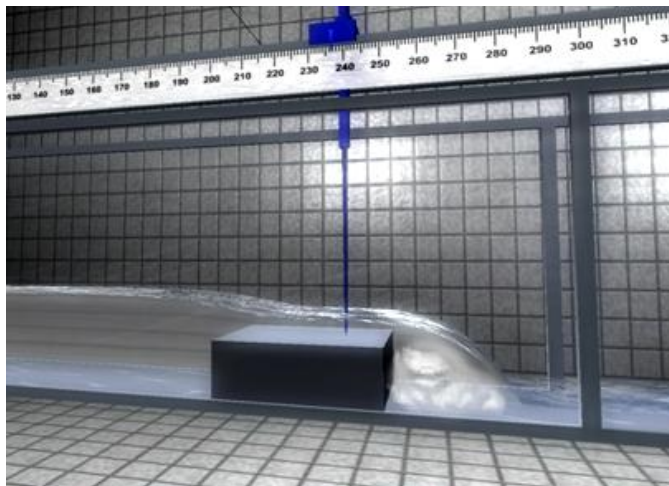


Рисунок 1.1 – Компьютерная имитационная модель течения воды в открытом русле

Расчет параметров открытого потока (формы свободной поверхности, расхода и напора воды и др.) в данной модели выполняется в соответствии с законами гидродинамики открытых потоков. Расчетные зависимости составляют основу алгоритма, согласно которому производится построение модели потока воды в виртуальном трехмерном пространстве в

реальном времени. Представленная компьютерная модель позволяет произвести геометрические замеры отметок поверхности воды в различных точках по длине потока, а также, определить расход воды и другие вспомогательные параметры. На основании полученных данных можно исследовать реальный физический процесс.

В приведенном примере рассматривается компьютерная имитационная модель с графической визуализацией физического явления. Однако компьютерные модели могут и не содержать визуальной или графической информации об объекте исследования. Тот же самый физический процесс или явление можно представить в виде набора дискретных данных, причем используя тот же алгоритм, на котором строилась имитационная визуальная модель.

Таким образом, основной задачей построения компьютерных моделей является функциональное исследование физического явления или процесса с получением исчерпывающих аналитических данных, а уже второстепенных задач может быть много, в том числе и графическая интерпретация модели с возможностью интерактивного взаимодействия пользователя с компьютерной моделью.

Далее мы будем говорить о компьютерном моделировании физических сред и характерных для них явлений. Под физической средой подразумеваются определенные механические системы.

Механическая система (или система материальных точек) – совокупность материальных точек (или тел, которые по условию задачи оказались возможным рассматривать как материальные точки).

В технических науках среды разделяют на сплошные (непрерывные) и дискретные среды. Данное разделение является в некоторой степени приближением или аппроксимацией, поскольку физическая материя по своей сути дискретна, а понятие непрерывности (континуума) относится к такой величине, как время. Другими словами, такая «сплошная» среда как, например, жидкость или газ состоит из дискретных элементов – молекул, атомов, ионов и т.д., однако математически описать изменение во времени этих структурных элементов крайне сложно, поэтому к таким системам вполне обосновано применяются методы механики сплошных сред.

1.2. Компьютерная реконструкция сплошных сред

1.2.1. Понятие сплошной среды

Сплошная среда – механическая система, обладающая бесконечным числом внутренних степеней свободы. Движение сплошной среды в пространстве, в отличие от других механических систем, описывается не координатами и скоростями отдельных частиц, а скалярным полем плотности и векторным полем скоростей. Математическое описание таких механических систем представляется законами механики сплошной среды.

Механика сплошной среды – раздел механики, посвященный изучению движения и равновесия газов, жидкостей и деформируемых твердых тел. К механике сплошной среды относятся: гидроаэромеханика, газовая динамика, теория упругости, теория пластичности и др. Основное допущение механики сплошной среды состоит в том, что вещество можно рассматривать как непрерывную, сплошную среду, пренебрегая его молекулярным (атомным) строением, и одновременно считать непрерывным распределение в среде всех её характеристик (плотности, напряжений, скоростей частиц и др.). К механике сплошной среды можно применить хорошо разработанный для непрерывных функций аппарат высшей математики.

Исходными в механике сплошной среды при изучении любой среды являются: 1) уравнения движения или равновесия среды, получаемые как следствие основных законов механики, 2) уравнение неразрывности (сплошности) среды, являющееся следствием закона сохранения массы, 3) уравнение энергии. Особенности каждой конкретной среды учитываются т. н. уравнением состояния или реологическим уравнением, устанавливающим для данной среды вид зависимости между напряжениями или скоростями изменения напряжений и деформациями или скоростями деформаций частиц. Характеристики среды могут также зависеть от температуры и др. физико-химических параметров; вид таких зависимостей должен устанавливаться дополнительно. Кроме того, при решении каждой конкретной задачи должны

Следует отметить, что законы механики сплошной среды в некоторых случаях применимы и к дискретным системам. К примеру, если размер зерен песка 0,5 мм, то даже в 1 см^3 содержится порядка 200 частиц и, следовательно, даже в столь небольшом объеме механические свойства песка проявляются как усредненный результат взаимодействия ансамбля зерен; при этом, очевидно, индивидуальные особенности одной из этих частиц не играют заметной роли. Механическое поведение рассматриваемого объема обусловлено всем ансамблем зерен, и именно свойства ансамбля, а не одного зерна, определяют свойства всей системы (грунта). В практических задачах рассматриваются различные грунтовые массивы. Размеры и конфигурация массивов могут быть разными; разными могут быть и нагрузки, тип грунта и т.п. Эффективное решение таких задач возможно лишь при использовании некоторого общего принципа, который действителен для всех разнообразных ситуаций. В механике сплошной среды этот принцип состоит в том, что предполагается возможным установить закон поведения материала в бесконечно малом его объеме, единый для всех конкретных случаев его работы. Тогда описание явления в большом объеме, т.е. в массиве конечных размеров, можно найти суммированием (интегрированием).

Исследование механического поведения массивов с помощью модели сплошной среды предусматривает, следовательно, как необходимую

процедуру операцию интегрирования по объему рассматриваемого массива. С этой точки зрения, малый объем материала, представительный в смысле обладания всеми учитываемыми в модели механическими свойствами материала, геометрически рассматривается как бесконечно малый объект.

В тех ситуациях, когда не обеспечивается сплошность среды, такие системы изучают с помощью моделей дискретных сред. Несвязные грунты и другие сыпучие материалы рассматриваются в таких моделях как наборы контактирующих друг с другом зерен – абсолютно твердых или упругих тел различной формы. Бесконечно малый объем материала можно рассматривать и в абсолютно твердом теле.

1.2.2. Методы компьютерного моделирования сплошных сред

Если структура вещества не представляет интереса или ничтожно мала по сравнению с его объемом, вещество моделируется в виде «идеальной» сплошной среды (внутренняя структура среды не принимается во внимание). Такой подход удобен для исследования потоков вещества. При их моделировании широко применяются CFD- программы [41].

CFD-метод (англ. Computational fluid dynamics, CFD) – подраздел механики сплошных сред, включающий совокупность физических, математических и численных методов, предназначенных для вычисления характеристик потоковых процессов.

Численные исследования с применением CFD-метода, как правило, подразумевают следующие действия: постановка задачи исследования на основе экспертного анализа; выбор метода расчета; разработка физической модели; выбор расчетного кода; выбор и построение расчетной области; разработка компьютерной модели; валидация результатов численного моделирования; верификация результатов численного моделирования; разработка отчетной документации [13].

Разработка компьютерной модели при использовании CFD-метода заключается в составлении и решении уравнений для распределения скоростей, давления, плотности и температуры среды (рисунок 1.2). В общем случае исходная система линейных дифференциальных уравнений в частных производных состоит из: уравнений движения (уравнений Навье–Стокса или осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье–Стокса для случаев, описывающих турбулентные течения); уравнения неразрывности; уравнения сохранения энергии; уравнения состояния, начальных и граничных условий. В подавляющем большинстве случаев такая система уравнений не имеет аналитического решения, поэтому необходимо применение численных методов для получения приближенного численного решения [13, 41].



Рисунок 1.2 – Схема применения метода вычислительной гидрогазодинамики

Как правило, в результате CFD-моделирования объект исследования визуализируется цветовым полем градиента. Это может быть 2D визуализация или 3D модель с характерными геометрическими параметрами. На рисунке 1.3 изображена компьютерная CFD-модель поля градиента скорости воздушных потоков [26].

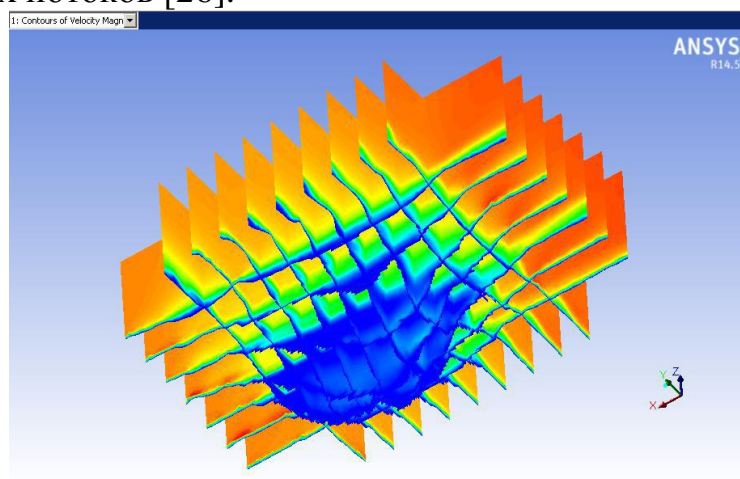


Рисунок 1.3 – Компьютерная CFD-модель поля градиента скорости воздушных потоков

Существует множество разнообразных программных пакетов CFD-моделирования. Можно отметить такие широко применяемые программные комплексы, как ANSYS Fluent, Autodesk Simulation CFD, Pushbutton

CFD и другие продукты. К примеру, посредством моделирования с использованием CFD-пакетов на сегодняшний день гоночными командами производится анализ и оптимизация весьма сложных потоков воздуха, образующихся на переднем и заднем спойлере современных гоночных автомобилей Формулы-1. Безупречная и эффективная работа будь то гоночного автомобиля Формулы-1, воздухоочистителя или индукционного улавливающего кожуха зависит от потоков воздуха, циркулирующих внутри устройства и в окружающем его пространстве. Моделирование с использованием CFD благодаря заложенным в них физическим и математическим моделям позволяет воспроизвести эти невидимые, но весьма важные и сложные процессы. Самое большое преимущество моделирования с использованием CFD по сравнению с другими экспериментальными методами и измерениями заключается в том, что определяются не только значения в выборочных точках, но и одновременно регистрируется совокупность всех физических величин, и тем самым появляется возможность удостовериться в правильности функционирования модели.

Более детально мы остановимся на компьютерной реконструкции дискретных сред, в частности на структурно-имитационном моделировании упаковок частиц гранулированных материалов, представляющих особый интерес при решении многих рецептурно-технологических задач.

1.3. Компьютерная реконструкция дискретных сред

1.3.1. Понятие дискретной среды

Дискретная среда – механическая система, представляющая собой совокупность отдельных частиц, каждая из которых, взятая в отдельности, обладает всеми свойствами твердого тела.

Как правило, понятие дискретной (зернистой) среды применяется к физическим телам, занимающим промежуточное положение между твёрдыми телами и жидкостями. Такие тела называют *сыпучими телами*. Силы сцепления между отдельными частицами системы отсутствуют вообще, либо очень малы. Вследствие этого сыпучие тела не воспринимают растягивающих усилий, что резко отличает их от твердых сплошных тел [18].

В настоящее время изучение зернистых сред осуществляется по двум направлениям, а именно, с позиции *механики зернистых сред* и с позиции *теории упаковок* [5].

Механика зернистых сред содержит изложение способов определения давления и сопротивления зернистой среды при различных воздействиях на нее со стороны сооружений и других внешних нагрузок. При решении задач предельного равновесия по существу рассматривается стадия разрушения сыпучего тела, поэтому в механике твёрдых деформируемых тел этой категории задач соответствуют задачи, исследуемые в теории предельного равновесия и в теории пластичности. При этом решение оказывается в большинстве случаев возможным без рассмотрения деформа-

ций и перемещений сыпучего тела, а в качестве основных механических характеристик среды в расчётные формулы вводят значения объёмной массы (кН/м^3), угла внутреннего трения и удельного сцепления частиц (кПа). Методы определения этих характеристик рассматриваются в курсе Механики грунтов.

Как говорилось ранее, для сыпучих тел применяют как «*модель сплошной среды*», так и «*модель дискретной среды*». В рамках модели сплошной среды не рассматривается поведение отдельной частицы, а принимается, что составляющие сыпучего тела заполняют рассматриваемую часть пространства непрерывно. Непрерывность строения такого идеализированного тела сохраняется в процессе его деформирования. Концепция сплошности вещества является основным постулатом *механики сплошной среды* и обеспечивает единый подход к изучению поведения твёрдых тел, сыпучих тел, жидкостей и газов.

Применение модели сплошной среды к сыпучим телам позволило широко использовать имеющиеся решения теории упругости, теории пластичности и других разделов механики сплошных сред [18]. Однако, применяя к сыпучим телам концепцию сплошности, необходимо выполнять требование, чтобы принимаемые в качестве малых элементы среды имели размеры много меньше наименьших характерных размеров исследуемого пространства:

$$\sqrt[3]{\Delta V} \leq a, \quad (1.1)$$

где ΔV – элементарный, бесконечно малый объём сыпучего тела, a – характерный линейный размер исследуемого пространства (высота откоса, ширина подошвы фундамента, ребро бункера и т.д.).

В то же время для исключения влияния особенностей отдельной конкретной частицы сыпучего тела необходимо обеспечить условие:

$$\sqrt[3]{\Delta V} \gg d_{\max}, \quad (1.2)$$

где d_{\max} – диаметр максимальной по крупности частицы сыпучего тела.

Модель сплошной среды применяется к большинству грунтов, являющихся основанием или внешней средой для реальных технических сооружений, поскольку указанные условия (1.1 и 1.2) выполняются, что позволяет вполне обоснованно описать напряженное состояние таких систем.

Отличительной чертой модели дискретной среды является рассмотрение отдельных элементов ее структуры как механически взаимодействующих тел, иными словами сыпучее тело принимается состоящим из отдельных частиц с учётом связей между ними. Элементами структуры модели дискретной среды являются зерна сыпучего материала. Примером дискретной модели является система взаимодействующих шаров или цилиндров (Г.И. Покровский, И.И. Кандауров [24]) – рисунок 1.4. В ряде случаев эта модель применяется к крупнообломочным грунтам, например, при рассмотрении напряженного состояния каменно-набросных плотин.

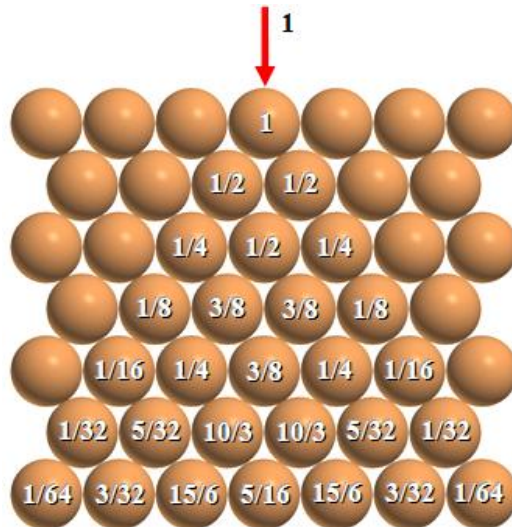


Рисунок 1.4 – Модель дискретной среды. Гипотеза долевого распределения нагрузки между отдельными элементами системы

В отличие от механики зернистых сред изучение сыпучих систем с позиции теории упаковок базируется на закономерностях расположения твердых тел в пространстве с учетом их геометрической формы и размеров. Теория упаковок является широко распространенной математической проблемой, решение которой представляет большой научный интерес в различных технических областях знаний.

1.3.2. Основные сведения о дисперсных системах

Прежде чем перейти непосредственно к классификации и описанию типов упаковок сыпучих тел, обратимся к важнейшим понятиям коллоидной химии, относящимся к системам частиц, а именно, дисперсным системам.

Дисперсная система – гетерогенная, довольно часто многокомпонентная система, состоящая из дисперсной фазы и дисперсионной среды. *Дисперсную фазу* образуют дисперсные частицы. *Дисперсионная среда* представляет сплошную (непрерывную) фазу, в которой распределены частицы дисперсной фазы. Для дисперсных систем характерны два общих признака: гетерогенность и дисперсность.

Гетерогенность – свойство неоднородности, обусловленной наличием поверхностей раздела фаз.

Поперечный размер частицы (a) – диаметр (d) для сферических частиц, длина ребра (l) для кубических частиц.

Дисперсность (D) – величина, обратная поперечному размеру частицы:

$$D = 1/a, \quad [\text{м}^{-1}] \quad (1.3)$$

Дисперсность характеризуется *удельной поверхностью* $S_{y\partial}$:

$$S_{y\partial} = S_0/V_{\partial.ф.}, \quad [\text{м}^{-1}] \quad (1.4)$$

где S_0 – общая поверхность частиц дисперсной фазы, $V_{\partial.ф.}$ – объем дисперсной фазы.

Для систем с кубическими частицами с длиной ребра l :

$$S_{y\partial} = S_0/V_{\partial.ф.} = 6l^2/l^3 = 6/l \quad (1.5)$$

Для систем со сферическими частицами с радиусом r (диаметром d):

$$S_{y\partial} = S_0/V_{\partial.ф.} = 4\pi r^2/((4/3)\pi r^3) = 3/r = 6/d \quad (1.6)$$

Если удельную поверхность отнести к массе дисперсной фазы ($m_{\partial.ф.}$), то учитывается плотность вещества. Для сферических частиц с учетом плотности частиц:

$$S_{y\partial} = S_0/m_{\partial.ф.} = S_0/V_{\partial.ф.} \cdot \rho = 6/d\rho, \quad [\text{м}^2/\text{кг}] \quad (1.7)$$

В общем случае:

$$S_{y\partial} = k(1/a) = kD, \quad (1.8)$$

где k – коэффициент, зависящий от формы частицы.

Таким образом, удельная поверхность прямо пропорциональна дисперсности, и обратно пропорциональна поперечному размеру частицы.

Объемная концентрация дисперсной фазы (доли единицы или %) в системе рассчитывается по формуле:

$$c_v = (V_{\partial.ф.}/V_{\partial.с.}) \cdot 100 \%, \quad (1.9)$$

где $V_{\partial.с.}$ – общий объем дисперсной системы.

Массовая концентрация дисперсной фазы в системе рассчитывается по формуле:

$$c_m = m_{\partial.ф.}/V_{\partial.с.}, \quad [\text{кг}/\text{м}^3] \quad (1.10)$$

Численная концентрация частиц дисперсной фазы:

$$v = N_{\text{частиц}}/V_{\partial.с.}, \quad [\text{м}^{-3}, \text{л}^{-1}] \quad (1.11)$$

где $N_{\text{частиц}}$ – количество частиц дисперсной фазы.

Число сферических частиц в 1 м^3 дисперсной системы равно отношению объема (1 м^3) системы к объему одной сферической частицы:

$$N_{\text{частиц}} = V_{\partial.с.}/V_{\text{сферы}} = 3/(4\pi r^3). \quad (1.12)$$

Число сферических частиц в 1 кг дисперсной системы равно отношению массы (1 кг) к массе одной частицы. Масса одной сферической частицы золя (высокодисперсной коллоидной системы) равна произведению объема сферы на плотность вещества (ρ , $\text{кг}/\text{м}^3$):

$$m_{\text{ч}} = V_{\text{сферы}} \cdot \rho = (4/3)\pi r^3 \cdot \rho. \quad (1.13)$$

Тогда, число частиц в 1 кг золя для сферических частиц:

$$N_{\text{частиц}} = m_{\partial.с.}/m_{\text{ч}} = 1/((4/3)\pi r^3 \rho). \quad (1.14)$$

Рассмотрим основные классификации дисперсных систем [37].

В таблице 1.1 представлена классификация дисперсных систем по размеру частиц дисперсной фазы, а в таблице 1.2 представлена классификация дисперсных систем по агрегатному состоянию дисперсной фазы и дисперсионной среды.

Таблица 1.1 – Классификация дисперсных систем по размеру частиц дисперсной фазы

Размер частиц, м	Название дисперсных систем	Основные признаки дисперсных систем
$>10^{-7}$	Микрогетерогенные (грубодисперсные): эмульсии, суспензии, аэрозоли, пены	– частицы не проходят через фильтры; – частицы видны в оптический микроскоп; – неустойчивы кинетически и термодинамически; – мутные.
$10^{-7}..10^{-9}$	Ультрамикрогетерогенные: коллоидные растворы (золи)	– частицы проходят через бумажный фильтр и не проходят через ультрафильтры; – частицы видны в электронный микроскоп; – относительно устойчивы кинетически и неустойчивы термодинамически; – прозрачные, рассеивают свет.
$<10^{-9}$	Молекулярно-ионно-дисперсные: истинные растворы низкомолекулярных соединений	– частицы проходят через бумажный фильтр и ультрафильтры; – частицы не видны в современные микроскопы; – устойчивы кинетически и термодинамически; – прозрачные.

Таблица 1.2 – Классификация дисперсных систем по агрегатному состоянию дисперсной фазы и дисперсионной среды

Дисперсионная среда	Дисперсная фаза	Условное обозначение	Примеры дисперсных систем
Газ (аэрозоли)	Газ	Г / Г	-
	Жидкость	Ж / Г	Туман, облака
	Твердое тело	Т / Г	Дым, пыль, порошки
Жидкость (лиозоли)	Газ	Г / Ж	Пена
	Жидкость	Ж ₁ / Ж ₂	Эмульсии
	Твердое тело	Т / Ж	Взвеси, суспензии
Твердое тело (солидозоли)	Газ	Г / Т	Пемза, хлеб
	Жидкость	Ж / Т	Почва, грунт
	Твердое тело	Т ₁ / Т ₂	Минералы, сплавы

В таблице 1.3 представлена классификация дисперсных систем по наличию взаимодействия между частицами дисперсной фазы.

Таблица 1.3 – Классификация дисперсных систем по наличию взаимодействия между частицами дисперсной фазы

Свободнодисперсные системы: лиозоли, суспензии, эмульсии, аэрозоли	Связнодисперсные системы: студни, пористые капиллярные системы
Частицы дисперсной фазы не связаны между собой и могут свободно перемещаться в объеме дисперсионной среды.	Частицы дисперсной фазы имеют между собой устойчивые связи, образуя сплошную структуру (сетку, каркас), внутри которой заключена дисперсионная среда.

Рассматривая типы упаковок дискретных сред, мы будем оперировать геометрическими характеристиками частиц, не учитывая каких-либо форм химического взаимодействия частиц. Таким образом, далее рассматриваются модельные двухфазные свободнодисперсные системы с твердой дисперсной фазой и газообразной дисперсионной средой, иными словами твердые частицы системы, распределенные в воздушном пространстве, не взаимодействуют между собой. Применение подобных моделей упаковок актуально в технологии композиционных материалов, где аэрозоли с твердой дисперсной фазой являются материалом для производства композиционных сырьевых смесей. К таким дисперсным системам относятся наполнители, наполнители, вяжущие вещества и другие материалы в свободнодисперсном (сухом) состоянии до начала проявления химического взаимодействия (например, процессов гидратации цемента в бетонной смеси). В свою очередь исследование закономерностей формирования упаковок таких дисперсных систем раскрывает возможность прогнозирования свойств композиционного материала на основании морфологических (форма частиц) и размерных (гранулометрия или статистическое распределение частиц по размерам) параметров частиц исходных компонентов сырьевой смеси.

1.3.3. Методы определения размеров частиц

Основной целью компьютерного моделирования упаковок дискретных сред является получение статистически адекватных закономерностей, численно описывающих процесс структурообразования реальных сыпучих материалов. Следовательно, для построения компьютерной модели дискретной среды необходимо знать морфологические и размерные параметры частиц, из которых состоит дискретная среда.

В таблице 1.4 перечислены основные методы определения размеров частиц в зависимости от диапазона измеряемых частиц.

Таблица 1.4 – Экспериментальные методы определения размеров частиц в зависимости от диапазона измеряемых частиц

Название метода дисперсионного анализа	Диапазон измеряемых частиц
Ситовой анализ	> 50 мкм
Мокрый ситовой анализ	> 5 мкм
Седиментационный анализ в гравитационном поле	1–100 мкм
Седиментационный анализ в центробежном поле	0,1–10 мкм; 5–100 нм
Оптическая микроскопия	1–100 мкм
Электронная просвечивающая микроскопия	5 нм – 5 мкм
Электронная сканирующая микроскопия	5 нм – 5 мкм
Методы светорассеяния	5–100 нм
Кондуктометрия	0,2–800 мкм

Для определения распределения частиц по размерам необходимо использовать методы, позволяющие собрать данные о размерах большого количества частиц (обычно не менее 200 частиц) либо массе фракций, а затем обработать эти данные согласно законам статистики. Такими методами являются: оптическая и электронная микроскопия, седиментация в гравитационном и центробежном поле, ситовой анализ, и некоторые другие.

Результаты дисперсионных анализов могут быть изображены графически в виде интегральных и дифференциальных кривых распределения частиц по размерам. На гранулометрическом графике по оси абсцисс откладывается линейный размер (d) измеряемых частиц. В случае интегрального графика распределения (рисунок 1.5) размеров частиц по оси ординат откладываются объемные доли (Q) частиц, размер которых меньше текущего. Таким образом, интегральная кривая распределения представляет собой некую функцию $Q=f(d)$.

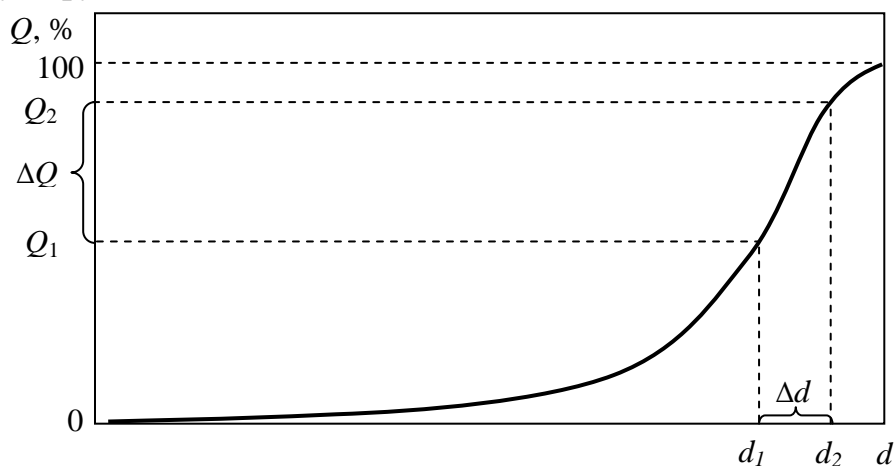


Рисунок 1.5 – Интегральная кривая распределения частиц по размерам

К примеру, если нас интересует объемная доля частиц порошка, размер которых меньше d_1 , то для этого необходимо найти на нижней шкале размер d_1 , провести вертикальную прямую из этой точки до пересечения с интегральной кривой распределения. Ордината полученной точки пересечения и покажет ту объемную долю, которую занимают частицы порошка, размер которых меньше d_1 , в данном случае это Q_1 . Интервалу размеров частиц от d_1 до d_2 соответствует интервал объемных долей от Q_1 до Q_2 .

Если разбить интегральную кривую на интервалы по оси абсцисс (рисунок 1.6), отложив соответствующие ординаты точек пересечения вертикальных линий с интегральной кривой, то для каждого интервала Δd_i мы получим ряд интервалов ΔQ_i , причем:

$$\sum_{i=1}^N \Delta Q_i = 100\%, \quad (1.15)$$

где N – количество выделенных интервалов (фракций) размеров частиц.

Интервалы объемных долей можно представить в виде столбиков с высотой $F_i = \Delta Q_i$, в таком случае мы получим дифференциальную гистограмму распределения частиц по размерам (рисунок 1.7).

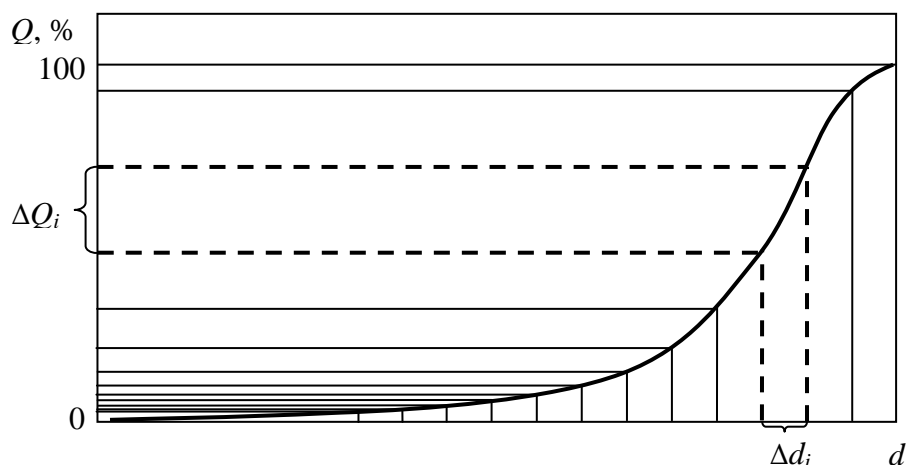


Рисунок 1.6 – Разбивка интегральной кривой распределения размеров частиц на интервалы

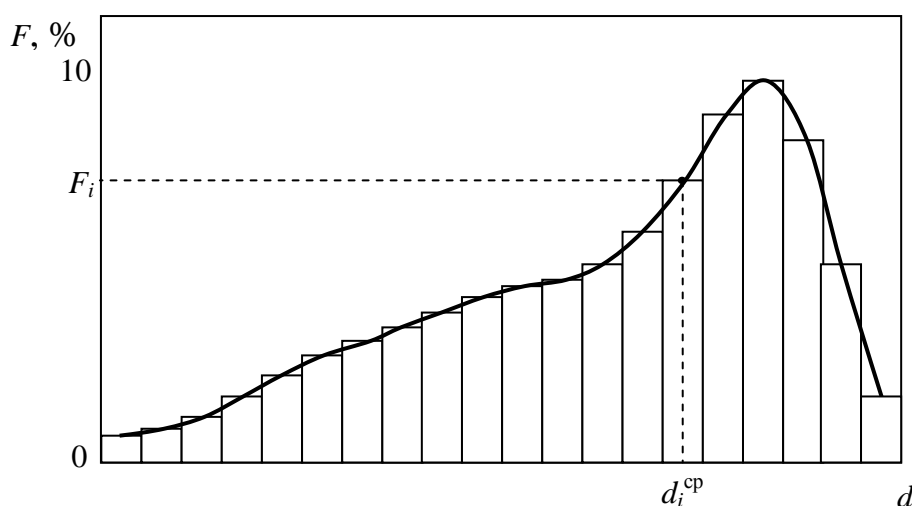


Рисунок 1.7 – Дифференциальная гистограмма распределения частиц по размерам

Соединив середины верхних оснований столбиков дифференциальной гистограммы распределения, мы получим плавную дифференциальную кривую. Она означает, что частицы со средними размерами, заключенными между правым и левым краем одного столбика (d_i^{cp}), занимают F_i , % по объему в измеряемом материале.

Часто при построении дифференциальной кривой распределения, на оси ординат откладывают не интервалы объемных долей F_i , а отношения $\Delta Q_i / \Delta d_i$. В полученной гистограмме площадь каждого прямоугольника представляет собой содержание фракции материала в пределах выбранного интервала размеров Δd_i . Соединив плавной кривой середины верхних оснований прямоугольников, также получают дифференциальную кривую распределения, по которой можно определить $d_{н.в.}$ – наиболее вероятный диаметр частиц в данной дисперсной системе (рисунок 1.8).

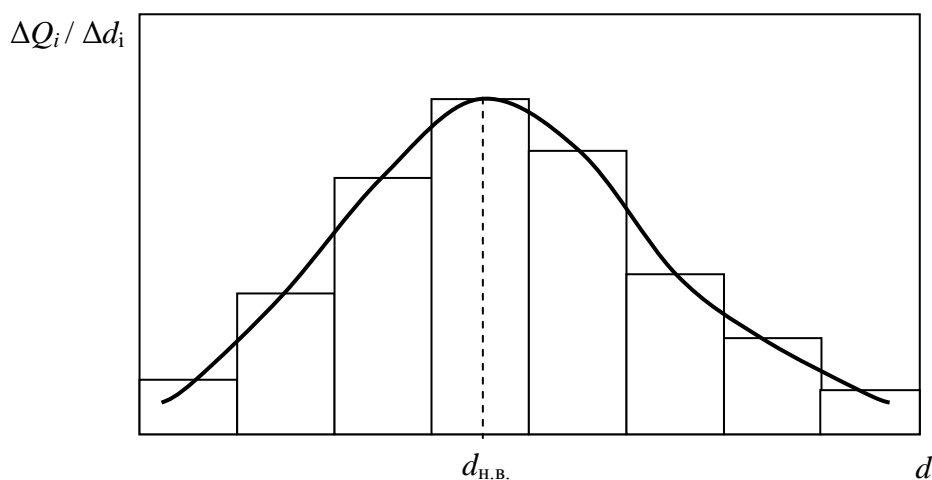


Рисунок 1.8 – Дифференциальная кривая распределения частиц по размерам и наиболее вероятный диаметр частиц

Основными статистическими характеристиками дифференциальных кривых распределения частиц по размерам являются: среднее значение, медиана и мода распределения (рисунок 1.9).

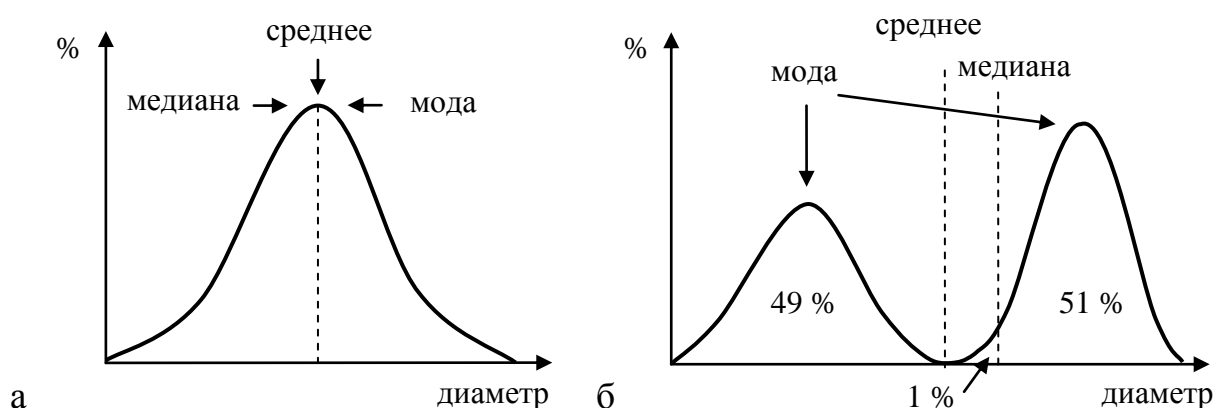


Рисунок 1.9 – Основные статистические характеристики при нормальном или гауссовом распределении (а) и бимодальном распределении (б) частиц по размерам

Среднее значение – средний размер частиц, результат усредненных данных. Средние значения вычисляют для определенного набора частиц, например, $d_{[1...4]}$. Для конкретного распределения средним является математическое ожидание/среднее арифметическое.

Медиана – это значение размера частиц, которое делит популяцию на две равные части, т.е. точка на дифференциальной кривой распределения, слева и справа от которой находится по 50 % распределения.

Мода – положение максимума дифференциальной кривой распределения, или наиболее вероятный в популяции размер частиц.

Для нормального распределения среднее, медиана и мода совпадают (рисунок 1.9.а). Однако, например, для бимодального распределения (рисунок 1.9.б) среднее находится в точности между двумя интервалами распределения. При этом частицы с диаметром, равным среднему отсутствуют. Медианный диаметр сдвинут в правую часть распределения. Диффе-

рещиальная кривая имеет два выраженных максимума (две моды). Наибольшая мода соответствует положению максимума правой части распределения. Данный пример демонстрирует, что среднее, мода и медиана – совершенно разные параметры, которые совпадают или близки лишь в исключительных случаях [43].

1.3.4. Эквивалентные диаметры частиц

Частицы реальных дисперсных материалов в основном имеют разнообразную геометрическую форму, отличную от идеальных геометрических тел. В качестве примера на рисунке 1.10 представлена морфология зерен песка.

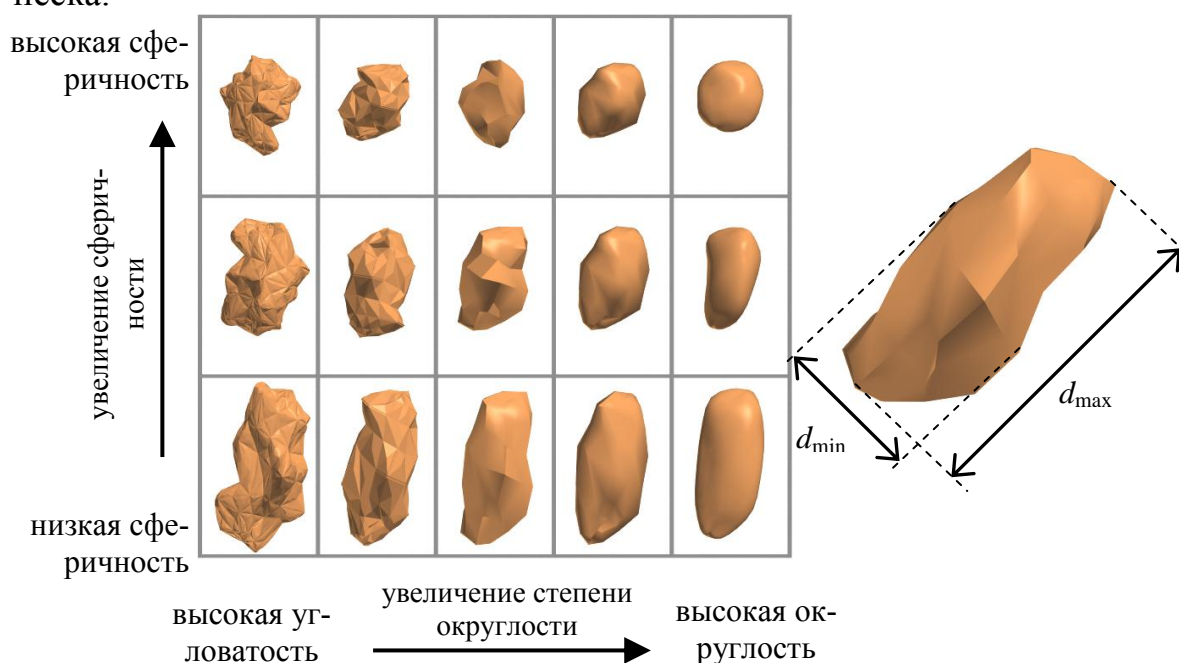


Рисунок 1.10 – Морфология зерен песка

Поскольку методы дисперсионного анализа в своем большинстве не позволяют достаточно полно охарактеризовать каждую частицу дисперсной системы в трех измерениях, пользуются некой аппроксимацией, иначе говоря, заменой частиц реального материала эквивалентными частицами правильной геометрической формы. Только объект сферической формы может быть охарактеризован одним числовым значением. Достаточно сказать, что диаметр сферы равен 50 мкм, и это даст исчерпывающую информацию о ее размере. Охарактеризовать куб таким же образом уже невозможно, поскольку значение 50 мкм может относиться как к длине ребра, так и к диагонали. Однако в том числе и для частиц кубической формы существует ряд свойств, которые могут быть охарактеризованы единственно возможным числом. Это, например, масса, объем или площадь поверхности. Таким образом, обладая инструментарием для определения массы частицы, можно полученную массу рассмотреть как массу сферической частицы и, учитывая, что $m_{сф.ч.} = (4/3)\pi r^3 \rho$, получить значение для диаметра сферической частицы ($2r$ – однозначно определяемый параметр), об-

ладающей такой же массой, как исходная частица угловатой формы. Данный подход известен как *теория эквивалентной сферы*. Измеряя некоторые характеристики частицы, предполагается, что они относятся к эквивалентной сферической частице, и вычисляется однозначно определяемый параметр (диаметр сферы), который характеризует частицу. Этот пример демонстрирует, что нет необходимости описывать частицу тремя или более числовыми значениями, которые конечно точнее характеризуют размер, но неудобны по многим соображениям.

В зависимости от формы объекта использование данного приближения приводит к проявлению некоторых интересных эффектов, что наглядно иллюстрируется на примере цилиндра и эквивалентной ему сферы (рисунок 1.11). Изменение формы или размеров цилиндра приводит к изменению его объема/массы, и лишь посредством модели эквивалентной сферы можно оценить увеличение/уменьшение объекта.

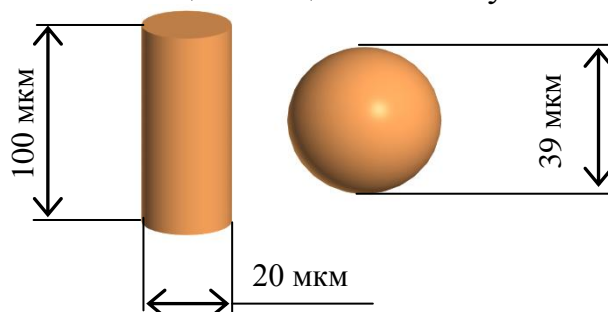


Рисунок 1.11 – Сфера, эквивалентная цилиндру

Возьмем цилиндр, диаметр которого $D_1 = 20$ мкм (соответственно $r=10$ мкм), а высота $h = 100$ мкм. Существует сфера с диаметром D_2 , эквивалентная цилиндру по объему ($V_{\text{сф}} = V_{\text{цил}}$). Диаметр такой сферы вычисляется следующим образом. Объем цилиндра:

$$V_{\text{цил.}} = \pi r^2 \cdot h = 10000\pi \quad (\text{мкм}^3) \quad (1.16)$$

Объем сферы:

$$V_{\text{сф.}} = (4/3)\pi X^3 \quad (\text{мкм}^3), \quad (1.17)$$

где X – радиус сферы с эквивалентным объемом.

Тогда,

$$X = \sqrt[3]{3V/(4\pi)} = \sqrt[3]{30000\pi/(4\pi)} = \sqrt[3]{7500} \approx 19,57 \quad \text{мкм}, \quad (1.18)$$

$$D_2 = 39,1 \text{ мкм}$$

Таким образом, диаметр сферы, эквивалентной по объему цилиндру с высотой 100 мкм и диаметром 20 мкм около 40 мкм. В таблице 1.5 приведены диаметры сфер, эквивалентных цилиндрам с различными высотами. Значения последних строк таблицы характерны для больших частиц глины, имеющих форму диска. Например, при визуализации частицы диаметром 20 мкм и толщиной всего 0,2 мкм, толщиной можно пренебречь. Анализатор частиц, измеряющий объем частиц, в этом случае дает результат около 5 мкм. Как следствие, вполне естественным является вопрос о сравнении результатов различных методов гранулометрического анализа.

Таблица 1.5 – Диаметры сфер, эквивалентных цилиндрам с различными высотами

Размеры цилиндра, мкм		Отношение размеров	Диаметр эквивалентной сферы, мкм
высота	диаметр		
20	20	1:1	22,9
40	20	2:1	28,8
100	20	5:1	39,1
200	20	10:1	49,3
400	20	20:1	61,1
10	20	0,5:1	18,2
4	20	0,2:1	13,4
2	20	0,1:1	10,6
0,2	20	0,01:1	4,9

Стоит обратить внимание, что в случае ситового анализа при использовании апертуры отверстий сита 25 мкм результат будет следующим: «все частицы образца меньше 25 мкм». При анализе методом лазерной дифракции «цилиндры» окажутся другого размера, поскольку физически измеряется другой параметр.

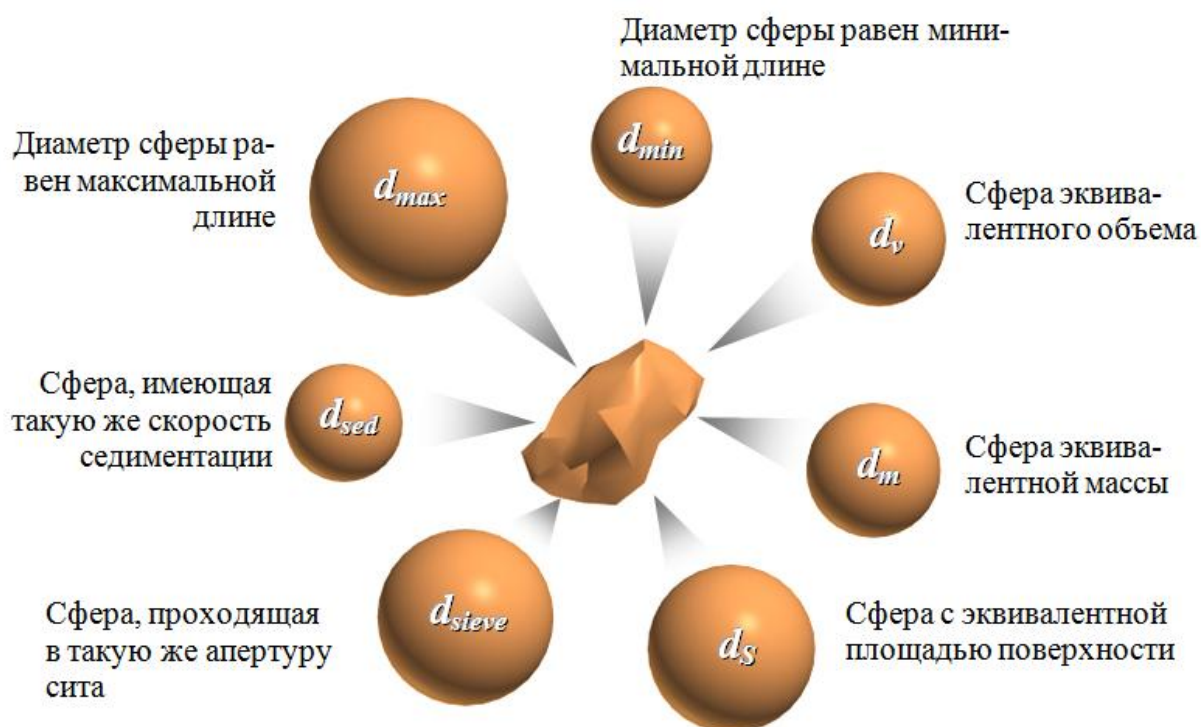


Рисунок 1.12 – Диаметры эквивалентных сфер

При анализе частицы под микроскопом визуализируется её плоская проекция, и в этом случае охарактеризовать частицу можно посредством ряда различных размерных параметров. Это могут быть максимальный или минимальный диаметр (линейный размер), диаметры Ферета и Мартина и т.д., каждый из которых дает значение «размера» частицы. Важно понимать, что каждый метод определения размера основан на измерении раз-

личных физических характеристик частиц (максимальная длина, минимальная длина, объем, площадь поверхности и т.д.), и, как следствие, размеры, полученные разными методами, будут различаться. На рисунке 1.12 показаны различные варианты ответов на вопрос, что есть размер частицы. При этом ошибочных результатов нет – каждый ответ субъективно корректен – он отражает физически измеряемую характеристику.

Распространенные эквивалентные диаметры сфер:

Объемно-эквивалентный диаметр:

$$d_v = ((6/\pi) \cdot V_{\text{частицы}})^{1/3}, \quad (1.19)$$

где $V_{\text{частицы}}$ – объем исходной частицы.

Например, для кубической частицы с ребром 1 мкм (объем частицы составляет 1 мкм³): $d_v = 1,24$ мкм.

Поверхностно-эквивалентный диаметр:

$$d_s = ((6/\pi) \cdot S_{\text{частицы}})^{1/2}, \quad (1.20)$$

где $S_{\text{частицы}}$ – площадь поверхности исходной частицы.

Например, для кубической частицы с ребром 1 мкм (площадь поверхности частицы составляет 6 мкм²): $d_s = 1,38$ мкм.

Массово-эквивалентный диаметр:

$$d_m = (6m_c / (\pi\rho_c))^{1/3}, \quad (1.21)$$

где m_c – масса исходной частицы, ρ – плотность исходной частицы.

Диаметр Стокса (диаметр сферы, обладающей той же плотностью и скоростью оседания в ламинарном потоке жидкости, что и оцениваемая частица):

$$d_{sed} = (18\eta v / (g\rho_s - g\rho_L))^{1/2}, \quad (1.22)$$

где η – вязкость чистой жидкой среды без частиц, ρ_s – плотность твердых частиц, ρ_L – плотность чистой жидкости, g – ускорение свободного падения, v – конечная скорость осаждения частицы.

Ситовой диаметр (диаметр сферы, проходящей в такую же апертуру сита, что и частица) – определяется размером отверстия сита (s):

$$d_{sieve} = s. \quad (1.23)$$

Гидродинамический эквивалентный диаметр (диаметр сферы, обладающей таким же коэффициентом диффузии D_{transl} , как исходная частица, находящаяся в той же жидкой среде при равных условиях), определяется из уравнения Стокса-Эйнштейна:

$$d_H = kT / (3\pi \cdot \eta \cdot D_{transl}), \quad (1.24)$$

где k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура среды, η – вязкость жидкой среды, D_{transl} – коэффициент диффузии.

Таким образом, практически корректно сравнивать только результаты тех измерений, в которых один и тот же материал анализировался одним и тем же методом. Это, также, означает, что не может существовать стандартных образцов (размера) для таких частиц, как зерна песка (или

другого аналогичного природного материала). Для возможности сравнения различных методов стандартные образцы должны быть сферическими. Стандартные образцы могут использоваться для сравнения результатов, полученных разными приборами, но использующими один метод измерения [23, 37, 43, 58].

1.3.5. Методы определения формы и удельной поверхности частиц

Различают *прямые* и *косвенные* методы определения формы частиц. К прямым методам относятся: *оптическая микроскопия* (рисунок 1.13) и *электронная микроскопия* (рисунок 1.14).

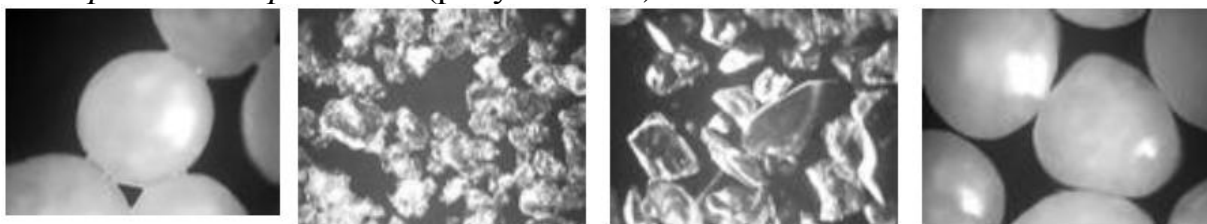


Рисунок 1.13 – Изображения, полученные с оптического микроскопа

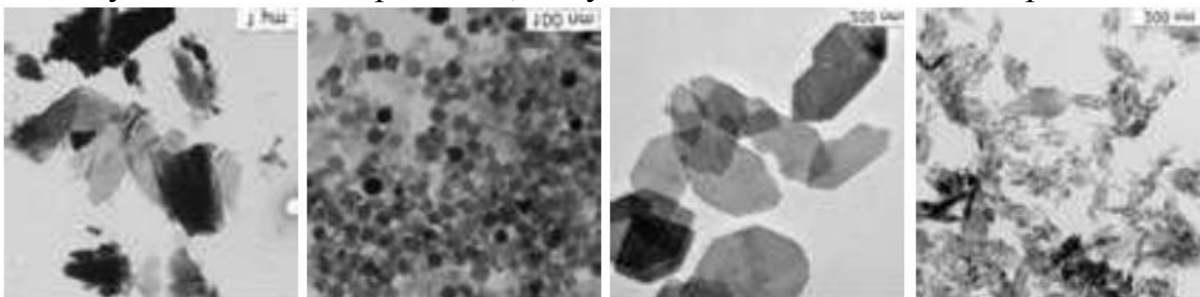


Рисунок 1.14 – Изображения, полученные с электронного микроскопа

К косвенным методам относятся: *методы светорассеяния* и *реологические измерения*.

Метод светорассеяния используется для оценки формы и размеров частиц монодисперсных порошков. Для полидисперсных систем необходимо предварительное фракционирование. Определение формы частиц методом светорассеяния проводится по интенсивности рассеянного света данной длины волны, по оценке спектра рассеянного света или по поляризуемости рассеянного света при заданной длине волны. Форму коллоидных частиц можно определить методами светорассеяния при помощи ультрамикроскопа. Если частицы ассиметричны, то они обладают переменной яркостью. Шарообразные частицы обладают постоянной яркостью.

Реологический метод определения формы частиц основывается на том, что разбавленные агрегативно-устойчивые дисперсные системы не образуют структуры, и поэтому их реологические свойства близки или подобны свойствам дисперсионной среды. Зависимость вязкости этих систем от концентрации дисперсной фазы является линейной и описывается уравнением Эйнштейна:

$$\eta = \eta_0 (1 + \alpha \varphi_{\Phi}) \quad (1.25)$$

где η_0 – вязкость дисперсионной среды; φ_ϕ – объемная доля дисперсной фазы; α – коэффициент формы частиц.

По зависимостям $\eta=f(\varphi_\phi)$ определяют значение коэффициента α и делают вывод о форме частиц (рисунок 1.15) [23, 37].

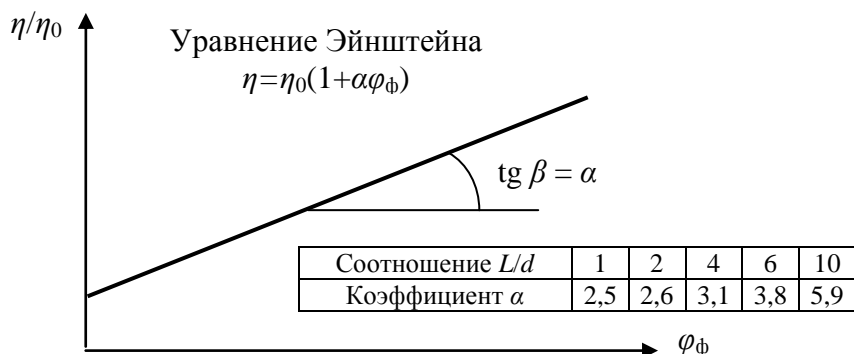


Рисунок 1.15 – К определению формы частиц по уравнению вязкости Эйнштейна

В таблице 1.6 представлены основные параметры формы частиц.

Таблица 1.6 – Основные параметры формы частиц

Хар-ки частиц	Форма частиц				
	Сфера	Куб	Призма	Волокно	Пластина
Описание геометрической формы					
Соотношение размеров $a : b : c$	$a = 1$ $b = 1$ $c = 1$	$a = 1$ $b = 1$ $c = 1$	$a = 1$ $b = 1$ $c = 1,5-4,0$	$a = 1$ $b = 1$ $c > 10$	$a = 1$ $b = 10-25$ $c = 10-25$
Коэффициент k $S_{\text{уд}} = S_0/V = k/a$	6	6	4	4	2
Коэффициент вязкости α $\eta = \eta_0(1 + \alpha\varphi_\phi)$	2,5	4	3-6	3-6	~5
Примеры наполнителей	Нитрид бора, силикагель	Кальцит, полевой шпат	Оксид кремния, оксид бария	Асбест, базальт, углеродные волокна	Каолин, тальк, слюда, графит

Для определения удельной поверхности используют *адсорбционные* и *кинетические методы*. *Адсорбционные методы* основаны на определении объема или массы вещества, адсорбированного на поверхности и образующего мономолекулярный слой. В качестве адсорбатов используются газы, жидкости и твердые вещества. Наибольшее распространение получили газоадсорбционный метод и метод адсорбции поверхностно-активных веществ из растворов. Данные испытаний обрабатываются по теории БЭТ.

Кинетические методы основаны на измерении сопротивления фильтрации воздуха или газов через слой порошка. Фильтрация проводится при атмосферном давлении либо при разрежении.

1.3.6. Теория упаковок дискретных сред

1.3.6.1. Плотность упаковки и координационное число

Основными количественными характеристиками упаковки частиц являются относительная плотность упаковки и координационное число.

Плотность упаковки (ϕ) – отношение суммарного объема (V_T), занятого твердыми частицами в элементарной ячейке (ΔV) дисперсной системы, к объему ячейки.

Координационное число – количество частиц вокруг центрального зерна, соприкасающихся с ним.

На плоскости задача определения максимально возможного координационного числа формулируется так: сколько монет одинакового диаметра может касаться одной заданной. Ответ очевиден – 6 (рисунок 1.16).

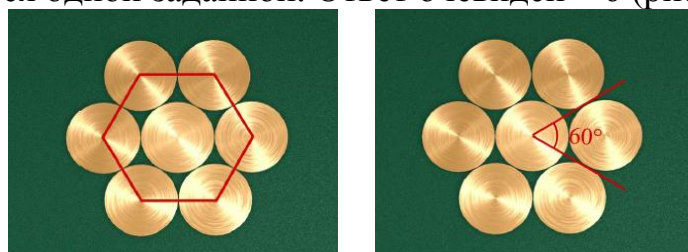


Рисунок 1.16 – К определению координационного числа на плоскости

В трехмерном пространстве проблема определения максимально возможного координационного числа заключается в том, сколько сферических частиц может коснуться одной центральной. При этом самая симметричная конфигурация получается, если 12 сфер расположены в местах, соответствующих вершинам правильного икосаэдра (рисунок 1.17).

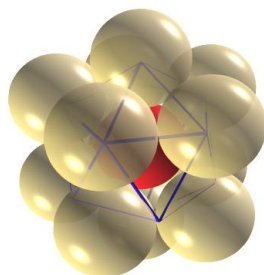


Рисунок 1.17 – К определению координационного числа в трехмерной системе координат

Согласно гипотезе Иоганна Кеплера (1611), доказанной Томасом Хейлзом (2005), для монодисперсных (все частицы одного размера) сферических частиц в трехмерном пространстве плотнейшая упаковка составляет 74,05 % или $\pi/3\sqrt{2}$, а координационное число равно 12.

1.3.6.2. Основные упорядоченные упаковки монодисперсных сферических частиц

Одной из простейших упаковок является *кубическая упаковка* монодисперсных сферических частиц (рисунок 1.18.а).

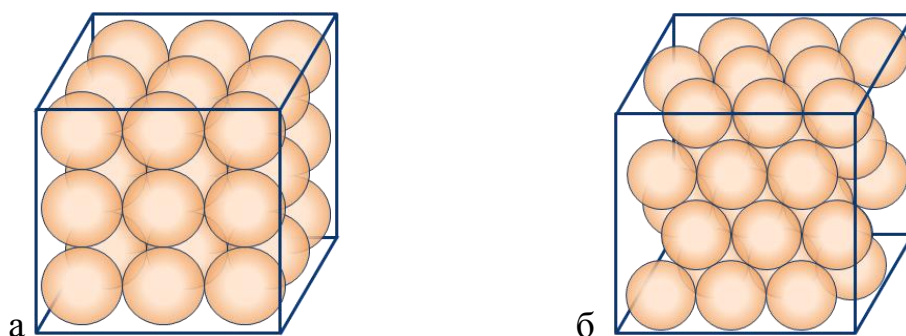


Рисунок 1.18 – Эскиз правильных кубической (а) и гексагональной (б) упаковок монодисперсных сфер

В данном типе упаковки каждая сфера имеет контакт с 6 окружающими ее сферами. Плотность кубической упаковки составляет 52,36 % или $\pi/6$, а зазор между частицами, в который возможно проникновение других (более мелких) частиц, составляет $d(\sqrt{2}-1) \approx 0,4142d$ [6].

Наиболее плотной является *гексагональная упаковка* монодисперсных сферических частиц (рисунок 1.18.б). В данном типе упаковки каждая сфера имеет контакт с 12 окружающими ее сферами. Плотность гексагональной упаковки составляет 74,05 % или $\pi/3\sqrt{2}$.

На плоскости сферами являются круги; известны несколько представляющих интерес упаковок кругов на плоскости (рисунок 1.19). В упаковке Z^2 центры кругов расположены во всех точках с целыми координатами; в упаковке D_2 центры расположены в тех же точках через одну в шахматном порядке.

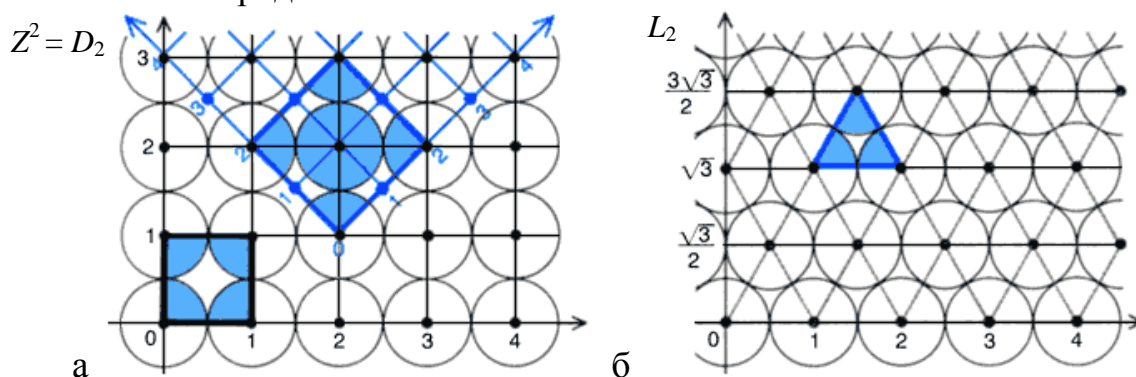


Рисунок 1.19 – Правильная упаковка в виде квадратной решетки (а) и гексагональная решётчатая (б) правильная упаковка кругов на плоскости

Если изменить масштаб на координатных осях и повернуть их на 45° , то упаковка Z^2 перейдет в D_2 , следовательно, эти упаковки эквивалентны. Чтобы найти их плотность, нужно вычислить, какую долю площади квадрата покрывают круги или их части (т.е. сосчитать площадь закрашенной части квадрата); она равна $\pi/4$, или примерно 0,7854 (рисунок 1.19.а). Плотнейшей упаковкой кругов на плоскости является гексагональная решётчатая упаковка L_2 . Круговые секторы в этой упаковке покрывают $\pi\sqrt{3}/6$ каждого равностороннего треугольника; следовательно, плотность этой упаковки равна приблизительно 0,9069 (рисунок 1.19.б) [6, 44].

1.3.6.3. Максимальная плотность упаковки и среднее расстояние между частицами

Максимальная плотность упаковки (φ_{\max}) – максимально возможная объемная доля дисперсной фазы, соответствующая такой упаковке частиц, при которой частицы непосредственно соприкасаются друг с другом в геометрически правильном порядке, причем деформации частиц не происходит. В таблице 1.7 приведены варианты плотной упаковки монодисперсных сферических частиц и значения максимальной плотности упаковки.

Таблица 1.7 – Влияние вида упаковки частиц на плотность структуры

Тип монодисперсной упаковки	Координационное число	φ_{\max}	Доля пустот $\varphi_f = 1 - \varphi_{\max}$
Кубическая (простая кубическая)	6	0,5236	0,4764
Объемно-центрированная кубическая	8	0,6045	0,3955
Двойная шахматная	10	0,6980	0,3020
Гексагональная (тетраэдрическая, пирамидальная)	12	0,7405	0,2595
Статистически плотная	8	0,6370	0,3630
Статистически рыхлая	8	0,58-0,60	0,42-0,40

Из таблицы 1.7 следует, что самая высокая плотность (74,05 %) обеспечивается при гексагональной, тетраэдрической и пирамидальной упаковках, а самая высокая пустотность при кубической упаковке. Это положение учитывается при расчете гранулометрического состава порошков для получения требуемой структуры керамических материалов, при расчете состава крупнопористых бетонов и в других случаях, когда используются монофракционные смеси. Плотность упаковки при неупорядоченных (аморфных) статистически плотных монодисперсных упаковках не превышает 64 % [15, 29, 35 и др.]. При статистически рыхлых упаковках максимальная плотность упаковки находится в интервале 58-60 %.

Определим среднее расстояние между частицами в монодисперсной упаковке сферических частиц. Введем максимально возможное количество частиц диаметром d в систему ($\varphi \leq \varphi_{\max}$). Опишем вокруг каждой частицы эквивалентную сферу диаметром D , чтобы создать модель плотной упаковки (рисунок 1.20). Среднее расстояние между частицами: $H_{\text{cp}} = D - d$.

$$\varphi = \nu \cdot V_0 = \nu \frac{\pi d^3}{6}; \quad \varphi_{\max} = \nu \cdot V = \nu \pi D^3 / 6, \quad (1.26)$$

где ν – число частиц в единице объема.

$$\nu = 6\varphi / (\pi d^3) = 6\varphi_{\max} / (\pi D^3) \quad (1.27)$$

$$\varphi / d^3 = \varphi_{\max} / D^3 \quad (1.28)$$

$$D = d \cdot (\varphi_{\max} / \varphi)^{1/3} \quad (1.29)$$

$$H_{\text{cp}} = d \cdot (\varphi_{\max} / \varphi)^{1/3} - d = d \left((\varphi_{\max} / \varphi)^{1/3} - 1 \right) \quad (1.30)$$

При $\varphi = \varphi_{\max}$:

$$H_{\text{cp}} = 0.$$

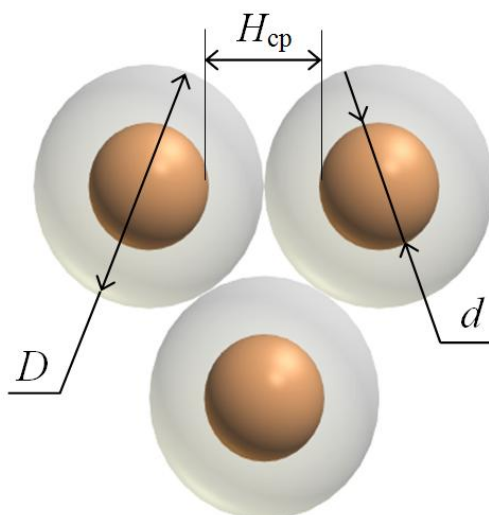







Рисунок 1.20 – К определению среднего расстояния между сферическими частицами

1.3.6.4. Влияние формы частиц на максимальную плотность упаковки

На максимальную плотность упаковки монодисперсных систем помимо способа упаковки влияет также форма частиц. В таблице 1.8 приведены значения φ_{\max} для различной формы частиц и способа упаковки. Если система представляет собой смесь частиц разной формы, то с увеличением в ней частиц окатанной формы плотность упаковки увеличивается. С увеличением угловатости частиц вероятные значения плотности упаковки уменьшаются.

На рисунках 1.21 и 1.22 изображены соответственно фрагменты упорядоченных плотных упаковок и аморфные упаковки частиц различной формы [57, 62, 63, 64].

Таблица 1.8 – Значения φ_{\max} для различной формы частиц и способа упаковки

Форма частиц	Эскиз частицы	Упаковка		
		Наиболее плотная	Средняя	Наименее плотная
Кубы		1,0	0,565	0,129
Октаэдры		0,878	0,520	0,161
Додекаэдры		0,859	0,626	0,393
Икосаэдры		0,892	0,649	0,401
Сферы		0,740	0,631	0,524

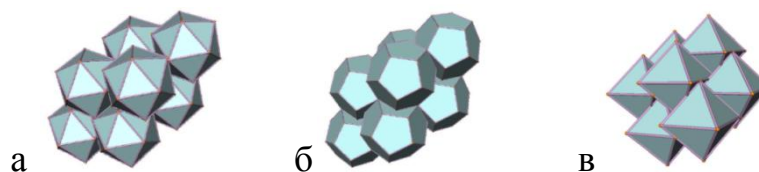


Рисунок 1.21 – Упорядоченные плотные упаковки: икосаэдров (а), додекаэдров (б), октаэдров (в)

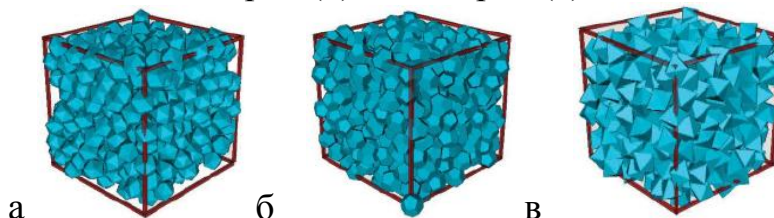


Рисунок 1.22 – Аморфные упаковки: икосаэдров (а), додекаэдров (б), октаэдров (в)

В таблице 1.9 приведены варианты упаковки монодисперсных частиц волокнистой формы, а в таблице 1.10 – плотность упаковки волокон в зависимости от соотношения длины (L) к диаметру (D) волокна.

Таблица 1.9 – Варианты упаковки волокон одинакового диаметра

Тип монодисперсной упаковки	Координационное число	φ_{\max}	Доля пустот $\varphi_f = 1 - \varphi_{\max}$
Объемно-центрированная кубическая	8	0,785	0,215
Гексагональная	12	0,907	0,093
Статистически плотная (аморфная)	8	0,820	0,180
Хаотически ориентированная	8	0,520	0,480

Таблица 1.10 – Упаковка волокон одинакового диаметра в зависимости от соотношения длины (L) к диаметру (D)

Соотношение L/D	2	4	6	10
φ_{\max}	0,68	0,60	0,53	0,42

1.3.6.5. Упорядоченные упаковки полидисперсных сферических частиц

Для получения плотной структуры необходимо использовать би- или полидисперсные (присутствуют частицы двух и более размеров) смеси, так как пустоты, образующиеся при любом типе упаковки, заполняются частицами меньших размеров, уменьшая суммарную пустотность и увеличивая плотность упаковки. На рисунке 1.23 представлены основные плотные упаковки бидисперсных сферических частиц.

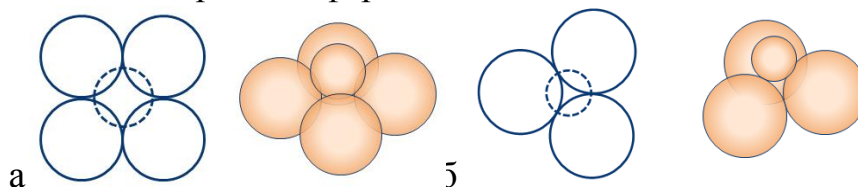


Рисунок 1.23 – Бидисперсные правильные упаковки сфер: а – кубическая с $\varphi_{\max} = 0,729$ (при количественном соотношении частиц 1:1); б – гексагонально-призматическая с $\varphi_{\max} = 0,782$ (при количественном соотношении частиц 1:2)

В таблице 1.11 приведены результаты расчетов плотности упаковок полидисперсных сферических частиц при непосредственном контакте частиц [33].

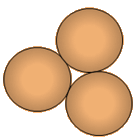
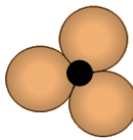
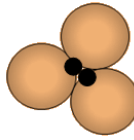
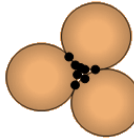
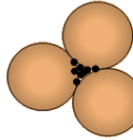
Таблица 1.11 – Плотность упаковок полидисперсных сферических частиц

Модальность упаковки (по размерам)	Кубическая упаковка	Гексагонально-призматическая упаковка
2	0,729	0,782
3	0,761	0,783
4	0,777	0,784

1.3.6.6. Влияние гранулометрического состава частиц на плотность упаковки

При введении сфер меньших размеров в пирамидальную или тетрагональную упаковку из сфер одного размера пустотность снижается до 15 %, а плотность упаковки может достигать 85 % (таблица 1.12).

Таблица 1.12 – Влияние размера и количества второй (меньшей) фракции на плотность упаковки

Размер малых сфер	d	$0,414d$	$0,225d$	$0,175d$	$0,117d$
Относительное число сфер в промежутке	–	1	2	8	8
Доля пустот $\varphi_f = 1 - \varphi_{\max}$	0,260	0,207	0,190	0,158	0,149
Плотность упаковки φ_{\max}	0,740	0,793	0,810	0,842	0,851
Схема упаковки (верхний слой не показан)					

Из таблицы 1.12 следует: если составить набор сфер из двух размеров, при условии, что меньшие помещаются в пустотах между крупными, в строго определенном количественном отношении, то теоретическая плотность укладки составит до 81 %.

Пусть $x_1 + x_2 = 1$ (объемные доли сфер двух размеров в системе), $d_1 > d_2$ на порядок. Вероятная плотность упаковки крупных сфер $\varphi_{\max 1} \approx 0,63$, тогда вероятная плотность упаковки мелких частиц в промежутках между крупными составит:

$$\varphi_{\max 2} = (1 - \varphi_{\max 1}) \cdot 0,63 = (1 - 0,63) \cdot 0,63 = 0,23.$$

В таблице 1.13 представлены расчеты параметров бимодальных упаковок при различных размерных и количественных соотношениях частиц. Можно выделить следующие условия получения плотной структуры:

– размер частиц следующей фракции должен быть значительно меньшим, чем размер пустот, образованных частицами предыдущих фракций;

– для системы, состоящей из двух фракций, эффект повышения плотности упаковки растет с увеличением соотношения между максимальным и минимальным диаметрами частиц (таблица 1.14).

Таблица 1.13 – Параметры бимодальных упаковок при различных размерных и количественных соотношениях частиц

d_1/d_2	0/1	4/1	10/1	40/1	100/1
x_1/x_2	0/1	0,76/0,24	0,75/0,25	0,74/0,26	0,74/0,26
φ_{\max}	0,63	0,663	0,714	0,749	0,149
Относительная пустотность ($1-\varphi_{\max}$)/ φ_{\max}	0,587	0,508	0,401	0,335	0,325

Таблица 1.14 – Условие повышения плотности бимодальной упаковки

d_{\max}/d_{\min}	Эффект повышения плотности упаковки
3 ÷ 5	незначительный
8 ÷ 10	заметный
> 10	явный

Трехфракционная система позволяет увеличить максимальную плотность упаковки до 84 %:

$$d_1/d_2 = 100/1; \quad d_2/d_3 = 40/1$$

$$x_1/x_2 \approx 0,7/0,3; \quad x_2/x_3 = 0,7/0,3$$

$$x_1 / x_2 / x_3 \approx 0,67 / 0,23 / 0,1$$

$$\varphi_{\max} \approx 0,84$$

Набор из четырех и более различных рассчитанных размеров сфер даст плотность до 85% и более. Например, в бетонах, при соотношении в размерах (мм) щебня и песка 40/2,5=16 достигается достаточно высокая плотность структуры (при других неизменных технологических параметрах). Соотношение крупной и мелкой фракции должно быть, примерно 7:3. В тяжелых бетонах соотношение по массе (кг) щебень-песок составляет: (1200÷1300)/(550÷600)=2÷2,5. Для 3-х фракционных смесей количество мелкой фракции обычно в 2÷2,5 раза меньше средней и в 5÷6 раз меньше крупной. Например, для плотных шамотных огнеупоров, с учетом требуемых размеров фракций рекомендуется следующее количественное соотношение фракций: крупная фракция – 60÷65 %; средняя – 25÷30 %; мелкая ~ 10 %.

1.3.6.7. Неупорядоченные плотные упаковки полидисперсных сферических частиц

Почти все реальные сыпучие системы являются полидисперсными или полимодальными. При этом различают системы с *непрерывной гранулометрией* (присутствуют частицы всех размеров) и *прерывистой гранулометрией* (отсутствуют частицы промежуточных размеров). Для расчета

плотнейшей упаковки систем с непрерывным зерновым составом применяются уравнения так называемых оптимальных гранулометрических кривых [8].

Для построения оптимальных кривых просеивания может применяться известное уравнение, или интегральная функция распределения, предложенная Фуллером (1907) и Андреасеном (1930), имеющая вид:

$$A_i = 100(d_i/d_{\max})^n, \quad (1.31)$$

где A_i – проход частиц, %, через условное сито размером d_i , мм; d_{\max} – наибольший размер зерна в смеси, мм (или апертура верхнего сита); n – коэффициент распределения, равный по Фуллеру 0,5; по Андреасену (для пространственного распределения) – 0,37.

В 20-х годах XX века ученый М. Боломей предложил уравнение плотных смесей заполнителя для тяжелого бетона:

$$A_i = B + (100 - B)\sqrt{d_i/d_{\max}}, \quad (1.32)$$

где B – коэффициент, вводимый в уравнение для расчета щебенистых и малопластичных смесей ($B = 10$), пластичных смесей с гравием ($B = 12$) или пластичных смесей со щебнем ($B = 14$); остальные обозначения те же, что и в уравнении Фуллера.

Тогда же Швейцарской федеральной лабораторией по испытанию материалов разработана кривая гранулометрического состава плотных смесей с уравнением:

$$A_i = 0,5 \cdot (d_i/d_{\max} + \sqrt{d_i/d_{\max}}) \quad (1.33)$$

Дорожные строители США в 20-х годах XX века пользовались уравнением Тэлбот-Ричарда (Гуммеля):

$$A_i = 100 \cdot (d_i/d_{\max})^m, \quad (1.34)$$

где m – экспериментально найденный показатель степени, изменяющийся в пределах от 0,46 до 0,52 (по Гуммелю – показатель степени m может колебаться от 0,1 до 1). При $m = 0,5$ получается уравнение Фуллера.

Применяются также кривые Китт-Пеффа с уравнением:

$$A_i = 100 \frac{(d_i/d_{\max})^m - d_{\min}/d_{\max}}{1 - d_{\min}/d_{\max}}, \quad (1.35)$$

где d_{\min} – наименьший размер зерна в смеси, мм; остальные обозначения те же, что и в формулах (1.31) и (1.32);

или кривые просеивания, предложенные Функом и Дингером (1994), уравнение которых имеет вид:

$$A_i = 100 \frac{d_i^n - d_{\min}^n}{d_{\max}^n - d_{\min}^n}, \quad (1.36)$$

где обозначения те же, что и в формулах (1.31) и (1.35).

Уравнения оптимальных кривых просеивания дают только приблизительный состав максимальной упаковки частиц, что можно объяснить различной формой частиц реальной сыпучей системы. Приведенные урав-

нения описывают оптимальную кривую просеивания для систем со сферической формой частиц и не учитывают возможных отклонений от этой формы для реальных систем. Учет данного фактора может быть выполнен с помощью коэффициента формы зерна, который определяется как отношение площади поверхности эквивалентной сферы $\Phi_{сф}$ к площади поверхности частицы $\Phi_{ч}$ равного объема, т.е.

$$K_{\phi} = \frac{\Phi_{сф}}{\Phi_{ч}} \quad (1.37)$$

Коэффициент формы сферы равен единице. При этом, чем сильнее форма частиц отличается от идеальной сферической формы, тем большую долю в зерновом составе должна занимать меньшая фракция.

Уравнение, описывающее оптимальную кривую просеивания по Функу/Дингеру с учетом коэффициента формы частиц, выглядит следующим образом:

$$A_i = 100 \left(\alpha + (1 - \alpha) \frac{d_i^n - d_{\min}^n}{d_{\max}^n - d_{\min}^n} \right), \quad (1.38)$$

где

$$\alpha = 1 - K_{\phi} \quad (1.39)$$

Коэффициент α для частиц реальных сыпучих систем по данным многих исследователей может изменяться в пределах от 0,08 до 0,14. Коэффициент α оказывает большее влияние на содержание мелких частиц. При этом использование значений α отличных от нуля позволяет учесть в реальной дисперсной системе, применяемой, например, в качестве заполнителя бетона, содержание мелких фракций, обычно не контролируемых при традиционных методах расчета бетонной смеси. В качестве тонкодисперсной части сырьевой смеси, учитываемой указанным коэффициентом, может также выступать вяжущее вещество (цементная составляющая).

Коэффициент распределения n оказывает влияние в основном на содержание частиц средних размеров, и на основании экспериментов можно утверждать, что более точные результаты получаются при использовании этого коэффициента, равного 0,5.

На рисунке 1.25 изображены оптимальные гранулометрические кривые.

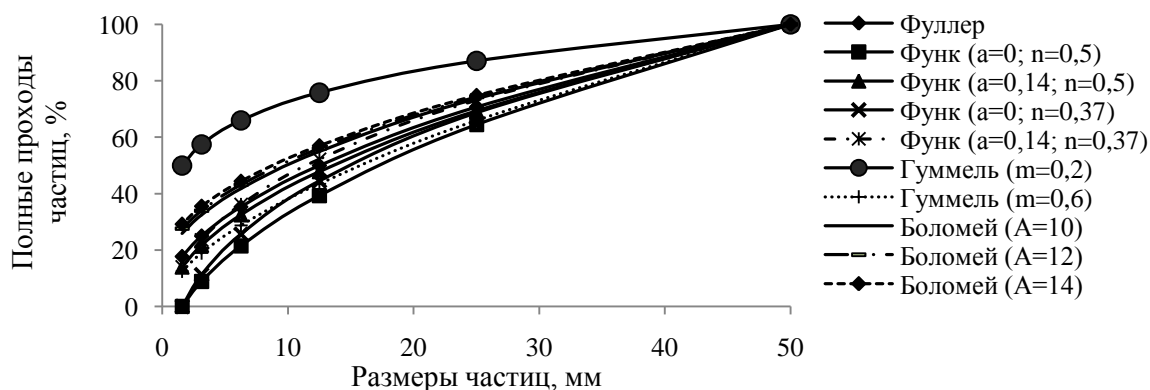


Рисунок 1.24 – Оптимальные гранулометрические кривые

1.3.6.8. Геометрическая оценка упаковок полидисперсных сферических частиц оптимальных зерновых составов

Геометрически оценить плотность упаковки системы полидисперсных сферических частиц, зерновой состав которой рассчитан по одной из известных формул оптимальных кривых, можно путем последовательного размещения сфер в бункере постоянного размера, причем, сферы помещаются в бункер в случайных позициях в порядке убывания диаметра. Количество сфер каждой условной фракции рассчитывается исходя из объемных долей фракций x_i и объема одной сферы i -й фракции. На рисунке 1.25 представлена модель упаковки сфер оптимального зернового состава, рассчитанного по уравнению Функа-Дингера, при различном общем количестве сфер.

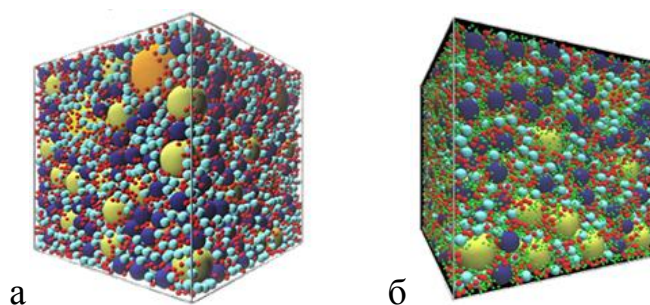


Рисунок 1.25 – Модель упаковки сфер оптимального зернового состава, рассчитанного по уравнению Функа-Дингера: общее число сфер 8000 (а), общее число сфер 16000 (б)

На рисунке 1.26 представлена диаграмма сравнения величины плотности упаковки для моделей из 8000 сфер.

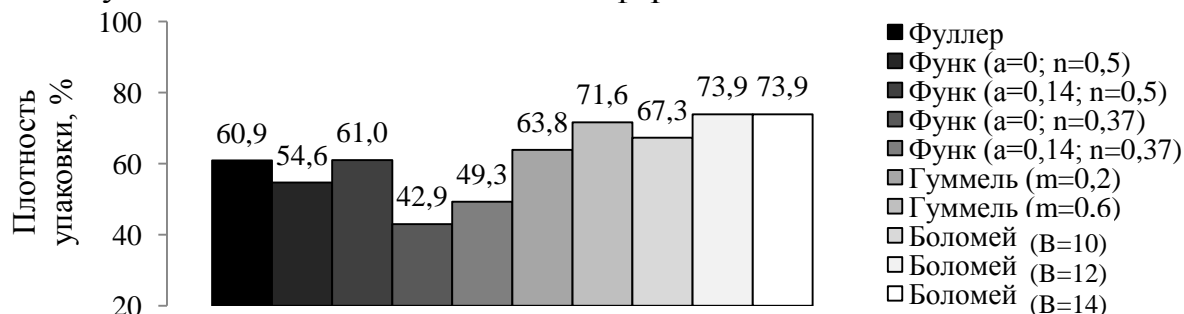


Рисунок 1.26 – Плотность упаковки геометрических моделей оптимальных гранулометрических кривых при общем количестве сфер 8000 в каждой модели

По расчетным данным наибольшей плотностью упаковки характеризуется модель, построенная по уравнению Боломея с эмпирическим параметром B свыше 12.

1.3.7. Компьютерное моделирование упаковок дискретных сред

1.3.7.1. Распространенные методы моделирования плотных упаковок

Наряду с экспериментальными исследованиями в области гранулированных (зернистых) сред, важнейшим инструментом оптимизации явля-

ется математическое компьютерное моделирование – имитационные методы: метод аналитических расчетов, метод динамики многих тел [14, 53, 60], методы конечных и дискретных элементов [41, 50 и др.], метод компьютерного моделирования гидродинамики потоков [22, 31], метод моделирования производственных процессов [41, 54, 56, 61]; интегрированные методы и подходы к решению оптимизационных задач [28].

Преимущество моделирования, когда вещество рассматривается как совокупность твердых частиц, раскрывается при необходимости учета влияния внутренней структуры материала на изучаемые процессы. Эффективность применения математического моделирования определяется возможностью нахождения уравнений, наиболее адекватно описывающих состояние материала и параметров моделирования для конкретной системы. Наилучший результат гарантируется комбинированием моделирования и экспериментальных методов [41, 59].

Несмотря на обилие известных методов моделирования упаковок сфер, часто приходится сталкиваться с материалами, в структуре которых преобладают частицы сложной формы. Упаковка частиц произвольной формы является ресурсоемкой задачей даже для современных компьютеров. Учитывая, что для достаточной точности моделирования требуется не менее 100000 частиц, подобные задачи могут решаться лишь на многопроцессорных компьютерах. Другим подходом к решению задачи упаковки частиц сложной формы может быть очередное приближение, не такое простое как сфера, но не столь сложное, как реальная частица, например, сфероцилиндр – капсулообразное геометрическое тело, представляющее собой цилиндр с двумя полусферическими торцами [36]. На рисунке 1.27 показаны модели систем с различной геометрической формой частиц. Подходы, основанные на результатах изучения случайных упаковок, вносят определенный вклад в понимание закономерностей возникновения беспорядка в твердых телах. Так, например, выявлено, что плотноупакованные системы могут находиться в двух различных состояниях: связанном (*dense random packing, DRP*), а также в виде случайной свободной упаковки (*random loose packing, RLP*). Здесь, под *DRP*-упаковкой понимается наиболее плотная случайная упаковка системы частиц, а под *RLP*-упаковкой – система частиц, находящаяся в состоянии, которому соответствует наименьшая плотность упаковки [16]. Методы формирования случайных упаковок можно разделить на два класса: динамические методы сжатия случайной свободной конфигурации или расширения системы частиц, а также методы последовательного заполнения некоторого пространства в центральном или одноосном силовом поле.

Динамические методы. В большинстве исследований, в качестве основы для динамического метода, принято использовать метод дискретных элементов (*DEM*) как непосредственно для подготовки начального расположения частиц, так и для генерации упаковок. Общий подход, при приме-

нении динамических методов, состоит в том, чтобы поместить необходимое число частиц, с диаметрами, намного меньшими, чем их конечный размер, в область установки. Затем диаметры частицы постепенно увеличивают до тех пор, пока не будет достигнуто плотное расположение частиц.

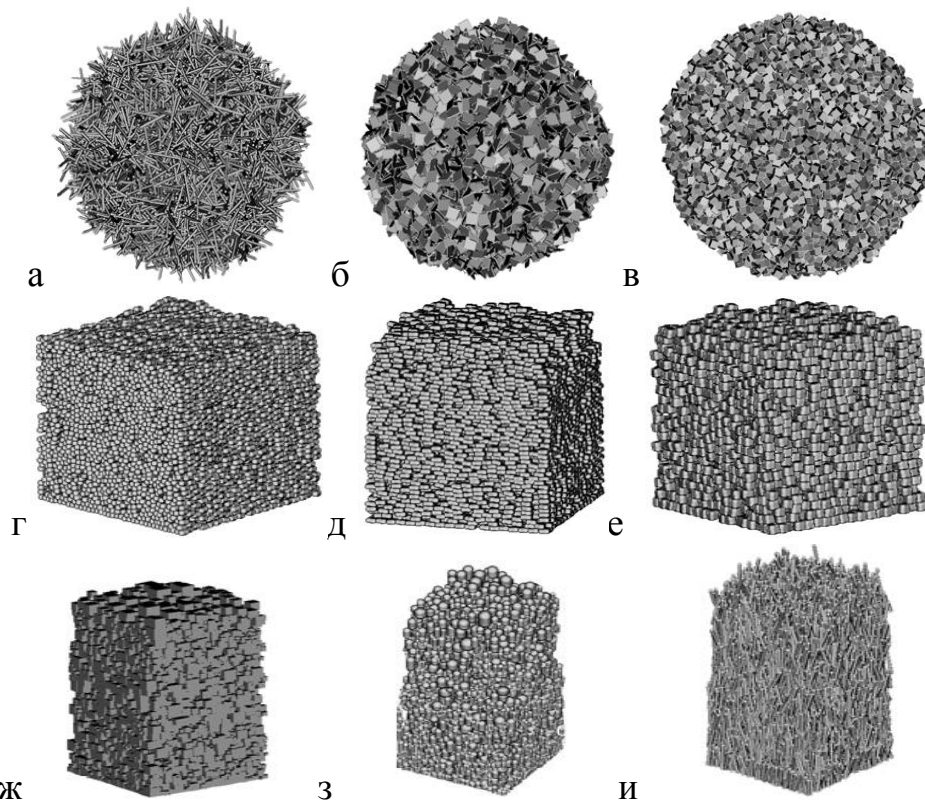


Рисунок 1.27 – Модели систем с различной геометрической формой частиц: «центральная» упаковка длинных сфероцилиндров (а), сфероквадратов (б), сферокубов (в); «горизонтальная» упаковка сфероцилиндров (г), сфероквадратов (д), сферокубов (е); «горизонтальная» полидисперсная упаковка кубов (ж), сфероцилиндров (з), длинных сфероцилиндров (и)

Другой вариант подобного подхода, состоит в назначении конечного размера частиц, помещенных в установочную область, стенки которой медленно смещаются внутрь до тех пор, пока необходимая плотность не будет достигнута. Оба способа приводят к практически одинаковым конфигурациям систем частиц. В ряде случаев принято использовать подход, который состоит в моделировании некоторого гравитационного смещения частиц начальной заправки. При этом, частицы определенного размера, попадая в установочную область, находят позицию равновесия, находясь под воздействием гравитационной силы. В динамических методах движение каждой частицы должно моделироваться с учетом многократных столкновений частиц в течение всего процесса уплотнения, что приводит к большим временным затратам. Кроме того, данные методы также не позволяют выполнять управление состоянием плотноупакованной системы частиц.

Методы последовательного заполнения. Другая группа подходов, названных методами последовательного заполнения, рассматривает системы, подготовленные путем геометрических вычислений, без моделирования динамики частиц. Все методы последовательного заполнения можно, в свою очередь, подразделить на методы *перестановок* и *роста*. В научной литературе описаны несколько методов перестановок, используемых при формировании случайных упаковок одно- и многокомпонентных систем частиц. Обзоры таких методов можно найти в работах Д. Стояна (Stoyan). Самыми известными из них являются: модель Стиенена, модель прудовых лилий, простая модель последовательного запрета и алгоритм Метрополиса-Гастинга. В модели Стиенена (Stienen) процесс подготовки упаковки начинается со случайного размещения центров частиц в 2D или 3D-мерной области установки. Область установки может иметь любую геометрическую форму – прямоугольный бункер или сфера [49]. Каждая частица в упаковке определена с радиусом, равным половине расстояния между ней и ее ближайшим соседом. Полученные частицы системы в этом случае могут обладать либо одним контактом с соседней частицей, либо вообще не иметь каких-либо контактов. Модель «водоем лилий» также основана на генерации ряда беспорядочно расположенных центров частиц. Частицы первоначально определены с нулевым радиусом. Радиусы частиц постепенно увеличивают и рост определенной частицы останавливается, когда она входит в контакт с другой частицей. Здесь уже каждая частица имеет, по крайней мере, хотя бы один контакт с соседней частицей. Распределение размера частицы в представленных моделях не может быть заранее определено, можно оказывать влияние только в начальный момент, при определении местоположения генерируемых центров частиц. Также данные модели нельзя применять для моделирования моносистем частиц.

Простая модель последовательного запрета SSI (Simple Sequential Inhibition) определена следующим образом. Частицы одинакового диаметра помещаются случайным образом в область установки. Если новая частица, помещенная таким способом, пересекается с ранее установленной, то данная частица будет отклонена. Процесс останавливается, когда вся установочная область будет заполнена частицами. Отметим, что данный метод генерирует системы частиц, которые практически не имеют никаких контактов друг с другом.

Алгоритм Метрополиса-Гастинга или его различные версии является более эффективным, чем рассмотренные ранее. Сущность метода следующая. Существует начальное случайное расположение частиц в области установки. Возможно, что при этом, несколько частиц оказались расположены далеко друг от друга в установочной области. Следующее состояние упаковки достигается путем вставки, удаления или перемещения частиц, с определенными вероятностями, которые могут быть предписаны пользователем. Расположения принимаются с вероятностями, названными отноше-

ниями Гастингса, которые отличны для операций вставки, удаления и перемещения частиц. В случае отклонения расположение частиц системы остается неизменным. Все вышеупомянутые методы приводят к упаковкам с довольно низкими плотностями упаковки и координационными числами.

Можно также отметить различные *коллективно-перестановочные методы*. В данных методах число частиц заранее определено в течение процесса подготовки. Первоначально частицы помещены беспорядочно в установочную область. Наложения разрешаются, но их величина уменьшается в течение процесса, путем перемещения, а иногда и изменением размера частиц. При каждом шаге смещения частиц вычисляется от значений величины наложений с её соседями, подобно динамическим методам. Следовательно, эти алгоритмы также являются довольно затратными по времени.

Методы роста, например, позволяют получить более плотные расположения. Типичное выполнение производится следующим образом. Упаковки моделируются очень медленной установкой твердых частиц в беспорядочно упакованный слой. Частицы вводятся по одной в потенциальной области падения или перекачивания. Каждый последующий шаг помещает новую частицу в область установки, и переводит ее вниз, пока она не занимает один из доступных ей участков. Позиция поступающей частицы вычисляется чисто геометрически, без анализа динамики системы. Периодические граничные условия устраняют воздействие пристенного эффекта, а начальный слой задает случайность расположения частиц на первом этапе формирования упаковки. Сохранение координат частиц упрощает последующий анализ для близко установленных соседей. В методах роста диаметры частиц могут быть одинаковыми, или могут определяться на основе любого распределения.

Одним из наиболее распространённых является *метод (алгоритм) Любачевского и Стиллингера*: задаётся случайное расположение частиц в расчётной области (частицы изначально имеют нулевой радиус), а также их скорость и направление движения; частицы движутся в расчётной области в соответствии с законами ньютоновской механики, постепенно увеличиваясь в размерах до номинальных значений (или до тех пор, пока дальнейшее движение не станет невозможным) [1, 2, 15].

Другой распространённый метод, *редуцированной размерности*, был предложен Дэвисом и Картером. В нём сферические частицы помещаются в цилиндрический «стакан» со случайно выбранными координатами, а расстояния между частицами принимают минимальные значения, при которых не возникает пересечения между частицами. Данный метод можно усовершенствовать, добавив к падению частицы возможность её перекачивания по другим частицам до достижения устойчивого положения.

Более простой метод, *вязкой суспензии*, разработан С.А. Рашковским: задаётся случайное расположение частиц в расчётной области (допускает-

ся, чтобы частицы пересекали друг друга); на пересекающиеся частицы действуют центральные силы отталкивания, которые приводят частицы в движение; система частиц эволюционирует до тех пор, пока пересечения не будут устранены.

Стоит также отметить подход, в котором частицы одна за другой вводятся в расчётную область, при этом на каждой итерации частицы перемещаются на малое расстояние в произвольном направлении, если при этом не возникает пересечений. Отличительной особенностью данного алгоритма является дискретизация частиц на прямоугольной сетке, что позволяет моделировать упаковки частиц произвольной формы.

Недостатком всех перечисленных моделей является то, что в формируемую упаковку затруднительно внести какие-либо особенности (например, получить ровный ряд частиц на границе расчётной области, что имеет место в зарядах твёрдого топлива). Также, все алгоритмы, кроме последнего, плохо обобщаются на случай частиц сложной формы [15].

1.3.7.2. Алгоритм «сжатия» Любачевского-Стилинжера

Алгоритм «сжатия» Любачевского–Стилинжера (Lubachevsky-Stillinger compression algorithm, ЛСА, ЛС протокол) – вычислительная процедура, которая имитирует процесс механического сжатия набора твёрдых частиц [1].

Механическое сжатие обычно осуществляется стенкой сосуда, где находятся частицы, например, давящим на частицы поршнем. ЛСА способен моделировать такой процесс. Однако в первоначальной формулировке ЛСА не было твёрдых стенок сосуда, а частицы как бы «распухали», расширяясь в размере, но находясь в фиксированном и конечном виртуальном объёме с периодическими граничными условиями (рисунок 1.28). В то время как абсолютные размеры частиц увеличивались, их размеры в отношении друг к другу оставались неизменными. В общем случае, ЛСА может справиться и с внешним сжатием, и с внутренним расширением частиц, происходящими одновременно, и возможно, но не обязательно, сочетающимися с присутствующими твёрдыми стенками сосуда. К тому же эти стенки могут быть подвижными.

В результирующем сжатом массиве могут найтись частицы так называемые «висячие частицы», которые «сжатыми» не будут, а, напротив, будут подвижны в пределах, ограниченных их сжатыми частицами-соседями и, возможно, твёрдыми стенками сосуда.

Появление свободных частиц не является ни артефактом, ни заранее заданным явлением, которое ЛСА должен был бы продемонстрировать. Они действительно возникают в сжатом массиве твёрдых частиц, оказавшись даже некоторой неожиданностью для создателей ЛСА. Фрэнк Хенри Стилинжер предложил название «ратлер» (rattler – «погремушка») для по-

добной частицы, поскольку если потрясти сжатый массив твёрдых частиц, ратлеры будут «громыхать».

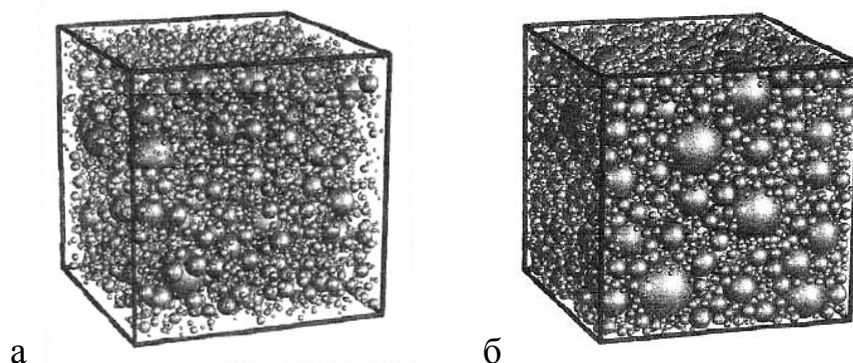


Рисунок 1.28 – Модель плотной упаковки сфер, построенная расширением размеров частиц в ограниченном объеме: до начала расширения (а), в окончательной стадии формирования модели (б)

В начальной фазе «сжимания», когда плотность заполнения частицами доступного объёма низка и когда все частицы подвижны, процессы внешнего сжатия и внутреннего расширения частиц могут быть остановлены. Продолжающий работать после такой остановки, ЛСА будет моделировать текущий поток, состоящий из частиц (*granular flow*). Промоделированы могут быть различные механизмы твёрдых столкновений, как то: идеально упругие или с только-частичным восстановлением, идеально скользящие и с трением. Разные массы частиц могут быть приняты во внимание при моделировании столкновений. Также порой оказывается полезным «разжижать» сжатую конфигурацию частиц, посредством уменьшения размера всех или некоторых частиц.

Первоначальный протокол ЛС предназначался, главным образом, для сфер одного или разных диаметров. Малейшее отклонение от формы сферы (или круга на плоскости), даже такое, как использование эллипсоидов (или, если на плоскости, то эллипсов) существенно замедляет вычисления. Но если форма всех частиц сферическая, ЛСА справляется с наборами в десятки и сотни тысяч частиц на стандартных сегодняшних персональных компьютерах.

Состояние сжатия достигается моделированием текущего потока частиц. Поток же, в свою очередь, представляется как последовательность дискретных событий, где событиями оказываются соударения частиц, а также столкновения частиц с твердыми стенками, если таковые присутствуют. Вычисления останавливаются, когда пробег всех частиц между столкновениями (исключая пробег ратлеров) становится меньше, чем некоторый малый порог, устанавливаемый явно или, чаще, неявно. Например, нет пользы продолжать вычисления, если пробег стал меньше ошибки округления.

Для любой частицы и на любой стадии вычислений ЛСА поддерживает запись только о двух событиях: о старом, уже просчитанном и совер-

шившемся событии, и о новом, только ещё намеченном к исполнению событии. Новое событие может и не совершиться по намеченному. Запись о событии состоит из: временной отметки события, из записи состояния частицы сразу после события (включая положение и скорость частицы), а также из идентификации «партнёра» частицы по данному событию, если таковой оказывается. Партнёром может быть другая частица, либо стенка сосуда. Максимум отметок времени совершившихся событий не может превзойти минимума отметок времени событий намеченных к исполнению.

Следующей частицей для просмотра выбирается частица с минимумом отметки времени среди событий намеченных к исполнению. При этом просмотре то, что прежде было новым событием, намеченным к исполнению для данной частицы, объявляется старым совершённым событием, и в то же время намечается следующее новое событие с его новой отметкой времени, новым состоянием и с новым партнёром, если таковой окажется. При таком установлении следующего нового события для частицы некоторые соседние частицы могут пересчитать свои намеченные к исполнению события, принимая во внимание возникшую новую информацию.

По мере прогресса вычислений, частоты столкновений частиц в моделируемом времени могут возрасти и обычно возрастают в действительности. Тем не менее, система успешно приближается к итоговому сжатому состоянию, если только частоты столкновений разных частиц оказываются соизмеримыми между собой. (Исключая ратлеров. Последние испытывают устойчиво низкие частоты столкновений, и это свойство ратлеров позволяет их легко выявить). Однако возможно, что некоторое небольшое число частиц, даже одна единственная частица, будет испытывать чрезмерно высокую и всё возрастающую по сравнению с остальными частицами частоту столкновений при приближении моделируемого времени к некоторой временной отметке. Если такое случается, процесс моделирования застревает на данной временной отметке, не будучи в состоянии достичь желаемого сжатия частиц [1, 2].

1.3.7.3. Алгоритм «расталкивания» Жодре-Тори

В случае алгоритма *Жодре-Тори* (JT-алгоритма), исходная система плотная, но состоит из перекрывающихся сферических частиц. Алгоритм реализует «расталкивание» перекрывающихся сфер с постепенным уменьшением их радиуса [2, 52]. JT-алгоритм позволяет генерировать достаточно большие упаковки с достаточно высокой плотностью (больше 60 % в случае одинаковых сферических частиц) за достаточно малое время (3 600 частиц за несколько часов). Суть его заключается в последовательном рассмотрении пар частиц, обнаружении пар пересекающихся частиц и «расталкиванием» их на сумму радиусов.

Существует проблема создания больших (свыше 6000 частиц) упаковок. Временные затраты на генерацию упаковки с использованием JT-алгоритма растут пропорционально $\sim 3N$. Одним из методов решения данной проблемы является создание регулярной упаковки. Сперва генерируется микроупаковка с проницаемыми границами, т. е. часть сферы, вышедшей за пределы упаковки, отображается на противоположной грани. Далее микроупаковка мультиплицируется на весь объем моделируемой системы. Очевидно, что при уменьшении размеров микроупаковки уменьшаются общие временные затраты создания итоговой упаковки. Однако, если характеристическая длина процессов, протекающих в макроупаковке, превышает размеры микроупаковки, модель изучаемого процесса будет неадекватной, и в самом лучшем случае будет необходим дополнительный анализ и пересчет выходных данных. При выборе закона распределения размеров частиц необходимо знать свойства реальных гранулированных сред. Набор частиц с их диаметрами, являясь входной информацией, на работу для алгоритма создания упаковки не влияет. На этапе разработки разумнее всего использовать частицы с нормальным распределением.

Многочисленные результаты компьютерного моделирования показывают, что в случае присутствия непроницаемых стенок модели окружение частицы определяется не только собственными свойствами упаковки, но и «эффектами стенки». Например, при прочих равных условиях вероятность обнаружения шести других частиц на расстоянии одного диаметра будет выше для частицы, расположенной в центре упаковки, чем для частицы, касающейся стенки. Экспериментальные данные подтверждают, что уровень упорядоченности плотных упаковок изменяется с расстоянием от стенок. Вблизи их структура высоко упорядочена и напоминает кристалл. Однако с удалением от стенок структура становится все более случайной. Следует отметить, что наличие непроницаемых стенок сильно затрудняет генерацию [20].

В общем, принципы реализации плотной упаковки сфер по JT-алгоритму и ЛСА схожи и позволяют достичь плотности упаковки монодисперсных сфер свыше 68 %, при этом превышение характерного порога плотности для аморфных упаковок, равного 64 %, происходит в результате образования локальных дислокаций правильно упорядоченных частиц.

1.3.7.4. Алгоритм перекатывающихся частиц «Drop and Roll»

Для моделирования упаковок сферических частиц часто пользуются алгоритмом перекатывающихся частиц («Drop and Roll») или алгоритмом, аналогичным насыпке частиц в бункер. Следует отметить, что модели упаковок, полученные по данному алгоритму, не допускают «висячих» частиц, то есть не имеющих контактов с соседями. Физическая идея алгоритма заключается в следующем. Упаковка сферических частиц реализуется моделированием случайной струи частиц по принципу «одна после дру-

гой». Вновь образованные частицы падают в бункер с плоскими стенками. Бункер устанавливает конфигурацию трехмерной упаковки. Первоначальная позиция каждой частицы (x_0, y_0, z_0) выбирается случайным образом, причём все положения частицы являются равновероятными.

Отпущенная частица движется в свободном падении в поле силы тяжести вдоль оси Y , то есть с постоянными координатами x_0 и z_0 . Как только падающая частица наталкивается на препятствие – стенку бункера или уже упакованную частицу, – она прилипает к ней (без соударения) и начинает скользить по поверхности в направлении минимума потенциальной энергии до следующего препятствия (рисунок 1.29).

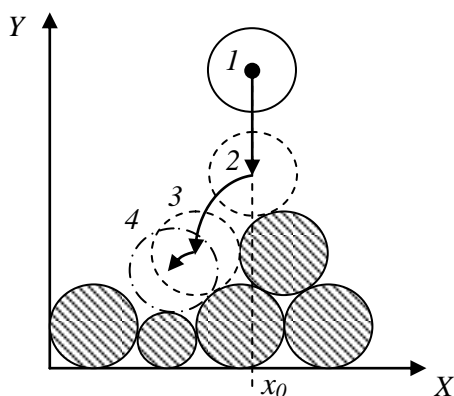


Рисунок 1.29 – Схема движения сферической частицы при случайной укладке в бункер: 1 – начальное положение частицы, 2 – положение частицы при первом контакте, 3 – неустойчивое положение, дальнейшее движение частицы, 4 – устойчивое положение в точке пересечения трёх поверхностей.

Процесс движения частицы продолжается до тех пор, пока она не займёт положение, устойчивое по отношению к силе тяжести. Остановка частицы происходит, очевидно, в точке пересечения трех поверхностей (три сферы, две сферы и плоскость и т.п.) или на поверхности, перпендикулярной направлению свободного падения частиц, например, на дне бункера. Таким образом, формулировка алгоритма движения очередной сферы выглядит следующим образом:

Шаг 1. Выбор начальной позиции для падения сферы.

Шаг 2. Анализ текущих ограничений. Определение нового направления движения сферы. Оно должно образовывать наименьший из допустимых углов с направлением свободного падения сфер. При отсутствии допустимых направлений (все углы больше 90^0) – остановка и выбор следующей сферы для упаковки.

Шаг 3. Определение очередного сегмента траектории движения. Это прямая линия или отрезок окружности.

Шаг 4. Вычисление точек пересечения текущего сегмента траектории со всеми уже упакованными сферами или стенками бункера и выбор из них ближайшей к началу сегмента. Возврат к шагу 2 [10].

На рисунке 1.30 изображен процесс построения модели упаковки сфер по алгоритму «Drop and Roll».

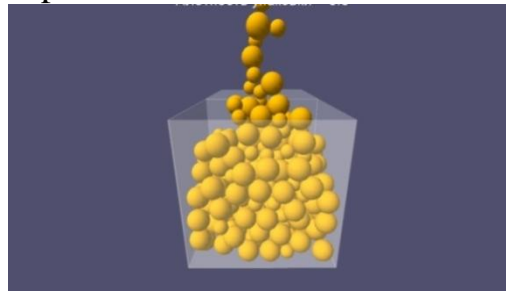


Рисунок 1.30 – Процесс построения модели упаковки сфер по алгоритму «Drop and Roll»

В случае сферических частиц одинакового размера порог максимальной плотности упаковки для алгоритма «Drop and Roll» составляет около 58 %. Для того чтобы преодолеть рубеж плотности в 58 % и достичь экспериментально регистрируемых в случайных упаковках значений порядка 63 %, необходимо использовать иные методы генерации позиций частиц. Разница в 5 % требует кардинальных изменений в алгоритме генерации [20].

1.3.7.5. Метод дискретных элементов

Для моделирования механического поведения твердых частиц сыпучих материалов широко применяется *метод частиц* или *метод дискретных элементов* (МДЭ, DEM). Как принципиально дискретный метод, основанный на приложении законов Ньютона и контактной механики, он не имеет недостатков континуальных (непрерывных) моделей, проявляющихся при нарушении сплошности вещества или в результате дискретности его внутренней структуры. Высокая эффективность этого метода обусловлена его универсальностью, относительно невысокой стоимостью вычислительных экспериментов по сравнению с натуральными и практически неограниченными возможностями диагностики моделируемых явлений.

Гранулированный материал представляется совокупностью из N обособленных упругих частиц сферической формы радиуса R_i (рисунок 1.31.а). Согласно законам классической Ньютонической механики, движение каждой i -й частицы полностью определяется координатами ее центра тяжести x_i и углом поворота θ_i вокруг центра тяжести как жесткого целого ($i=1, \dots, N$).

Система уравнений движения для каждого элемента в прямоугольной декартовой системе координат имеет следующий вид:

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = F_i, \quad (1.40)$$

$$I_i \frac{d^2 \theta_i}{dt^2} = M_i (i=1, \dots, N), \quad (1.41)$$

где t – время, m_i – масса частицы, I_i – момент инерции, векторы F_i представляют собой сумму сил, действующих на контактах i -й и j -й частиц (включая силу тяжести):

$$F_i = \sum_{i=1, i \neq j}^N F_{ij} + m_i g, \quad (1.42)$$

Вектор M_i – момент сил F_{ij} относительно центра i -й частицы:

$$M_i = \sum_{i=1, i \neq j}^N M_{ij} = \sum_{i=1, i \neq j}^N (x_i - x_j) \cdot F_{ij}, \quad (1.43)$$

Поверхностные силы F_{ij} состоят из сил отталкивания $F_{n,ij}$ и сил трения $F_{t,ij}$. Сила отталкивания возникает между частицами при условии $\delta_{ij} > 0$ (рисунок 1.31.а) и направлена по нормали n_{ij} в направлении центра i -й частицы (рисунок 1.31.б). Для ее определения выберем вязкоупругую модель соударения: $F_{n,ij} = F_{n,ij}^e + F_{n,ij}^v$, где $F_{n,ij}^e$ – упругая, $F_{n,ij}^v$ – вязкая составляющие. Согласно Дж. Герцу, упругая часть силы $F_{n,ij}$ равна:

$$F_{n,ij}^e = \frac{4}{3} \frac{E_i E_j}{(1 - \nu_i^2) E_j + (1 - \nu_j^2) E_i} \sqrt{\frac{R_i R_j}{R_i + R_j}} \delta_{ij}^{\frac{3}{2}}, \quad (1.44)$$

где ν_i – коэффициент Пуассона, E_i – модуль упругости частицы, δ_{ij} – величина перекрытия частиц. В случае соударения частицы и прямолинейной границы, в формуле (1.44) достаточно положить один из радиусов равным бесконечности.

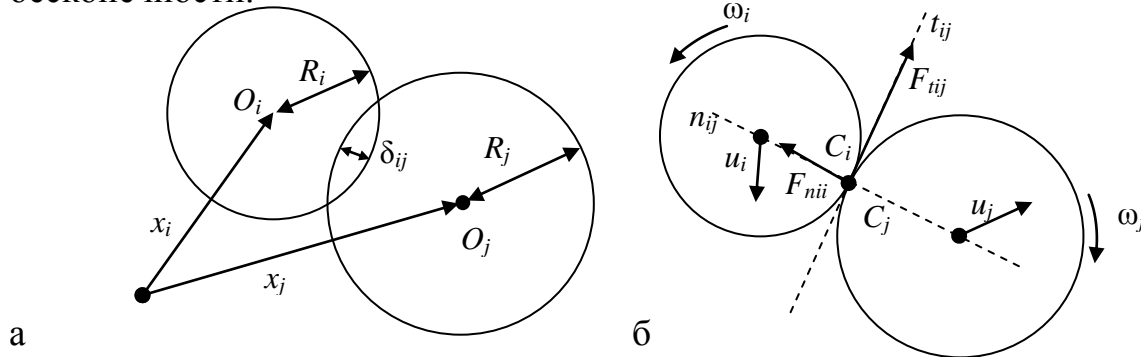


Рисунок 1.31 – Задание параметров для описания контакта: геометрия модели (а); силы, действующие на контакте (б)

Вязкая составляющая силы отталкивания определяется так:

$$F_{n,ij}^v = -\gamma_n M_{ij} u_{n,ij}, \quad (1.45)$$

где M_{ij} – приведенная масса частиц, $u_{n,ij}$ – проекция относительной скорости точки соударения на ось n_{ij} , γ_n – коэффициент демпфирования, оказывающий основное влияние на коэффициент восстановления скорости после удара.

Сила трения $F_{t,ij}$ направлена против движения i -й частицы относительно j -й, а ее величина определяется соотношением:

$$F_{t,ij} = -\sin(u_{t,ij}) F_{n,ij} \cdot \operatorname{tg} \varphi_t, \quad (1.46)$$

где $u_{t,ij}$ – проекция скорости точки контакта C_i относительно скорости точки C_j на ось t_{ij} , φ_t – угол контактного трения между частицами.

Таким образом, система дифференциальных уравнений второго порядка (1.40–1.41) относительно неизвестных x_i , θ_i и соотношения (1.42–1.46) полностью определяют движение и соударение совокупности упругих частиц, моделирующих дискретную среду [25].

Метод дискретных элементов реализуется как на плоскости (рисунок 1.32), так и в трехмерной системе координат (рисунок 1.33).

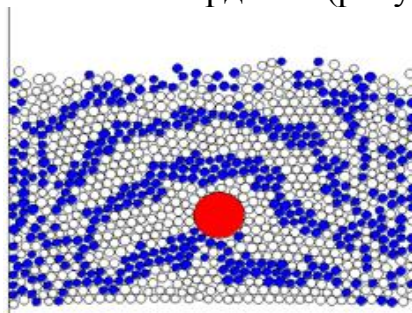


Рисунок 1.32 – Реализация метода дискретных элементов на плоскости

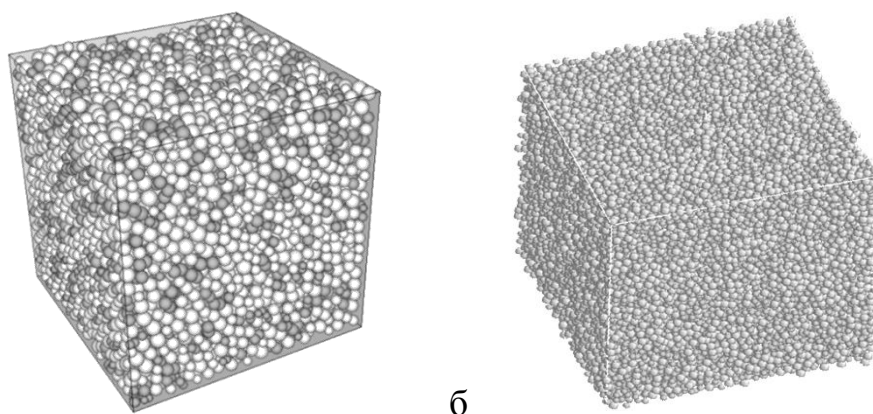


Рисунок 1.33 – Модель плотной упаковки сфер по методу дискретных элементов: 10000 частиц (а); 30000 частиц (б)

Наиболее известны следующие программы, реализующие метод дискретных элементов: Chute Maven (Hustrulid Technologies Inc.), PFC2D и PFC3D, EDEM (DEM Solutions Ltd.), GROMOS-96, ELFEN, MIMES, PASSAGE[®]/DEM [3].

1.3.8. Реализация комбинированного метода пространственной реконструкции упаковки дискретной среды

Перечисленные выше алгоритмы структурно-имитационного моделирования упаковок дискретных сред имеют свои положительные стороны и недостатки. Выбор того или иного метода (алгоритма) компьютерного моделирования осуществляется исходя из условий конкретной решаемой задачи, а также возможностей реализации метода на каком-то определенном языке программирования. Определяющими критериями эффективности алгоритма моделирования является воспроизводимость результатов моделирования, а также корреляция значений модельной плотности упаковки с экспериментальными значениями, полученными при проведении

физических экспериментов (например, бросание стальных шаров в емкость известного объема).

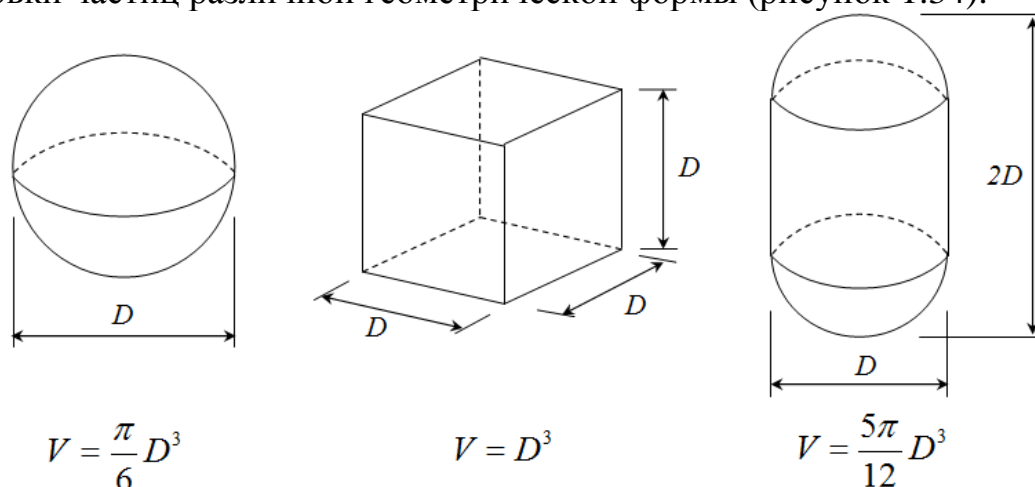
Рассмотрим два наиболее эффективных комбинированных метода компьютерного моделирования – метод гравитационной засыпки частиц в бункер с расчетом динамики частиц (метод дискретных элементов) и метод, в основе объединяющий алгоритм «сжатия» Любачевского-Стиллинджера и алгоритм «расталкивания» Жодре-Тори.

Первый метод является комбинацией алгоритма перекатывающихся частиц и метода дискретных элементов. Предлагаемый метод позволяет динамически моделировать движение каждой частицы, учитывая ее многократные столкновения со стенками бункера и другими частицами в течение всего процесса формирования упаковки. Бункер имеет кубическую форму с постоянным размером ребра. Количество частиц, вмещаемых в бункер, заведомо неизвестно. На начальном этапе моделирования генерируются случайные координаты частицы выше верхней кромки бункера. Затем отпущенная частица двигается в свободном падении в поле силы тяжести вдоль оси Y , то есть с постоянными координатами X_0 и Z_0 по аналогии с методом «Drop and Roll», причем угловая скорость частицы равна нулю. На частицы действуют силы тяжести, пропорциональные их объему. При достижении частицей препятствия физика взаимодействия определяется по принципу упругого соударения частиц, аналогично методу дискретных элементов. Формирование упаковки завершается закрытием верхней крышки бункера с небольшим сдавливанием системы. Данный алгоритм позволяет получать наиболее достоверные модели упаковок, плотность которых эквивалентна плотности упаковок частиц реальных физических моделей (к примеру, упаковок стальных шаров в емкости).

Второй метод основан на алгоритмах «сжатия» и «расталкивания». Бункер имеет кубическую форму. В данном методе не рассматривается динамическое движение частиц, система находится в статичном состоянии. Объем бункера изначально превышает окончательный объем упаковки. Количество частиц, вмещаемых в бункер, установлено изначально. Начальные координаты частиц случайны и находятся внутри границ бункера. Габариты бункера равномерно сжимаются до достижения плотности упаковки 100 %, при этом поверхности частиц перекрывают друг друга и стенки бункера. Объем бункера медленно расширяется, при этом каждая частица ищет свободную позицию (происходит взаимное противоположно направленное смещение частиц) в направлении уменьшения области перекрытия поверхностей (δ), таким образом, происходит «расталкивание» частиц. Формирование упаковки завершается, когда все частицы системы заняли свободные позиции, а перекрытия поверхностей исключены.

Для реализации методов используется язык программирования TGC Dark Basic Professional и высокопроизводительная технология моделирования физических явлений NVidia PhysX. Исходными данными для по-

строения моделей служат геометрические характеристики упаковки – количество «фракций» в системе, количество частиц каждой «фракции», размеры и форма частиц. Интерактивные модели позволяют моделировать упаковки частиц различной геометрической формы (рисунок 1.34).



а – сфера, б – куб, в – сфероцилиндр

Рисунок 1.34 – Геометрическая форма частиц и формулы вычисления их объема

Для наглядности процесс моделирования можно отобразить на экране (рисунок 1.35). Выходными данными являются статистика упакованных частиц и величина плотности упаковки.

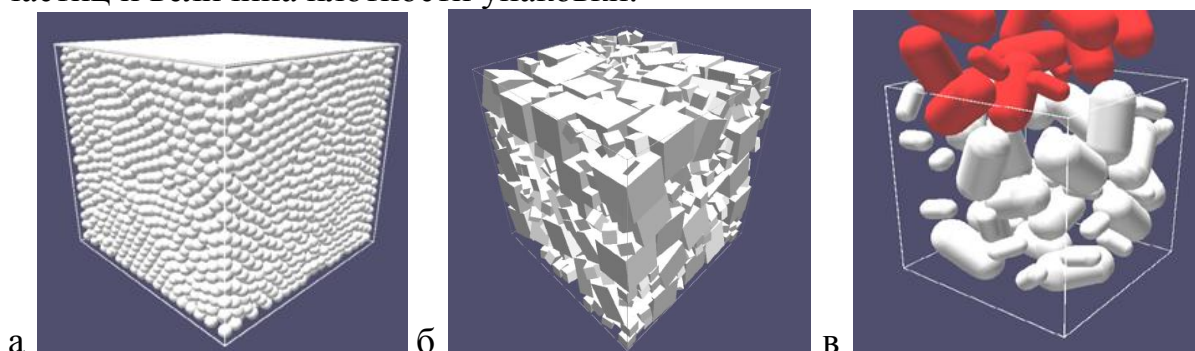


Рисунок 1.35 – Структурно-имитационные модели упаковок: сфер (а), кубов (б) и сфероцилиндров (в) различных размеров

Предложенные алгоритмы структурно-имитационного моделирования имеют достаточно подробное научное обоснование, в ходе которого выявлена статистическая адекватность получаемых результатов [9, 39].

Получаемые с использованием предложенных методов моделирования результаты позволяют судить о характере изменения плотности упаковки как монодисперсных (рисунок 1.36) так и полидисперсных (рисунок 1.38) систем. Максимальный предел плотности упаковки для кубов и сфероцилиндров составляет 67 %, для сферических частиц – 64 %. Нарастающий характер плотности упаковки при малом количестве частиц в объеме системы обусловлен так называемым «эффектом стенок» – наличием повышенной пустотности между частицами вблизи стенок емкости. Данный

эффект уменьшается при повышении дисперсности частиц и увеличении их численной концентрации в системе.

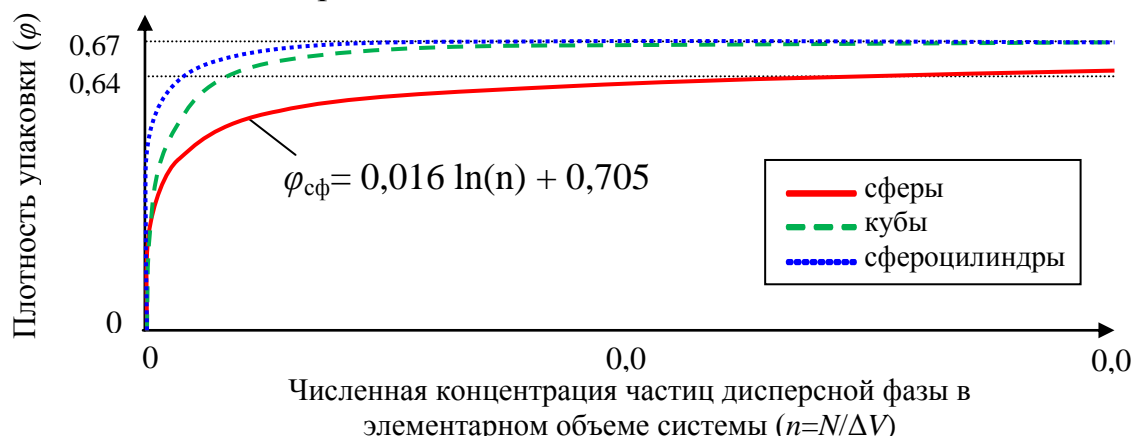


Рисунок 1.36 – Усредненные (для двух методов моделирования) зависимости плотности монодисперсной упаковки от численной концентрации частиц в элементарном объеме системы

График, представленный на рисунке 1.37, иллюстрирует количественные характеристики компьютерных моделей в виде степенных зависимостей количества частиц от их дисперсности (в безразмерных единицах) для трех типов частиц при условии полного заполнения емкости частицами.

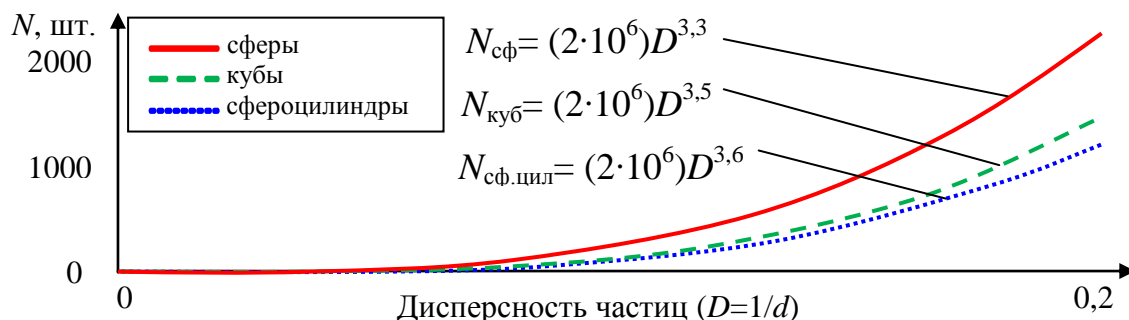


Рисунок 1.37 – Усредненные (для двух методов моделирования) зависимости количества частиц в монодисперсной упаковке от дисперсности частиц при условии полного заполнения емкости частицами

По модельным характеристикам можно утверждать, что предельное значение плотности упаковки (ϕ_{max}) для неупорядоченных монодисперсных систем постоянно и достигается при увеличении дисперсности частиц. Неупорядоченные упаковки сфер представляют наибольший практический интерес, поскольку сферическая форма частиц учитывается в большинстве методик подбора оптимального гранулометрического состава сыпучих материалов, в том числе в уравнениях оптимальных кривых распределения полидисперсных систем.

В отличие от монодисперсных упаковок, плотность упаковки бидисперсных систем зависит от двух параметров – соотношения диаметров крупных и мелких сфер ($\alpha = d_k/d_m$) и соотношения их объемных долей ($k = x_k/x_m$). На рисунке 1.38 представлены результаты вычислительного экс-

перимента, включающего 200 итераций – по 40 имитационных моделей для каждого из 5 параметров α . В моделях изменяется соотношение объемных долей k крупных и мелких частиц. Общее количество частиц во всех моделях составляет 5000. Компьютерные модели построены методом «сжатия-расталкивания».

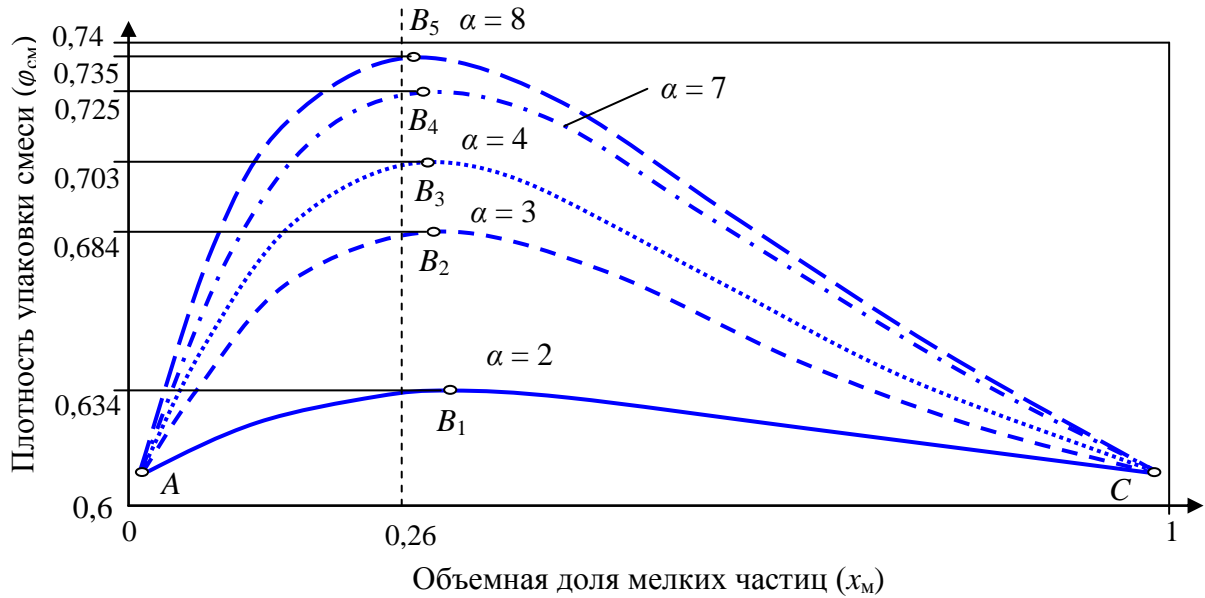


Рисунок 1.38 – Зависимости плотности бидисперсной упаковки от объемной доли мелких частиц и соотношения диаметров

Экстремум плотности упаковки бидисперсных сфер (рисунок 1.38) существенно зависит от параметра α – чем больше соотношение диаметра крупных частиц к диаметру мелких, тем выше экстремум плотности упаковки. Также, при уменьшении параметра α наблюдается тенденция смещения максимума плотности упаковки в сторону равного соотношения объемных долей крупных и мелких частиц. При высоких значениях параметра α объемная доля мелких частиц, соответствующая максимальной плотности упаковки, приближается к теоретическому значению пустотности крупных сферических частиц, равному 26 %.

Участки AB кривых плотности упаковки характеризуют состояние бидисперсной системы, при котором мелкие частицы заполняют пустоты между крупными, не раздвигая их. С позиции пространственно-структурной топологии, на данном участке система уплотненного типа переходит в систему заполненного типа (точки B). Дальнейшее увеличение объемной доли заполняющих частиц (участки BC) приводит к переходу системы заполненного типа в систему раздвинутого типа.

1.3.9. Моделирование плотных бинарных и тернарных упаковок сферических частиц с учетом поверхностного взаимодействия частиц

Усложним задачу моделирования полидисперсных упаковок, добавив дополнительные условия взаимодействия частиц. Основной задачей предлагаемого алгоритма является построение структурно-имитационных

моделей бинарных (два типоразмера) и тернарных (три типоразмера) упаковок частиц с учетом их поверхностного взаимодействия. Под поверхностным взаимодействием частиц в моделях понимается наличие поля притяжения у поверхности крупной частицы, при попадании в которое мелкая частица испытывает притяжение к ней. Силы поверхностного притяжения преобладают над силами тяжести мелких частиц, в результате чего происходит «налипания» мелких частиц на поверхность крупных. Построение моделей такого типа актуально для тонкодисперсных систем (порошковых материалов), в которых наблюдается существенное изменение баланса действия поверхностных и гравитационных сил. Последнее обстоятельство в большей степени определяет принцип формирования упаковки таких систем и их конечную плотность. Определяемым параметром упаковки будет являться среднее координационное число крупной частицы – количество мелких сферических частиц, окружающих одну крупную. Практический интерес представляет получение аналитической зависимости координационного числа от соотношения диаметров частиц и объемной доли заполняющих частиц в системе.

С целью исключения пристеночного эффекта кубической «емкости», предусмотрим возможность изменения формы заполняемого пространства. Введем в систему дополнительные сферы, уложенные в правильной последовательности, согласно основным типам правильных упаковок, таким образом, получим фрагмент правильной макроупаковки сфер большого диаметра, пустоты между которыми будут заполняться бидисперсной смесью сфер двух типоразмеров. Получаемая геометрическая модель будет соответствовать тернарной упаковке частиц. На рисунке 1.39 представлена блок-схема алгоритма моделирования упаковки бинарной системы сферических частиц с учетом поверхностного взаимодействия частиц.

Согласно алгоритму программы, пользователем задаются исходные параметры в безразмерных единицах: размер ребра элементарной ячейки (S); типоразмеры частиц (d_1' и d_2'); количество больших сфер (N_0), создающих каркас; количество частиц двух типоразмеров (N_1 и N_2); предельное количество слоев мелких частиц (k), «налипающих» на одну крупную; величина зазора (dL) между большими сферами макрокаркаса, кратная диаметру крупных заполняющих частиц; условные плотности заполняющих частиц (ρ_1 и ρ_2). В декартовой системе координат создается элементарная кубическая ячейка с размером ребра 50–100 безразмерных единиц. По выбору пользователя в ячейке создается условный скелет из больших сфер ($N_0 = 0, 2, 4, 6$ или 8), которые формируют конфигурацию порового пространства. Затем создается бинарный массив крупных (d_1') и мелких (d_2') сфер, имитирующий заполняющую дисперсную систему (рисунок 1.40).

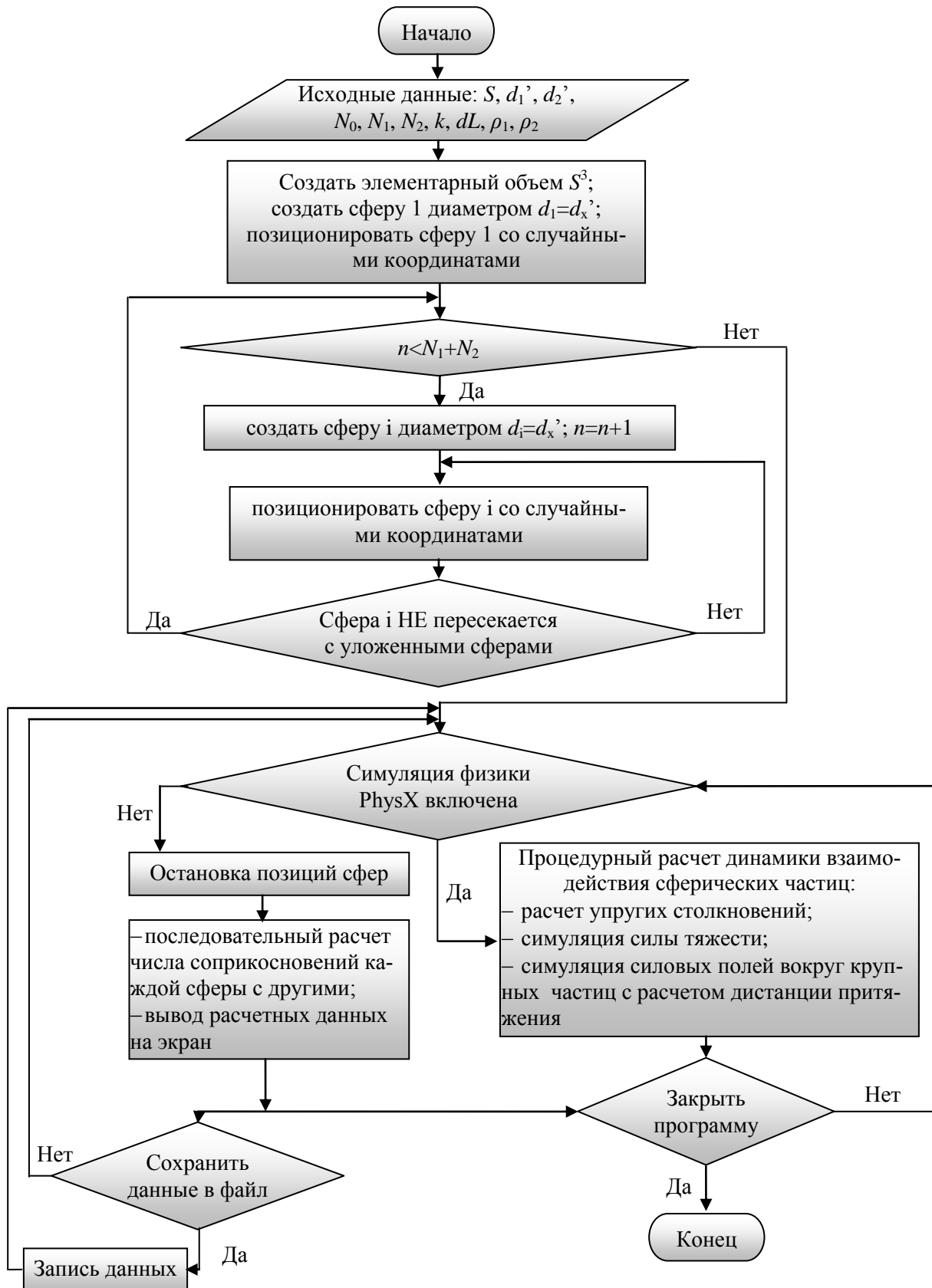


Рисунок 1.39 – Блок-схема алгоритма трехмерной реконструкции элементарной ячейки тонкодисперсной системы сферических частиц

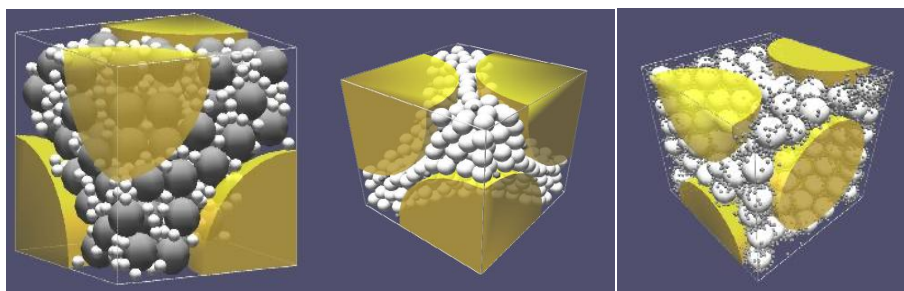


Рисунок 1.40 – Модели заполненного порового пространства при различных соотношениях диаметров частиц

Созданный массив сфер характеризуется заданными параметрами: диаметрами сфер, их количеством, а также условной плотностью частиц, которая в свою очередь определяет гравитационное воздействие на частицу. Процесс создания сферических частиц в ячейке производится в цикле до тех пор, пока число созданных сфер (n) не достигнет общего числа частиц в системе (N_1+N_2). Диаметру каждой новой сферы присваивается значение одного из двух исходных типоразмеров $d_i=d_X$. При $n \leq N_1$ генерируются сферы диаметром $X=1$, при $N_1 > n \leq N_1+N_2$, соответственно, $X=2$. Сферы распределяются случайным образом в пространстве макропоры, при этом проверяется условие пересечения поверхностей сфер путем циклического расчета расстояний между центрами всех сферических частиц системы. Одновременно на все сферы бинарной системы действуют физические законы – упругое соударение, гравитация и силы поверхностного притяжения. Пользователь может регулировать параметры модели – коэффициенты динамического и статического трения сфер, толщину слоя мелких частиц, притягиваемых к крупным ($k=1\dots 5$ слоев), а также, наличие сил тяжести, действующих на частицы, вычисляемых по их массам ($\rho_i d_i^3 \pi/6$) с учетом ускорения свободного падения.

После сбалансирования сил, действующих на систему сфер, пользователь отключает симуляцию физических законов динамики, переводя модель в статичное состояние, и в основном цикле программы последовательно рассчитывается количество контактов между частицами по схемам: «сфера d_1 – сфера d_2 – сфера d_1 », «сфера d_2 – сфера d_2 », «сфера d_1 – сфера d_1 ». Все параметры модели сводятся в таблицу и сохраняются в файл, откуда передаются в программу Microsoft Excel для статистической обработки. В процессе расчета программа отображает массовые и объемные доли компонентов. Задавая количество сфер можно приблизительно подобрать реальные вещественные пропорции компонентов. К примеру, чтобы построить модель тонкодисперсной части композиционного материала, необходимо знать плотности компонентов и их удельные поверхности, по которым можно вычислить средний диаметр эквивалентных сферических частиц:

$$d = 6/(\rho \cdot S_{\text{уд}}), \quad (1.47)$$

где ρ – истинная плотность дисперсной фазы, кг/м³; $S_{уд}$ – удельная поверхность дисперсной фазы, м²/кг.

Получаемые с использованием приведенного алгоритма структурно-имитационные компьютерные модели позволяют рассчитать суммарное число статичных соприкосновений крупных частиц с мелкими и определить среднее координационное число (Z) крупных частиц (рисунок 1.41).

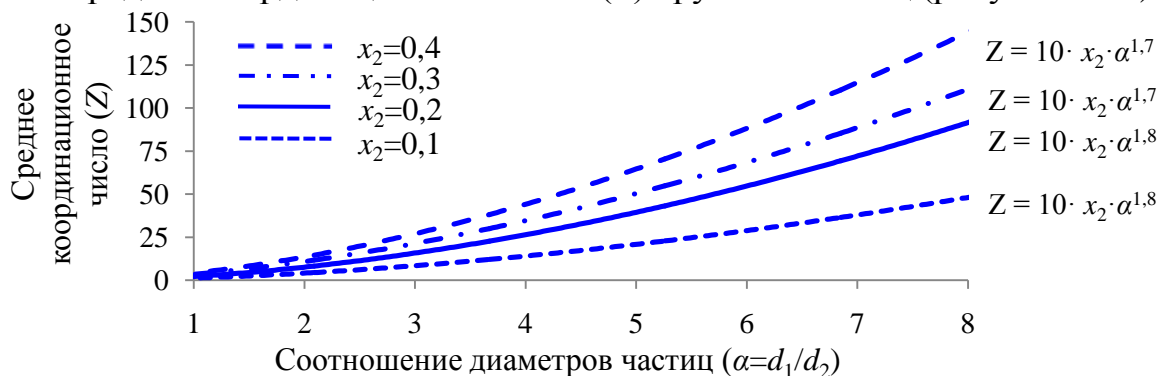


Рисунок 1.41 – Количество мелких сфер, окружающих одну крупную, в зависимости от соотношения диаметров частиц (α) и объемной доли мелких частиц в системе (x_2)

С увеличением параметра α , а также, с повышением объемной доли заполняющих частиц, среднее число контактов крупных сфер с мелкими, приходящееся на одну крупную сферу, возрастает по степенной зависимости. Уплотненное и заполненное состояния системы характеризуются средним числом контактов крупных частиц между собой, равным 8, что характерно для неупорядоченных статистически плотных монодисперсных упаковок. В процессе раздвижки данная характеристика стремится к нулю.

1.3.10. Моделирование плотных полидисперсных упаковок сферических частиц методом последовательного заполнения элементарного объема

Составим алгоритм построения структурно-имитационных моделей плотных полидисперсных (множество типоразмеров) частиц, позволяющий в случайном порядке сформировать геометрическую структуру из сфер уменьшающегося диаметра. Случайный характер заполнения элементарной ячейки сферами приближает модельную структуру к реальной системе частиц по степени хаотичности, а переход размеров частиц от большего к меньшему позволяет получить непрерывный зерновой состав системы.

Задачу алгоритма сформулируем следующим образом: «последовательно разместить в ограниченном кубическом объеме N -ое количество сферических частиц, при условии, что каждая новая частица будет занимать свободную позицию, не пересекая поверхности ранее созданных частиц». Основой алгоритма служит хаотичное распределение частиц, получаемое случайной генерацией начальной позиции каждой частицы. В про-

цессе добавления новых частиц в систему их координаты пересчитываются при обнаружении пересечения поверхностей частиц.

Для того чтобы, получить плотную структуру, необходимо использовать полидисперсные частицы, т.е. различного размера, при этом частицы укладываются, начиная с крупных в порядке уменьшения диаметров. Необходимо, чтобы каждая вновь созданная частица, как можно быстрее находила свободное место при своем максимальном диаметре. Если же такое условие не выполняется, диаметр частицы уменьшается, и частица вновь начинает поиск свободной позиции. Уменьшение диаметра частицы происходит до достижения заданного ограничения количества «фракций» (F), таким образом, если пользователем установлено 8 «фракций» в системе, то размер частицы может уменьшаться 8 раз, пока частица не займет свободную позицию. Данный принцип заполнения частицами пустот предполагает введение важного параметра – ограничения поиска свободной позиции (Lim) для каждой новой частицы до уменьшения её диаметра. Указанный параметр определяет число новых генераций координат частиц, до того как программа уменьшит диаметр частицы. После уменьшения диаметра счетчик генераций (Mov) обнуляется, и частица с уменьшенным диаметром начинает поиск свободной позиции заново, пока ограничение снова не будет достигнуто. Блок-схема алгоритма приведена на рисунке 1.42.

Особенность алгоритма заключается в последовательном расчете пересечений поверхностей для каждой отдельной частицы в цикле, что повышает производительность работы программы. В конце цикла помещается расчет основных параметров модели – количества упакованных частиц ($N_{упак}$), суммарных объемов фракций (V_s), объемных соотношений частиц, пустотности системы, величины удельной поверхности системы, а также выводится оценка производительности системы в кадр/сек., и время, затраченное на формирование модели в секундах.

Для достижения условия оптимальности – максимально плотной упаковки частиц при их размере, стремящемся к максимальной крупности, необходимо оперировать двумя параметрами: увеличивать количество частиц N модели и повышать ограничение поиска свободной позиции (Lim) каждой частицей. Увеличение данных параметров приведет к падению производительности программы, т.к. общее количество частиц зависит от ресурса памяти компьютера, а ограничение поиска свободной позиции увеличивает время расчета конечной позиции частицы. Параметр начальной крупности частиц d_0 или $d_{наиб}$ определяет крупность всех частиц модели. Данный параметр также влияет на величину конечной плотности упаковки системы. При увеличении d_0 объем быстро заполнится крупными частицами, создав ажурную пористую структуру. В таком случае необходимо увеличить количество заполняющих «фракций» (F), чтобы заполнить крупные поры мелкими частицами, и, следовательно, увеличить количест-

во частиц модели. Таким образом, для достижения минимальной пустотности (максимальной плотности), необходимо увеличивать все перечисленные параметры 3D модели.

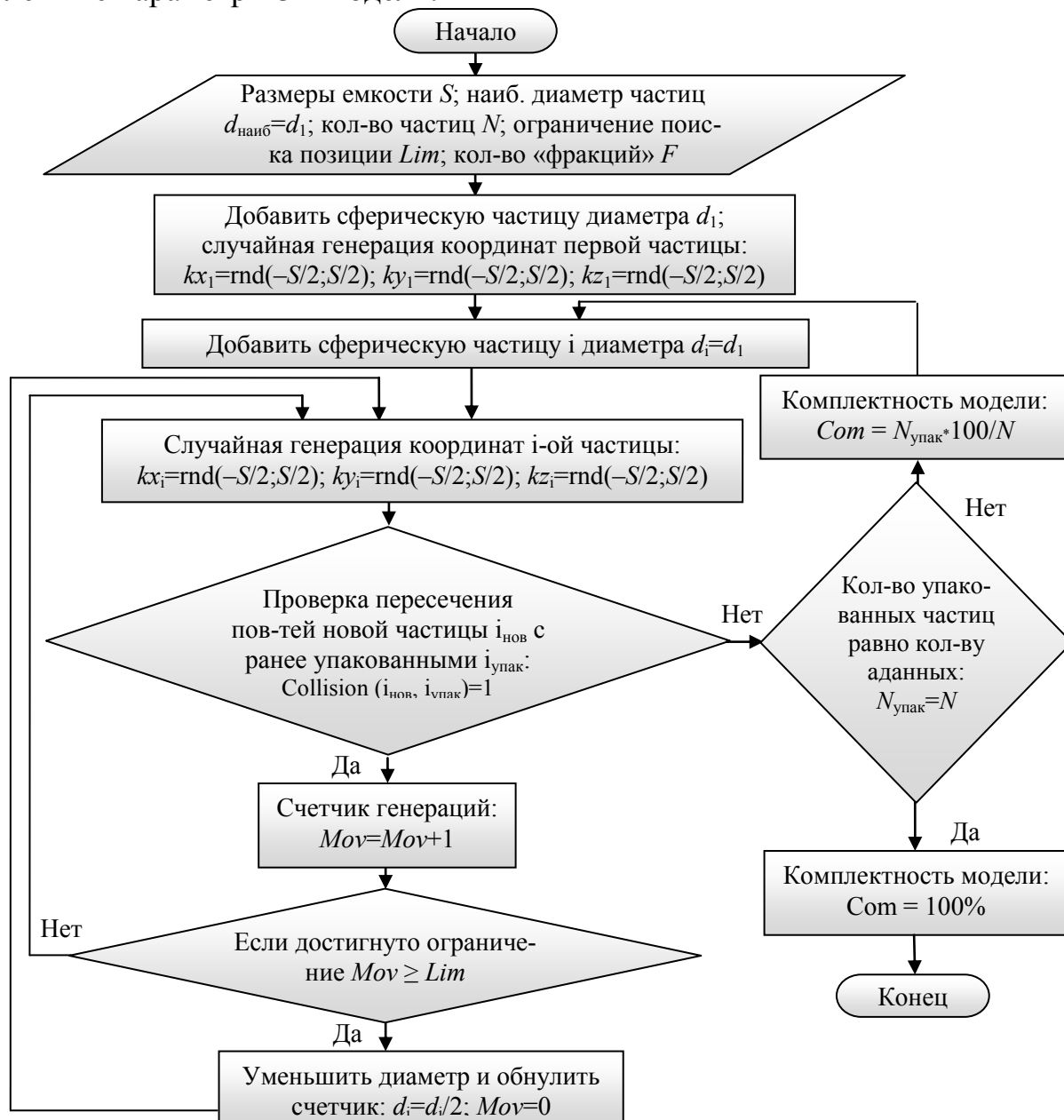


Рисунок 1.42 – Блок-схема алгоритма моделирования плотной упаковки полидисперсных сферических частиц в трехмерной элементарной ячейке методом последовательного заполнения пустот

Сформулированный алгоритм реализован в программе 3D-моделирования плотных полидисперсных упаковок. Анализ моделей хаотичного распределения полидисперсных сферических частиц позволяет математически обосновать предположение о влиянии оптимального распределения размеров частиц (см. подраздел 1.3.6.8) в системе на плотность упаковки системы. Примеры структурно-имитационных моделей плотных полидисперсных упаковок, построенных по предложенному алгоритму, были продемонстрированы на рисунке 1.25.

1.3.11. Компьютерное моделирование дисперсных структур, образованных в результате капиллярного взаимодействия частиц

Как оговаривалось в подразделе 1.3.2, приведенные алгоритмы ориентированы на структурно-имитационное моделирование упаковок идеализированных свободнодисперсных систем с твердой дисперсной фазой и газообразной дисперсионной средой. Данные модели позволяют судить лишь о геометрической конфигурации хаотичных структур, состоящих из тел правильной формы (как правило, рассматриваются эквивалентные сферы) без учета ряда факторов, характерных для реальных гранулированных материалов. К числу таких факторов относится присутствие практически в любом материале, находящемся в естественном состоянии, третьей фазовой составляющей – влаги. В пространстве и во времени структура любого материала непрерывно претерпевает изменения, этому, в частности, способствуют постоянное движение элементарных частиц, атомов, молекул, взаимодействие материала с окружающей средой. К примеру, почти все строительные материалы и их сырьевые смеси, по крайней мере, на микроуровне, представляют собой микрогетерогенные дисперсные системы, состоящие нескольких фаз, к числу которых относится жидкая составляющая. Характер структуры таких систем во многом определяется характером и величиной связей или сил сцепления между структурными элементами (микрочастицами, зёрнами и т.д.). В зависимости от характера этих связей в дисперсных системах выделяют прочные фазовые контакты в *конденсационных* (сращивание за счет химических взаимодействий аморфных частиц) или *кристаллизационных* (сращивание за счет химических взаимодействий частиц в виде кристаллов) структурах дисперсных материалов, непосредственные атомные контакты в *сухих порошках* и сравнительно слабые силы молекулярного взаимодействия, действующие между частицами через прослойки жидкой фазы, в *коагуляционных* структурах. Особенность структур второго и третьего видов – полная их обратимость по прочности. Конденсационные и особенно кристаллизационные структуры придают веществу повышенную прочность, хрупкость. Во многих случаях возможно сосуществование всех указанных видов структур. Например, при затворении цемента водой атомные (непосредственные) контакты переходят в коагуляционные, затем в фазовые. Этому переходу соответствует непрерывное изменение вязкости, модуля упругости и, главное, прочности дисперсных структур. Помимо рассмотренных видов взаимодействий и соответствующих структур, необходимо выделить такие важные взаимодействия, как *капиллярные*, проявляющиеся в трехфазных (твёрдое–жидкость–газ) дисперсных системах, к которым относится, к примеру, большинство сырьевых (бетонных, растворных, силикатных и т.п.) смесей для изготовления строительных композиционных материалов.

На рисунке 1.43 показано искривление жидкости в зазоре между двумя частицами сферической формы радиуса r_c , а также между сфериче-

ской частицей и плоскостью, приводящее к их стягиванию в результате растяжения жидкости и появления в ней отрицательного капиллярного давления (основная составляющая силы капиллярного сцепления) [11].

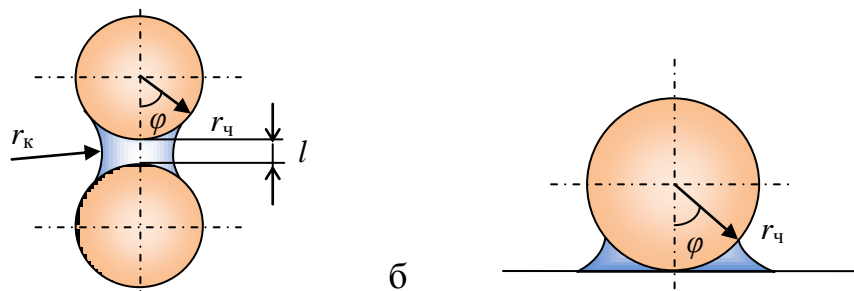


Рисунок 1.43 – Образование капиллярного мениска: между двумя сферическими частицами (а); между сферической частицей и плоскостью (б)

Со стороны искривленной поверхности жидкости действует сила, направленная внутрь, к центру кривизны. Она создает дополнительное давление, величина которого определяется формулой Лапласа:

$$\Delta p^+ = 2\sigma/r_{\kappa}, \quad (1.48)$$

где σ – коэффициент поверхностного натяжения жидкости, r_{κ} – радиус кривизны ее поверхности.

Например, для частиц песка сила «склеивания» рассчитывается следующим образом. Для простоты будем считать частичку шариком диаметром 300 микрон или $3 \cdot 10^{-2}$ см. Когда соприкасаются две песчинки, окружающие их водяные пленки сливаются, образуя нечто вроде цилиндра с донцами радиуса r (рисунок 1.44). Коэффициент поверхностного натяжения воды $\sigma = 72,5$ дин/см. Подставив эти данные в формулу Лапласа, получаем величину избыточного давления, сжимающего песчинки:

$$\Delta p^+ = 2 \cdot 72,5 / (1,5 \cdot 10^{-2}) \approx 10000 \text{ дин/см}^2$$

Вес песчинки создает «противодавление», усилие, которое растягивает пленку воды и отрывает песчинки друг от друга. Этот вес $P = mg = (4/3)\pi r^3 \rho g$, где ρ – плотность материала, g – ускорение силы тяжести. Он приложен к площади $S = \pi r^2$. Отсюда растягивающее давление:

$$\Delta p^- = P/S = (4/3) \cdot r \rho g \quad (1.49)$$

Подставив плотность кварца $2,4 \text{ г/см}^3$, $g \approx 10^3 \text{ см/с}^2$, получаем $\Delta p^- \approx 50 \text{ дин/см}^2$.

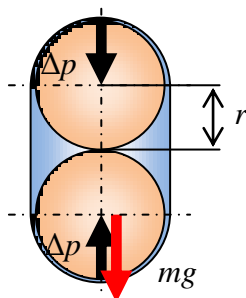


Рисунок 1.44 – Схема капиллярного сцепления двух шарообразных частиц
Сила, «склеивающая» песчинки, в 200 раз больше силы, их разрывающей. При уменьшении радиуса r частиц это соотношение очень резко

возрастает: вес частицы падает пропорционально r^3 , а сила сцепления растет линейно (рисунок 1.45). Чем меньше размеры частиц, тем сильнее они слипаются одна с другой и прилипают к различным поверхностям.

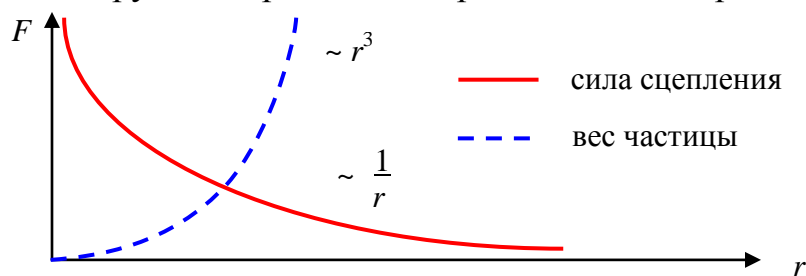


Рисунок 1.45 – Зависимость силы поверхностного натяжения от радиуса частиц

У крупных песчинок есть некий «критический размер», после превышения которого силы поверхностного натяжения перестают держать их вес. Его несложно отыскать, приравняв силы давления и растяжения $\Delta p^+ = \Delta p^-$, и подставив численные данные. Расчеты дают значение «критического» радиуса частицы примерно 0,6 мм [51].

Преобладание капиллярных сил над другими составляющими межчастичного взаимодействия особенно заметно для частиц размером более 10 мкм и вплоть до 1-2 мм. Именно действием сил капиллярного сцепления объясняются экстремальные зависимости насыпного объема, уплотняемости сырьевых смесей, а также прочности свежесформованных композитных изделий. Капиллярное сцепление проявляется также в капиллярно-пористых телах, структурные элементы которых в основном соединены другими связями некапиллярного характера. В этих телах силы капиллярного сцепления создают внутренние напряжения, вызывающие усадочные деформации, а также влияют на прочность материала.

Подобно тому, как образуются конденсационные или коагуляционные структуры, под действием сил капиллярного сцепления возникают *капиллярные структуры* (рисунок 1.46), которые затем накладывают свой отпечаток на строение и свойства материалов, полученных из таких систем.

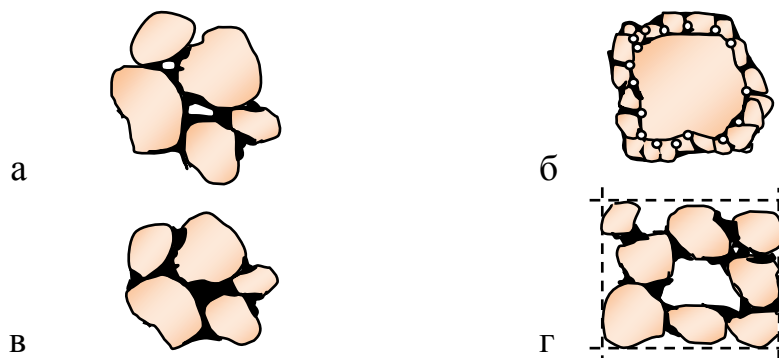


Рисунок 1.46 – Капиллярные структуры в дисперсных системах: а – трехфазная гранула; б – трехфазная глобула; в – двухфазная гранула; г – ячеисто-глобулярная структура

В полидисперсных трехфазных системах появление капиллярных менисков и возникновение сил капиллярного сцепления между тонкодисперсными и грубодисперсными частицами приводит к прилипанию тонкодисперсных частиц к грубодисперсным с образованием агрегатов-глобул. К примеру, в сырьевых смесях для производства строительных композиционных материалов, в результате процессов капиллярного структурообразования и наиболее важного из них – глобулирования, концентрация вяжущего вещества у поверхности заполнителей и в контактных зонах между ними выше средней концентрации в смеси. В этом одна из причин увеличения прочности и плотности материалов в указанных зонах. Более полное использование гидратационной и связующей активности вяжущего в пресованных строительных композитах (силикатный и бетонный кирпич полусухого прессования и т.п.) достигается на стадии приготовления сырьевых смесей при влажности, соответствующей их максимальному глобулированию. В этом случае жидкая фаза играет роль усиливающего компонента, упрочняя материал за счет перевода матричного цементирующего вещества из объемного состояния в пленочное с более высокими прочностью и структурированностью. Если для дисперсных систем и материалов определяющими являются контактные взаимодействия, характер и величина которых обуславливают соответствующий тип структуры (эффект поверхностей), то для грубозернистых систем наибольшее значение имеют закономерности укладки в зависимости от размеров и формы зерен (эффект масс) [11].

Сформулируем алгоритм построения компьютерной структурно-имитационной модели объемной ячеисто-глобулярной структуры. Для реализации алгоритма используем язык программирования Blitz Basic с возможностью трехмерной визуализации. Основой алгоритма послужит условие, исключающее пересечение поверхностей объектов в трехмерном пространстве.

Порядок построения модели заключается в следующем.

1. В бесконечном трехмерном пространстве создается объект сфера, имеющая координаты $x = 0, y = 0, z = 0$.

2. Вблизи поверхности случайно выбранной существующей частицы создается i -ая сферическая частица. Координаты новой сферической частицы задаются случайными. Таким образом, строится трехмерная цепочечная структура из сферических частиц. Создание новой частицы возможно только при отсутствии пересечения поверхностей частиц. Для этого рассчитываются расстояния между центрами сфер. Для двух трехмерных тел с координатами (x_1, y_1, z_1) и (x_2, y_2, z_2) , расстояние L_{1-2} между их центрами определяется по формуле:

$$L_{1-2} = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2} \quad (1.50)$$

Исходя из вычисленных расстояний между центрами сфер и величин их радиусов, формулируется условие отсутствия пересечений поверхно-

стей сфер: если расстояние между центром вновь созданной сферы и центром ранее возникшей сферы L_{1-2} меньше суммы их радиусов (r_1+r_2), то происходит новая генерация случайных координат текущего объекта.

3. Для моделирования процесса «налипания» мелких частиц на крупные вычисляются в каждом цикле расстояния от каждого мелкого объекта до каждого крупного и сравниваются между собой. Сближение мелкой частицы с крупной происходит в том случае, если расстояние до крупной минимальное из всех рассмотренных. Мелкие сферы изменяют свои координаты в сторону ближайших крупных. В процессе сближения объектов происходит проверка столкновений: мелких сфер с мелкими – со скольжением, мелких с крупными – с остановкой.

4. Моделируется процесс раздвижки крупных сфер. При «налипании» мелких частиц на поверхность крупных рассчитываются расстояния между крупными сферами. Вводится условие: если рассчитанные расстояния меньше двух диаметров мелких сфер (в зазоре между крупными), происходит изменение координат крупных сфер во взаимно противоположных направлениях.

5. По окончании процесса раздвижки мелкие сферы сближаются друг с другом, не отрываясь от поверхности крупных. Для этого вычисляются расстояния между ними и изменяются координаты мелких сфер относительно поверхности крупных. Силы сближения мелких сфер с крупными и мелких с мелкими (вдоль поверхности крупных) продолжают действовать.

Мелкие сферические частицы размещаются в зазорах между крупными сферами, тем самым имитируя образование арочных структур. Описанная процедура выполняется в цикле до момента достижения системой статичного состояния (рисунок 1.47). Полученная трехмерная модель отражает принцип капиллярного взаимодействия частиц. К полученной геометрической структуре частиц можно применить систему «стягивающих» (Δp^+) и «разрывающих» сил (Δp^-) с ввода коэффициента поверхностного натяжения для конкретной жидкости и истинной плотности для конкретного материала.

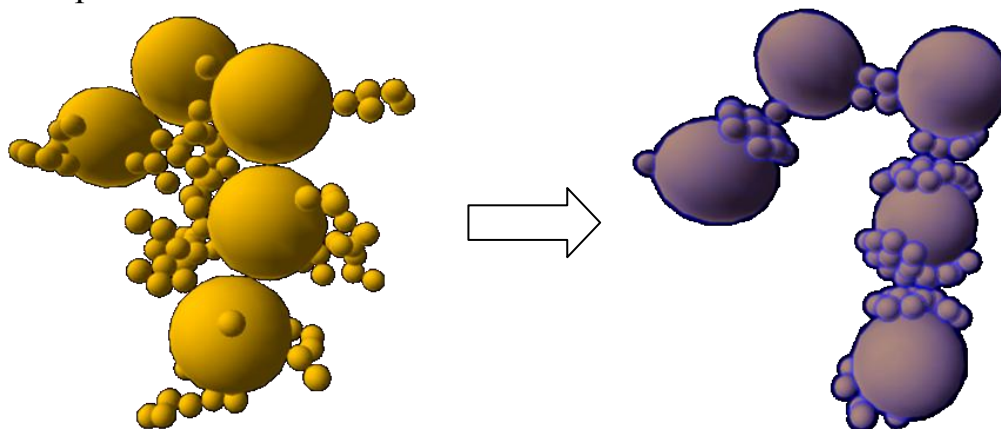


Рисунок 1.47 – Процесс моделирования ячеисто-глобулярной структуры

Глава 2. Компьютерный анализ и математическая обработка экспериментальных данных

2.1. Аппроксимация эмпирических распределений

2.1.1. Понятие функции распределения

Практически любая техническая наука основана на эмпирическом (опытном) знании, следовательно, получение данных о том или ином объекте исследования неизбежно сопровождается фактором случайности. Под фактором случайности мы подразумеваем заведомо неизвестную совокупность опытных данных, которую необходимо представить в аналитической форме.

Продолжая разговор об аналитическом описании механических систем, в частности дискретных систем, стоит отметить, что наиболее универсальной характеристикой случайной величины является *функция распределения*.

Функция распределения случайной величины (она же интегральная функция распределения вероятностей) – это вероятность того, что случайная величина (назовём её ζ) примет значение меньшее, чем конкретное числовое значение X :

$$F(X) = P(\zeta < X) \quad (2.1)$$

Для дискретной случайной величины функция распределения вычисляется для каждого значения как сумма вероятностей, соответствующих всем предшествующим значениям случайной величины.

Касательно дискретных систем в подразделе 1.3.3 упоминалось, что функции распределения используются для представления результатов дисперсионного анализа гранулированных материалов. В том же подразделе описывается принцип построения дифференциальных гистограмм и кривых распределения частиц по размерам, позволяющих производить статистический анализ гранулометрического состава сыпучих материалов. Ввиду того, что современные методы обработки эмпирических данных основываются на применении программно-вычислительных средств, далее мы будем рассматривать вопросы, касающиеся разработки алгоритмов компьютерного анализа эмпирических распределений.

Рассмотрим поэтапно процесс статистической обработки данных с применением алгоритмических методов на примере дисперсионного анализа гранулированного материала. Как уже отмечалось выше, результатом дисперсионного анализа является набор данных о размерах частиц и вероятности их присутствия в составе гранулированного материала. Получаемые данные носят дискретный характер, другими словами, измерения производятся с определенным шагом. В случае ситового анализа шагом дискретности измерений является апертура стандартных сит, например, 5,0; 2,5; 1,25; 0,63; 0,315; 0,25; 0,125; 0,063 мм. Это значит, что в процессе анализа фиксируются остатки пробы материала на указанных ситах, при этом промежуточные значения размеров зерен между двумя апертурами оста-

ются неизвестными. Для построения интегральной кривой отсева полученных данных достаточно, а промежуточные значения распределения размеров определяются линейной интерполяцией (дискретные точки кривой соединяются прямыми отрезками). Рисунок 2.1 иллюстрирует кривую отсева гранулированного материала, построенную по данным ситового анализа.

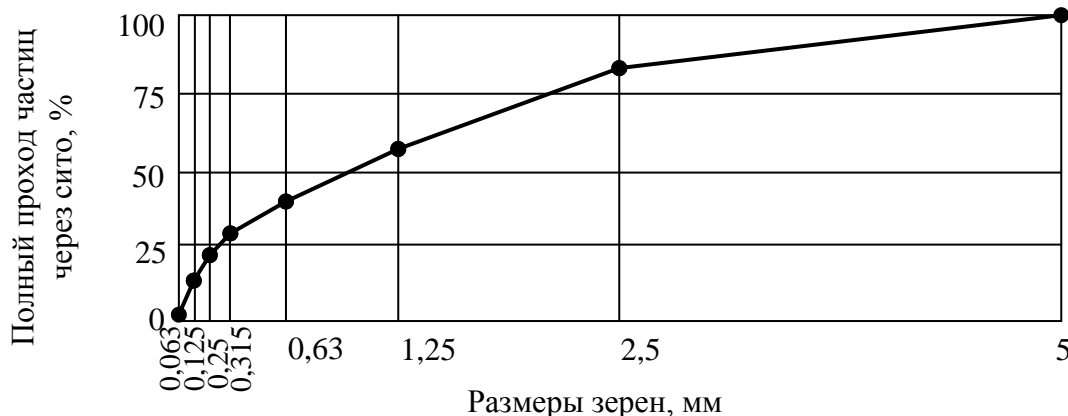


Рисунок 2.1 – Кривая отсева материала по данным ситового анализа

Таким образом, построив интегральную кривую отсева, мы приблизительно описываем зерновой состав материала с допущением, что каждая фракция гранулированного материала, заключенная между двумя апертурами, например 1,25-2,5 мм, описывается линейным распределением размеров частиц. Однако фактически распределение размеров зерен внутри одной фракции имеет разброс. Точность определения гранулометрического состава материала зависит от конкретного применяемого экспериментального метода дисперсионного анализа. Ситовой анализ в данном случае дает наиболее грубую оценку зернового состава материала, ввиду большого шага дискретности. Данный тип анализа применяется к грубодисперсным материалам, например, природным гранулированным материалам (щебень, песок). Для исследования тонкодисперсных материалов (порошков, пыли) применяются более точные методы дисперсионного анализа, например, лазерный дифракционный анализ. Данный метод анализа характеризуется малым шагом дискретности измерений, а в результате анализа получается больше выходных данных. Так, например, для пробы порошка цемента в результате лазерного анализа получают кривую распределения, включающую порядка 50-100 экспериментальных точек.

Когда речь идет о дифференциальном распределении частиц по размерам, а именно о получении дифференциальной функции распределения, возникает задача аппроксимации эмпирического распределения значений плавной кривой. Рисунок 2.2 наглядно демонстрирует результат построения дифференциальных гистограмм распределения частиц по размерам (в и г) для линейной (а) и сплайновой (б) аппроксимации интегральной кривой распределения. Масштаб оси ординат дифференциальной гистограммы в 4 раза больше масштаба оси ординат интегрального графика.

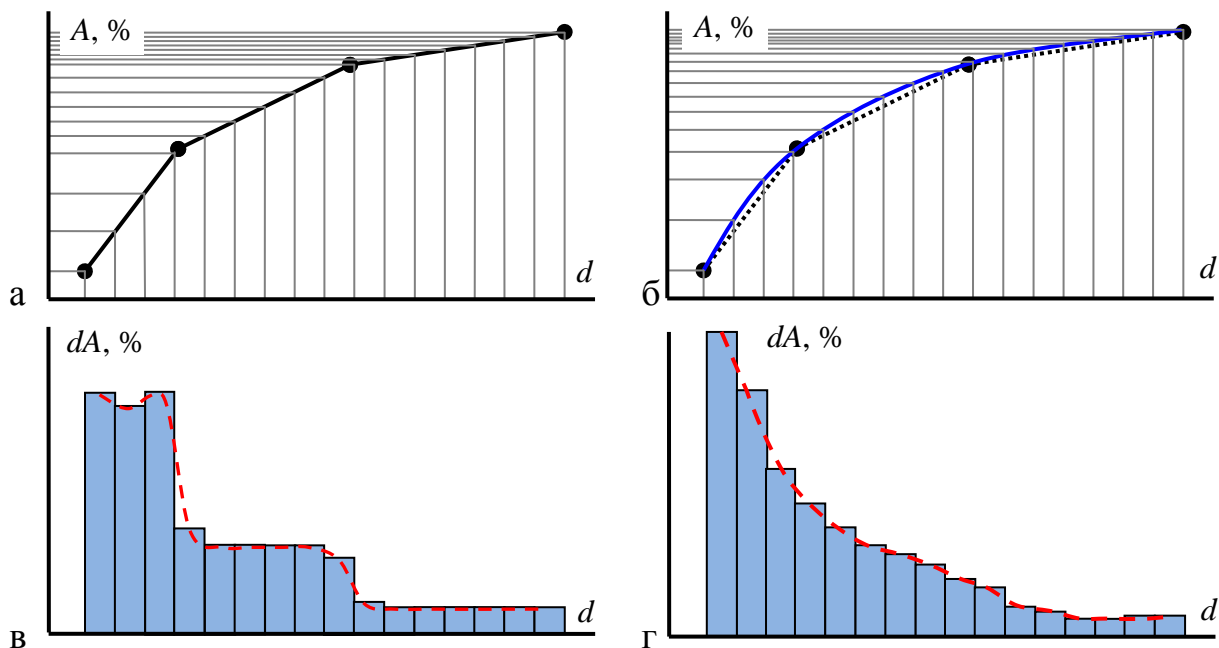


Рисунок 2.2 – Пример построения дифференциальной гистограммы распределения частиц по размерам для двух случаев аппроксимации интегральной кривой

Как видно из представленного рисунка, сплайновая аппроксимация интегральной кривой распределения позволяет построить гистограмму дифференциального распределения, которая носит более закономерный характер, в отличие от первого способа аппроксимации данных. Далее остановимся на понятии «аппроксимация».

Аппроксимация (от лат. *арргохіто* – приближаюсь) – замена одних математических объектов другими, в том или ином смысле близкими к исходным. Аппроксимация позволяет исследовать числовые характеристики или качественные свойства объекта, сводя задачу к изучению более простых или удобных объектов (например, таких, характеристики которых легко вычисляются или свойства которых уже известны) [34].

Условно аппроксимацию можно разделить на два вида:

1. строгая теория математической аппроксимации;
2. физическая (техническая) аппроксимация.

Строгая теория математической аппроксимации включает в себя следующие методы аппроксимации [17]:

1. полиномами (многочленами);
2. сплайнами;
3. отрезками ряда Фурье;
4. полиномами по ортогональным многочленам;
5. собственными функциями краевых задач.

2.1.2. Аппроксимация данных сплайнами Безье

В рассмотренном выше примере рассматривается сплайновая аппроксимация интегрального распределения.

Сплайн (от англ. spline, – гибкое лекало, гибкая плазовая рейка – полоса металла, используемая для черчения кривых линий) – функция, область определения которой разбита на конечное число отрезков, на каждом из которых сплайн совпадает с некоторым алгебраическим многочленом. Максимальная степень из использованных полиномов называется *степенью сплайна*. Разность между степенью сплайна и получившейся гладкостью называется *дефектом сплайна*. Например, непрерывная ломаная есть сплайн степени 1 и дефекта 1. В современном понимании сплайны – это решения многоточечных краевых задач сеточными методами.

Чтобы наглядно продемонстрировать приведенные понятия сплайна, степени сплайна и дефекта сплайна, рассмотрим следующую задачу: имеется совокупность экспериментальных данных, необходимо максимально точно аппроксимировать последовательность данных полиномиальной функцией n -го порядка с достоверностью не менее 95 %. В качестве базового выбираем метод полиномиальной аппроксимации с помощью так называемого сплайна Безье. Данный метод наиболее актуален для реализации в компьютерном алгоритме.

Сплайны (кривые) Безье или Кривые Бернштейна-Безье разработаны в 60-х годах XX века независимо друг от друга Пьером Безье из автомобилестроительной компании «Рено» и Полем де Кастельжо из компании «Ситроен», где применялись для проектирования кузовов автомобилей [30].

Кривая Безье относится к полиномам третьего порядка и уникально определяется четырьмя точками. Обозначим эти точки p_0 (начальная), p_1 , p_2 (две управляющие) и p_3 (конечная). Обозначенные точки будут иметь координаты: (x_0, y_0) , (x_1, y_1) , (x_2, y_2) и (x_3, y_3) . Полином третьего порядка, задающий координаты точек в двумерном пространстве, выражается параметрическими уравнениями общего вида:

$$\begin{aligned} x(t) &= a_x \cdot t^3 + b_x \cdot t^2 + c_x \cdot t + d_x \\ y(t) &= a_y \cdot t^3 + b_y \cdot t^2 + c_y \cdot t + d_y \end{aligned} \quad (2.2)$$

где $a_x, b_x, c_x, d_x, a_y, b_y, c_y$ и d_y – константы, а параметр t меняется от 0 до 1. Любая кривая Безье уникально определяется этими 8 константами. Их значения зависят от координат четырех точек, задающих кривую. Цель этой задачи – вывести уравнения для расчета восьми констант по заданным координатам четырех точек.

Первое допущение для вывода этих уравнений заключается в том, что кривая Безье начинается в точке с координатами (x_0, y_0) при $t = 0$:

$$x(0) = x_0; \quad y(0) = y_0$$

Даже такое простое допущение позволяет продвинуться в выводе уравнений для констант. Подставив в параметрические уравнения $t = 0$, получим:

$$x(0) = d_x; \quad y(0) = d_y$$

Это означает, что две из констант – это просто координаты начальной точки:

$$d_x = x_0 \quad (2.3)$$

$$d_y = y_0 \quad (2.4)$$

Второе допущение, касающееся кривой Безье: она заканчивается в точке с координатами (x_3, y_3) при $t = 1$:

$$x(1) = x_3; \quad y(1) = y_3$$

Подставив в параметрические уравнения 3.2 вместо t единицу, получаем:

$$x(1) = a_x + b_x + c_x + d_x; \quad y(1) = a_y + b_y + c_y + d_y$$

что означает наличие следующей связи между константами и координатами конечной точки:

$$a_x + b_x + c_x + d_x = x_3 \quad (2.5)$$

$$a_y + b_y + c_y + d_y = y_3 \quad (2.6)$$

Остальные допущения касаются первых производных параметрических уравнений, описывающих угол наклона кривой. Первую производную параметрического уравнения общего вида, задающего полином третьего порядка как функцию переменной t , можно записать так:

$$x'(t) = 3a_x \cdot t^2 + 2b_x \cdot t + c_x; \quad y'(t) = 3a_y \cdot t^2 + 2b_y \cdot t + c_y$$

Нас, в частности, интересует угол наклона кривой в конечных точках. Как известно, прямая, проведенная из начальной точки через первую управляющую точку, проходит по касательной к кривой Безье и направлена в ту же сторону, что и кривая. Обычно эту прямую задают параметрическими уравнениями:

$$x(t) = (x_1 - x_0) t + x_0; \quad y(t) = (y_1 - y_0) t + y_0$$

где t изменяется от 0 до 1. Но можно задать ее иначе:

$$x(t) = 3(x_1 - x_0) t + x_0; \quad y(t) = 3(y_1 - y_0) t + y_0$$

где t изменяется от 0 до 1/3. Почему именно 1/3? Дело в том, что длина той части кривой Безье, по касательной к которой проходит прямая, проведенная из точки p_0 через p_1 , направленная в ту же сторону, что и кривая, равна 1/3 от общей длины кривой. Первые производные модифицированных параметрических уравнений можно записать так:

$$x'(t) = 3(x_1 - x_0); \quad y'(t) = 3(y_1 - y_0)$$

Если нужно рассчитать по этим уравнениям угол наклона кривой Безье при $t = 0$, то:

$$x'(0) = 3(x_1 - x_0); \quad y'(0) = 3(y_1 - y_0)$$

Подставив $t = 0$ в уравнение первой производной полинома третьего порядка, получим:

$$x'(0) = c_x; \quad y'(0) = c_y$$

Это позволяет записать равенство:

$$c_x = 3(x_1 - x_0) \quad (2.7)$$

$$c_y = 3(y_1 - y_0) \quad (2.8)$$

Последнее допущение таково: прямая, проведенная из второй управляющей точки через конечную, является касательной к кривой Безье в ее конечной точке и направлена в ту же сторону, что и кривая. Иначе говоря:

$$x'(1) = 3(x_3 - x_2); \quad y'(1) = 3(y_3 - y_2)$$

Из уравнений общего вида следует, что:

$$x'(1) = 3a_x + 2b_x + c_x; \quad y'(1) = 3a_y + 2b_y + c_y$$

поэтому:

$$3a_x + 2b_x + c_x = 3(x_3 - x_2) \quad (2.9)$$

$$3a_y + 2b_y + c_y = 3(y_3 - y_2) \quad (2.10)$$

Выражения 2.3, 2.5, 2.7 и 2.9 дают четыре уравнения с четырьмя неизвестными, которые можно решить относительно a_x , b_x , c_x и d_x , выразив их через x_0 , x_1 , x_2 и x_3 . После ряда алгебраических преобразований, получаем:

$$a_x = -x_0 + 3x_1 - 3x_2 + x_3$$

$$b_x = 3x_0 - 6x_1 + 3x_2$$

$$c_x = 3x_0 + 3x_1$$

$$d_x = x_0$$

Уравнения 2.4, 2.6, 2.8 и 2.10 позволяют сделать то же самое для коэффициентов y . После этого можно подставить константы обратно в параметрическое уравнение общего вида для полинома третьего порядка:

$$x(t) = (-x_0 + 3x_1 - 3x_2 + x_3) \cdot t^3 + (3x_0 - 6x_1 + 3x_2) \cdot t^2 + (3x_0 + 3x_1) \cdot t + x_0$$

$$y(t) = (-y_0 + 3y_1 - 3y_2 + y_3) \cdot t^3 + (3y_0 - 6y_1 + 3y_2) \cdot t^2 + (3y_0 + 3y_1) \cdot t + y_0$$

В сущности, на этом можно было бы закончить. Но лучше раскрыть скобки и привести подобные слагаемые. В итоге получатся более элегантные параметрические уравнения, с которыми проще работать:

$$x(t) = (1-t)^3 \cdot x_0 + 3t(1-t)^2 \cdot x_1 + 3t^2(1-t) \cdot x_2 + t^3 \cdot x_3 \quad (2.11)$$

$$y(t) = (1-t)^3 \cdot y_0 + 3t(1-t)^2 \cdot y_1 + 3t^2(1-t) \cdot y_2 + t^3 \cdot y_3 \quad (2.12)$$

Уравнения 3.11 и 3.12 позволяют построить кривую Безье в декартовых координатах.

На первом этапе разработки компьютерного алгоритма аппроксимации экспериментальных данных мы будем задавать кривую Безье визуальным способом, перемещая ее узловые точки в декартовой системе координат графической области экрана. В качестве средства разработки выбираем среду программирования Microsoft Visual Basic 6.0. На рисунке 2.3 представлена форма графического интерфейса, включающая графическое поле для построения кривых, и панель параметров, расположенную в левой части формы. Точки P_0 и P_3 – начальная и конечная точки кривой соответственно, P_1 и P_2 – управляющие точки (или точки направляющих отрезков).

С помощью указателя мыши пользователем задаются положения точек P_0 , P_1 , P_2 и P_3 сплайна Безье. Центр системы координат можно смещать, перемещая указатель мыши в графической области при нажатой правой кнопке мыши.

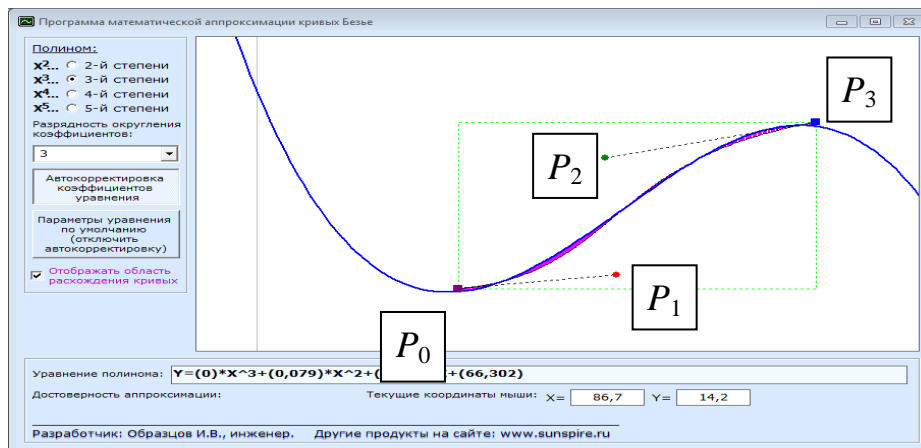


Рисунок 2.3 – Графический интерфейс пользователя программы математической аппроксимации кривой Безье

Далее проведем кривую полиномиальной функции n -го порядка по кривой построенного сплайна Безье. На панели параметров в левой части экрана пользователем выбирается степень n полиномиальной функции. От данного параметра зависит, сколько опорных точек будет выделено на сплайне Безье, через которые проходит полиномиальная кривая, и, следовательно, точность приближения полиномиальной кривой к сплайну, также будет зависеть от выбранной степени полинома.

Принцип построения полиномиальной кривой базируется на вычислении коэффициентов полинома:

$$y(x) = C_1 \cdot x^{n-1} + C_2 \cdot x^{n-2} + C_3 \cdot x^{n-3} + \dots + C_{i-1} \cdot x^{n-i} + C_i \cdot x + C_0, \quad (2.13)$$

где n – число точек на сплайне Безье, через которые проходит полиномиальная кривая.

Для вычисления коэффициентов C_i необходимо задать опорные точки на сплайне Безье, координаты которых вычисляются по известным параметрическим уравнениям Безье (2.11 и 2.12), и подставить координаты опорных точек (x_i, y_i) в уравнение (2.11). В таком случае мы получаем систему линейных уравнений с n неизвестными:

$$\begin{cases} y_1 = a_{n-1}x_1^{n-1} + a_{n-2}x_1^{n-2} + \dots + a_{n-i}x_1^{n-i} + a_1x_1 + a_0 \\ y_2 = a_{n-1}x_2^{n-1} + a_{n-2}x_2^{n-2} + \dots + a_{n-i}x_2^{n-i} + a_1x_2 + a_0, \\ y_i = a_{n-1}x_i^{n-1} + a_{n-2}x_i^{n-2} + \dots + a_{n-i}x_i^{n-i} + a_1x_i + a_0 \end{cases} \quad (2.14)$$

где a_i – коэффициенты системы уравнений, a_0 – свободные члены.

В представленном алгоритме система линейных уравнений вида (2.14) решается методом Крамера, подразумевающим преобразование системы уравнений в матрицы 3×3 , 4×4 , 5×5 и 6×6 для полиномиальной функции 2, 3, 4 и 5-го порядков, соответственно. Программно вычисления производятся с использованием двумерных массивов, в которые записываются столбцы основной и вспомогательных матриц Крамера, после чего производится вычисление их определителей, и находятся коэффициенты полиномиального уравнения.

В программе реализован алгоритм автоматической корректировки коэффициентов уравнения полинома. Сущность алгоритма заключается в циклической проверке максимального расхождения полиномиальной кривой и кривой Безье в направлении оси Y (рисунок 2.4). Степень сплайна Безье e_s равна 3, а степень полиномиальной кривой e_p выбирается пользователем (2, 3, 4 или 5). Теоретически, при $e_p \geq e_s$ расхождение кривых сводится к нулю.

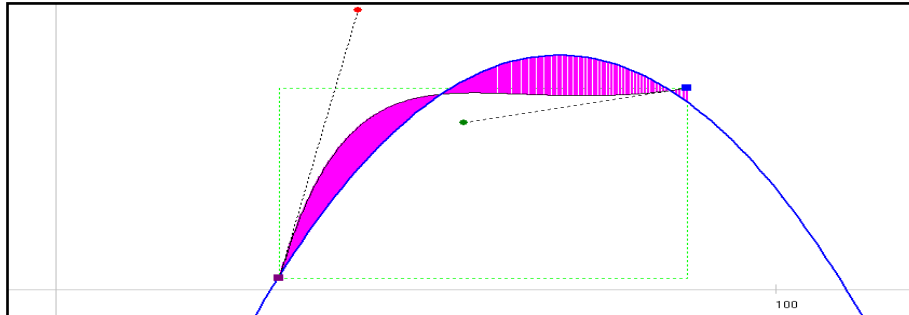


Рисунок 2.4 – К определению степени достоверности аппроксимации (до пересчета координат опорных точек)

С заданным шагом (по оси абсцисс) вычисляются длины вертикальных отрезков, соединяющих кривую полинома и кривую Безье (закрашенная область на рисунке 2.4). Длины указанных отрезков записываются в одномерный массив, после чего определяется и фиксируется наибольшая длина отрезка (максимальная величина расхождения кривых Δ). С помощью генератора случайных чисел задаются новые координаты опорных точек на кривой Безье, тем самым происходит их случайное смещение по сплайну, при этом каждая итерация заканчивается пересчетом величины Δ . Если после новой итерации величина Δ уменьшилась по сравнению с предшествующей, то полиномиальная кривая перестраивается. Визуально мы наблюдаем сближение полиномиальной кривой со сплайном Безье (рисунок 2.5).

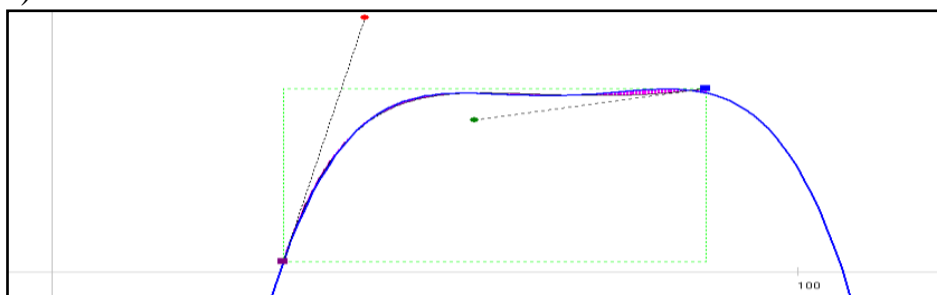


Рисунок 2.5 – К определению степени достоверности аппроксимации (максимальное приближение аппроксимирующей кривой к сплайну Безье)

Разработанный алгоритм является эффективным инструментом для обработки эмпирических данных с использованием сплайнов. К примеру, если речь идет об интегральных кривых распределения, сплайном Безье можно задавать аппроксимирующую функцию, которая будет проходить через экспериментальные точки. При этом, конфигурация сплайна может задаваться не только ручным способом с помощью конечных и управляю-

щих точек, а процедурно, путем проверки расходимости координат экспериментальных точек и точек, выделенных на сплайне с равной абсциссой. В конечном итоге мы получаем полиномиальную функцию n -й степени, которая будет максимально точно описывать последовательность эмпирических данных (например, как на рисунке 2.6).

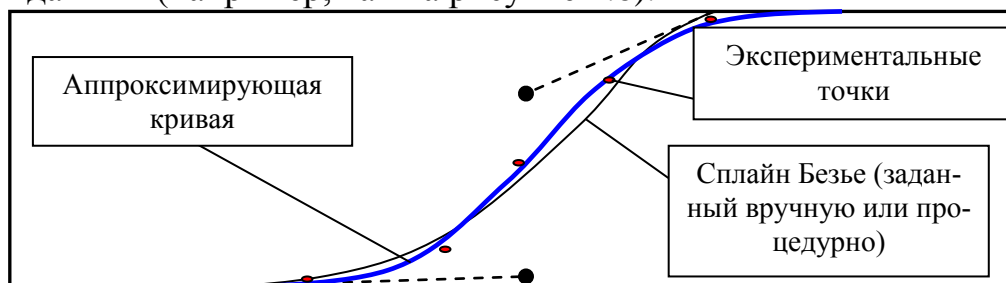


Рисунок 2.6 – Схематическое представление процесса аппроксимации эмпирических данных

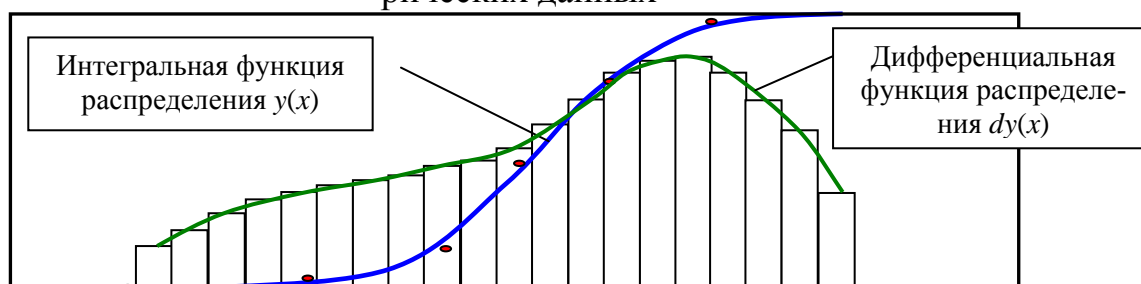


Рисунок 2.7 – Построение дифференциальной гистограммы распределения по аппроксимирующей полиномиальной кривой

В случае аппроксимации интегральных кривых распределения на выходе работы алгоритма мы получаем функцию $y(x)$, дифференцирование которой позволит построить закономерную дифференциальную гистограмму распределения $dy(x)$ (например, как на рисунке 2.7).

2.1.3. Алгоритмизация обработки данных дисперсионного анализа

Рассмотрим графоаналитическое представление результатов лазерного дифракционного анализа порошкового материала на примере простой компьютерной программы, разработанной в среде программирования Microsoft Visual Basic 6.0, основной задачей которой будет обработка дискретных значений дифракционного анализатора, построение сплайновой аппроксимированной интегральной кривой распределения, а также дифференциальной гистограммы распределения частиц по размерам в декартовой системе координат.

Исходными данными для расчета являются количество экспериментальных точек – дискретных значений N , дискретные значения размеров частиц d_i (мм, мкм, нм), а также «полные проходы» частиц Q_i (%) или вероятности нахождения в порошке частиц, размер которых меньше конкретного d_i . Исходные данных представляются в виде электронной таблицы, имеющей возможность заполнения путем ввода с клавиатуры.

Аппроксимация интегральной кривой производится путем построения периодического сплайна Безье, для этого соблюдается условие совпадения последней точки одного криволинейного участка с первой точкой последующего криволинейного участка кривой распределения, начиная с точки № 1, заканчивая точкой № 22, ввиду чего ввод данных в электронную таблицу необходимо осуществлять в порядке возрастания числовых значений слева направо. Построение гранулометрического графика производится в логарифмическом масштабе оси абсцисс (рисунок 2.8), что позволяет более удобно рассматривать широкий диапазон значений размеров частиц от мелких (доли микрона) до крупных (десятки микрометров).

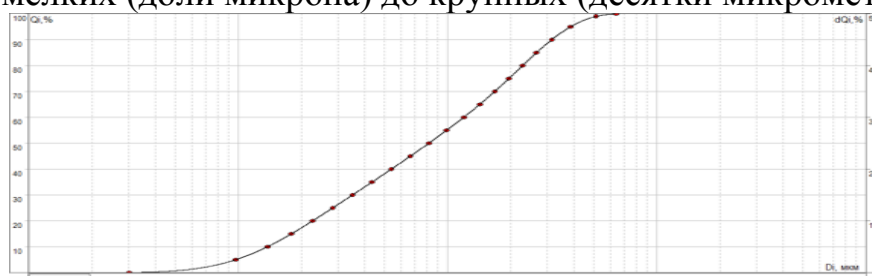


Рисунок 2.8 – Аппроксимированная интегральная кривая распределения

Координаты точек сплайновой кривой заносятся в двумерный массив, после чего пользователем задается количество интервалов размеров частиц, по которым далее строится дифференциальная гистограмма распределения размеров частиц, путем нахождения точек пересечения кривой сплайна с вертикальными границами столбиков гистограммы. Количество задаваемых интервалов может меняться от 20 до 300 (рисунок 2.9).

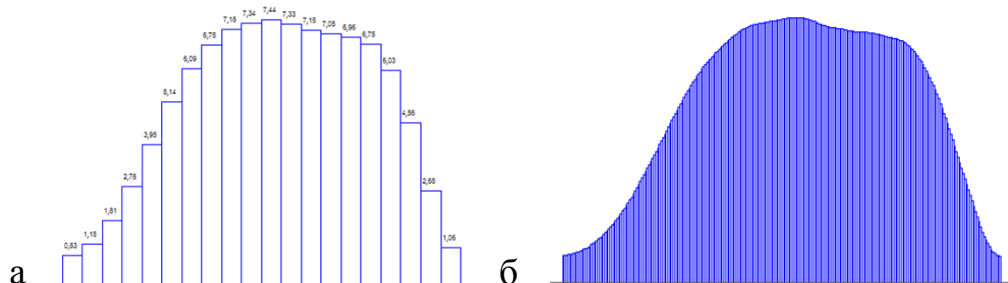


Рисунок 2.9 – Дифференциальная гистограмма распределения размеров частиц при количестве интервалов, равном 20 (а) и 300 (б)

На рисунке 2.10 представлен вид окна программы после построения гранулометрического графика. Подобные методики аппроксимации данных применяются в программном обеспечении, поставляемом разработчиками дифракционных анализаторов частиц. Данные программы ориентированы на прямое считывание данных с измерительного прибора с последующим составлением подробного отчета, включая таблицы данных, гранулометрические графики и расчетные статистические характеристики распределения частиц (моды, средние значения, фактор формы кривой и т.п.).

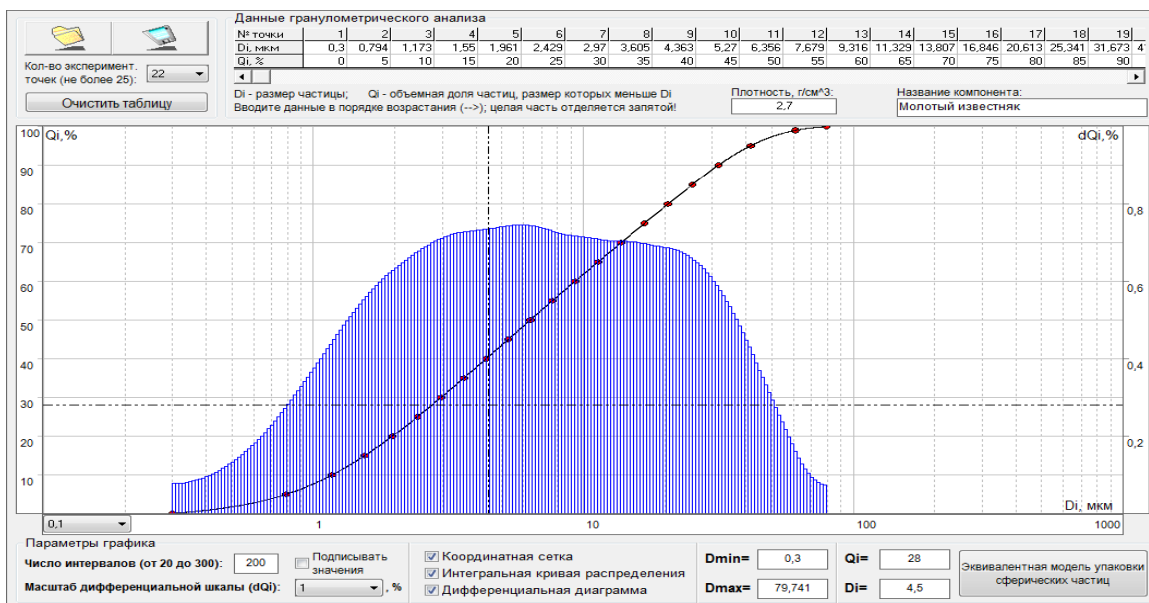


Рисунок 2.10 – Вид окна программы после построения гранулометрического графика

Усложним алгоритм программы, добавив дополнительную функцию, позволяющую произвести расчет эквивалентного зернового состава, учитывая, что все частицы материала имеют правильную сферическую форму. Данная функциональная особенность алгоритма позволит перейти от абстрактного вероятностного описания состава материала к его приближенным структурным характеристикам, например, к суммарной удельной поверхности частиц и их количеству в единице объема.

Расчет количества эквивалентных сферофракций производится автоматически до того момента, пока дифференциальные гистограммы распределения исходного состава и эквивалентного полностью не совпадут. Процесс пересчета исходного зернового состава в модельный заключается в последовательном вычислении количества частиц каждого интервала размеров. Расчетные данные заносятся в таблицу зернового состава, а на графике другим цветом отображается дифференциальная гистограмма распределения сфер по размерам. В блоке параметров в левой части окна программы отображаются основные характеристики модельного зернового состава. Процесс расчета заканчивается, когда дифференциальные гистограммы исходного состава и модели полностью совпадут. Основной выходной характеристикой модели зернового состава сферических частиц является расчетная удельная поверхность, вычисленная с учетом плотности вещества ($\text{кг}/\text{м}^2$).

2.2. Сочетание эмпирических распределений

2.2.1. Практическая значимость сложения эмпирических распределений

Рассмотрим следующую задачу. Имеется несколько дискретных систем – гранулированных материалов, характеризующихся индивидуальным распределением частиц по размерам. Необходимо смешать эти материалы

в определенных массовых (или объемных) пропорциях, и определить характер распределения размеров частиц полученной смеси. Решение данной задачи сводится к экспериментальному определению гранулометрических составов исходных материалов, и последующему сложению полученных распределений, согласно заданным пропорциям компонентов в смеси.

Представим, что поставленная задача решается экспериментально, а в качестве исходных компонентов применяются следующие гранулированные материалы: гранитный щебень, кварцевый песок и дробленый известняк, причем в наличии имеется по 10 кг каждого материала. Для приготовления смеси заданы массовые пропорции всех трех компонентов – 30, 50 и 20 % для щебня, песка и известняка, соответственно. Задача технолога заключается в смешивании трех компонентов и определении зернового состава полученной смеси. Допустим, что зерновой состав смеси определяется ситовым методом, причем необходимо приготовить 5 кг смеси. Таким образом, от каждого исходного материала следует взять пробу ($m_{щ}$, $m_{п}$ и $m_{и}$) в пропорциях заданных массовых долей, чтобы в сумме получить навеску 5 кг: $m_{щ}=30 \cdot 5/100=1,5$ кг; $m_{п}=50 \cdot 5/100=2,5$ кг; $m_{и}=20 \cdot 5/100=1$ кг, а затем смешать все три отобранные пробы, рассеять смесь через набор стандартных сит, после чего взвесить остатки на каждом сите и построить кривую отсева смеси. Казалось бы, в перечисленных действиях нет никакой сложности, однако здесь следует обратить внимание на следующие факторы.

Допустим, что исходные материалы однородны и находятся в своем естественном состоянии (без предварительного просева или перемешивания). Говоря об однородности, мы предполагаем, что закон распределения частиц по размерам распространяется на весь исходный объем (массу) материала, и если взять пробы этого материала из разных областей этого объема, зерновой состав проб будет неизменным. Поскольку при решении поставленной задачи производится операция перемешивания трех компонентов, возникает второй фактор, влияющий на однозначность итогового зернового состава смеси. Другими словами, если компоненты плохо перемешать, или не перемешивать вовсе, а просто засыпать в общую емкость, такая смесь не будет являться однородной, а, следовательно, многократное определение зернового состава смеси каждый раз будет давать существенное расхождение с предыдущими результатами.

Таким образом, описывая расчетные методы проектирования гранулометрических составов сыпучих материалов, мы будем учитывать два основополагающих допущения об однородности исходных компонентов и однородности проектируемой смеси.

Практическая значимость расчетных методов проектирования зерновых составов многокомпонентных систем с применением программно-алгоритмических средств обусловлена возможностью быстрой оценки ха-

рактера распределения проектируемой системы, а также возможностью расчетной оптимизации и корректирования состава.

2.2.2. Алгоритм сложения эмпирических распределений с задаваемым долевым соотношением

Исходя из теории упаковок дискретных сред, можно предположить, что существуют оптимальные упаковки, характеризуемые высокой плотностью, а также, соответствующие им функции распределения. В подразделе 1.3.6.7 мы говорили об оптимальных функциях распределения частиц по размерам, отвечающих плотным неупорядоченным упаковкам полидисперсных сферических частиц. Такие оптимальные функции распределения могут применяться в задачах оптимизации зернового состава многокомпонентных сырьевых смесей для производства композиционных материалов.

Смешивание различных компонентов известного зернового состава в оптимальном соотношении с целью приближения гранулометрического состава смеси к оптимальной кривой распределения, или непосредственно из условия достижения наибольшей плотности упаковки, часто применяется в инженерной практике.

К примеру, в практике строительного материаловедения и технологии строительных композиционных материалов, для получения кривой просеивания смеси заполнителей, близкой к оптимальной, недостаточно одного (иногда и двух) природных минеральных компонентов ввиду того, что кривые просеивания каждого материала отличаются одна от другой и далеки от оптимальной кривой. Необходимо либо вводить дополнительный компонент, либо корректировать соотношения имеющихся компонентов в проектируемой смеси. Поэтому использование простых методик подбора оптимального состава сырьевой смеси, применяемых, например, в технологии бетона и заключающихся в нахождении путем смешивания наилучшего соотношения между крупным и мелким заполнителями, которое обеспечивает минимальную пустотность их смеси, оказывается явно недостаточным. Методики подбора состава минеральной части строительных конгломератов, применяемые в настоящее время и описанные в соответствующих справочных и учебных пособиях, основаны на ручном (экспериментальном) подборе соотношения компонентов, заведомо не обеспечивающем наилучшего результата и весьма трудоемком.

Наиболее эффективным методом проектирования оптимального соотношения различных компонентов известного фракционного состава и приближения гранулометрического состава смеси к эталонной кривой распределения является метод сложения эмпирических распределений частиц исходных компонентов с возможностью изменения их объемных (или массовых) долей в смеси.

В качестве основного критерия оптимальности в такой задаче рассматривается величина расхождения рассчитанного гранулометрического

состава смеси компонентов и эталонного гранулометрического состава, выраженного оптимальной кривой распределения.

Опишем суть предлагаемого метода на примере компьютерной программы «Granumetrik», разработанной на кафедре производства строительных изделий конструкций Тверского государственного технического университета авторами данного учебного пособия (свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2010617267 «Подбор оптимальной гранулометрии заполнителя строительного композита» от 29.10.2010 г.). В целях упрощения работы с программой, ее пользовательский интерфейс разделен на 6 функциональных форм.

Форма 1 – «Параметры сырьевой смеси». В данной форме пользователь указывает название проектируемой смеси, после чего задает количество применяемых сырьевых компонентов N_i (до 10 компонентов включительно), их названия, а также плотность зерен каждого компонента ρ_i (г/см³).

Форма 2 – «Зерновые составы сырьевых компонентов смеси». В данной форме пользователь выбирает тип представления исходных данных – интегральный или дифференциальный. Первый тип предполагает, что зерновые составы будут задаваться полными проходами частиц i -го компонента A_{ji} (%) через апертуру условного j -го сита d_j по аналогии с ситовым анализом. Второй тип предполагает, что зерновые составы будут задаваться частными остатками частиц Q_{ji} (%) на условном j -ом сите с апертурой d_j также по аналогии с ситовым анализом. Далее задается количество типоразмеров частиц N_j (до 50 типоразмеров). Ввод данных о зерновых составах исходных компонентов осуществляется в интерактивную электронную таблицу, причем заполнение таблицы осуществляется в порядке уменьшения размеров частиц. Размерность частиц принимается условно и не обозначается в расчетах, однако значения типоразмеров частиц для всех компонентов должны иметь одинаковую размерность (пользователем предполагаются мм, мкм, нм и т.д.). В случае интегральной формы представления исходных данных, значения полных проходов частиц задаются в порядке уменьшения, а в случае дифференциальной формы представления данных, сумма частных остатков для каждого типоразмера частиц должна составлять 100 %.

Форма 3 – «Исходный состав сырьевой смеси». В данной форме пользователем задается исходный состав сырьевой смеси в массовых долях компонентов M_{oi} (%). Ввод исходного состава смеси предполагает наличие базовой рецептуры приготовления смеси, которая в последующем корректируется с помощью данной программы. В случае отсутствия исходного состава (если состав смеси проектируется с нуля) данный шаг пропускается. Обязательным условием ввода исходных массовых долей компонентов является сумма массовых долей, которая после заполнения таблицы должна составить 100 %.

Форма 4 – «Выбор эталонного распределения частиц по размерам». В данной форме пользователю предлагается выбрать эталонное распределение размеров частиц – 4 функции оптимального распределения: Функа/Дингера, Фуллера, Гуммеля, Болоея с соответствующими параметрами, а также ввести эталонный зерновой состав вручную с помощью интерактивной электронной таблицы. Последняя опция предназначена для сравнения проектируемого (корректируемого) состава сырьевой смеси с другим существующим (предположительно, более оптимальным) составом, а также может быть использована для оценки расхождения двух любых гранулометрических кривых.

В случае выбора одной из четырех предложенных оптимальных функций распределения, расчет полных проходов зерен эталонного состава A_j' (%) через условные сита с апертурой d_j , производится автоматически. Выбор эталонной функции распределения осуществляется на основании теоретически обоснованных методик, базирующихся на теории упаковок дискретных систем, или других научных теорий, учитывающих закономерности формирования структуры гранулированных материалов. Программа не дает рекомендаций по выбору эталонной функции распределения, а лишь автоматизирует расчеты.

Форма 5 – «Корректировка состава сырьевой смеси». Данная форма является основной составляющей программного продукта. В правой части формы представлен гранулометрический график (рисунок 2.11), на котором изображены интегральные кривые распределения размеров частиц эталонного состава, исходного состава и проектируемого (скорректированного) состава, а также величина расхождения проектируемой кривой и эталонной. Масштаб оси абсцисс («типоразмеры частиц») можно представлять в натуральном и логарифмическом виде.

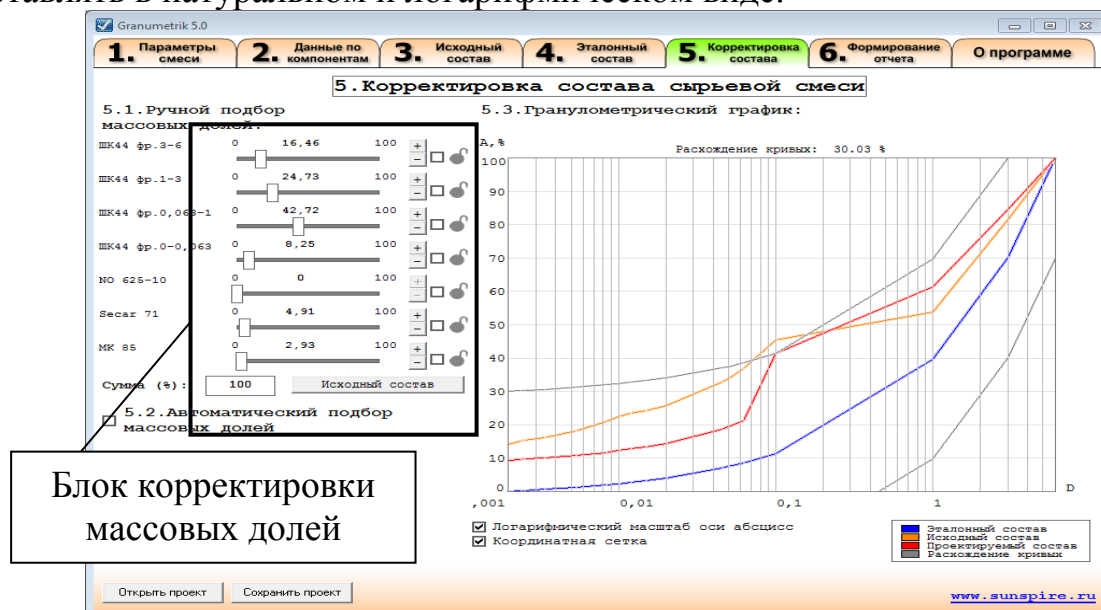


Рисунок 2.11 – Интерфейс программы «Granumetrik» – форма «Корректировка состава сырьевой смеси»

Расчет зернового состава исходной смеси производится следующим образом. Если выбран интегральный тип представления исходных данных, то полные проходы зерен исходной смеси через условные сита j вычисляются по формуле:

$$A_{oj} = \sum_{i=1}^{N_i} (A_{ji} \cdot V_{oi}) \cdot 0,01, \quad (2.15)$$

где V_{oi} – объемные доли компонентов исходного состава, %; A_{ji} – полный проход частиц исходного i -го компонента через условное j -е сито, %; N_i – количество компонентов смеси.

Объемные доли компонентов исходного состава вычисляются по формуле:

$$V_{oi} = 100 \cdot \left((M_{oi} / \rho_i) / \sum_{i=1}^{N_i} (M_{oi} / \rho_i) \right), \quad (2.16)$$

где M_{oi} – исходные массовые доли, %; ρ_i – плотность зерен исходных компонентов.

Если выбран дифференциальный тип представления исходных данных, то полные проходы зерен исходной смеси через условные сита j вычисляются по формуле:

$$A_{oj} = 0,01 \cdot \sum_{i=1}^{N_i} \left((100 - Q^P_{ji}) \cdot V_{oi} \right), \quad (2.17)$$

где Q^P_{ji} – полный остаток частиц исходного i -го компонента на условном j -м сите, %, который вычисляется по формуле:

$$Q^P_{ji} = Q_{1i} + Q_{2i} + \dots + Q_{ji}, \quad (2.18)$$

где Q_{ji} – частный остаток частиц исходного i -го компонента на условном j -м сите, % (по данным формы 2 для дифференциального представления исходных данных).

Вычисление зернового состава скорректированной смеси осуществляется по тем же формулам (2.15-2.18), но вместо исходных объемных долей в расчет берутся скорректированные значения V_{ki} :

$$V_{ki} = 100 \cdot \left((M_{ki} / \rho_i) / \sum_{i=1}^{N_i} (M_{ki} / \rho_i) \right), \quad (2.19)$$

где M_{ki} – скорректированные массовые доли компонентов, %.

Корректировка массовых долей компонентов проектируемой смеси осуществляется с помощью блока специальных элементов управления – так называемых «слайдеров» или «бегунков» (рисунок 2.11). Изменение массовой доли производится путем перемещения «бегунка» мышью, либо с помощью кнопок «плюс» и «минус», расположенных в правой части блока. При изменении текущей выбранной массовой доли, в цикле программы производится пересчет остальных массовых долей таким образом, что сумма массовых долей компонентов всегда составляет 100 %. Кроме того, положение «бегунков» можно фиксировать с помощью элементов управления «флажок» с изображением замка, расположенных справа от

кнопки «плюс» и «минус». Зафиксированные «бегунки» невозможно перемещать, а также в процессе пересчета зафиксированные массовые доли остаются неизменными. Данная опция полезна для случаев, если массовое содержание какого-либо компонента в смеси строго регламентировано и не может быть изменено.

В цикле рассчитываются расхождения между интегральными кривыми проектируемого и эталонного составов по каждому типоразмеру частиц:

$$\Delta A_j = |A_j' - A_{kj}|, \quad (2.20)$$

где A_j' – полный проход зерна эталонного состава через условное j -е сито, %; A_{kj} – полный проход зерна скорректированного состава через условное j -е сито, %.

Далее определяется наибольшее значение величины расхождения ΔA_{\max} путем последовательного сравнения величин ΔA_j . Верхняя граница коридора расхождения кривых рассчитывается прибавлением величины ΔA_{\max} к ординатам кривой эталонного состава, а нижняя граница коридора расхождения, соответственно, вычитанием величины ΔA_{\max} от ординат кривой эталонного состава.

2.2.3. Алгоритм сложения эмпирических распределений с возможностью автоматического изменения долевого соотношения

Представленная выше программа расчета гранулометрического состава многокомпонентной дискретной системы оснащена дополнительной интеллектуальной функцией – возможностью автоматического подбора массовых долей компонентов смеси из условия последовательного уменьшения погрешности. В данном случае значения скорректированных массовых долей компонентов M_{ki} выбираются случайным образом из интервала от 0 до $(100 - \Sigma M_i')$ %, где $\Sigma M_i'$ – сумма зафиксированных массовых долей (в том случае, если какие-то «бегунки» изменения массовых долей были зафиксированы установкой соответствующего «флажка» с изображением замка).

Выбор порядкового номера текущей случайно генерируемой массовой доли M_{ki} осуществляется случайным образом из числа всех компонентов смеси, кроме тех, чьи массовые доли зафиксированы, при этом остальные массовые доли пересчитываются, таким образом, чтобы сумма всех массовых долей всегда составляла 100 %. Каждую итерацию случайного перебора рассчитывается величина максимальной погрешности $\Delta A_{\max}(k)$, которая сохраняется в памяти. Величина $\Delta A_{\max}(k)$ сравнивается с $\Delta A_{\max}(k-1)$ из предыдущей итерации, в том случае, если $\Delta A_{\max}(k) < \Delta A_{\max}(k-1)$, происходит перестроение гранулометрического графика и изменение положений «бегунков» массовых долей, согласно сгенерированным значениям M_{ki} .

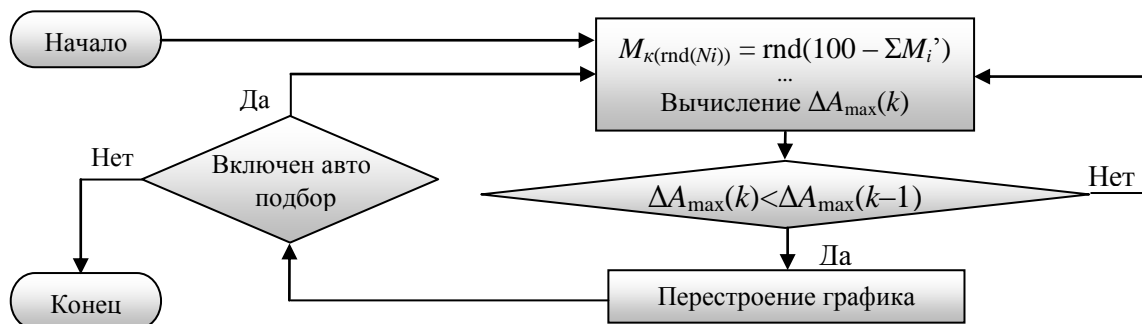


Рисунок 2.12 – Алгоритм автоматического подбора массовых долей

Запуск алгоритма, представленного на рисунке 2.12, осуществляется установкой соответствующего «флажка» включения/выключения автоматического подбора массовых долей в форме 5. В процессе расчета пользователь может отключить автоматическую генерацию массовых долей, изменив положение «флажка» включения/выключения автоматического подбора массовых долей, поэтому каждая итерация заканчивается проверкой положения «флажка».

Таким образом, во время выполнения процедуры автоматического подбора массовых долей компонентов, в оптимальных пропорциях сочетаются исходные распределения, при этом суммарное распределение смеси приближается к заданному эталону (рисунок 2.13).

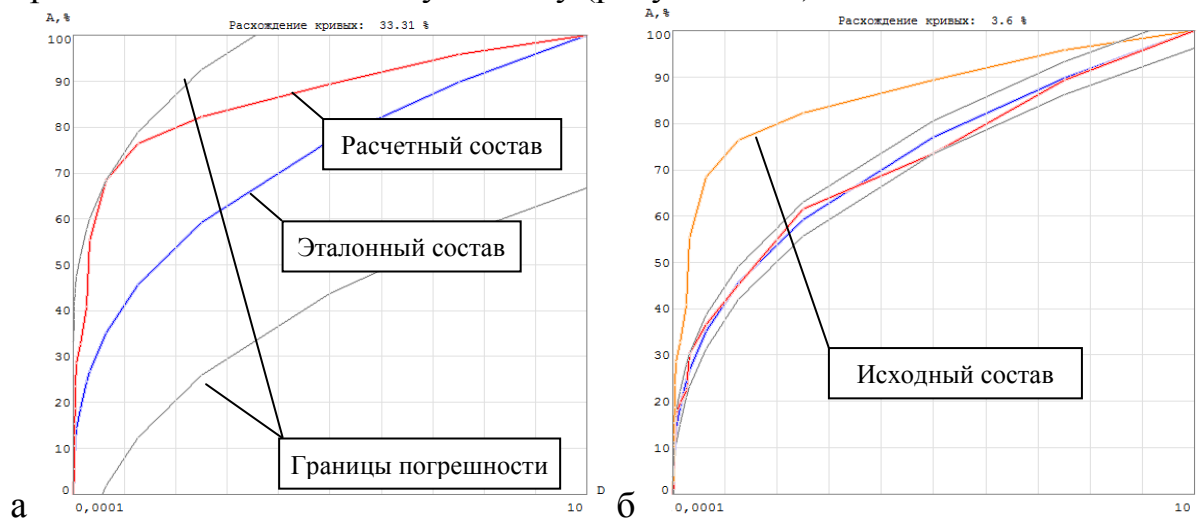


Рисунок 2.13 – Гранулометрический график суммарного зернового состава: а – до запуска процедуры автоматического подбора массовых долей (расхождение кривых составляет 33,31 %); б – после нескольких итераций автоматической корректировки массовых долей (расхождение кривых составляет 3,6 %)

Представленная расчетная методика позволяет за короткое время смоделировать предположительно оптимальное распределение частиц по размерам, оперируя только соотношениями массовых долей исходных компонентов в смеси. В форме 6 пользователь может сформировать итоговый отчет и экспортировать его в текстовый процессор Microsoft Word для последующего вывода на печать.

2.3. Математическое планирование экспериментов

При проведении научных экспериментов и технологических расчетов наряду с субстанционным (изготовление физического образца материала) и структурно-имитационным (имитация взаимодействия структурных элементов системы) моделированием широко применяется функциональное моделирование, результатом которого является получение некоей математической функции, описывающей поведение объекта исследования, абстрагируясь от внутренней структуры вещественного субстрата. Функциональная модель работает по принципу «черного ящика», при этом известны параметры «входа» – переменные или постоянные факторы, а также, параметры «выхода» – критерий эффективности, отклик и т.д. [7, 19, 40].

К примеру, построение функциональных моделей экспериментальных зависимостей свойств бетона от его состава включает в себя следующие этапы:

- уточнение в зависимости от конкретной задачи оптимизируемых параметров (прочности бетона, удобоукладываемости бетонной смеси и др.);
- выбор факторов, определяющих изменчивость оптимизируемых параметров;
- определение основного исходного состава бетонной смеси;
- выбор интервалов варьирования факторов;
- выбор плана и условий проведения эксперимента;
- обработка результатов эксперимента с построением математических моделей зависимостей свойств бетонной смеси и бетона от выбранных факторов.

Планирование эксперимента – это процедура выбора числа и условий проведения опытов, необходимых и достаточных для решения поставленной задачи с требуемой точностью.

Рассмотрим процесс математического планирования и обработки данных факторного эксперимента с применением программно-алгоритмических средств на примере компьютерной программы «PlanExp В-D₁₃», разработанной авторами учебного пособия в среде программирования Microsoft Visual Basic 6.0. Разработанный программный продукт позволяет производить моментальный расчет плана эксперимента по заданным переменным факторам, рассчитывать коэффициенты уравнения математической модели, проводить статистическую оценку адекватности математической модели, строить диаграммы линий равного уровня с возможностью обнаружения точки экстремума, а также, автоматически формировать отчет по итогам эксперимента. Программа ориентирована на работу с трехфакторным планом эксперимента В-D₁₃, который позволяет получать нелинейные квадратичные модели, и обладает хорошими статистическими характеристиками.

Алгоритм программы включает основные процедуры – процедуру расчета коэффициентов функции отклика, процедуру статистической обработки и процедуру визуализации математической модели. Все основные вычисления производятся циклично, что позволяет моментально пере-страивать математическую модель, изменяя входные данные. Кроме того, алгоритм включает вспомогательную процедуру, обеспечивающую проверку синтаксической правильности вводимых данных. При допущении ошибок ввода данных программа корректирует действия пользователя средствами текстового оповещения.

Интерфейс программного продукта реализован в виде логических блоков, позволяющих вводить исходные данные и изменять параметры вывода математической модели в интерактивном режиме (рисунок 2.14).

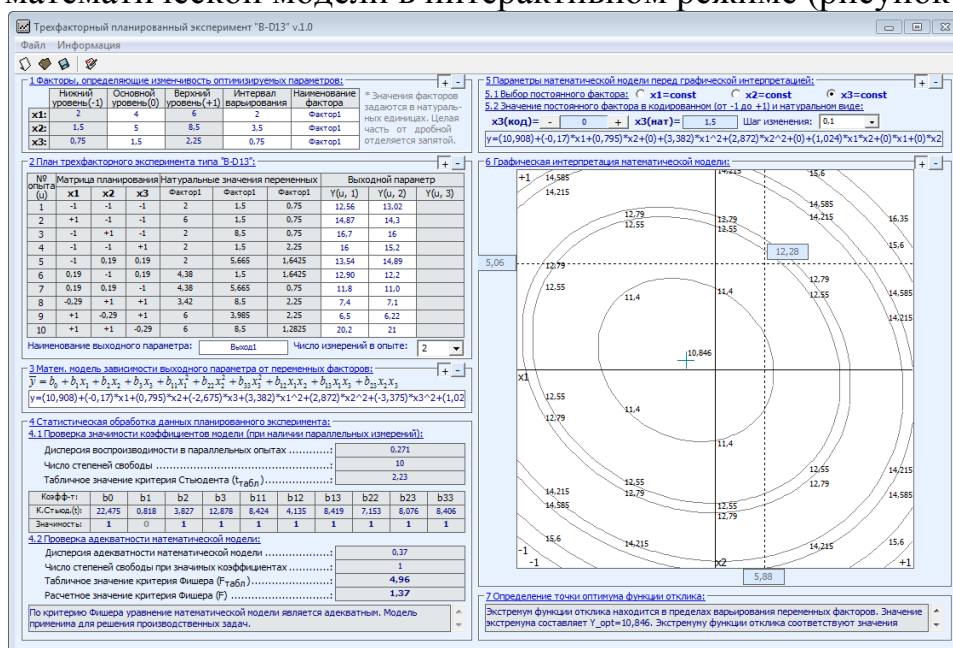


Рисунок 2.14– Интерфейс программы обработки данных трехфакторных планированных экспериментов

Опишем порядок работы с программой на примере планированного эксперимента по исследованию зависимости прочности бетона от рецептурных факторов.

На первом этапе устанавливаются входные факторы эксперимента. В эксперименте варьируются: количество вяжущей части бетона; содержание наполнителя и количество добавки – гиперпластификатора. Значения факторов задаются в натуральном виде (граммы, проценты и т.д.). Пользователь вводит значения основного уровня, интервалы варьирования и наименования факторов. В расчете факторного плана значения уровней входных факторов принимаются в кодированном виде, при этом, основным уровнем (центр плана) каждого фактора обозначается как «0», а нижний и верхний уровни: «-1» и «+1» соответственно. Пересчет заданных пользователем натуральных значений факторов производится путем линейной интерполяции значений:

$$x_i = (X_i - x_{0i}) / \Delta X_i, \quad (2.21)$$

где x_i – значение i -го фактора в кодированном виде, X_i – значение i -го фактора в натуральном виде, ΔX_i – интервал варьирования i -го фактора.

В рассматриваемом примере в эксперименте контролируется величина предела прочности бетона на сжатие ($R_{сж}$, МПа). Для определения воспроизводимости измерений выходного параметра необходимо проводить параллельные измерения. В программе допускается ввод выходных значений до трех параллельных замеров. Согласно плану эксперимента рассчитывается 10 опытов по 3 параллельных испытания в каждом.

После автоматической проверки введенных данных программа рассчитывает коэффициенты математической модели и выводит функцию отклика в третьем логическом блоке. После получения математической модели производится проверка значимости (отличия от нуля) коэффициентов модели и ее адекватность.

Адекватность (от лат. *adaequatus* – приравненный, равный) – соответствие, верность, точность. Точность измерения – характеристика измерения, отражающая степень близости его результатов к истинному значению измеряемой величины [45].

Проверка коэффициентов на значимость производится с помощью критерия Стьюдента (t -критерия), который рассчитывается по формуле:

$$t_i = |b_i| / S\{b_i\}, \quad (2.22)$$

где b_i – i -й коэффициент математической модели, $S\{b_i\}$ – среднеквадратическое отклонение в определении коэффициентов.

Среднеквадратическое отклонение в определении коэффициентов функции отклика определяется по формуле:

$$S\{b_i\} = \sqrt{C_i \cdot S_e^2}, \quad (2.23)$$

где C_i – величины, приведенные для плана В-D₁₃ в таблице 2.1, S_e^2 – дисперсия воспроизводимости в параллельных опытах.

Таблица 2.1 – Величины C_i для плана В-D₁₃

b_0	b_1	b_2	b_3	b_{11}	b_{12}	b_{13}	b_{22}	b_{23}	b_{33}
0,868	0,159	0,159	0,159	0,594	0,226	0,226	0,594	0,226	0,594

Дисперсия воспроизводимости в параллельных опытах рассчитывается по формуле:

$$S_e^2 = \frac{1}{N(m-1)} \sum_{u=1}^N \sum_{j=1}^m (y_{uj} - \bar{y}_u)^2, \quad (2.24)$$

где N – количество опытов в плане, m – количество параллельных измерений в каждом опыте, y_{uj} – значение выходного параметра в u -ом опыте, j -ом параллельном замере, \bar{y}_u – среднее значение выходного параметра в u -ом опыте.

Расчетное значение t -критерия сравнивается с табличным $t_{\text{табл}}$ для выбранного уровня значимости (как правило, 5%) и данного числа степеней свободы $N(m-1)$. При $t_i < t_{\text{табл}}$ коэффициент b_i считается значимым.

Проверка адекватности математической модели производится по критерию Фишера (F -критерий). Для этого вычисляется дисперсия адекватности по формуле:

$$S_{\text{ад}}^2 = \frac{m}{N - n_3} \sum_{u=1}^N \left(\bar{y}_u - \hat{y}_u \right)^2, \quad (2.25)$$

где n_3 – количество значимых коэффициентов, \hat{y}_u – значение отклика, предсказанное по уравнению математической модели.

В свою очередь критерий Фишера рассчитывается как отношение:

$$F = S_{\text{ад}}^2 / S_{\text{е}}^2 \quad (2.26)$$

Расчетное значение F -критерия сравнивается с табличным $F_{\text{табл}}$ для выбранного уровня значимости (как правило, 5%) и чисел степеней свободы $N(m-1)$ и $(N-n_3)$. При $F < F_{\text{табл}}$ уравнение математической модели считается адекватным. Результаты статистической обработки модели отображаются в четвертом логическом блоке в виде таблицы.

В представленном примере математическая модель прочности бетона признана адекватной по критерию Фишера ($F=3,07 < F_{\text{табл}}=3,1$) и применима для решения рецептурно-технологических задач. Уравнение математической модели представляет собой квадратичную функцию трех переменных. Поскольку для графической интерпретации функции трех переменных требуется четырехмерное пространство, с целью визуального упрощения и удобства работы с математической моделью функцию трех переменных необходимо преобразовать в функцию двух переменных, поочередно принимая константой один из факторов. В пятом логическом блоке программы представлены средства для преобразования уравнения регрессии в функцию двух переменных. Пользователь может установить постоянный фактор и задать его значение (в пределах интервала варьирования) в кодированном и натуральном виде. В результате преобразования получаются три варианта математической модели: $y=f(x_2, x_3)$ при $x_1=\text{const}$, $y=f(x_1, x_3)$ при $x_2=\text{const}$ и $y=f(x_1, x_2)$ при $x_3=\text{const}$. Для визуализации каждого из трех видов уравнений строится диаграмма линий равного уровня (изолиний), представляющая собой проекции трехмерных поверхностей на плоскости $(x_2 \oplus x_3)$, $(x_1 \oplus x_3)$ и $(x_1 \oplus x_2)$. Таким образом, кривая каждой изолинии строится в координатах (x_2, x_3) , (x_1, x_3) и (x_1, x_2) , а ее построение производится по квадратичным функциям $x_2=f(x_3)$, $x_1=f(x_3)$ и $x_1=f(x_2)$ соответственно.

В шестом логическом блоке программы представлена интерактивная диаграмма изолиний, позволяющая пользователю снимать координаты факторного поля и значения выходного параметра в режиме реального времени (рисунок 2.15).

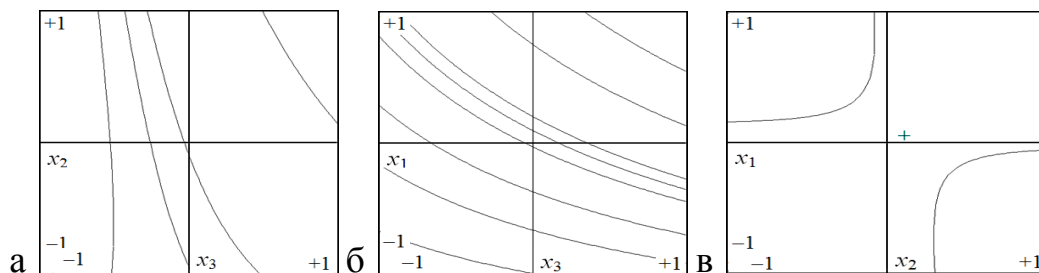


Рисунок 2.15 – Диаграмма изолиний математической модели прочности бетона: $x_1=\text{const}$ (а), $x_2=\text{const}$ (б), $x_3=\text{const}$ (в)

Обработка данных планированного эксперимента завершается процедурой обнаружения экстремума функции отклика. Для определения координат точки экстремума производится автоматическое вычисление первой производной по каждому из значений факторов. Корни полученной системы уравнений представляют собой координаты точки экстремума исследуемого уравнения регрессии:

$$\begin{cases} \frac{dy(x_1, x_2)}{dx_1} = 0, \\ \frac{dy(x_1, x_2)}{dx_2} = 0 \end{cases} \quad (2.27)$$

Программа оснащена дополнительными функциями загрузки/сохранения данных, а также функцией экспорта результатов расчетов в Microsoft Word. Используя полученное уравнение функции отклика, пользователь может произвести дополнительные построения в программе Microsoft Excel, например, построить поверхность отклика в трехмерной системе координат (рисунок 2.16.а), а также, построить сечения поверхности отклика, позволяющие проанализировать изменение выходного параметра в зависимости от одного переменного фактора (рисунок 2.16.б).

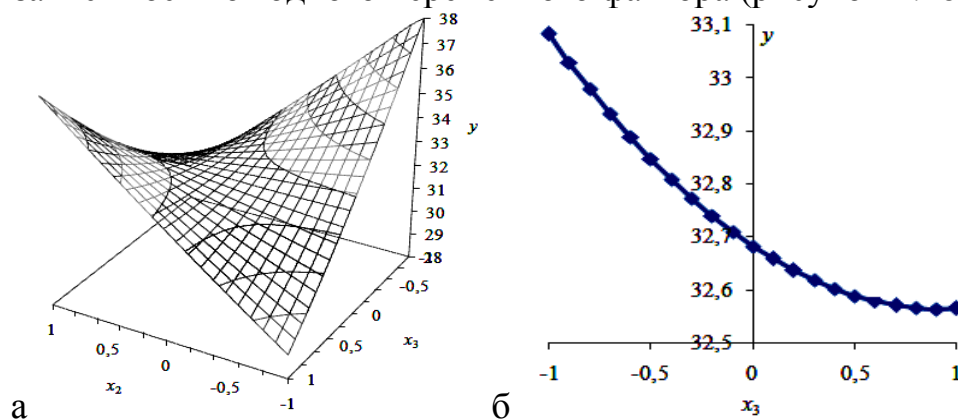


Рисунок 2.16 – Поверхность отклика (а) при $x_1=\text{const}$ и ее сечение (б) при $x_1=\text{const}$ и $x_2=\text{const}$

Разработанное программное средство может применяться в любых научно-прикладных задачах по оптимизации свойств объекта исследования, подбора рецептуры и технологических параметров, где используется математическое моделирование методом ортогонального планирования экспериментов.

Глава 3. Компьютерная визуализация и имитационное моделирование технического оборудования и устройств

3.1. Применение виртуальных лабораторий в техническом образовании

В настоящее время в научных исследованиях и образовании, в производственной и других сферах деятельности человека определяющее значение имеют информационно-вычислительные системы [12]. Развитие информатики и применение компьютеров в научных исследованиях ставят вопрос о пересмотре основных концепций представления научных знаний даже в уже глубоко разработанных и весьма формализованных областях и выдвигают на первый план задачу структурирования этих знаний [42]. Разработка мультимедийных учебно-научных лабораторий и их использование в инженерном образовании являются перспективным направлением в обучении современным высоким технологиям, подготовке высококвалифицированных научных кадров и отраслевых специалистов, а также повышении квалификации инженерно-технических работников и сотрудников предприятий промышленного сектора.

Виртуальная лаборатория представляет собой программно-аппаратный комплекс, позволяющий проводить опыты без непосредственного контакта с реальной установкой или при полном отсутствии таковой. В первом случае мы имеем дело с так называемой лабораторной установкой с удаленным доступом, в состав которой входит реальная лаборатория, программно-аппаратное обеспечение для управления установкой и оцифровки полученных данных, а также средства коммуникации. Во втором случае все процессы моделируются при помощи компьютера [47, 48], именно о таких средствах обучения мы будем говорить дальше.

Электронные образовательные ресурсы на основе современной компьютерной трехмерной симуляции физических процессов и явлений реализуются в форме мультимедийных учебно-научных лабораторий или виртуальных тренажеров. Новизна технологии виртуальных тренажеров аргументируется использованием современных средств компьютерного моделирования и активным внедрением информационных технологий в сферу образования как нового трансдисциплинарного направления [32].

Сформулируем основные причины использования технологии виртуальных тренажеров:

- существующие лабораторные стенды и мастерские недостаточно оснащены современными приборами, устройствами и аппаратами;
- лабораторных стендов и учебных мастерских введены в действие после списания с производства, не отвечают современным требованиям и морально устарели, что может исказить результаты опытов и служить потенциальным источником опасности для обучающихся;
- лабораторные работы и стенды требуют ежегодного усовершенствования, которое приводит к дополнительным финансовым затратам;

- в таких областях как, например, строительное материаловедение или физическая химия, кроме оборудования требуются также расходные материалы – сырье, реактивы и др., стоимость которых достаточно высока. Разумеется, компьютерное оборудование и программное обеспечение также стоят недешево, однако универсальность компьютерной техники и ее широкая распространенность компенсируют этот недостаток;

- современные компьютерные технологии позволяют пронаблюдать процессы, трудноразличимые в реальных условиях без применения дополнительной техники, например, из-за малых размеров наблюдаемых частиц;

- виртуальные тренажеры дают возможность моделирования процессов, протекание которых принципиально невозможно в лабораторных условиях;

- виртуальные тренажеры дают возможность проникновения в тонкости процессов и наблюдения происходящего в другом масштабе времени, что актуально для процессов, протекающих за доли секунды или, напротив, длящихся в течение нескольких лет;

- безопасность – является немаловажным плюсом использования виртуальных лабораторий в случаях, где идет работа, например, с высокими напряжениями или химическими веществами;

- из-за инерционности работы или процессов на некоторых лабораторных установках за отведенное для них время, трудно проводить повторные анализ или проверку;

- приобретение слушателями достаточных навыков и опыта работы в определенной области требует необходимости повторения занятий, что не всегда выполняется во избежание частых поломок установок и дополнительных затрат на расходные материалы;

- виртуальные тренажеры являются высокоэффективным методом обучения, что обусловлено низким уровнем абстракции содержащегося в них учебного материала, иными словами, виртуальная среда обучения в мультимедийных учебно-научных лабораториях максимально имитирует реальные условия.

Учитывая вышеизложенные факты, возникает необходимость введения такого нового, эффективного и доступного педагогического метода (методики), который способствовал бы решению следующих задач:

- инициировать достаточно большой интерес у слушателей наряду с доступностью для них, тем самым повысить активность и самостоятельность их учебной работы;

- привлечь внимание слушателей, учитывая их психологические особенности улучшить восприятие учебного материала за счет его мультимедийности;

- обеспечить полный контроль усвоения материала каждым слушателем;

- облегчить процесс повторения и тренинга при подготовке к экзаменам и другим формам контроля знаний;
- разгрузить преподавателей от рутины контроля и консультирования;
- использовать внеаудиторное время для изучения конструкций в виде домашних заданий;
- внедрить дистанционные формы учебной работы, в том числе в учебных заведениях, имеющих слабую лабораторную базу.

Именно с этой точки зрения внедрение информационных технологий способствует оптимальному решению вышеназванных задач и устранению ряда недостатков традиционного способа обучения. Эти вопросы во всей полноте можно решать с помощью мультимедийных учебно-научных лабораторий, создаваемых на компьютерах [46, 38].

3.2. Процесс обучения с применением виртуального тренажера

Виртуальный тренажер представляет собой программный комплекс, позволяющий проводить физические опыты на компьютере без непосредственного контакта с реальной лабораторной установкой или стендом. В виртуальных тренажерах динамика процессов реализуется посредством компьютерной анимации – комплекса методов отображения каких-либо объектов во времени. Процессы формирования понятий при помощи анализа, сравнения, выделения существенных признаков и других логических операций воспроизводятся специалистом, разрабатывающим анимацию, в образной форме, и интерактивно выводятся на дисплей компьютера в строго определенных последовательностях. Мультимедийная учебно-научная лаборатория, как правило, сочетает в себе имитационную динамическую модель оборудования и программную оболочку, включающую методическое сопровождение лабораторной работы. Динамическая модель формируется из совокупности элементов управления, позволяющих регулировать конкретные входные параметры и считывать выходные параметры опыта, тем самым имитируя протекание физических процессов.

На рисунке 3.1 представлена принципиальная схема процесса обучения с применением виртуального тренажера. Как показано на схеме, компьютерный тренажер включает в себя совокупность программных и аппаратных средств, позволяющих осуществлять процесс обучения без непосредственного взаимодействия человека и реальной лабораторной установки. Аппаратные возможности тренажера – это современный персональный компьютер, оснащенный качественными устройствами ввода/вывода информации. Программные средства – это математически обоснованная виртуальная модель, включающая в себя систему графической визуализации, звуковое сопровождение и текстовую информацию [4]. Ввод и вывод информации осуществляется согласно разработанному алгоритму – программному коду виртуальной модели.

В процессе обучения пользователь проходит основные этапы познавательной деятельности: восприятие, первоначальное знакомство; осмысление, закрепление, контроль знаний; формирование профессионально-ориентированных умений и навыков; развитие интуиции.

На рисунке 3.2 показана сфера применения виртуальных тренажеров, включающая в себя несколько больших областей.



Рисунок 3.1 – Процесс обучения с применением виртуального тренажера



Рисунок 3.2 – Области применения виртуальных тренажеров

Виртуальные лабораторные тренажеры позволяют устранить ещё один недостаток традиционного способа обучения – это отдельное проведение лекционных и лабораторных работ, как по времени, так и по теме. В большинстве случаев, лабораторные работы (особенно по естественным дисциплинам) назначаются не с позиции сохранения последовательности изложения тем по лекционным занятиям, а с точки зрения доступности (работоспособности или незанятости) лабораторного стенда. Виртуальные лабораторные работы также можно демонстрировать во время лекции. При этом достигается не только последовательность изучаемых тем по дисциплине, но устраняется временной барьер между лекционными и лабораторными занятиями, что способствует повышению эффективности и качества обучения. Эффективное применение виртуальных тренажеров в образовательном процессе способствует не только повышению качества образования, но и экономии значительных финансовых ресурсов, создают безопасную, экологически чистую среду. Внедрение виртуальных лабораторий требует комплексного подхода, как со стороны образовательных структур, так и производственных и других государственных структур.

3.3. Принципы построения виртуальных тренажеров

С развитием компьютерной графики стало возможным создавать высокореалистичные трехмерные модели лабораторных установок, станков, приборов и прочих объектов. Модели изготавливаются в строгом соответствии с чертежами типового оборудования и полностью отражают его конструктивно-функциональное назначение.

При создании виртуального тренажера разработчик применяет методы имитационно-численного моделирования и выполняет ряд рабочих этапов:

1. Изучение физики исследуемых процессов, установление входных и измеряемых параметров. На данном этапе работы необходимо определить, из каких основных элементов будет строиться имитация физического явления или процесса. Зная конкретные входные параметры опыта (постоянные или изменяемые), разработчик решает, каким способом будут реализованы элементы управления виртуальной модели – «устройства» регулирования. Знание выходных параметров опыта позволяет решить задачу, каким способом будут реализованы «устройства» измерения.

В целях приближения работы измерительных устройств к реальным условиям, к положению стрелок приборов и другим измерительным элементам прибавляется случайное отклонение в пределах одного процента в положительную и отрицательную стороны от фактического значения измеряемой величины. Таким образом, можно имитировать дрожание стрелок приборов и создавать разброс измерений в каждом опыте, что является неотъемлемым атрибутом реального эксперимента.

2. Создание геометрических моделей лабораторного оборудования. На данном этапе разработчик выполняет графическое решение виртуальной модели – современные виртуальные тренажеры выполняются в трехмерной графике с максимальной имитацией материалов и освещения, что существенно повышает качество работы. Главной задачей здесь является приближение модели к реальному объекту, за счет соблюдения правильных пропорций, размеров, цветовых решений и освещения [27].

3. Разработка интерактивного модуля, объединяющего геометрические модели и физические зависимости. Написание программного кода виртуальной модели является наиболее трудоемкой частью работы. В задачи программиста входит разработка алгоритма, адекватно описывающего физику реального процесса или явления. Программа связывает воедино графические элементы, звуковое и текстовое сопровождение, интерактивную составляющую, и, согласно точным математическим зависимостям, имитирует динамику протекания процесса или явления. Программный код разрабатывается в соответствии с алгоритмической схемой, пример которой приведен на рисунке 3.3. Согласно алгоритму, вначале задаются параметры графической системы (разрешение и глубина цвета экрана, а также ограничение количества кадров в секунду). После установки параметров

проверяется поддержка видеосистемой компьютера заданных параметров на основании контрольной таблицы поддерживаемых графических режимов (эта информация считывается из библиотеки драйвера видеокарты).

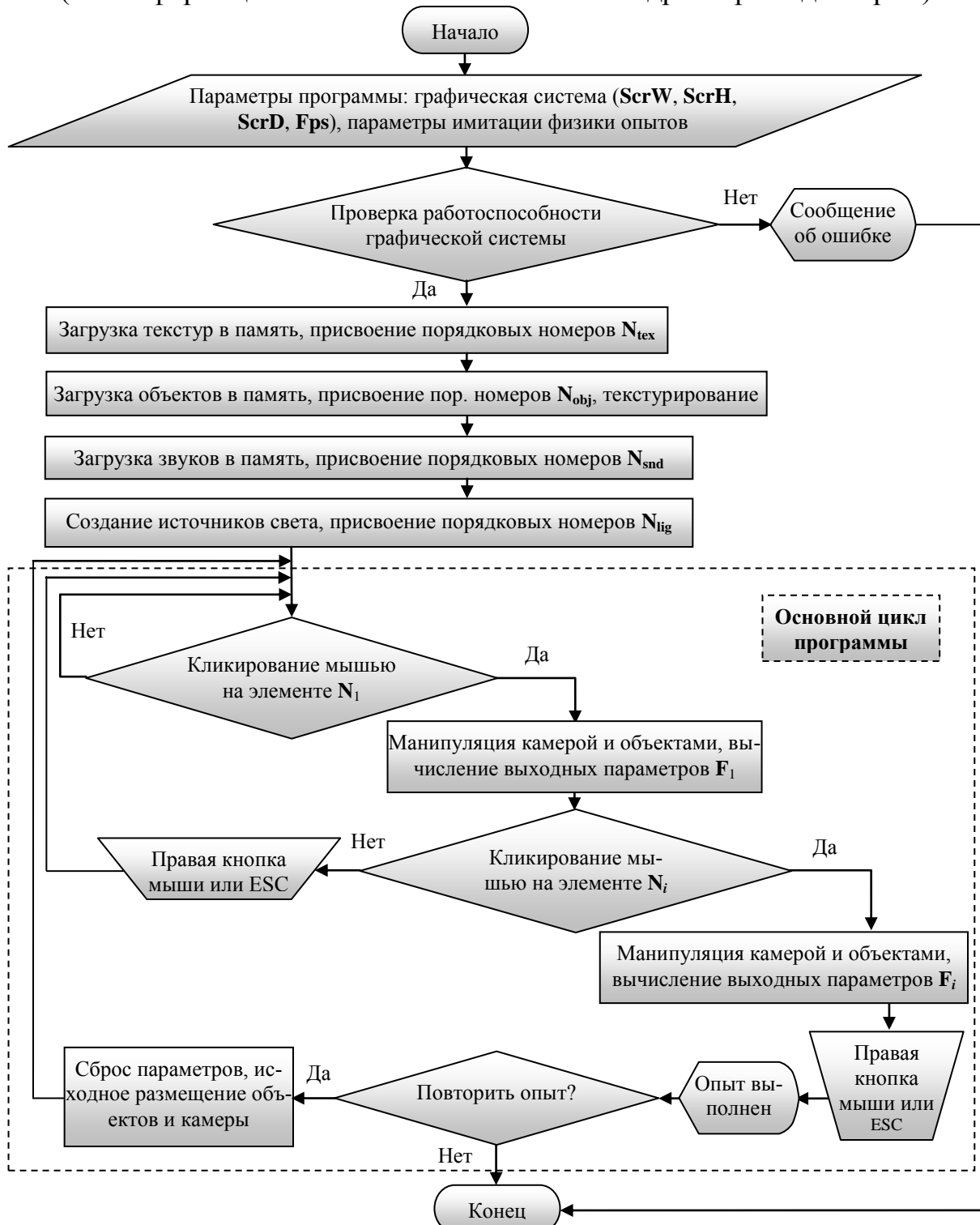


Рисунок 3.3 – Блок схема алгоритма виртуальной лабораторной работы

В случае успешного выполнения проверки происходит последовательная загрузка медиа-файлов (3D моделей, текстур и пр.). После загрузки медиа-файлов задается основной цикл программы, в котором последовательно выполняется обработка событий мыши (и клавиатуры), то есть про-

верка кликирования мышью по объекту N_1 (например, лабораторный стол, установка в целом или кнопка запуска двигателя и т.д.), после чего камера обзора и объекты меняют свои координаты, углы поворота, масштабы по координатным осям, цветовые и текстурные свойства, выходные параметры F_1 . Таким образом, происходит последовательная проверка событий для всех элементов объекта исследования, а также расчет и вывод выходных данных.

Последний элемент управления N_i служит для завершения рабочего цикла, при этом выводится информация о выполнении опыта и запрос на повтор опыта, в случае отказа от которого, программа завершается. Для реализации интерактивной части проверяются условия наведения мыши на объекты, нажатие кнопок мыши и клавиш клавиатуры при каждом положении камеры обзора. В зависимости от сложности имитируемого лабораторного опыта, алгоритм усложняется, так например, если в опыте присутствует замер времени секундомером, цикл программы оснащается вложенным циклом и подпрограммой. Количество элементов N_i также определяется сложностью лабораторной работы.

4. Внедрение системы методических указаний и справочной информации. Когда виртуальная модель сформирована, ее необходимо снабдить сопровождающей информацией методического или справочного характера, что позволит пользователю более полно изучить суть исследования, а также освоить управление виртуальным тренажером. На данном этапе важнейшей задачей является структурирование всего учебного материала с целью сделать доступное, удобное в обращении «рабочее место» обучаемого пользователя. Одним из эффективных способов реализации системы методического сопровождения виртуального тренажера является разработка программной оболочки, позволяющей пользователю ознакомиться со структурой учебного курса, осуществлять прямой доступ к основным разделам курса, запускать интерактивные модули лабораторных работ, сохранять и читать статистические данные прохождения курса.

Основной задачей обучающего программного продукта является развитие творческого мышления и профессиональных способностей студентов, умения решать вопросы прикладного характера, делать самостоятельные выводы, в виду чего виртуальные лабораторные практикумы должны полностью соответствовать реальному учебному процессу. Приступая к выполнению лабораторного опыта, студент должен знать методику исследования и хорошо представлять ход работы, последовательность действий и расчетов. В реальном учебном процессе данную информативную функцию выполняют учебные пособия и брошюры с методическими указаниями. Виртуальные лаборатории полностью имитируют реальную лабораторию, а методика экспериментов здесь интегрирована в сам программный продукт в форме комплекса сопровождающих инструментов и надстроек. В программах продумывается отдельная система методического сопрово-

ждения – методические указания к выполнению лабораторных работ, дающие полное изложение принципов проведения эксперимента, интегрированная в оболочку учебного курса, как правило, в формате HTML-документа, и система инструкций, интегрированная непосредственно в лабораторные работы, позволяющая правильно выполнять эксперимент и поясняющая принципы управления программой.

5. Тестирование разработанной системы. Тестирование – это заключительный этап разработки. По завершению работы необходимо выявить возможные уязвимости алгоритма, и предусмотреть реагирование программы на «неправильные» действия пользователя.

3.4. Примеры использования виртуальных тренажеров в различных технических дисциплинах

Как уже отмечалось выше, виртуальные тренажеры имеют обширную область применения, начиная от простых демонстраций какого-либо процесса или механизма до сложных симуляторов технологических процессов и оборудования. Тверской государственной технической университет специализируется на разработке виртуальных тренажеров и учебных программных комплексов, начиная с конца 90-х годов прошлого столетия. За период работы в данном направлении технология разработки программных продуктов претерпела существенные изменения. Современные обучающие программы выполняются в режиме высоко реалистичной трехмерной графики с максимальной реалистичностью имитации. Разработки охватывают целый ряд технических дисциплин и учебных направлений, в числе которых можно выделить: гидромеханику, теплотехнику, технологию обработки металлов, торфяные машины и оборудование, строительное материаловедение, техносферную безопасность и другие направления. Разрабатываемые программные продукты имеют свидетельства об официальной регистрации (РОСПАТЕНТ), и полностью соответствуют требованиям отраслевого стандарта Минобразования РФ ОСТ.2-98 «Системы автоматизированного лабораторного практикума». География применения программных продуктов охватывает более 80 вузов и колледжей по России и странам СНГ.

Приведем примеры некоторых виртуальных лабораторных работ по различным дисциплинам. На рисунке 3.4 изображена виртуальная лабораторная установка для исследования процесса напорной фильтрации воды в порах водонасыщенного грунта, описываемой законом Дарси. Модель лабораторной установки представляет собой выполненную из прозрачного материала вертикальную колонну квадратного сечения, заполненную пятью слоями условного «песчаного» грунта различной крупности. На границах слоев имеются штуцеры, к которым через гибкие шланги подсоединены так называемые пьезометрические трубки (№ 1...6) для измерения напоров воды.

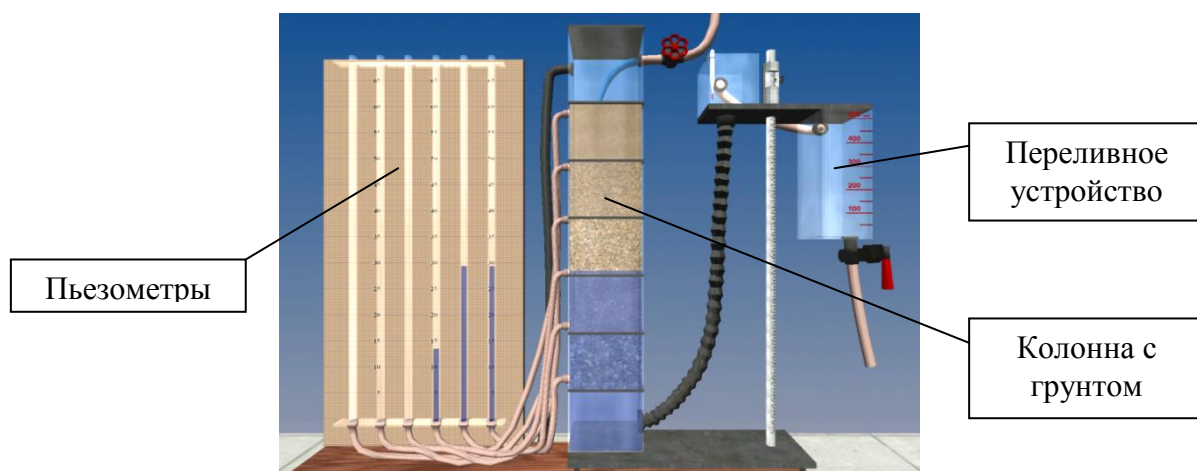


Рисунок 3.4 – Виртуальная лабораторная установка для исследования процесса напорной фильтрации

Изменение в опытах градиента напора достигается изменением высотного положения сливного устройства, расположенного в правой части модельной лабораторной установки. Измерение фильтрационного расхода воды осуществляется с помощью мерного сосуда с нанесенной шкалой. Время заполнения профильтрованной водой нужного объема измеряется модельным секундомером. Проводя имитационный эксперимент, обучаемый убеждается в справедливости закона Дарси путём построения в масштабе (по данным пяти опытов) графиков зависимости скорости фильтрации от градиента напора; определении по построенным графикам средней величины коэффициента фильтрации; построении в масштабе по данным одного опыта графика изменения напора по пути фильтрации. Элементами регулирования в данной виртуальной лабораторной работе являются вентиль подачи воды и подвижная платформа сливного устройства с закрепленной на ней мерной емкостью, изменение положений которых осуществляется с помощью мыши и клавиатуры. Измерительными элементами служат миллиметровая шкала напорных трубок, линейка подвижной платформы, шкала мерной емкости для замера расхода воды и шкала секундомера. Представленная виртуальная лабораторная работа входит в состав программного лабораторного практикума «Гидравлика», которому присвоен гриф: «Рекомендовано научно-методическим советом по гидравлике» в 2011 году.

Еще один пример виртуальной лабораторной работы – имитационный опыт «Определение истинной плотности материала», которая входит в программный лабораторный практикум строительного материаловедения. Целью работы является определение величины истинной плотности порошкового материала с помощью объёмомера Ле-Шателье. Входными параметрами имитационного опыта являются: тип строительного материала (цемент, песок, гипс) и масса опытной навески. Выходными данными служат: масса остатка пробы и объем вытесненной жидкости. На рисунке 3.5 изображены снимки экрана имитационной лабораторной работы.

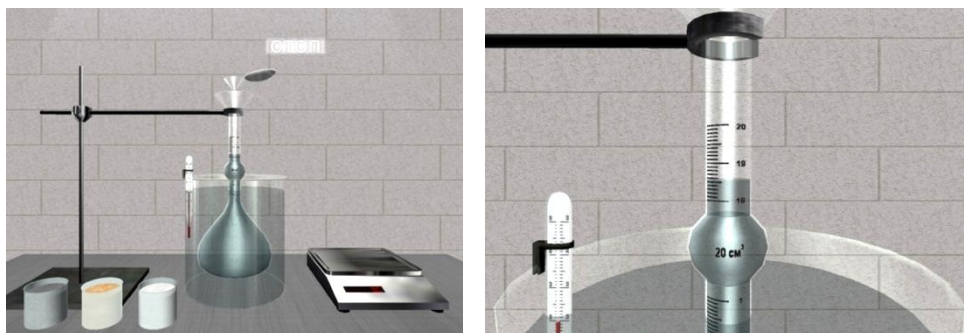


Рисунок 3.5 – Снимки экрана имитационной лабораторной работы «Определение истинной плотности материала»

Имитационный опыт проводится в интерактивном режиме, при этом пользователь оперирует лабораторными предметами с помощью мыши и клавиатуры компьютера, фиксируя в лабораторном журнале измеряемые параметры. Опыт можно проводить многократно, причем с каждой итерацией пользователем могут задаваться различные входные значения массы навески материала, а также может быть выбран другой тип исследуемого материала. Выходные значения имитационного опыта соответствуют физическим параметрам реального эксперимента по определению истинной плотности материала. Имитационная лабораторная работа сопровождается электронным документом с методикой выполнения работы.

Одной из последних разработок является виртуальная лаборатория «Определение свойств самоуплотняющегося бетона», предназначенная для имитационного выполнения лабораторных испытаний современных самоуплотняющихся бетонов в соответствии с европейскими требованиями СТБ EN 206-9. Разработка направлена на обучение и повышение квалификации студентов строительных специальностей, инженерно-технических работников и сотрудников предприятий промышленного сектора. На рисунке 3.6 изображен имитационный опыт по исследованию консистенции самоуплотняющейся бетонной смеси с помощью блокировочного кольца.

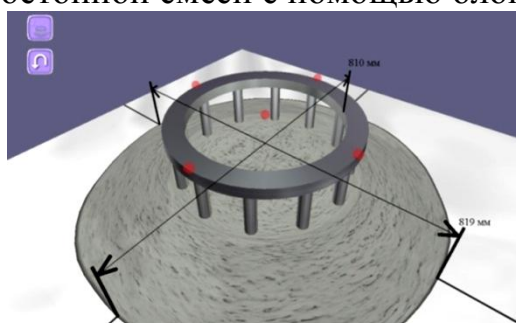


Рисунок 3.6 – Имитационный опыт по исследованию консистенции самоуплотняющейся бетонной смеси с помощью блокировочного кольца

В программе воспроизводятся физические принципы лабораторного эксперимента, имитируются реологические свойства бетонной смеси и физико-механические свойства затвердевшего бетона. Программа выполнена в режиме интерактивной трехмерной визуализации и оснащена звуковым сопровождением. Виртуальная лаборатория сопровождается методически-

ми указаниями по выполнению лабораторных работ, а также рекомендуемыми бланками лабораторных отчетов. Доступ к электронным версиям сопроводительных документов осуществляется из главного меню программы. Исходными данными имитационных лабораторных работ являются выбранные составы бетонной смеси (во всех опытах исследуются одни те же составы). Предлагаемые составы бетона получены на основе результатов реальных лабораторных исследований. Все лабораторные работы оснащены функциональными элементами управления – графическими кнопками, с помощью которых обучаемый открывает диалоговые окна и совершает имитационные действия в соответствии с методикой экспериментов.

Подробный перечень виртуальных лабораторных работ, разработанных Тверским государственным техническим университетом, представлен на информационном научно-образовательном веб-сайте www.sunspire.ru.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На сегодняшний день рынок научно-образовательного программного обеспечения в России находится в стадии развития и является пока «незрелым». Потенциальный объем рынка оценивается очень высоко. Согласно данным «The Economist Intelligence Unit», граждане России тратят около \$10 млрд. в год на получение дистанционного образования в иностранных университетах. На сегодняшний день потенциальный спрос и реальное предложение российского рынка электронных информационных ресурсов отличаются друг от друга в десятки раз. Рынок будет расти, и развиваться как за счет новых потребителей, так и за счет поиска опытными потребителями улучшений существующих систем. По данным CNews Analytics, в России корпоративный сегмент развивается более быстрыми темпами, в то время как росту государственного сектора препятствуют консервативность представителей ВУЗов, отсутствие четко прописанного законодательства в этой области и финансовые затруднения. Согласно прогнозам участников рынка, рост рынка электронных научно-образовательных ресурсов в России составит 20-25 % ежегодно. По данным журнала «Learning Circuits», уже около 40 % компаний в мире активно используют для подготовки персонала симуляции и интерактивные имитационные модели, а около 12 % – обучающие игры и виртуальные лаборатории. При этом растет объем электронных курсов, создаваемых для компаний на заказ: более 40 % организаций используют для создания такого контента услуги сторонних разработчиков, а около 30% – планируют существенно увеличить объем заказных разработок в течение года.

Рост, улучшение и развитие электронных научно-образовательных ресурсов можно ожидать в следующих направлениях: быстрый и точно прогнозируемый возврат инвестиций; ясность и прогнозируемость сроков внедрения; богатство доступных функций и способов применения; воз-

возможность длительного использования, модификации и доработки; свобода выбора и смены поставщиков. Разрыв в уровне развития электронного научно-образовательного обеспечения в России и на Западе пока огромный, но в перспективе он сократится. Все большее количество не только крупных, но и средних компаний предпринимают шаги по использованию в управлении подготовкой и развитием персонала электронных средств обучения и систем компьютерного моделирования.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Алгоритм Любачевского–Стилинжера // Википедия, свободная энциклопедия. – Электрон. дан.– Сан-Франциско: Фонд Викимедиа, 2013.
2. Аникеенко, А.В. Структурный анализ монодисперсных упаковок твердых сфер при разной плотности / А.В. Аникеенко, Н.Н. Медведев // Структура и динамика молекулярных систем, 2007 г., Вып. №1. С.700-705.
3. Арсентьев, В.А. Методы динамики частиц и дискретных элементов как инструмент исследования и оптимизации процессов переработки природных и техногенных материалов / В.А. Арсентьев, И.И. Блехман, Л.И. Блехман, Л.А. Вайсберг, К.С. Иванов, А.М. Кривцов // Обогащение руд. 2010. № 1. С. 30–35.
4. Афанасьев, В.О. Исследования и разработка системы интерактивного наблюдения индуцированной виртуальной среды / В.О. Афанасьев, А.Г. Бровкин // Космонавтика и ракетостроение. 2001. № 20.
5. Баданин, А.Н. Обоснование первой критической нагрузки на зернистую среду супесчаного основания / А.Н. Баданин, А.К. Бугров, А.В. Кротов // Инженерно-строительный журнал. №9. 2012. С.29-34.
6. Баранцева, Е.А. Процессы смешивания сыпучих материалов: моделирование, оптимизация, расчет / Е.А. Баранцева, В.Е. Мизонов, Ю.В. Хохлова // ГОУ ВПО «Ивановский государственный энергетический университет им. В.И. Ленина», Иваново, 2008. – 116 с.
7. Баженов, Ю.М. Модифицированные высококачественные бетоны / Ю.М. Баженов, В.С. Демьянова, В.И. Калашников // научное издание. – М.: Издательство Ассоциации строительных вузов. 2006. 368 с.
8. Белов, В.В. Строительные композиты из оптимизированных минеральных смесей: монография / В.В. Белов, М.А. Смирнов. Тверь: ТвГТУ, 2012. 112 с.
9. Белов, В.В. Компьютерное моделирование и оптимизирование составов строительных композитов: монография / В.В. Белов, И.В. Образцов. Тверь: ТвГТУ. 2014. 124 с.
10. Белов, В.В. Компьютерная трехмерная модель хаотичной упаковки частиц композиционного материала / В.В. Белов, И.В. Образцов, А.Г. Реунов // Теория и практика повышения эффективности строит. материалов: Мат-лы IV Всерос. конф. студ., аспирантов и молодых ученых. Пенза: ПГУАС. 2009. С.4-8.

11. Белов В.В. Капиллярное структурообразование сырьевых композиций на основе минеральных вяжущих веществ. – «ALIFORM» Международное аналитическое обозрение, №6, 2010, С.63-75.

12. Белов, М.А. Принципы проектирования виртуальной компьютерной лаборатории на основе технологии облачных вычислений / М.А. Белов, О.Е. Антипов // Сборник трудов международной конференции «Современные проблемы и пути их решения в науке, транспорте, производстве и образовании – 2010». Одесса: УКРНИИМФ, 2010.

13. Белова, О.В. Методологические основы CFD-расчетов для поддержки проектирования пневмогидравлических систем / О.В. Белова, В.Ю. Волков, А.П. Скибин, А.В. Николаева, А.А. Крутиков, А.В. Чернышев // Инженерный журнал: наука и инновации, 2013, вып. 5. С.1-13.

14. Берлин, А.А. Имитация свойств твердых тел и жидкостей методами компьютерного моделирования / А.А. Берлин, Н.К. Балабаев // Физика. Соровский образовательный журнал. №11. 1997. с.85-92.

15. Болкисев, А.А. О применении метода случайного поиска к задаче случайной упаковки твердых частиц для моделирования структуры смешанного твердого топлива / А.А. Болкисев // Вестник удмуртского ун-та. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2012. Вып. 2. С.106-113.

16. Бондарев, В.Г. Имитационное моделирование структуры плотноупакованных систем твердых дисков / В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль, Т.П. Бондарева // НАУЧНЫЕ ВЕДОМОСТИ №9 (49) 2008. С.248-260.

17. Голубинский, А.Н. Методы аппроксимации экспериментальных данных и построения моделей / А.Н. Голубинский // Вестник Воронежского института МВД России. Выпуск №2. 2007. С.1-6.

18. Горбачёв, К.П. Основы механики деформируемого твердого тела / К.П. Горбачёв, Е.Г. Краснов, В.В. Субботницкий // Владивосток: Уссури, 1998.

19. Григорьев, Ю.Д. Планы эксперимента для моделей регрессии типа сплайнов / Ю.Д. Григорьев // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. №11 (79). 2013.

20. Даутов, М.М. Исследования зависимости коэффициента диффузии в плотных упаковках сферических частиц от свойств упаковок методами Монте-Карло / М.М. Даутов // Сборник работ 59-й научной конф. студентов и аспирантов Белгосуниверситета: В 3 ч. ч.3 БГУ, 2002. 207 с. ISBN 985-445-369-3 (С.9-14).

21. Дворецкий С.И., Муромцев Ю.Л., Погонин В.А. Моделирование систем. – М.: Изд. центр «Академия», 2009. – 320 с.

22. Дорофеенко, С.О. Численное моделирование течения бидисперсного сыпучего материала в реакторе шахтного типа / С.О. Дорофеенко // Теоретические основы химической технологии. 2007. Том 41. №6. С. 625-629.

23. Егорова, Е.В. Поверхностные явления и дисперсные системы: учеб. пособие / Е.В. Егорова, Ю.В. Поленов // Иван. гос.хим.-технол. ун-т.-Иваново, 2008. - 84 с.

24. Иванов, П.Л. Грунты и основания гидротехнических сооружений / П.Л. Иванов // Учебник для гидротехнических специальностей вузов. – М.: ВШ, 1985.

25. Клишин, С.В. Применение метода дискретных элементов при анализе гравитационного движения гранулированного материала в сходящемся канале / С.В. Клишин // Горный информационно-аналитический бюллетень.(научно-технический журнал), 2009, №12, С.273-277.

26. Козырев С.А. CFD метод в компьютерных технологиях как инструмент исследования аэродинамики глубоких карьеров / С.А. Козырев, В.Ф. Скороходов, Р.М. Никитин, П.В. Амосов, В.В. Массан // Труды горного института Кольского НЦ РАН. 2014. С.251-255.

27. Колганов, Д.А. Нереальная физика. Тестирование NVIDIA PhysX на конфигурации SLI Multi-Card / Д.А. Колганов // Игромания. Февраль. 2010. С. 162-164.

28. Кондращенко, В.И. Интегрированный подход к решению задач строительного материаловедения / В.И. Кондращенко, Д.А. Гребенников, С.В. Гузенко, А.В. Кендюк // Мат-лы межд. конгресса «Наука и инновации в строительстве SIB-2008». Т.1. Современные проблемы строительного материаловедения и технологии – Воронеж. 2008. 358 с. (С. 235-240).

29. Королев, Л.В. Плотная упаковка полидисперсных частиц в композитных строительных материалах / Л.В. Королев, А.П. Лупанов, Ю.М. Придатко // Научный журнал «Современные проблемы науки и образования». 2007. №6.

30. Кривая Безье: Материал из Википедии // Википедия, свободная энциклопедия. – Электрон. дан. – Сан-Франциско: Фонд Викимедиа, 2014.

31. Кучин, И.В. Моделирование процессов структурообразования в дисперсных системах / И.В. Кучин, Н.Б. Урьев // Журнал физической химии. 2007. Том 81. №3. с.421-425.

32. Лесовик, В.С. Геоника (геомиметика) как трансдисциплинарное направление исследований / В.С. Лесовик // Высшее образование в России. 2014. № 3. С.77-83.

33. Мамыркулов, М.И. Математическое моделирование структуры пористых материалов / М.И. Мамыркулов, Ю.А. Мамонтов, К.М. Абдугаппаров, А. Дауренбаев // Популярное бетоноведение, 2008. № 4. С. 77-78.

34. Математика: Энциклопедия / под ред. Ю.В. Прохорова.— М.: Большая Российская энциклопедия, 2003.

35. Медведев, Н.Н. От аморфной фазы к дефектному кристаллу. Исследование структурных особенностей плотных упаковок твердых сфер / Н.Н. Медведев, А. Безруков, Д. Штоян // Журнал структурной химии. 2004. Том 45. С.24–31.

36. Мизгулин, В.В. Моделирование плотных материалов методом упаковки сферополиэдров / В.В. Мизгулин, Р.М. Кадушников, Д. М. Алиевский, В. М. Алиевский // Компьютерные исследования и моделирование. 2012. Т.4. №4 С.757–766.

37. Михеева, Е.В. Поверхностные явления и дисперсные системы. Коллоидная химия. Сборник примеров и задач / Е.В. Михеева, Н.П. Пикула, С.Н. Карбаинова // учебное пособие для студентов ХТФ, ФТФ, ЭЭФ, ИГНД и ИДО. – Томск: Изд-во ТПУ, 2008. – 116 с.

38. Норенков, И.П. Информационные технологии в образовании / И.П. Норенков, А.М. Зимин // М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004. 352 с.

39. Образцов, И.В. Оптимизация зерновых составов цементно-минеральных смесей для производства строительных композитов методами компьютерного моделирования: автореф. дис. на соискание ученой степени канд. тех. наук (05.23.05 – Строительные материалы и изделия) / И.В. Образцов; рук. В.В. Белов. – Тверь, 2014. – 24 с.

40. Ординарцева, Н.П. Планирование эксперимента в измерениях / Н.П. Ординарцева // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. №3. 2013.

41. Пальцер, У. Компьютерное моделирование в производстве бетонных изделий / У. Пальцер, Й.Г. Швабе // Бетон и Железобетон. 2010. С.20-22.

42. Палюх, Б.В. Электронное обучение в инженерном образовании / Б.В. Палюх, А.В. Твардовский, В.К. Иванов // Качество образования. №10. 2012. С.34-37.

43. Роул, А. Основные принципы анализа размеров частиц / А. Роул // Техническая аннотация Malvern Instruments Limited. 2009. 12 с.

44. Слоэн, Н. Дж. А. Упаковка шаров / Н. Дж. А. Слоэн // В мире науки: Scientific American. Издание на русском языке, 1984. №3. С.72-82.

45. Советский энциклопедический словарь / под ред. А.М. Прохорова. – М.: Советская энциклопедия, 1980.

46. Соловов, А.В. Виртуальные учебные лаборатории в инженерном образовании / А.В. Соловов // Сборник статей «Индустрия образования». Вып.2. - М.: МГИУ, 2002. С.386-392.

47. Трухин, А.В. Виды виртуальных компьютерных лабораторий / А.В. Трухин // Информационные технологии в высшем образовании. 2005. С. 58-67.

48. Трухин, А.В. Об использовании виртуальных лабораторий в образовании / А.В. Трухин // Открытое и дистанционное образование. – 2002. – № 4 (8).

49. Ульянов, В.И. Математическое обоснование получения упорядоченных структур на основе частиц сферической формы / В.И. Ульянов,

А.М. Лавров, О.Н. Клочков, В.В. Чистяков // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Естественные науки». 2007. № 2. С.78-92.

50. Харитонов, А.М. Структурно-имитационное моделирование в исследованиях свойств цементных композитов: автореф. дис. на соискание ученой степени доктора тех. наук (05.23.05 – Строительные материалы и изделия) / А.М. Харитонов; рук. П.Г. Комохов. - С.-Петербург, 2009. - 38 с.

51. Шишлова, А. Песок сухой, влажный и звучащий. – Наука и жизнь, № 6, 1999.

52. Baranau, V. Pore-size entropy of random hard-sphere packings / V. Baranau, D. Hlushkou, S. Khirevich, U. Tallarek // The Royal Society of Chemistry. Soft Matter, 2013, 9, pp.3361-3372.

53. Binder, K., Heermann D.W. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics / K. Binder, D.W. Heermann // An Introduction. London-NY.: Springer. 2010. 200 p.

54. Bullard, J.W. The Virtual Cement and Concrete Testing Laboratory Consortium / J.W. Bullard // Annual Report, January 2003, pp. 1-39.

55. Hlushkou, D. Computer generation of random-close packing of spheres / D. Hlushkou, V. Apanasovich, A. Seidel-Morgenstern, U. Tallarek.

56. Hu, J. Shape Characterization Of Concrete Aggregate / J. Hu, P. Stroeven. // Image Anal Stereol, 25, 2006; pp. 43-53.

57. Jiao, Y. Maximally Random Jammed Packings of Platonic Solids: Hyperuniform Long-Range Correlations and Isostaticity / Y. Jiao, S. Torquato // Physical Review E, 84, 041309 (2011).

58. Pabst, W. Characterization of particles and particle systems / W. Pabst, E. Gregorova // ICT Prague. 2007. 122 p.

59. Raabe, D. Computational Materials Science. The Simulation of Materials Microstructures and Properties. / D. Raabe // Weinheim. NY.: Wiley, 1998. 380 p.

60. Satoh, A. Introduction to Practice of Molecular Simulation: Molecular Dynamics, Monte Carlo, Brownian Dynamics, Lattice Boltzmann and Dissipative Particle Dynamics / A. Satoh // Elsevier, 2011. 322 p.

61. Stroeven, P. Virtual Reality Studies of Concrete / P. Stroeven, L.J. Sluys, Z. Guo, M. Stroeven. // Forma, 21, 2006, pp. 227–242.

62. Torquato, S. Jammed Hard-Particle Packings: From Kepler to Bernal and Beyond / S. Torquato, F.H. Stillinger // Reviews of Modern Physics, 82, 2633 (2010).

63. Torquato, S. Reformulation of the Covering and Quantizer Problems as Ground States of Interacting Particles / S. Torquato // Physical Review E, 82, 056109 (2010).

64. Zachary, C. E. Hyperuniformity, Quasi-Long-Range Correlations, and Void Space Constraints in Maximally Random Jammed Particle Packings. II. / C. E. Zachary, Y. Jiao, S. Torquato // Anisotropy in Particle Shape, Physical Review E, 83, 051309 (2011).

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
Глава 1. Компьютерная реконструкция физических явлений и сред ...	4
1.1. Понятия модели, физического явления и среды.....	4
1.2. Компьютерная реконструкция сплошных сред	5
1.2.1. Понятие сплошной среды.....	5
1.2.2. Методы компьютерного моделирования сплошных сред	7
1.3. Компьютерная реконструкция дискретных сред.....	9
1.3.1. Понятие дискретной среды	9
1.3.2. Основные сведения о дисперсных системах	11
1.3.3. Методы определения размеров частиц	14
1.3.4. Эквивалентные диаметры частиц.....	18
1.3.5. Методы определения формы и удельной поверхности частиц....	22
1.3.6. Теория упаковок дискретных сред.....	24
1.3.6.1. Плотность упаковки и координационное число	24
1.3.6.2. Основные упорядоченные упаковки монодисперсных сферических частиц	24
1.3.6.3. Максимальная плотность упаковки и среднее расстояние между частицами	26
1.3.6.4. Влияние формы частиц на максимальную плотность упаковки....	27
1.3.6.5. Упорядоченные упаковки полидисперсных сферических частиц..	28
1.3.6.6. Влияние гранулометрического состава частиц на плотность упаковки	29
1.3.6.7. Неупорядоченные плотные упаковки полидисперсных сферических частиц	30
1.3.6.8. Геометрическая оценка упаковок полидисперсных сферических частиц оптимальных зерновых составов	33
1.3.7. Компьютерное моделирование упаковок дискретных сред	33
1.3.7.1. Распространенные методы моделирования плотных упаковок	33
1.3.7.2. Алгоритм «сжатия» Любачевского-Стилинджера	38
1.3.7.3. Алгоритм «расталкивания» Жодре-Тори	40
1.3.7.4. Алгоритм перекатывающихся частиц «Drop and Roll»	41
1.3.7.5. Метод дискретных элементов.....	43
1.3.8. Реализация комбинированного метода пространственной реконструкции упаковки дискретной среды.....	45
1.3.9. Моделирование плотных бинарных и тернарных упаковок сферических частиц с учетом поверхностного взаимодействия частиц	49
1.3.10. Моделирование плотных полидисперсных упаковок сферических частиц методом последовательного заполнения элементарного объема....	53
1.3.11. Компьютерное моделирование дисперсных структур, образованных в результате капиллярного взаимодействия частиц	56

Глава 2. Компьютерный анализ и математическая обработка экспериментальных данных	61
2.1. Аппроксимация эмпирических распределений	61
2.1.1. Понятие функции распределения.....	61
2.1.2. Аппроксимация данных сплайнами Безье.....	63
2.1.3. Алгоритмизация обработки данных дисперсионного анализа ...	69
2.2. Сочетание эмпирических распределений.....	71
2.2.1. Практическая значимость сложения эмпирических распределений.....	71
2.2.2. Алгоритм сложения эмпирических распределений с задаваемым долевым соотношением	73
2.2.3. Алгоритм сложения эмпирических распределений с возможностью автоматического изменения долевого соотношения	77
2.3. Математическое планирование экспериментов.....	79
Глава 3. Компьютерная визуализация и имитационное моделирование технического оборудования и устройств	84
3.1. Применение виртуальных лабораторий в техническом образовании	84
3.2. Процесс обучения с применением виртуального тренажера	86
3.3. Принципы построения виртуальных тренажеров.....	88
3.4. Примеры использования виртуальных тренажеров в различных технических дисциплинах	91
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	94
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК	95

Владимир Владимирович Белов
Илья Вячеславович Образцов
Владимир Константинович Иванов
Евгений Николаевич Коноплев

**КОМПЬЮТЕРНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ РЕШЕНИЯ
НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИХ И ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ
ЗАДАЧ**

Учебное пособие

Редактор

Корректор

Технический редактор

Подписано в печать

Формат 60x84/16

Бумага писчая

Физ.печ.листов

Усл.печ.л

Уч. - изд.л

Тираж 100 экз.

Заказ №

С - 92

Издательство и типография Тверского государственного технического университета

170026, г. Тверь, наб. Афанасия Никитина, 22