

ПЕРВЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО СТРОИТЕЛЬНОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Вознесенский В.А. (Одесская государственная академия строительства и архитектуры)

Рассмотрены типы математических моделей в строительном материаловедении. Проанализировано их использование в шести докторских диссертациях, содержащих элементы компьютерного материаловедения, а также в материалах 10 международных семинаров по моделированию и оптимизации композитов (МОК).

Введение. В 1992 г. основан международный журнал *Computational Materials Science*. Анализ публикаций показывает, что компьютерное материаловедение охватывает практически все теоретические и прикладные аспекты материаловедения, не нарушая его стереотипного содержания как «отрасли науки и техники, которая изучает состав, строение, химические, физические, потребительские и технологические свойства материалов, методы их оценивания, разработки новых и совершенствования существующих материалов высокого качества, технологичности, долговечности, безопасности и надежности в процессе эксплуатации» [1]. В строительстве необходимость в методах компьютерного материаловедения возникает, когда результат не может быть получен с необходимой точностью в прямом физическом эксперименте или вне компьютерной технологии без больших затрат материальных ресурсов и/или времени [2]. По-видимому, сейчас трудно провести четкую границу между компьютерным строительным материаловедением (КСМВ) и, в частности, информационными технологиями в производстве строительных материалов или автоматизированным проектированием, поскольку математические постановки задач, методы их решения и программное обеспечение нередко одинаковы.

Пять типов математических моделей, характерных для строительного материаловедения. Целесообразно считать 1992 г. началом отчета для нового научного направления, не отрицая, что и в более ранних публикациях отражено решение ряда задач близкими к компьютерному материаловедению методами. Более того, к этому времени

сформировалась типизация [3, с.10; 4, с.14] математических моделей, достаточно распространенных в строительном материаловедении.

M_1 – уравнения математической физики (УМФ) – традиционно входили в описание процессов теплообмена и структурообразования в дисперсных системах, течения неньютоновских жидкостей, напряженно-деформированного состояния материала... Естественно, что к решению привлекались численные методы, реализуемые на ЭВМ.

M_2 – концептуальные модели, включающие те или иные инженерные (механические, физико-химические...) идеализированные представления о материале, которые описываются разнообразными математическими методами. Кроме традиционных расчетов в системе «состав – структура – свойства» бетонов, сюда вошли модели гидратации цементов, структурообразования наполненных полимеров, коррозии цементных и деградации полимерных композитов и т.п.

M_3 – экспериментально-статистические модели (ЭСМ), описывающие на основе экспериментальных данных (как правило, алгебраическими выражениями) связи между входами X и выходами Y системы (а также взаимосвязи внутри групп факторов X и внутри групп критериев качества Y). Это моделирование (иногда называемое излишне общим термином «кибернетическое») накопило положительный опыт построения и применения ЭСМ практически для всех строительных материалов. Оно вошло в КСМВ с достаточно развитым и универсальным методическим обеспечением, основанным на постоянно совершенствующемся аппарате математической статистики и математической теории эксперимента и ориентированным на инженеров-экспериментаторов (будущим специалистам по строительным материалам даже читался обязательный курс [4]).

M_4 – модели исследования операций, оставшиеся, надо признать, весьма экзотическими в строительном материаловедении.

M_5 – имитационные модели, реализуемые исключительно в вычислительном эксперименте (ВЭ). При этом в алгоритм ВЭ, как правило, входит генератор случайных чисел, заставляющий модель флуктуировать подобно реальному объекту в натурном эксперименте (НЭ). В имитационном моделировании возможно использование любых моделей ($M_1...M_4$), совместимых по логике инженерной задачи. Были исследованы структурно-имитационные модели (СИМ): случайная структура материала собирается из множества заданных (по форме, размеру, свойствам...) элементов и на такой материал воздействуют, в частности, радиационные потоки (В.А. Воробьев) или нагрузки (Ю.В. Зайцев). Программное обеспечение такого ВЭ эксклюзивно.

Отдавая должное этим начальным элементам *КСМВ*, целесообразно проанализировать, как они развиты и чем дополнены за последние годы. Концентраторами научно-методической новизны допустимо считать защищенные в этот период докторские диссертации.

Шесть докторских диссертаций, содержащих элементы компьютерного материаловедения. Анализируются авторефераты диссертаций [5-10] (в хронологическом порядке), а также публикации их авторов в доступных изданиях.

Т.В. Ляшенко [5] разработала концепцию полей свойств материалов, направленную на максимальное извлечение из многофакторных ЭСМ содержательной информации, и необходимое методическое обеспечение, включающее ВЭ с использованием метода Монте-Карло. Созданы основы новой ресурсосберегающей технологии исследования композитов на основе НЭ и ВЭ. Модельно-детерминированные поля (полные и локальные) трансформируются в случайные за счет учета с разным риском ошибок моделирования в каждой точке, что приближает результаты ВЭ к НЭ. Поля свойств силикатных и полимерных композитов, их отношения и взаимосвязи проанализированы в задачах реологии и структурообразования, при формировании функциональных свойств и стойкости.

А.В. Илюхин [6] развил идеи и методы СИМ, с одной стороны, выдвинув ряд продуктивных гипотез о роли структуры композита в формировании его свойств, а с другой – создав программное обеспечение, ориентированное на потребности материаловедов. Получены перспективные результаты при исследовании структурно-зависимых свойств композитов, в частности, электрофизических, а также процессов образования, развития и гашения трещин в бетонах на прочных и плотных заполнителях.

Н.И. Нетеса [7] в ВЭ с использованием метода конечных элементов (МКЭ) исследовал влияние пор и других дефектов структуры на концентрацию растягивающих напряжений, на зарождение и на развитие трещин. Как показали ВЭ, опасные напряжения уменьшаются в несколько раз, если дефекты находятся между жесткими зернами инертных компонентов. Это условие формирования структуры обеспечивают рациональные зерновые составы, которые для конкретных малоцементных бетонов с наполнителями, уплотненных при различных режимах, исследованы и оптимизированы на комплексах ЭСМ.

С.В. Коваль [8] разработал эффективный подход к проектированию модифицированных бетонов, который объединяет концептуальные модели теории модификации цементных систем с многофакторным

ЭС-моделированием (разнообразным и по критериям качества, и по рецептурно-технологическим факторам). Это позволяет проводить с высокой степенью достоверности комплексные исследования полифункциональных добавок, находить рациональные решения по модифицированию бетона добавками в условиях изменяющихся факторов его состава, технологии и эксплуатации.

В.И. Кондращенко [9] при исследовании производства брусковых изделий показал возможность и полезность интегрированного подхода к назначению рецептурно-технологических факторов, когда материаловедческие и конструкторские задачи ставятся и решаются комплексно. При этом продуктивно использованы три типа моделей (*СИМ*, *УМФ* и *ЭСМ*) индивидуально или в сочетании при решении каждой задачи. Для железобетонных шпал найдены оптимальные параметры макроструктуры высокопрочного бетона на плотных и пористых заполнителях, вскрыты различия в механизмах деформирования таких бетонов и другие их особенности. Получены нетривиальные результаты для древесно-полимерных шпал и биопластиков. В частности, методами компьютерного материаловедения определена химическая структура отвержденной фенолформальдегидной смолы и трудно доступные в эксперименте характеристики полимеров древесины, а также параметры теплообменных процессов при прессовании шпал.

О.Л. Дворкин [10] развил классический подход к решению проблемы назначения составов бетонов; предложен ряд новых концептуальных моделей, позволяющих объяснять влияние рецептурных факторов, взаимосвязи между параметрами структуры, связи этих параметров с критериями качества бетонной смеси и бетона. Модели, дополненные эмпирическими оценками коэффициентов, позволили создать компьютерную систему многокритериального проектирования составов, которая существенно расширяет возможности применения информационной технологии при производстве бетона.

Поскольку шесть докторских диссертаций, в совокупности развивающие все типы математического моделирования в строительном материаловедении, защищены в 2003-5 г., то можно считать, что за последние годы *КСМВ* сделало качественный скачок.

Наиболее развиваемые и перспективные направления *КСМВ*, представленные на семинарах *МОК*. Анализ диссертаций показал, что наиболее продуктивно развиваются экспериментально-статистическое и имитационное моделирование. К такому же заключению приводит анализ почти 2000 страниц 10 сборников материалов международного семинара *МОК*, проведенного в 1996-2005 г. Науч-

ным советом по компьютерному материаловедению Международной инженерной академии совместно с ОГАСА [11]. Не возвращаясь к диссертациям, можно выделить по двум этим направлениям наиболее продуктивные научные группы и перспективные исследования.

В Украине (кроме группы, работающей в ОГАСА над проблемами методологии *КСМВ* и практики ЭС-моделирования) большой опыт накоплен в НИИ вяжущих веществ и материалов им. В.Д. Глуховского (П.В. Кривенко, Е.К. Пушкарева, Н.А. Мохорт и др.), главным образом, в области щелочных алюмосиликатных композитов; выпущены методические рекомендации [12] достаточно общего назначения. В Донбасской НАСА (В.И. Братчун, Л.И. Базжин, С.С. Поливцев и др.) ЭСМ используют в области композитов на модифицированных органических вяжущих, а в Приднепровской ГАСА (В.И. Большаков, Ю.И. Дубров, В.Н. Волчук и др.) – в металловедении. Несколько версий программного обеспечения, ориентированного на материаловедов, создано в НТУ КПИ (Г.А. Статюха). Из России в сборниках *МОК* систематически публиковались работы Мордовского госуниверситета (В.Т. Ерофеев, В.П. Селяев с соавторами), которые отличает широкая гамма исследуемых материалов и небанальный подход к построению ЭСМ (в *МОК* 43, с. 60 опубликована информация о специализированной программе FACTOR).

Целесообразно отметить две, на наш взгляд, весьма перспективные группы работ. В первой – представленный НИИБЖ (К.А. Пирадов с соавторами: *МОК* 40 с.61, *МОК* 44 с.23) комплекс моделей связывает состав бетона с показателями трещиностойкости K_{Ic} и K_{Ic} , а также с прогнозируемой (в годах) долговечностью. Во второй – комплексное исследование известесодержащих композитов (ОГАСА, Е.С. Шинкевич с соавторами – *МОК* 41 с. 20, *МОК* 44 с. 15 и с. 37); используются нетривиальные планы «смесевой треугольник на кубе» [3], а в число моделируемых критериев входят количественные оценки фазового состава новообразований, порового пространства и других структурных параметров (*МОК* 42 с.70, *МОК* 43 с. 28), определяемые методами физико-химического анализа.

Имитационные модели в строительном материаловедении встречаются значительно реже, чем ЭСМ, и их создание не сосредоточено в каких-либо научных центрах Украины. С использованием имитационных моделей в Харькове выполнены работы (кроме вошедших в [9]) по анализу на основе термoporометрии влияния различных факторов на микроструктуру цементного камня и его свойства (*МОК* 42, с. 32), а в

Днепропетровске (кроме работ, вошедших в [7]) – при проектировании первичной защиты арматуры железобетонных конструкций в газовых средах (МОК'41, с. 19). Мордовским университетом на МОК'36–44 [11] представлен большой цикл работ по исследованию напряженно-деформированного состояния (НДС) композиционных структур с использованием последовательной схемы «планирование ВЭ с варьированием факторов состава – численное моделирование МКЭ – описание ЭСМ влияния факторов состава на компоненты НДС».

Следует отметить две перспективные работы, представленные на МОК'40 и МОК'44. Это имитационное моделирование поверхностей разрушения бетонов разных классов (V. Mechtcherine, H.S. Müller – Карлсруэ) и формирования магистральной трещины в материале как процесса постоянно возникающих малых кластеров – начальных трещин (А.Н. Гергега с соавторами – Одесская ГА холода).

Вопросы без ответов. В приглашении к каждому семинару МОК предлагались для обсуждения 5 приоритетных вопросов. По многим из них в сборниках [11] можно найти ответы (разной степени полноты и корректности). Однако по некоторым вопросам весьма мало «информации к размышлению».

Первая группа «вопросов без ответов» методологическая: какое материаловедческое знание можно считать новым; методы получения нового знания на основе анализа моделей; достоверность экспериментальной информации и доказательность материаловедческих гипотез.

Вторая группа – совместное использование в ВЭ моделей разного уровня (атомно-молекулярного, гетерофазного, матрица-наполнитель и др.) и различного генезиса; связь моделей всех уровней и генезисов с качеством композита; модели поведения материала в конструкциях.

Третья группа – проблема LIFE CYCLE материалов и конструкций; прогнозирование времени жизни; теоретическая и экспериментальная составляющие прогноза; риск моделирования и риск прогноза.

Заключение. Не вызывает сомнения, что развитие строительного материаловедения стимулируется методологией и результатами КСМВ. Интеллектуальный потенциал коллег, работающих в Украине и России и заинтересованных в решении проблем КСМВ, позволяет не только широко применять методы компьютерного материаловедения при анализе и оптимизации строительных материалов любого класса, но и создавать основанные на этих методах новые технологии исследований. Основным тормозом при этом является крайняя скудость экспериментальной базы. Без доступа к современной измерительной технике

не удастся ответить на вызов Computational Materials Science – развитие экспериментальных исследований материалов во взаимосвязи с компьютерными технологиями.

Литература

1. Бюллетень ВАК України. – 2002. – №1. – С. 7.
2. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Методы компьютерного материаловедения и технология бетона // Будівельні конструкції– Вип. 56: Сучасні проблеми бетону та його технологій. – К.: НДБК, 2002. – С. 217-226.
3. ЭВМ и оптимизация композиционных материалов / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, Я.П. Иванов, И.И. Николов. – К.: Будивельник, 1989. – 240 с.
4. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Огарков Б.Л. Численные методы решения строительно-технологических задач на ЭВМ. – К.: Выща школа, 1989. – 328 с.
5. Ляшенко Т.В. Поля свойств строительных материалов (концепция, анализ, оптимизация): Автореф дис. д.т.н.: 05.23.05 / ОГАСА. – Одесса, 2003. – 34 с.
6. Илюхин А.В. Автоматизация технологического процесса приготовления компонентов радиопоглощающего бетона с оптимизацией по электрофизическим характеристикам электропроводной фазы): Автореф дис. д.т.н.: 05.13.06/ МГАДИ/ТУ – М., 2004. – 39 с.
7. Нетеса М.І. Наукові основи підвищення ефективності використання цементу в бетонах): Автореф. дис. д.т.н.: 05.23.05 / ПДАБА – Днепропетровськ. – 2004. – 35 с.
8. Коваль С.В. Развитие научных основ модифицирования бетонов полифункциональными добавками): Автореф. дис. д.т.н.: 05.23.05 / ОГАСА. – Одесса, 2005. – 34 с.
9. Кондращенко В.И. Оптимизация составов и технологических параметров получения изделий брускового типа методами компьютерного материаловедения): Автореф. дис. д.т.н.: 05.23.05 / МГУПС (МИИТ). – М., 2005. – 48 с..
10. Дворкин О.Л. Основы теории та методології багатопараметричного проектування складів бетону: Автореф. дис. д.т.н.: 05.23.05 / ПДАБА – Днепропетровськ. – 2005. – 36 с.
11. Материалы международных семинаров по моделированию и оптимизации композитов (МОК). – Одесса, изд. «Астропринт» (кроме МОК'36 – «Система-сервис»): МОК'35, 1996. – 138 с.; МОК'36, 1997. – 152с.; МОК'37, 1998. – 196 с.; МОК'38, 1999. – 161 с; МОК'39, 2000. – 198 с; МОК'40,2001. – 197 с; МОК'41, 2001. – 195 с; МОК'42, 2003 – 218 с; МОК'43, 2004. – 220 с; МОК'44, 2005. – 200 с.
12. Методические рекомендации по применению экспериментально-статистических моделей для анализа и оптимизации состава, технологии и свойств композиционных материалов на основе щелочных вяжущих систем / Науч. ред. В.А. Вознесенский, П.В. Кривенко. – ОГАСА, НИИВМ им. В.Д. Глуховского. – К., 1996. – 105 с.