



О МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ В СТРОИТЕЛЬНОМ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

УДК 624.05 : 519.24

АВТОР

ЛЯШЕНКО Т.В. д-р техн. наук, профессор ОДАБА
Одесская государственная академия строительства и архитектуры

АННОТАЦИЯ

Представлена классификация математических моделей строительного материаловедения с точки зрения их генезиса и связей с компьютерными технологиями. Подчеркивается важность взаимодействия экспериментального подхода с компьютерными методами и роль экспериментально-статистических моделей. Рассматриваются возможности совместного использования моделей разных типов, развиваемые компьютерным материаловедением. Выделены основные положения методологии рецептурно-технологических полей.

Classification of mathematical models in building materials science from position on their geneses and on connections with computer technologies is presented. Underlined are the importance of interaction of experimental approach with computational methods and the role of experimental-statistical models. The potentials of joint use of the models of different type are considered, which could be developed by computational materials science. The basics of composition-process fields methodology are pointed out.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

ВВЕДЕНИЕ.

В декларации комитета RILEM «Numerical modeling of cement-based materials» (ТС 244-NUM) справедливо отмечено, что, несмотря на давнюю историю моделей и моделирования, компьютерные технологии открыли беспрецедентные возможности для их развития и применения в науке о материалах и в стройиндустрии. Это стало понятным уже в начале 90-х, о чем напоминает и данная статья. Ее цель – представить имеющуюся классификацию математических моделей строительного материаловедения с позиций их включения в компьютерное материаловедение – продиктована наблюдаемым ожидаемым всплеском «интереса» к моделям. Этот новый всплеск в значительной степени обусловлен следующим.

Большинство исследований в современном строительном материаловедении направлено на создание высококачественных композиционных материалов, наилучшим образом отвечающих своему назначению. В этом смысле их стали называть высокофункциональными [1]. К таким материалам можно отнести и высокопрочный бетон для конструкций моста, и быстротвердеющий раствор низкой прочности для кратковременного закрепления породы.

Назначение диктует комплекс требований к критериям качества материала на разных этапах его жизни: к характеристикам структуры, технологическим и эксплуатационным свойствам; к критериям стойкости, уровень которых определяет время службы при работе в агрессивных, низко- и высокотемпературных средах; к надежности, гарантированности свойств в системах, отказ которых приводит к недопустимым последствиям; к экологическим критериям «чистоты» технологии, утилизации отходов, ресурсосбережения и др. Концепция устойчивого развития выдвигает, в частности, требования по обеспечению долговечности бетонов. Это позволило бы сократить выбросы CO₂ от производства цемента, уменьшить нагрузку на исчезающие источники природных заполнителей, смягчить проблему вывоза бетона



разрушенных конструкций, снизить расходы на ремонт [1].

Современные производители вынуждены создавать новые высоко технологичные продукты в рекордные сроки, повышая при этом и их качество, и эффективность процессов, в узком и широком смысле. Последнее означает, что хотя увеличение долговечности достигается, как правило, за счет высокой «начальной» стоимости собственно материала, это может снизить затраты «в целом», оказаться эффективным для включающей материал системы. Такой высококачественный материал оказывается конкурентоспособным.

При этом подразумевается эффективность всей жизни материала, «от рождения до смерти» (от идеи, через исследование, конструирование и производство, при эксплуатации и деградации, до утилизации). Это соответствует современной философии качества – гарантировать качество, строя его с самого начала жизни продукта, с замысла, проекта. Принцип обеспеченности качества представляет компромисс, смягчает противоречие между тенденцией улучшения качества жизни людей и необходимостью экономить ресурсы.

Проектирование качества (Quality by Design, QbD) означает, что качество должно быть заложено в продукт при его разработке. Для последующего воплощения должны быть назначены такие параметры состава и процесса производства композиционного материала, которые обеспечат требуемые или улучшенные свойства, включая устойчивость и надежность, и как следствие, максимальную эффективность его применения.

Разрабатываемые материалы – сложные, гетерогенные, многокомпонентные системы. Само понятие «композит» указывает на принципиальную возможность найти рецептурные решения, которые бы удовлетворяли требованиям, выдвигаемым тем или иным назначением. Реализовать такую возможность помогает увеличение числа компонентов, ставшее тенденцией, «магистральным направлением» в разработках строительных композитов. Это многокомпонентные вяжущие системы, комплексные модификаторы, включающие десятки химических добавок и активных минеральных компонентов разной дисперсности, модифицированные полимерные связующие, полифракционные наполнители и заполнители, гибридные волокнистые наполнители и другие многокомпонентные компоненты многокомпонентных систем, в частности, таких как полимерминеральные сухие смеси. Характерна «вложенная» многокомпонентность. Увеличение количества компонентов и их подсистем – своего рода вызов строительному материаловедению, которому приходится анализировать и выбирать рецептурно-технологические решения из неограниченного многообразия вариантов.

¹ Среди них могут быть и стоимостные критерии.

При разработке любых многокомпонентных композиций (на минеральных или органических связующих, твердеющих естественно или при тепловой обработке, конструкционных или отделочных и т. д.) приходится решать проблемы количественного анализа и обеспечения свойств на разных стадиях существования материала (свойств смеси, характеристик формирующейся структуры, функциональных свойств композита), в их связи с многокомпонентным составом и параметрами процессов.

Параметры рецептуры и технологии (включая условия эксплуатации), уровни которых можно назначить, зафиксировать, составляют вектор рецептурно-технологических (РТ) факторов $x = (x_1, \dots, x_k)$. Критерии качества Y – технологические и структурные характеристики материала на разных стадиях, эксплуатационные свойства и любые другие отклики¹ на изменения управляемых входов x могут быть обобщенно названы свойствами.

Схема на рис. 1 подчеркивает природу случайных величин Y , характеризующих реакцию структуры материала на управляемые воздействия x и в силу этого представляющих информационную базу для формирования желаемых структур за счет тех или иных значений РТ-факторов.



Рис. 1. Схематическое изображение связей при рассмотрении цепи «рецептура, технология → структура → свойства».

Очевидно, что для количественного анализа связей между факторами x и критериями Y и для «закладки качества в проект» (для назначения состава и режимов, которые обеспечат заданные или улучшенные уровни комплекса свойств) необходимы математические модели этих связей. По таким моделям могут решаться и прямые задачи материаловедения (прогноза, оценки Y), и обратные задачи (проектирования, определения допустимых и лучших x) [2].

Типология математических моделей в строительном материаловедении (по В.А. Вознесенскому). Математические модели – неотъемлемые составляющие этой мультидисциплинарной отрасли науки, на всех уровнях рассмотрения материала (от атомно-молекулярного до материала в конструкции); сформирована их типизация [3-5].



Выделены следующие пять типов различных по своей природе моделей (M_1 - M_5), ориентированных на те или иные цели моделирования, в той или иной степени связанных с использованием компьютерных средств.

1. Основанные на фундаментальных законах уравнения математической физики (УМФ), описывающие процессы теплообмена и структурообразования в дисперсных системах, течение жидкостей, напряженно-деформированное состояние материала... Особенности и проблемы их применения в материаловедении, как подчеркивают Б.В. Гусев и А.С. Файвусович [6], заключаются в том, что приходится описывать совокупности многостадийных последовательных и параллельных физических и химических процессов, используя законы и зависимости разных научных дисциплин, учитывая структурные особенности среды и др. Компьютеры нужны, прежде всего, для решения численными методами формулируемых затем краевых задач. Важные для анализа механизмов структурообразования и деструкции, обобщенно характеризуя материалы того или иного класса, УМФ не выражают связей свойств с многокомпонентным составом, знание которых необходимо для конструирования (синтеза) конкретных материалов конкретного назначения.

2. Концептуальные модели, основанные на идеализированных (механических, физико-химических ...) представлениях о материале. Такую модель сначала выражают вербально, как в примере [3-4] с реологическим телом Максвелла: «пусть тело состоит из пружины и поршня, движущегося внутри вязкой жидкости». Далее модель описывается аналитически дифференциальными (модель Максвелла) или алгебраическими уравнениями (распределение напряжений в образце, представленном системой конечных элементов), геометрическими соотношениями (укладка зерен шаров в объеме), кинетическими уравнениями (устойчивость свобододисперсных систем). К этому типу относятся и формулы традиционных расчетов состава бетона (включаемые в компьютерные системы проектирования составов), модели гидратации цемента и структурообразования наполненных полимеров, коррозии цементных и деградации полимерных композитов и т.д. В концептуальном основании таких математических моделей заложено и их преимущество – «физическая» интерпретируемость, и недостаток – может быть корректно описана символически далекая от реальности концепция. Следует подчеркнуть, что подразумевается экспериментальное определение входящих в математические выражения коэффициентов (вязкости жидкости, модуля упругости и т. д.) – констант, относящихся к фиксированному рецептуре и режимам, но не зависимостей от них. В концептуальных моделях свойства материала не связаны непосредственно с многокомпонентным составом.

3. Экспериментально-статистические модели, ЭС-модели [3-4, 7-8] – математические описания именно связей между факторами x и критерия-

ми Y , как правило, в виде полиномов, построенные по результатам спланированного эксперимента. О назначении, содержании и истории экспериментально-статистического моделирования (ЭСМ) рассказывается в работе [6, с. 50]. Использование нормализованных безразмерных переменных x_i (чаще всего $-1 \leq x_i \leq +1$) вместо натуральных именованных величин X_i (варьируемых в диапазонах $X_{i,\min} \leq X_i \leq X_{i,\max}$) обеспечивает четкий физический смысл коэффициентам полиномиальной ЭС-модели, имеющим размерность критерия Y , а также приемлемые ошибки вычислений. Между тем, применяемые довольно часто модели с измеряемыми на разных шкалах «натуральными факторами», как правило, невозможно интерпретировать, а ошибки могут оказаться неприемлемыми, что дискредитирует ЭСМ.

ЭС-модели неизбежно приходится использовать как зависимости $Y(x)$ при разработке эффективных материалов в конкретных условиях их создания и эксплуатации, когда уровни РТ-факторов можно назначать в определенных диапазонах значений. Поэтому ЭСМ широко применяется в разработках практически любых строительных композитов, имеет достаточно развитое и универсальное методическое обеспечение, ориентированное на инженеров-экспериментаторов², осуществляется с помощью специальных и стандартных компьютерных средств. Построенные по данным натурных экспериментов ЭС-модели можно использовать для извлечения скрытой в этих данных информации – выполнения вычислительных экспериментов (ВЭ), в которых комплексы моделей имитируют свойства любых композиций в исследуемых диапазонах значений РТ-факторов [5 и др.].

Конечно, полиномиальная форма не способствует объяснению механизмов поведения материала, выводам и прогнозам общего характера по ЭС-моделям. При этом теряется спрятанное в них «богатство реальности» и то знание, которое потенциально они могут содержать. Снизить потери, более полно извлечь свернутую в ЭС-моделях информацию о материале может помочь структурирование системы РТ-факторов – выделение их подсистем в соответствии с природой, характером, степенью их влияния на свойства – и использование соответствующих структурированных ЭС-моделей [6, с. 69].

Важно, что среди критериев Y , зависимости которых от x описываются ЭС-моделями, могут быть коэффициенты-константы фундаментальных уравнений и концептуальных моделей [5]. Примеры такой инкорпорации моделей [9-10] – зависимости параметров реологических уравнений и других характеристик реологических кривых от состава технологических смесей. Так, параметры K и m модели Оствальда-Вилля для вязкости фиброполлимерцементных композиций в зависимости от скорости сдвига, $\eta_v = K m v$ (где K – вязкость η_1 , при единичной скорости, m – темп разрушения), могут быть выражены (1-2), функциями состава; в пояснениях к (2) V , MC и F – дозировки Виннапас, метилцеллюлозы и полипропиленовой фибры, MMS

²ЭСМ посвящена большая часть учебника [4] для студентов вузов, обучающихся по специальности «производство строительных изделий и конструкций».



- молекулярная масса метилцеллюлозы.

$$\ln \eta_T(x) = \ln \eta_1(x) + m(x) \cdot \ln \gamma' \quad (1)$$

$$\ln \eta_1(x) = 4.06 + \begin{matrix} + 0.70x_1 - 0.41x_1^2 \\ - 0.09x_2 - 0.20x_2^2 \pm 0 \ x_2x_3 \\ + 0.13x_3 \pm 0 \ x_3^2 \\ + 0.17x_4 \pm 0 \ x_4^2 \end{matrix} + \begin{matrix} + 0.25x_1x_2 \\ - 0.05x_1x_3 \\ + 0.11x_1x_4 \\ \pm 0 \ x_2x_4 \\ - 0.16x_3x_4 \end{matrix} \quad (2)$$

Эффекты Виннапаса при средних ММС, МС, F
Эффекты метилцеллюлозы при средних V и F
Уровень при средних V, ММС, МС, F
Эффекты фибры при средних V, ММС, МС
Синергизм

4. **Модели исследования операций** (характерные для технико-экономических задач: сетевого планирования, распределения ресурсов, выбора маршрута и т.д.). Как отмечал В.А. Вознесенский, «в силу нетривиальности аналогий», эти модели остаются пока «весьма экзотическими» для строительного материаловедения. В книгах [3-4] приводится пример: филь-трация жидкости в бетоне, рассматриваемая как движение через сеть случайной конфигурации с запертыми узлами³.

5. **Имитационные модели**, для выполняемых на компьютерах вычислительных экспериментов. При этом, как правило, применяют метод Монте-Карло – метод статистических испытаний, суть которого в генерации случайных реализаций изучаемых ситуаций по их моделям⁴. В структурно-имитационных моделях (СИМ) структура материала «собирается» из множества случайных распределенных элементов (представляющих частицы, зерна, волокна, трещины, поры – «структурные неоднородности») с заданными (фиксированными или случайно распределенными) свойствами, размером, формой [4]. Модель флуктуирует, подобно реальной структуре в натурном эксперименте. Исследуются развитие трещин, поверхности разрушения и деформации в бетоне (Wittmann F.H., Зайцев Ю.В., Mechtcherine V.), процессы гидратации и пористость (Bentz D.P., Stroeve P.), радиационные потоки и электрофизические свойства (Воробьев В.А. Илюхин А.В.), свойства бетонной смеси (Dewar J.D.). В многофакторных ситуациях для выделения главных факторов, влияющих на критерии поведения материала, для классификации по этим критериям или прогнозирования их уровней могут быть применены искусственные нейронные сети (Wittmann F.H., Kasperkiewicz J., Buenfeld N.R., Гальберштам Н.М., Торсу I.B.); получаемые результаты идентичны результатам множественной регрессии.

Известны «структурно-функциональные» модели изменений в составе, структуре и свойствах композитов гидратационного твердения, на ранних стадиях структурообразования (Brouwers H.J.H., Bentz D.P. и др.) и в процессе длительного воздействия среды (F.H. Wittmann F.H., Roelfstra, P.E., Sadouki H., Чернявский В.А., Дубницкий

В.Ю.). Программное обеспечение ВЭ с имитационными моделями, в частности в NIST (National Institute of Standards and Technology, USA), до недавнего времени можно было считать эксклюзивным.

Модели структур сами по себе не дают возможности оценивать уровни проектируемых эксплуатационных свойств. Для этого, в конце концов, привлекают концептуальные модели – системы конечных элементов, формулы расчета прочности с эмпирическими коэффициентами и др., а также регрессионные модели. О возможном наборе моделей в компьютерных исследованиях материалов говорит приведенный в статье [11] список доступных программ для моделирования, разработанных в NIST. Используют последовательное моделирование: модели структур геля гидросиликата кальция (уровень нанометра), цементной пасты (уровень микрометра), раствора или бетона (уровень миллиметра); вычисления на нижнем структурном уровне определяют входные свойства для симуляции структуры следующего более высокого уровня (Bentz D.P., Garboczi E.J., Комохов П.Г., Харитонов А.М.).

Перспективы СИМ, в том числе, для решения проблем многокомпонентности – в объединении с моделями других типов. Есть примеры последовательного использования моделей разных типов в исследованиях строительных материалов. Так, изучая диффузионные свойства цементных паст, E. Garboczi и D. Bentz (1992) с помощью модели случайного роста генерировали их микроструктуру, которую затем рассматривали как случайную сеть; коэффициенты диффузии D определялись, для разных В/Ц и степени гидратации, по аналитической модели – зависимости Нернста-Эйнштейна, связывающей D с электропроводностью. В работах В.И. Кондращенко сочетания СИМ, УМФ и ЭС-моделей применены в исследованиях бетонов на плотных и пористых заполнителях, древесно-полимерных композитов и биопластиков, в том числе, с учетом уровня «материал-конструкция»⁵.

Для разработок эффективных композитов на основе фундаментальных закономерностей и накопленных знаний перспективно синтетическое (мультипликативное) моделирование [5, 9-10]. Важно, что таким образом для коэффициентов («констант») УМФ и концептуальных моделей, а также для оценок по имитационным моделям могли бы быть определены их зависимости от факторов рецептуры и технологии – в виде ЭС-моделей, в частности таких, как уравнение (2). Другой пример (В.Т. Ерофеев и др., Мордовский ГУ) – «планирование ВЭ, с варьированием факторов состава – численное моделирование на основе метода конечных элементов – ЭС-модели влияния факторов состава на компоненты напряженно-деформированного состояния».

О компьютерном материаловедении. Компью-

³ Подвальный А.М., Проценко А.М. Исследование проницаемости бетона на математических моделях // Защита строительных конструкций промышленных зданий от коррозии / НИИЖБ Госстроя СССР. – М.: Стройиздат, 1973. – С. 149-157.

⁴ В современном понимании термин «метод Монте-Карло» относится к любой имитации с уча-тием случайных чисел (Murdoch D.J. Markov Chain Monte Carlo // Chance, V. 13, No. 4, 2000. – P. 48-51).

⁵ 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.



терные технологии открыли возможности для совместного использования, объединения моделей разного масштабного уровня, разного генезиса, записанных на разных математических языках. В конце 1992 г. начал выходить международный журнал Computational Materials Science (ISSN 0937-0256)⁶. Год его основания В.А. Вознесенский предложил [5] считать началом отсчета для этого научного направления, нацеленного на решение проблем материаловедения как такового. Любопытно, что именно в 1992 г. впервые в заголовок публикации по стройматериалам на русском языке (см. библиографию в [12]) он вынес название компьютерное материаловедение (КМВ).

Тогда же осмысливались специфические задачи нового направления в содружестве занятых в материаловедении дисциплин и место ЭС-моделей в КМВ, среди моделей разных типов. Была разработана приведенная ниже схема взаимосвязей элементов КМВ, отражающая, с одной стороны, концепцию объединения экспериментального и вычислительного походов в исследованиях и разработках материалов, с другой – необходимость соединять описания поведения материала в конкретных рецептурно-технологических условиях с накопленными мультидисциплинарными знаниями. Синтетическое по своей сути КМВ, могло бы инкорпорировать модели разных уровней структуры, любой генерации, реализовывать ВЭ на моделях, наполнять базы данных и базы знаний о материалах для экспертных систем.

Возможности взаимообогащения подходов и методического скачка на этой основе важны для ЭС-моделирования. Его принцип, извлечение максимума информации из данных эксперимента [6, с. 69; 13], согласуется с целью журнала, продекларированной в редакционном заявлении, суть которой – усилить связь между экспериментальной и вычислительной составляющими исследования. Компьютерное материаловедение призвано развивать экспериментальные исследования во взаимосвязи с компьютерными технологиями [5].

Е.Ж. Garbotci вспоминает [11]⁷, что примерно в 1990-ом начал использовать термин «компьютерное материаловедение бетона», которое сейчас, как он считает, стало жизнеспособной дисциплиной, собирающей многоуровневый набор моделей для такого многоуровневого материала как бетон, начинающей преодолевать разрыв между фундаментальными принципами и практически приложениями. Этому способствовали электронная образовательная монография Modeling and Measuring the Structure and Properties of Cement-Based Materials, проект Virtual Cement and

Concrete Testing Laboratory, Computer Integrated Knowledge System for High Performance Concrete и другие работы⁸. Однако, создатель компьютерных моделей гидратации тоже приходит к пониманию [11], что для преодоления этого разрыва в науке о материалах необходимо объединять экспериментальный и вычислительный подходы и упоминает, что эта идея стала движущей силой для Инициативы генома материалов (Materials Genome Initiative).

В.А. Вознесенский отмечал, в частности в [5], что при разработке конкурентоспособных материалов для строительной отрасли необходимость в методах компьютерного материаловедения возникает, когда решение не может быть получено в прямом физическом эксперименте или вне компьютерной технологии без больших затрат материальных ресурсов и (или) времени. Вопросы компьютерного строительного материаловедения (КСМВ) с 1993 по 2008 г. обсуждались на ежегодных международных семинарах по моделированию и оптимизации композитов (МОК, Одесса). Им было посвящено Приложение [14] к журналу Строительные материалы (ISSN 0585-430X, Москва).

Наиболее эффективным и распространенным моделированием в задачах разработки конкретных материалов, принципиально способным иметь дело с многокомпонентными составами [3-4; 6 с. 69; 13 и др.] и подготовленным к включению в КСМВ, оказалось ЭСМ. Предполагается, что «простые» ЭС-модели строятся на основе «лучшей» возможной информации – на априорных физико-химических знаниях и результатах спланированного, рационального эксперимента. Планирование эксперимента – не только формализованный способ максимизировать количество получаемой информации при ограниченных ресурсах, позволяющий охарактеризовать и индивидуальное, и совместное влияние РТ-факторов x на отклики Y . Это философия и логика исследования⁹, стержень стратегии эксперимента [7]. Неформализованным остается «предпланирование» [7] – базирующиеся на системном подходе постановка проблемы и выбор вида математической модели, включая область независимых переменных x (факторную область).

Однако, задачи строительного материаловедения в «эру многокомпонентности» потребовали создания новой методологии исследований и проектирования высококачественных композиционных материалов. Чтобы справиться с многомерностью задач и «сократить расстояние» между сложностью объектов и используемыми для их описания простыми полиномиальными моделями, чтобы

⁶ Содержание первых номеров, за 1992-93, проанализировано в Материалах международного семинара по моделированию и оптимизации композитов МОК'35. – Одесса, 1996.

⁷ В статье он приводит ссылку на работу, в которой опубликована первая компьютерная модель гидратации цемента: Frohnsdorff G., Fryer W.G., Johnson P.D. The mathematical simulation of chemical, physical, and mechanical changes accompanying the hydration of cement. Supplementary Paper II-44 at the 5th Int. Symp. of the Chemistry of Cement, Tokyo, 1968.

⁸ http://concrete.nist.gov/monograph_ciks.cbt.nist.gov/~bentz/phpct/cmml.html, ciks.cbt.nist.gov/~bentz/

⁹ Из книги В.В. Налимова и Т.И. Голиковой [15]: «...результаты изучения механизмов явлений следует представлять не одной, а множеством моделей». «Математическая модель – это вопрос, который исследователь задает природе». «Искусство моделирования в значительной степени определяется тем чувством меры, которое помогает уравновешивать знания с тем, что хочется узнать». «Планирование эксперимента – это раздел знаний, относящийся не только и не столько к математической статистике, сколько к логике».



«увеличить совместимость моделей материаловедения и инженерной практики», потребовались новые представления и методы, предусматривающие включение ЭС-моделирования в КСМВ [5, 13]. Для превращения количественных оценок, получаемых по ЭС-моделям, в знания, для того, чтобы задачи вычислительных экспериментов ставились, а результаты интерпретировались в терминах материаловедения, нужно было, чтобы ВЭ (на любых моделях) получил общую физическую основу, некоторое универсальное, общенаучное мета-представление.

Рецептурно-технологические поля. Такая метамодель как поле физической величины в трехмерном пространстве соответствует еще более общему математическому понятию поля величины Y , которое определяется как функция точки x в области Ω_x многомерного пространства, т.е. как совокупность значений Y для всех возможных значений x . Это позволяет рассматривать совокупности возможных уровней свойств материала – значений критериев Y при всех возможных значениях РТ-факторов как поля свойств материала в координатах состава, параметров процессов производства и эксплуатации (а также в координатах изделия) [5; 6, с. 69; 8; 13-14]¹⁰.

Понятие рецептурно-технологического поля (РТП) открыло для строительного материаловедения ряд возможностей.

- Поле $Y(x)$ соединяет многообразие «воздействий» РТ-факторов на материал с результатами этих воздействий (уровнями любых критериев качества) и служит аналогом материала в исследованиях и проектировании отдельных сторон его поведения. Для описания РТП в принципе могут быть предложены любые модели.

- По ЭС-моделям для анализа связей РТ-факторов и свойств из полного поля (в области всех рассматриваемых факторов) можно выделить локальные поля, с областями той же и меньшей размерности, любой конфигурации. Поля разных свойств и локальные поля одного свойства (а не символьные структуры – формулы и их «куски») можно сравнивать, используя в качестве мер сравнения числовые характеристики, имеющие ясный физический смысл. Это минимальный и максимальный уровни поля и их координаты, перепад, градиент, уровни поля в любых интересующих материаловеда особых точках и расстояния между ними, площади (объемы) особых зон и другие обобщающие показатели полей (G , от

generalising).

- Таким образом, понятие РТП (вместе с общенаучными понятиями градиента, поверхности равного потенциала и т.д.), соединяя наддисциплинарный язык описания мультидисциплинарных объектов строительного материаловедения с языками отдельных дисциплин, может служить элементом языка междисциплинарного.
- Появилась возможность проанализировать, как локальные поля, в координатах части РТ-факторов, могут изменяться под влиянием других факторов. При этом удобно использовать графические отображения, в частности, однофакторные кривые в зоне экстремумов [8 и др.], «карты полей», с изолиниями и особыми точками (максимального и минимального уровня поля и др.), позволяющие визуализировать связи факторов и свойств (рис. 2). Изменяющимся локальным полям более других соответствуют упомянутые выше структурированные формы ЭС-моделей [6, с.69, 8, 13]. При необходимости исследовать многокомпонентные системы, принцип структурирования как прием «борьбы с размерностью» открывает разнообразные возможности для анализа и визуализации результатов.

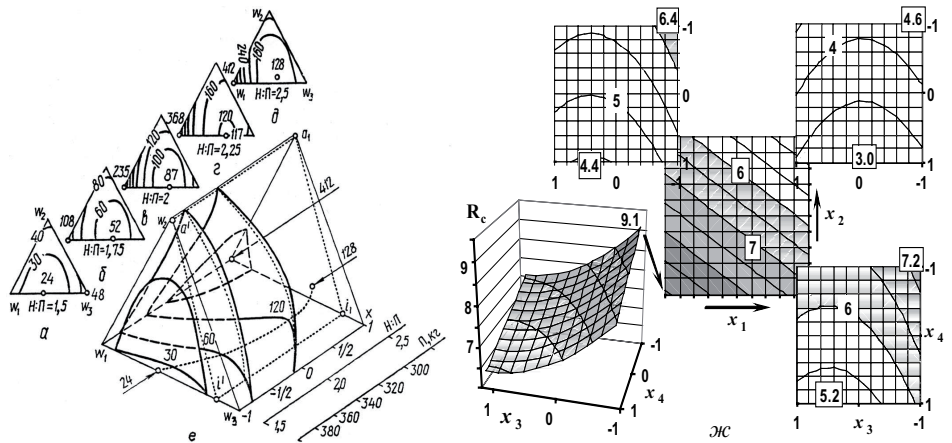


Рис. 2. Примеры визуализации рецептурных полей:

- слева: локальные поля «зерновой состав наполнителя – вязкость» при разных степенях наполнения полиэфирного связующего (а-д) и поле «зерновой состав, степень наполнения – вязкость» (е), из книги [3], где локальное поле называлось «информационным элементом» (инженерный результат данной визуализации – экономия смолы без ухудшения свойств); - справа: поля прочности R_c гипсового композита в координатах дозировок добавок (x_3, x_4) в вершинах квадрата ($x_1, x_2 = \pm 1$) содержания зольных микросфер и перлита, а также максимум $R_c(x_3, x_4)$ в зависимости от x_1 и x_2 на несущем квадрате (ж).

- РТ-поля представляют материал в вычислительных экспериментах. В тандеме с методом Монте-Карло ЭС-модели могут имитировать результаты натуральных экспериментов, оценивая уровни свойств для любых вариантов рецептур и параметров процессов в описываемых моделями диапазонах, с учетом риска моделирования, ошибок эксперимента

¹⁰ Понятие поля величины в геометрических координатах распространено на свойства материала в k РТ-координатах (иных по существу при принципиально не ограниченном увеличении их числа).



и дисперсии предсказания моделей [5, 14]. При этом заданные ЭС-моделями детерминированные поля превращают в случайные. Многократные случайные реализации полей дают информацию о распределениях оценок их обобщающих показателей и взаимосвязей свойств, позволяя учитывать гарантированные уровни этих показателей. Цель компьютерных экспериментов – извлечь из моделей, построенных по реальным экспериментальным данным, свернутую в них и напрямую недоступную информацию о связях рецептуры, технологии, структуры и свойств материалов. Итерационное случайное сканирование РТ-полей позволяет в многокритериальной ситуации определить гарантированно допустимые, оптимальные и компромиссно оптимальные составы и параметры процессов [5, 16-17].

Схема на рис. 3 [5, 12] содержит блоки, формирующие методологию исследований и конструирования многокомпонентных строительных компо-

зитов, направленную на получение нового знания, ресурсосбережение, обеспечение эффективности процессов и качества продуктов.

Задачи, которые позволяет решать методология рецептурно-технологических полей, многомерны – и по набору РТ-факторов x , должных обеспечить выполнение требований к свойствам (критериям) Y , и по набору свойств, и по числу связей между ними. При этом предполагается, что не только структура и свойства материала должны быть оптимальными, но и процессы его разработки и изготовления [3, 7].

Методология РТ-полей рассматривает оптимальность материала как

- достигаемое за счет состава и параметров процессов соответствие лучшему уровню конкретного критерия или компромиссу нескольких критериев, выдвигаемым научной идеей или практическим заказом (при выполнении требований к другим критериям);
- это соответствие оценивается с целесообразной точностью, опираясь на известные закономерности, по данным оптимального эксперимента, с помощью моделей, позволяющих наиболее полно извлечь из данных информацию о материале.



Рис. 3. Схема включения концепции полей свойств и ЭС-моделей в компьютерное строительное материаловедение.

ВЫВОДЫ

Соединение возможностей разных математических моделей, обеспечение взаимодействия экспериментального и вычислительного подходов к получению данных и знаний о материалах – миссия компьютерного строительного материаловедения. В набор его средств входит методология рецептурно-технологических полей. Ее особенности определяют:

- идеологическая установка – оптимальность материала;
- ключевая концепция – рецептурно-технологические поля свойств;
- информационная база – планируемый многофакторный натурный эксперимент;
- основная форма обобщения данных – структурированная ЭС-модель;
- способ извлечения новой информации (вторичной) – вычислительный эксперимент.



ЛИТЕРАТУРА

1. Mindes S. High performance concrete: where do we go from here? / Mindes S. // *Brittle Matrix Composites 8*. – Cambridge: Woodhead Publ. Ltd. - Warsaw: ZTUREK RSI, 2006. - P. 15-23.
2. Вознесенский В.А. Некоторые обратные задачи компьютерного строительного материаловедения / Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Гаврилюк В.П. // *Сучасні будівельні матеріали: Вісник Донб. НАБА*, 2010-5(85). – Макіївка, 2010. – С. 33-38.
3. ЭВМ и оптимизация композиционных материалов / [В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, Я.П. Иванов, И.И. Николов]. – К.: Будівельник, 1989. – 240 с.
4. Вознесенский В.А. Численные методы решения строительного-технологических задач на ЭВМ / Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Огарков Б.Л. – К.: Вища школа, 1989. – 328 с.
5. Вознесенский В.А. ЭС-модели в компьютерном строительном материаловедении / Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. – Одесса: Астропринт, 2006. – 116 с.
6. Моделирование и оптимизация композитов = Modelling and Optimisation of composites. Мат-лы межд. сем. МОК (МОС). – Одесса: Астропринт, 2014. – 264 с. <http://frabull16.wix.com/dvoe/voznnesensky>
7. Современные методы оптимизации композиционных материалов / под ред. В.А. Вознесенского. – К.: Будівельник, 1983. – 144 с.
8. 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. www.frabull16.wix.com/dvoe/publications
9. Москалева К.М. Оценка структурообразующей роли компонентов полимерминеральных смесей как неньютоновских жидкостей по разностям логарифмических функций вязкости / Москалева К.М., Ляшенко Т.В., Вознесенский В.А. // *Сучасні будівельні матеріали. Вісник Донб. НАБА*, 2012-1(93). – Макіївка, 2012. – С. 3-12.
10. Lyashenko T. Modelling the influence of composition on rheological parameters and mechanical properties of fibre reinforced polymer-cement mortars / Lyashenko T., Kryukovskaya S. // *Brittle Matrix Composites 10*. – Cambridge: Woodhead Publ. Ltd. - Warsaw: IFTR, 2012. – P. 169-178.
11. Garbotczi E.J. The computational materials science of concrete: Past, present and future / Garbotczi E.J. // *American Ceramic Society Bulletin*, Vol. 92. - No. 4, 2013. – P. 40-45.
12. Вознесенский В.А. Компьютерное материаловедение, экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация композиционных строительных материалов / Вознесенский В.А. // *Строительство в России: прогресс науки и техники*. – М.: Инженерная академия РФ, 1993. – №1. – С. 98-101.
13. Voznesensky V.A. Experimental-statistical modeling in computational materials science / Voznesensky V.A., Lyashenko T.V. // *Proc. 3rd Int. Applied Statistics in Industry Conf.*, V.1. – Wichita, KS (USA): ACG Press., 1995. – P. 287-298. frabull16.wix.com/dvoe/publications
14. Строительные материалы, 2006, №3. – Приложение: Наука № 7. – 36 с.
15. Налимов В.В. Логические основания планирования эксперимента / Налимов В.В., Голикова Т.И. - М.: Металлургия, 2-е изд., 1981. – 152 с.
16. Вознесенский В.А. Компромиссная многофакторная оптимизация гарантированного качества шлакощелочных вяжущих (максимизация прочности и морозостойкости, минимизация расхода ресурса) / Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Довгань А.Д. // *Современное промышленное и гражданское строительство*. - Т. 3, №1, 2007. – С. 5-15.
17. Lyashenko T.V. Multicriterion optimisation of autoclaved aerated concrete properties and expenditure of energy resources / Lyashenko T.V., Voznesensky V.A., Gavriuliuk V.P. // *Brittle Matrix Composites 9*. – Cambridge: Woodhead Publ. Ltd. - Warsaw: IFTR, 2009. – P. 219-226.