

Создание структурно-информационных технологий и систем для построения нанообъектов

О.Ф. Вячеславова, С.В. Усов

Аннотация. Статья посвящена созданию методологии формирования структурно-информационных технологий и систем автоматизации на основе кластерно-фрактальной концепции. Названная методология применяется для построения наносистем и наноконструктов при создании аэрокосмической техники и изделий атомной техники, продукции медицинской промышленности и др. Разработанный подход позволяет проектировать и создавать наноконструкты с различными физико-механическими свойствами в зависимости от целей и технологических характеристик объектов по схеме «снизу-вверх».

Введение

Разработка и создание наносистем и наноконструктов является важной государственной задачей, выполнение которой позволяет решить множество проблем по совершенствованию и обеспечению технических требований, надежности, долговечности, сохраняемости изделий аэрокосмического, атомного машиностроения и т.п. (Рис.1). Известные системы автоматизированного проектирования [1] не адаптированы под процессы управления наночастицами, в то время как кластерные структурно-информационные технологии на основе фрактального анализа обладают широкими возможностями для практического применения. Моделирование нанопостроений осуществляется по уровням структуры веществ (атом, кластер, микроструктура, микрообъект), реализующих эффект самосборки с использованием положений фрактально-синергетических подходов. Структурно-информационные технологии и системы автоматизации для указанных задач опираются на следующую последовательность действий: технические характеристики изделия; вариантность конструкторско-технологических решений; идентификация и

номенклатура структурно-геометрических неровностей (элементов) и кластеров в многообразии технологических методов; апробация с уточнением параметров поверхностного слоя и физико-механических характеристик; разработка конструкторско-технологической документации; производство и внедрение наносистем и наноматериалов.

1. Фрактально-кластерные комплексы

Основой создаваемой концепции является комплексный критерий фрактального кластера, включающий фрактальную размерность кластера D , число кластеров N_k , число элементов в одном кластере $N_{e1}(j,t)$, распределение кластеров по размерам $N_{e1}(j,t-1)$, математическое ожидание числа кластеров M_k . Объектом рассмотрения являются как материалы (Табл.1), так и биоткань (Табл.2). Формируется взаимосвязь между параметрами поверхностного слоя, физико-механическими свойствами наносистем и комплексным критерием на основе фрактальной размерности (Рис.1).

Свойства и поведение наносистем при неравновесных фазовых переходах позволяют

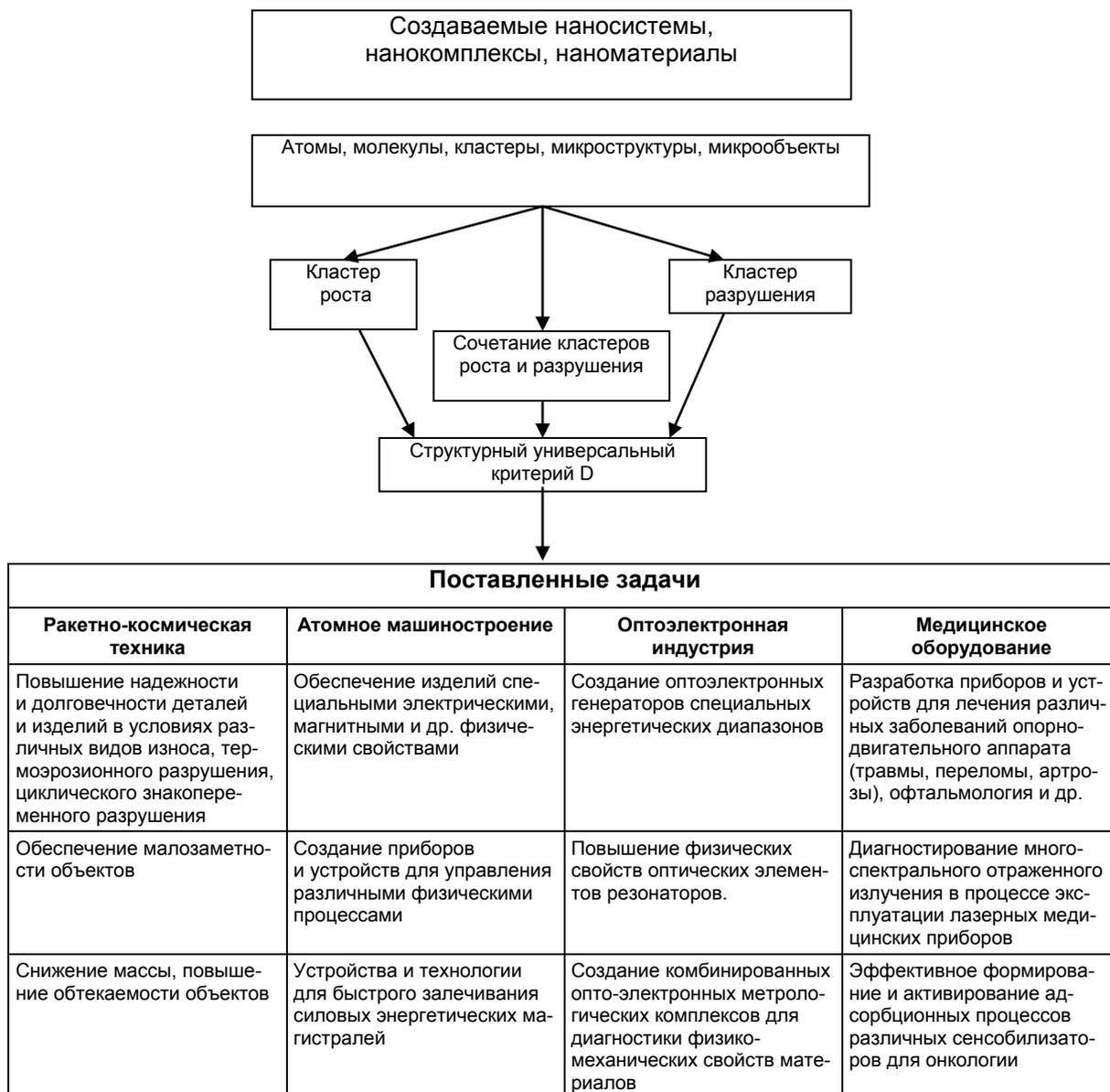


Рис. 1. Формирование наноструктур для решения прикладных задач

установить связь между процессами структурообразования, протекающими на различных масштабных уровнях (Рис.2).

Поэтому характеристики конечного макрообъекта будут определяться строением и свойствами всех нижестоящих уровней иерархической организации и требуют единого подхода к описанию всех ее уровней. Это, в свою очередь диктует необходимость создания структурно-информационных технологий, учитывающих

эффект самосборки устойчивых атомных нанокластеров в диссипативной среде, способных к дальнейшему устойчивому росту.

Концепция диссипативного состояния системы и самоорганизация структур являются определяющими в условиях самосборки устойчивых наноструктур. Универсальность эффекта самоорганизации структур состоит в его проявлении в различных системах и условиях (высокие температуры или высокие скорости) [3].

Табл. 1

№ п.п.	Тип детали	Эскиз	Количество, номенклатура типоразмеров	Материал	Шероховатость, мкм	Геометрическая точность, мм	Функциональное назначение	Технические проблемы освоения	Примечание
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1.	Детали ускорителей: пластинчатый теплообменник		10	Твердый сплав	1,5 - 2,5	0,02	Фильтрация жидких и газообразных сред	Необходимость использования и применения дорогостоящей инструментальной оснастки	Обеспечение стабильности температурного режима в течении нескольких часов эксплуатации

Табл. 2

№ п.п.	Наименование	Краткая характеристика заболевания	Возраст больных, (лет)	Число дней нетрудоспособности	Инвалидность, %	Осложнение, %	Летальность, %	Примечание
Травмотологические заболевания								
1.	Заболевания опорно-двигательного аппарата	Боль в суставах	15 - 65	14	13	5	1	Проблемы с лечением застарелых заболеваний
2.	Радикулит, остеохондроз	Боли в спине и позвоночнике	15 - 65	23	13	5	1	-!!-

Переход от физико-химических процессов на наноуровне, определяющих самосборку устойчивых динамических структур, к процессам структурообразования на более высоких масштабных уровнях требует ведения меры устойчивости динамической структуры и меры адаптивности системы к внешним возмущениям. С этой целью введена функция самоподобия F , связывающая меру динамической устойчивости системы D_ζ с кодом m обратной связи, определяющим меру адаптивности системы к окружающей среде:

$$F = Am = Aj1/m \tag{1}$$

Точки бифуркаций, отвечающие переходам систем в диссипативное состояние, являются точками, характеризующими нарушение пространственной симметрии системы, и поэтому обладают информационными свойствами, в силу чего само понятие информации можно связать с мерой нарушенной симметрии системы.

$$D = \left[\frac{\ln \langle h(r) \rangle}{\ln r} \right] \tag{2}$$

где r – функция масштабного самоподобия в интервале размеров r , $R_0 \leq r \leq R$, а R_0 –

масштабная единица измерения линейного размера R кластера.

К основным характеристикам процесса образования кластеров можно отнести: число кластеров, число элементов в одном кластере, распределения кластеров по размерам [6,8].

Общее число кластеров в системе представляется индикаторной функцией

$$N_k = \sum j l(t_j^1), \tag{3}$$

где $l(t_j^1)$ – индикатор события, состоящего в появлении j - го кластера, математическое ожидание $Mk(t)$ числа кластеров равно

$$G\left\{ \sum j \tau_j^1 \leq t \right\} = \sum_{j=1}^{\infty} G(j, t). \tag{4}$$

Число элементов в j - м кластере представляется индикаторной функцией

$$N_{el}(j, t) = \sum i l(t_j^1) \tag{5}$$

где $l(t_j^1)$ – индикатор события, состоящего в появлении i -го элемента в j -м кластере, математическое ожидание $M_{el}(j, t - t_j^1)$ числа элементов равно

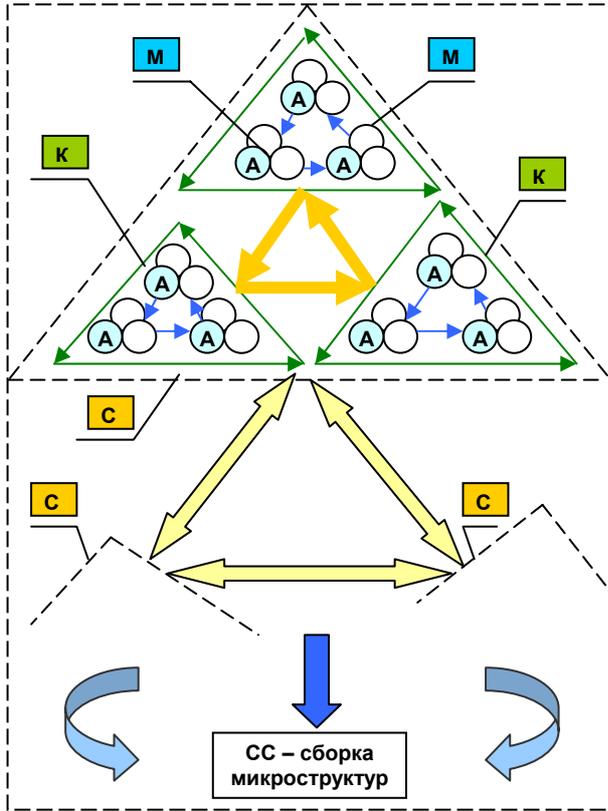


Рис. 2. Схема формирования наносистем на основе свойства самоподобия

A – атомы, M – молекулы, K – кластеры, C – микроструктура, СС – сборка микроструктур

$$\sum_{i=1}^{\infty} G(i, t - t_j^1), t - t_j^1 \geq 0 \quad (6).$$

Общее число элементов во всех кластерах ко времени t определяется индикаторной функцией: $M_M(t) = \sum_j \sum_i l(t_j^1)$, математическое ожида-

ние $M_M(t)$ числа элементов равно

$$\sum_{j=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{\infty} G(i, j, t) = \sum_{i=1}^{\infty} G(i, j=1, t) + \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{\infty} G(i, t) * G(j, t), \quad (7)$$

$$\text{или } M_M(t) = M_{el}(t) + \int_0^t M_{el}(t - \tau) dM_k(\tau). \quad (8).$$

При определении распределения кластеров по размерам учитываем, что размер произвольного j -го кластера выражается индикаторной функцией

$$N_{el}(j, t - t_j^1) = \sum_i l(t_j^i). \quad (9)$$

Математическое ожидание числа элементов в первом кластере

$$M_{el}(j=1, t) = M_{el}(t) = \sum_{i=1}^{\infty} G(i, j=1, t), \text{ а во всех}$$

последующих

$$(j > 1) - M_{el}(j, t) = \sum_{i=1}^{\infty} G(j, t) * G(i, t) =$$

$$= \int M_{el}(t - \tau) dG(j, t). \quad (10)$$

Полученные выражения позволяют нам изучать статистические свойства множества кластеров $\{N_{el}(j, t) : j = 1 \div \infty, t > 0\}$ или $\{M_{el}(j, t) : j = 1 \div \infty, t > 0\}$ в произвольный момент времени t . Это множество представляет собой вариационный ряд кластеров (ранговое распределение), упорядоченных по мере уменьшения их размеров или числа входящих в них элементов.

Если необходимо выявить распределение групп кластеров с одинаковым числом, считается, что число кластеров, в каждом из которых имеется ровно по i элементов, образуют группу размером

$$N_{gr}(i, t) = \sum_j l(t_j^i), \quad (11)$$

причем, суммирование ведется по кластерам с одинаковым числом элементов.

Математическое ожидание числа кластеров, в каждом из которых имеет ровно по i элементов, представимо в виде

$$\begin{aligned} M_{gr}(i, t) G &= \{G(i, j=1) - G(i+1, j=1)\} + \\ &+ \sum_{j=2}^{\infty} \{G(i, j, t) - G(i+1, j, t)\} - \{G(i, j=1) - G(i+1, j=1)\} + \\ &+ \sum_{j=2}^{\infty} \{G(i, t) = G(i+1, t)\} * G(j, t) = P(i, t) + M_k(t) * P(i, t) = \\ &= p(i, t) + \int P(i, t - \tau) dM_k(\tau). \end{aligned} \quad (12)$$

Для количественного определения меры нарушенной симметрии системы успешно применяется теория фракталов. Свойство самоподобия фрактальных структур на различных масштабных уровнях обуславливает эффект

самоподобия адаптивных перестроек структуры на нано-, мезо-, макроуровнях [4,5].

На основании изложенных теоретических предпосылок создана информационная система, базирующаяся на математических моделях формирования поверхности деталей с наноэлементами рельефа с применением методов фрактальной геометрии. Рассматриваются модели формирования поверхности как фрактального кластера разрушения (съем обрабатываемого

материала) и модели фрактального кластера роста (наращивание поверхности - пленочный механизм).

Методически необходимо выделить следующие этапы:

- идентификация технических требований к изделиям, создаваемые физико-механическими свойствами наноконструкций;
- обобщенное формирование наноконструкций ($A_1; A_2; \dots A_i$) и перевод их в образы ($M_j; K_m; C_z$ и т.д.) (Рис. 2, 3);

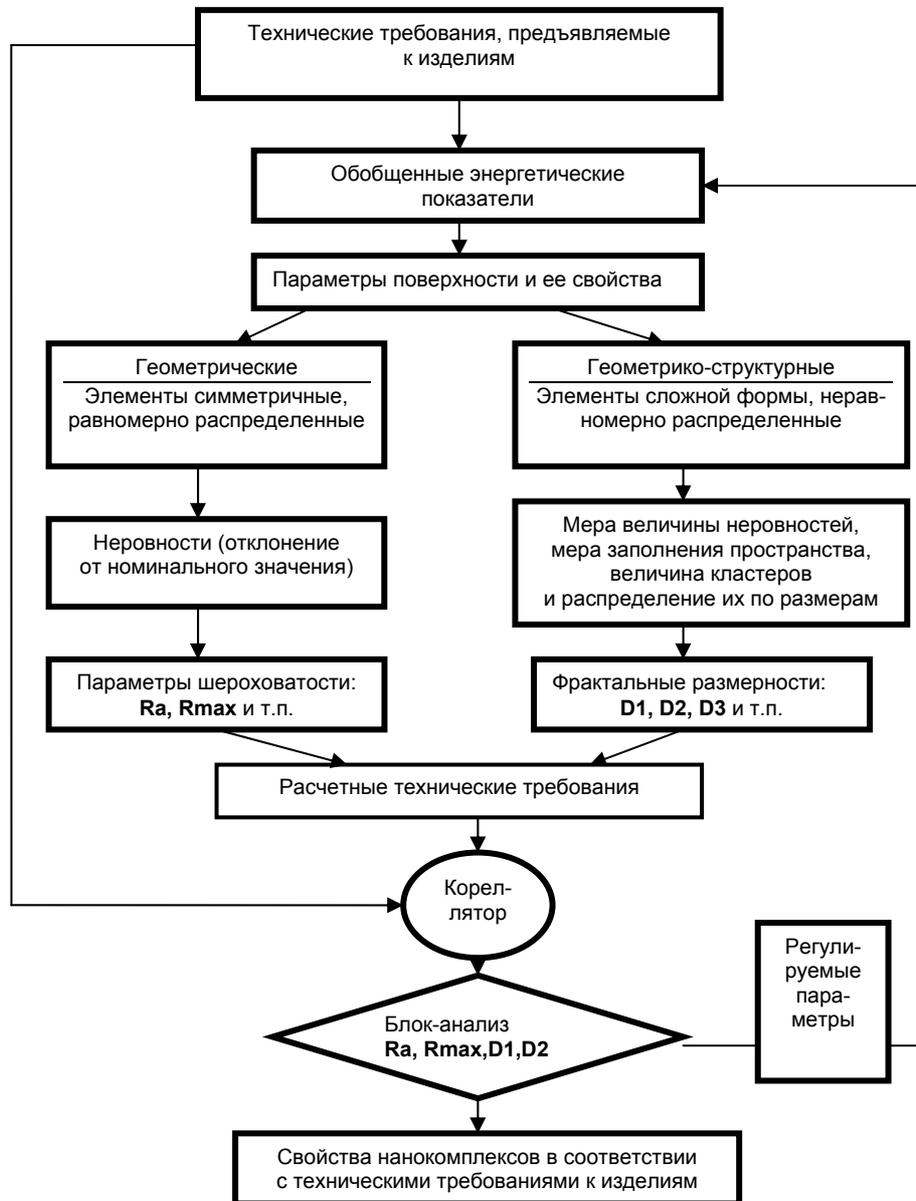


Рис. 3. Алгоритм образования расчетных систем для обеспечения технических требований к изделиям с использованием наносистем

- введение комплексного критерия характеристики фрактального кластера, как меры нанообъекта (зависимости 4-8);

- создание граничных условий вычислений путем ввода в обобщенном виде физико-технических свойств нанообъектов с учетом технических условий изделий;

- вычислительные процедуры множества сочетаний комплексного критерия, сформированного в соответствии с техническими требованиями к изделиям;

- вывод результатов вычислений (зависимости 9,10) и корректировка начальных условий для продолжения расчетов.

При этом процесс образования нанообъектов базируется на теории самоорганизации, в соответствии с которой осуществляется перебор различных вариантов математических моделей и их комбинаций (кластер роста; кластер разрушения; сочетание в различных соотношениях этих моделей) при постепенном увеличении сложности.

Качественная и количественная оценка фрактальной кластерной системы [7,9], формирующей поверхность деталей, осуществляется на базе комплексного анализа основных характеристик процесса образования кластеров с учетом фрактальной размерности.

Определение статистических свойств множества кластеров в моменты времени t_j^i позволяет выявить принципы управления структурой формируемых комплексов за счет целенаправленного введения и последующей реализации контролируемых обратных связей с целью получения поверхностей нанообъектов с диссипативными свойствами, необходимыми для заданных условий эксплуатации.

Механизм формирования кластерной системы с различным уровнем иерархии на основе случайного числа кластеров со случайным числом элементов предполагает целое семейство кластерных образований, определяемых множеством возможных значений параметров, таких как относительная скорость увеличения размеров произвольного кластера λ и относительная скорость увеличения числа самих кластеров g . Для прогнозирования наиболее возможного варианта реализации кластерного образования на практике среди множества возможных применяется анализ множества траек-

торий процесса развития кластерной системы с точки зрения максимальной вариабельности (дисперсии) в произвольный момент времени, т.е. определения максимума диссиметрии системы. Такой подход основан на использовании энтропии для определения наиболее вероятного стохастического процесса образования кластеров, причем энтропия рассматривается как мера количественной неопределенности, связанной со случайными явлениями [6].

При этом неопределенность в наступлении события ω должна совпадать с количеством информации, получаемой, если событие действительно происходит. Таким образом, количество информации, заключенной в событии, служит также количественной мерой неопределенности этого события.

Энтропия вероятностного распределения рассматривается в данном случае на множестве возможных распределений случайной величины $\{\zeta\} = \{\zeta_i; \lambda_i \in \Lambda, I = 1, \div \infty, \sum_{k=1}^n P(\omega_k, \lambda_i) = 1, \cup_{k=1}^n \omega_k = \Omega\}$, для которых задан закон распределения с различными значениями параметра распределения.

Энтропийная функция позволяет сравнивать распределения случайных величин из одного параметрического семейства по степени неопределенности на множестве возможных значений параметров. В этом случае тот процесс, для которого значение энтропии в каждый момент времени максимально, находится в равновесном состоянии и имеет наибольшие шансы быть реализованным на практике.

В конечном счете формирование физико-механических параметров наносистем осуществляется по схеме «снизу-вверх», обеспечивая образование атомно-молекулярных структур наноструктурированных нанокомплексов.

2. Практические результаты

Формализованный выше математический аппарат, обеспечивающий построение структурно-информационных технологий, иллюстрирован алгоритмом последовательности расчетов (Рис.3). Соотнесение сочетаний кластеров роста и кластеров разрушения с микрогеометрическими характеристиками позволяет формировать структурно-информационные технологии, обеспечивающие прогнозирование

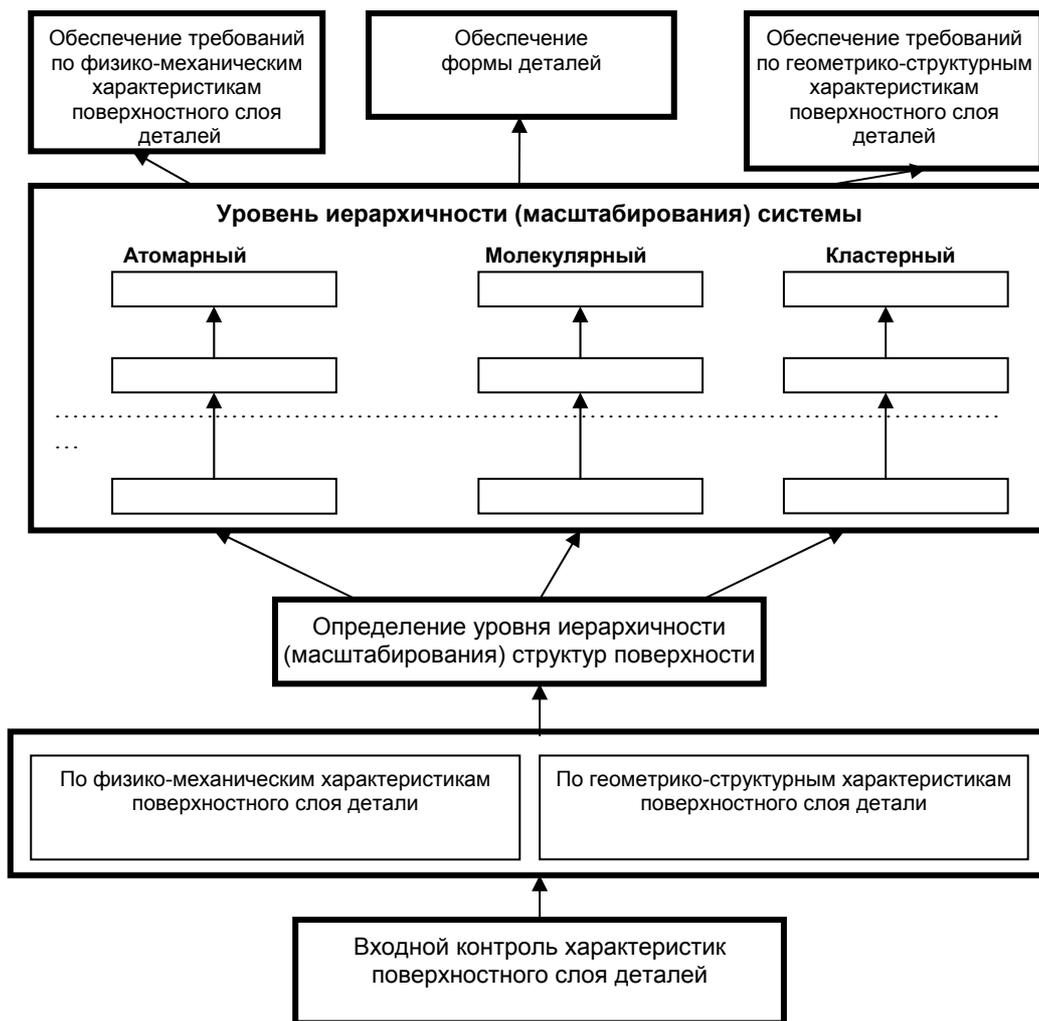


Рис. 4. Дерево целей для формирования наносистем и наноконструкций

физических свойств разрабатываемых наноконструкций. Поступающие нормируемые фрактально-кластерные характеристики (зависимости 2-12) в виде информационных потоков обрабатываются в корректоре, а затем интегрально дозируются посредством геометрико-структурных параметров нанобъектов и обобщенных энергетических показателей различных методов формообразования и упрочнения [1,8].

Адаптация разработанного фрактального математического подхода и последовательности алгоритмических действий позволила разработать автоматизированное место информационной системы построения наноконструкций (Рис.5). В отличие от ранее опубликованных

данных в ней присутствует масштабирование систем на основе атомно-кластерно-молекулярного подхода. Тем самым устанавливается возможность вычислительного итерационного образования физических показателей наносистем с последующей их адаптацией для выполнения требуемых технических характеристик изделий.

Заключение

Решение задач создания структурно-информационных нанотехнологий и наноматериалов базируется на информации о морфологии структур, получаемых в процессе изготовления наноматериалов, разработке программных

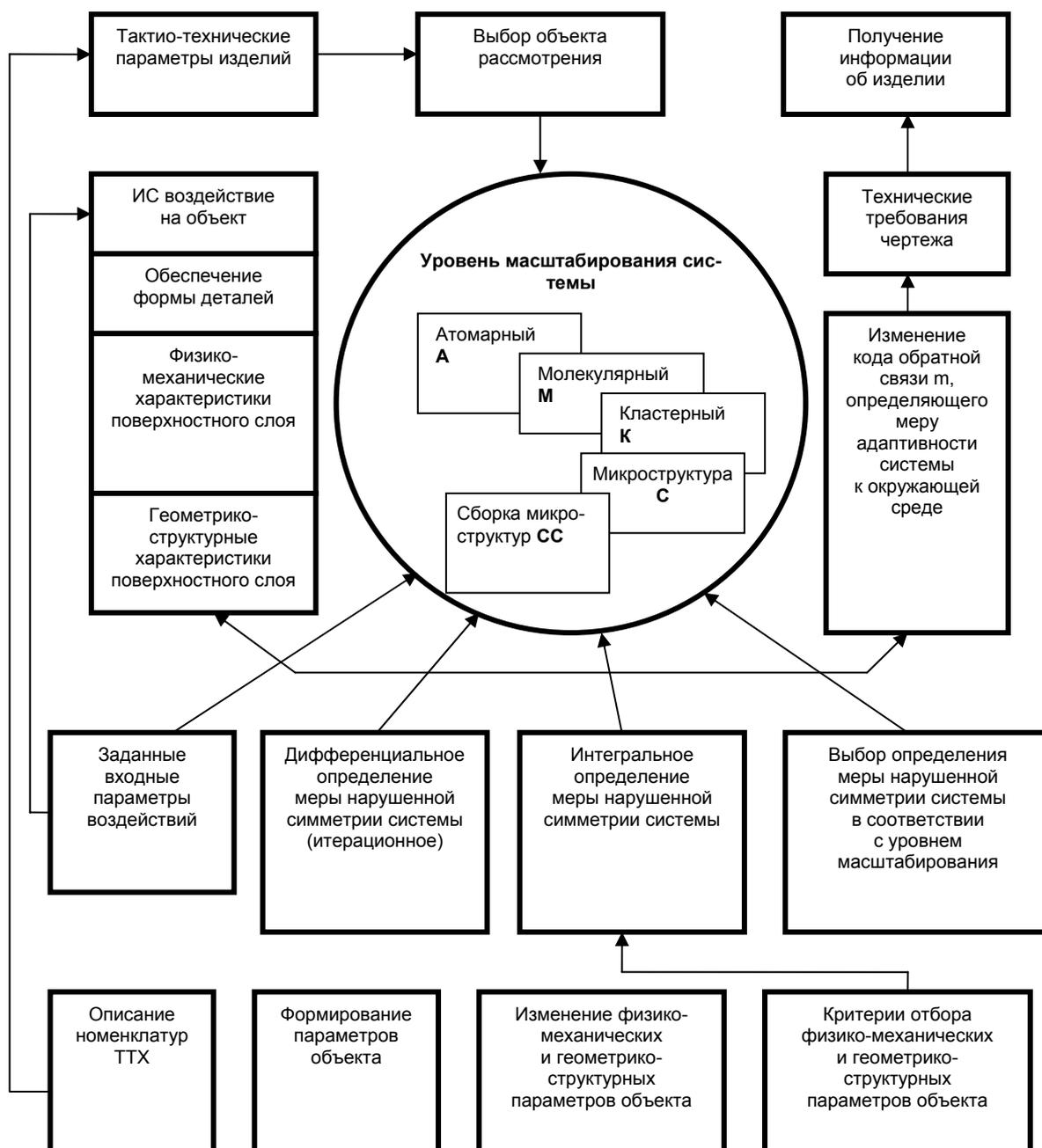


Рис. 5. Автоматизированное рабочее место информационной системы создания нанокомплексов

средств, реализующих единую систему контроля и анализа информации с разных уровней иерархии структуры.

Предлагаемый фрактальный синергетический подход, учитывающий информационные свойства фракталов на основе базового алгоритма адаптации системы к внешней среде, яв-

ляется продуктивным для создания различных заказных наноструктурированных материалов.

Разработаны теоретические основы формирования заданных эксплуатационных свойств изделий на базе фрактального анализа геометрико-структурных и физико-механических характеристик поверхностного слоя деталей.

Исследованный механизм управления параметрами технических условий деталей и изделий на основе автоматизированного проектирования физических свойств наносистем (кластеров разрушения и роста) обеспечил синтез, сборку, отработку «заказных» свойств нанокомплексов. Результаты работы нашли практическое воплощение при создании наносистем в аэрокосмической, оптоэлектронной, атомной и других отраслях промышленности.

Литература

1. Усов С.В. Разработка систем автоматизации и информационные технологии, сокращающие сроки создания и освоения специальных изделий. Журнал ИМВМ РАН, М., 2006 – с. 78-87.
2. Каргапольцев В.А., Коган М.Н. и др. Авиационная наука – источник новых технологий/ В сб. Нанотехнологии – технологии XXI века: материалы международной научно- практической конференции.-М.: Изд-во МГОУ, 2006, с. 29-31.
3. Иванова В.С., Фолманис Г.Э. Фрактально-синергетический подход к разработке структурных информационных нанотехнологий. - Материалы международной научно-практической конференции «Нанотехнологий - технологии 21 века». М, МГОУ. 2006, с.47-48.
4. Потапов А.А. Фракталы в радиофизике и радиолокации. – М.: ЛОГОС. 2002, 260 с.
5. Иванова В.С., Баланкин А.С., Бунин И.Ж., Оксогоев А.А.. Синергетика и фракталы в материаловедении. М.: Наука, 1994. – 383 с.
6. Королев В.Ю. Вероятностные модели: введение в асимптотическую теорию случайного суммирования. М.Диалог- МГУ, 1997, 72 с.
7. Ломаев В.И, Петров Д.В., Вячеславова О.Ф. Фракталы в размерной обработке деталей машин. Материалы международной научно- технической конференции «Нанотехнологий – технологии 21 века». М, МГОУ. 2006, с.72-74.
8. Чуйкин С.А., Усов С.В. и др. Основы проектирования технологии размерной обработки с применением методов фрактальной геометрии. - Материалы международной научно-практической конференции «Нанотехнологий - технологии 21 века»- М., МГОУ, 2006, с.45.
9. Вячеславова О.Ф., Назаров Ю.Ф., Иванов С.А. Фрактальная модель формирования поверхности физическими методами //Обзорные прикладной и промышленной математики. 2002, т.9, вып. 3, с. 698-699.

Вячеславова Ольга Федоровна. Профессор кафедры «Стандартизация, метрология и сертификация» Московского государственного технического университета «МАМИ». В 1976 году окончила Тульский политехнический институт, доктор технических наук, профессор. Количество печатных работ – 65, в том числе одна монография, 2 учебника.

Усов Вадим Сергеевич. Профессор кафедры «Технология машиностроения» Московского государственного открытого университета. В 1974 году окончил Тульский политехнический институт, доктор технических наук, профессор. Четырежды лауреат Государственной премии РФ. Количество печатных работ - 238. Область научных интересов: электрофизические и комбинированные методы обработки.