

Секция «Вычислительная математика, математическое моделирование и численные методы»

Математическое моделирование характеристик нанокomпозиционных материалов при использовании генетического алгоритма

Романчук Сергей Петрович

Сотрудник

Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А., Саратов, Россия

E-mail: romanчук_sergey@bk.ru

Математическое моделирование характеристик нанокomпозиционных материалов является актуальным научным направлением, которое позволяет упростить создание новых материалов. Ключевой задачей для моделирования характеристик функциональных материалов с заданными свойствами, является эффективный подбор состава и структуры нанокomпозитной среды. Такой подбор возможно реализовать программными средствами применяя генетический алгоритм.

На характеристики нанокomпозитного материала сильное влияние оказывают свойства входящих компонент, структура и материальные параметры включений. Особыми оптическими и электродинамическими свойствами обладают нанокomпозиционные материалы, состоящие из полупроводников, металлов и других соединений [1].

Объектом исследования является нанокomпозиционная среда, состоящая из однородной матрицы с помещенными в неё частицами в форме, приближенной к сфероидальной. Аппроксимируя форму неоднородных частиц эллипсоидом вращения, получим модель нанокomпозита с включениями в форме сфероидов с длинами полуосей a , b , c ($b = c$) вдоль координатных линий [2]. В рамках теории эффективной среды такую нанокomпозиционную среду можно рассматривать если длина волны внешнего электромагнитного поля на порядок превышает размер частиц по трем направлениям и расстояние между частицами [3].

Подбор состава материала с заданными характеристиками является оптимизационной задачей с большим количеством параметров и нелинейной зависимостью свойств материала от состава. Генетический алгоритм является методом оптимизации, основанным на имитации естественного отбора и работает с конечным множеством решений, создавая новые путем использования «генетических» операторов скрещивания, мутации и селекции [4].

Для решения задачи моделирования характеристик нанокomпозиционных материалов разработан программный комплекс [5], проведен анализ влияния численности популяции и коэффициента мутации на скорость сходимости разработанного метода.

Источники и литература

- 1) Виноградов А. П., Дорофеев А. В., Зухди С. К вопросу об эффективных параметрах мета- материалов // УФН. 2008. Т. 178, № 5. С. 511-518.
- 2) Романчук С.П., Корчагин С.А., Терин Д.В. Моделирование характеристик нанокomпозиционного материала со сферическими включениями применяя генетический алгоритм. сред // Математическое моделирование и численные методы . – 2018. - № 2. - С. 21–31.
- 3) Головань Л.А., Тимошенко В.Ю., Кашкаров П.К. Оптические свойства нанокomпозитов на основе пористых систем // Успехи физических наук. 2007. Т. 177 № 6. С. 619-638.

- 4) Гордиенко М.В. Об исследовании эффективности стандартного генетического алгоритма // Актуальные проблемы авиации и космонавтики. 2016. №12. С.492-494
- 5) Свидетельство № 2018612039 Российская Федерация. Программный комплекс " Подбор структуры и состава нанокompозитного матричного материала со сферическими включениями" : свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ / Д.В. Терин, С.П. Романчук ; правообладатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А.» (СГТУ имени Гагарина Ю.А.) (RU). - № 2017663089 ; заявл. 15.12.2017; зарегистр. 09.02.2018. - [1] с.