

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

*Ю. Г. Кожевникова*

*Астраханский инженерно-строительный институт,  
г. Астрахань (Россия)*

Процесс массопереноса веществ является сложным, зависящим от большого числа параметров, для которого сложно построить идеальную модель.

На основании экспериментальных данных был достигнут определенный уровень априорных сведений об исследуемых диффузионных процессах, который и был положен в основу построения адекватной компьютерной модели.

Программный комплекс выступает в качестве инструмента для достижения целей, при проектировании, строительстве и эксплуатации зданий и сооружений в части их защиты от разрушений, вызванных воздействием солей, углекислого газа и воды и направлен на систематизацию характеристик для получения новых высокоэффективных материалов.

Проблемы исследования, связанные с поиском решений систем уравнений, значительным количеством вариаций входных параметров и переменных, а также графическим построением взаимозависимостей протекания процессов диффузии в различных материалах, стало возможным благодаря привлечению программных средств ЭВМ. Разработанный программный комплекс Diffuzion позволяет решить следующие задачи:

1. Предоставление удобного интерфейса по вводу, редактированию и сохранению исходных параметров:

- физико-химических характеристик строительного материала;
- вариативности условий проведения эксперимента;
- результатов квантово-химического расчета энергии взаимодействия ионов щелочных и щелочноземельных металлов со строительными материалами и образцами пород.

2. Проведение расчетов по определению:

- коэффициента диффузии;
- энергии образования (разрушения) связей и т. д.

3. Построение геометрических зависимостей протекания диффузионных процессов и процессов образования (разрушения) связей.

4. Возможность анализа полученных расчетных данных и их сравнение с экспериментальными.

Как результат, методы и средства, реализованные с помощью программного комплекса Diffuzion, состоят из двух модулей.

Первый модуль программного комплекса разработан для возможности проанализировать и количественно оценить физико-химические про-

цессы диффузии растворов солей в наиболее часто применяемых строительных материалах (рис. 1).

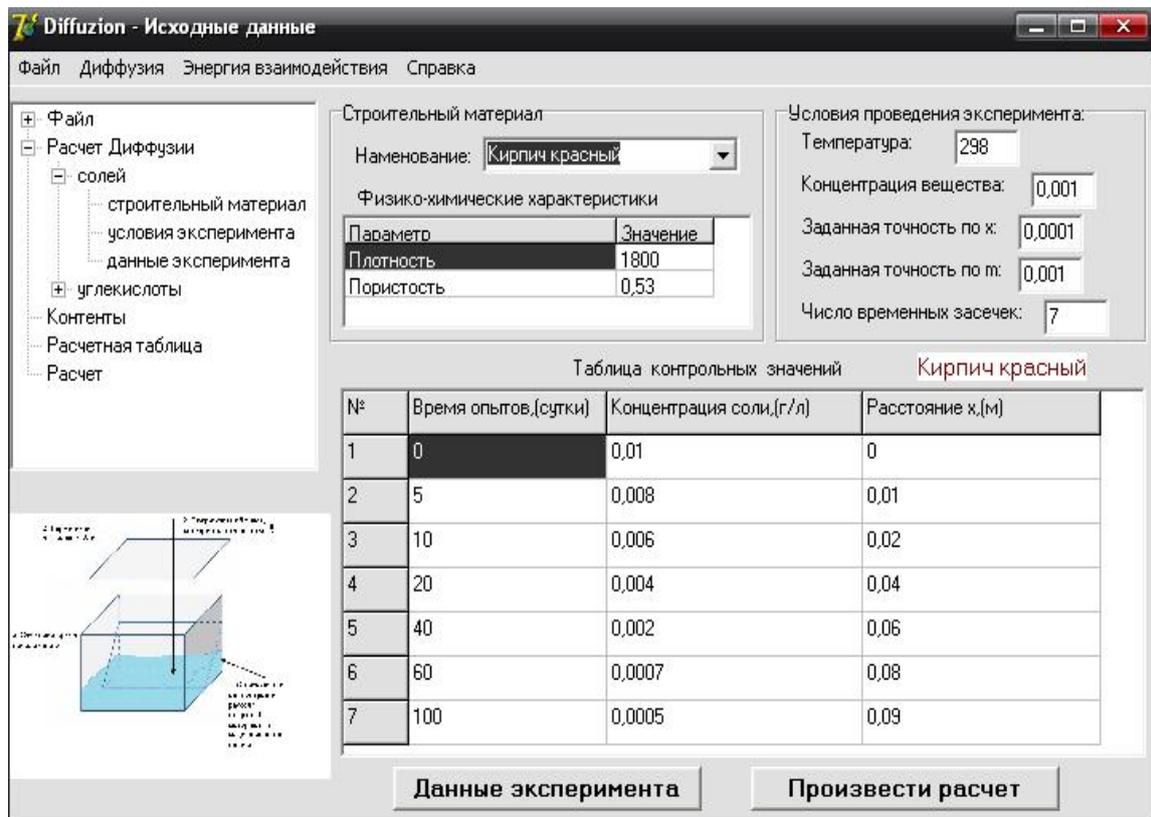


Рис. 1. Структура первого модуля для расчета коэффициента диффузии по выбранному строительному материалу (используются вариативные исходные данные)

Далее следует графическое представление диффузии в заданном образце строительного материала (рис. 2).



Рис. 2. Графическое представление результатов изучения диффузии по выбранному материалу

Затем следует оценить и систематизировать диффузофорез углекислоты в различные по соотношениям заполнителей бетонные элементы (рис. 3–4).

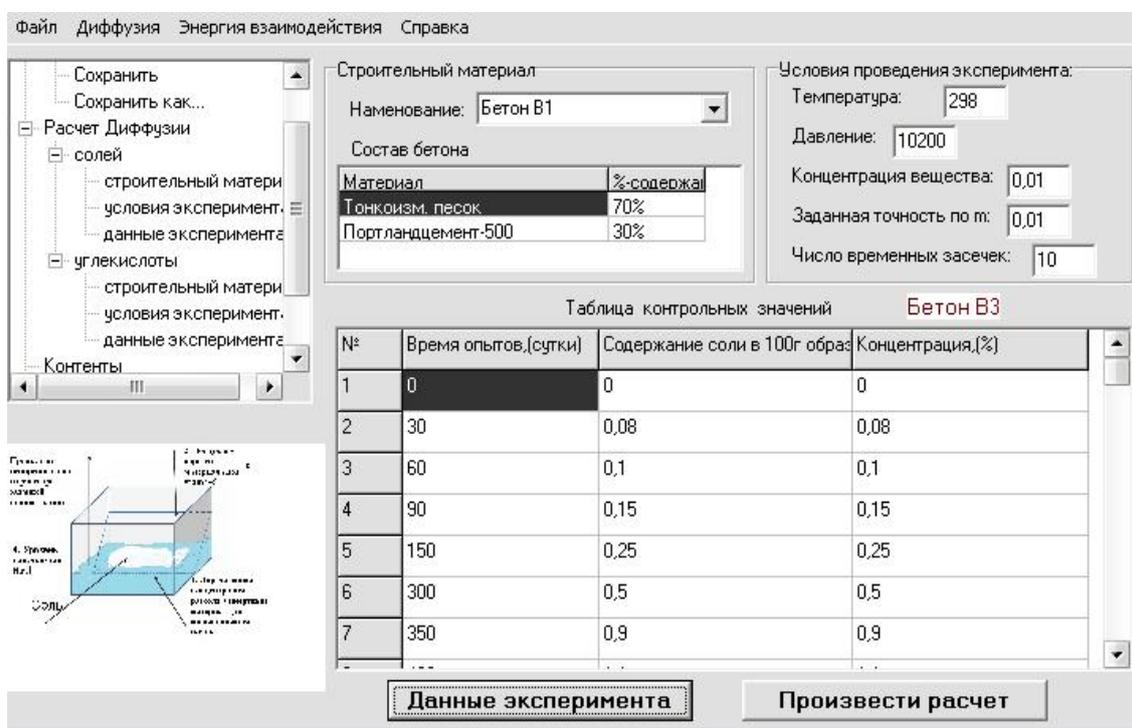


Рис. 3. Структура первого модуля для расчета диффузофореза по определенному составу бетона (используются вариативные исходные данные)



Рис. 4. Графическое представление результатов изучения диффузофореза по выбранному материалу

Второй модуль программного комплекса моделирует процессы диффузии на алюмосиликатах и различных образцах материалов (рис. 5). Он позволяет выполнять построение гистограммы образования (разрушения) устойчивых соединений (кластеров) с ионами щелочных и щелочно-земельных элементов и расчетом коэффициента диффузии.

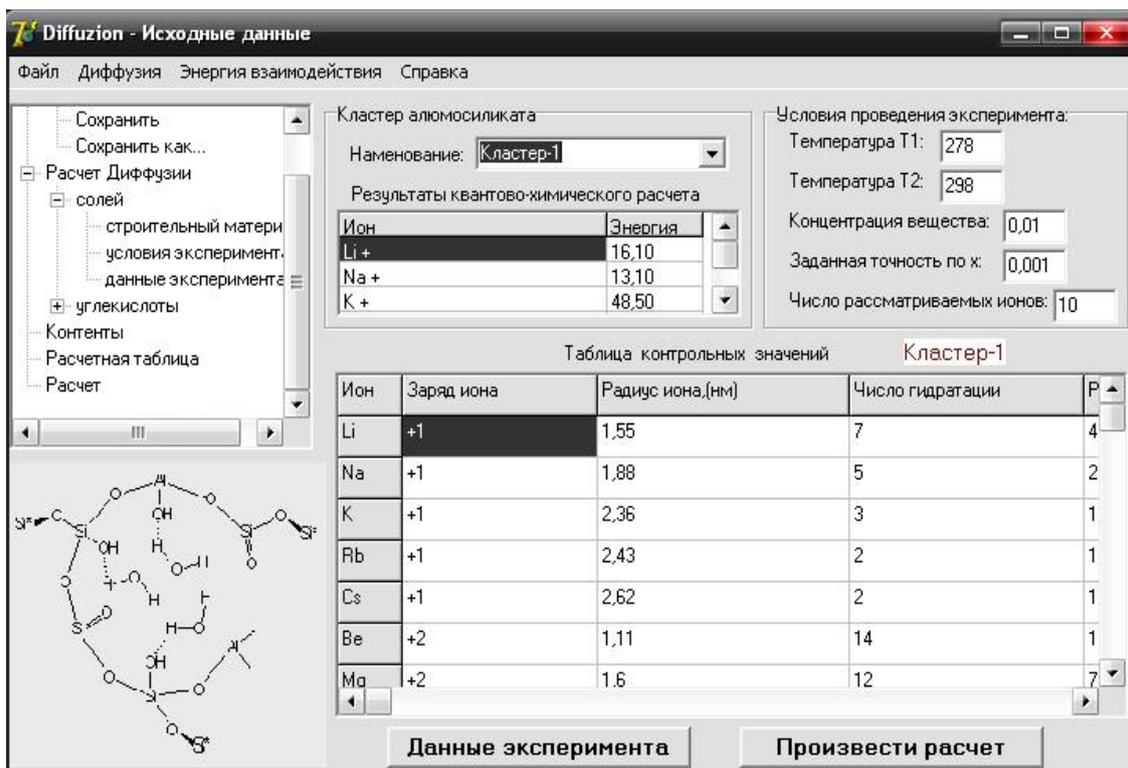


Рис. 5. Структура второго модуля программного комплекса

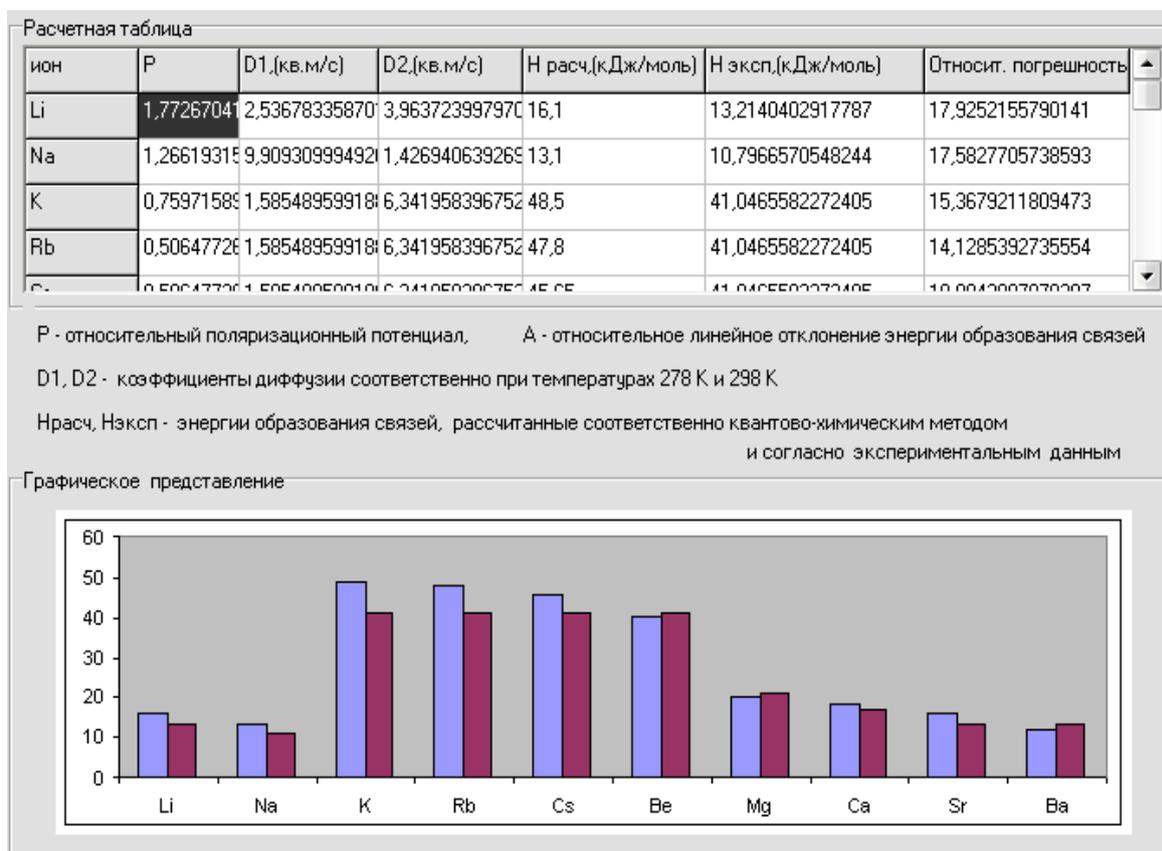


Рис. 6. Результаты теоретических расчетов по экспериментальным данным, проиллюстрированные гистограммой

Очевидно, что система автоматизации не может хранить все типы объектов предметной области, их показатели и взаимосвязи, поэтому выбраны самые необходимые. Вводятся значения соответствующие условиям проведения эксперимента с определенными температурными показателями, концентрацией действующего вещества, числа временных засечек и т. д.

Точность полученной информации подтверждается эмпирическими данными. Они производились не только для того, чтобы «отладить» программу, то есть отыскать и исправить все ошибки и опечатки, допущенные как при создании алгоритма, так и при его программной реализации. В этих предварительных расчетах тестировалась математическая модель, выяснялась ее адекватность исследуемому объекту, был проведен ряд контрольных экспериментов, по которым имеются достаточно надежные измерения.

Использование программного комплекса дает возможность в определенной долей уверенности производить аналоговые расчеты на различных материалах, характеризующихся отличными от изученных физико-механическими свойствами.

#### **Список литературы**

1. Программный комплекс моделирования диффузионных процессов «Diffuzion» : свид. о гос. рег. программы для ЭВМ № 2012617861.