

На правах рукописи

Соколов Александр Павлович

Научные основы автоматизированного проектирования композиционных
материалов

Специальность: 2.3.7. Компьютерное моделирование и автоматизация
проектирования

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
доктора технических наук



Москва — 2023

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» (МГТУ им. Н.Э. Баумана).

Научный консультант:

Карпенко Анатолий Павлович,
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты:

Шайдурова Галина Ивановна
доктор технических наук, профессор,
кафедра «Механика композиционных материалов и конструкций»
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет»

Чистякова Тамара Балабековна
доктор технических наук, профессор,
заведующая кафедрой систем автоматизированного проектирования и управления, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)

Наседкин Андрей Викторович
доктор физико-математических наук, профессор,
заведующий кафедрой математического моделирования,
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южный федеральный университет»,

Ведущая организация:

Институт проблем управления имени В.А. Трапезникова РАН

Защита диссертации состоится 21 декабря 2023 года в 14 час. 00 мин. на заседании диссертационного совета 24.2.331.19 при МГТУ им. Н.Э. Баумана по адресу: 105005, Россия, Москва, ул. 2-я Бауманская, д.5, стр.1, в зале Учёного Совета.

Отзыв на автореферат в двух экземплярах, заверенный печатью организации, просим высылать по адресу: 105005, Россия, Москва, ул. 2-я Бауманская, д.5, стр.1, МГТУ им. Н.Э. Баумана, ученому секретарю диссертационного совета 24.2.331.19.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте МГТУ им. Н.Э. Баумана <https://bmstu.ru>.

Автореферат разослан « _____ » _____ 2023 г.

Учёный секретарь диссертационного
совета, кандидат технических наук, доцент

Сакулин С.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Композиционные материалы (КМ) находят широкое применение в различных отраслях промышленности: авиация, судостроение, ракетостроение, строительство и пр.

Конкурентноспособность продукции, включающей композитные элементы, обусловлена скоростью реагирования производителей на запросы рынка. Современные подходы к проектированию композитных конструкций и композиционных материалов (КМ) предполагают, наряду с проведением экспериментальных исследований, активное применение автоматизированных систем различных классов, в т.ч. САД/САЕ. Ключевую роль при этом играют системы инженерного анализа (САЕ), реализующие математические модели и методы, учитывающие особенности микроструктуры и поведение КМ при внешних воздействиях.

Многообразие типов КМ, многочисленные модели и вычислительные методы исследования характеристик КМ, в совокупности, приводят к различным сценариям решения каждой прикладной задачи рассматриваемой области. Известные САЕ системы обладают широким спектром функциональных возможностей и при этом, требуя специальной подготовки пользователя, часто не позволяют быстро поставить и решить практически значимую задачу автоматизированного проектирования КМ (АП КМ). Применение САЕ систем эффективно для решения научно-исследовательских задач анализа характеристик конкретных КМ, однако, сильно ограничено для общего случая задачи АП КМ с различными схемами армирования. Задачи АП КМ, как правило, требуют учитывать особенности будущей технологии их изготовления, использовать различные модели материалов компонентов КМ, учитывать неполноту входных данных (*их частичную определённость*), многократно решать задачи анализа характеристик КМ (*прямая гомогенизация*) и задачи идентификации характеристик компонентов проектируемого КМ (*обратная гомогенизация*) и пр.

Несмотря на достигнутый прогресс в области развития высокопроизводительных вычислительных систем, а также вычислительных методов и программных систем, задачи численной оценки характеристик КМ, идентификации свойств отдельных компонентов КМ и, тем более, задачи АП КМ, продолжают оставаться сложными с вычислительной точки зрения.

Современный процесс проектирования КМ остро нуждается в новых автоматизированных методологиях. Эти методологии должны базироваться на математических моделях достаточно универсальных, чтобы их можно было применять для различных классов проектируемых КМ, в том числе, в условиях неполноты входных данных. Вместе с тем, такие методологии должны обладать гибкостью и возможностями простой модификации с целью удовлетворения изменяющимся со временем требованиям.

Актуальность темы исследования обусловлена текущим состоянием науки в рассматриваемой области: 1) отсутствует методология автоматизированного проектирования КМ с заранее заданными характеристиками; 2) отсутствует математическая модель для универсального описания различных физико-механических характеристик КМ и их отдельных компонентов, которая учитывала бы, что некоторые из этих характеристик неизвестны; 3) отсутствуют вычислительные методы анализа физико-механических

характеристик КМ и их отдельных компонентов, которые могут использоваться в условиях неполноты входных данных; 4) отсутствуют теоретические основы разработки САПР КМ; 5) отсутствуют отечественные САПР КМ.

Основной научной проблемой, на решение которой направлено диссертационное исследование, является создание научных основ специализированных САПР, предназначенных для решения задач автоматизированного проектирования КМ с заранее заданными характеристиками.

Цели исследования. 1) Создать научные основы автоматизированного проектирования КМ с заранее заданными физико-механическими характеристиками при учете частичной определённости свойств отдельных компонентов, а также создать теоретические основы разработки САПР КМ, включая методы разработки программных средств для анализа характеристик КМ различных типов при учете неполноты входных данных. 2) Создать прототип САПР КМ. 3) Показать работоспособность созданного математического и программного обеспечения.

Основные задачи исследования.

1) Провести обзор современных методов, алгоритмов и программного обеспечения, применяемых для проектирования КМ.

2) Разработать научные основы АП КМ, включая:

— методологию автоматизированного проектирования КМ с заранее заданными физико-механическими характеристиками при учёте неопределённости свойств отдельных компонентов исследуемого КМ, включая основные проектные процедуры и маршруты проектирования;

— математическую модель многомасштабной многокомпонентной гетерогенной структуры (ММГС), описывающую свойства проектируемого КМ и учитывающую неопределённость характеристик его отдельных компонентов;

— теоретические основы вычислительного метода реверсивной многомасштабной гомогенизации для анализа физико-механических характеристик КМ и их отдельных компонентов в условиях неполноты входных данных.

3) Создать теоретические основы САПР КМ, включая:

— основы построения архитектуры масштабируемых программных реализаций сложных вычислительных методов (СВМ) для реализации метода реверсивной многомасштабной гомогенизации в рамках САПР КМ;

— системный автоматизированный подход к разработке стандартных программных модулей САПР КМ.

4) Разработать архитектуру и прототип САПР КМ.

5) Верифицировать созданный прототип САПР КМ на примере практически значимых задач проектирования КМ и провести сравнение численных результатов с результатами экспериментальных исследований.

Объект исследования: процесс автоматизированного проектирования КМ с заранее заданными характеристиками.

Предмет исследования: 1) современные технологии автоматизированного проектирования КМ; 2) вычислительные методы анализа характеристик КМ и эффективные технологии реализации этих методов; 3) технологии разработки наукоёмких распределённых программных комплексов.

Научная новизна работы состоит в следующем.

1) Разработана методология автоматизированного проектирования КМ с заранее заданными характеристиками, особенностью которой является применение проектных процедур автоматизированного формирования плана вычисления характеристик проектируемого КМ на основе его заранее определённой многомасштабной многокомпонентной гетерогенной структуры.

2) Создана математическая модель многомасштабной многокомпонентной гетерогенной структуры, особенность которой заключается в возможности её применения для описания неоднородных материалов различной природы с неопределёнными характеристиками, в частности КМ.

3) Разработан вычислительный метод реверсивной многомасштабной гомогенизации для анализа характеристик КМ и их отдельных компонентов, особенность которого состоит в возможности его применения для анализа характеристик КМ в условиях частичной определённости характеристик компонентов.

4) Созданы теоретические основы программной реализации сложных вычислительных методов на базе понятий теории категорий и теории графов (графоориентированный подход), научная новизна которых заключается в реализации системного подхода к описанию алгоритмов решения широкого класса задач, возникающих в процессе АП КМ и при разработке вычислительных подсистем САПР КМ.

5) Предложена методика создания интерпретируемых динамически обновляемых графовых моделей, описывающих логику работы пользователей с разными ролями в САПР КМ, особенность которой заключается в возможности её применения для создания мультидисциплинарных интегрированных САПР.

6) Предложена и разработана архитектура САПР КМ, особенность которой заключается в возможности её применения для создания мультидисциплинарных интегрированных САПР.

Теоретическая значимость работы заключается в создании научных основ автоматизированного проектирования КМ с заранее заданными характеристиками в условиях частично определённых значений свойств отдельных его компонентов, а также в создании теоретических основ разработки архитектуры и вычислительных средств САПР КМ.

Практическая ценность и реализация результатов.

1) Предложенная и разработанная методология может применяться в условиях проектирования КМ, обладающих различными схемами армирования, включающих наполнители различных типов из различных материалов.

2) Характерным для прикладных задач является неполнота информации о характеристиках отдельных компонентов проектируемого КМ. Разработанный метод реверсивной многомасштабной гомогенизации предназначен для применения в таких случаях.

3) Разработанный язык aINI [10] позволяет существенно упростить процесс определения и модификации форматов входных данных для различных актуальных задач в области АП КМ. С его помощью определяются постановки задач, краевые условия, характеристики компонентов проекти-

руемых КМ и т.п.

4) Разработана методика для автоматического создания программных средств ввода входных данных для вычислительных программных модулей САПР на основе интерпретации данных в формате aINI [10].

5) Разработанный способ и система графо-ориентированного создания масштабируемых, реконфигурируемых и сопровождаемых программных реализаций СВМ [34], а также алгоритмическое обеспечение поддержки процесса разработки, позволяют упростить создание САПР КМ.

6) На основе графоориентированного подхода, а также с применением разработанного предметно-ориентированного языка описания графовых моделей aDOT, созданы графоориентированные реализации вычислительных методов решения задач линейной теории упругости, теплопроводности, анализа различных характеристик КМ на основе методов конечных элементов, асимптотического осреднения, реверсивной гомогенизации и пр.

7) Показано, что повышение точности расчёта упруго-прочностных характеристик дисперсно-армированных и керамоматричных наномодифицированных КМ с применением МАО возможно за счёт введения в модель материала дополнительных виртуальных (к примеру, адгезионных) компонентов.

8) Показано, что учёт нелинейного характера деформирования компонентов полимерных КМ позволяет повысить точность моделирования прочностных характеристик более, чем на 30% [30].

Методы исследования. Теоретические исследования выполнены с использованием общей теории систем, теории категорий и теории графов, теории конечных автоматов и формальных языков, методов микромеханики КМ (прямой и обратной гомогенизации), теории упругости и теории прочности. В практических исследованиях использованы методы структурного анализа и синтеза, технологии и методы обобщённого, объектно-ориентированного и потоко-ориентированного программирования.

На защиту выносятся.

1) Методология автоматизированного проектирования КМ.

2) Математическая модель многомасштабной многокомпонентной гетерогенной структуры, особенностью которой является возможность учёта частичной определённости характеристик отдельных её компонентов.

3) Вычислительный метод реверсивной многомасштабной гомогенизации анализа физико-механических характеристик КМ в условиях частичной определённости входных данных.

4) Теоретические основы программной реализации сложных вычислительных методов (графоориентированный подход), необходимых при решении задач АП КМ.

5) Методика создания интерпретируемых динамически обновляемых графовых моделей, описывающих логику работы пользователей в САПР КМ.

6) Архитектура прототипа САПР КМ.

Достоверность полученных результатов обусловлена применением математически обоснованных методов. Достоверность численных результатов, полученных с применением разработанного вычислительного метода реверсивной многомасштабной гомогенизации, подтверждена сравнением с

доступными результатами экспериментальных исследований: а) при расчёте упругих и прочностных характеристик дисперсно-армированных сферическими включениями полимерных КМ (сферопластиков); б) при проектировании 1D волокнистых дисперсно-армированных полимерных КМ с требуемыми термо-упруго-прочностными характеристиками для создания композитных герметизирующих заделок при разработке газоразделительных мембранных модулей.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на Российских и международных научных конференциях, наиболее важными из которых являются следующие 23: IX-ая Всероссийская конференция «Физикохимия ультрадисперсных (нано-) систем» (ФХУДС-IX) (Ижевск, ФТИ УрО РАН, 2010); Международная конференция «Обратные и некорректные задачи математической физики», посвящённая 80-летию со дня рождения академика М.М. Лаврентьева (Новосибирск, 2012); XIV международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование» (Саров, РФЯЦ ВНИИЭФ, 2012); Вторая Всероссийская научно-техническая конференция «Суперкомпьютерные технологии» – СКТ-2012 (Дивноморское, НИИ МВС им. А.В. Каляева ЮФУ, 2012); 6-ая Международная конференция по многомасштабному моделированию материалов – МММ’2012 (Биополис, Сингапур, 2012); IV Всероссийский симпозиум по проблеме «Механика композиционных материалов и конструкций» (Москва, ИПРИМ РАН, 2012); XXV Международная научная конференция «Математические методы в технике и технологиях» – ММТТ-25 (Волгоград, 2012); XXV Международная конференция «Математическое моделирование в механике деформируемых сред и конструкций. Методы граничных и конечных элементов» – ВЕМ&FEM’2013 (Санкт-Петербург, 2013); XIV Всероссийской конференции молодых учёных по математическому моделированию и информационным технологиям (Томск, ИВТ СО РАН, 2013); III Международная научно-техническая конференция «Аэрокосмические технологии», посвящённая 100-летию со дня рождения академика В.Н. Челомея (Реутов, НПО «Машиностроения», 2014); First International Conference on Mechanics of Composites – MECOMCOMP’2014 (New York, Long Island, USA, Stony Brook University, 2014); Всероссийская научная конференция «Обратные краевые задачи и их приложения», посвящённая 100-летию со дня рождения проф. М.Т. Нужина (Казань, 2014); V Петербургский Международный Газовый Форум – ПМГФ-2015 (Санкт-Петербург, 2015); Exhibition-Seminar «Technology and the software distributed and high-performance computing» on basis of Russian Centre of Science and Culture in Chennai, India, 2015; Четвёртый Национальный Суперкомпьютерный Форум – НСКФ-2015 (Переславль-Залесский, ИПС им. А.К. Айламазяна РАН, 2015); Московский Ежемесячный Семинар Молодых Учёных и Студентов по проблемам машиноведения имени Ю.Н. Работнова (Москва, ИМАШ РАН, 18 января 2017); II Всероссийская научно-практическая конференция «Актуальные вопросы развития вооружения, военной и специальной техники войск противовоздушной и противоракетной обороны, космических войск воздушно-космических сил» (Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2017); International Conference on Intelligent Manufacturing (Harbin, China, 2017); II Всероссийская научно-техническая конференция «Механика

и математическое моделирование в технике 2017» – МММТ'2017 (Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2017); 9-th International Conference on Material and Manufacturing Technology – ICMMT'2018 (Moscow, 2018); 9-th International Conference on Smart Material Technologies – ICSMT'2018 (Moscow, 2018); 10-th International Conference on Material and Manufacturing Technology – ICMMT'2019 (Kuala-Lumpur, Malaysia, 2019); International Conference on Oil, Gas and Coal Technology – ICOGCT'2019 (Bangkok, Thailand, 2019).

Личный вклад автора. Все исследования, изложенные в диссертационной работе, проведены лично автором в процессе научной деятельности. Заимствованный материал обозначен в работе ссылками.

1) Предложена и разработана методология АП КМ.

2) Предложена и разработана математическая модель многомасштабной многокомпонентной гетерогенной структуры. Модель является развитием модели многомасштабной иерархической структуры, созданной профессором Димитриенко Ю.И. и программно реализованной автором.

3) Предложен, обоснован и разработан вычислительный метод реверсивной многомасштабной гомогенизации. Сформулирована идея метода, основанная на применении разработанной модели ММГС.

4) Предложена концепция графоориентированного подхода к разработке СВМ и определены его базовые теоретические основы.

5) Предложен вычислительный метод, позволяющий восстановить эффективную кривую деформирования исследуемого КМ.

6) В рамках разработанного прототипа САПР КМ, автором предложены концепция, архитектура, платформа разработки, реализованы большинство подсистем, включая вычислительную.

7) Выполнен комплекс численных и экспериментальных исследований эффективных упруго-прочностных характеристик ряда КМ. Предложена вычислительная методика решения задач поиска пределов прочности КМ при сложном напряжённо-деформированном состоянии, а также разработаны программные реализации конечно-элементных методов решения задач моделирования процессов разрушения КМ. Предложена вычислительная методика решения задач определения эффективных упруго-прочностных характеристик микроструктур моделируемых 1D-армированных КМ на основе полых мембранных волокон. Предложен и применён метод реверсивной многомасштабной гомогенизации для дисперсно-армированных КМ.

8) Предложена концепция, архитектура и создано программное обеспечение поддержки процесса разработки элементов САПР КМ.

Публикации. По результатам выполненных исследований опубликовано 60 научных работ, в том числе: 23 статьи в отечественных рецензируемых изданиях, рекомендуемых ВАК РФ (среди которых 7 по специальности 2.3.7 и/или 05.13.12); 12 статей в научных изданиях, индексируемых в международных базах данных; 23 тезиса трудов конференций; 1 патент на изобретение РФ, 3 свидетельства об официальной регистрации программ для ЭВМ в Роспатенте.

Реализация и внедрение результатов исследований осуществлены в процессе решения прикладных задач следующих организаций (подтверждающие документы представлены в диссертации): 1) МГТУ им. Н.Э. Баумана; 2) РХТУ им. Д.И. Менделеева; 3) ООО «Группа 7»;

4) Группа Компаний «СТП» («STP Group»); 5) Институт нефтехимии и катализа РАН.

Структура работы. Диссертационная работа состоит из введения, 6 глав, общих выводов и заключения, списка литературы (400 наименований), приложения, содержит 170 рисунков и 33 таблицы. Полный объём составляет 472 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** определён предмет, сформулированы цели и задачи диссертационного исследования, приведено обоснование актуальности работы, представлены методы исследований, показана научная новизна, теоретическая и практическая значимость, даны сведения о достоверности, апробации и внедрении результатов диссертации, указан личный вклад автора.

В **главе 1** представлены современные подходы, вычислительные методы и программное обеспечение, применяемые при проектировании новых КМ. Материал главы разбит на следующие подразделы: 1) современные подходы к проектированию КМ и конструкций; 2) вычислительные методы анализа характеристик КМ; 3) организация вычислительных процессов при разработке САПР; 4) существующее ПО применяемое при проектировании КМ.

Современные подходы к проектированию КМ и конструкций. Описаны существующие подходы к автоматизированному и неавтоматизированному проектированию КМ и особенности проведения проектных расчётов, применяемых на практике. Представлена концептуальная постановка проблемы АП КМ и входящие в её состав задачи. Освещены особенности и важность экспериментальных исследований, проводимых в процессе проектирования КМ. Показано, что на конечные характеристики КМ оказывают существенное влияние следующие факторы: а) особенности применяемых технологий изготовления (режимы отверждения и пр.); б) появление новых компонентов в процессе изготовления (поры, трещины и прочие дефекты); в) применение упрощённых моделей материалов компонентов с точки зрения упругих, прочностных и прочих характеристик в связи с отсутствием достаточной информации. Указанные факторы приводят к неполноте входных данных, существенно усложняют численный анализ характеристик соответствующих КМ, определяют повышенные требования к применяемым вычислительным методам.

Вычислительные методы анализа характеристик КМ. Сформулированы основные задачи микромеханики КМ, для решения которых необходимо одновременное использование различных ресурсоёмких вычислительных методов, что существенно усложняет как процессы разработки соответствующих расчётных программ, так и процессы численного моделирования характеристик КМ и их компонентов. Представлен широкий обзор публикаций по вычислительным методам анализа характеристик КМ, включая методы решения задач прямой и обратной гомогенизации.

Организация вычислительных процессов при разработке САПР. Представлен обзор литературы по методам создания наукоёмкого ПО. Особое внимание уделено методам разработки расширяемых и сопровождаемых вычислительных библиотек, а также технологиям реализации

вычислительных методов, организации вычислительных процессов и комплексных вычислений в распределённых вычислительных системах.

Программное обеспечение, применяемое при проектировании КМ. Рассмотрены специализированные и универсальные системы инженерного анализа, применяемые при разработке КМ.

В главе 2 представлены: 1) постановка проблемы АП КМ с заданными характеристиками в условиях частично определённых входных данных; 2) предложенная методология АП КМ, её проектные процедуры и маршруты проектирования.

Постановка проблемы АП КМ в условиях частично определённых входных данных. Проблема АП КМ предполагает решение многочисленных задач (Рис. 1), среди которых ключевыми являются задачи прямой и обратной гомогенизации в различных вариациях. Для постановки и последующего решения таких задач должны быть определены так называемые операторы гомогенизации, которые зависят от типа исследуемых характеристик КМ и соответствующей модели физико-механического процесса.



Рис. 1. Основные задачи АП КМ

Рассмотрим КМ, состоящий из m компонентов с характеристиками $\omega^\alpha \in \mathbb{R}^n$, где $\alpha \in [1..m]$ – номер компонента КМ; n – число характеристик, определяемое выбранной моделью физико-механического процесса.

Пусть целое $s \geq 0$ – номер масштабного уровня, который определяет характерный размер l_s представительного элемента объёма (ПЭО) $V_s \in \mathbb{V}$, описывающего микроструктуру КМ на масштабном уровне s (Рис. 2), где \mathbb{V} – множество всех возможных ПЭО. Вообще говоря, микроструктура КМ на уровне s может быть представлена множеством представительных элементов объёма, каждый из которых описывает микроструктуры отдельных компонентов на этом же масштабном уровне. В диссертации этот случай не рассматривается. Считаем, что $l_s \propto 10^{-\rho s}$ м, где значение ρ зависит от конкретного КМ и верны неравенства $2 \lesssim \rho \lesssim 3$. Также полагаем, что характерные размеры значимых включений КМ имеют тот же порядок, что и l_s . Если не оговорено иное, то микроструктуру КМ рассматриваем на масштабном уровне $s = 1$, а его эффективные характеристики – на масштабном уровне $s = 0$.

На Рис. 2 слева представлена неоднородная область V_0 проектируемого

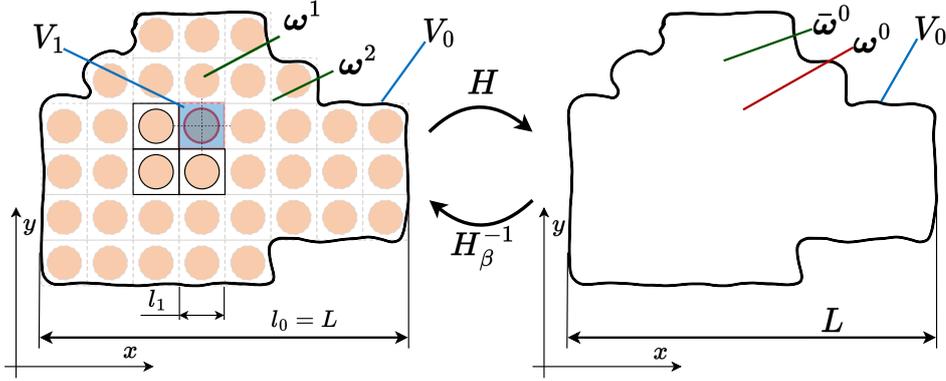


Рис. 2. Прямая и коэффициентная обратная гомогенизация КМ: l_0 и l_1 – характерные размеры V_0 и V_1 , соответственно; H , H_β^{-1} – операторы прямой и коэффициентной обратной гомогенизации (глава 3)

КМ, обладающего периодической микроструктурой, описываемая ПЭО V_1 , а справа – однородная («гомогенизированная») область, где $\omega^0, \bar{\omega}^0 \in \mathbb{R}^n$ – эффективные физико-механические характеристики КМ на масштабном уровне $s = 0$, полученные численно (осреднённые) и экспериментально (или требуемые) соответственно. Исходная область V_0 состоит из наполнителя (сферические включения) и матрицы (связующее) с характеристиками ω^1 и ω^2 соответственно.

Задача *прямой гомогенизации*: определить ω^0 на основе известных характеристик $\{\omega^\alpha\}_1^m$, геометрической модели ПЭО V_1 , а также заданном операторе гомогенизации H (глава 3), для которого $\omega^0 = H(V_1, \{\omega^\alpha\}_1^m)$.

В диссертации предложена следующая постановка задачи *коэффициентной обратной гомогенизации*: определить такие характеристики $\omega^{*\beta}$ (возможно, неединственные) некоторого компонента β при известных (требуемых) эффективных характеристиках КМ $\bar{\omega}^0 \in \mathbb{R}^n$ и известных характеристиках ω^α всех остальных компонентов, т.е. $\alpha \in [1..m]$, $\alpha \neq \beta$:

$$\omega^{*\beta} = H_\beta^{-1}(V_1, \{\omega^\alpha : \alpha \neq \beta\}_1^m, \bar{\omega}^0) = \underset{\omega^\beta \in \mathcal{D}_H \subset \mathbb{R}^n}{\operatorname{argmin}} M^\lambda(\omega^\beta), \quad (1)$$

$$M^\lambda(\omega^\beta) = \|H(V_1, \omega^1, \dots, \omega^\beta, \dots, \omega^m) - \bar{\omega}^0\|_2^2 + \lambda \|\omega^\beta\|_2^2, \lambda > 0,$$

где \mathcal{D}_H – область определения H ; $M^\lambda(\omega^\beta)$ – стабилизирующий функционал А.Н. Тихонова; λ – параметр регуляризации.

Постановка *проблемы АП КМ* с заданными характеристиками требует определить: объект проектирования, критерии качества и множество СВМ, необходимых для автоматизированного решения соответствующих задач (Рис. 1). В отличие от (1), математическая постановка задачи АП КМ предполагает как определение характеристик $\omega^{*\beta}$, так и уточнение им соответствующих эффективных характеристик $\bar{\omega}^0 \in \mathbb{I}\mathbb{R}$, заданных в форме интервальных оценок. Решение задачи АП КМ, в том числе, предполагает автоматизацию процедуры выбора оператора прямой гомогенизации на основе модели исследуемого физико-механического процесса (Рис. 4).

Задачи обратной гомогенизации и АП КМ, как правило, некорректно поставлены по Адамару. Для преодоления некорректности предложен метод реверсивной многомасштабной гомогенизации (глава 3).

Методология АП КМ предполагает выполнение проектных процедур согласно заданным маршрутам проектирования с целью достижения требуемых критериев качества объекта проектирования (Рис. 3). Объектом проектирования в задаче АП КМ является КМ с заданными характеристиками, который формализован его моделью ММГС (глава 3), множеством ПЭО и заданным типом схемы армирования (Рис. 4).

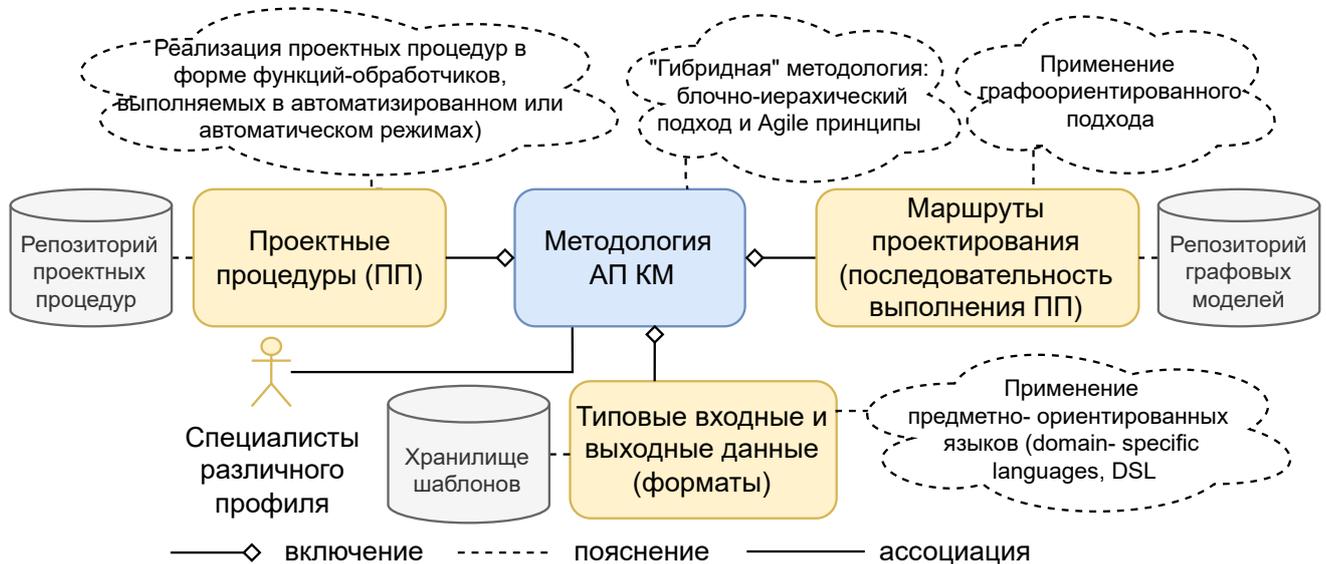


Рис. 3. Концептуальный уровень методологии АП КМ и особенности её реализации. Понятия графоориентированный подход, функция-обработчик, графовая модель вводятся в главе 4.

Маршруты проектирования, обеспечивающие решение задач АП КМ, определяются с помощью понятия графовой модели СВМ (глава 4). Ключевыми в процессе АП КМ являются задачи прямой и обратной гомогенизации, методы решения которых относятся к СВМ и также определяются с помощью понятия графовой модели. Основные маршруты проектирования: *статический* (Рис. 5), неизменный для различных задач проектирования КМ, определяющий верхний уровень методологии и реализуемый в форме статической графовой модели G_s ; *динамический*, зависящий от постановки задачи, обеспечивающий автоматизированное решение задачи прямой гомогенизации и реализуемый в форме динамической графовой модели G_d , вложенной в G_s .

Графовая модель G_d называется динамической, т.к. формируется автоматически на основе модели ММГС, построенной в рамках проектной процедуры \tilde{F}_{01} (Рис. 5), а также данных, определяемых при обходе графовой модели G_s . Топология графовой модели G_d обусловлена алгоритмом метода асимптотического осреднения, разработанного проф. Н.С. Бахваловым, в основе которого лежит решение серии т.н. *локальных задач* на представительном элементе объёма. Число локальных задач, необходимых для решения, зависит от выбранной модели исследуемого физико-механического процесса (Рис. 4). Для решения локальных задач, как правило, применяются метод конечных элементов, который относится к СВМ и описывается соответствующей графовой моделью.

Обход указанных графовых моделей в автоматизированном режиме

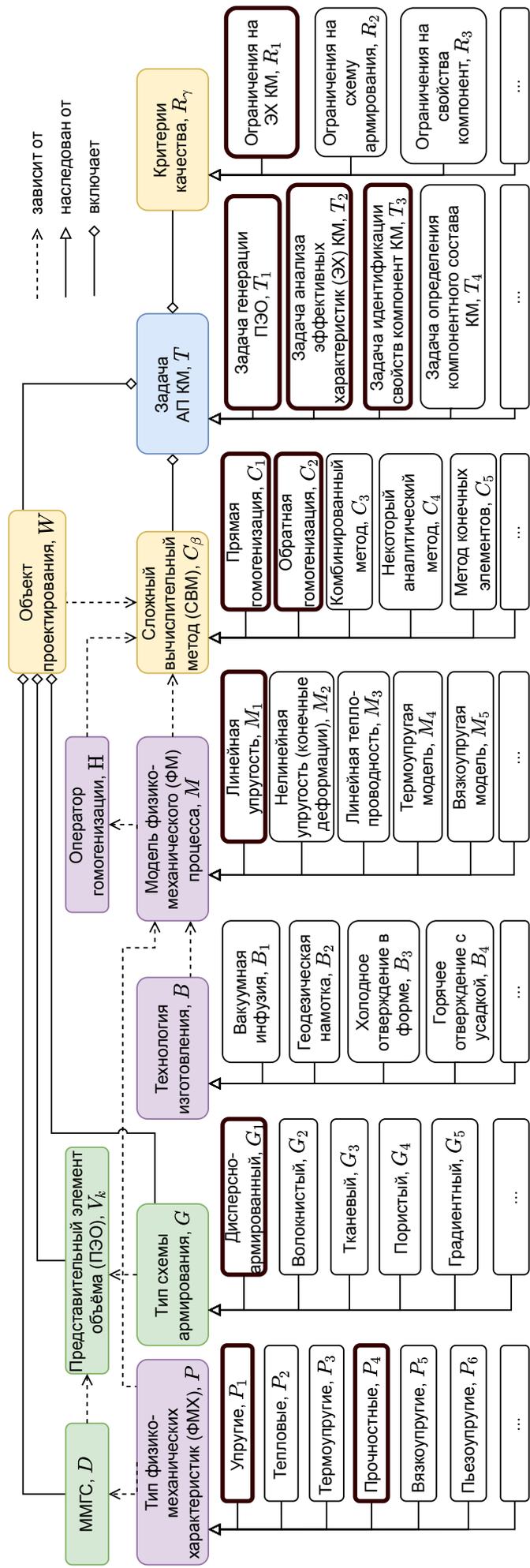


Рис. 4. Объектная модель взаимосвязей ключевых сущностей задачи АП КМ

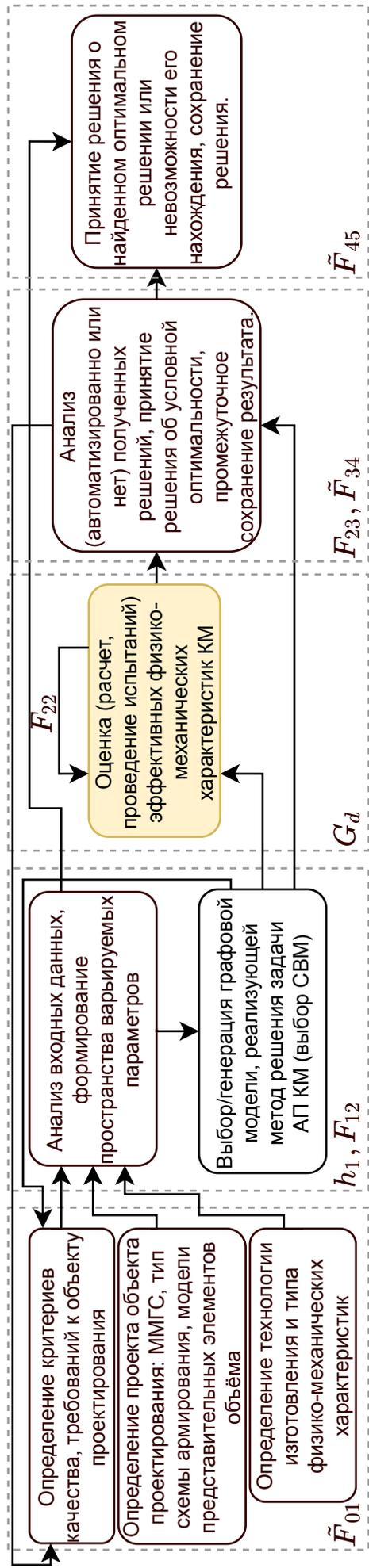


Рис. 5. Статический маршрут проектирования АП КМ, реализуемый статической графовой моделью G_s :

F_{ij}, \tilde{F}_{ij} – проектные процедуры, выполняемые автоматически и автоматизировано, соответственно

определяет маршрут АП КМ и решение поставленной задачи АП КМ с заданными характеристиками в условиях частично определённых входных данных (реализация представлена в главе 6).

Реализация ключевых проектных процедур и маршрутов проектирования указанным способом обеспечивает простоту модификации процессов проектирования, основанных на предложенной методологии АП КМ, и удовлетворение известному принципу гибкой разработки: «реагирование на изменения, а не следование плану».

Графовая модель G_s (Рис. 6) реализует статический маршрут проектирования АП КМ. Состояния данных G_s : S_0 – начальное состояние данных (входные данные загружены); S_1 – осуществлена подготовка входных данных (определены ММГС, требования к объекту проектирования, модели представительных элементов объёма V_s и т.п.); S_2 – «план» решения конкретной задачи АП КМ сформирован (сгенерирован) или завершена итерация вычислений согласно ранее определённому «плану» (например, получены физико-механические характеристики КМ или компонента КМ); S_3 – осуществлена автоматизированная фильтрация списка возможных физико-механических характеристик КМ или компонентов с учётом проектных требований; S_4 – осуществлена ручная фильтрация результатов с учётом проектных требований; S_5 – полученные результаты сохранены (получен прототип объекта проектирования, удовлетворяющий проектным требованиям).

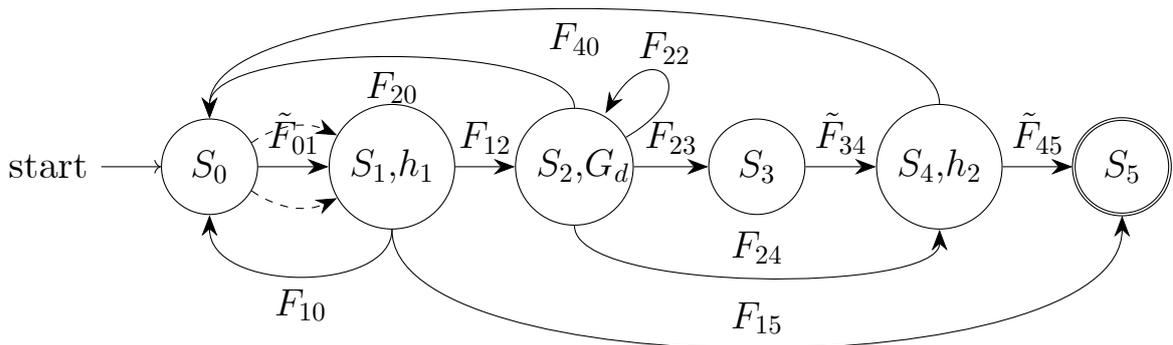


Рис. 6. Статическая графовая модель G_s , использующая вложенную G_d

Назначение проектных процедур F_{ij} , \tilde{F}_{ij} графовой модели G_s : \tilde{F}_{01} – подготовка входных данных; F_{10} , F_{20} , F_{40} , F_{15} – вывод о невозможности АП КМ и необходимости изменения входных данных; h_1 (функция-селектор) – анализ входных данных; F_{12} – формирование пространства варьируемых параметров, выбор решателя задачи или генерация «плана» решения задачи в форме графовой модели (определение графовой модели G_d); G_d – численное решение прямой задачи гомогенизации, используя заранее реализованные решатели, или проведение испытаний и сохранение их результатов; F_{22} – выбор следующего варианта входных данных в пространстве варьируемых параметров; F_{23} – автоматизированный анализ полученных решений (удаление неверных вариантов и т.п.); \tilde{F}_{34} – анализ полученных решений и удаление решений, неудовлетворяющих критериям оптимальности; \tilde{F}_{45} – анализ промежуточных условно оптимальных решений, сохранение результатов.

В главе 3 представлены: 1) математическая модель ММГС [13]; 2) теоретические основы метода реверсивной многомасштабной гомогениза-

ции [11], основанного на применении операторов одномасштабной и многомасштабной прямой (Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П., Санчес-Паленсия Э.) и обратной (Cherkaev E., Weiglhofer W., Chafra M.) гомогенизации.

Математическая модель многоуровневых многокомпонентных гетерогенных структур предложена для описания характеристик КМ. Для построения модели в диссертации введены следующие определения, ключевым из которых стало пространство многокомпонентных гетерогенных структур.

Определение. Пространство многокомпонентных гетерогенных структур $\Omega(\mathbb{X}^n, m)$ (далее, пространство МГС) с заданным числом компонент $m \in \mathbb{N}$ (возможно составных) и заданным числом параметров (характеристик) $n \in \mathbb{N}$ каждой компоненты над полем \mathbb{X} есть прямое произведение:

$$\Omega(\mathbb{X}^n, m) = \underbrace{\mathbb{X}^n \times \dots \times \mathbb{X}^n}_{m \text{ раз}} = \mathbb{X}^{n \times m}. \quad (2) \quad \square$$

В качестве \mathbb{X} может выступать поле действительных \mathbb{R} или интервальных \mathbb{IR} чисел: $\Omega(\mathbb{R}^n, m)$, $\Omega(\mathbb{IR}^n, m)$ – пространства МГС с *определёнными* и *интервально заданными* значениями характеристик соответственно.

Определение. Элемент $\vartheta \in \Omega(\mathbb{X}^n, m)$ называется *одноуровневой (одномасштабной)* МГС. Здесь $\vartheta = (\omega^1, \dots, \omega^\alpha, \dots, \omega^m)$, где $\omega^\alpha \in \mathbb{X}^n$ – характеристики компонента α проектируемого КМ. \square

Обобщение понятия пространства МГС на многомасштабный случай базируется на понятиях: масштабный уровень s ; способ нумерования компонент вложенных МГС, входящих в состав компонент МГС верхних масштабных уровней; набор операторов гомогенизации, определяющих функциональную взаимосвязь компонент масштабных уровней s и $s - 1$.

Определение. Взаимно однозначную функцию \mathcal{K} называем *функцией идентификации компоненты многокомпонентной гетерогенной структуры* (Рис. 7):

$$\mathcal{K}: \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N} \times \mathbb{N} \times \mathbb{Z}_+, \quad \mathcal{K}(\alpha) \mapsto (\xi, \psi, s), \quad (3)$$

где α – глобальный номер компоненты МГС $\vartheta \in \Omega(\mathbb{X}^n, m)$ с характеристиками ω^α ; ξ – номер МГС, входящей в состав другой МГС; ψ – локальный номер компоненты МГС; s – номер масштабного уровня.

Функция \mathcal{K} определяет способ нумерования компонент в составе МГС, содержащей вложенные МГС. \square

Определение. Операторами *прямой* H и *обратной* H_β^{-1} гомогенизации параметров МГС называем следующие отображения:

$$\begin{aligned} H &: \mathbb{V} \times \Omega(\mathbb{X}^n, m) \rightarrow \Omega(\mathbb{X}^n, 1); \\ H_\beta^{-1} &: \mathbb{V} \times \Omega(\mathbb{X}^n, m - 1) \times \Omega(\mathbb{X}^n, 1) \rightarrow \Omega(\mathbb{X}^n, 1), \end{aligned}$$

где H_β^{-1} – оператор идентификации характеристик ω^β компонента КМ β , часто определяемый выражением (1). \square

Операторы прямой гомогенизации H позволяют «подняться» с более низкого масштабного уровня на более высокий, а операторы обратной гомогенизации H_β^{-1} – «опуститься» с более высокого на более низкий (Рис. 7).

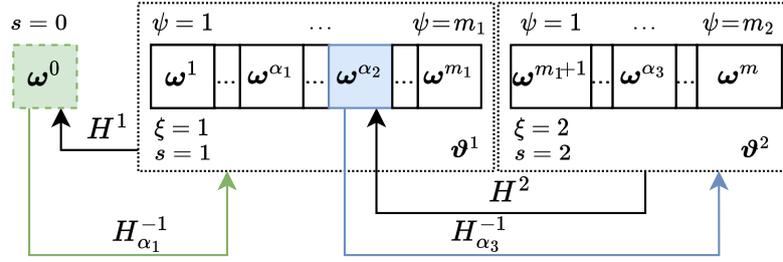


Рис. 7. Пример двухмасштабной МГС $\vartheta \in \Omega(\mathbb{X}^n, m)$ с функционально связанными параметрами компонент

Определение. Элемент $\omega^0 \in \Omega(\mathbb{X}^n, 1)$ называем *эффективными параметрами* или *характеристиками* МГС $\vartheta \in \Omega(\mathbb{X}^n, m)$, если существует оператор прямой гомогенизации H такой, что $H(V, \vartheta) = \omega^0$, $V \in \mathbb{V}$. \square

Определение. Подпространство $\check{\Omega}(\mathbb{X}^n, m) \subseteq \Omega(\mathbb{X}^n, m)$ называем *пространством многомасштабных МГС* (ММГС), если

$$\check{\Omega}(\mathbb{X}^n, m) = \{ \vartheta \in \Omega(\mathbb{X}^n, m) : \exists \omega^{\bar{\alpha}} \in \Omega(\mathbb{X}^n, 1), \exists \vartheta^\xi \subseteq \vartheta, \vartheta^\xi \in \Omega(\mathbb{X}^n, m_\xi) \Rightarrow \\ \Rightarrow H^\xi(V^\xi, \vartheta^\xi) = \omega^{\bar{\alpha}}, V^\xi \in \mathbb{V}, \xi \in [1..M], M \leq m, \sum_{i=1}^M m_\xi = m, \bar{\alpha} \in [0..m] \},$$

где M – число вложенных МГС ϑ^ξ в ϑ ; $\vartheta^\xi = (\vartheta^{\xi,1}, \dots, \vartheta^{\xi,\psi}, \dots, \vartheta^{\xi,m_\xi})$, $\vartheta^{\xi,\psi}$ – обозначение характеристик компоненты ψ МГС ϑ^ξ ; $\vartheta^\xi \subseteq \vartheta \Leftrightarrow \vartheta^{\xi,\psi} = \omega^{\text{pr}_2(\mathcal{L}(\alpha))}$, $\psi \in [1..m_\xi]$; H^ξ – операторы прямой гомогенизации МГС ϑ^ξ ; V^ξ – представительный элемент объёма МГС ϑ^ξ ; $\omega^{\bar{\alpha}} = \text{pr}_{\bar{\alpha}}(\vartheta) \Leftrightarrow \bar{\alpha} \in [1..m]$, $\xi = \text{pr}_1(\mathcal{K}(\bar{\alpha}))$ или $\omega^{\bar{\alpha}} = \omega^0$, где $\text{pr}_i(r)$ – операция проекции объекта r на i -ю координату. \square

Элемент $\vartheta \in \check{\Omega}(\mathbb{X}^n, m)$ есть *многомасштабная МГС* (ММГС), являющаяся математической моделью характеристик проектируемого КМ, обладающего многоуровневой иерархической микроструктурой. Пространство $\check{\Omega}(\mathbb{X}^n, m)$ построено так, что для каждого его элемента ϑ , может быть определён набор операторов гомогенизации $\{H^\xi\}$, функционально связывающих каждую группу компонент ξ либо с эффективными характеристиками $\omega^0 \in \Omega(\mathbb{X}^n, 1)$ этой ММГС ϑ , либо с конкретными компонентами ω^α , входящими в состав ϑ (Рис. 7).

Учитывая определение пространства многомасштабных МГС, оператор прямой многомасштабной гомогенизации \check{H} задаёт отображение: $\check{H} : \mathbb{V}^M \times \check{\Omega}(\mathbb{X}^n, m) \rightarrow \Omega(\mathbb{X}^n, 1)$ и позволяет вычислить эффективные характеристики ω^0 путём обхода древовидного представления ММГС $\vartheta \in \check{\Omega}(\mathbb{X}^n, m)$ «снизу-вверх» с рекурсивным вызовом операторов H^ξ (Рис. 8).

Если характеристики ω^β компоненты β ММГС ϑ известны частично и известны ω^0 , то следует: а) вычислить $\xi = \text{pr}_1(\mathcal{K}(\beta))$; б) определить оператор многомасштабной гомогенизации \check{H}^ξ , «действующий вдоль ветви древовидного представления» ММГС ϑ и являющийся суперпозицией операторов одномасштабной гомогенизации H^ξ , применяемых к вложенным МГС ϑ^ξ последовательно, начиная с $\bar{\xi} = \xi$ и до масштабного уровня $s = 0$ (Рис. 8); в) определить оператор обратной многомасштабной гомогениза-

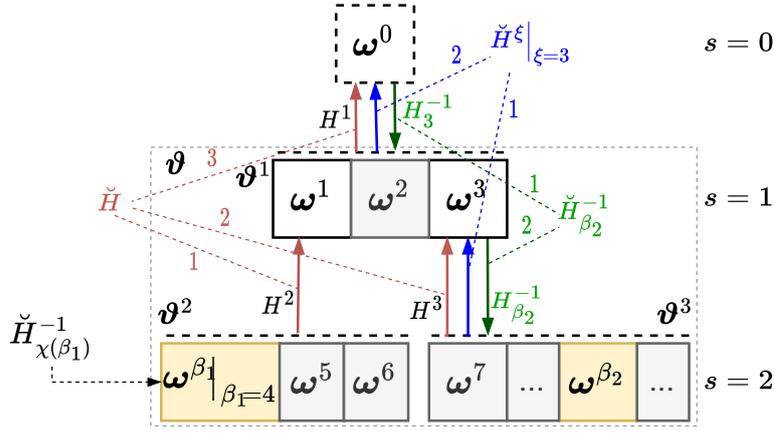


Рис. 8. Многомасштабные операторы прямой \check{H} , \check{H}^ξ и обратной \check{H}_β^{-1} гомогенизации. Характеристики ω^{β_1} , ω^{β_2} известны частично \check{H}_β^{-1} , идентифицирующий ω^β .

Теоретические основы метода реверсивной многомасштабной гомогенизации. Рассмотрим ММГС $\vartheta \in \Omega(\mathbb{X}^n, m)$. Оператор гомогенизации H может быть применён только при условии, что $\forall \alpha \in [1..m]$ известны все ω^α , что обычно не соблюдается для прикладных задач. В диссертационном исследовании в качестве метода гомогенизации используется метод асимптотического осреднения, реализующий оператор H . Оператор многомасштабной гомогенизации \check{H} может быть применён только тогда, когда для $\forall \omega^\alpha$ верно, что либо компонента ω^α гомогенная и ее параметры известны, либо ω^α гетерогенная и $\exists \vartheta^\xi \subseteq \vartheta$ такая, что $\omega^\alpha = H(V^\xi, \vartheta^\xi)$.

Пусть $\forall \chi \in [1..R]$ характеристики ω^χ компоненты χ ММГС $\vartheta \in \Omega(\mathbb{X}^n, m)$ включают хотя бы один неизвестный параметр (например, заданный его интервальной оценкой), где R – число таких компонент Рис. 8. Пусть $\forall \chi \in [1..R] \Rightarrow \exists \vartheta^\chi \in \Omega(\mathbb{R}^n, m_\chi)$ – вспомогательная ММГС, $\vartheta^\chi = (\omega^{\chi,1}, \dots, \omega^{\chi,m_\chi})$ и $\exists \gamma \in [1..m_\chi]$ такая, что $\omega^{\chi,\gamma} = \omega^\chi$ (т.е. в состав ϑ^χ входит компонента с характеристиками ω^χ , но под другим номером). Пусть $\omega^{\chi,0}$ – известные эффективные характеристики ϑ^χ . Оператор реверсивной многомасштабной гомогенизации \hat{H} параметров ММГС ϑ есть отображение

$$\hat{H}: \mathbb{V}^M \times \underbrace{\check{\Omega}(\mathbb{X}^n, m)}_{(a)} \times \prod_{\chi=1}^R \left\{ \mathbb{V}^{M_\chi} \times \underbrace{\check{\Omega}(\mathbb{X}^n, m_\chi)}_{(б)} \times \underbrace{\Omega(\mathbb{R}^n, 1)}_{(в)} \right\} \rightarrow \underbrace{\Omega(\mathbb{R}^n, 1)}_{(г)}, \quad (4)$$

где M_χ – число вложенных МГС в ϑ^χ ; (а) – пространство, в котором частично определены характеристики проектируемого КМ, описываемые ММГС ϑ ; (б) – пространства, в которых определены характеристики вспомогательных КМ, описываемые ММГС ϑ^χ и для $\forall \chi \in [1..R] \Rightarrow \exists! \omega^{\chi,\gamma} \in \mathbb{I}\mathbb{R}$, т.е. частично определены характеристики одной компоненты ϑ^χ ; (в) – пространство, в котором определены эффективные характеристики вспомогательных ММГС ϑ^χ ; (г) – пространство, в котором осуществляется поиск эффективных характеристик ω^0 проектируемого КМ с частично определёнными характеристиками компонентов.

Реализация оператора \hat{H} базируется на использовании графоориентированного подхода (глава 4).

Глава 4 посвящена созданным теоретическим основам разработки САПР КМ. Материал главы включает: 1) теоретические основы и особенности реализации графоориентированного подхода, предназначенного для реализации СВМ, включая описание языка определения графовых моделей aDOT; 2) описание языка определения входных данных aINI и принципы генерации графических пользовательских интерфейсов; 3) теоретические основы автоматизированной поддержки процесса разработки САПР КМ.

Теоретические основы и особенности реализации графоориентированного подхода. В связи с очевидной сложностью реализации и ресурсоёмкостью операторы прямой гомогенизации H , \hat{H} , \hat{H}^ξ , а также их обратные варианты, например, H_β^{-1} и \hat{H} , можно отнести к СВМ, т.е. методам, включающим множество взаимосвязанных друг с другом вычислительных методов.

Выделены особые условия, отличающие разработку программной реализации СВМ от программной реализации вычислительного алгоритма решения конкретной узкоспециализированной задачи: 1) существенный объём работ по написанию исходных кодов, ограничивающий возможности создания качественной реализации одним исследователем; 2) существенный объём входных данных (скалярных и/или векторных), задаваемых точно и/или неточно, сильно зависящих от модифицируемой со временем постановки задачи; 3) существенное число особых условий функционирования и согласованности выбранных численных методов между собой; 4) требование масштабируемости реализации; 5) требование возможности запуска на различных платформах; 6) необходимость обеспечения универсальности форматов представления постановок задач и отправки их на расчёт; 7) требование возможности гибкого сопровождения.

В основе предложенного в диссертации графоориентированного подхода к реализации СВМ лежат понятия теории графов, теории категорий, а также методы потоко-ориентированного и реактивного программирования (Carksi M., 2014). Основной целью создания подхода является обеспечение разработчика набором инструментов, обеспечивающих организацию кода при реализации методов решения ключевых задач АП КМ и позволяющих уменьшить трудозатраты на последующее сопровождение.

Графоориентированный подход базируется на трёх уровнях абстракции: *категориальный* (описание преобразований данных алгоритма в алгебраических терминах теории категорий); *графовый* (описание алгоритма в виде ориентированного графа); *интерфейсный* (описание программных инструментов для построения реализации алгоритма на основе его графовой модели).

Алгебраическим фундаментом графоориентированного подхода является категория состояний \mathcal{C} СВМ с копроизведением. Для построения этой категории необходимо (Awodey, S., 2010): 1) определить объекты, морфизмы и копроизведение; 2) определить ассоциативную композицию морфизмов; 3) задать тождественный морфизм. Объектами категории \mathcal{C} являются состояния СВМ, принадлежащие пространству состояний СВМ \mathcal{S} , которое

строится на основе множества элементарных состояний СВМ.

Определение. Множеством элементарных состояний СВМ называем множество $\mathbb{W} = \text{Ind}(\text{string}) \times \bigcup_{i=0}^{N_T} \{\text{Ind}(T_i)\}$, где T_i – i -ый произвольный тип данных заданного языка программирования; string – тип строк; N_T – число типов (неограничено для языков с пользовательскими типами); $\text{Ind}(X) = \{x : x \in X\}$. \square

Пример элементов множества элементарных состояний СВМ: $\mathbb{W} = \{('A', \text{int}); ('C', \text{double}); ('AB', \text{bool}); \dots\}$, где $\forall a \in \mathbb{W} : \text{pr}_1(a) \in \text{Ind}(\text{string})$.

Определение. Пространство состояний СВМ есть множество подмножеств $\mathbb{S} = \{S : S \subset \mathbb{W}; \forall s_1, s_2 \in S : s_1 \neq s_2 \Rightarrow \text{pr}_1(s_1) \neq \text{pr}_1(s_2)\}$, так что элементы каждого подмножества S (состояния СВМ) имеют уникальные имена в его рамках. \square

В теории категорий состояния СВМ являются объектами, поэтому если $S \in \mathbb{S} \Rightarrow S \in \mathcal{C}$, а преобразования между состояниями СВМ описываются морфизмами специального вида.

Определение. Пусть $S \in \mathcal{C}$ – состояние СВМ. Множество D такое, что $\forall s \in S \Rightarrow \exists d \in D : d = (n, v), n = \text{pr}_1(s), v \in \text{pr}_2(s)$, называем *данными СВМ, находящимися в состоянии S* , и обозначаем $D \bullet \circ S$. \square

Определение. Множество $\mathbb{D} = \{d = (n, v) | \exists S \in \mathbb{S} : n = \text{pr}_1(s), v \in \text{pr}_2(s), s \in S\}$ называем *данными СВМ*. \square

Данные СВМ \mathbb{D} реализуют в форме ассоциативных массивов (словарей) со строковым ключом и произвольным типом хранимых данных.

Определение. Пусть $S_{\text{in}}, S_{\text{out}} \in \mathcal{C}$. Тогда морфизмом f из S_{in} в S_{out} или функцией-обработчиком называем отображение вида

$$f : \text{pr}_2(s_1) \times \text{pr}_2(s_2) \times \dots \times \text{pr}_2(s_n) \longrightarrow \text{pr}_2(\tilde{s}_1) \times \text{pr}_2(\tilde{s}_2) \times \dots \times \text{pr}_2(\tilde{s}_m), \quad (5)$$

где $s_1, s_2, \dots, s_n \in S_{\text{in}}; \tilde{s}_1, \tilde{s}_2, \dots, \tilde{s}_m \in S_{\text{out}}; n = |S_{\text{in}}|; m = |S_{\text{out}}|$. Объект S_{in} называем входным состоянием СВМ f , а объект S_{out} – выходным состоянием f . Преобразование $D_{\text{in}} \bullet \circ S_{\text{in}}$ в $D_{\text{out}} \bullet \circ S_{\text{out}}$ с помощью функции-обработчика f обозначаем $D_{\text{out}} = f(D_{\text{in}})$ или $f : S_{\text{in}} \rightsquigarrow S_{\text{out}}$. \square

Для определённости процедур разделения и объединения нескольких параллельных композиций морфизмов из общего начального состояния СВМ и в общее конечное состояние СВМ соответственно введены понятия разделения и копроизведения состояний СВМ.

Определение. Разбиением состояния СВМ $S \in \mathcal{C}$ называем такое множество $\{S_i\}_{i=1}^n$, что $S_i = \{(pr_1(s), D) : s \in S_i, D \subset pr_2(s)\}$ и при этом $\forall s \in S \exists s_1 \in S_1, \dots, s_n \in S_n : pr_1(s_1) = \dots = pr_1(s_n) \Rightarrow \bigcup_{i=1}^n pr_2(s_i) = pr_2(s)$, $pr_2(s_i) \cap pr_2(s_j) = \emptyset$, где $i \neq j$. Далее используем краткое обозначение: $S \rightrightarrows \{S_i\}_{i=1}^n$. \square

Определение. Копроизведением состояний $S_1, S_2 \in \mathcal{C}$, для которых $\{pr_1(s) | s \in S_1\} \cap \{pr_1(s) | s \in S_2\} = \emptyset$ называем состояние $S = S_1 \cup S_2$. \square

Копроизведение определено только для тех состояний, имена параметров элементов которых не пересекаются.

Построенная категория состояний \mathcal{C} с копроизведением позволяет описать произвольный алгоритм (Рис. 9), состоящий из последовательных участков преобразования (переходов из начальных состояний в конечные через композицию морфизмов) и параллельных участков преобразования, конечные состояния которых образуются через копроизведение конеч-

ных состояний соответствующих последовательных участков преобразования [14].

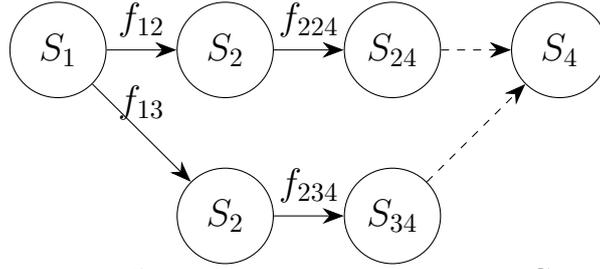


Рис. 9. Диаграмма преобразований состояния S_1 , состоящая из двух параллельных участков (из S_1 в S_{24} и из S_1 в S_{34}), которые объединяются в состояние S_4 путем копроизведения конечных состояний на каждом из участков, т.е. $S_4 = S_{24} \cup S_{34}$

В программной реализации алгоритма СВМ могут формироваться некорректные данные, что требует создания механизма обработки исключительных ситуаций.

Определение. Пусть $S_{in} \in \mathcal{C}$ – входное состояние СВМ функции-обработчика f , $\mathbb{D} = \{D: D \bullet \circ S_{in}\}$ – семейство всех возможных данных СВМ в состоянии S_{in} , а также существует разбиение $S_{in} \rightrightarrows \{S_{true}, S_{false}\}$. *Функцией-предикатом* называем такое отображение $p: \mathbb{D} \rightarrow \{0, 1\}$, что $p^{-1}(1) = D_{true} \bullet \circ S_{true}$ и $p^{-1}(0) = D_{false} \bullet \circ S_{false}$, где $D_{true} \in \mathbb{D}_{true}$, $D_{false} \in \mathbb{D}_{false}$, $\mathbb{D}_{true} \cup \mathbb{D}_{false} = \mathbb{D}$. \square

Функция-предикат p определяется для каждой функции-обработчика f , задаёт разбиение входного состояния $S_{in} \rightrightarrows \{S_{true}, S_{false}\}$ и определяет возможность выполнения f .

Определение. Объединённую функцию F называем *функцией перехода* и обозначаем $F = \langle p, f \rangle$. \square

В случае реализации на языке C/C++, исполнение F осуществляется в соответствии с тернарным оператором: $\langle p, f \rangle(D_{in}) = p(D_{in}) ? f(D_{in}) : D_{in}$. С точки зрения категории \mathcal{C} функция перехода F несет ту же семантику морфизма состояний СВМ, что и функция-обработчик f , в то время как с алгоритмической точки зрения, в том числе, организует обработку исключительных ситуаций.

Определение. Пусть $S \in \mathcal{C}$ – некоторое состояние СВМ, $\mathbb{D}_S = \{D: D \bullet \circ S, S \in \mathcal{C}\}$ – семейство всех возможных данных СВМ, находящихся в состоянии S и $S \rightrightarrows \{S_j\}_{j=1}^m$ – семейство состояний, являющихся разбиением состояния S . *Функцией-селектором* называем такое отображение $h: \mathbb{D} \rightarrow \mathbb{B}^m$, где $\mathbb{B} = \{\text{true}, \text{false}\}$ и $\forall D \in \mathbb{D}_S \Rightarrow \exists! \mathbf{b} \in \mathbb{B}^m: h^{-1}(\mathbf{b}) = D_j \bullet \circ S_j$ (Рис. 10). \square

Алгоритмическую структуру переходов между состояниями СВМ удобно представлять в виде ориентированного графа, в частности с помощью графа потока управления (Allen, F.E., 1970). Понятие графовая модель СВМ является расширением понятия граф потока управления.

Учитывая ранее введённые определения, *графовой моделью СВМ* называем объект $G = (g, \{S_i: S_i \in \mathcal{C}\}, \{F_j\}, \{h_k\})$, где g – ориентированный граф, $\{S_i: S_i \in \mathcal{C}\}$ – множество состояний СВМ, $\{F_j\}$ – множество функций перехода, $\{h_k\}$ – множество функций-селекторов. Каждому узлу графа

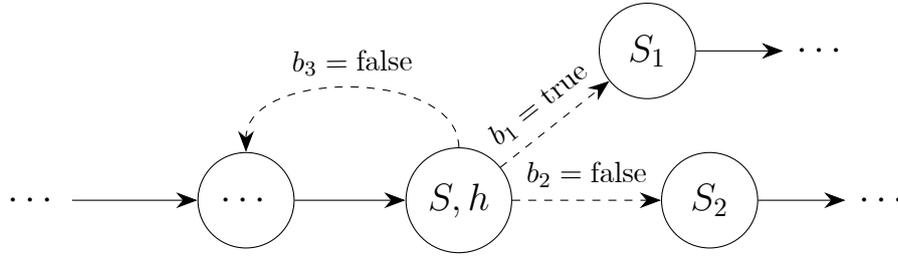


Рис. 10. Пример организации ветвления с помощью функции-селектора h из состояния S , где $\forall D \bullet \circ S \Rightarrow \{S_j\}_{j=1}^3$ и $h(D) = \mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3)^T = (\text{true}, \text{false}, \text{false})^T$. Переход по ветвям, для которых $b_i = \text{false}$, запрещён

g ставится в соответствие состояние S_i , с некоторыми узлами сопоставляются функции-селекторы h_k , каждому ребру графа g ставится в соответствие функция-перехода F_j .

Для создания графовых моделей и их последующей обработки были разработаны программные инструменты, объединённые в графоориентированный программный каркас. Реализация осуществлена на языках C++ (библиотека `comsdk`) и Python (библиотека `pycomsdk`). Для определения графовых моделей разработан язык aDOT (Лист. 1, Рис. 11). Программный каркас также содержит в себе функции для запуска процедур обхода графовой модели с учётом условных ветвлений и параллельных веток.

Листинг 1. Определение графовой модели некоторого СВМ на языке aDOT

```

1 P [type=predicate, binname=lib_preds,
   entry_func=pass_predicate]
2 F01 [type=edge, predicate=P, binname=lib_procs,
   entry_func=f01]
3 ...
4 H [type=selector, binname=lib_preds, entry_func=sel_func]
5 S2 [type=node, selector =H]
6 __BEGIN__ ->S1
7 S0 ->S1 [edge=F01]
8 S1 ->S2 [edge=F12]
9 S2 ->S1 [edge=F21]
10 S2 ->S3 [edge=F23]
11 S3 ->__END__ }

```

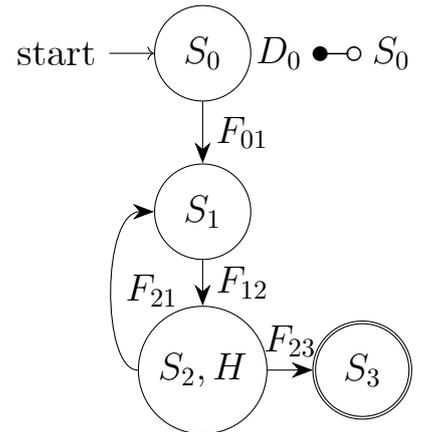


Рис. 11. Графовая модель, определённая в листинге 1

Язык определения входных данных. Для возможности обхода графовой модели СВМ данные СВМ в начальном состоянии S_0 должны быть предварительно загружены в оперативную память из файла входных данных. Для формализации процесса текстового представления данных СВМ $D_0 \bullet \circ S_0$ введены понятия *формат данных СВМ* и *данные СВМ, индуцированные состоянием S и определяемые на языке L* . В качестве L предложен и разработан язык aINI. Язык aINI использовался как инструмент для определения входных данных для различных актуальных задач в области АП КМ. На этом же языке определялись форматы данных СВМ, которые применялись как входные данные для подсистемы автоматической генерации графических пользовательских интерфейсов разработанного прототипа

САПР КМ [10].

Теоретические основы автоматизированной поддержки процесса разработки САПР КМ. Важной составляющей процесса разработки САПР КМ стало создание и применение программных средств поддержки процесса разработки (CASE-инструментариев). В состав указанных программных средств вошли: средства генерации кода на основе шаблонов, средства генерации графических пользовательских интерфейсов на основе файлов входных данных. В основу указанных программных средств легла формализация понятий шаблон генератора кода, параметр шаблона, а также определение стандартных типов параметров шаблонов. Представлена постановка задачи построения семейства данных СВМ в фиксированном состоянии данных.

Применение разработанных программных средств позволило повысить эффективность и качество процесса разработки, уменьшить количество ошибок при создании новых подсистем и программных модулей, автоматизировать процессы разработки документации.

Глава 5 посвящена разработанному прототипу САПР КМ. В главе представлены: 1) концепции, назначение и требования к системе, архитектурные особенности и описание платформы разработки; 2) вычислительная подсистема, принципы организации распределённых вычислений с применением графоориентированного подхода; 3) принципы применения графоориентированного подхода для разработки средств взаимодействия пользователь-система; 4) описание программной реализации методологии АП КМ; 5) особенности программной реализации метода реверсивной многомасштабной гомогенизации.

Концепция и архитектура прототипа САПР КМ. Разработка системы была основана на применении компонентно-ориентированной многозвенной клиент-серверной архитектуры.

Введены классификации и соглашение об именовании компонентов системы, понятия *функциональный компонент*, *класс задач*, *решатель*, *вычислительная подсистема*, а также представлена связь с введённым ранее понятием *сложный вычислительный метод* (Рис. 12).

Важную роль в системе играет трёхуровневая иерархическая классификация «комплекс-решение-проект», которая обеспечивает возможность связать конкретный компонент системы с той или иной её частью (Рис. 12). Каждый компонент системы разрабатывается для решения определённой задачи, а каждую из решаемых задач следует относить к заранее заданному классу решаемых задач, которому в рамках разрабатываемой САПР КМ соответствует *класс* или *тип компонентов по предметному назначению*.

В процессе создания прототипа САПР КМ использовались: 1) ПО поддержки процесса разработки (глава 4); 2) структуры данных для хранения системных объектов, их связей, пользователей, функций системы, подсистем и прочей системной информации; 3) форматы поддерживаемых данных и методов их обработки; 4) классификация функций по уровням системы; 5) графоориентированный подход при разработке решателей, вошедших в состав вычислительной подсистемы, и пр.

В состав разработанного прототипа САПР КМ (Рис. 13) вошла вычислительная подсистема, а также ряд прикладных библиотек, включаю-

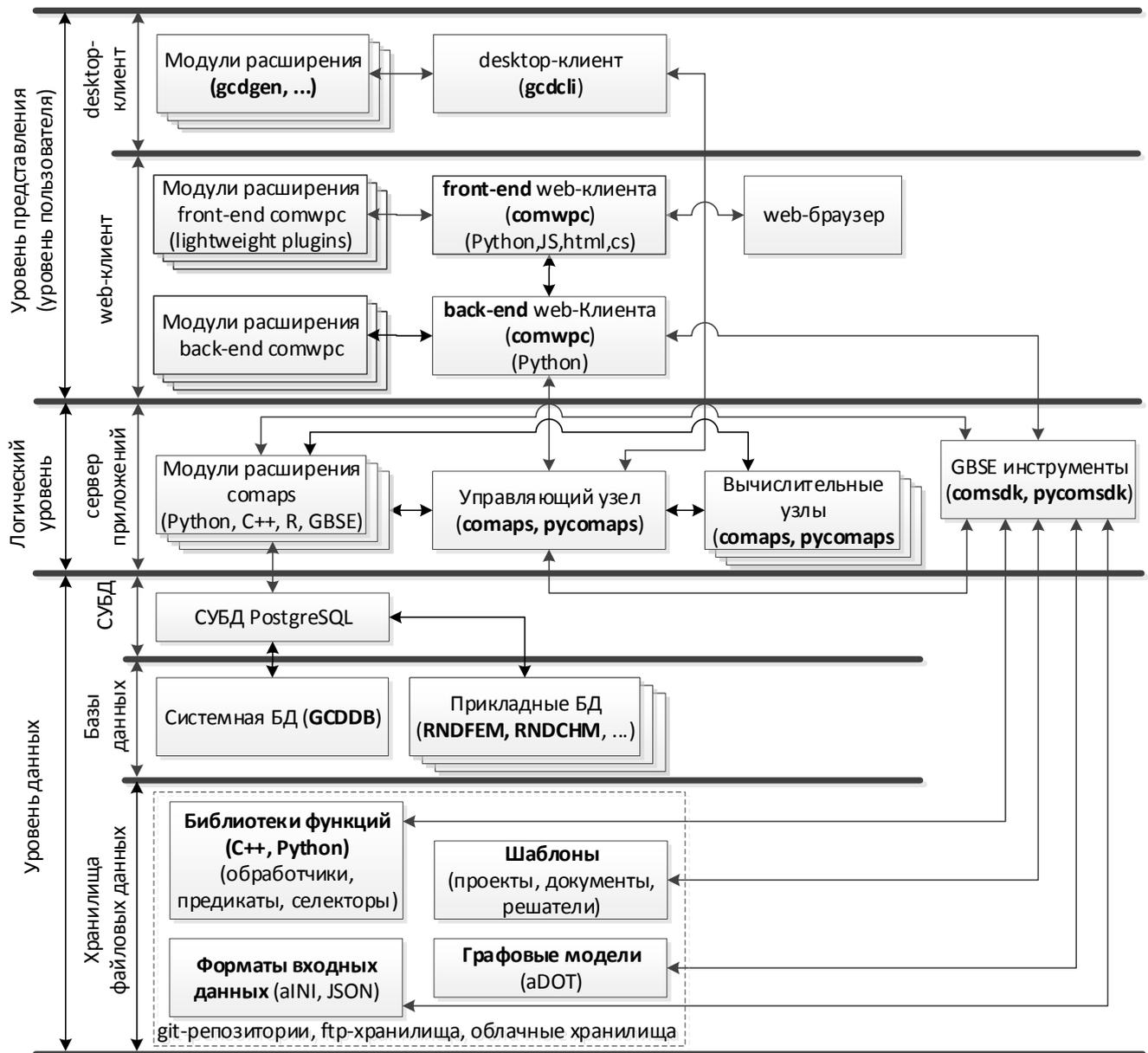


Рис. 13. Архитектура прототипа САПР КМ

не только автоматическое преобразование данных из одного состояния в другое, но также и обеспечивать запрос дополнительных данных от лица, принимающего решение, в процессе автоматического обхода соответствующей графовой модели.

На Рис. 14 представлена графовая модель верхнего уровня абстракции, реализующая методологию АП КМ в рамках разработанного прототипа САПР КМ. Пользователь формирует исходное описание проектируемого КМ в форме его ММГС [13]. Обозначения Рис. 14: F_{011} , F_{012} , F_{013} , F_{015} – определение ПЭО, требований к ФМХ КМ, к диапазонам ФМХ компонентов КМ, фиксация критериев оптимальности и т.д.; F_{10} – возврат; F_{12} – генерация графовой модели G_d в формате aDOT (plan.adot); S_2 – состояние с вложенной графовой моделью G_d , при переходе в которое осуществляется обхода G_d ; F_{22} – подготовка новых входных данных для графовой модели G_d ; F_{20} – анализ завершён и требуется продолжение; F_{25} – продолжение расчёта невозможно; F_{23} – постобработка результата; F_{34} – анализ результатов (фильтрация решений удовлетворяющих критериям); F_{45} – проверка

критериев оптимальности ЛПР; F_{50} – требуется корректировка критериев оптимальности (решения не найдены); F_{56} – сохранение результатов; F_{06} – продолжение проектирования невозможно.

Программная реализация метода реверсивной многомасштабной гомогенизации также была основана на применении графоориентированного подхода. Учитывая (1) и (4), графовая модель оператора \hat{H} (Рис. 15) зависит от графовых моделей операторов \hat{H} и H_{χ}^{-1} .

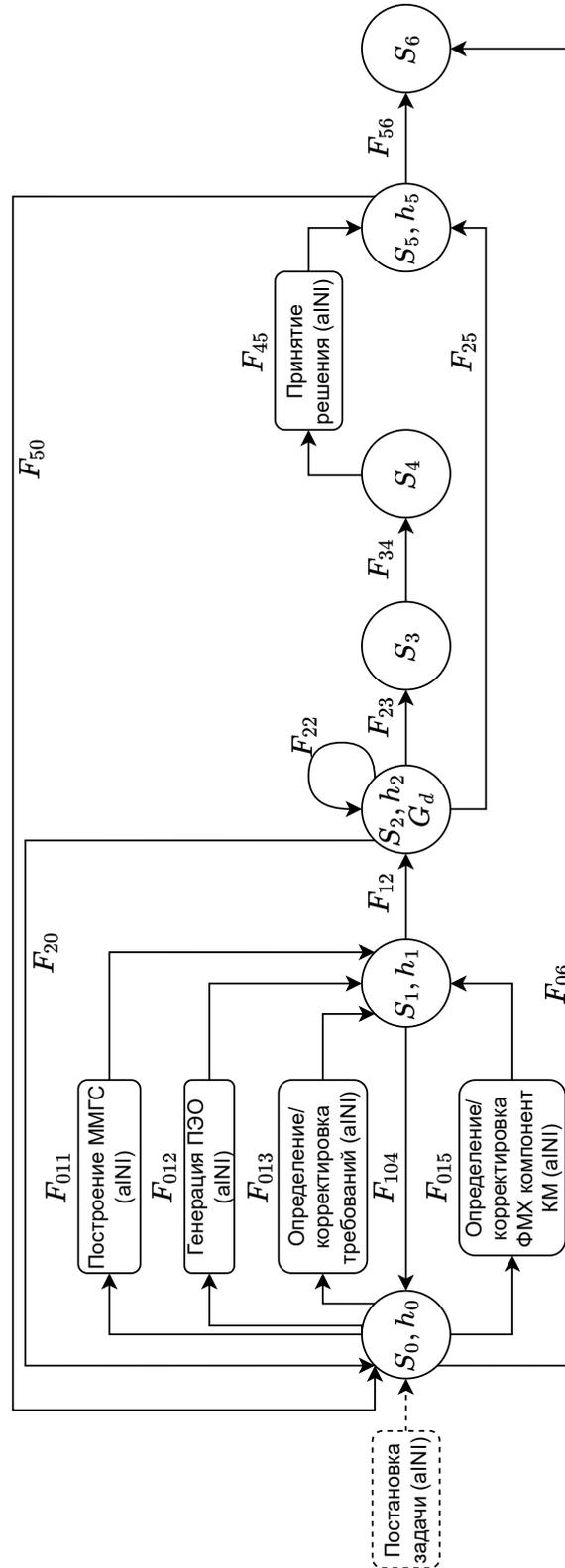
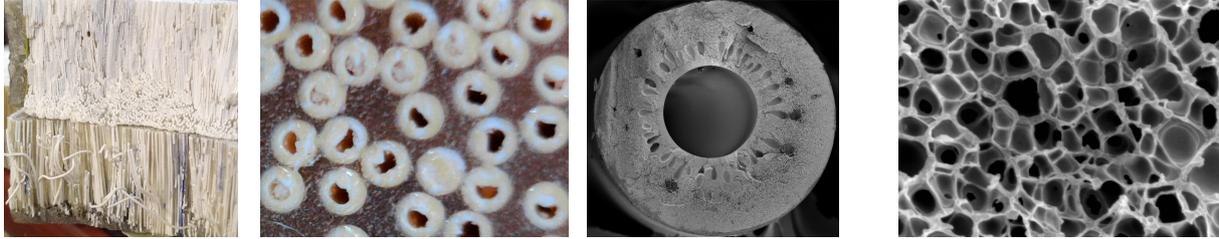


Рис. 14. Графовая модель, описывающая методологию АП КМ на верхнем уровне абстракции: прямоугольниками выделены проектные процедуры, которые требуют участия лица, принимающего решение

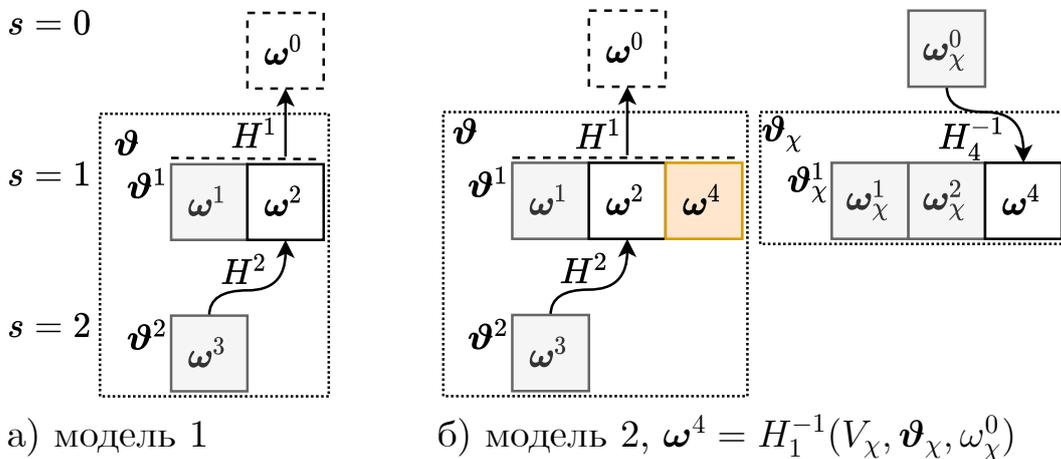
ходного газа попадает в ретентатный канал (4) под давлением P_2 . Область исходного газа (3) отделена от пермеатной области (5) заделкой (1), которая, фактически, при изготовлении становится 1D-армированным КМ на основе полимерного связующего, наполненного в одном направлении ПМВ (Рис. 17). Эксплуатация рассматриваемой конструкции осуществляется при повышенных температурах ($T \approx 60^\circ C$) и при этом заделка (1) испытывает существенный перепад давлений ($P_1 \gg P_3$), который может составлять до 100 атмосфер.



а) скел ($s = 0$) б) торцевой срез б) сечение ПМВ в) материал стенки ПМВ (SEM, $s = 2$)
($s = 0$) (SEM, $s = 1$)

Рис. 17. Фотографии полимерного КМ на основе ПМВ и эпоксидного связующего: SEM – scanning electron microscopy, s – масштабный уровень

На Рис. 18 представлены ММГС, описывающие микроструктуру заделки (1), где используются следующие обозначения характеристик компонентов исследуемого полимерного КМ: ω^1 – эпоксидное связующее; ω^2 – пористый материал стенки ПМВ; ω^3 – характеристики основного материала ПМВ, ω^4 – характеристики интерфейса, идентифицируемые на основе экспериментальных данных (применялась модель неидеального контакта [38]).



а) модель 1

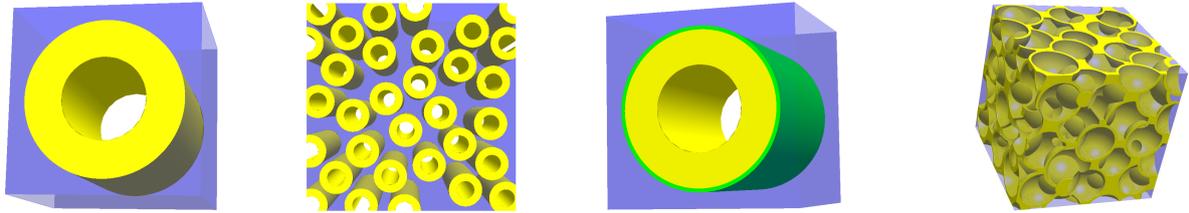
б) модель 2, $\omega^4 = H_1^{-1}(V_\chi, \vartheta_\chi, \omega_\chi^0)$

Рис. 18. Модели ММГС исследуемых полимерных КМ: без (а) и с (б) учётом адгезионного взаимодействия отдельных компонентов

Построенные геометрические модели представительных элементов объёма исследуемого полимерного КМ представлены на Рис. 19.

В результате проведённых численных и экспериментальных исследований получены кривые деформирования (Рис. 20), на основе обработки которых были определены искомые упруго-прочностные характеристики исследуемых полимерных КМ, в т.ч. с учётом неидеального контакта компонентов.

Эксперименты и расчёты проводились над образцами и моделями



а) модель ϑ^1 без адгезионного слоя (Рис. 20, расч. 25); б) модель ϑ^1 без адгезионного слоя; в) модель ϑ^1 с адгезионным слоем пористого материала стенок ПМВ; г) модель ϑ^2

Рис. 19. Модели представительных элементов объёма полимерного КМ

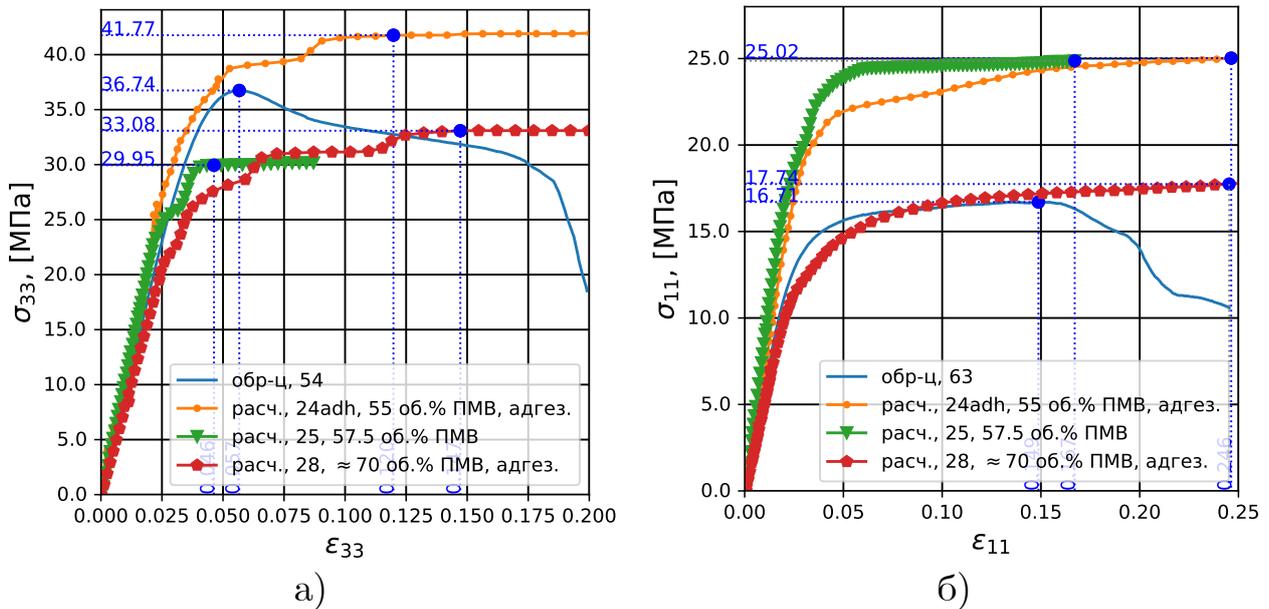


Рис. 20. Диаграммы деформирования при сжатии (а) вдоль и (б) поперёк направления укладки ПМВ

представительных элементов объёма, соответственно, с различными объёмными концентрациями ПМВ. Адгезионный слой описывался с помощью модели неидеального контакта [12], а его свойства ω^4 идентифицировались на основе результатов экспериментальных данных.

Численный анализ упруго-прочностных характеристик керамоматричных КМ (Рис. 21,а). Для проведения расчёта была построена ММГС (Рис. 21,б), где ω^1 – характеристики бескислородной керамической матрицы карбида кремния; ω^2 – характеристики межкристаллического (межзёренного) материала, модифицированного углеродными нанотрубками; ω^3 – характеристики наномодификатора УНТ; ω^4 – характеристики дополнительного «поверхностного» компонента (адгезионный слой между моделью одной нанотрубкой и керамической матрицей).

Осуществлялась предварительная идентификация характеристик адгезионного слоя ω^4 между моделью одной нанотрубки и керамической матрицей на основе доступных результатов экспериментальных исследований при фиксированной концентрации углеродных нанотрубок. Далее проводились расчёты упруго-прочностных характеристик наномодифицированного КМ при варьировании объёмной концентрации нанотрубок.

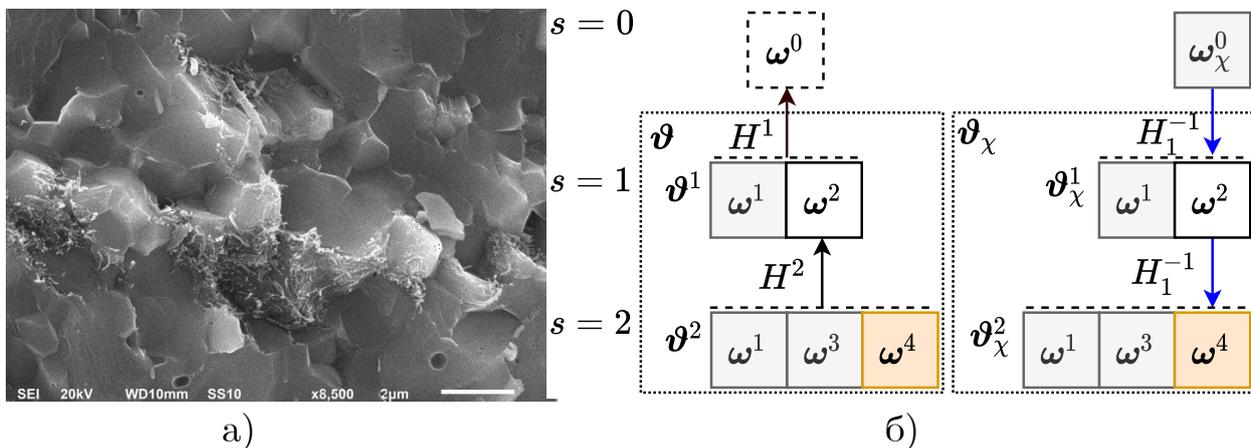


Рис. 21. Представлено: а) SEM фотография керамоматричного КМ на основе Al_2O_3 , наполненного 20 об. % углеродными нанотрубками, увеличение $\times 8500$ (предоставлено РХТУ им. Д.И. Менделеева); б) двухуровневая ММГС исследуемого КМ

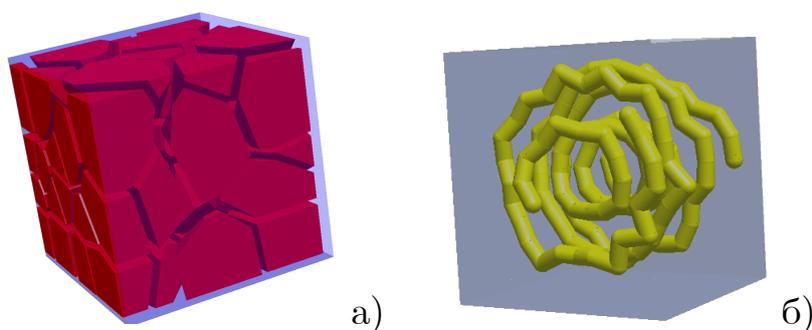


Рис. 22. Модели представительных элементов объёма а) ϑ^1 керамического материала и б) ϑ^2 межзёренного материала, модифицированного нанотрубками

Представленные и прочие исследования были выполнены в рамках следующих проведённых научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ (полный список представлен в тексте диссертации).

1) НИР «Разработка математических моделей, численных методов и программного обеспечения для проектирования многоуровневых наноструктурированных материалов с уникальными широкополосными упруго-диссипативными свойствами», грант Президента РФ, МК-4223.2010.8, 2010-2011, заказчик Минобрнауки РФ, руководитель Соколов А.П.

2) НИР «Разработка математических моделей и программного обеспечения для многомасштабного конечно-элементного моделирования упруго-прочностных свойств композиционных материалов и наноструктурированных материалов», госзадание, шифр 1.6260.2011, 2012-2014, заказчик Минобрнауки РФ, руководитель Соколов А.П.

3) НИР «Разработка распределенной программной технологии построения высокопроизводительных вычислительных систем многомасштабного конечно-элементного анализа эффективных характеристик композитных материалов», грант Президента РФ, МК-6421.2012.9, 2012-2013, заказчик Минобрнауки РФ.

4) НИР «Разработка математических моделей, численных методов и программного обеспечения для решения обратных задач многомасштабного

анализа упруго-прочностных характеристик композиционных материалов и композитных конструкций», грант Президента РФ, МК-765.2012.8, 2012-2013, заказчик Минобрнауки РФ, руководитель Соколов А.П.

5) НИР «Проектирование и разработка распределённой программной подсистемы сетевого взаимодействия и диспетчеризации ресурсоемких процессов решения задач анализа эффективных характеристик композиционных материалов», грант ФЦПК, 14.В37.21.1869, 2012-2013, заказчик Минобрнауки РФ, руководитель Соколов А.П.

6) НИР «Разработка методов проектирования и производства конструкций из углерод-керамических композиционных материалов с заранее прогнозируемыми свойствами на основе многомасштабного математического моделирования», грант Президента РФ, МК-6573.2013.3, 2013-2014, заказчик Минобрнауки РФ.

7) НИР «Разработка программной реализации численного алгоритма, реализующего математическую модель прочностных свойств тканевых ПКМ, включающую учёт влияния процесса отверждения связующего при изготовлении», грант Президента РФ, МК-4811.2014.8, 2014-2015, заказчик Минобрнауки РФ.

8) ОКР «Численное моделирование напряженно-деформированного состояния газоразделительных мембранных модулей и разработка программного обеспечения сопровождения процесса их проектирования», хоздоговор, 2015, руководитель Соколов А.П.

9) ПНИ «Разработка методов и алгоритмов, обеспечивающих количественную оценку метапредметных и метакогнитивных навыков и умений на основе применения методов искусственного интеллекта при анализе данных о поведении обучаемых», грант ФЦПИР, ПНИ 14.577.21.0135, 2014-2016, заказчик Минобрнауки РФ.

10) НИР «Численный анализ термо-упруго-прочностных характеристик композитных заделок и оптимизация геометрических параметров конструкции газоразделительных мембранных модулей», хоздоговор, 2017-2018, руководитель Соколов А.П.

11) ПНИ «Разработка технологии получения новых функциональных керамоматричных композиционных материалов, с улучшенными электрофизическими и термомеханическими свойствами для оборонной, электронной и авиакосмической промышленности», госконтракт ФЦПИР, ПНИ 14.574.21.0158, 2017-2020, заказчик Минобрнауки РФ, исполнитель РХТУ им. Д.И. Менделеева.

ОБЩИЕ ВЫВОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Основные результаты диссертационного исследования заключаются в следующем.

1) Разработана методология автоматизированного проектирования КМ с заранее заданными характеристиками. В основе методологии лежит применение проектных процедур для автоматизированного формирования плана вычислений характеристик проектируемого КМ, используя его заранее определённую ММГС. План представляется в виде графовой модели, обход которой определяет последовательность выполнения проектных процедур АП КМ с заданными характеристиками.

2) Создан математический аппарат определения характеристик КМ различной природы на основе его модели ММГС. Применения модели ММГС позволило создать универсальный формат входных данных, для постановки различных задач АП КМ, обеспечивающий определение неизвестных значений параметров в форме их интервальных оценок.

3) Предложенный и разработанный метод реверсивной многомасштабной гомогенизации позволяет уточнять модели исследуемых КМ за счёт включения в их состав дополнительных компонентов с неизвестными идентифицируемыми свойствами, что позволило повысить точность получаемых численно эффективных характеристик КМ. Предложенный метод позволяет оценивать характеристики проектируемого КМ на основе частично известных свойств отдельных его компонентов и известных эффективных характеристик вспомогательных КМ, содержащих в своём составе те же компоненты с частично определёнными характеристиками.

4) Обосновано, что для полимерных КМ, наполненных полыми мембранными волокнами, и для дисперсно-армированных КМ со сферическими включениями, для существенного повышения точности получаемых численно результатов с помощью метода асимптотического осреднения в состав моделей исследуемых КМ следует включать дополнительные компоненты (например, «тонкие адгезионные плёнки») с неизвестными свойствами, идентифицируемыми на основе экспериментальных данных.

5) Применение графоориентированного подхода в совокупности с созданными программными инструментами поддержки процесса разработки ПО существенно упрощают построение и последующее развитие вычислительных подсистем САПР КМ.

6) Разработанный графоориентированный подход не имеет прямых аналогов на сегодняшний день в России, что подтверждено проведённым патентным исследованием и полученным патентом на изобретение [34].

7) Лежащая в основе программной реализации СВМ графовая модель может быть визуализирована, что упрощает интерпретацию архитектуры вычислительного метода и обеспечивает возможности его модификации.

8) Обоснована эффективность применения графоориентированного подхода: создано более 20 программных реализаций СВМ, включая реализацию метода реверсивной многомасштабной гомогенизации.

9) Графоориентированный подход положен в основу методики разработки модулей расширения, реализующих логику работы пользователей в САПР КМ.

10) Сбор результатов экспериментов и расчётов в разработанной базе данных свойств исследуемых КМ, вошедшей в состав прототипа САПР КМ, позволил обеспечивать уточнение хранимых данных с каждым новым расчётом.

11) Обоснована эффективность применения программных средств поддержки процесса разработки (CASE инструментов) при создании различных программных средств и подсистем САПР КМ, включая: модули ввода и вывода данных, вычислительные модули (в т.ч. графоориентированные), средства динамической генерации документации на модули различного типа. Актуальным является адаптация созданных CASE инструментов для работы в рамках принципов «Software as a service» (SaaS).

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ

по теме диссертации: в изданиях, рекомендуемых ВАК при защите докторских диссертаций

1. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П. Система автоматизированного прогнозирования свойств композиционных материалов // Информационные технологии. Москва, 2008. Т. 1, № 8. С. 31–38. (0.7 п.л./0.35 п.л.)
2. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П. Многомасштабное моделирование упругих композиционных материалов // Математическое моделирование. 2012. Т. 24, № 5. С. 3–20. (1.0 п.л. / 0.5 п.л.)
3. Моделирование поверхностей прочности композитов на основе микроструктурного конечно-элементного анализа / Ю.И. Димитриенко, А.П. Соколов, Ю.В. Шпакова [и др.] // Наука и образование: электронное научно-техническое издание. 2012. № 11. С. 487–496. (0.4 п.л. / 0.1 п.л.)
4. Метод решения задачи оптимизации структуры дисперсно-армированных композитов при ограничениях на тепловые и прочностные свойства / Ю.И. Димитриенко, А.Н. Дроголюб, А.П. Соколов [и др.] // Наука и образование: электронное научно-техническое издание. 2013. № 11. С. 415–430. (0.9 п.л. / 0.3 п.л.)
5. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П., Маркевич М.Н. Математическое моделирование диэлектрических свойств полимер-керамических композиционных материалов методом асимптотического осреднения // Наука и образование: электронное научно-техническое издание. 2013. № 1. С. 49–64. (0.9 п.л. / 0.3 п.л.)
6. Димитриенко Ю.И., Сборщиков С.В., Соколов А.П. Численное моделирование микроразрушения и прочностных характеристик пространственно-армированных композитов // Механика композиционных материалов и конструкций. 2013. Т. 19, № 3. С. 365–383. (1.4 п.л./0.45 п.л.)
7. Численное и экспериментальное моделирование прочностных характеристик сферопластиков / Ю.И. Димитриенко, С.В. Сборщиков, А.П. Соколов [и др.] // Композиты и наноструктуры. 2013. Т. 19, № 3. С. 35–51. (1.06 п.л./0.2 п.л.)
8. Computational modeling of failure of textile composites / Y. Dimitrienko, S. Sborschikov, A. Sokolov et al. // Computational continuum mechanics. 2013. Vol. 6, No. 4. (1.5 п.л./0.3 п.л.)
9. Соколов А.П., Щетинин В.Н., Сапелкин А.С. Параллельный алгоритм построения поверхности прочности КМ для архитектуры Intel MIC (Intel Many Integrated Core Architecture) // Программные системы: теория и приложения. 2016. Т. 7, № 2. С. 3–25. (1.6 п.л./0.69 п.л.)
10. Соколов А.П., Першин А.Ю. Программный инструментальный для создания подсистем ввода данных при разработке систем инженерного анализа // Программная инженерия. 2017. Т. 8, № 12. С. 543–555. (1.5 п.л./1.2 п.л.)
11. Реверсивная многомасштабная гомогенизация физико-механических характеристик гетерогенных периодических сред с использованием графоориентированного программного подхода / А.П. Соколов, А.Ю. Першин, В.Н. Щетинин [и др.] // Композиты и наноструктуры. 2017. Т. 9, № 3-4. С. 25–38. (1.5 п.л./1.3 п.л.)

12. Соколов А.П., Щетинин В.Н. Идентификация упругих свойств адгезионного слоя дисперсно-армированных композитных материалов на основе экспериментальных данных // *Механика композиционных материалов и конструкций*. 2018. Т. 24, № 4. С. 555–581. (1.6 п.л./0.6 п.л.)
13. Гомогенизация многоуровневых многокомпонентных гетерогенных структур для определения физико-механических характеристик композиционных материалов / А.П. Соколов, А.Ю. Першин, А.В. Козов [и др.] // *Физическая мезомеханика*. 2018. Т. 21, № 5. С. 90–107. (1.6 п.л./1.0 п.л.)
14. Соколов А.П., Першин А.Ю. Графоориентированный программный каркас для реализации сложных вычислительных методов // *Программирование*. 2019. Т. 47, № 5. С. 43–55. (1.6 п.л./0.8 п.л.)
15. Разработка программного обеспечения генерации кода на основе шаблонов при создании систем инженерного анализа / А.П. Соколов, В.М. Макаренков, А.Ю. Першин [и др.] // *Программная инженерия*. 2019. Т. 10, № 9-10. С. 400–416. (1.6 п.л./0.8 п.л.)
16. Математическое моделирование многостадийной химической реакции N-метилирования аминов диметилкарбонатом / Д.Л. Карлова, И.М. Губайдуллин, К.Ф. Коледина [и др.] // *Вестник Башкирского Университета*. 2020. Т. 25, № 3. С. 523–533. (1.0 п.л./0.2 п.л.)
17. Соколов А.П., Першин А.Ю. Система автоматизированного проектирования композиционных материалов. Часть 1: концепции, архитектура и платформа разработки // *Известия СПбГЭТУ «ЛЭТИ»*. 2020. № 8–9. С. 72–83. (0.8 п.л./0.6 п.л.)
18. Соколов А.П., Першин А.Ю. Система автоматизированного проектирования композиционных материалов. Часть 2: вычислительная подсистема, распределенные вычисления с применением графоориентированного подхода // *Известия СПбГЭТУ «ЛЭТИ»*. 2020. № 10. С. 49–63. (1.0 п.л./0.6 п.л.)
19. Соколов А.П., Голубев В.О. Система автоматизированного проектирования композиционных материалов. Часть 3: графоориентированная методология разработки средств взаимодействия пользователь-система // *Известия СПбГЭТУ «ЛЭТИ»*. 2021. № 2. С. 43–57. (1.2 п.л./0.6 п.л.)
20. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П. Разработка автоматизированной технологии вычисления эффективных упругих характеристик композитов методом асимптотического осреднения // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Серия «Естественные науки»*. 2008. Т. 29, № 2. С. 56–66. (0.6 п.л./0.3 п.л.)
21. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П. Исследование процессов разрушения композиционных материалов на базе метода асимптотической гомогенизации // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Серия «Естественные науки»*. Спец. Вып. 2012. № 6. С. 101–113. (1.0 п.л./0.4 п.л.)
22. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П., Сборщиков С.С. Моделирование микро-разрушения тканевых композитов // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Серия «Естественные науки»*. 2012. Т. 1, № Спец. выпуск 3 «Математическое моделирование». С. 5–19. (1.0 п.л./0.4 п.л.)
23. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П., Юрин Ю.В. Численное моделирование упругопластического деформирования пространственно-армированных композитов // *Вестник МГТУ им. Н.Э.Баумана. Сер. Есте-*

ственные науки. Спец.выпуск «Математическое моделирование». 2012. № 4. С. 40–54. (0.8 п.л./0.2 п.л.)

в изданиях, индексируемых в Scopus и/или Web of Science

24. Dimitrienko Y., Sokolov A. On elasticity properties of composite materials // *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2010. Vol. 2, No. 1. P. 116–130. (0.9 п.л./0.4 п.л.)

25. Dimitrienko Y., Sokolov A. Numerical Modeling of Composites with Multiscale Microstructure // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics*. 2011. Vol. 75, No. 11. P. 1457–1461. (0.25 п.л./0.1 п.л.)

26. Dimitrienko Y., Sokolov A., Shpakova Y. Computer-aided Analysis of Micromechanics and Damage of Composite Materials Based on Multiscale Homogenization Method // *Materials Research Society Symposium Proceedings*. Vol. 1535. 2013. P. 105–111. (0.4 п.л./0.2 п.л.)

27. Dimitrienko Y., Sborshchikov S., Sokolov A. Numerical simulation of microdestruction and strength characteristics of spatially reinforced composites // *Composites: Mechanics, Computations, Applications*. 2013. Vol. 4, No. 4. P. 345–364. (1.2 п.л./0.4 п.л.)

28. Sokolov A., Schetinin V. Modeling of phases adhesion in composite materials based on spring finite element with zero length // *Key Engineering Materials*. 2018. Vol. 780. P. 3–9. (0.6 п.л./0.3 п.л.)

29. Sokolov A., Schetinin V., Kozlov M. Surface finite element for imperfect interface modeling in elastic properties homogenization // *Key Engineering Materials*. 2020. Vol. 833. P. 101–106. (0.5 п.л./0.2 п.л.)

30. Prediction of the effective stress-strain curves of ductile polymer 1D-reinforced composites filled with hollow fibers using parameterized model based on Bezier curves / A. Sokolov, V. Schetinin, A. Sapelkin et al. // *Key Engineering Materials*. 2020. Vol. 833. P. 93–101. (0.5 п.л./0.1 п.л.)

31. Sokolov, A.P., Pershin, A.Yu. Computer-aided design of composite materials using reversible multiscale homogenization and graph-based software engineering // *Key Engineering Materials*. 2018. Vol. 779. P. 11–18. (0.6 п.л./0.4 п.л.)

32. Vikulin S. D., Pershin A. Y., Sokolov A. P. Application of multigrid methods for solving systems of linear algebraic equations of large dimension in the context of model differential equations // *Journal of Physics: Conference Series (CSP2020, 12-16 October, Moscow, Russia)*. 2021. Vol. 1740. P. 012051. (0.25 п.л./0.1 п.л.)

33. Sokolov, A.P. and Schetinin, V.N. and Kozlov, M.Yu. Modeling Elastic Properties of Composites using Asymptotic Averaging Method with Imperfect Interface // *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2021. Т. 13, № 2. С. 347–359. (1.2 п.л./0.2 п.л.)

основные патенты и свидетельства о регистрации ПрЭВМ

34. Соколов А.П., Першин А.Ю. Патент на изобретение RU 2681408. Способ и система графо-ориентированного создания масштабируемых и сопровождаемых программных реализаций сложных вычислительных методов. 2019. заявка № RU 2017 122 058 А, приоритет 22.07.2017, опубликовано 22.02.2019 (3.4 п.л. / 2.4 п.л.)

35. Соколов А.П. Библиотека `gcd_dll_INIParser` поддержки чтения данных в формате `aINI`. 2013. свид. 2013617546 от 20.08.2013, заявл. 2013615288 от 27.06.2013

36. Соколов А.П., Макаренков В.М. Программа `gcdcli_plg_CodeGenerator` для автоматического формирования документов и программных объектов на основе шаблонов. 2014. свид. 2014612782 от 06.03.2014, заявл. 2013617477 от 07.08.2013.

37. Щетинин В.Н., Соколов А.П. Программа `ElasticHomProblem_ImpInterface` численного решения задачи осреднения упругих свойств композита с условиями неидеального интерфейса. 2020. свид. 2020662386 от 13.10.2020, заявл. 2020660872 от 17.09.2020.