

УДК 631.53.027.3

© Є.К. Сербій, к.т.н.
УкрНДПВТ ім. Л. Погорілого

СТАТИСТИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ДИСКРЕТНОЇ МОДЕЛІ ДРАЖИРОВАНОЇ НАСІНИНИ

Виконано статистичне дослідження дискретної моделі дражированої насінини, за результатами якого обґрунтовано доцільність використання часток заповнювача діаметром 0,5...0,63 мм з середнім значенням 0,565 мм та середньоквадратичним відхиленням не більше 0,02 мм та відносною кількістю за масою в межах 0,6...0,7.

ДИСКРЕТНА МОДЕЛЬ, МЕЗОЧАСТКА, ДРАЖИРОВАНЕ НАСІННЯ, КООРДИНАЦІЙНЕ ЧИСЛО, ПОРИСТІСТЬ, ПЛОЩА ПОВЕРХНІ, ЗАПОВНЮВАЧ, ЗВ'ЯЗУЮЧА РЕЧОВИНА, БЕНТОНІТ, ГУМАТИ.

Постановка проблеми. Поява нових матеріалів визначає розвиток всіх галузей промисловості, в тому числі сільськогосподарського виробництва, та є одним з найважливіших напрямків сучасних досліджень. Зміни укладів життя людства пов'язані

з відкриттям і освоєнням виробництва нових матеріалів. Матеріали - це шаблі нашої цивілізації, а нові матеріали - це трамплін для стрибка в майбутнє, що змінює вигляд нашого буття.

Одним з найважливіших критеріїв, що визначає пріоритетні технології, є здатність докорінно змінити, “перевернути” всю структуру виробництва, а можливо, і соціальних умов життя людства. До таких технологій, безперечно, належать інформаційні технології, біотехнології, гена інженерія, а в сільському господарстві однією з пріоритетних технологій у рослинництві є використання дражированого насіння, і всі вони ґрунтуються на одержанні та використанні нових матеріалів. За експертними оцінками в найближчі 20 років 90% матеріалів будуть замінені принципово новими, що призведе до революції в різних областях техніки, у тому числі у сільськогосподарському виробництві. Про перспективність робіт з створення нових матеріалів свідчить і той факт, що майже 22% світових патентів видаються на винаходи в цій області. Про це ж говорить і динаміка зростання світових ринків основних видів нових матеріалів.

Одним з напрямків, якому в усіх промислово розвинених країнах приділяється особлива увага, є проектування та використання “розумних” матеріалів, з яких виготовляються конструкції з адаптивно мінливими властивостями. На теперішній час розробляються “розумні” обшивки корпусів морських суден, самозміцнених лопатей вертольотів, звукопоглинальних промислових конструкцій. В сільськогосподарському виробництві, також має бути місце «розумним» матеріалам, наприклад – адаптивні ґрунтообробні органи, оброблене насіння сільськогосподарських культур, оболонка якого змінює свої властивості в залежності від ґрунтово-кліматичних умов.

Також в останні роки в усьому світі відбувається швидке зростання комп'ютерних технологій у всіх сферах сучасних досліджень. У матеріалознавчій науці і технологічній практиці отримання нових матеріалів стрімко розвивається новий напрямок - комп'ютерне конструювання нових продуктів і технологій їх виготовлення. Прогрес в цій області пов'язаний з розвитком методів динаміки часток, фізичної мезомеханики (дискретні методи), що описують рух мезооб'єктів в навантажених матеріалах. Ці методи дозволяють будувати комп'ютерні моделі, прогнозувати поведінку матеріалу в різних умовах навантаження та інших зовнішніх впливах (температура, вологість), здійснювати діагностику стадії передруйнування конструкцій.

Широкі можливості методів дозволяють також здійснювати комп'ютерне конструювання матеріалу із заданими механічними властивостями [1].

Нова ера технологічного прориву в усіх галузях, особливо у сільськогосподарському виробництві потребує появи нових матеріалів з особливими властивостями, що працюють в різноманітних та змінних умовах. Наприклад, в галузі рослинництва створення і використання дражированого насіння вимагатиме розроблення нових підходів проектування для ефективного застосування природних матеріалів у композиціях оболонок дражированого насіння адаптованого до різних ґрунтово-кліматичних умов.

Виходячи з цього прогнозування властивостей та обґрунтування кількісного складу композиції для дражирування насіння є своєчасною та актуальною задачею наукових досліджень в галузі сільськогосподарського виробництва.

Аналіз останніх досліджень. Розвиток дискретних методів досліджень робить актуальним створення систем автоматичного проектування і дизайну матеріалів та пристроїв. Методи дискретної механіки в даний час інтенсивно розвиваються і впроваджуються в різні галузі науки [2], в тому числі і в сільське господарство.

При виконанні умов, що накладаються класичною механікою, якщо з достатньою точністю відомо міжчасткове силове поле, якщо можливо розв'язувати рівняння руху і правильно задавати початкові умови, то результат розрахунку має статус обчислювального експерименту (*in silico*). Тобто результат можна порівнювати з експериментально вимірюваними величинами і, що дуже важливо, отримувати інформацію про параметри, які майже неможливо фізично виміряти [3].

Принципові обмеження на використання методу часток відсутні і на мезомасштабному рівні структурними одиницями моделювання доцільно вважати не окремі атоми і молекули, а їх агрегати (флокули, кластери, частки матеріалу).

Інформативність результатів моделювання виявляється максимальною, якщо програмне забезпечення для моделювання розробляється з урахуванням конкретних прикладних задач і виконано в програмному забезпеченні, початково орієнтованому на ресурсномісткі обчислення. Вже в найближчій перспективі обчислювальним інструментарієм для розвитку пріоритетних напрямків має стати GRID-технології [4].

Методу часток та його використанню присвячені численні ресурси Internet, підтримувані як комерційними розробниками, так і

некомерційними дослідницькими організаціями. На умовах загальнодоступних ліцензій (GPL або BSD) поширюються пакети процедур, що реалізують окремі стадії чисельного рішення систем. Для загальнодоступних пакетів процедур не характерний недолік комерційних пакетів CAD/CAE - «непрозорість» моделювання процесу, відсутність доступу до довільних характеристик. Однак у більшості випадків витрати часу на зв'язування різних загальнодоступних програмних інтерфейсів істотно перевищує витрати часу на аналіз і реалізацію обчислювального ядра - розрахункових алгоритмів на універсальній алгоритмічній мові. Зміщенню акцентів до реалізації авторського програмного забезпечення сприяє і послаблення вимог до обчислювальної ефективності - закономірний наслідок процесу зростання швидкодії EOM [5].

Рішення системи рівнянь динаміки часток можна виконати з використанням універсальних пакетів символічної або чисельної математики (Mathcad, MATLAB, Maple та ін.), проте для подібного підходу характерна порівняно невисока обчислювальна швидкість. Однак, реалізація розрахункової схеми мовою пакету символічної або чисельної математики за витратами часу розробника набагато швидша у порівнянні з реалізацією в автономному програмному забезпеченні.

Нарешті необхідність обліку тангенціальних сил ускладнює використання існуючих пакетів молекулярної динаміки та динаміки часток.

В основі розрахункової схеми [6-9] полягає модель формування структурних одиниць мезоструктури композиту (часток заповнювача - піску, у матриці зв'язуючого компоненту – суміші бентоніту та гумітів з водою). Рух часток заповнювача відбувається під дією: сили тяжіння, сил контактної взаємодії (представлені центрально-симетричним полем відштовхування-притягування) і сил взаємодії з межами розрахункової області.

Обчислювальне ядро виконано у Maple з використанням процедур MathLab. Результати обчислювального експерименту представляються обчислювальним ядром в текстовій формі (формат інформації - txt - ASCII-дані, розділені комами, напівавтоматичним чином генерується та сприймається Maple), в тому числі - мовою Maple пакет, який на платформі Microsoft може бути використаний для візуалізації конфігурацій часток.

Сама по собі дискретна модель модельованого дражированого насіння не є кінцевим результатом досліджень, а може бути використана для статистичного аналізу, враховуючи внутрішню його

структуру, або вихідним об'єктом для динамічних розрахунків з визначенням міцнісних та гідрофільних показників.

Мета роботи. Виконати статистичне дослідження дискретної моделі дражированої насінини, за результатами якого обґрунтувати кількісні показники композиції для дражування насіння.

Результати дослідженн. Результатом формування моделі дражированої насінини (рис. 1) методом часток є структура даних, що включає в якості полів:

- координати центрів X_i, Y_i, Z_i , діаметри D_i , маси M_i , швидкості V_i , прискорення a_i та координаційні числа K_i часток моделі;
- двовимірні масиви «сусідів» кожної частки та відстані до них;
- кількісний склад композиції для дражування та фізико-механічні властивості вхідних елементів;
- статистичні параметри моделі драже: пористість $K_{\text{пор}}$, кількість часток у драже N_s , середнє координаційне число K_{sr} , середня відстань між сусідніми частками L_{sr} , площа поверхні часток S_s , середній еквівалентний діаметр D_k об'єму зв'язуючої речовини між частками, об'єм часток V_s , об'єм бентоніту V_b та об'єм гумітів V_g у драже;
- одновимірний масив відносних відхилень δL відстаней між частками від їх рівноважного положення.

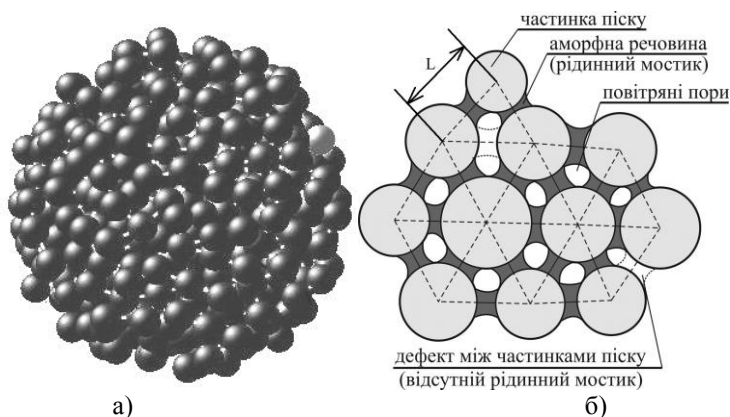


Рис. 1 - Дискретна модель дражированої насінини (при $D_s=0,47\text{мм}$, $\sigma_D=0,01\text{мм}$, $n_s=0,7$, $n_g=0,1$, $n_b=0,2$): а – 3D - зображення моделі, б – 2D – фрагмент моделі

При постановці обчислювальних експериментів керуючими змінними були обрані:

- D_i : діаметр часток заповнювача;
- σ_D : середнє квадратичне відхилення діаметру часток заповнювача;
- n_s : відносна кількість заповнювача (піску або перліту) за масою;
- n_b : відносна кількість бентоніту за масою;
- n_g : відносна кількість гумату за масою.

Фізико-механічні параметри трьох складових композиції для дражування насіння було прийнято при значенні їх вологості, яка відповідає насиченню адсорбованою з повітря вологою при нормальних умовах, що співпадає з вимогами для зберігання насінневого матеріалу більшості сільськогосподарських культур (оптимальна вологість для зберігання насіння більшості овочевих культур 12...15%).

В сукупній дії вказані змінні повністю визначають фізико-механічні параметри драже. У першому обчислювальному експерименті фактори D_i , σ_D варіювалися відповідно з повнофакторним планом для двофакторної квадратичної експериментально-статистичної моделі (таблиця 1), а інші дорівнювали: $n_s=0,7$, $n_b=0,2$, $n_g=0,1$.

Враховуючи вірогідніший характер побудови дискретної моделі дражированої насінини, одна його реалізація не може дати істинну картину, тому кожен чисельний експеримент з формування дискретної моделі було проведено у трикратній повторності і кожна величина визначалась, як математичне очікування.

Таблиця 1 – Рівні варіювання факторами D_i , σ_D

Рівень	Фактори	
	D_i , мм	σ_D , мм
-1	0,32	0,01
0	0,47	0,05
+1	0,63	0,09

В результаті виконання обчислювальних експериментів визначено:

- залежність кількості часток у драже (рис. 2);
- залежність площі поверхні часток у драже (рис. 3);

- відносна кількість відхилень $P_{\delta L}$ відстаней δL між частками від їх рівноважного положення у драже (рис. 4);
- залежність середнього координаційного числа часток у драже (рис. 5);
- залежність пористості драже (рис. 6);

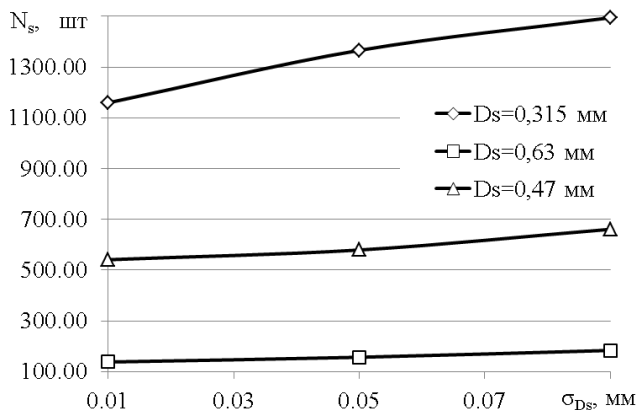


Рис. 2 - Залежність кількості часток у драже від σ_{Ds}

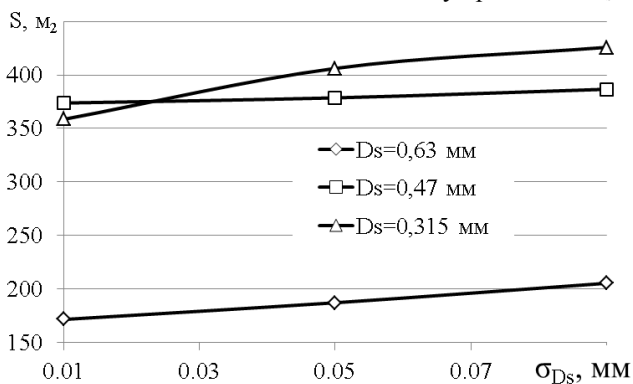


Рис. 3 - Залежність площі поверхні часток у драже від σ_{Ds}

З рис. 2 та рис. 3 видно, що збільшення діаметру часток заповнювача призводить до зменшення їх кількості у дражированій насінині та зменшенню сумарної площі їх поверхонь.

Механізм формування міцності матеріалу полягає у зв'язуванні часток заповнювача зв'язуючими компонентами з бентоніту, гумітів та води. Повна енергія міжмолекулярної взаємодії

зв'язуючого компоненту складається з енергії витраченої на зовнішнє формування сил поверхневого натягу (створення міжмолекулярного зв'язку на поверхні зчеплення з заповнювачем та вільної поверхні на границі розділу з повітрям) та внутрішньої енергії міжмолекулярного зв'язку (сили Ван дер Ваальса), саме яка в більшості і визначає міцність речовини.

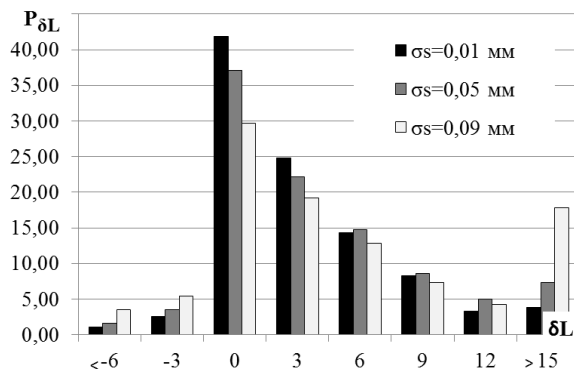


Рис. 4 - Відносна кількість відхилень $P_{\delta L}$ відстаней δL між частками від їх рівноважного положення у драже (при $D_i=0,63$).

Таким чином, при збільшенні площі вільної поверхні часток збільшується енергія поверхневого натягу, а оскільки повна енергія міжмолекулярного зв'язку незмінна, то це призводить до зменшення енергії внутрішнього міжмолекулярного зв'язку, що формує міцність матеріалу. Отже, для збільшення міцності драже доцільно використовувати заповнювач, як можна більшого діаметру, однак малі розміри дрібного овочевого насіння (розміри насіння моркви – 2,5x1,2x0,9 мм, капусти – 2x1,8x1,7 мм) обмежують діаметр заповнювача, враховуючи нормальний ряд решіт для фракційного розподілу, в межах 0,5...0,63 мм.

При формуванні драже, внаслідок стохастичного розташування часток заповнювача і його дисперсності, упаковка цих часток не є регулярною і відстані між ними не відповідають умовам статичної рівноваги (рівноважного положення двох часток і зв'язуючого компоненту між ними) [8]. Це означає, що при формуванні драже зволожений зв'язуючий компонент між частками заповнювача знаходиться в напруженому стані (найчастіше в розтягнутому) і при висиханні його міцність буде слабкішою, ніж при умовах рівноважного стану. З рис. 4 видно, що при збільшенні середньоквадратичного відхилення діаметру часток від 0,01 до 0,09 мм суттєво зменшується

відносна кількість врівноважених (та близьких до врівноваженого) зв'язків між частками. Так, для відхилень відстаней між частками від рівноважного в межах $\pm 3\%$ відносна кількість зв'язків зменшується від 67 до 49%, а відносна кількість зв'язків при відхиленні більше 15% суттєво збільшується з 4 до 18%. Все це, а також данні рис. 2 та рис. 3, дозволяють зробити висновок про доцільність використання часток з найменшим середньоквадратичним відхиленням їх діаметрів. Враховуючи встановлені межі для діаметру заповнювача 0,50...0,63 мм (середній діаметр 0,565 мм) та правило 3σ , середньоквадратичне відхилення діаметру часток має бути близько 0,02 мм.

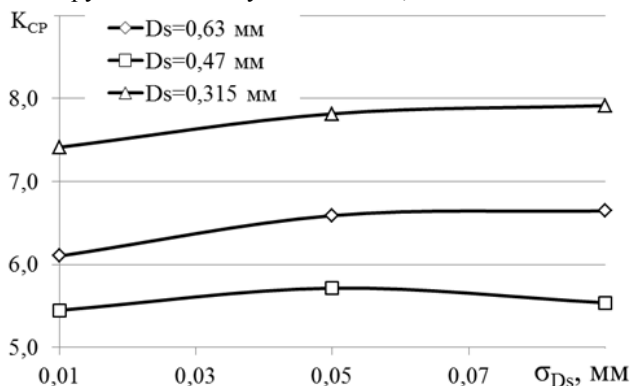


Рис. 5 - Залежність середнього координаційного числа часток у драже від σ_{Ds}

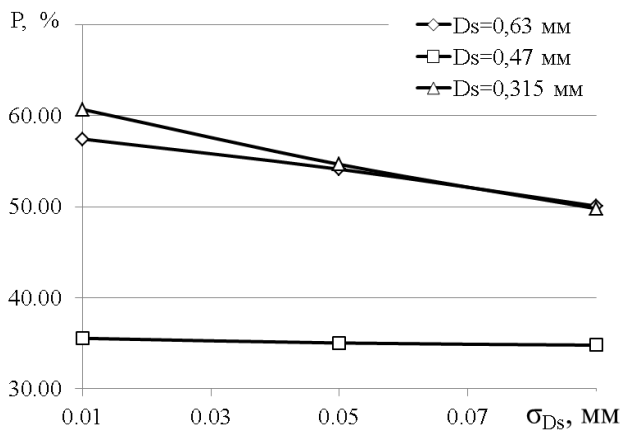


Рис. 6 - Залежність пористості не зволоженого драже від σ_{Ds}

З рис. 5 та рис. 6 також бачимо, що використання часток розмірами у вказаному діапазоні сприяє формуванню їх укладки с координаційним числом близьким до 6, яке відповідає кубічній щільній укладці часток. При збільшенні середньоквадратичного відхилення діаметру часток спостерігається незначне збільшення середнього координаційного числа, що можна пояснити заповненням простору між великими частками більш малими, а також зменшення пористості та розмірів пор, що негативно буде впливати на повітряно-водний обмін між насінною та зовнішнім середовищем.

Компоненти зв'язуючої частини – бентоніт та гумати, як хімічно-активні речовини, активно поглинають вологу та мають високу ступінь набухання [10] (рис. 7). Тому при попаданні у вологий ґрунт бентоніт і гумати будуть збільшуватись за розмірами, що сприятиме зменшенню пористості драже насінни. Так, враховуючи фізико-механічні параметри компонентів для дражирування, при збільшенні об'ємів бентоніту і гумітів у два рази при діаметрі часток 0,57 мм пористість зменшиться до 38%, що є задовільним показником з точки зору агрономії [11].

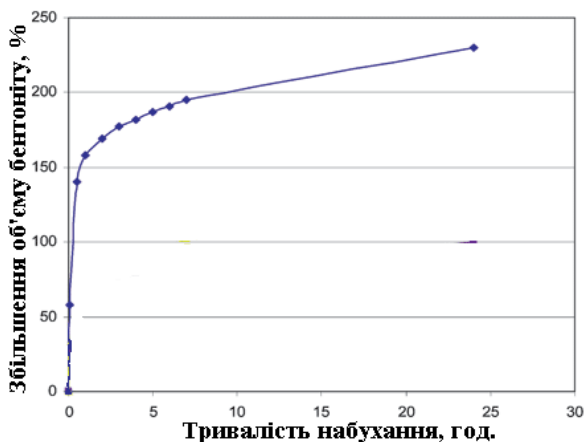


Рис. 7 - Залежність об'єму бентоніту від зміни часу набухання [10]

Другий чисельний експеримент проведено з варіюванням складу композиції (табл. 2), діаметр часток прийнято 0,57 мм з середньоквадратичним відхиленням 0,02 мм.

Таблиця 2 – Склад композицій при проведенні другого чисельного експерименту

№ експерименту	n_s	n_b	n_g
1	0,55	0,05	0,10
2	0,70	0,10	0,20
3	0,85	0,15	0,30

За результатами другого чисельного експерименту встановлено:

- залежність кількості часток у драже від відносної їх кількості за масою (рис. 8);
- залежність сумарної площі часток від відносної їх кількості за масою (рис. 9);
- відносну кількість відхилень $P_{\delta L}$ від рівноважного положення відстаней δL між частками у драже (рис. 10);
- залежність координаційного числа від відносної кількості часток за масою (рис. 11);
- залежність пористості зволоженого драже від відносної кількості часток за масою (рис. 12).

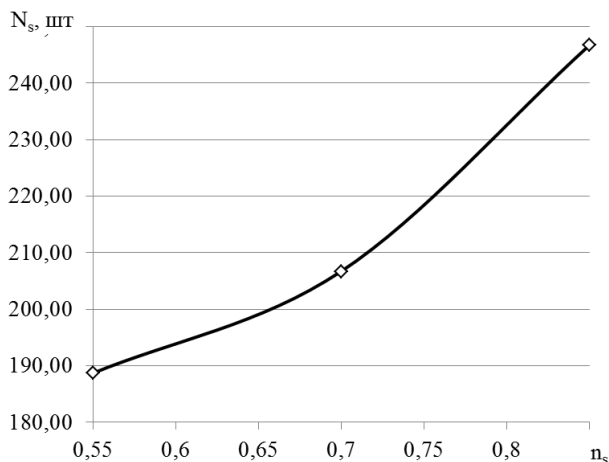


Рис. 8 - Залежність кількості часток у драже від відносної їх кількості за масою

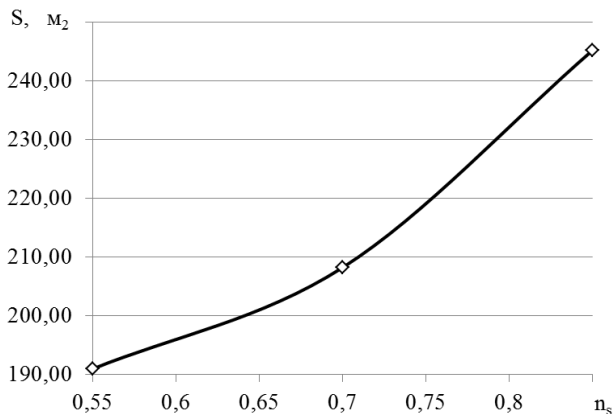


Рис. 9 - Залежність сумарної площі часток від відносної їх кількості за масою

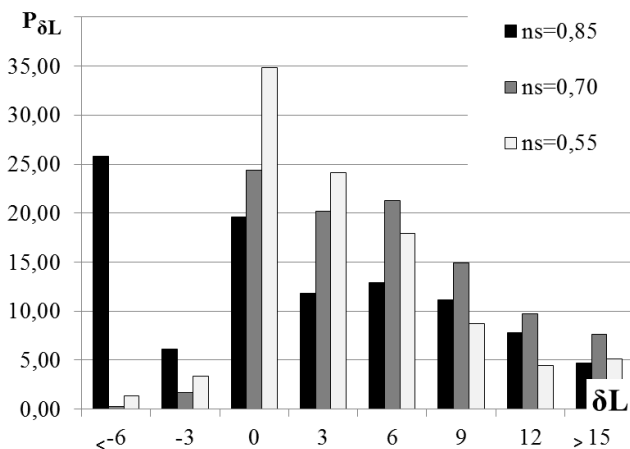


Рис. 10 - Відносна кількість відхилень $P_{\delta L}$ від рівноважного положення відстаней δL між частками у драже

Залежності з рис. 8 та рис. 9 свідчать про те, що збільшення відносної кількості часток заповнювача за масою суттєво не впливає на їх кількість та сумарну площу у драже. Але, як видно з рис. 10, при збільшенні відносної кількості часток заповнювача від 0,55 до 0,85 значно зменшується кількість врівноважених (та близьких до врівноваженого) зв'язків між частками. Так, для відхилень відстаней

між частками від рівноважного в межах $\pm 3\%$ відносна кількість зв'язків зменшується від 59 до 31%, а відносна кількість зв'язків при відхиленні менше 6% суттєво збільшується з 1 до 26%. Це дозволяє зробити висновок про доцільність використання меншої кількості часток наповнювача і більшої кількості гуматів та бентоніту, що також позитивно вплине на міцність драже.

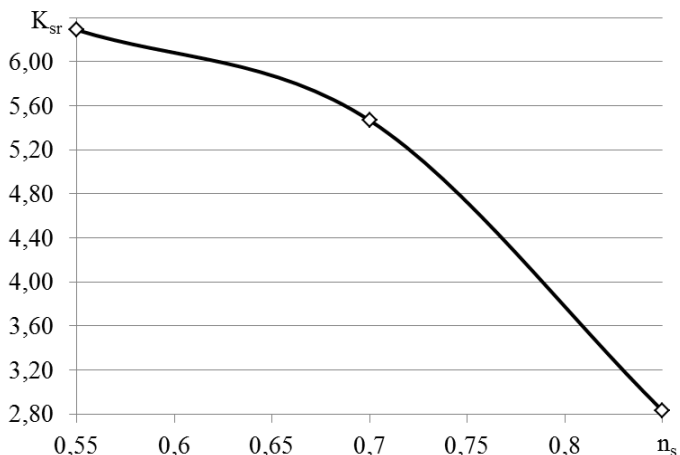


Рис. 11 - Залежність координаційного числа від відносної кількості часток за масою

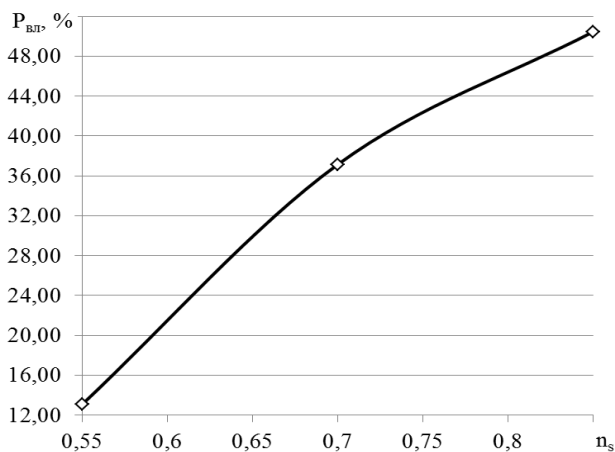


Рис. 12 - Залежність пористості зволоженого драже від відносної кількості часток за масою

Залежності на рис. 11 та рис. 12 так само свідчать про доцільність зменшення відносної маси часток заповнювача. Так при зменшенні часток заповнювача від 0,85 до 0,55 координаційне число збільшується з 2,8 до 6,8, а пористість зменшується з 51 до 13%. Однак занадто мале значення пористості зволоженого драже може привести до зменшення доступу повітря до насінини, що негативно вплине на її розвиток. Враховуючи агрономічні вимоги до умов проростання насіння у ґрунті [11] у першому наближенні приймаємо відносну кількість часток заповнювача в межах від 0,6 до 0,7. В цьому діапазоні координаційні числа змінюватимуться від 5,5 до 6,1, а пористість зволоженого драже – від 22 до 37 %.

Уточнення кількісного складу елементів композиції повинно бути виконано за динамічним дослідженням дискретної моделі дражированої насінини.

Висновки:

1. У універсальному пакеті символічної математики Maple розроблено обчислювальне ядро, що генерує дискретну модель дражированої насінини та розраховує її статистичні показники: пористість, кількість часток у драже, середнє координаційне число, середня відстань між сусідніми частками, площа поверхні часток, середній діаметр об'єму зв'язуючої речовини між частками, об'єм часток, об'єм бентоніту та об'єм гумітів.

2. Виконано статистичне дослідження дискретної моделі дражированої насінини, за результатами якого обґрунтовано доцільність використання часток заповнювача діаметром 0,5...0,63 мм та середньоквадратичним відхиленням не більше 0,02 мм, кількість якого буде в межах 0,6...0,7 від загальної маси.

Література

1. Терещенко Г.Ф., Путилов А.В. Новые материалы как перспективная химическая продукция и технологии их получения. Перспективы создания и внедрения новых технологий для производства химической продукции в России [Електронний ресурс] / Доклад на Российском конгрессе “Химическая промышленность на рубеже веков: итоги и перспективы”. Министерство науки и технологий Российской Федерации. - Режим доступу: http://www.chem.msu.ru/rus/journals/membranes/3/puti_tx6.htm

2. Kalinichev A.G., Kirkpatrick R.J. Molecular dynamics Modeling of Chloride Binding to the surface of Calcium Hydroxide, Hydrated Calcium Aluminate, and Calcium Silicate Phases. - Chem. Matter. - 2002., v.14. - p.3539–3549.

3. Шайган К. В. Молекулярная динамика биополимеров // Проблемы регуляции в биологических системах / Под общей ред. А. Б. Рубина. – М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2006. – 480 с.

4. Интернет-портал по грид-технологиям [Электронный ресурс] . - Режим доступа: <http://gridclub.ru/about> (доступ 30.03.2012)

5. Королев Е.В. Отчет о НИР «Разработка технологии наномодифицирования композиционных строительных материалов с использованием уникального комплекса исследовательского оборудования научно-образовательного центра по направлению «Нанотехнологии» МГСУ» по теме «Моделирование структуры наномодифицированного композиционного материала» (промежуточный). - МГСУ, Москва. - 2012 г. - 121 с.

6. Сербий Е.К. Природные компоненты для дражирования семян // Материалы Международной научно-технической конференции «Научно-технический прогресс в сельскохозяйственном производстве». Т.2. – Минск, 2012, стр. 253-261

7. Сербій Є.К., Новохацький М.Л. Можливості пролонгованого використання елементів дражувальної оболонки насіння овочевих культур // Праці / ТДАТУ – Вип. 12. Т.4. – Мелітополь: ТДАТУ, 2012. – стр. 70-80

8. Сербій Є.К. Дискретна модель дражированої насінини. Збірник наук. праць. Випуск 17 (31): “Техніко-технологічні аспекти розвитку та випробування нової техніки і технологій для сільського господарства України”. Том 2. - Дослідницьке: УкрНДПВТ ім. Л. Погорілого, 2013. - стор. 158-175.

9. Сербий Е.К. Концепция дискретного моделирования дражированных семян // Материалы Международной научно-технической конференции «Научно-технический прогресс в сельскохозяйственном производстве». – Минск, 2013.

10. Мотылева Т.А., Казанцев В.В., Смирнова Н.В. Опыт применения полианионной целлюлозы AquaPAC® Regular при бурении скважин на Арктическом шельфе [Электронный ресурс] / Бурение и нефть. – 2010, №3. - Режим доступа: <http://burneft.ru/archive/issues/2010-03/8>

11. Апарин Б.Ф. Почвоведение: уч. — М.: Академия, 2012. - 256 с.

Рецензент д.т.н., проф. Кушнарьов А.С.