УДК 691

СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В СТРОИТЕЛЬНЫХ КОМПОЗИТАХ С ПОЗИЦИИ ФРАКТАЛЬНОЙ ГЕОМЕТРИИ

Довгань И.В., д.х.н., профессор,
Колесников А.В.,
Шарыгин В.Н., к.х.н., доцент,
Дмитренко М.П.,
Кириленко Г.А.
Одесская государственная академия строительства и архитектуры
maryana06@ukr.net

Аннотация. В работе рассматривается подход к описанию свойств композитных материалов с помощью теории фракталов. Предлагается к использованию функция распределения фрактальной размерности, являющаяся вероятностно-фрактальной характеристикой материала на промежуточных пространственных масштабах. Функция распределения фрактальной размерности при таком подходе представляется подчиняющейся уравнению Фоккера-Планка. Предлагаемый математический аппарат позволяет, в частности, рассмотреть структурообразование с позиций теории катастроф новым методом, на основе функции распределения фрактальной размерности.

Ключевые слова: композиты, фракталы, фрактальная размерность, функция распределения, уравнение Фоккера-Планка, модели, структурообразование.

СТРУКТУРНІ ЗМІНИ В БУДІВЕЛЬНИХ КОМПОЗИТАХ З ПОЗИЦІЇ ФРАКТАЛЬНОЇ ГЕОМЕТРІЇ

Довгань І.В., д.х.н., професор,
Колесніков А.В.,
Шаригін В.М., к.х.н., доцент,
Дмитренко М.П.,
Кириленко Г.А.
Одеська державна академія будівництва та архітектури
maryana06@ukr.net

Анотація. В роботі розглядається підхід до опису властивостей композиційних матеріалів за допомогою теорії фракталів. Пропонується до використання функція розподілу фрактальної розмірності, яка є ймовірносно-фрактальною характеристикою матеріалу на проміжних просторових масштабах. Функція розподілу фрактальної розмірності при такому підході є підкоряється рівнянню Фоккера-Планка. Пропонований математичний апарат дозволяє, зокрема, розглянути структуроутворення з позицій теорії катастроф новим методом, на основі функції розподілу фрактальної розмірності.

Ключові слова: композити, фрактали, фрактальна розмірність, функція розподілу, рівняння Фоккера-Планка, моделі, структуроутворення.

STRUCTURAL CHANGES IN THE CONSTRUCTION COMPOSITES WITH POSITION FRACTAL GEOMETRY

Dovgan I.V, Doctor of Chemistry, Professor,
Kolesnikov A.V,

Sharygin V.N, PhD, Assistant Professor,
Dimitrenko M.P.,
Kirilenko G.A.
Odessa State Academy of Civil Engineering and Architecture
maryana06@ukr.net

Abstract. The paper deals with an approach to the description of the properties of composite materials with the help of the theory of fractals. The necessity of the transition to quantitative characteristics of multifractal objects is substantiated. Besides widely used indicators as generalized fractal dimension and multifractal spectrum function it is proposed to use the distribution function of fractal dimension, which is probabilistic and fractal characteristic of the material in the intermediate spatial scales. Structure formation is considered from the standpoint of the theory of stochastic processes. The distribution function of the fractal dimension of this approach appears to vary over time and obeying the Fokker-Planck equation. This equation can be restored on the basis of experimental data obtained, for example, by materials images processing. The stationary distribution function allows us to calculate the effective Hamiltonian, which determines the coefficients of the Fokker-Planck equation. The proposed mathematical apparatus allows, in particular, to consider the structure formation from the point of catastrophe theory by new method, based on the distribution function of the fractal dimension.

Keywords: composites, fractals, distribution function of the fractal dimension, the Fokker-Planck equation, model, structure

Введение. Одной из характерных черт композиционных материалов на произвольной стадии их системного жизненного цикла является сложность его структуры и наличие элементов качественного и количественного самоподобия – масштабной инвариантности [1]. Это свойство характерно и для их идеализированных геометрических моделей – фракталов [2].

Цели и задачи. В процессе моделирования композитов и исследования влияния изменения их структурных характеристик на свойства возникает задача поиска *параметров порядка* – характеристики структуры, определяющей пространственно однородные области, закономерно связанные с процессами упорядочения и существенно влияющие на свойства материала. В «классических» системах статистической физики параметры порядка связаны со спиновыми характеристиками (ферромагнетики), поляризацией (сегнетоэлектрики), изменении в элементарной кристаллической ячейке. В рассматриваемых системах подобную физическую характеристику найти затруднительно.

С этой целью, однако, представляется возможным использовать геометрические характеристики – фрактальные размерности [2, 3]. Композитный материал ввиду сложности структуры является, вообще говоря, мультифрактальным объектом [4].

Объекты и методы исследования. Рассматриваемый в работе метод описания таких объектов представляется комбинированным – фрактальные характеристики, в простейшем случае – размерность подобия D_s (1):

$$D_s = -\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\ln N(\varepsilon)}{\ln(\varepsilon\varepsilon)} \qquad (1),$$

где N (ε) – число кубов с ребром ε, необходимых для покрытия какой либо определенной фазы материала как дисперсной системы (зерен и коллоидных частиц вяжущего, частиц наполнителя) либо границ раздела фаз (например, композит–капиллярно пористое полое пространство) рассматриваются как непрерывные полевые переменные. Во всех случаях (1) рассматривается в физически реализуемом пределе $\varepsilon \to \min$. Таким образом, рассматриваются участки материала на мезоскопических масштабах – они достаточно велики для определения фрактальной размерности и, в то же время, малы для формирования макроскопических свойств – эксплуатационных характеристик материала.

Результаты исследований. В качестве первичного шага рассматриваемой программы будем рассматривать разбиение материала на n одинаковых областей с описанными выше характеристиками. Определим фрактальную размерность (1) D_i, i=1..n, каждой из них. Рассмотрим гистограмму распределения D_i по m интервалам. На ее основе при $n \to \infty$ и $m \to \infty$, физически – достаточно больших, получим функцию распределения $f(D)$ фрактальной размерности. Такая характеристика мультифрактальных объектов наряду с обобщенной фрактальной размерностью D_q и функцией мультифрактального спектра $f(\alpha)$ [3] представляется полезной для описания свойств мультифрактальных объектов. Функция $f(D)$ материалов оказывается зависимой от параметров управления **a** (рецептурно-технологических факторов) и времени t (2):

$$f(D,a,t), \quad \int_{D1}^{D2} f(D,a,t)\,dD = 1 \tag{2}$$

Построенная на основе экспериментальных данных функция распределения размерностей применима для нескольких задач материаловедения. В частности, процесс структурообразования в композитах может быть рассмотрен с позиций кинетического уравнения для $f(D,a,t)$. Предположим, что эволюция $f(D,a,t)$ может быть рассмотрена как марковский процесс, задаваемый уравнением Фоккера-Планка. Произведем реконструкцию этого уравнения [5]. Используем приближение стационарности, будем считать, что быстрые процессы структурообразования завершились и структура «зафиксировалась». Пусть препарат твердеющего материала, в простейшем случае – относительно ровные участки сколов, подвергается оптической обработке с дальнейшим определением распределения фрактальных размерностей. В первом варианте используются изображения без фильтрации, а во втором – с фильтрацией, основанной на переходе к двумерному фурье-преобразованию (FFT), наложения фильтра-маски и обратному преобразованию. Это легко осуществляется в ряде программ обработки изображений, например, NihImage . В результате могут быть получены следующие функции распределения (3):

$$f(D,a), \quad f_{filt}(D,a) \tag{3}$$

Для этих двух распределений уравнения Фоккера-Планка запишутся как (4,5):

$$\frac{\partial}{\partial t} f(D,a,t) = \frac{\partial}{\partial D}\left[A(D,a) f(D,a,t)\right] + \frac{\partial}{\partial D}\left[B(D,a)\frac{\partial}{\partial D} f(D,a,t)\right] \tag{4}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f_{filt}(D,a,t) = \frac{\partial}{\partial D}\left[A(D,a) f_{filt}(D,a,t)\right] + B_{filt}\frac{\partial^2}{\partial x^2} f_{filt}(D,a,t) \tag{5}$$

Целью фильтрации является, как следует из (4, 5) частичное устранение шумовых эффектов с точностью до постоянной. Стационарные решения этих уравнений (одномерный случай) удается выписать в виде (6), для фильтрованных изображений в знаменателе $-B_{filt}$:

$$f(D,a) = f(D_0,a)\exp\left(-\int_{D_0}^{D}\frac{A(D',a)}{B(D',a)}dD'\right) \tag{6}$$

Введем эффективные гамильтонианы для обоих случаев (7):

$$H_{eff} = -\ln f(D,a); \quad H_{eff}^{filt} = -\ln f_{filt}(D,a) \tag{7}$$

Теперь коэффициенты A и B, соответствующие сносу и диффузии, могут быть определены с точностью до постоянной (8):

$$A(D,a) = B_{filt} \frac{\partial H_{eff}^{filt}}{\partial D}; \qquad B(D,a) = A(D,a) \Big/ \frac{\partial H_{eff}}{\partial D} \tag{8}$$

Уравнения (4, 5), реконструируемые на основе экспериментальных данных, позволяют рассматривать, в частности, временную эволюцию материала с позиций фрактальной геометрии.

Для выявления особенностей эволюции фрактальных свойств материала рассмотрим детерминированный предел – перейдем к градиентным системам [6].

Пусть

$$\frac{dD}{dt} = -\frac{\partial}{\partial D} \cdot V(D,a) = A(D,a) \tag{9}$$

Если $V(D,a)$ представляет собой полином 4-й степени, а его коэффициенты являются управляющими параметрами в уравнениях (4, 5, 9), то оказывается возможным дать качественную трактовку процессов схватывания, опирающуюся на теорию катастроф. Пусть распределение фрактальных размерностей можно рассматривать как медленно изменяющееся и «подстраивающееся» под значения управляющих параметров **a** – физико-химической переменной, соответствующей, например, степени гидратации. Рассмотрим последовательные этапы структурообразования (рис.1). Первый этап соответствует затворению вяжущего и образованию зародышей новой фазы. Этап 2 соответствует росту кристаллов-зародышей и образованию коагуляционной структуры. На этапе 3 появляется новое устойчивое структурное состояние (происходит бифуркация) с большей фрактальной размерностью – наблюдается рост перколяционного кластера частиц вяжущего и заполнителя. На этапе 4 его рост продолжается и происходит захват мелких кластеров, который завершается в состояниях 5,6, при которых образуется трехмерная сшитая структура материала.

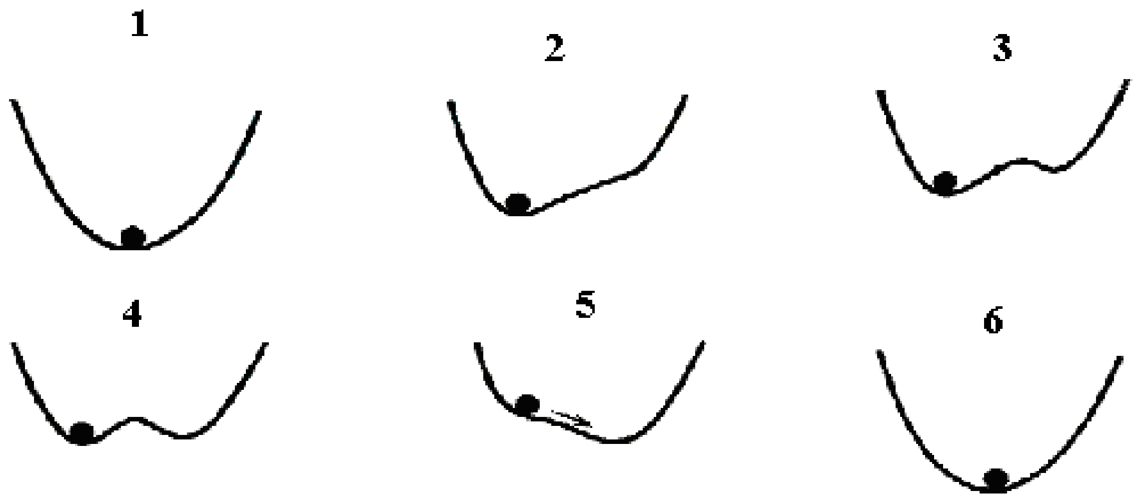

Рис.1. Качественная трактовка процесса структурообразования
с позиции теории катастроф

Выводы. Композитные материалы многих видов имеют структуру, сочетающую в себе вероятностно-статистическую природу, проявляющуюся в результате применения технологических приемов при их получении, и детерминированную, в частности – фракталоподобную, возникающую в результате процессов самоорганизации в период структурообразования. Функция распределения фрактальной размерности сочетает в себе элементы этих двух видов описания дисперсных систем и является естественной их характеристикой.

Таким образом, изучение распределения фрактальной размерности и ее временной эволюции на основе теории вероятностных процессов представляется полезным для анализа процессов структурообразования и, в частности, позволяют указать новый подход к качественному и количественному моделированию таких процессов.

Литература

1. Выровой В.Н. Композиционные строительные материалы и конструкции: структура, самоорганизация, свойства / В.Н. Выровой, В.С. Дорофеев, В.Г. Суханов. – Одесса, 2010. − 168 с.
2. Федер Е. Фракталы / Е.Федер. − М.: Мир, 1991. − 254 с.
3. Божокин С.В. Фракталы и мультифракталы / С.В. Божокин, Д.А. Паршин. – Ижевск: НИЦ, 2001. − 128 с.
4. Довгань И.В. Статистическое исследование поровой структуры теплоизоляционных композитов / И.В. Довгань, В.Я. Керш, А.В. Колесников, С.В. Семенова // Вісник ОДАБА. − Одеса, 2015. − вип. № 60. − С.86-90.
5. Климонтович Ю.Л. Построение уравнения Фоккера-Планка и управляющего уравнения на основе єкспериментальных данных. Н-теорема и S-теорема / Ю.Л. Климонтович. –Львов: препр. Институра физики конденсированных систем АН Украины, 1992. - 27 с.
6. Гилмор Р. Прикладная теория катастроф. Книга 1/ Р. Гилмор. − М: Мир, 1984. − 350 с.