

УДК 691

**ПРИМЕНЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ИНФОРМАЦИИ
ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ В СТРОИТЕЛЬНЫХ
КОМПОЗИТАХ**

Довгань И.В., д.х.н., профессор,
Колесников А.В., ст. преподаватель,
Семенова С.В., к.т.н., доцент,
Дмитренко М.П., ст. преподаватель

Одесская государственная академия строительства и архитектуры
svetas@inbox.ru

Аннотация. В статье рассматриваются модели процессов структурообразования строительных композиционных материалов. Показано, что композит на начальных этапах жизненного цикла удовлетворяет требованиям к информационным системам – системам, в которых осуществляется переход микроинформации (по Бриллюэну) в фиксированную макроинформацию (по Кастлеру). Рассмотрены геометрические и фрактальные характеристики структурных ансамблей композита. Предложена модель пространственного взаимодействия в сети структурных ансамблей за счет граничного согласования фрактальной размерности.

Ключевые слова: композиционные материалы, структурообразование, модели, информационные процессы, фракталы, фазовые превращения.

**ЗАСТОСУВАННЯ ДИНАМІЧНОЇ ТЕОРІЇ ІНФОРМАЦІЇ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ
СТРУКТУРОУТВОРЕННЯ В БУДІВЕЛЬНИХ КОМПОЗИТАХ**

Довгань І.В., д.х.н., професор,
Колесников А.В., к.т.н.,
Семенова С.В., к.т.н., доцент,
Дмитренко М.П., ст. викладач,

Одеська державна академія будівництва та архітектури
svetas@inbox.ru

Анотація. У статті розглядаються моделі процесів структуроутворення будівельних композиційних матеріалів. Показано, що композит на початкових етапах життєвого циклу задовольняє вимогам до інформаційних систем – систем, в яких здійснюється перехід мікроінформації (по Бріллюєну) в фіксовану макроінформацію (по Кастлеру). Розглянуто геометричні та фрактальні характеристики структурних ансамблів композиту. Запропоновано модель просторової взаємодії в сітці структурних ансамблів за рахунок граничного узгодження фрактальної розмірності.

Ключові слова: композиційні матеріали, структуроутворення, моделі, інформаційні процеси, фрактали, фазові перетворення.

**APPLICATION OF DYNAMIC INFORMATION THEORY FOR RESEARCH OF
STRUCTURAL FORMATION IN CONSTRUCTION COMPOSITES**

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

Abstract. Models of building composite materials structure formation processes are considered in the article. It is shown that the composite satisfies the requirements for information systems at the initial stages of the life cycle - systems in which the transfer of micro information in the Brillouin sense to fixed macro information in the Kastler sense takes place. When moving from statistical to dynamic layer, the system selects the direction and nature of the emerging structure. The geometric and fractal characteristics of the composite structural ensembles are considered. It is shown that, for the ensembles considered as disordered systems, the fractal dimension can play the role of an order parameter. It is shown that, based on the concepts of the morphogenesis of composite materials and the theory of phase transitions, it is possible to take into account the effects of intra-ensemble and inter-ensemble interactions, the latter manifesting themselves in a critical period given by the physical-chemical solidification process. A model of spatial interaction in a network of structural ensembles is proposed due to the boundary matching of the fractal dimension. The possibility of constructing a theory of phase transitions in disordered systems and, in particular, building composites based on fractal dimension as an order parameter, is shown. The effective Hamiltonian and Ginsburg-Landau equation is written out for the objects under consideration.

Keywords: composite materials, structure, models, information processes, fractals, phase transformations.

Введение. Одной из тенденций современного материаловедения является выявление причинно-следственных связей между требуемыми эксплуатационными характеристиками композиционных материалов и их структурой. Этому способствует иерархическое распределение структур по пространственно-временным масштабам. Для композитов на основе вяжущих материалов характерна способность перехода из одной масштабной области в другую, в которой характеристические периоды системных изменений более длительны. С таких же позиций возможно рассматривать формирование структуры композита – структурообразование.

Поскольку структурообразование – неравновесное явление, к нему применимы подходы на основе методов теории неравновесных процессов, физической кинетики и синергетики и, в частности, теории информации в ее динамическом аспекте [1, 2]. Применение теории информации в этой области позволяет с новых позиций рассмотреть процессы структурообразования композитов.

Цели и задачи исследования. Рассмотреть процессы структурообразования композитных материалов как явления в информационной системе, связанные с образованием структурных особенностей. Разработать схему параметризации структурных характеристик формирующегося композита на основе фрактальной размерности. Построить физическую модель взаимодействия структурных ансамблей композиционных материалов за счет изменения их геометрических и фрактальных характеристик.

Анализ последних исследований. Теория композиционных материалов может базироваться на двух принципиально различных подходах: исторически более раннем приближении сплошной среды и альтернативном, основанном на исследовании его структуры [3]. Один из вариантов структурного описания может быть построен на основе геометрии и физики фрактальных систем [4]. На основе представления о иерархии пространственных масштабов в композитных материалах возможно построение комбинированного описания – статистического [5] и континуального, в котором фрактальная размерность присутствует как полевая переменная, играющая роль параметра порядка. Рассмотренная стратегия исследования композитов может быть существенно обогащена элементами динамической теории информации и физической теорией морфогенеза [6] материальных сред.

Результаты исследований. Исходным постулатом динамической теории информации является принципиальное различие так называемой микроинформации I^{mic} , например, информации о текущем значении координат и импульсов молекул (по Бриллюэну) и макроинформации, которая фиксируется и запоминается системой (по Каствелу). Взаимодействие этих двух видов информации осуществляется в информационных системах – динамических системах, фазовое пространство которых расслоено на статистическую (эргодическую) и динамическую области. В статистической области за счет неустойчивости движения происходит непрерывная смена одного состояния другим – она в некотором смысле эквивалентна однородному состоянию. В динамической области происходит фиксация информации за счет попадания состояния системы в области притяжения – аттракторы.

Для микроинформации выполнен принцип Бриллюэна эквивалентности информации и физической энтропии [1] (1):

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{\max} &= I_{\max}^{mic} = \log_2 W \\ \tilde{S} + I^{mic} &= S_{\max} = I_{\max}^{mic} \end{aligned} \quad (1)$$

где $\tilde{S} = S(k_B \ln 2)^{-1}$ – энтропия в битах.

В динамической части информационной системы происходит фиксация одного из N состояний, где N , как правило, невелико. Таким образом, информационная емкость системы составляет (2):

$$I_{\max} = \log_2 N. \quad (2)$$

Для рецепции информации и ее хранения необходимо произвести некоторую работу, часть которой тратится на переход в одно из устойчивых состояний, другая, большая, на увеличение энтропии системы. Поскольку информационная система – единое целое и рассмотренное выше расслоение приблизительно, при переходе из статистического в динамический слой происходит рецепция (фиксация) – часть микроинформации переходит в макроинформацию.

Типичный пример информационной системы – бильярд с лунками [2]. Сразу после удара шар перемещается в области статистического слоя, затем переходит в динамический слой – притягивается и падает в одну из лунок. Здесь происходит фиксация информации (3):

$$I=0 \rightarrow I=I_{\max}. \quad (3)$$

Однако это требует затраты работы ΔE и перехода энергии в теплоту. При этом возрастает физическая энтропия системы (4):

$$\Delta S = \frac{\Delta E}{T}. \quad (4)$$

Прирост энтропии всегда превышает фиксированную информацию (5):

$$\Delta S \gg I_{\max}. \quad (5)$$

Благодаря диссипативным свойствам происходит переход к устойчивым состояниям, время жизни которого τ определяется высотой потенциального барьера между ними (6):

$$\tau = \frac{h}{kT} \exp \frac{U}{kT}. \quad (6)$$

Строительный композиционный материал в процессе структурообразования вполне удовлетворяет требованиям к информационной системе, поэтому к нему также применимо информационное описание рассматриваемого вида.

Решение рассмотренной выше задачи необходимо вести исходя из представлений о структурных ансамблях, согласно которым в качестве основного структурного элемента строительного композита могут выступать вероятностно организованные пространственные единицы композиционного материала, в которой в органической взаимосвязи и взаимозависимости сосуществуют следующие структурные элементы, актуальные для

изучаемого материала:

1. Минеральное вяжущее в мелкокристаллической и коллоидных формах.
2. Вяжущее в кристаллической форме.
3. Зерна наполнителя.
4. Частицы минеральных добавок.
5. Полимерное связующее.

Элементы пористой структуры – поры различных типов и их границы. Следует отметить, что материал может быть рассмотрен как компонент структуры, заполняющий промежутки между порами, границами раздела и трещинами.

6. Технологические трещины и внутренние границы раздела.
7. Области слабой связанности.

8. Слои связанной и свободной воды, включающие также и молекулы ПАВ пластификатора.

Все эти компоненты структуры и их основные формы взаимодействия представляются известными [7]. Несмотря на разнородность включаемых объектов, они могут быть изучены только совместно и образуют элементарную структуру системы композитного материала. Связываясь друг с другом в пространственную трехмерную сеть, такие ансамбли образуют уже макроскопическую структуру материала.

В процессе структурообразования рассматриваемые ансамбли подвергаются видоизменениям – морфогенетическим превращениям сложной физико-химической природы. Поскольку речь идет о сложной системе, процессы в которой в своем сочетании обладают значительным разнообразием, представляется полезным, временно отвлекаясь от их природы, обратиться к их феноменологическим моделям. Здесь представляется полезным некоторая аналогия с моделями биологического формообразования. Рассмотрим так называемый эпигенетический ландшафт Уоддингтона [6] – модель биологического формообразования, имеющую общесистемный характер (рис.1).

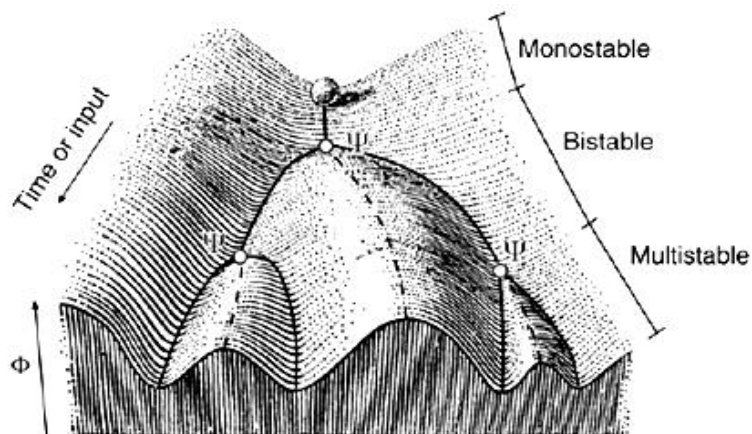


Рис.1. Эпигенетический ландшафт процесса структурообразования, Ψ– точки бифуркации

По оси абсцисс здесь рассматривается некоторая (позднее уточняемая) количественная характеристика структуры материала – параметр порядка, по оси ординат – свободная энергия. Исходное состояние соответствует однородной системе с учетом пространственных флуктуаций. Перемешивание композитного вяжущего теста играет роль статистического (эргодического) слоя предполагаемой информационной системы – в ней по мере перемешивания композита происходит смена микроструктуры – переход от одного состояния к другому. Эти переходы осуществляются вблизи устойчивого состояния, символически изображенного вверху рис. 1. Далее внешнее воздействие снимается и начинаются процессы структурообразования. Здесь рассматриваются в основном медленноотвердеющие вяжущие на основе цемента, а также гипса с добавлением замедлителей схватывания, поскольку процесс

структурообразования носит релаксационный характер и раннее возрастание коэффициента структурной вязкости не позволяет им проявиться в полной степени. У структурообразования много общего с биологической дифференциацией – с течением времени благодаря химическим процессам форма ландшафта изменяется – появляется возможность формирования разных структурных ансамблей, что соответствует точкам бифуркации на рис. 1. Здесь осуществляется переход системы из статистического в динамический слой и притяжение в области соответствующих минимумов потенциальной функции. Отметим, что вблизи точек бифуркации формируются области высокой чувствительности к внутренним флуктуациям и внешним воздействиям. Таким образом, согласно соотношениям (4-5) осуществляется переход большей части работы химических сил (реакции гидратации) в энтропию системы, часть энергии уходит на фиксацию структурных особенностей. В итоге (2) приобретает смысл структурной информации (7):

$$I_{\max} = \log_2 N_{str}. \quad (7)$$

Для решения инженерных задач получения материала с заданными свойствами рассмотренная выше общая схема нуждается в уточнении и математическом оформлении.

В частности, принципиальной проблемой предлагаемой выше концепции является выбор параметра порядка. Если в случае известных классических систем выбор параметра порядка осуществлялся на основании соображений симметрии, то для структурных ансамблей, представляющих собой «неупорядоченную» многокомпонентную систему, в качестве такого параметра могут выбираться размерности Реньи (мультифрактальные размерности) или, в простейшем случае, клеточная (8) и корреляционная [8]:

$$D = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\log(n(r))}{\log\left(\frac{1}{r}\right)}, \quad (8)$$

где $n(r)$ – число кубов (либо квадратных клеток на плоскости) с ребром r , покрывающих структурный ансамбль рассматриваемого материала.

Фрактальную размерность возможно использовать в качестве параметров порядка при рассмотрении фазовых переходов. Будем упрощенно предполагать, что физико-химические процессы задают значения параметров управления для соответствующей потенциальной функции и что они протекают достаточно медленно (композиты на медленно твердеющих вяжущих). При этом структурные составляющие успевают существенно релаксировать. Пусть $\eta = D_0 - D$, где D_0 – исходная фрактальная размерность вяжущего теста. По аналогии с теорией фазовых превращений эффективный гамильтониан ($H_{эф}$) может быть определен как (9):

$$H_{эф} = (\alpha\eta^2 + \frac{1}{2}\beta\eta^4 + \dots)V, \quad (9)$$

где коэффициент α зависит от физико-химических переменных, $\beta > 0$.

Наиболее вероятные состояния системы соответствуют минимумам эффективного гамильтониана (10):

$$\frac{\partial H_{эф}}{\partial \eta} = 0. \quad (10)$$

Это соответствует (11):

$$\eta(\alpha + \beta\eta^2) = 0. \quad (11)$$

При $\alpha > 0$ (11) имеет одно решение $\eta = 0$, соответствующее исходному устойчивому состоянию (затворение вяжущего теста). При $\alpha < 0$ наблюдается три решения – происходит бифуркация (рис. 1). Исходное нулевое решение становится неустойчивым, ему соответствует максимум $H_{эф}$. Два ответвляющихся решения – $\eta = \pm \frac{\alpha}{\beta}$.

Таким образом, фрактальная размерность в процессе структурообразования (незначительно) понижается либо повышается по сравнению с исходным значением. Будем

далее предполагать, что $D(r)$ способна плавно изменяться в пространстве. Здесь важно отметить, что благодаря иерархии пространственных масштабов фрактальную размерность возможно рассматривать как локальную (ее определение, например, методом подсчета клеток, осуществляется на малых масштабах). Пусть $\eta(r) = D_0 - D(r)$. Эффективный гамильтониан может здесь по аналогии с теорией фазовых переходов (12) включать дополнительное градиентное слагаемое [9]:

$$H_{\text{эф}} = \int \left[\alpha \eta^2 + \frac{1}{2} \beta \eta^4 + g |\nabla \eta|^2 + \dots \right] dV \quad (12)$$

Следует особо остановиться на природе градиентного слагаемого в (12). Структурные ансамбли изменяют свой характер в результате процесса релаксации относительно самостоятельно. Вблизи точки $\alpha = 0$, которой соответствует определенный период структурообразования, соответствующие процессы, согласно приводимой здесь теории, могут синхронизироваться благодаря граничным условиям. По общим границам происходит процесс согласованных структурных изменений, отражающихся в изменениях фрактальных размерностей (рис. 2).

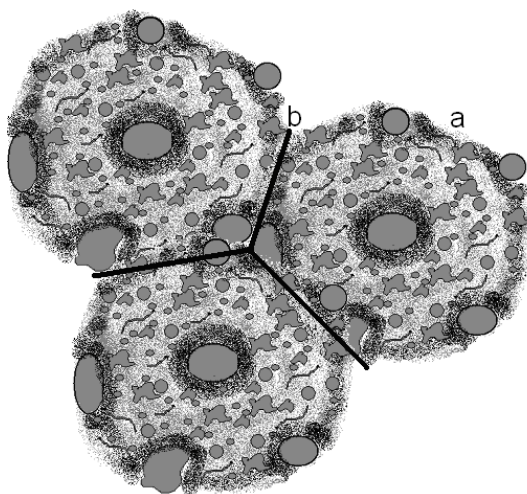


Рис.2 Согласование фрактальных размерностей:
а – структурные ансамбли со своими составляющими, б – области структурного взаимодействия

Этим можно объяснить наблюдаемые в некоторых экспериментах феномены дальнего действия и синхронизации процессов структурообразования в условии существенной вязкости композитной смеси. Наиболее вероятным состояниям соответствуют минимумы функционала (12), определяемые через обращение в нуль вариационной производной (13):

$$\frac{\delta H_{\text{эф}}}{\delta \eta(r)} = 0. \quad (13)$$

Уравнение (13) необходимо рассматривать с учетом граничных условий, что приводит к возникновению в общем случае неоднородных состояний. Уравнение структурной релаксации в соответствии с рассмотренной теорией выписывается как (14) и, в явной форме, (15):

$$\dot{\eta}(r, t) = -\gamma \frac{\delta H_{\text{эф}}}{\delta \eta}(r, t), \quad (14)$$

$$\dot{\eta} = -\gamma [\alpha \eta + \beta \eta^3 - g \Delta \eta], \quad (15)$$

γ – постоянная релаксации, определяемая характером изменения физико-химических переменных.

Рассматриваемый процесс релаксации – форма фиксации макроинформации (3, 7) с учетом возрастания общей энтропии системы с соотношением (5).

Таким образом, согласно приведенной выше теории, в системе композитного вяжущего теста осуществляется «выбор» (в смысле 14 и рис. 1) структуры с несколько различными значениями фрактальной размерности. Он может быть согласованным либо несогласованным пространственно благодаря внешнему управляющему воздействию. Более корректное описание структурообразования требует обязательного учета флуктуаций, что может быть осуществлено по аналогии с физическими фазовыми переходами.

Выводы. Разработан теоретический подход к изучению проблем структурообразования строительных композитов, обладающий следующими особенностями:

1. Структурообразование композиционных материалов возможно рассматривать с позиции информационных систем и их моделей. Непосредственно структурообразованию соответствует переход состояния системы из статистического в динамический слой.

2. Процессы структурообразования происходят в трехмерной системе структурных ансамблей. Взаимодействие внутри ансамбля относительно автономно, межансамблевые взаимодействия наиболее ярко проявляются в определенный период, характеризующийся высокой чувствительностью к внешним воздействиям.

3. Фрактальная размерность может быть выбрана в качестве мезоскопического параметра порядка.

4. Для нее может быть построена теория, аналогичная теории фазовых переходов в физических системах.

Рассмотренные выше теоретические представления представляются полезными для описания структурообразования в сложных многокомпонентных системах, таких, как строительные композитные материалы. Кроме этого, на их основе может быть построен алгоритм анализа структуры строительных композитов по их изображениям и прослежена взаимосвязь этой структуры с эксплуатационными характеристиками, например, прочностью.

Литература

1. Чернавский Д.С. Синергетика и информация (динамическая теория информации). Серия "Синергетика: от прошлого к будущему". Изд.2 / Д.С. Чернавский. – URSS, 2004. – 288 с.
2. Романовский Ю.М. Математическая биофизика / Ю.М. Романовский, Н.В. Степанова, Д.С. Чернавский. – М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1984. – 304 с.
3. Суханов В.Г. Структура материала в структуре конструкции / В.Г. Суханов, В.Н. Выровой, О.А. Коробко. – Одесса: Полиграф, 2016. – 244 с.
4. Герега А.Н. Моделирование кластерных структур в материале: силовые поля и дескрипторы / А.Н. Герега // Физическая мезомеханика. – 2013. – Т. 16. – №5. – С. 87-93.
5. Довгань И.В. Структурные изменения в строительных композитах с позиции фрактальной геометрии / И.В. Довгань, А.В. Колесников, В.Н. Шарыгин, М.П. Дмитренко, Г.А. Кириленко // Вісник Одеської державної академії будівництва та архітектури. – 2016. – № 62. – С. 57-60.
6. Polak P. Cell-of-origin chromatin organization shapes the mutational landscape of cancer / P.Polak, R. Karlić, A.Koren and others // Nature 518, 2015 – PP. 360–364.
7. Выровой В.Н. Композиционные строительные материалы и конструкции: структура, самоорганизация, свойства / В.Н. Выровой, В.С. Дорофеев, В.Г. Суханов. – Одесса, 2010. – 168 с.
8. Федер Е. Фракталы / Е. Федер. – М.: Мир, 1991. – 254 с.
9. Полак Л.С. Самоорганизация в неравновесных физико-химических системах / Л.С. Полак, А.С. Михайлов. – М.: Наука, 1983. – 287 с.

Стаття надійшла 18.04.2017