УДК 539.3.01

А.И. Деревянко

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В ПРОЦЕССАХ АГРЕГАЦИИ

Введение. Процесс агрегации (формирования устойчивых структурных образований) в среде хаотически движущихся частиц можно рассматривать как процедуру чередующихся во времени и пространстве геометрических фазовых переходов. При этом согласно определению, данному в [2], фаза – это однородная часть термодинамической системы, то есть тело, физические и химические свойства которого во всех точках одинаковы и не зависят от количества вещества. Фазы отделены одна от другой поверхностями раздела. Твердое состояние, жидкость, пар – привычные примеры разных фаз одного и того же вещества. В то же время различные фазы одного и того же вещества совсем не обязательно существуют в разных агрегатных состояниях (графит и алмаз).

В свою очередь, в основе геометрического фазового перехода лежит процесс образования структур, характеризующихся новыми топологическими свойствами, не обязательно обусловленными изменением агрегатного состояния вещества [3]. Принципиально важным при этом есть то, что переход от одной топологической структуры к другой предопределяется наличием промежуточной фазы – хаоса, предполагающей полное разрушение старой структуры, минуя стадию ее эволюционной трансформации.

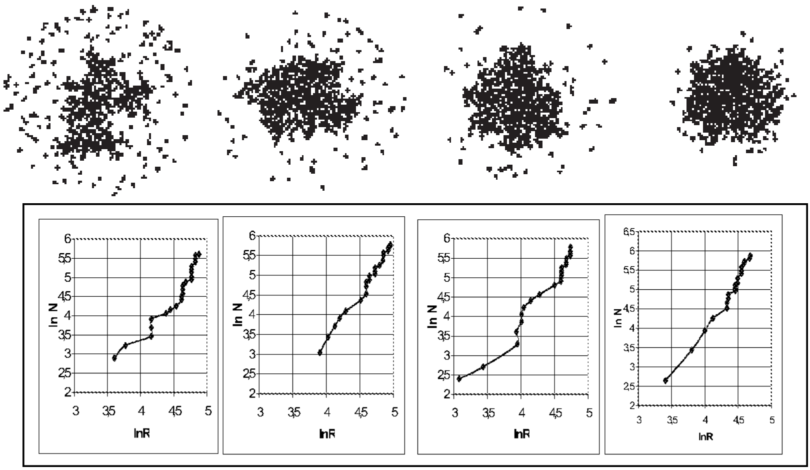
В работах [3–6] достаточно подробно рассмотрена статистическая концепция формирования структур, однако совершенно игнорируется тот факт, что хаотическое движение порождается детерминированными нелинейными системами.

Постановка задачи. Ставится задача компьютерного моделирования динамики формирования устойчивых структурных образований в распределенных хаотических системах с последующим исследованием на полученной модели влияния на параметры фрактально-кластерных образований характеристик среды (условий) формирования.

Основная часть. Рассмотрим геометрический фазовый переход как процесс агрегации частиц совершающих хаотические колебания на плоскости.

В процессе диффузии, вызванной эффектом фазовой синхронизации элементов распределенной хаотической колебательной системы, синергетические переходные процессы приводят к образованию устойчивых пространственных структур, которые растут, оставаясь самоподобными. Такая модель формирования, например тонкой структуры наноматериалов, создает предпосылки для использования фрактально-кластерного анализа их микроструктур [4], основным свойством которых является пространственная (пространственно-временная) масштабная инвариантность [5].

Как правило, в имитационных моделях диссипативного процесса "слипания" частиц их количество определяется априори. При таком и прочих равных условиях роста динамического фрактального кластера, фрактальная размерность остается неизменной во времени, в то время как в случае формирования кластеров в ограниченном пространстве (с непроницаемыми границами), количество свободных частиц уменьшается. Это, в свою очередь, приводит к многомодовой функции распределения массы кластеров.



а) $\chi = 10$, $D = 1.7299$; б) $\chi = 40$, $D = 2.3101$; в) $\chi = 50$, $D = 2.1794$; г) $\chi = 100$, $D = 2.6062$.

Рис. 1 – Влияние коэффициента диффузии χ на фрактальную размерность D кластера.

Заметное влияние на фрактальную размерность кластера, которая характеризует рыхлость его структуры, оказывает коэффициент диффузии свободных частиц (рис. 1). Для фрактального кластера число частиц в кластере связано с его радиусом R соотношением [1]:

$$N = \lambda \cdot (R/R_0)^D, \tag{1}$$

где λ – коэффициент, определяющий вид упаковки частиц в кластере, R_0 – радиус этих частиц (предполагается неизменным), D – размерность кластера.

Для описания топологических свойств фрактального множества F, вложенного в евклидово пространство E^n, введем геометрическую характеристику фрактала – индекс связности [8]:

 ISSN 1562-9945

$$\Theta = 2\left(d_{\Theta} - 1\right)\ \theta = 2(d_{\theta} - 1), \tag{2}$$

где d_θ имеет смысл хаусдорфовой размерности геодезических линий на F.

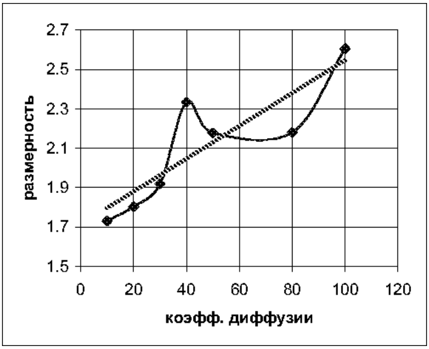


Рис. 2 – Зависимость фрактальной размерности от коэффициента диффузии

Индекс связности θ равен нулю для гладких множеств, включая евклидовы пространства $\boldsymbol{E}^n$ при $n > 1$, т.к. в этом случае $d_\theta = 1$ то для таких множеств $\theta = 0$.

Для фрактального множества F, вложенного в пространство $\boldsymbol{E}^n$ при $n \geq 2$, значение индекса θ определяется условием линейной связности F и топологией пустот, образуемых множеством F. При этом, если F не содержит внутренних пустот (F – связное множество), то $\theta\{F\} = 0$, а при их наличии $\theta > 0$. Для F – фрактального линейно связного множества $d_\theta > 1$ и $\theta > 0$, а для не связного: $d_\theta < 1$ и $\theta < 0$. Как видно, знак θ выступает индикатором линейной связности (несвязности) фрактального множества F.

Определим значение хаусдорфовой размерности геодезических линий d_θ в следующем виде

$$d_\theta\left(\chi\right) = \frac{d^{D}(\chi)}{d\chi} + 1, \tag{3}$$

где D – фрактальная размерность множества F, зависящая от параметра χ. Появление в выражении (3) слагаемого, равного 1, обусловлено наличием нефрактальных линий.

Фрактальная размерность, как известно [1], является интегральной характеристикой растрового изображения, обусловленной топологией изображения, поэтому любые изменения структуры изображения вызывают изменение значения D. При этом скачок значения фрактальной размерности связан с моментом возникновения особенностей топологии. Поэтому полученная зависимость (рис. 2) демонстрирует разрывный характер фрактальной размерности при $\chi = 40$, что соответствует $\theta = 0$ и вызвано существованием в кластере "пустот" при $\chi < 40$ и их исчезновением при $\chi > 40$.

В процессе формирования нескольких кластеров (рис. 3) между ними образуется граница за счет градиента плотности свободных частиц. Это служит иллюстрацией условий роста кластеров в локальной области при геометрическом фазовом переходе [7].

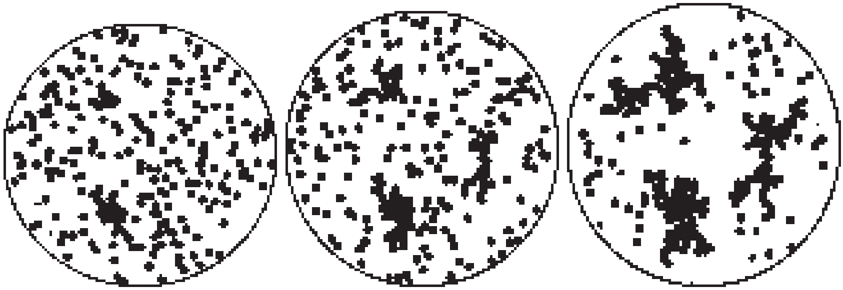


Рис. 3 – Одновременный рост трех фрактальных кластеров

Следует отметить, что эта граница наблюдалась только на средней фазе моделирования роста кластеров и в дальнейшем разрушалась. Такая неустойчивость границы связана с отсутствием в алгоритме моделирования условия прекращения роста кластера, который продолжается до "приклеивания" всех свободных частиц к кластерам.

Выводы. Разработанная компьютерная модель формирования устойчивых структурных образований в среде хаотически движущихся частиц позволила получить ряд эффектов, недоступных для наблюдения в случае использования модели ограниченной диффузной агрегации [6].

Предложенный метод определения индекса связности по значению фрактальной размерности позволяет численно оценить критическое значение параметра χ, связанное с возникновением внутренних пустот в кластере. Программная реализация алгоритма этого метода является частью программного комплекса по обработке растровых изображений микрошлифов металлических сплавов.

Литература

1. Федер Е. Фракталы. – М.: Наука, 1991. – 136 с.
2. Физическая энциклопедия. – М.: "Советская энциклопедия", 1980.
3. Кулак М.И. Фрактальная механика материалов. Мн.: Выш.шк. 2002. – 304 с.
4. Structure Formation Model for Hardening Process of Metals / Ju. N. Taran, A. I. Mikhalyov, A. I. Derevjanko, T. E. Vlasova, V. E. Khrychikov //5-th International Symposium of Croatian Metallurgical Society

 ISSN 1562-9945

Materials and Metallurgy (SCMS'2002, June, 23-27, 2002). – Metallurgy. –Vol. 41. – №3, 2002. - P. 226.

5. Смирнов Б.М. Физика фрактальных кластеров. - М.: Наука, 1991.– 136 с.
6. Meakin Paul. Fractals, scaling and growth far from equilibrium. Cambridge University Press,1998. - 663 p.
7. Зеленый М.Л., Милованов А.В. Фрактальная топология и странная кинетика // УФН – 2004. – Т. 174, 8. - С. 809-852.