УДК 539.3.01

А.И.Михалев, А.И. Деревянко

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

Введение. В работе рассмотрена задача компьютерного моделирования геометрического фазового перехода, как динамического процесса агрегации (формирование устойчивых структурных образований) в среде хаотически движущихся частиц. Объектом исследования являются растровые изображения металлоструктур, которые характеризуются контурами – границами структурных образований, полученными сечением плоскостью 3-мерных металлических материалов. Отличительной особенностью таких объектов является подобие фрагментов изображения (скейлинг), что рассматривается в работе как проявление фрактальных свойств [1].

Анализ публикаций. Следуя определению, данному в [2], будем считать, что фаза - это однородная часть термодинамической системы, то есть тело, физические и химические свойства которого во всех точках одинаковы и не зависят от количества вещества. При этом, фазы отделены одна от другой поверхностями раздела. Твердое состояние, жидкость, пар - привычные примеры разных фаз одного и того же вещества. Их физические характеристики, например плотность, существенно отличаются и определяют агрегатные состояния. Однако различные фазы одного и того же вещества совсем не обязательно существуют в разных агрегатных состояниях (графит и алмаз).

Геометрический фазовый переход связан с образованием структур, характеризующихся новыми топологическими свойствами, и не обусловлен изменением агрегатного состояния вещества [3]. При этом переход из состояния с одной топологической структурой к состоянию с другой топологической структурой предопределяет наличие промежуточной фазы – хаоса, предполагающей полное разрушение старой структуры, и не допускает ее трансформирование.

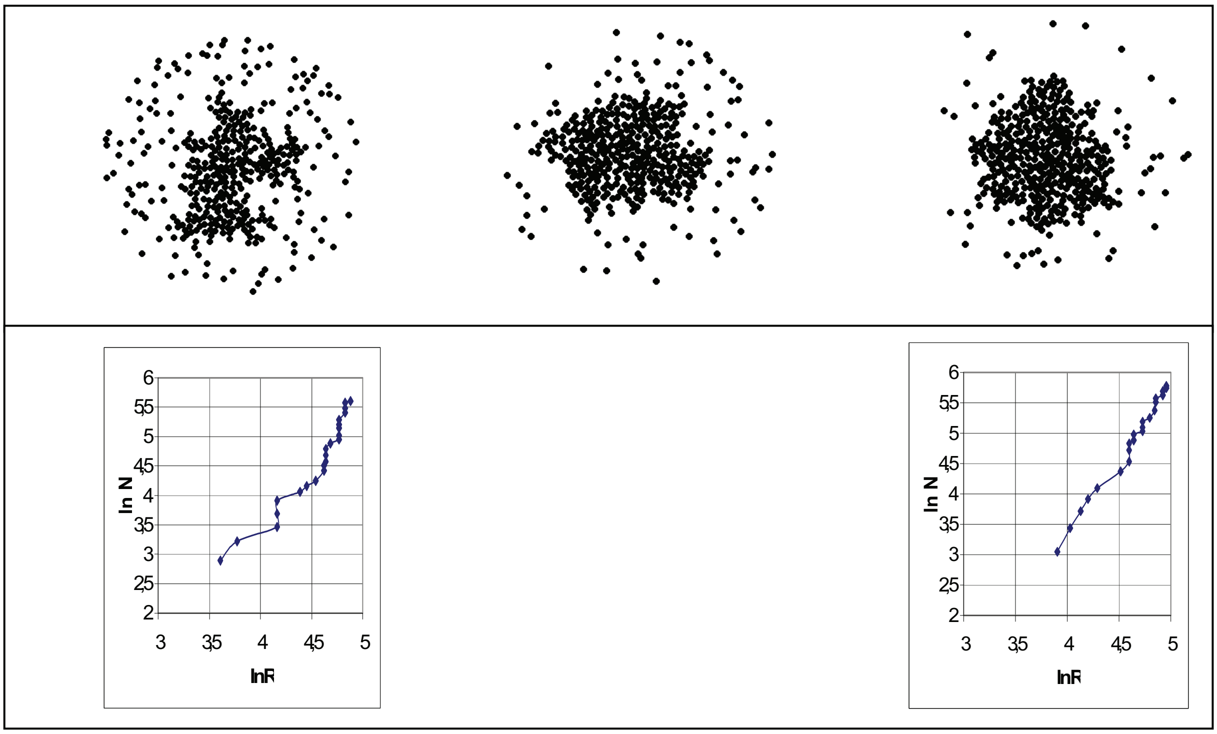
Вопросам формирования фрактальных структур в результате геометрических фазовых переходов посвящена многочисленная литература [3-6], в которой рассмотрена статистическая концепция. Таким образом, игнорируется основной тезис хаотической динамики: хаотическое движение порождается детерминированными нелинейными системами.

Постановка задачи. Настоящая работа посвящена вопросам моделирования динамики формирования устойчивых структурных образований в распределенных хаотических системах. Основной задачей работы является исследование на разработанной компьютерной модели влияния характеристик среды (условий) формирования на параметры кластерных образований, как результата геометрического фазового перехода.

Основная часть. Рассмотрен этап геометрического фазового перехода – процесс агрегация 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 микроструктуры [4], основным свойством которых является пространственная (пространственно-временная) масштабная инвариантность [5].

В реализованной имитационной модели диссипативного процесса "слипания" частиц, их количество определяется до начала эксперимента. Для динамического фрактального кластера, при сохранении условий роста, фрактальная размерность остается неизменной во времени, однако в случае формирования кластеров в ограниченном пространстве с непроницаемыми границами, количество свободных частиц уменьшается, что приводит к многомодовой функции распределения массы кластеров.



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

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

 ISSN 1562-9945

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]

$$N = \lambda \cdot (R / R_0)^D, \qquad (1)$$

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]

$$\theta = 2(d_{\theta}1), \qquad (2)$$

где d_θ имеет смысл хаусдорфовой размерности геодезических линий на F.

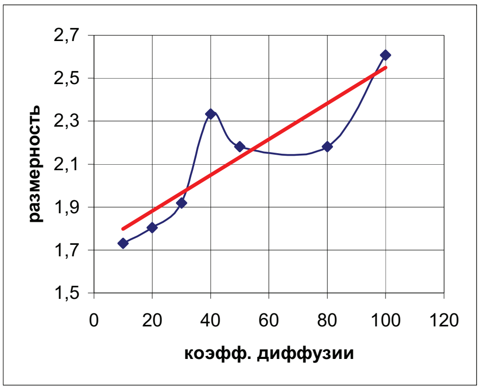


Рисунок 2 - Зависимость фрактальной размерности от коэффициента диффузии

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

Для фрактального множества F, вложенного в евклидово пространство E^n при n ≥ 2, значение индекса θ определяется условием линейной связности F и топологией пустот, образуемых множеством F. При этом, если F не содержит внутренних пустот, 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 имеет место условие $d_\theta < 1$ и $\theta < 0$. Следовательно, знак θ выступает индикатором линейной связностьи (несвязности) фрактального множества F.

Определим значение хаусдорфовой размерности геодезических линий d_θ в следующем виде

$$d_\theta(\chi) = \frac{d\ D(\chi)}{d\chi} + 1. \qquad (3)$$

где D фрактальная размерность множества *F*. При этом значение D является функцией параметра. Появление в выражении (3) слагаемого равного 1 обусловлено значением размерности нефрактальных линий на плоскости.

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 χ=40, что соответствует θ=0 и вызвано существованием в кластере «пустот» при χ<40 и их исчезновением при χ>40.

Для вычисления фрактальной размерности в разработанной программе выделения контуров использовался метод «Triangular prism surface area» [9], предназначенный для обработки растрового изображений в градациях серого. 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].

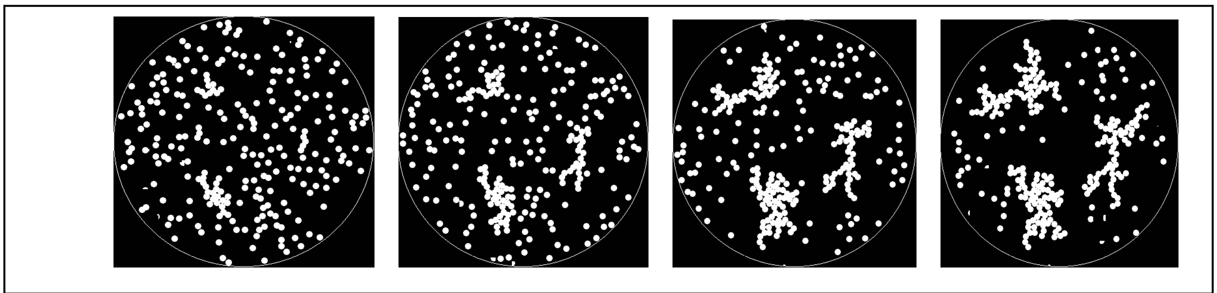


Рисунок 3 – Одновременный рост трех фрактальных кластеров

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 роста кластеров 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

 ISSN 1562-9945

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 Materials and Metallurgy (SCMS'2002, June, 23-27, 2002). – Metallurgy. –Vol. 41. – N 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. Баландин Г.Ф. Состояние и перспективы математической теории формирования отливки // Литейное производство. – 1980. -№1. - С. 6-9.
8. Зеленый М.Л., Милованов А.В. Фрактальная топология и странная кинетика
   . // УФН – 2004. – Т. 174, №8. - С. 809-852.
9. Фрактальная модель роста зерен при затвердевании сплавов / Таран Ю.Н., Михалев А.И., Хрычиков В.Е., Деревянко А.И. //Современные проблемы металлургии. Научные труды Нац. металл.академии Украины. - Том 3. - 2001. - С. 414-421.

Получено 21.03.2006 г.

УДК 004.9268:539:621

А.И. Михалев, В.В. Помулев

ВОПРОСЫ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СТРУКТУР МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ КЛАСТЕРОВ

Введение

Благодаря ряду работ последнего десятилетия уже не вызывает сомнений оправданность и эффективность применения фрактальных моделей для описания металлоструктур и процессов их образования [1-6].