

А.М. Ніколенко, А.А. Позняк

## Теоретико-множинна модель структури однонаправленого волокнового композита

*Українська державна академія залізничного транспорту, 61177, Харків-177*

Проаналізовано можливості та шляхи статистичного опису структури однонаправленого волокнового композита. Розроблено відповідну теоретико-множинну модель структури таких матеріалів та одержано загальні співвідношення, що описують взаємозв'язки між макроскопічними та субмезоскопічними параметрами структури.

**Ключові слова:** однонаправлений волокновий композит, теоретико-множинна модель, структура, мезоскопічна невпорядкованість.

*Стаття постуила до редакції 11.05.2005; прийнята до друку 30.05.2005.*

### Вступ

В фізиці твердого тіла та в фізичному матеріалознавстві знання про внутрішню архітектуру матеріалів складають підґрунтя досліджень їх структури та властивостей. З прагматичного погляду, ці знання відображають внутрішній зміст центральної ланки ланцюга “технологія - структура – властивості” [1]. Це стосується всіх матеріалів без винятку, проте дослідження та адекватний аналіз внутрішньої архітектури матеріалів набувають непересічного значення, коли ці матеріали відносяться до так званих мезоскопічного невпорядкованих середовищ [2], якими є зокрема однонаправлені волокнові композити.

Розглянемо однонаправлений волокновий композит, окремі волокна якого з метою спрощення аналізу будемо розглядати тотожними циліндрами та проаналізуємо особливості еволюції його структури в процесі ущільнення. Поперечний переріз композита площиною, нормальною до осей волокон, являє собою хаотичне пакування сфер в  $R^2$ . Це свідчить про доцільність модельного аналізу внутрішньої архітектури таких матеріалів саме в рамках застосування мезоскопічних моделей їх структури [1]. У довільний момент еволюції структури системи в ній можуть спостерігатися частинки зі значення координаційного числа від 1 до 6. Тобто слід розглядати мезоскопічну ієрархічну платформу-субмезоструктуру, за якою досліджувана система є середовищем частинок (двовимірних сфер), що може розглядатися як множина, розділена на підмножини. Характерною ознакою кожної підмножини є цілком конкретне координаційне число. Отже процес

ущільнення супроводжується обміном частинками між зазначеними підмножинами і асоціюється зі збільшенням середнього координаційного числа. З іншого боку, частинки з підвищеною координацією повинні групуватися в кластери, реалізуючи тим самим у макросистемі області підвищеної густини. На початку ущільнення ці області можна розглядати як флуктуації щільності, проте з часом ці флуктуації стабілізуються і почнуть домінувати у системі як зародки репрезентативних елементів ієрархічної платформи, що виникла і розвивається (мезоструктури). За макроскопічною ієрархічною платформою, хаотичне пакування частинок є двохфазною системою, дві окремі фази якої складають частинки та пори. Таким чином, застосування мезоскопічного опису до аналізу структури досліджуваної системи дозволяє послідовно вивчити особливості внутрішньої архітектури її з погляду трьох ієрархічних рівнів - субмезоструктури, мезоструктури та макроструктури.

Метою даної роботи була розробка базової теоретико-множинної моделі структури однонаправленого волокнового композита, орієнтованої на теоретичний аналіз особливостей внутрішньої архітектури його з погляду субмезоструктурної та мезоструктурної ієрархічних платформ.

### I. Субмезоструктурний опис системи

Нехай система хаотичного пакування  $N$  частинок, кожна з яких має поверхню  $a$ , займає поверхню  $A$ . З макроскопічної точки зору, основними

макропараметрами структури системи є середня відносна поверхнева щільність  $\langle \sigma \rangle$ :

$$\langle \sigma \rangle \equiv \frac{Na}{A} \quad (2.1)$$

та середнє значення координаційного числа  $\langle \lambda \rangle$ . Для даного випадку еволюцію структури системи можна описати в термінах зміни макропараметра  $\langle \sigma \rangle$ :

$$\delta \langle \sigma \rangle = \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial A} \delta A + \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial N} \delta N + \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial a} \delta a. \quad (2.2)$$

Якщо ж система є закритою ( $\delta N = 0$ ) і поверхня кожної частинки не змінюється ( $\delta a = 0$ ), вираз (2.2) з урахуванням (2.1) набуває вигляду:

$$\delta \langle \sigma \rangle = -\frac{\varepsilon(A)}{A} \delta A, \quad (2.3)$$

де  $\varepsilon(A)$  - розмірний фактор системи:

$$\varepsilon \equiv \frac{a}{A}. \quad (2.4)$$

З субмезоструктурної точки зору кожна частинка описується цілочисельним значенням координаційного числа  $\lambda_i$  з деякої множини

$$\lambda_i \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}] \quad (2.5)$$

і саме ця обставина дозволяє ввести поняття топологічної фази системи. Під  $i$ -ю топологічною фазою будемо розуміти нелокалізовану частку повної поверхні системи  $A_i \in A$ , яка містить  $n_i \in N$  частинок, що характеризуються конкретним координаційним числом  $\lambda_i$ . Далі, оскільки кожна частинка системи повинна належати до однієї з топологічних фаз, доречно переформулювати модель в термінах об'єднання їх:

$$\bigcup_i A_i = A; \quad \bigcap_i A_i = \emptyset. \quad (2.6)$$

Співвідношення (6) відображають базову теоретико-множинну модель системи.

Очевидно, структурними параметрами окремої  $i$ -ї топологічної фази є  $\lambda_i$  - координаційне число  $n_i$  частинок, що входять до її складу, та відносна поверхнева щільність  $\sigma_i$ :

$$\sigma_i = \frac{n_i a}{A_i}. \quad (2.7)$$

Відповідними мезоскопічними параметрами структури (підкреслюємо: параметрами субмезоструктури) буде, по-перше, множина імовірностей реалізації окремих топологічних фаз  $\{p_i\}$ , де

$$p_i = \frac{A_i}{A}. \quad (2.8)$$

По-друге, слід ввести множину імовірностей  $\{\tilde{p}_i\}$  того, що окрема частинка характеризується конкретним координаційним числом  $\lambda_i$ :

$$\tilde{p}_i = \frac{n_i}{N}. \quad (2.9)$$

При цьому  $\lambda_i$  та  $\sigma_i$  - це структурні фазові

параметри, що визначають особливості структури множини топологічних фаз модельної системи.

Отже, проблема субмезоструктурного аналізу системи зводиться до пошуку функціональних залежностей між макропараметрами  $\langle \sigma \rangle$ ,  $\langle \lambda \rangle$  та субмезопараметрами  $\{p_i\}$ ,  $\{\tilde{p}_i\}$  системи при заданих структурних фазових параметрах  $\{\lambda_i\}$ ,  $\{\sigma_i\}$  та зовнішніх факторах  $A$ ,  $N$ ,  $a$ . Розв'язання цієї задачі можна реалізувати, приміром, в рамках застосування методу максимальної ентропії [3].

## II. Мезоструктурний опис системи

Звернемося тепер до іншого типу мезоскопічного опису середовища хаотичного пакованих частинок – опису з погляду мезоструктурної ієрархічної платформи. У цьому випадку систему репрезентує статистичний ансамбль мезоелементів, кожен з яких складається з ущільненого (ядра) та розпушеного (оболонки) компонентів. Це означає, що для опису мезоструктури базова теоретико-множинна модель (2.6) трансформується:

$$A_c \cup A_s = A; \quad A_c \cap A_s = \emptyset, \quad (3.1)$$

де  $A_c$  та  $A_s$  - поверхні ущільненого та розпушеного компонентів системи відповідно. Ці поверхні є об'єднаними для відповідних топологічних фаз:

$$A_c = \bigcup_{i_c} A_{i_c}, \quad A_s = \bigcup_{i_s} A_{i_s}, \quad (3.2)$$

де  $i_c$  та  $i_s$  - індекси топологічних фаз, що характеризуються відповідно підвищеним та зниженим значеннями координації частинок, які входять до їх складу.

Роль репрезентативного елемента мезоструктури відіграє так званий еталонний мезоелемент, що представляє в середньому статистичний ансамбль мезоелементів системи. Отже, еталонний мезоелемент характеризується середньою відносною поверхневою щільністю, що дорівнює середній відносній поверхневій щільності  $\langle \sigma \rangle$  системи, а середні значення відносної щільності його ядра  $\sigma_c$  та оболонки  $\sigma_s$  дорівнюють відповідним значенням, котрі характеризують ущільнений та розпушений компоненти системи:

$$\sigma_c = \frac{N_c a}{A_c}, \quad \sigma_s = \frac{N_s a}{A_s}. \quad (3.3)$$

Тут  $N_c$  та  $N_s$  - число частинок, що входять відповідно до ущільненого та розпушеного компонентів ( $N_c + N_s = N$ ). Окрім того, ядро та оболонка еталонного мезоелемента характеризуються середніми значеннями координаційного числа частинок ( $\lambda_c$  та  $\lambda_s$  відповідно), що входять до їх складу. У довільний момент еволюції структури в процесі ущільнення мезоскопічні параметри  $\sigma_c$  і  $\sigma_s$  та  $\lambda_c$  і  $\lambda_s$  є функціями середньої відносної поверхневої

щільності  $\langle \sigma \rangle$  і можуть бути визначені за попередніми розрахунками субмезопараметрів (2.8) та (2.9).

## Висновки

Репрезентація структури однонаправленого волокнового композита в термінах об'єднання топологічних фаз дозволяє одержати відповідну базову теоретико-множинну модель системи (2.6), що описує її як з субмезоструктурного, так і з мезоструктурного погляду. Очевидно, підґрунтям подальшого аналізу особливостей структури системи є співвідношення (2.8) та (2.9), що повинні бути визначені в явному вигляді. В загальному випадкові ця задача розв'язується на основі застосування методу максимальної ентропії [3]. Переформулювання загального розв'язку [3] до досліджуваної проблеми хаотичного пакування сфер в  $R^2$  дозволяє одержати шукані результати:

$$P_i = \frac{\exp(-\beta\sigma_i)}{\sum_i \exp(-\beta\sigma_i)}; \tilde{P}_i = \frac{\sigma_i}{\langle \sigma \rangle} P_i \quad (4.1)$$

при цьому співвідношення, що пов'язують між собою субмезо- та макропараметри системи, набувають вигляду:

$$\langle \sigma \rangle = \sum_i \sigma_i P_i; \langle \lambda \rangle = \sum_i \lambda_i \tilde{P}_i, \quad (4.2)$$

де  $\beta$  - невизначений множник Лагранжа.

Таким чином, основою подальшого використання результатів є попереднє визначення множини структурних фазових параметрів  $\{\sigma_i\}$ , яка може бути як дискретною, так і неперервною в залежності від прикладного застосування моделі.

**Ніколенко А.М.** – доктор фізико-математичних наук, професор, пров. н. с.;  
**Позняк А.А.** – старший викладач.

- [1] А.М. Ніколенко. Концепція ієрархічної структури матеріалів // *Порошкова металургія*. №5/6. сс. 105-127 (2002).
- [2] А.М. Ніколенко. Нова проблема фізики та хімії твердого тіла: мезоскопічно неупорядовані середовища // *Фізика і хімія твердого тіла*. 4(4), сс. 758-765 (2003).
- [3] А.М. Ніколенко. Статистичний аналіз середовищ хаотично пакованих частинок. Теорія // *Український фізичний журнал*. №2. сс. 243-246 (1996).

A.N. Nikolenko, A.A. Poznyak

## The Theoretical-Plural Model of Structure of One-Direct Fibrils Composite

*Ukrainian State Academy of Railway transportation. 61177, Kharkiv-177*

Possibilities and ways of statistical description of structure of one-Direct Fibrils Composite are analysed. The proper Theoretical -plural model of structure of such materials is developed and got common correlations, that describe intercommunications between macroscopic that submезoscopic parameters of structure.