ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 7, № 4 (2006) С. 798-802

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 7, № 4 (2006) P. 798-802

УДК 539.2

ISSN 1729-4428

А.М. Ніколенко

Структура однонаправленого волокнового композита: апроксимації базової моделі

Українська державна академія залізничного транспорту, м. Харків-50, пл. Фейєрбаха 7

Проаналізовано шляхи переформулювання базової теоретико-множинної моделі однонаправленого волокнового композита до опису структури відповідних матеріалів за конкретних умов. Розроблено дискретну та континуальну апроксимації базової моделі та окреслено основні напрямки її застосування.

Ключові слова: однонаправлений волокновий композит, теоретико-множинна модель, дискретний опис, технологічні процеси електромашинобудування.

Стаття поступила до редакції 03.04.2006; прийнята до друку 15.06.2006.

Вступ

Однонаправлені волокнові композити, до яких зокрема відносяться багато матеріалів електромашинобудування (всипні обмотки, жмути провідників тощо) є за своєю природою структурно недосконалими матеріалами, характерна риса яких полягає в аномальних відгуках на зовнішні впливи. З іншого боку, структурна недосконалість таких систем є наслідком їх мезоскопічної невпорядкованості, що спричиняє наявність специфічних мезоскопічних дефектів [1]. Отже виникає проблема пошуку шляхів технологічного керування особливостями структури зазначених матеріалів, що, очевидно, актуалізує проблему адекватного моделювання їх внутрішньої архітектури.

В результаті проведення досліджень на попередніх етапах роботи було показано, що адекватний аналіз структури однонаправленого волокнового композита найбільш доцільно здійснювати, застосовуючи модель хаотичного паковання тотожних сфер в R^2. При цьому особливості структури цієї моделі можна легко дослідити на основі застосування відповідної базової теоретико-множинної моделі з подальшим залученням методу максимальної ентропії [2]. В термінах цієї моделі система апроксимується об'єднанням можливих топологічних фаз, під кожною $A_i \subset A$ з яких розуміється нелокалізована частка системи, тобто:

$$\bigcup_i A_i = A; \quad \bigcap_i A_i = \emptyset. \tag{1}$$

Очевидно, структурними параметрами окремої $i-ї$ топологічної фази λ_i - координаційне число n_i сфер, що входять до її складу, та відносна поверхнева щільність σ_i:

$$\sigma_i = \frac{n_i a}{A_i}, \tag{2}$$

де a – поверхня окремої сфери. Відповідними мезоскопічними параметрами структури буде, по-перше, множина імовірностей реалізації окремих топологічних фаз $\{p_i\}$, де

$$p_i = \frac{A_i}{A}, \tag{3}$$

та множина імовірностей $\{\tilde{p}_i\}$ того, що окрема сфера характеризується конкретними координаційним числом λ_i:

$$\tilde{p}_i = \frac{n_i}{N}, \tag{4}$$

де N – повне число сфер системи

Застосування методу максимальної ентропії до розв'язання задачі дозволяє одержати шукані співвідношення [2]

$$p_i = \frac{\exp(-\beta\sigma_i)}{\sum \exp(-\beta\sigma_i)}; \; \tilde{p}_i = \frac{\sigma_i}{<\sigma>} p_i, \tag{5}$$

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

$$<\sigma> = \sum \sigma_i p_i; \; <\lambda> = \sum \lambda_i \tilde{p}_i, \tag{6}$$

де β - невизначений множник Лагранжа.

Мета цієї роботи полягає в тому, щоб послідовно проаналізувати особливості внутрішньої структури однонаправлених волокнових композитів на основі застосування раніше розробленої відповідної базової теоретично-множинної моделі та окреслити шляхи подальшого практичного застосування одержаних результатів та їх узагальнення.

I. Дискретна апроксимація базової моделі

Практичне застосування одержаних результатів спонукає до вирішення низки проблем, серед яких основними є наступні. По-перше, множини фазових параметрів $\{\sigma_i\}$ можна визначити по-різному і в цьому полягає невизначеність у вихідних даних. По-друге, загальні співвідношення для розрахунку множин імовірностей $\{p_i\}$ та $\{\tilde{p}_i\}$ містять невизначений множник Лагранжа β, що може змінюватися від $-\infty$ до $+\infty$, що ускладнює застосування теорії. По-третє, одержані результати є відокремленими і потребують узагальнення. Даний етап досліджень був присвячений розв'язанню зазначених проблем.

Проблема неоднозначності у визначенні множини фазових параметрів була розв'язана на основі застосування фрагментів регулярних паковань сфер в R^2 на гратках з розширеною координацією, для яких розширене значення координаційного числа λ^* становить $\lambda^* = \lambda + 1$, де λ - звичайна координація сфер. В таблиці наведено результати відповідних розрахунків для граток симетрій C_3, C_4 та C_6.

Можна запропонувати низку міркувань щодо звуження нескінченного інтервалу значень β до деякого прийнятного відрізка

$$\beta \in [\beta_{min}; \beta_{max}]. \tag{7}$$

Позаяк залежність $<\lambda> = f(<\sigma>)$ є плавною, то можна записати:

$$\lim_{<\sigma> \to \sigma_1} \frac{p_2}{p_1} = 0; \quad \lim_{<\sigma> \to \sigma_\nu} \frac{p_{\nu-1}}{p_\nu} = 0; \tag{8}$$

Тобто, в першому наближенні можна визначити β_{min} та β_{max}, вимагаючи, щоб відповідні експонен розрізнювалися не більш, ніж на n порядків. Звідки одержується співвідношення для меж інтервалу β :

$$\beta \in \left[\frac{n \ln 10}{\sigma_{\nu-1} - \sigma_\nu}; \ \frac{n \ln 10}{\sigma_2 - \sigma_1} \right]. \tag{9}$$

Як показують попередні розрахунки, достатнім є покласти у виразі (9) $n = 2$.

Результати розрахунків залежностей множин імовірностей (5) і макропараметрів (6) наведено на рис.1-3 відповідно. Зазначені результати відповідають експериментальним даним [3], що свідчить про адекватність описаного методу.

Проблема узагальнення одержаних результатів розв'язується на основі застосування статистичної суми Z:

$$Z = \sum_i \exp(-\beta\sigma_i). \tag{10}$$

В цьому випадкові одержані аналітичні залежності [1] у відповідності з результатами статистичної механіки набувають вигляду

$$p_i = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\sigma} \ln Z; \ <\sigma> = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z, \tag{11}$$

вираз для флуктуацій щільності має при цьому вигляд:

$$\delta^2 \equiv <\sigma_i^2> - <\sigma>^2 = \frac{\partial^2}{\partial\beta^2} \ln Z. \tag{12}$$

Одержані результати повністю дозволяють аналізувати особливості структури композита в термінах моделі з дискретним спектром топологічних фаз, що зокрема є достатнім для опису та дослідження процесу просочення. Проте, наприклад, технологічний процес обтиснення жмута провідників не можна описати в термінах цієї моделі. Тому слід здійснити переформулювання базової теоретико-множинної моделі з урахуванням того, що вона може бути континуальною.

Таблиця 1

Структурні параметри топологічних фаз для планерних систем хаотично пакованих сфер

Координаційне число		Відносна щільність, σ		
		Симетрія гратки		
розширене λ^*	звичайне λ	C_3	C_4	C_6
0	-	0	0	0
1	0	0,1512	0,1571	0,1296
2	1	0,3023	0,3142	0,2591
3	2	0,4534	0,4712	0,3887
4	3	0,6046	0,6283	0,5182
5	4	-	0,7854	0,6478
6	5	-	-	0,7773
7	6	-	-	0,9069

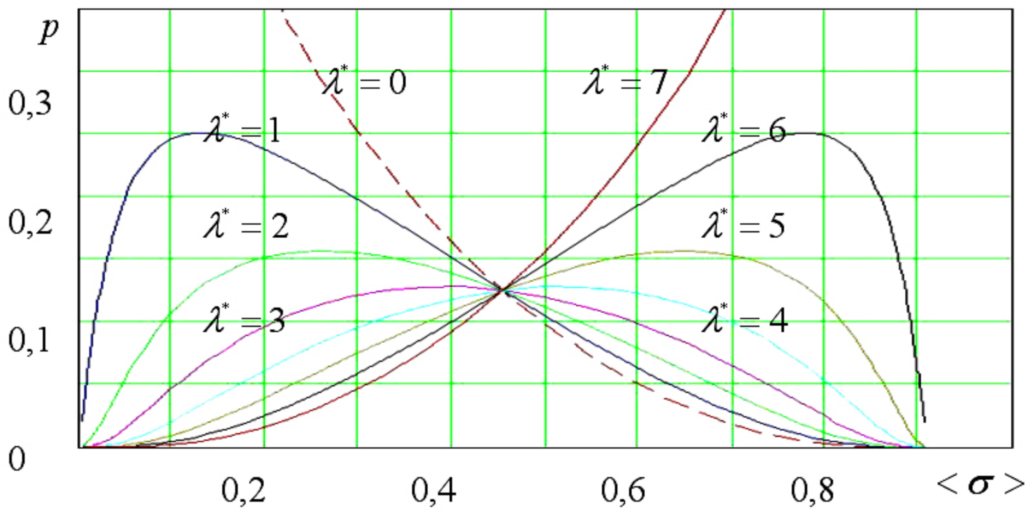

Рис. 1. Графік $p = p(<\sigma>)$

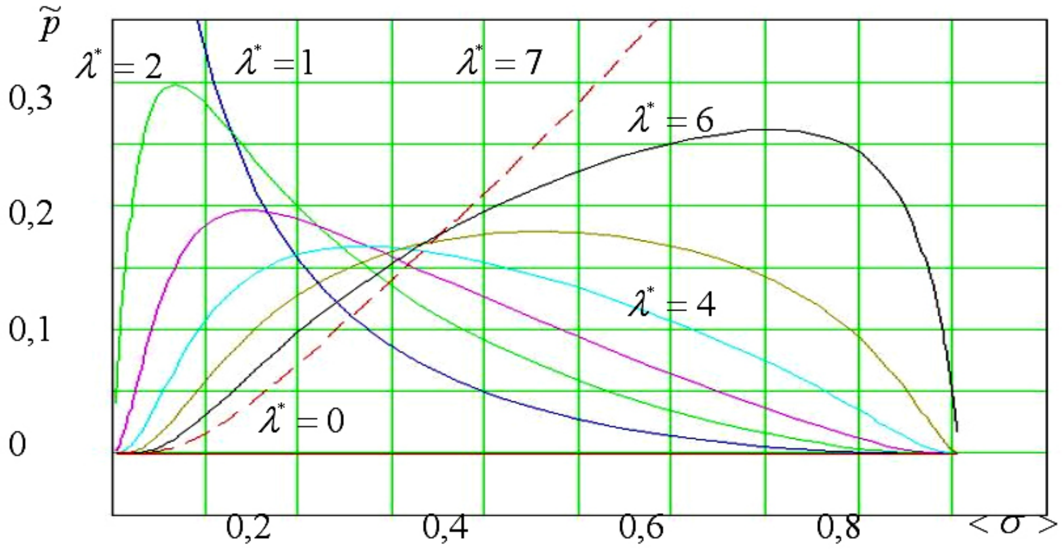

Рис. 2. Графік залежностей $\widetilde{p}_i = \widetilde{p}_i(<\sigma>)$

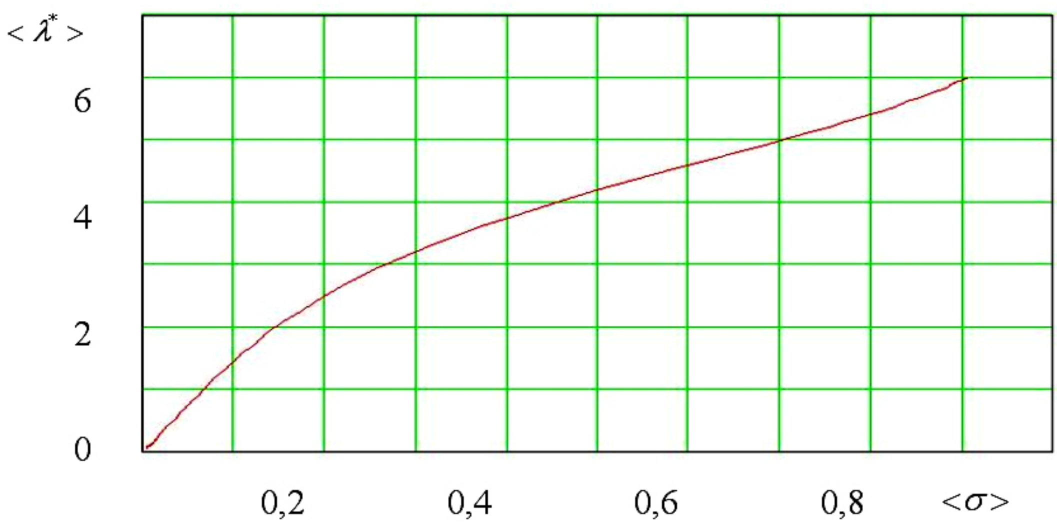

Рис. 3. Графік залежності $<\lambda^*> = <\lambda^*>(<\sigma>)$

II. Континуальна апроксимація базової моделі

Переформулювання базової теоретико-множинної моделі [2] з метою розробки континуальної апроксимації її вбачається найбільш привабливим в термінах застосування моделі вільного об'єму (МВО), запропонована О.Й. Бачинським з метою опису структури середовища макроскопічних частинок [4].

В МВО кожна частина середовища займає деяку, утворену частинками її оточення, комірку, що являє собою поліедр Вороного [5]. Якщо об'єм комірки v^h перевищує деяке критичне значення v^*, що приблизно дорівнює об'єму комірки в щільно пакованій структурі, то об'єм

$$v^h - v^* \equiv v^f \tag{13}$$

вважається вільним. При цьому суттєвим є саме допущення про наявність комірок, що містять вільний об'єм, та множина засад, які встановлюють щільність та розподіл комірок за певних зовнішніх умов, а також типи пов'язаних з ними перебудов структури середовища. Деталі ж конфігурацій як „нормальних" комірок, так і тих, що містять вільний об'єм, є неістотними. Очевидно, інформацію про особливості структури системи містить вираз для імовірності того, що вільний об'єм лежить в інтервалі від v^f до $v^f + \mathrm{d}v^f$.

Проаналізуємо поняття вільного об'єму в контексті проблеми дослідження структури хаотичного пакування сфер в R^2, розглядаючи як і раніше [2] модельну систему поверхні *A,* що містить *N* тотожних двовимірних сфер, кожна з яких має поверхню *a*. Виберемо деяку довільну сферу та опишемо навколо неї (з урахуванням її оточення) багатокутник Вороного, який по суті є коміркою, що характеризується певною поверхнею s^h. В загальному випадку поверхню s^h комірки слід розглядати як таку, що складається з двох частин – ефективної поверхні сфери a^*, яка чисельно дорівнює поверхні комірки за умови, що система характеризується максимальною відносною поверхневою щільністю σ^*

$$a^* \equiv s^* = \frac{a}{\sigma^*}, \tag{14}$$

та власне вільної поверхні s^f, значення якої можуть, очевидно лежати в інтервалі

$$s^f \in (0;\infty). \tag{15}$$

При цьому якщо система в деякий момент еволюції характеризується певним значення середньої відносної поверхневої щільності $<\sigma>$, то можна також записати вираз для середнього значення вільної поверхні комірки:

$$<s^f> = <s^h> - s^* = \frac{a}{<\sigma>} - \frac{a}{\sigma^*}. \tag{16}$$

Якщо тепер ввести до розгляду характеристики системи, обернені зазначеним вище відносним щільностям.

$$\frac{1}{<\sigma>} \equiv \tau\ ;\ \frac{1}{\sigma^*} \equiv \tau^*, \tag{17}$$

то вираз для середнього значення вільної поверхні можна звести до вигляду

$$<s^f> = a(\tau - \tau^*). \tag{18}$$

Повернемося тепер до базової теоретико-множинної моделі [2]. Очевидно, досліджувана система (множина *N* частинок) розглядається тепер як така, що складається з υ підмножини, кожна *i*-та з яких характеризується числом n_i частинок, що входять до її складу, та вільною поверхнею s_i^f комірки, яку займає кожна з цих n_i частинок. При цьому справедливими є умова збереження повного числа частинок

$$\sum_i n_i = N \tag{19}$$

та умова збереження повної вільної поверхні A^f

$$\sum_i s_i^f n_i = A^f, \tag{20}$$

що з урахуванням виразу для середньої вільної поверхні, яка припадає на одну комірку

$$<s^f> = \frac{A^f}{N},$$

набуває вигляду

$$\sum_i s_i^f n_i = <s^f> N. \tag{21}$$

Отже, можна ввести до розгляду імовірність того, що окремій сфері з повного їх числа *N* відповідає вільна поверхня s_i^f

$$\tilde{p}_i = \frac{n_i}{N}, \tag{22}$$

при цьому умови збереження (19) та (20) набувають вигляду

$$\sum_i \tilde{p}_i = 1 \tag{23}$$

та

$$\sum_i s_i^f \tilde{p}_i = <s^f>. \tag{24}$$

По суті, вище ми неявно побудували канонічний ансамбль, для якого найбільш імовірний розподіл в конфігураційному просторі відповідає максимальному значенню конфігураційної ентропії

$$S = \sum_i \tilde{p}_i \ln \tilde{p}_i \tag{25}$$

з урахуванням умов збереження (23) та (24). Максимізація (25) методом невизначених множників Лагранжа [6] дозволяє одержати вирази для множини (22)

$$\tilde{p}_i = Z^{-1}\exp(-\beta s_i^f), \tag{26}$$

де β – невизначений множник Лагранжа, а *Z* – статистична сума

$$Z \equiv \sum_i \exp(-\beta s_i^f). \tag{27}$$

Перехід до континуального спектра значень вільної поверхні комірок системи в (27)

$$\sum_i \exp(-\beta\, s_i^f) \to \int_0^\infty \exp(-\beta s^f)\, \mathrm{d}s^f = \langle s^f \rangle \qquad (28)$$

дозволяє одержати вираз для імовірності того, що вільна поверхня лежить в інтервалі значень від s^f до $s^f + \mathrm{d}s^f$

$$\tilde{p}(s^f)\mathrm{d}s^f = \frac{1}{\langle s^f \rangle}\exp(-\frac{s^f}{\langle s^f \rangle})\mathrm{d}s^f, \qquad (29)$$

або з урахуванням (18),

$$\tilde{p}(s^f)\, \mathrm{d}s^f = \frac{1}{a(\tau-\tau^*)}\exp\left[-\frac{s^f}{a(\tau-\tau^*)}\right]\mathrm{d}s^f. \qquad (30)$$

Співвідношення (30) складає основу теоретичного аналізу структури системи в термінах континуальної апроксимації базової моделі [2].

Висновки

Базова теоретико-множинна модель структури однонаправленого волокнового композита складає підґрунтя подальших теоретичних та модельних досліджень особливостей структури відповідних матеріалів та їх поведінки за відповідних технологічних і експлуатаційних процесів. Зокрема, дискретна апроксимація базової моделі приводить до результатів, що відповідають експериментальним даним [3] і тому може бути застосованою до розробки алгоритмів оптимізації технологічних процесів оптимізації просочування всипних обмоток електроустаткування. Континуальна апроксимація базової моделі, що ґрунтується на застосуванні моделі вільного об'єму, дозволяє одержати аналітичні залежності, що описують еволюцію структури композита в залежності від зовнішніх параметрів, і тому може бути застосованою, наприклад, до опису та оптимізації технологічних процесів обчислення жмутів провідників.

Ніколенко А.М. – д.ф.-м.н., професор.

[1] А.М. Ніколенко. Концепція ієрархічної структури матеріалів // *Порошковая металургія*, (5-6), сс. 105-127 (2002).
[2] А.М. Ніколенко, А.А. Позняк. Теортико-множинна модель структури однонаправленого волокнового композита // *Фізика і хімія твердого тіла*, **6**(3), сс. 505-507 (2005).
[3] R. German. Particle paking characteristics. Princeton, New Jersey: Powder Industries Federation, 443 p. (1989).
[4] А.И. Бачинський. *Закон в'язкості жидкостей (предварительное сообщение)*. Избр. тр.- М.: Изд-во АН СССР, 48 с. (1960).
[5] Г.Ф. Вороной. Новые приложения непрерывных параметров к теории квадратичных форм. Второй мемуар. Исследования о примитивных параллелоэдрах. Собр.соч.в 3-х т. Т.2. Киев: Изд-во АН СССР, сс. 239-268 (1952).
[6] Г. Арфкен. Математические методы в физике. М.: Атомиздат, 712 с. (1970).

A.M. Nikolenko

Structure of the Unidirectional Fibrous Composite: Approximations of Base Model

Ukrainian state academy of a railway transportation, Kharkiv, Ukraine

Is analysed ways reformulation base plural-theoretical model of the unidirectional fibrous composite to the description of structure corresponding materials are analysed under concrete conditions. It is developed discrete and continual approximations of base model and describe the basic directions of its application.