

**МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ СТРУКТУРОУТВОРЕННЯ КОМПОЗИТИВ
МЕТОДАМИ ТЕОРІЇ КАТАСТРОФ**

¹**Колесников А.В.**, к.т.н., доцент,
kolesnikov_himek@odaba.edu.ua, ORCID: 0000-0001-8737-0933

¹**Семенова С.В.**, к.т.н., доцент,
semenova@odaba.edu.ua, ORCID: 0000-0002-5309-5854

¹**Маковецька О.О.**, старший викладач,
makoveckaya_himek@odaba.edu.ua, ORCID: 0000-0002-3135-4333

¹*Одеська державна академія будівництва та архітектури*
4, вул. Дідріхсона, Одеса, 65029, Україна

Анотація. У роботі досліджується можливість моделювання процесів структуроутворення у в'язучих матеріалах за допомогою деяких методів теорії катастроф. Аналізуються події на масштабному рівні співіснування і взаємодії макроскопічних і мікроскопічних явищ. Динаміка перетворень на цьому рівні організації матеріалу розглядається за допомогою методу структурного потенціалу, аналогічного термодинамічному, з можливістю його емпіричної ідентифікації на основі обробки мікроскопічних зображень. Перехід до потенціальних функцій теорії катастроф здійснюється шляхом геометричної параметризації – виділення ділянок об'єму, займаного фазами матеріалу та ділянок, пов'язаних із межами розділу. Модель структуроутворення представляється як явище в стохастичних градієнтних системах, зумовлене виникненням особливостей структурного потенціалу та їхньої трансформації при зміні керуючих фізико-хімічних параметрів. Показано можливість адаптації апарату фазових діаграм трикомпонентних систем до розглянутих завдань та його спорідненість із моделями теорії катастроф. Структурно-фазова діаграма будується за аналогією до методу Гіббса-Розебуму на трикутнику, координатами при цьому є частини компонентів з різною геометричною структурою – порожнинами, суцільним при обумовленому масштабі матеріалом і границями розділу з оточуючим трансформованим матеріалом. З потенціальних функцій теорії катастроф обґрунтовано виділені такі, що відповідають проаналізованій системі – омбілічні функції, а при спрощеному варіанті – потенціали однієї змінної. Розроблено схему дослідження матеріалів за допомогою методів структурних потенціалів, що базується на визначенні мезоскопічних масштабів для матеріалу, який вивчається, переході до частотних характеристик зображення, далі – до структурного потенціалу, що визначає асортимент структур, які реалізуються у матеріалі і, у перспективі, до переходу від структурних потенціалів до фізичних властивостей.

Ключові слова: структуроутворення, структурний потенціал, теорія катастроф, омбіліка, діаграма.

Вступ. Однією з центральних проблем будівельного матеріалознавства є управління технологічними властивостями матеріалів за допомогою спрямованого підбору рецептурно-технологічних факторів. Зв'язок між рецептурно-технологічними факторами та фізичними властивостями композиційного матеріалу здійснюється через структуру матеріалу, що виникає та змінюється в процесі структуроутворення. Однак відслідкувати відповідний причинно-наслідковий ланцюг доволі складно завдяки впливу структур, що формуються на різних просторових масштабах і, особливо, завдяки виникненню дуже широкого асортименту структур на кожному масштабному рівні. Один з перспективних напрямків подолання відповідних труднощів полягає в енергетичному підході, при якому властивості матеріалу визначаються за допомогою структурних потенціалів. При цьому можливий випадок, коли дуже різноманітні елементи структури матеріалу можуть відповідати майже

однаковому рівню структурного потенціалу. Перетворення структурного потенціалу завдяки зміні керуючих параметрів, одні з яких залежать безпосередньо від рецептурно-технологічних факторів, а інші можуть повільно змінюватися у часі протягом активної фази структуроутворення, можна дослідити методами теорії катастроф, чому і присвячена дана робота.

Аналіз останніх досліджень та публікацій. Одними з важливіших процесів, що відбуваються у в'язучих матеріалах різної природи, є тужавлення та твердіння, пов'язане з переходом в'язучих матеріалів та композитів на їх основі у каменеподібний стан. Зміна структурно-механічних властивостей матеріалів у процесі твердіння відбувається одночасно з явищами структуроутворення. Основна частина таких процесів обумовлена трансформацією багатомасштабної просторової структури матеріалу, що відбувається під впливом процесів на молекулярному рівні організації (наприклад, процесів гідратації та полімеризації). Незважаючи на те, що процеси структуроутворення стосуються всіх масштабних рівнів від молекулярного до макроскопічного, на якому проявляються експлуатаційні властивості матеріалу у зразку, виробі або конструкції, найбільший вплив на експлуатаційні властивості має проміжний, мезоскопічний структурний рівень [1] (300 нм – 0,1 мм). Трансформація матеріалу на цьому рівні представляється такою, що відбувається під впливом попереднього (молекулярного або мікрорівня) і пов'язана з виникненням високих потенційних бар'єрів (істотно вище рівня термічних флуктуацій), що відокремлюють одну групу (кластер, ансамбль [2, 3]) взаємодіючих частинок від іншої. Це явище зумовлює перехід матеріалу як цілого в каменеподібне тіло. Споріднені фізичні уявлення свідчать про збільшення структурної в'язкості матеріалу в цьому випадку.

Взаємодія частинок композиційного матеріалу на молекулярному і колоїдному рівні в присутності розчинника або інших частинок дисперсійного середовища, так само як і взаємодія частинок наповнювача в матричному матеріалі, підпорядковується досить складним закономірностям, а відповідні ефективні потенціали є сумою багатьох складових. Навіть у простому варіанті, що розглядається в теорії ДЛФО [4, 5], таких складових, що містять набір параметрів, вже дві, відповідно до вкладів електростатичної та дисперсійної взаємодії. Тому інтерес представляє таке моделювання структури матеріалів і процесів структуроутворення, що дозволить звести істотне розмаїття структурних елементів (тріщин, пір, капілярів) до кількох геометричних параметрів, тобто використати метод параметризації.

Метою роботи є аналіз методу структурного потенціалу і можливості його застосування при дослідженні процесів структуроутворення. Відповідними завданнями є адаптація методу фазових діаграм трикомпонентних систем до мезоструктурних змін у матеріалі та обґрунтований вибір потенціалів теорії катастроф, які відповідають задачі аналізу структури матеріалу.

Методика дослідження полягає в моделюванні структурних перетворень в композиційному матеріалі за допомогою градієнтних стохастичних систем та відповідних рівнянь Ланжевена та Фокера-Планка, дослідженні стаціонарних рішень та їх структурно-орієнтованому тлумаченні.

Результати досліджень. Методи структурно-орієнтованого дослідження композиційних матеріалів можуть бути засновані на різних підходах. Один з них базується на виділенні окремих конкретних об'єктів, що впливають на важливі властивості матеріалу. Наприклад, в багатьох випадках слід у першу чергу виділити внутрішні границі розділу, пори та мікротріщини, що присутні в досліджуваному матеріалі. Але різноманітність потенційно активних об'єктів, розвиток яких обумовлює процеси при структуроутворенні та руйнуванні, досить висока [6]. Наприклад, в теплоізолюючих композиційних матеріалах часто виявляються області накопичення інертних частинок заповнювачів – таких елементів структури, що не забезпечують міцність. Фактор різноманітності структурних елементів композиційних матеріалів примушує застосувати методи параметризації, згідно з яким усі структурні елементи розглядаються принципово однаково – для них визначається відображення на простір деякого невеликого набору параметрів – геометричних,

топологічних або енергетичних, і дослідження таких параметрів. При цьому структурам різного типу відповідають різні координати простору параметрів.

Найбільш очевидним і природним методом параметризації є геометрична параметризація. Проводиться розбиття досліджуваної ділянки зразка за допомогою сітки калібру, $\delta_i, i = 1, \dots, M$, що зменшується, і далі обчислюється об'ємна частка, зайнята клітинами, що містять тривимірні (об'ємні, при заданому масштабі) ділянки матеріалу η_v , об'ємна частка, зайнята двовимірними поверхнями розділу η_s , і об'ємна частка вільних осередків $\eta_f(1)$:

$$\eta_v = \frac{N_v}{N}, \quad \eta_s = \frac{N_s}{N}, \quad \eta_f = \frac{N_f}{N}, \quad (1)$$

тут $N = N_v + N_s + N_f$ – сумарна кількість осередків і, відповідно (2):

$$\eta_v + \eta_s + \eta_f = 1. \quad (2)$$

Аналогічну параметризацію можна реалізувати і для композиційного матеріалу, при цьому необхідно враховувати існування системи з декількох фаз (наприклад, «матриця-наповнювач») і кілька видів меж розділу.

Процес структурування для прийнятої параметризації можна розглядати наступним чином. Нехай матеріал може бути розбитий за допомогою сітки на мезоструктурні осередки (велике розбиття, калібр сітки $\varepsilon \gg \delta_1$), у кожній з яких обчислюються показники (1).

Структурні характеристики кожної великомасштабної комірки можна зобразити, наприклад, за допомогою адаптованого графічного апарату трикомпонентних фізико-хімічних систем. Фізико-геометричний стан матеріалу у великій комірці (а іноді, якщо цього достатньо для структурно-орієнтованого дослідження, і для всього матеріалу) відображається на відповідному трикутнику Гіббса-Розебума [7] (рис.1).

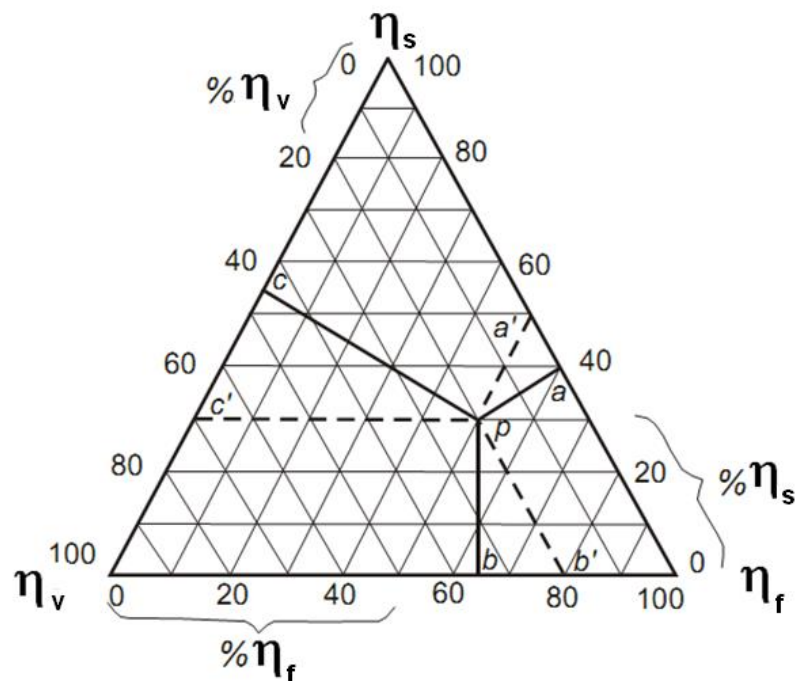


Рис. 1. Застосування графічних методів теорії трикомпонентних фізико-хімічних систем до відображення фізико-геометричних характеристик матеріалу: η_v – об'ємна частина тривимірного матеріалу; η_s – об'ємна частина комірок, що зайняті двовимірними структурами; η_f – об'ємна частина комірки, що зайнята вільним об'ємом або матеріалом у розчиненій формі; точка P відповідає фізико-геометричному стану матеріалу; сполучні лінії відповідають методу Гіббсу, пунктирні – методу Розебума

Процеси в осередках припускаємо незалежними, що утворюють статистичну сукупність. Тоді на підставі вимірювань можна відновити емпіричну щільність розподілу (3):

$$f(\eta_v, \eta_s, \eta_f), \int f d\eta = 1, \quad (3)$$

та обчислити ефективний потенціал [8, 9] (4):

$$H(\eta, q) = -\ln f(\eta, q), \quad (4)$$

тут $\eta = [\eta_v, \eta_s, \eta_f]$; q – вектор параметрів управління, відповідний впливам як з нижчого мікроскопічного рівня, так і з макrorівня (приклад – навантажений матеріал у формі виробу).

Процесу структуроутворення в композиційних матеріалах з позицій, що пропонуються, можна зіставити часову еволюцію керованої системи Ланжевена [9] (5):

$$\frac{d\eta_i}{dt} = -\frac{\partial H(\eta, q)}{\partial \eta_i} + F_i. \quad (5)$$

Тут (5) визначає релаксаційний процес під час дії флуктуацій F_i з інших масштабних рівнів – мікро- і макроскопічного.

Характерно те, що управління q може змінюватися в часі і представляти відому функцію $q(t)$, що описує структурно-хімічні процеси. Система (5), загалом кажучи, має бути доповнена співвідношеннями для кінетики фізико-хімічних процесів, що супроводжують структуроутворення. Далі буде передбачатися, що процеси релаксації (5) переважають, а рівняння Фоккер-Планка (6), відповідне (5), описує досягнення стаціонарного розподілу ймовірності f_{cm} [10]:

$$\frac{\partial f(\eta, q)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \eta_i} (A_i(\eta, q) f(\eta, q)) + D \frac{\partial^2 f(\eta, q)}{\partial \eta_i^2}, \quad (6)$$

тут виконується (7):

$$A_i(\eta, q) = -\frac{\partial H(\eta, q)}{\partial \eta_i} = -D \frac{\partial (\ln f(\eta, q))}{\partial \eta_i}. \quad (7)$$

При зроблених припущеннях відновлена функція розподілу (3) відповідає стаціонарному розподілу як стаціонарному рішення (6) за умови градієнтності (7). Функція розподілу $f(\eta, q)$ задає потенціал $H(\eta, q)$ із точністю до постійного множника.

До вивчення властивостей потенціалу $H(\eta, q)$, визначити який з фізичних міркувань для даного випадку доволі важко. Можна застосувати методи апроксимації до функцій катастроф. Варіанти такого застосування суттєво залежать від змістовної суті завдань матеріалознавства, а саме від кількості ступенів свободи системи.

У разі найбільш поширеної описаної вище задачі («матеріал – межа розділу – пустотна фаза») як апроксимуючий потенціал теорії катастроф, керуючись геометричним змістом запропонованого опису (2) за допомогою змінних η_s, η_v (третья виключається за допомогою (2)), переходимо до катастроф із двома змінними – омбілічними потенціалами теорії катастроф (табл. 1). Для цього також можливо попередньо застосувати лінійні перетворення координат або перетворення (8):

$$x = \frac{\eta_s}{\eta_v} \quad y = \frac{\eta_f}{\eta_v}, \quad (8)$$

При цьому слід враховувати рівність (9):

$$H(\eta, q) = C(x, y, q). \quad (9)$$

Таблиця 1 – Потенціали омбілічних катастроф

Тип катастрофи	Формула
Гіперболічна омбіліка	$C(a, b, c) = x^3 + y^3 + axy + bx + cy$
Еліптична омбіліка	$C(a, b, c) = \frac{x^3}{3} - xy^2 + a(x^2 + y^2) + bx + cy$
Параболічна омбіліка	$C(a, b, c, d) = yx^2 + y^4 + ax^2 + by^2 + cx + dy$

Зображення відповідних омбілічних поверхонь наведено на рис. 2, 3 [11, 12].

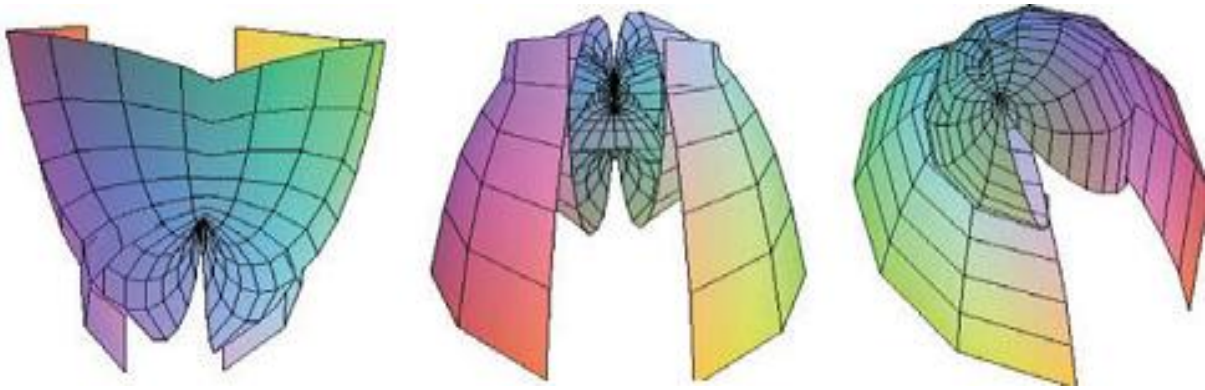


Рис. 2. Поверхня параболічної омбіліки

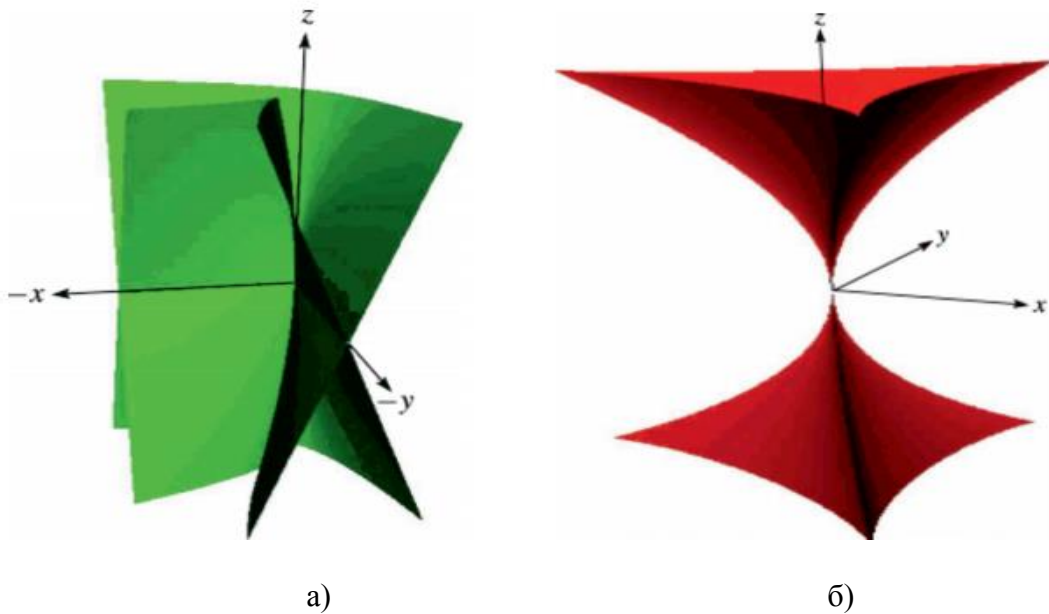


Рис. 3. Гіперболічна (а) та еліптична (б) омбіліка

Інтерес представляє питання, чи можна побудувати ефективну модель структурної трансформації матеріалу (принаймні деяких її видів) за допомогою більш простих функцій теорії катастроф, що містять тільки одну змінну і ряд керуючих параметрів. Одним із шляхів такого моделювання є припущення про те, що пропорція між елементами об'єму, що займає поверхня розділу фаз, і вільним об'ємом зберігаються постійними (10):

$$\eta_f \approx k\eta_s. \quad (10)$$

Таке співвідношення геометричних параметрів є грубою моделлю тріщини з однорідним розкриттям k . Якщо прийняти таку огрублену модель тріщини і відобразити процеси тріщиноутворення на структурному трикутнику Гіббса-Розебума, то ефект тріщиноутворення може бути описаний як переміщення вздовж відрізка, що виходить з вершини $\eta_v = 1$ («суцільний» при аналізованому масштабному рівні матеріал), або з будь-якої іншої внутрішньої точки трикутника для матеріалу зі складною структурою і наявними структурними елементами (рис. 4).

Так як у цьому випадку система стає формально моноваріантною, єдиною змінною залишається $\Delta\eta_v = \eta_{v1} - \eta_{v2}$, пов'язаною з тріщиноутворенням, при поширенні тріщини η_v зменшується.

Перейдемо до нормованого показника (11):

$$x = 1 - \frac{\Delta\eta_v}{\Delta\eta_{v \max}}, \quad (11)$$

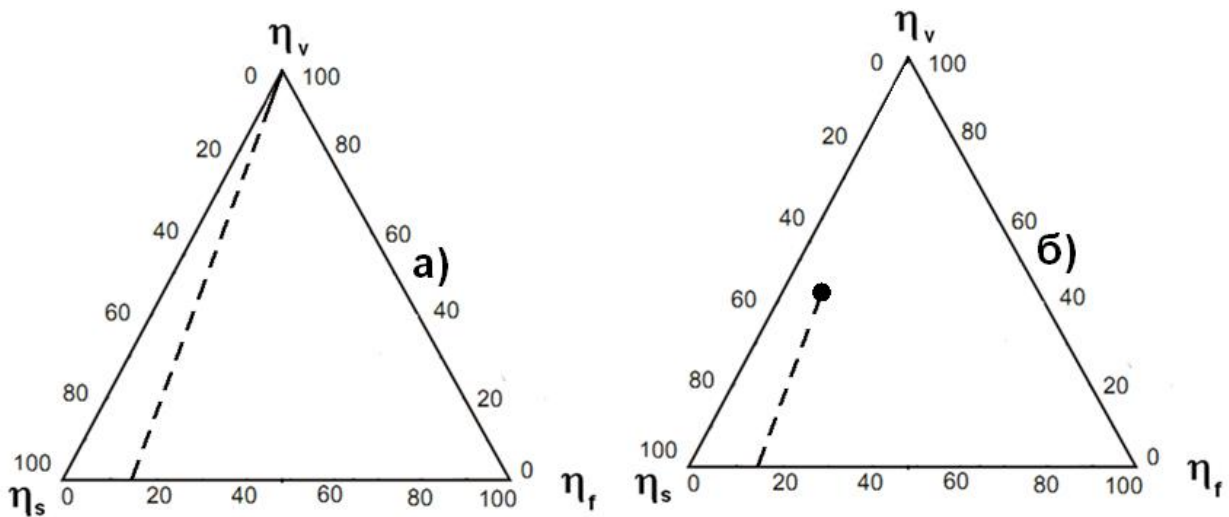


Рис. 4. Лінії постійних співвідношень (10) в трикутнику Гіббса-Розебуму (пунктир)

Його можна використовувати для побудови потенціалів $C(x)$ [13, 14] (див.(9)) (табл. 2). Статистична реконструкція дозволяє це здійснити через функцію розподілу (3).

Таблиця 2 – Потенціали теорії катастроф як апроксимуючі моделі керованого тріщиноутворення

Тип катастрофи	Формула
Складка	$C(x, a) = \frac{1}{3}x^3 + ax$
Збірка	$C(x, a, b) = \frac{1}{4}x^4 + \frac{1}{2}ax^2 + bx$
«Хвіст ластівки»	$C(x, a, b, c) = \frac{1}{5}x^5 + \frac{1}{3}ax^3 + \frac{1}{2}bx^2 + cx$
«Метелик»	$C(a, b, c, d) = x^6 + ax^4 + bx^3 + cx^2 + dx$

У всіх цих випадках параметрами управління можуть бути як рецептурно-технологічні фактори композиту, так і характер навантаження матеріалу в конструкції і зразку при випробуванні. Розглянемо, наприклад, найпростішу катастрофу збірки (рис. 5). Тут відображається не потенціал H або C , а його похідна A (7).

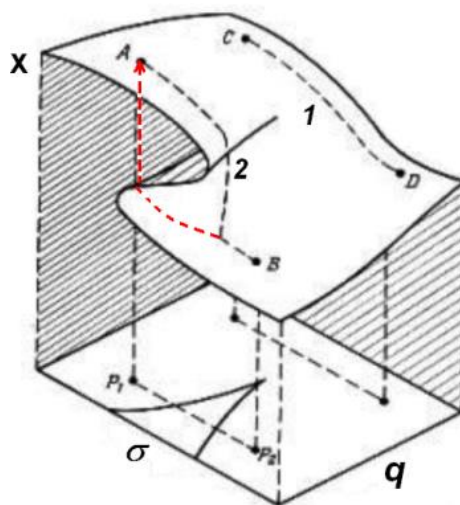


Рис. 5. Якісна інтерпретація процесів об'ємного руйнування матеріалу за допомогою теорії катастроф

Необоротне зростання об'єму, зайнятого тріщиною з її береговими поверхнями, моделюється гістерезисом (рис. 5, 2) і стрибкоподібним спаданням X . Якщо крива перерізу складання присікає вісь ординат (тут X), гістерезисні зміни трансформуються в незворотні (модель класичного руйнування). Залежно від властивостей матеріалу процес кінцевої деформації в деякому діапазоні є оборотним (рис. 5, 1), відповідним, наприклад, оборотним змінам структури при пружних деформаціях. Поява нових параметрів управління при переході до більш складних катастроф («ластівчин хвіст», «метелик», рис. 4) призводить до збільшення різноманіття динамічних режимів досліджуваного матеріалу за різних видів керуючих впливів.

Потенціали як із двома, і однієї змінної, що найчастіше реалізуються, відновлюються шляхом статистичної реконструкції. Об'єднання методів геометричної параметризації (1, 2), статистичної реконструкції (3-7), методів теорії катастроф та структурно-геометричних діаграм Гіббса-Розебуму дозволяє запропонувати єдиний алгоритм дослідження структури матеріалу та процесів структуроутворення (рис. 6).

Відповідно до цього алгоритму здійснюється аналіз частотних характеристик матеріалу, здійснюється перехід до структурних потенціалів, які є основою для прогнозу та управління експлуатаційними властивостями композиційних будівельних матеріалів.

Слід зазначити, що запропонована схема, що базується на структурних потенціалах у вигляді потенціалів та систем теорії катастроф, є пристосованою для вивчення процесів структуроутворення в композиційних матеріалах. Експериментальною основою тут можуть бути серії «миттєвих» знімків структури матеріалу, що формується, параметри потенціалів розглядаються при цьому як функції часу активної фази структуроутворення, наприклад, тужавління. Такий вважається перспективним для експериментально-статистичного моделювання процесів структуроутворення матеріалів.

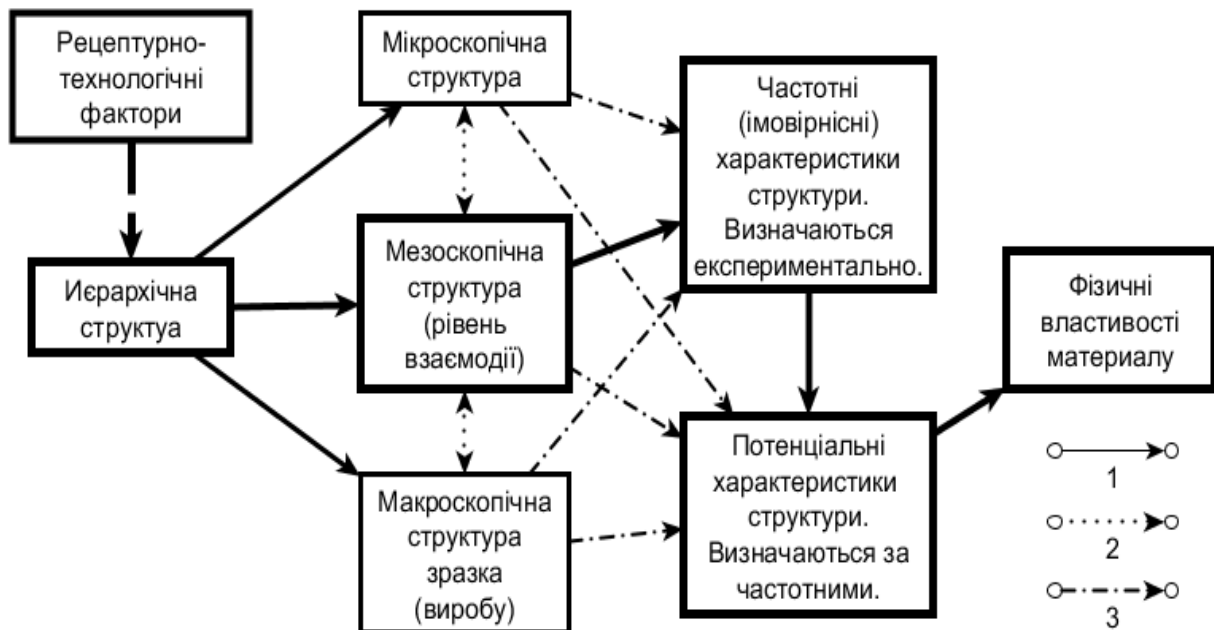


Рис. 6. Алгоритм структурно-орієнтованого дослідження структури матеріалів та процесів структуроутворення: 1 – переходи між етапами, 2 – відповідності, 3 – приховані впливи; пропонувані маршрути дослідження затемнені

Висновки. Розглянуті особливості застосування методів теорії катастроф при дослідженні проблем структуроутворення у *матеріалах*. Визначені потенціали теорії катастроф, що відповідають формам структурного потенціалу. Події, що відбуваються під час структуроутворення, моделюються змінами параметрів структурних потенціалів. Розроблений алгоритм послідовного переходу від зображень поверхонь матеріалу на мезоскопічному масштабі до частотних характеристик структури зображень і далі, до структурного потенціалу і фізичних властивостей композиту. Підхід, який запропоновано, є

перспективним до експериментально-статистичного моделювання процесу багатого осередкового структуроутворення.

Література

1. Выровой В.Н., Суханов В.Г., Коробко О.А. Структура материала в структуре конструкции Одесса: Полиграф, 2016. 244 с.
2. Выровой, В.Н., Дорофеев В.С., Суханов В.Г. Композиционные строительные материалы и конструкции. Структура, самоорганизация, свойства. Одесса: «ТЭС», 2010. 169 с.
3. Выровой В.Н., А. Н. Гергега, 2012. Ансамбль перколяційних кластерів фаз як основа само подібної структури композитів. *Сучасні будівельні матеріали*. 2012. №1(93). С. 53-57.
4. Довгань, И.В., Колесников, А.В., Семенова, С.В. Методы описания процессов коагуляции и структурообразования в строительных вяжущих материалах. *Вісник ОДАБА*. 2010. №38. С. 224-230.
5. Фридрихсберг Д. А. Курс коллоидной химии: учебник. Санкт-Петербург: Лань, 2010. 416 с.
6. Выровой В.Н., Суханов В.Г., Елькин А.В., Казмирчук Н.В. Самоорганизация. Структура. Свойства. *Моделювання та оптимізація будівельних композитів*: матеріали міжнародного семінару, 3-4 грудня 2020 р. Одеса: ОДАБА, 2020. С. 23-26
7. Еремин В.В., Каргов С.И., Успенская И.А. Основы физической химии: теория и задачи. М.: Экзамен, 2005. 480 с.
8. Breden J., Hubler A. Reconstruction Equation of Motion From Experimental Data with Unobserved Variables, *Phis. Rev. A*. 1990. № 42(10). P. 5817-5826.
9. Klimontovich Yu.L. Entropy evolution in self-organization processes. H-theorem and S-theorem. *Physica*. 1987. V.142A, No. 1-3. P. 390-404.
10. Эбелинг В., Энгель-Герберт Г. Экстремальные принципы и теория катастроф для стохастических моделей нелинейных необратимых процессов. Термодинамика и кинетика биологических процессов. М.: Наука, 1980. С. 153–169.
11. Tom, R. Structural stability, catastrophe theory, and applied mathematics. *SIAM Review*. 1977. № 19(2). P.189–201.
12. Zeeman, E. C. Catastrophe theory. *Scientific American*. 1976 234(4), 65–83.
13. Бородин А.И., Шаш Н.Н., Новикова Н.Н. Применение синергетических методов и теории катастроф. *Эффективное антикризисное управление*. 2015, 2. С. 84-90.
14. Liu, J., Bao, J., Yin, Y., Yang, S. Applications of Catastrophe Theory in Engineering: A Review. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*. 2015. №12(12). P. 5739–5744.

Reference

- [1] V.N. Vyrovoy, V.G. Sukhanov, O.A. Korobko, *Struktura materiala v strukture konstruksii*. Odessa: Poligraf, 2016
- [2] V.N. Vyrovoy, V.S. Dorofeev, V.G. Sukhanov, *Kompozitsionnyye stroitelnyye materialy i konstruksii. Struktura, samoorganizatsiya, svoystva*. Odessa: TES, 2017.
- [3] V.N. Vyrovoy, A.N. Gerega, "Ansambl perkolyatsiynikh klasteriv faz yak osnova samo podibnoi struktury kompozytiv", *Suchasni budivelni materialy*, vol. 1(93), pp. 53-57, 2012.
- [4] I.V. Dovgan, A.V. Kolesnikov, S.V. Semenova, "Metody opisaniya protsessov koagulyatsii i strukturoobrazovaniya v stroitelnykh vyazhushchikh materialakh", *Vіsnyk Odeskoi derzhavnoi akademii budivnytstva ta arkhitektury*, vol. 38, pp. 224-230, 2010.
- [5] D.A. Fridrikhsberg, *Kurs kolloidnoy khimii: uchebnik*. Sankt-Peterburg: Lan, 2010.
- [6] V.N. Vyrovoy, V.G. Sukhanov, A.V. Yelkin, N.V. Kazmirchuk, "Samoorganizatsiya. Struktura. Svoystva", *Modelyuvannya ta optyimizatsiya budivelnykh kompozytiv: materialy mizhnarodnoho seminaru*. Odesa, 2020, pp. 23-26.
- [7] V.V. Yeremin, S.I. Kargov, I.A. Uspenskaya, *Osnovy fizicheskoy khimii: Teoriya i zadachi*. M.: Ekzamen, 2005.

- [8] J.L. Breden, A. Hubler, "Reconstructing equation of motion from experimental data with unobserved variables", *Physical Review A*, vol. 42(10), pp. 5817-5826, 1990.
- [9] Yu.L. Klimontovich, "Entropy evolution in self-organization processes. H-theorem and S-theorem", *Physica*, vol.142 (1-3), pp. 390-404, 1987.
- [10] V. Ebeling, G. Engel-Gerbert, *Ekstremalnyye printsipy i teoriya katastrof dlya stokhasticheskikh modeley nelineynykh neobratimykh protsessov. Termodinamika i kinetika biologicheskikh protsessov*. M.: Nauka, 1980. pp. 153–169.
- [11] R. Tom, "Structural stability, catastrophe theory, and applied mathematics", *SIAM Review*, vol. 19(2), pp.189–201, 1977.
- [12] E.C. Zeeman, "Catastrophe theory", *Scientific American*, vol. 234(4), pp. 65–83, 1976.
- [13] A.I. Borodin, N.N. Shash, N.N. Novikova, "Primeneniye sinergeticheskikh metodov i teorii katastrof", *Effektivnoye antikrizisnoye upravleniye*, vol. 2(89). pp. 84-90, 2015.
- [14] J. Liu, J. Bao, Y. Yin & S. Yang, "Applications of Catastrophe Theory in Engineering: A Review", *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 12(12), pp. 5739–5744, 2015.

SIMULATION OF COMPOSITES STRUCTURE FORMATION PROCESSES USING THE METHODS OF THE CATASTROPHE THEORY

¹**Kolesnykov A.V.**, Ph.D., Associate Professor,
kolesnikov_himek@odaba.edu.ua, ORCID: 0000-0001-8737-0933

¹**Semenova S.V.**, Ph.D., Associate Professor,
semenova@odaba.edu.ua, ORCID: 0000-0002-5309-5854

¹**Makovetska O.O.**, Senior Lecturer,
makoveckaya_himek@odaba.edu.ua, ORCID: 0000-0002-3135-4333

¹*Odessa State Academy of Civil Engineering and Architecture*
4, Didrikhson str., Odessa, 65029, Ukraine

Abstract. The paper examines the possibility to model the structure formation processes in binder materials using some methods of catastrophe theory. Events at the level of coexistence and interaction of macroscopic and microscopic phenomena are analyzed. The dynamics of transformations at this level of material organization is considered using the method of structural potential, similar to the thermodynamic one, with the possibility of its empirical identification based on the processing of microscopic images. The transition to the potential functions of the theory of catastrophes is carried out by means of geometric parameterization – selection of areas of the volume occupied by material phases and areas associated with interface boundaries. The model of structure formation is presented as a phenomenon in stochastic gradient systems caused by the emergence of features of the structural potential and their transformation upon changing the controlling physicochemical parameters. The possibility of adapting the apparatus of phase diagrams of three-component systems to the considered tasks and its affinity with catastrophe theory models is shown. The structural-phase diagram is constructed by analogy to the Gibbs-Roseboom method on a triangle, while the coordinates are parts of components with different geometric structures – cavities, continuous material at a given scale and interfaces with the surrounding transformed material. From the potential functions of the theory of catastrophes, those that correspond to the analyzed system are reasonably selected - umbilical functions, and in the simplified version – potentials of one variable. A scheme for the study of materials using methods of structural potentials has been developed, which is based on the determination of mesoscopic scales for the material being studied, on the transition to the frequency characteristics of the image, then to the structural potential, which determines the range of structures realized in the material and, in the future, to the transition from structural potentials to physical properties.

Keywords: structure formation, structural potential, catastrophe theory, umbilical surfaces, diagram.

Стаття надійшла до редакції 9.11.2023