

## МОДЕЛЬ КЛАСТЕРООБРАЗОВАНИЯ В ХАОТИЧЕСКОМ ПОТОКЕ

Асланов А. М., Ботнар К. В. (Одесская государственная академия холода, г. Одесса), Выровой В. Н. (Одесская государственная академия строительства и архитектуры, г. Одесса), Герега А. Н. (Одесская государственная академия холода, г. Одесса), Нетеса Н. И. (Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта, г. Днепропетровск)

Предложена компьютерная модель начальных стадий процесса кластерообразования в двухфазной открытой системе. Разработан алгоритм перемещения и взаимодействия твёрдых частиц и кластеров. Установлена мультифрактальность полученных кластеров, построены поля межчастичного взаимодействия в них, получены данные о возможности модификации свойств кластеров на стадии технологических операций.

Хорошо известно, что некоторые технологические характеристики материала определяется на ранних стадиях формирования кластеров дисперсной фазы вещества [1–3]. Говоря о кластерах, мы имеем в виду объекты промежуточной асимптотики, определяемые как совокупность частиц, индивидуальные свойства которых трансформируются в свойства кластера. Характерным для такого рода объектов, является скачкообразное изменение свойств при изъятии или добавлении даже одной частицы.

Кластеры, образованные из твёрдых частиц двухфазного потока, обладают свойствами, одна часть которых определяется структурой и составом вещества, а другая — кинетикой процесса кластерообразования. В некоторых случаях полученные кластеры представляют собой, т. н., фрактальные агрегаты. Для них характерно структурное самоподобие, зависимость средней плотности от размеров и, как следствие, возможность описания с помощью фрактальной размерности.

Параметры получаемых материалов зависят и от организации кластерной структуры, которая во многом закладывается уже на стадии приготовления полидисперсной смеси, определяется первичной организацией частиц.

Управляя процессами агрегации, формируя структуру и свойства кластеров, можно заложить даже такие свойства материалов, влияние на которые начальных стадий кластерообразования весьма проблема-



точно проследить. Исследование процессов образования кластеров, возможно, позволит сформулировать принципы, которые будут положены в основу технологии получения полидисперсных систем.

**Предложена компьютерная имитационная статистическая модель** образования кластеров твёрдой фазы потока, позволившая изучить структуру и свойства модельных агрегатов, влияние на них характеристик дисперсной фазы, взаимодействия частиц и внешних факторов, а также параметров хаотического потока и конструкции, в которой происходит движение.

Модель представляет собой алгоритм перемещения и взаимодействия твёрдых частиц между собой и со стенками конструкции.

В модели сделаны допущения о том, что взаимодействующие частицы имеют сферическую форму, движутся в хаотическом потоке и при сближении на определённое расстояние слипаются с единичной вероятностью. При этом задаются количество и радиусы частиц, условия их взаимодействия и коагуляции, а также параметры конструкции, в которой движется двухфазный поток.

Система является открытой: процессы самоорганизации идут под внешним воздействием, которое в модели представлено переносной составляющей скорости частиц и кластеров. В модели объединение частиц в кластеры и соединение кластеров происходит при сближении на определённое расстояние. Реализованы два варианта определения такого расстояния — фиксированное и пропорциональное массам взаимодействующих объектов. После возникновения контакта, части будущего кластера имеют возможность «упасть» так, чтобы обеспечить его максимальную компактность.

В модели предусмотрена визуализация кластеров; характерные формы изображены на рис. 1.

Степень хаотичности потока оценивалась двумя способами: по величине фрактальной размерности траектории и с помощью временной автокорреляционной функции скорости движения частиц и кластеров, служащей мерой сходства значений скорости в моменты времени, отличающиеся на определённую величину.

Ещё один параметр хаотического потока, влияющий на формирование структуры кластера, — персистентность [4—7]. Характеризующая наличие тенденций развития динамической системы и степень их стабильности, персистентность может быть описана с помощью показателя Хёрста, который определяется из эмпирически найденного соотношения и характеризует нормированный размах (отношение максимального размаха отклонения к стандартному отклонению)  $R/\sigma \sim \tau^H$ , где  $\tau$  — промежуток времени наблюдения. В рассматриваемой модели показа-



тель Хёрста восстанавливается по величине фрактальной размерности следов взаимодействия кластеров твёрдой фазы со стенами аппарата (рис. 2). Таким образом, взаимодействие кластеров со стенками – это не только существенная часть движения, но и фактор, позволяющий определить характерные особенности двухфазного потока.

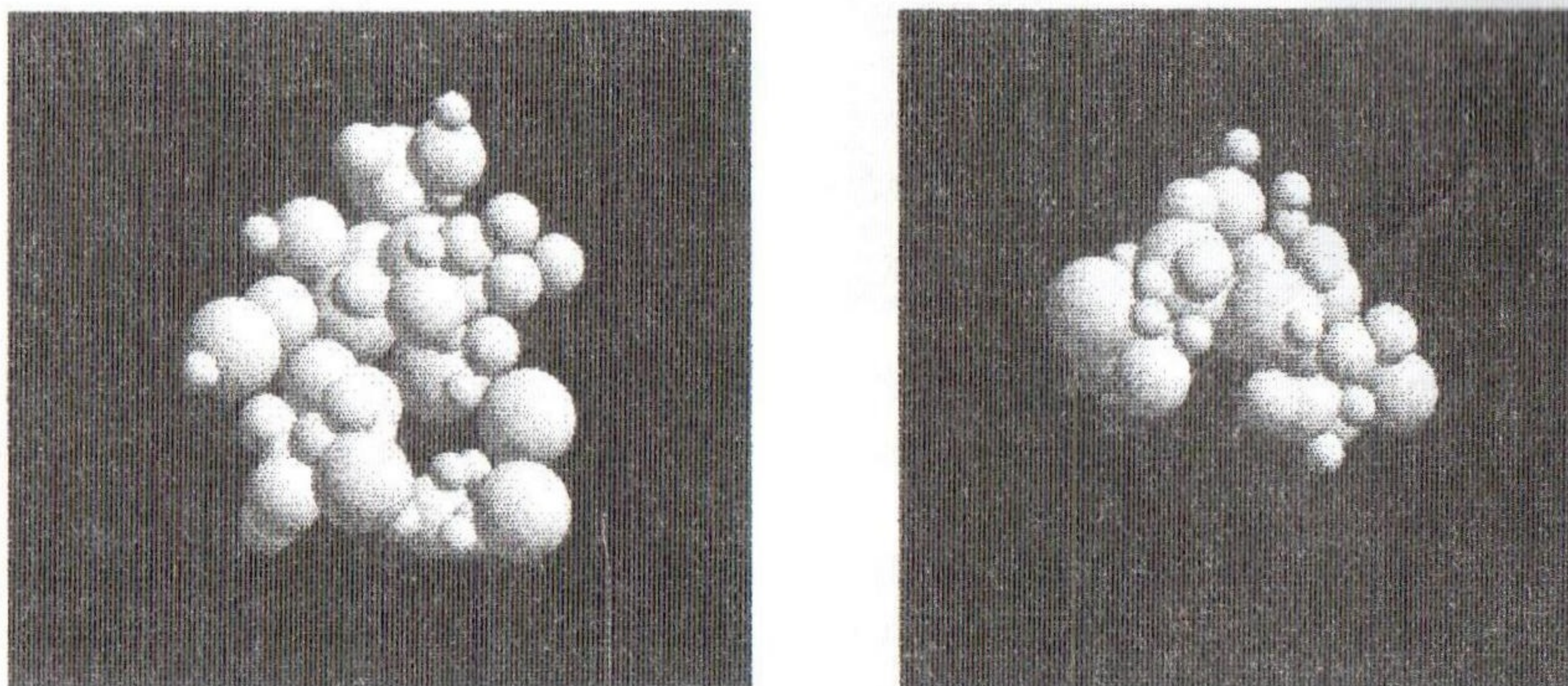


Рис. 1. Вид типичных кластеров

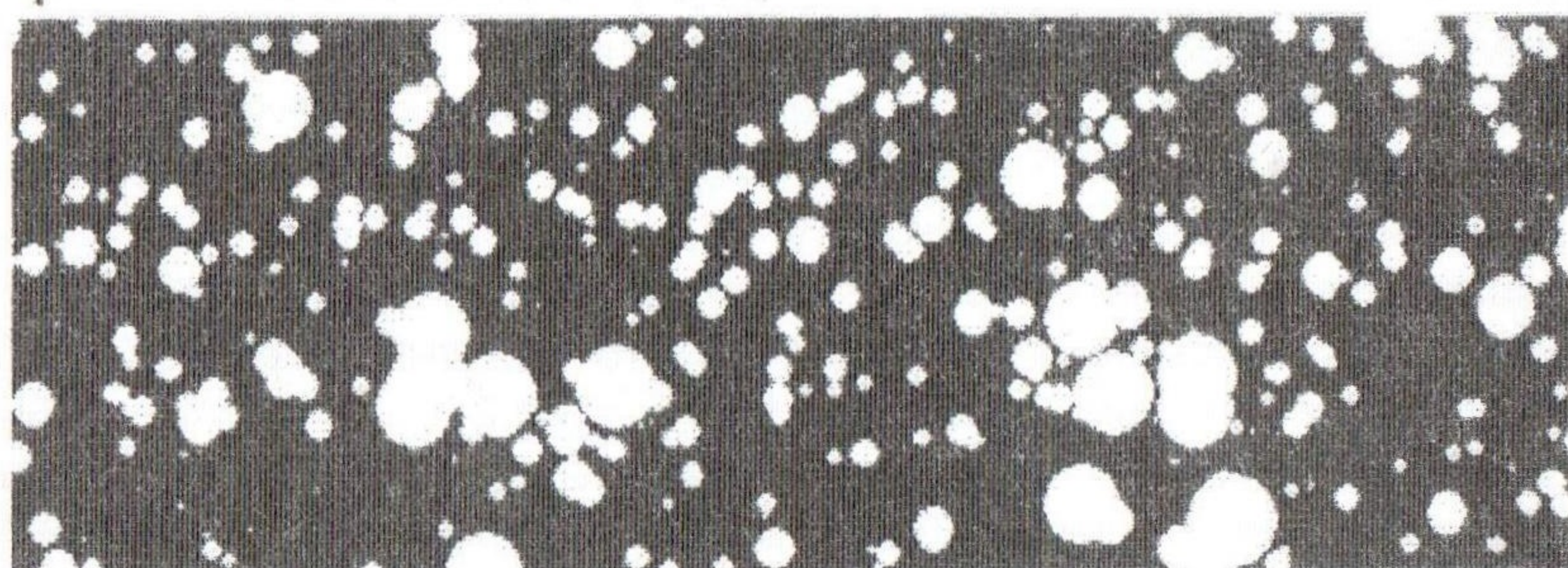


Рис. 2. Вид поверхности стенки конструкции в результате взаимодействия с кластерами

Для расчёта площади следа, оставляемого кластером в результате единичного акта взаимодействия на стене конструкции, использован следующий алгоритм (см. рис.3 и 4):

1. вокруг кластера из центра масс описывается сфера;
2. определяется радиус гирации;
3. вокруг кластера из центра масс описывается сфера;
4. определяется радиус гирации;



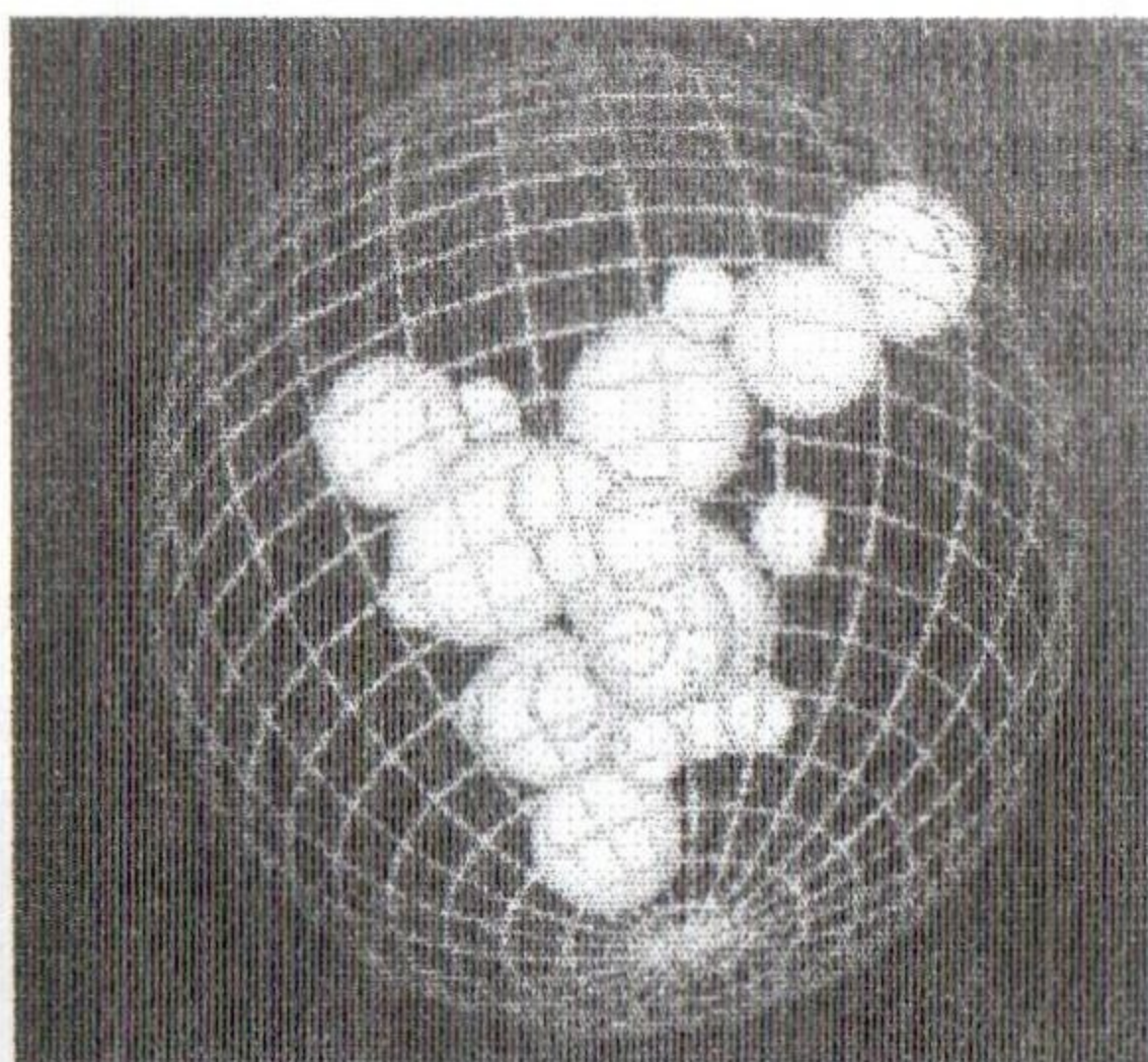


Рис. 3. Кластер в сфере: к определению радиуса гирации

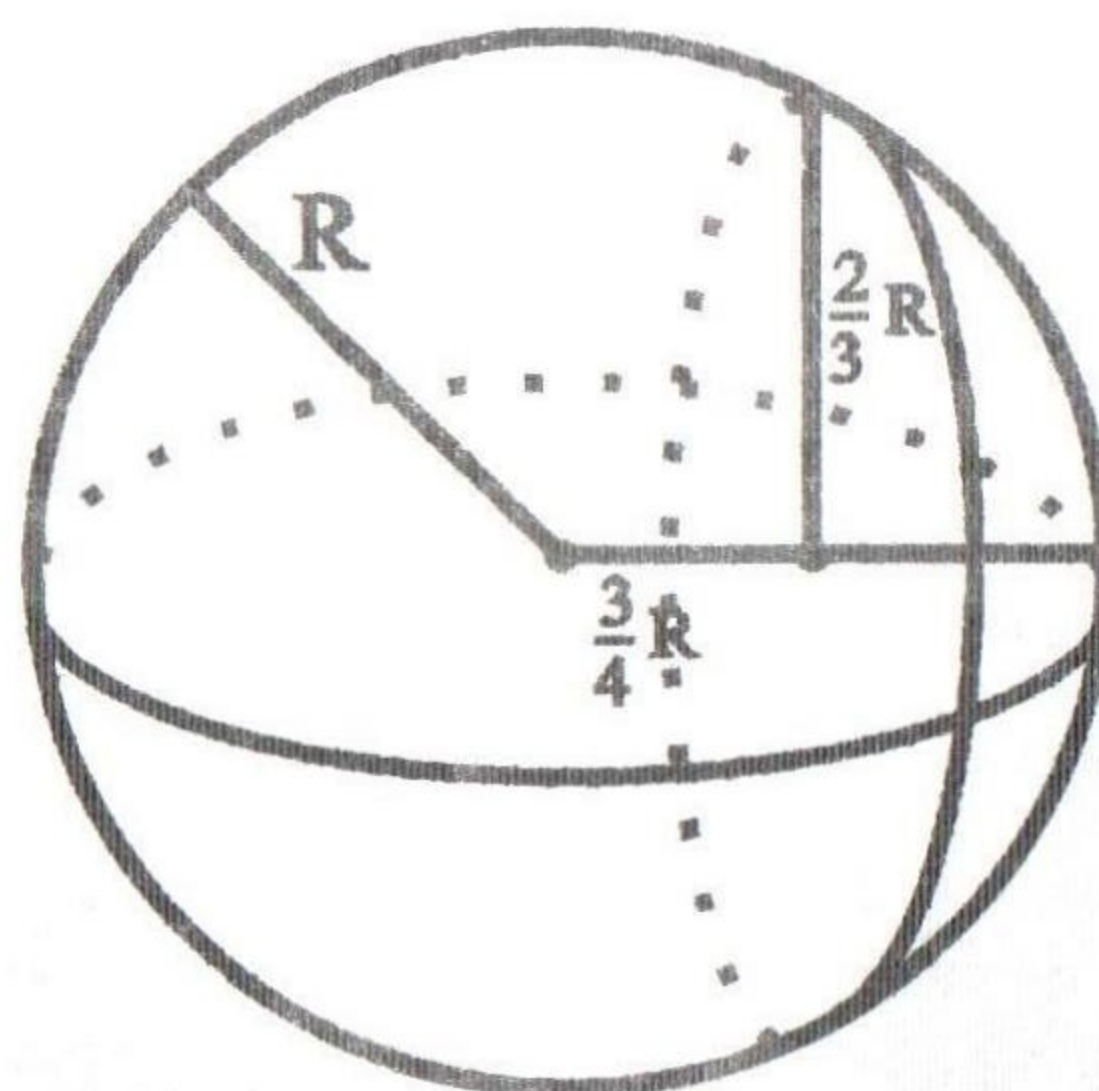


Рис. 4. К расчёту площади поверхности контакта

5. вне зависимости от направления скорости движения кластера, на расстоянии  $0,75$  радиуса от центра гирации сфера пересекается плоскостью, параллельной стенке конструкции;
6. определяется площадь сечения взаимодействия.

Для анализа следа взаимодействия частиц и кластеров, циркулирующих в объёме конструкции, с её стенками существенным является вопрос о времени, в течение которого создавался изучаемый след. Если этот промежуток будет слишком малым, следы взаимодействия со стенкой будут разрозненными точками, другая крайность приведёт к практически сплошному пятну. В работе определены промежутки времени, зависящие от скорости циркуляции кластеров, и позволяющие получать статистически-самоподобные пятна, для которых может быть определена фрактальная размерность.

Изучение зависимости фрактальной размерности следа от параметров движения кластеров в модельном эксперименте позволило установить пределы изменения различных составляющих скорости, оставляющих след объектом промежуточной асимптотики.

Процессы образования, роста и модификации кластера естественным образом ставят вопрос о механической устойчивости, что, в свою очередь, приводит к необходимости построения и изучения полей межчастичного взаимодействия в кластере.

Методика построения полей тел неправильной геометрической формы, основанная на работах Н. Е. Жуковского [8], и некоторые результаты описаны в [6, 9–12]. Зависимости, полученные в модели, аналогичны описанным в [11, 12], и позволяют судить о механических деформациях в кластерах (рис 5), степени их устойчивости и, по необ-



ходимости, изменяя алгоритм процесса кластерообразования, оптимизировать их свойства.

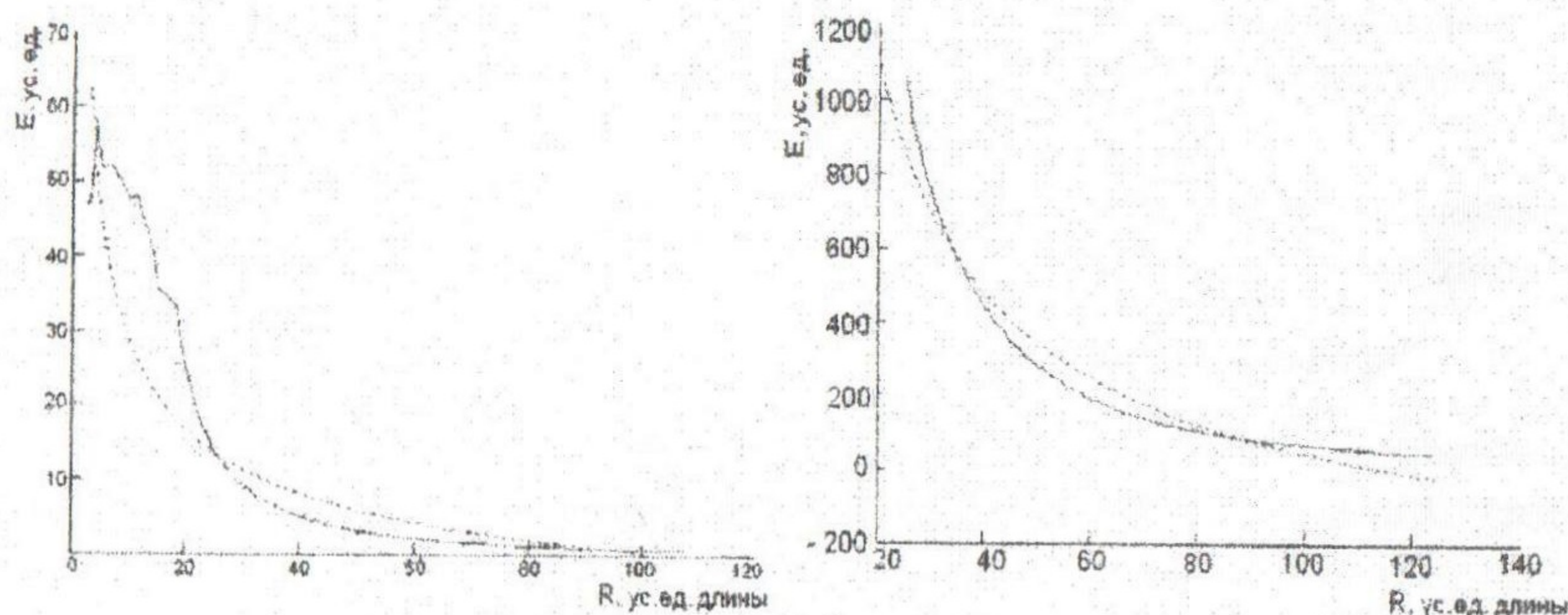


Рис. 5. Зависимость силового поля произвольного кластера от расстояния (сплошная линия – экспериментальная кривая, пунктир – аппроксимация)

Процессы, описанные в предложенной модели, являются следствием взаимодействия многих факторов. Следовательно, результаты, полученные при проведении компьютерного эксперимента, являются вероятностными по своему характеру. Это связано и со статистической природой изучаемых явлений, и с погрешностями расчётов, заложенными, например, в определении размерностей А. Реньи. Описанные ниже результаты, естественно, прошли статистическую верификацию.

Результаты компьютерных экспериментов показали, что плотность модельных кластеров изменяется в достаточно широких пределах и зависит от степени хаотизации траектории: чем больше траектория схожа с броуновской, тем выше уровень компактности кластера, что коррелирует с известными данными [13, 14].

Получаемый в таких условиях кластер имеет мультifrакционную природу [15]. Для описания его структурных свойств используются первые четыре размерности А.Реньи [4, 5, 15].

### Вывод

Оперируя в рамках модели внешними воздействиями, можно наблюдать и изучать процесс кластерообразования, изменять свойства модельных кластеров за счет варьирования степенью хаотизации потока, изменения дисперсности частиц и диапазона их скоростей. Она



также позволяет визуализировать движение модельного потока частиц и кластеров различной формы, массы и плотности; вычислять двумя различными способами первую четверку размерностей А.Реньи для плоских и объемных тел; определять и регулировать степень персистентности потока.

### *Литература*

1. Дорофеев В.С., Выровой В.Н. Технологическая поврежденность строительных материалов и конструкций. – Одесса: Город мастеров, 1998. – 165 с.
2. Соломатов В.И., Выровой В.Н., Дорофеев В.С., Сиренко А.В. Композиционные строительные материалы и конструкции пониженной материалоемкости. – Киев: Будівельник, 1991. – 145 с.
3. Чернявский В.Л. Адаптация бетона. – Днепропетровск, 2002. – 115с.
4. Мандельброт Б. Фрактальная геометрия природы. – Москва: ИКИ, 2002. – 656 с.
5. Федер Е. Фракталы. – Москва: Мир, 1991. – 254 с.
6. Герега А.Н. Иерархическая модель кластерообразования во многоуровневой системе//Вісник Одеської державної академії будівництва та архітектури, № 12, 2003 г. – С. 88-91.
7. Барьяхтар В.Г., Гончар В.Ю., Яновский В.В. Природа сложной структуры пятна загрязнений//Український фізичний журнал, т. 38, № 15. – 1993 г. – С. 967-975.
8. Жуковский Н.Е. Теоретическая механика. – Москва: ГИТТЛ, 1952. – 812 с.
9. Герега А.Н., Выровой В.Н., Ковдиенко Н.А., Шумакевич А.И. Компьютерное моделирование фрактальных кластеров в гетерогенных средах//Моделирование в материаловедении. – Одесса, 1998. – С. 20-21.
10. Герега А.Н. Модель коагуляции в циркулирующем потоке//Труды IV Сибирского конгресса по промышленной и прикладной математике (ИНПРИМ-2000) – Новосибирск, 2000 г.
11. Герега А.Н., Выровой В.Н. Управление свойствами композиционных материалов. Перколяционный подход// Вісник Одеської державної академії будівництва та архітектури, № 20, 2005 г. – С. 56-61.
12. Герега А.Н., Воробьева Е.Н. О механических напряжениях, создаваемых кластерами гетерогенной среды//Моделирование и оптимизация в материаловедении. – Одесса, 2005. – С. 22.
13. Жюльен Р. Фрактальные агрегаты//Український фізичний журнал, т. 157, вип. 2. – 1989 г. – С. 339-357.
14. Смирнов Б.М. Фрактальные кластеры//Український фізичний журнал, т. 149, вип. 2. – 1986 г. – С. 177-200.
15. Божокин С.В., Паршин Д.А. Фракталы и мультифракталы. – Ижевск, 2001. – 128 с.