

Применение методов теории хаоса и нелинейной динамики к разработке технических объектов литейного производства

Методы повышения связующей способности технических лигносульфонатов являются эффективным инструментом совершенствования технологических процессов литья. Они позволяют комплексно решать вопросы ресурсосбережения и экологии, поскольку расширение применения лигносульфонатов позволяет сократить использование в производстве дорогостоящих и экологически опасных синтетических смол и масляных связующих. В этой связи целесообразно сделать оценку эффективности использования методов воздействия на лигносульфонаты для повышения их связующей способности с применением методологических подходов нелинейной динамики и теории хаоса для прогнозирования состояния связующего и получения материала с заранее заданными свойствами, с целью практического применения разработанных литейных связующих в производстве отливок.

Ключевые слова: методы повышения связующей способности, связующие материалы, технические лигносульфонаты, связующая способность, фрактальный объект, детерминированный хаос

Актуальность проблемы исследования. Литейное производство Украины, в сложившихся условиях, является одним из наиболее перспективных, но пока не оценённых в полной мере, объектов инвестирования. Известно, что наибольшей статьёй заработанных валютных поступлений в Украине, является выпуск и продажа на экспорт металлопроката, этот показатель варьируется в пределах 42-44 % от общего объёма всех поступлений в нашу страну, в то же время 1 т любого литья по стоимости эквивалентна 5-7 т экспортируемого металлопроката [1-3]. Объёмы производства и потребления литья в мире в 2010-2012 гг. составили около 89-91 млн т, что в стоимостном эквиваленте составляет примерно €350-370 млрд. В предкризисный 2007 г. было произведено всего 67 млн т литья. Это говорит о том, что литейное производство не уменьшило объёмов производства даже в кризисное время, а сумело их нарастить [2].

Несмотря на постоянно идущую в правительственных кругах риторику об инновационном развитии Украины, не существует единой стратегии относительно развития литейного производства страны как потенциального инструмента развития экономики за счёт наращивания экспорта литья. Как свидетельствуют эксперты [2], всего 1 млн т экспортированного литья по стоимости соответствует 5 млн т проката. Продавая в пять раз меньшее количество продукции, можно получать такую же прибыль. Если бы Украина экспортировала не прокат, а литьё, то могла бы получать прибыль в размере €20 млрд ежегодно [1, 2].

Украина гарантированно производит 1 млн т литья в год, что в денежном эквиваленте составляет 15 млрд грн. По прогнозу Ассоциации литейщиков Украины к 2020 г. объём производства машиностроительной продукции в стране возрастёт в три раза, и для обеспечения его заготовками увеличится производство до 2,5 млн т литья. Это означает, что литейщики смогут производить продукции на 37,5 млрд грн.

Будут созданы дополнительно 150 тыс. рабочих мест, что очень важно для роста занятости населения. Кроме того, работой в отрасли будут обеспечены сотни учёных. Из этих 37,5 млрд грн 10 останутся в бюджете нашего государства [2].

Такие перспективы требуют адекватных технологических решений. Нарращивая производство литья, мы должны позаботиться об эффективности литейных технологий, а это в современном понимании, не только валовые экономические показатели, но и экология, безопасность труда, ресурсоэффективность и разнообразные социальные аспекты, связанные с производственным процессом.

Оценивая значимость упомянутых аспектов, целесообразно рассмотреть наиболее уязвимые элементы технологий литья, а именно, обратить особое внимание на связующие материалы, которые являются неотъемлемой частью практически любого технологического процесса изготовления отливок. Они, прежде всего, являются носителями потенциальных экологических опасностей для окружающей среды, поскольку на этапах технологического процесса выделяют наиболее опасные токсины (вещества первого и второго класса опасности) [3, 4]. Широко распространённые в настоящее время в литейном производстве украинских предприятий масляные и смоляные связующие в большинстве случаев не отвечают предъявляемым требованиям безопасности, а жидкое стекло очень часто не удовлетворяет условиям технологичности. Поэтому целесообразно рассмотреть альтернативные решения, обратившись к лигносульфонатным материалам, как наиболее безопасным с экологической точки зрения, технологичным и перспективным связующим [4].

Всё это предопределяет необходимость более детального изучения затронутой проблематики в контексте оценки возможностей использования лигносульфонатных связующих для её разрешения, что

требует системного изучения и анализа опыта применения ЛСТ в литейном производстве, выявления причин, сдерживающих их более широкое применение и поиск путей преодоления этих проблем.

Цель работы состояла в поиске адекватных объекту исследований (техническим лигносульфонатам), подходов и методов оценки изменения прочностных характеристик в условиях неопределённости их олигомолекулярного состава и процессов структурообразования в процессе конденсации, для прогнозирования их состояния и создания литейного связующего материала с заранее заданными свойствами.

Лигносульфонаты как перспективное сырьё для разработки новых связующих материалов. Типичным представителем лигносульфонатных связующих материалов на современном Украинском рынке являются «Лигносульфонаты технические» (ЛСТ), которые выпускаются в соответствии ТУ 13-0281036-029-94, ТУ 2455-064-05711131-03 и ТУ 2455-028-00279580-2004, соответственно порошкообразные, модифицированные (с улучшенными связующими свойствами) и жидкие. Производят ЛСТ – целлюлозно-бумажные комбинаты (ЦБК) Российской Федерации, на Украинском рынке – 8 из 14 производителей ЛСТ. Технические характеристики этого материала показаны в таблице.

Лигносульфонаты технические жидкие и порошкообразные – это побочный продукт переработки древесины. ЛСТ представляют собой смесь солей лигносульфоновых кислот (с примесью редуцирующих и минеральных веществ), получаемых из щелоков бисульфитной варки целлюлозы.

С точки зрения требований безопасности лигносульфонаты технические порошкообразные – горючие вещества, пожаро- и взрывобезопасные, по степени воздействия на организм относятся к веществам 4-го класса опасности (инертные, не опасные для человека). В литейном производстве они применяются в жидком состоянии: ЛСТ марок «А» (для литейного производства) и «С» (общетехнического назначения). ЛСТ как литейное связующее – это водный раствор лигносульфоновых кислот с натриевым, кальциевым или аммониевым основанием, имеющий тёмно-коричневый цвет, со слабым специфическим запахом.

Лигносульфонаты технические (состояние поставки ТУ 13-0281036-029-94, ТУ 2455-064-05711131-03 и ТУ 2455-028-00279580-2004)

Наименование показателей	ЛСТ	ЛСМ	ЛСТП
Массовая доля сухих веществ не менее (%)	47	92 (порошкообразные) 53 (жидкие)	
рН водного раствора не менее	4,4	4,4	4,5
Предел прочности при растяжении высушенных образцов, МПа, не менее	0,6	0,6	0,69
Влажность, %, не более	–	–	4,0
Массовая доля золы к массе сухих веществ, %, не более	18	22,0	18,0
Вязкость условная, с	50-320	50-320	–
Массовая доля редуцирующих веществ к массе сухих веществ, %, не более	–	15	10
Плотность, кг/м ³ , не менее	1230	1260	–

Жидкие технические лигносульфонаты заливают в железнодорожные цистерны с нижним сливом, автоцистерны, бочки и другие ёмкости. Порошкообразные технические лигносульфонаты упаковывают в бумажные и полипропиленовые мешки, а также в мягкие специализированные контейнеры разового использования.

В соответствии с ТУ ЛСТ используются:

- в качестве разжижителя сырьевой смеси для снижения влажности шлама при изготовлении цемента;
- в качестве связующего материала при производстве формовочных и стержневых смесей при чугунном, стальном и цветном литье;
- при агломерации руд чёрных металлов; изготовлении огнеупоров; брикетировании;
- в качестве смазочных и смазочно-охлаждающих жидкостей при горячей штамповке и ковке;
- как пенообразователь при кислотном травлении металла;
- в качестве шлихтующего средства целлюлозосодержащих основ в текстильной промышленности;
- в качестве пластифицирующего материала при изготовлении гипсокартонных листов;
- при гранулировании технического углерода и пористых наполнителей из сыпучих порошкообразных материалов, шихт;
- как диспергатор и стабилизатор суспензий в производстве химических средств защиты растений;
- в качестве смазочных и смазочно-охлаждающих жидкостей в горячей штамповке и ковке;
- как исходное сырьё и диспергатор при изготовлении синтетических дубителей;
- для изготовления древесностружечных, древесноволокнистых плит и фанеры;
- как пластификатор цемента и бетона;
- в качестве реагента для регулирования основных параметров буровых растворов для нефтяных и газовых скважин;
- как реагент для флотации руд;
- в ином качестве в различных сферах производства.

Примечательна характеристика связующей способности, приводимая производителем, для разных разновидностей ЛСТ представленных в таблице, МПа: для ЛСТ – 0,60, ЛСМ – 0,60, ЛСТП (порошкообразных) – 0,69. Она фактически находится в пределах 0,6 МПа, хотя декларируется повышенная связующая способность ЛСМ. Практика показывает различия регламентируемого показателя прочности в пределах 5-7 %, то есть почти в пределах статистической погрешности. Что касается жидких ЛСТ марок «А» и «С», технические условия регламентируют разницу в связующей способности 0,6 МПа для первой и 0,4 – для второй. Однако на практике эти различия также находятся на уровне

статистической погрешности. Это не позволяет говорить о существенном увеличении связующей способности ЛСТ, является не достаточным и требует дополнительных усилий по улучшению этого показателя.

Длительное время, до второй половины 90-х годов прошлого века, литейная отрасль Украины, являлась одним из основных потребителей ЛСТ. По объёмам применения лигносульфонатные связующие делили второе место с жидким стеклом, не значительно ему уступая [3, 4]. Однако в связи с дезинтеграцией производственных связей, упрощённым доступом к западным рынкам литейных технологий и другими политическими факторами эта ситуация существенно образом изменилась. В настоящее время доминируют, хотя и устаревшие морально, но достаточно работоспособные разнообразные технологии производства отливок по ХТС – процессам с использованием разнообразных фенольных, фенольно-формальдегидных, карбомидо-формальдегидных смол. Также используется жидкое стекло, глина и лишь частично ЛСТ [4].

Анализ процессов структурообразования ЛСТ. Анализ практического опыта применения ЛСТ в качестве связующего материала в литейном производстве, проведённый выше, не позволяет понять внутренние механизмы, скрытые пружины процессов, приводящие к повышению связующей способности ЛСТ. В этой связи, основываясь на теоретических представлениях о природе лигносульфонатных материалов и существующих теориях формирования прочности литейной формы, целесообразно провести на более глубоком фундаментальном уровне анализ предпосылок – теоретически возможных процессов, которые бы могли обеспечить повышение связующей способности ЛСТ.

По-видимому, логика данного исследования требует: необходимость определения возможной материальной основы – химических связей обеспечения прочности материала (ЛСТ); проработку возможной механики протекающих процессов, приводящих к такому состоянию материала; выявлению необходимых условий обеспечения протекания упомянутых процессов именно в таком направлении.

Разработка теоретических положений повышения связующей способности ЛСТ, помимо понимания их материальной основы, механизма и условий, требует выяснения вопросов природы ЛСТ и генезиса её формирования, а также изучения влияния технологических факторов на прочностные показатели ЛСТ.

Такой подход позволит выработать рабочую гипотезу для последующего проведения комплекса экспериментальных исследований.

Следует обратить особое внимание на сложность и многостадийность переработки древесины при получении ЛСТ (рис. 1). Это обстоятельство существенно образом формирует их свойства [3, 12]. Обращает внимание тот факт, что ЛСТ не являются главным продуктом на ЦБК. Это предопределяет отношение у производителя к этому продукту. Главным продуктом, как видно из рис. 1 является целлюлоза. По этой причине ЛСТ, это фактически упаренный до соответствующей плотности

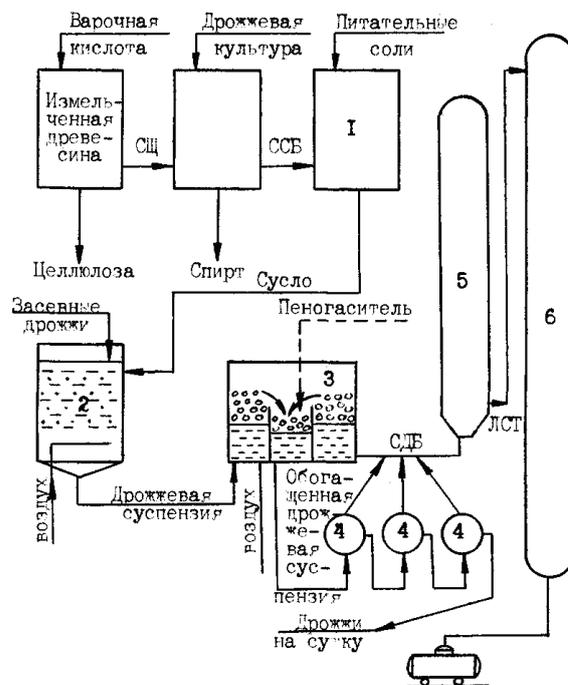


Рис. 1. Принципиальная схема технологического процесса получения ЛСТ: 1 – ёмкость для приготовления сусла; 2 – инокулятор; 3 – флатор; 4 – установка сепарации дрожжей; 5 – выпарная установка СДБ; 6 – ёмкость для хранения ЛСТ

сульфитный щелок – продукт разрушения лигнина в растительной ткани. Доведённый до определённой консистенции (ТУ 13-0281036-029-04), он выставляется на продажу. Фактически такое «бросовое» отношение, а это для ЦБК отход – не упаренный сульфитный щелок сливается в реки, предопределяет не стабильность свойств и все вытекающие отсюда причины неудовлетворительных прочностных свойств.

Учитывая это и констатируя сложность производства ЛСТ, их свойства могут колебаться в очень широких пределах. Специфика производства (индивидуальная в каждом случае) будет определять процессы делигнификации древесины, то есть в каждом конкретном случае образуется индивидуальный полимолекулярный состав ЛСТ с соответственным молекулярно-массовым распределением и дисперсией значений молекулярных масс. Этот показатель может меняться в зависимости от даже незначительных изменений технологического процесса.

Фактически ЛСТ, в их нынешнем состоянии, можно рассматривать как фрактальный объект и применять к ним, вернее к процессам их структурообразования, методологию моделирования систем, находящихся в условиях детерминированного хаоса.

Такие системы характеризуются неопределённостью, общей неустойчивостью, что в итоге приводит к нестабильности молекулярной структуры. Это предопределяет то, что за одной и той же торговой маркой, например ЛСТ марки «А», могут скрываться совершенно разные по структуре и химическому составу вещества. Отсюда и нестабильность свойств конечного продукта ЛСТ, поставляемого для нужд литейного производства.

Таким образом, становится понятной роль молекулярной массы в показателях прочности ЛСТ, так подробно описанная в работах А. П. Семика [4]. По-видимому, полидисперсность олигомолекулярного состава ЛСТ, наличие структурных элементов – очень маленьких – до 500 единиц массы, и очень больших – до 500 000 000 единиц массы – не позволяют эффективно выстраивать прочные полимерные каркасы (сложение очень маленького и очень большого очевидно не даёт возможности получать прочное).

На наш взгляд, именно это обстоятельство является главной причиной, предопределяющей низкую связующую способность ЛСТ.

Перечисленное, с одной стороны определяет экономическую целесообразность, экологическую разумность и техническую возможность разработки на основе ЛСТ новых связующих материалов с высокими прочностными свойствами, а с другой – объясняет нестабильность свойств и слабую связующую способность.

Установили, что физическим носителем прочностных свойств является трёхмерный сетчатый полимер. Все процессы, ведущие к его формированию, будут приводить к повышению связующей способности ЛСТ.

Выяснили, что причиной нестабильности свойств и низкой связующей способностью является неоднородность, большая полидисперсность его состава ЛСТ. Это объясняет доказанный в работах А. П. Семика тезис – все процессы, ведущие к повышению молекулярной массы, обеспечивают повышение прочностных свойств ЛСТ. Действительно повышение молекулярной массы повышает однородность состава ЛСТ, а равные молекулярные блоки, в процессе отверждения дают более прочные полимерные каркасы, хотя бы за счёт снижения внутреннего напряжения в манжетах и плёнках связующего.

Все процессы, приводящие к повышению молекулярной массы, стабилизируют, делают более однородным молекулярно-массовое распределение, снижают их полидисперсность, связующее структурируется. Результатом этого есть высокие прочностные характеристики.

Условием обеспечения подобных процессов является гомогенизация – снижение степени полидисперсности молекулярного состава ЛСТ, что неизменно должно приводить к повышению связующей способности ЛСТ и стабилизации свойств.

В этой связи рассмотрим возможность применения методов теории хаоса и нелинейной динамики к процессам структурообразования и формирования прочностных характеристик лигносульфонатных связующих материалов.

Фрактальная модель иерархически соподчинённого процесса структурообразования в полимерной системе. Дается математическое описание кинетики процесса структурообразования в системе на основе синергетического подхода в рамках концепции перестраиваемого потенциального рельефа. Адекватное математическое представление кинетики процесса дается диффузионным формализмом. При этом установление когерентной связи в ансамбле исходных реагентов приводит к коллективным эффектам,

позволяющим рассматривать процесс на основе формализма теории фракталов. По мере формирования фрактальности реализуется режим, в котором необходимо учитывать процессы установления модулированной структуры в поле минимально устойчивых структурных элементов, что соответствует закономерностям фазового перехода второго рода

В рамках единого подхода, основанного на анализе локализованных возбуждений рассмотрены нелинейные физико-химические процессы структурообразования в полимерной среде. Роль таких возбуждений в существенно нелинейных системах, каковыми являются полимерные системы, аналогична роли автоколебаний и волн в нелинейной динамике. Явления самоорганизации динамических систем, протекающие при формировании различных, в том числе полимерных структур стали, в последнее время стало предметом достаточно интенсивных исследований. При этом обнаруживаются явления детерминированного хаоса с образованием фрактальных пространственно-временных структур. Изложению обозначенной картины посвящена данная статья.

Анализ современного состояния проблемы. Развитие современной механики (как теоретической, так и экспериментальной) во многом опирается на представление о множествах, обладающих нецелой размерностью. Понятие дробной (фрактальной) размерности было впервые сформулировано в работах Ф. Хаусдорфа и Безиковича, которым предшествовали исследования выдающихся математиков конца XIX – начала XX веков, таких как Г. Кантор, К. Вейерштрасс, Дж. Пеано, Н. Кох, В. Серпинский [5-8]. Всплеск работ по фракталам затронул такие основополагающие направления как неравновесная термодинамика [10, 11] и космология [8, 9], теория динамического хаоса [10, 11] и гидродинамической турбулентности [12, 13, 14], исследование фазовых переходов [15, 16].

В данной работе предпринята попытка использования нелинейной механики и теории фракталов к исследованию динамики процесса полимеризации. Адекватное математическое представление кинетики процесса дается диффузионным формализмом [17, 18]. При этом установление когерентной связи в ансамбле исходных реагентов приводит к коллективным эффектам, не позволяющим рассматривать процесс обычным способом. По мере формирования фрактальности реализуется режим, в котором необходимо учитывать процессы установления модулированной структуры в поле минимально устойчивых структурных элементов, соответствующей закономерностям фазового перехода второго рода [19]. Для адекватного описания этой стадии используется синергетический подход [20].

При проведении исследований ставилась задача разработки подхода, опирающегося на анализ коллективных эффектов в синергетической схеме, который бы позволил ввести в анализ конкретный механизм структурообразования на основе формализма фрактального броуновского блуждания и рассматривать многоуровневый сценарий структурообразования как последовательное развитие кластерной фрактальной структуры.

Изложение результатов исследований. Сформулируем правила (алгоритм) кинетической картины структурообразования с точки зрения дискретного метода клеточных автоматов [21].

Будем моделировать процесс двумерной гексагональной решёткой размером $L \times L$. В ячейках решетки расположены целые числа (рис. 2). Если число превышает единицу, ячейка (структурный элемент) объявляется неустойчивой, что выражается в уменьшении на 2 стоящего в ней числа с одновременным увеличением на единицу значений в двух ячейках, примыкающих к данной снизу.

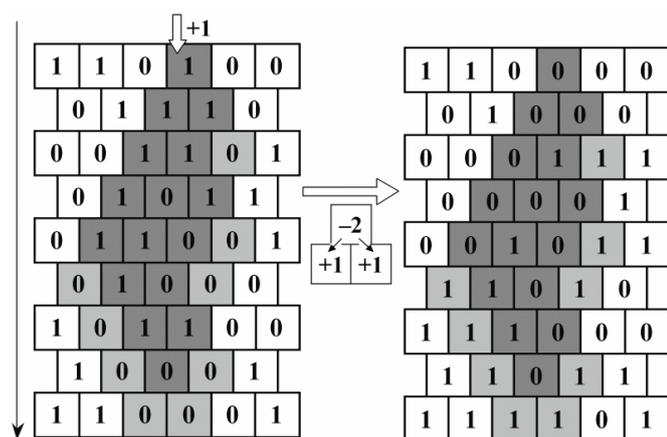


Рис. 2. Клеточный автомат

Если возмущённость среды недостаточна, то возмущение не может далеко распространиться, и активность быстро затухает. Если, напротив, возмущённость достигла предела вблизи некоторого значения, при котором концентрация минимально устойчивых структурных элементов (СЭ) равна порогу перколяции, то есть точке возникновения из них бесконечного связного кластера, то любое возмущение может распространяться по системе на бесконечное расстояние, и система ведёт себя как единое целое.

Параметр порядка (число когерентно связанных СЭ) начинает принимать ненулевое значение при переходе управляющего параметра через критическое значение, что означает появление у системы целостных свойств [21]. Критическая точка разделяет хаотическое (докритическое) и упорядоченное (сверхкритическое) состояния, поэтому в ней любое малое воздействие может оказать существенное влияние на систему.

При описании состояния структуры системы в терминах минимально устойчивых элементов (МУЭ) управляющим параметром служит их доля. Параметром порядка – вероятность того, что некоторая ячейка принадлежит к бесконечно большому кластеру из них, то есть воздействие на неё распространится на бесконечное расстояние, что соотносится с картиной установления модулированной структуры [22], соответствующей закономерностям фазового перехода второго рода [23].

Как известно из теории фазовых переходов, такое состояние образуется критическим образом – упорядоченная фаза развивается как самоподоб-

ная структура, в которой отсутствует характерный масштаб [20]. Формально свойство самоподобия выражается однородностью функции распределения $P(x)$ по амплитуде x , ответственной за упорядочение [24, 21]:

$$P(x / x_c) = x_c^\alpha P(x). \quad (1)$$

Согласно (1) изменение масштаба x_c разрешения случайной величины x приводит к мультипликативному изменению вероятности её реализации P , характеризуемому показателем α . Вводя масштабированную переменную $y = x / x_c$ и функцию распределения $P(y) = y^\alpha P(x)$, можно переписать (1) в виде

$$P(x) = x^{-\alpha} P(y), \quad (2)$$

из которого следует, что в пределе больших и малых значений стохастической переменной x , когда функцию $P(y) = y^\alpha P(x)$ можно положить постоянной, распределение $P(x) = x^{-\alpha} P(y)$ принимает степенную форму [24, 25].

Представленная кинетическая картина соответствует полювому представлению структурообразования, выписанному из первых принципов, что доказывает принадлежность процесса структурообразования в полимерном материале к одному классу универсальности с фазовым переходом второго рода.

Эти представления исходят из того, что исходная структура преобразуется в конечную не прямым образом, а через промежуточные стадии. Достижение термодинамически наиболее выгодного состояния в системе реализуется по схеме ветвления, по мере заполнения локальных минимумов термодинамического потенциала. В свою очередь каждый из минимумов, различимых на данном масштабе, выявляет при дальнейшем увеличении более тонкую структуру минимумов, которые имеют меньшую глубину и отвечают более близким одномерным длиннопериодным структурам (рис. 3).

Поскольку эти минимумы соответствуют устойчивым элементам микроструктуры, то такое предположение означает иерархическую соподчинённость их поведения в ходе эволюции структуры: перестройка грубых деталей обеспечивается соответствующим изменением мелких. Графически это представляется, если каждому минимуму сопоставить точку в ультраметрическом пространстве. Тогда эволюция системы отвечает «движению» по узлам иерархического дерева Кейли (рис. 4), представляющего геометрический образ ультраметрического пространства.

Наиболее густо расположенные узлы дерева связаны с мельчайшими деталями структуры, при движении к стволу переход к более крупным. Ветви дерева отвечают элементарным актам перестройки структуры, когда согласованное и взаимообусловленное поведение её деталей на одном уровне приводит к спонтанной перестройке на более высоком уровне (срастание нескольких ветвей в один узел).

Фрактальная топология механизма структурообразования означает, что независимым образом действует набор параллельных каналов структурообразования, наличие которого предполагается в модели

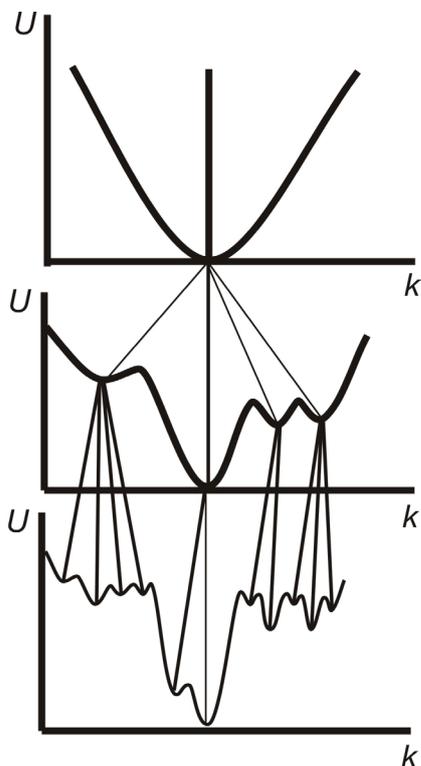


Рис. 3. Структура потенциального рельефа термодинамического потенциала [25]

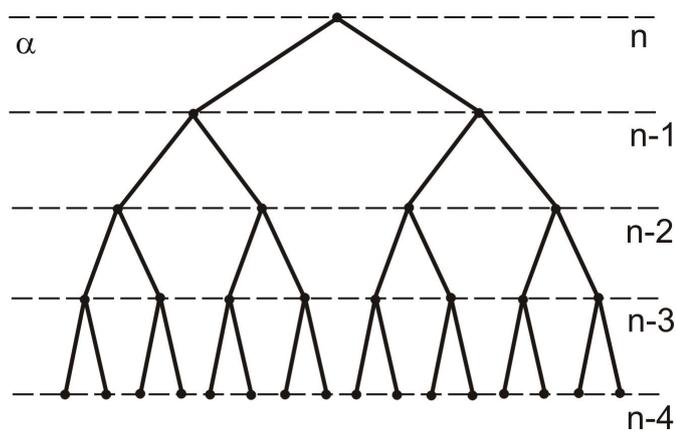


Рис. 4. Дерево Кейли. Модель ветвящегося процесса [23]

ветвящегося процесса (см. рис. 4). Такая ситуация отвечает потенциальному рельефу системы (рис. 3), имеющему иерархическую структуру.

Проследим за структурными превращениями в системе, моделируя динамику структурообразования фрактальным броуновским процессом [23].

Для описания явлений, обладающих фрактальными свойствами, в работе [24] было введено обобщённое броуновское движение, которое по определению записывается в форме дробного интеграла

$$B_H(t) = \frac{1}{\Gamma\left(H + \frac{1}{2}\right)} \int_{-\infty}^e h(t - \tau) dB(\tau), \quad (3)$$

где $dB(\tau)$ – приращение виннеровского процесса; $\Gamma(H + 1/2)$ – гамма-функция; H – параметр Херста.

Импульсная переходная функция равна

$$h(t - \tau) = \begin{cases} (t - \tau)^{H-1/2}, & 0 \leq \tau \leq t; \\ (t - \tau)^{H-1/2} - (-\tau)^{H-1/2}, & \tau < 0. \end{cases} \quad (4)$$

Использование в формуле (3) импульсной переходной функции степенного вида (4) приводит к сильной коррелированной зависимости процесса $B_H(t)$ от предшествующих его значений, а также указывает на самоподобный характер фрактального броуновского движения. На основании соотношения $h(bt - b\tau) = b^{H-1/2}h(t - \tau)$, а также зависимости для виннеровского процесса $dB(b\tau) = b^{1/2}dB(\tau)$ из формулы (3) получаем

$$B_H(t) = b^{-H}B_H(bt), \quad (5)$$

что подтверждает самоподобный характер структурообразования, если моделировать его фрактальным броуновским движением.

Для приращений этого процесса математическое ожидание и дисперсия на основании (3) с учетом свойств виннеровского процесса

$$M\{dB(T)\} = 0, M\{dB(\tau_1)dB(\tau_2)\} = M\{n(\tau_1)n(\tau_2)\}d\tau_1d\tau_2 = N_0\delta(\tau_2 - \tau_1)d\tau_1d\tau_2$$

соответственно равны

$$M\{B_H(t) - B_H(t_0)\} = 0 \quad (6)$$

$$M\{[B_H(t) - B_H(t_0)]^2\} \sim (t - t_0)^{2H}. \quad (7)$$

Определим нормированную корреляционную функцию стационарных приращений фрактального броуновского движения для двух соседних неперекрывающихся интервалов времени (t_0, t_1) и (t_1, t_2) :

$$r_H(t) = \frac{M\{[B_H(t_1) - B_H(t_0)][B_H(t_2) - B_H(t_1)]\}}{M\{[B_H(t_1) - B_H(t_0)]^2\}};$$

или при $B_H(t_0) = 0$

$$r_H(t) = \frac{M\{B_H(t) - B_H(2t)\} - M\{B_H^2(t)\}}{M\{B_H^2(t)\}}. \quad (8)$$

Прибавляя и вычитая в каждом из сомножителей первого слагаемого (8) соответственно $B(2t)$ и $B(t)$, после перемножения и приведения подобных членов получаем

$$\begin{aligned} r_H(t) &= \frac{M\{[B_H(t) - B_H(2t) + B_H(2t)][B_H(2t) - B_H(t) + B_H(t)]\}}{M\{B_H^2(t)\}} - 1 = \\ &= \frac{M\{B_H^2(2t)\}}{M\{B_H^2(t)\}} - \left[\frac{M\{B_H(t)B_H(2t)\}}{M\{B_H^2(t)\}} - 1 \right] - 2. \end{aligned} \quad (9)$$

Принимая во внимание, что соотношение в квадратных скобках в выражении (9) на основании (8)

равно $r_H(t)$, а также учитывая (7), имеем окончательно

$$r(t) = 2^{2H-1} - 1. \quad (10)$$

Если (10) помножить на $M\{B_H^2(t)\} \sim t^{2H}$, то приходим к корреляционной функции приращений на интервалах $(0, t)$ и $(2t)$ фрактального броуновского движения [18]

$$K_{2H}(t) \approx (2^{2H-1} - 1) t^{2H}.$$

Это выражение указывает на сильную корреляционную зависимость приращений, увеличивающуюся с ростом t .

Запишем корреляционную функцию для фрактального броуновского движения в форме

$$K_{2H}(t_1, t_2) \sim 1/2 [t_1^{2H} + t_2^{2H} - |t_1 - t_2|^{2H}]. \quad (11)$$

Коэффициент корреляции для стационарных приращений фрактального броуновского движения на интервалах $(t_n, t_n - T)$ и $(t_{n+k}, t_{n+k} - T)$ заданной длительности T , разнесённых на время kT , где k – параметр смещения, можно представить выражением

$$r_H(k, T) \sim 1/2 [(k+1)^{\alpha+1} - 2k^{\alpha+1} + (k-1)^{\alpha+1}].$$

При $k=1$, что соответствует корреляционной зависимости для приращений процесса на соседних интервалах времени, а также учитывая соотношение $\alpha = 2H-1$, получаем (10). При больших значениях k коэффициент корреляции аппроксимируется выражением

$$r_H(k, T) \sim 1/2 \alpha (\alpha + 1) k^{\alpha-1} = H (2H-1) k^{2H-2}. \quad (12)$$

Из этого выражения следует, что чем больше параметр H , тем более протяжённой зависимостью обладает $r_H(k, T)$.

Этот вывод можно использовать для характеристики поведения временной последовательности изменений параметра, определяющего концентрации реагентов в исследуемой полимерной системе, через обладающие свойствами самоподобия статистики фрактального броуновского движения.

Если обозначить приращения фрактального броуновского движения на интервалах $(t_n, t_n - T)$ через X_n , то агрегированный процесс кластерообразования, сформированный как последовательность средневзвешенных величин из приращений на m одинаковых неперекрывающихся интервалах длительностью T , описывается соотношением [20]:

$$X^{(m)} = \left\{ X_k^{(m)}; k = 0, 1, \dots \right\} = \left\{ \frac{X_1 + \dots + X_m}{m}, \dots, \frac{X_{km+1} + \dots + X_{(k+1)m}}{m} \right\}.$$

У агрегированного процесса приращений, при $m \rightarrow \infty$ коэффициент корреляции $r_H(k, T)$ сохраняет свою структуру и практически не зависит от параметра m , а дисперсия изменяется согласно соотношению

$$D^{(m)}(t) \sim m^{\alpha-1}. \quad (13)$$

Указанная статистика – дисперсия приращений является удобной характеристикой при обработке экспериментальных данных для анализа рассматриваемого процесса.

Представим исследуемый процесс моделью случайного процесса с приращениями случайной величины [17].

Если $p_x(x, T)$ – условная вероятность произойти событию x , если произошло событие T , а плотность распределения этого события есть $p_T(T, t)$, тогда безусловная вероятность найти случайную величину в состоянии x равна

$$p(x) = \int_0^\infty p(x, T) p_T(T, t) dt. \quad (14)$$

Наша цель – получить функцию для безусловного распределения случайных блужданий радиус-вектора

$R = \sum_{i=1}^N r_i$ при условной вероятности распределения

Гаусса $p_x(x, T)$, то есть найти функцию $p_T(T, t)$. Решение этой задачи формулируется в обобщённых двухпараметрических функциях Леви [17]:

$$L(x, \alpha, \gamma) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \int_0^\infty \exp \left[-ixz - z^\alpha \exp \left(\frac{i\pi\gamma}{2} \right) \right] dz. \quad (15)$$

Будем искать распределение случайной величины в следующем классе функций [17]:

$$\varphi(0) = \frac{q}{r_N^\alpha} - \frac{q}{r_i^\alpha}, \quad (16)$$

если радиус-вектор r случайно перемещается из положения 1 в положение N после N -го прыжка.

Введём тот же скаляр $\varphi(0)$ по формуле [17]:

$$\varphi(0) = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{q}{r_N^\alpha} - \frac{q}{r_i^\alpha} = \sum_{i=2}^N \frac{q}{r_i^\alpha} - \sum_{i=1}^{N-1} \frac{q}{r_i^\alpha}. \quad (16a)$$

По определению плотность вероятности распределения $\varphi(0)$ равна

$$\varphi(0) = \int \delta(\varphi - \varphi(0)) P_N(r_1 \dots r_N) dr_1 \dots dr_N,$$

где $\delta(x)$ – дельта-функция, а $P_N(r_1 \dots r_N)$ – вероятность найти частицу после первого прыжка в точке r_1 , после второго – в точке r_2 и т. д. Введём Фурье-образ дельта-функции [17], тогда

$$W(\varphi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dK \int_V \dots \int_V P_N(r_1 \dots r_N) dr_1 \dots dr_N \exp \left[iK \left(\varphi - \sum_{i=1}^N \frac{q}{r_i^\alpha} \right) \right]. \quad (17)$$

Пусть любой прыжок может быть произведён в любую точку пространства равновероятно, тогда

$$P_N(r_1 \dots r_N) = \frac{1}{V^N}. \quad (18)$$

Теперь плотность вероятности (18) удобно представить в виде

$$W(\varphi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dK \exp(iK\varphi) \prod_{i=1}^N \left\{ 1 - \frac{1}{V} \int_V \left[1 - \exp \left(iK \frac{q}{r_i^\alpha} \right) \right] dr_i \right\}, \quad (19)$$

и задача сводится к нахождению единственного интеграла

$$I_{\alpha,G} = \frac{1}{V} \int_V \left[1 - \exp \left(-iK \frac{q}{r^\alpha} \right) \right] dr \cong \frac{d(Kq)^{G/\alpha}}{V} \int_0^\infty (1 - \cos y) \frac{dy}{y^{G/\alpha+1}}. \quad (20)$$

Здесь α – показатель степени в законе (16), G – число пространственных измерений, d – результат интегрирования по углам.

Интеграл (20) сходится, если $0 \leq G/\alpha \leq 2$, то есть в окне определения распределения Леви [24]. Интеграл в правой части (20) вычисляется по частям:

$$I_{\alpha,G} = \frac{\pi d(Kq)^{G/\alpha}}{2GV \sin \left(\frac{\pi G}{2\alpha} \right) \Gamma \left(\frac{G}{\alpha} \right)} = BK^{G/\alpha},$$

где B – константа, $\Gamma(x)$ – гамма-функция Эйлера.

В (19) все интегралы одинаковы, поэтому можно перейти к экспоненциальному пределу при $N \rightarrow \infty$:

$$(1 - I_{\alpha,G})^N = \left(1 - \frac{NBK^{G/\alpha}}{N} \right)^N \rightarrow \exp(-NBK^{G/\alpha}).$$

В соответствии с [18], считая, что скачки происходят равномерно, то есть с постоянной скоростью $N = \gamma T$, вводим обозначения

$$\varphi(0) = B^{G/\alpha} = \frac{q}{V^{G/\alpha}} \left[\frac{\pi d}{2D \sin \left(\frac{\pi G}{2\alpha} \right) \Gamma(G/\alpha)} \right]^{G/\alpha},$$

$$x = K\varphi_0, \beta = \varphi / \varphi_0.$$

В результате из (19) следует выражение для плотности распределения вероятности случайной величины $\varphi(0)$ (16) в виде зависящего от времени распределения Леви

$$W(\beta) = \pi^{-1} \int_0^\infty \cos(\beta x) \exp(-\gamma t x^{G/\alpha}) dx.$$

Закон распределения блужданий Леви характерен медленно спадающей асимптотикой, то есть значительным количеством больших флуктуаций [24].

Рассмотрим одномерный дискретный аналог прыжков Леви на фрактальной решётке, моделируемой остовом используемого в теории перколяции фрактала Мальдерброта-Гивена [23, 24]. Обозначим вероятность частицы оказаться на l узле после n шагов $P_n(l)$ и распределение вероятности прыжков по длинам $f(l)$:

$$P_{n+1}(l) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} f(l-m) P_n(m). \quad (21)$$

В качестве функции $f(l)$ выберем следующую функцию:

$$f(l) = \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} (\delta_{l-b^n} + \delta_{l,b^n}), \quad (22)$$

где $\delta_{n,m}$ – символ Кронекера. Тогда структурная функция для такого случайного блуждания равна

$$\lambda = \int f(l) \exp(ikl) dl = \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} \cos(kb^n). \quad (23)$$

Заметим также, что структурная функция λ удовлетворяет функциональному уравнению $\lambda(k) = a\lambda(kb)$.

Следовательно, при $k \rightarrow 0$ она должна вести себя степенным образом с показателем $D = \ln a / \ln b$. Поскольку на каждом шагу диффундирующая частица покидает узел, постольку сумма вероятностей движения по W_+ и против W_- поля, должна равняться единице: $W_+ + W_- = 1$. Отсюда выражение для вероятностей движения по и против поля:

$$W_{\pm} = (1 \pm \alpha)^{b^n} / \left[(1 + \alpha)^{b^n} + (1 - \alpha)^{b^n} \right].$$

Следовательно, структурная функция $\lambda(k; E)$ при диффузии посредством прыжков Леви равна

$$\lambda(k; E) = \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n} \left[\cos(kb^n) + i \sin(kb^n) (W_+ - W_-) \right]. \quad (24)$$

Как и при обычной диффузии, второе слагаемое при малых $k \rightarrow 0$ содержит дрейфовую скорость:

$$V = i\partial\lambda(k; RE) / \partial t \Big|_{k \rightarrow 0} = \sum_{n=0}^{\infty} (b/a)^n \times \left\{ \frac{\left[(1+\alpha)^{b^n} - (1-\alpha)^{b^n} \right]}{\left[(1+\alpha)^{b^n} + (1-\alpha)^{b^n} \right]} \right\} \cong \sum_{n=0}^{\infty} (b/a)^n th(ab^n), \quad (25)$$

где $th(y)$ – гиперболический тангенс. Для вычисления скорости воспользуемся формулой Пуассона:

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n) = 1/2f(0) + \int_0^{\infty} f(t)dt + 2 \sum_{m=1}^{\infty} f(t) \cos(2mt).$$

В нашем случае $f(t) = (b/a)^t th(ab)^t$. Сделав две замены $t' = t \ln b$ и $z = \exp t'$, получим для функции $f(z)$: $f(z) = z^{-D} th(\alpha z)$.

Следовательно,

$$V(E) = \alpha / 2 + \alpha^{(d-1)} \left[\sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_1^{\infty} th(z) z^{-\gamma_m} dz + \int_0^{\alpha} th(z) z^{-\gamma_m} dz \right],$$

где показатель $\gamma_m = D + 2\pi mi / \ln b$.

Нетрудно увидеть, что второе слагаемое в скобках мало по сравнению с первым по параметру α . Таким образом, получаем нелинейную зависимость: $V \sim R^{1-D}$, которая показывает, событий какого масштаба следует ожидать от системы.

Проецируя приведённую методику анализа на моделирование процессов структурообразования ЛСТ можно с высокой вероятностью прогнозировать их свойства: связующую способность, живучесть, вязкость и т. п., что открывает возможность для принципиально нового подхода в разработке технических объектов с напередзаданными свойствами. В рассмотренном примере это экологически чистый литейный связующий материал на основе ЛСТ, предназначенный для замены токсичных синтетических смол на фенольной основе использующихся для производства отливок.

Существование подобной связи является очень эффективным и даёт возможность глубже проникнуть в природу исследуемого процесса структурообразования, позволяет применять методы нелинейной динамики с возможностью включения в процесс

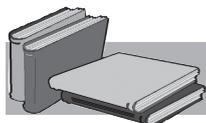
исследования принципиально нового элемента, которым является хаос. В экономическом аспекте такой подход позволяет существенно сократить затраты на проведение экспериментов.

Выводы

Поскольку динамика сложной системы, эволюционирующей во времени, наблюдается обычно как временной ряд некоторой характеристики, который создаёт базу данных для анализа и идентификации динамического поведения системы с помощью методов нелинейной динамики, то такой анализ позволяет отслеживать функцию состояния исследуемой системы по изменению непосредственно связанных с этой функцией концентраций реагентов. Выявление области начальных условий, при выборе которых можно ожидать самоорганизацию с образованием периодических пространственно-временных режимов, представляет собой достаточно сложную задачу, поскольку решение её требует проведения широких исследований. На данном этапе исследований мы ограничились изучением автоколебательных режимов, тем более именно эти режимы определяют, по-видимому, особенности структурной организации изначально неупорядоченной полимерной среды.

Для углубления представлений о динамических закономерностях процесса структурообразования в системе мы воспользовались подходом, основанным на концепции детерминированного хаоса. Характерной особенностью системы, функционирующей в режиме детерминированного хаоса, является генерация пространственно-временных фракталов.

Можно предполагать, что динамическая предистория, точнее временная структура процесса структурообразования, определяет структурную организацию материальных объектов – кластеров, которые возникают в результате процесса. Если образование структуры происходит в режиме детерминированного хаоса, то можно ожидать обнаружение степенной асимптотики функций распределения кластеров по размерам. Это означает, что явление структурообразования, сопровождаемое образованием фрактальных структур, приводит к возникновению корреляционных взаимосвязей при образовании структур различного масштабного уровня в среде. Таким образом, мы получили доказательства принципиальной возможности реализации режима детерминированного хаоса в исследуемом процессе, когда флуктуации параметра, связанного с концентрациями реагентов в исследуемой среде формируют фрактальные структуры.



ЛИТЕРАТУРА

1. Шинский О. И. Экология, техника и экономика литейного производства Украины / О. И. Шинский // Инвестиционный бюллетень 3-го и Международного промышленного инвестиционного форума, Запорожье: Торгово-промышленная палата. – 2012 г. – С. 34-36.
2. http://www.lgm.com.ua/press_publications.aspx (Технология, экономика и экология литейного производства Украины / Шинский И. О., к.т.н., Шинский О.И., д.т.н.)

3. Болдин А. Н. Экология литейного производства / Под ред. А. Н. Болдина, С. С. Жуковского, А. Н. Поддубного, А. И. Яковлева, В. Л. Крохотина: Учеб. пособие для Вузов. – Брянск: Изд-во БГТУ, 2001. – 315 с.
4. Болдин А. Н. Инженерная экология литейного производства. Учебное пособие // А. Н. Болдин, А. И. Яковлев, С. Д. Тепляков (под общ. ред. А. Н. Болдина). – М.: Машиностроение, 2010. – 352 с.
5. Hausdorff F., Dimension und äußeres Maß, Math. Annalen 79, 157 (1919).
6. Пайтген Х. О. Красота фракталов. Образы комплексных динамических систем / Х. О. Пайтген, И. Х. Рихтер. – М.: Мир, 1993. – 176 с.
7. Морозов, А. Д. Введение в теорию фракталов / А. Д. Морозов // Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002. – 160 с.
8. Мандельброт Б. Фрактальная геометрия природы / Б. Мандельброт. – М.: Институт компьютерных исследований, 2002. – 656 с.
9. Малинецкий Г. Г. Современные проблемы нелинейной динамики / Г. Г. Малинецкий, А. Б. Потапов. – М.: Едиториал УРСС, 2002. – 371 с.
10. Пригожин И. Время, хаос, квант. К решению парадокса времени / И. Пригожин, И. Стенгерс. Пер. с англ. – М.: Едиториал УРСС, 2003. – 356 с.
11. Малинецкий Г. Г. Новое в синергетике: Взгляд в третье тысячелетие / Информатика: неограниченные возможности и возможные ограничения. Под ред. Г. Г. Малинецкого, С. П. Курдюмова. – М.: Наука, 2002. – 480 с.
12. Князева Е. Н. Сложные системы и нелинейная динамика в природе и обществе [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.synergetic.ru/society/index.php?article=kn3>
13. Берже П. Порядок в хаосе / П. Берже, И. Помо, К. Видаль. – М.: Мир, 1991. – 257 с.
14. Шустер Г. Детерминированный хаос. Введение / Г. Шустер. – М.: Мир, 1988. – 240 с.
15. Лихтенберг А. Регулярная и стохастическая динамика / А. Лихтенберг, М. Либман. – М.: Мир, 1984. – 528 с.
16. Ахромеева Т. С. Нестационарные структуры и диффузионный хаос / Т. С. Ахромеева, С. П. Курдюмов, Г. Г. Малинецкий, А. А. Самарский. – М.: Наука, 1992. – 285 с.
17. Белоцерковский О. М. Турбулентность. Новые подходы / О. М. Белоцерковский, А. М. Опарин, В. М. Четчин. – М.: Наука, 2002. – 286 с.
18. Будаев В. П. Наблюдения перемежаемости и обобщенного самоподобия в турбулентных пограничных слоях: на пути к определению количественных характеристик переноса / В. П. Будаев, С. П. Савин, Л. М. Зеленый. – УФН. – Т. 181. – 2011. – № 9. – С. 704-742.
19. Климонтович Ю. Л. Статистическая теория открытых систем / Ю. Л. Климонтович – М.: Янус, 1995. – 382 с.
20. Гленсдорф П. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуации / П. Гленсдорф, И. Пригожин. – М.: УРСС, 2003. – 280 с.
21. Романовский М. Ю. Функциональные блуждания Леви / М. Ю. Романовский // Тр. Ин-та общей физики РАН. – Т. 65. – 2009. – С. 20-28.
22. Зеленый М. Л. Фрактальная топология и странная кинетика / М. Л. Зеленый, А. В. Милованов. – УФН. – Т. 174. – 2004. – № 8. – С. 809-852.
23. Заславский Г. М. Физика хаоса в гамильтоновых системах / Г. М. Заславский. – М-Ижевск: Ин-т комп. исслед., 2004. – 288 с.
24. Хакен Г. Синергетика: иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах / Г. Хакен. – М.: Мир, 1985. – 532 с.
25. Bartelemy P. A Levy ight for light / P. Bartelemy, J. Bertolotti, D. Wiersma. – Nature. – 2008. – V. 453. – P. 495-498.

Анотація

Свинороєв Ю. О., Марченко Д. М.

Використання методів теорії хаосу та нелінійної динаміки у розробці технічних об'єктів ливарного виробництва

Методи підвищення зв'язуючої здібності технічних лігносульфонатів є ефективним інструментом удосконалення технологічних процесів литва. Вони дозволяють комплексно розв'язувати питання ресурсозбереження та екології оскільки розширення застосування лігносульфонатів дозволяє скоротити використання у виробництві дорогих за ціною та небезпечних за екологічними характеристиками синтетичних смол та масляних зв'язуючих матеріалів. В цьому зв'язку доцільно скласти оцінку ефективності використання методів впливу на лігносульфонати для підвищення їх зв'язуючої здібності, з метою практичного використання цих інструментів у виробництві литва.

Ключові слова

методи підвищення зв'язуючої здібності, зв'язуючі матеріали, технічні лігносульфонати, зв'язуюча здібність

Summary

Svinoroev Yu., Marthenko D.

Application of methods of chaos theory and non linear dynamics for development of technical objects in foundry

Methods of rising up the binding capability of technical lignosulfonates are the effective instrument to improve the technological processes in foundry. They allow to solve complexly the ecological and resource-saving problems, because the extension of lignosulfonates' usage allows reducing industrial usage of the expensive and ecologically dangerous synthetic resins and oily binds. In this connection it is expedient to make the effectiveness evaluation of the methods of impact on lignosulfonates for their binding capability's raising aiming the practical applying of these instruments in the producing of casting.

Keywords

methods of rising up binding capability, binding materials, technical lignosulfonates, binding capability

Поступила 29.01.2015

**Продолжается подписка на журналы
«Металл и литьё Украины»
и «Процессы литья»
на 2015 год.**

Для подписки на журналы необходимо

направить письмо-заказ по адресу:

03680, Украина, г. Киев-142, ГСП,

бул. Вернадского, 34/1,

Физико-технологический институт металлов и сплавов НАН Украины

или факсом (044) 424-35-15.

Счёт-фактура согласно заказу высылается письмом, по факсу или E-mail.

Редакция готова предоставить электронную версию журналов

на компакт-диске.

Стоимость одного журнала – 40 грн.

Годовая подписка (для Украины):

«Металл и литьё Украины» – 480 грн,

«Процессы литья» – 240 грн.

Годовая подписка для зарубежных стран – 100 \$.