УДК 691:539.2

Л.И. ЕВЕЛЬСОН, канд. техн. наук (levelmoscow@mail.ru), Н.П. ЛУКУТЦОВА, д-р техн. наук (natluk58@mail.ru), А.Н. НИКОЛАЕНКО, инженер (wnav111@yandex.ru), Е.Н. ХОМЯКОВА, химик (kat-himik@inbox.ru), Я.А. РИВОНЕНКО, магистрант (riyanaone@yandex.ru)

Брянский государственный инженерно-технологический университет (241037, г. Брянск, пр-т Станке Димитрова, 3)

Некоторые практические аспекты фрактального моделирования структуры нанокомпозиционного материала*

Рассмотрены некоторые практические аспекты фрактального моделирования структуры наномодифицированных бетонов, содержащих серпентинит, волластонит, шунгит и метакаолин, с целью последующего их применения при решении оптимизационных задач. Изучены две фрактальные характеристики микроструктуры наномодифицированных бетонов: фрактальная размерность D и лакунарность L с использованием программы ImageJ с установленным расширением (плагином) FracLac. Установлено, что величина фрактальной размерности является значительно более инвариантной, чем лакунарность. Показано, что важной особенностью является тот факт, что при ранжировании результатов по фрактальной размерности и лакунарности порядок следования наномодификаторов не изменяется при разных увеличениях и настройках. Использованная методика применения фрактального анализа для моделирования структуры композитных материалов является унифицированной и может быть пригодной для описания подобных характеристик для других объектов подобного рода.

Ключевые слова: фрактальное моделирование, лакунарность, структура, наномодификаторы, наномодифицированный бетон.

L.I. EVEL'SON, Candidate of Sciences (Engineering) (levelmoscow@mail.ru), N.P. LUKUTTSOVA, Doctor of Sciences (Engineering) (natluk58@mail.ru), A.N. NIKOLAENKO, Engineer (wnav111@yandex.ru), E.N. KHOMYAKOVA, Chemist (kat-himik@inbox.ru), Ya.A. RIVONENKO, Master student (riyanaone@yandex.ru)
Bryansk State Engineering-Technological University (3, Stanke Dimitrova Avenue, Bryansk, 241037, Russian Federation)

Some Practical Aspects of Fractal Simulation of a Structure of Nano-Composite Material*

Some practical aspects of the fractal simulation of a structure of nono-modified concretes containig serpentinite, wollastonite, schungite, and meta-kaolin are considered for the purpose to apply them for solving optimization problems. Two fractal characteristics of the micro-structure of nano-modified concretes are studied; they are fractal dimension D and lacunarity L with the use of the ImageIJ program with a set extension (plugin) FracLac. It is established that the value of fractal dimension is more significantly invariant than lacunarity. It is shown that the important feature is the fact that when ranking results according to fractal dimension and lacunarity, the sequence order of nano-modifiers doesn't change at various enlargements and adjustments. The applied methods for using the fractal analysis for simulation of the structure of composite materials is standardized and can be suitable for the description of similar characteristics of other objects of this kind.

Keywords: fractal simulation, lacunarity, structure, nano-modifiers, nano-modified concrete.

В ранее выполненных исследованиях [1] авторами были представлены теоретические основы управления свойствами наномодифицированного бетона, базирующиеся на математических моделях, учитывающих разные количественные и качественные признаки. Для качественных признаков, связанных со структурой материала, было предложено использовать фрактальное моделирование с целью заменить качественные факторы на количественные. В той же работе было предложено для оптимизации свойств наномодифицированного бетона по условиям прочности использовать ранее предложенный одним из авторов и описанный в [2–3] метод регрессионной нелокальной квадратичной аппроксимации. Для того чтобы этот метод можно было эффективно использовать в ситуации, когда часть управляющих факторов определяется из натурного эксперимента, а другие вычисляются по математической фрактальной модели, требуется провести предварительные исследования, чтобы оценить изменчивость (статистическую устойчивость) фрактальных характеристик. Такие оценки важны как для последующего решения вопроса об адекватности формирующихся регрессионных моделей, так и для выявления тех фрактальных характеристик, которые целесообразно принимать в качестве управляющих факторов.

Объектом исследования являлся бетон с включенными в его состав различными наномодификаторами (НМ). Предметом исследования выступали некоторые фрактальные характеристики и методы (алгоритмы и параметры) их вычисления. Массовое соотношение цемента и песка, водоцементное отношение, содержание НМ и другие физические входные факторы системы принимались одинаковыми для разных НМ. В качестве физического выхода системы рассматривался предел прочности при сжатии бетона, модифицированного нанодисперсными добавками на основе серпентинита, волластонита, шунгита и метакаолина, через 28 сут твердения.

На рис. 1 представлены характерные фотографии микроструктуры наномодифицированного бетона, сделанные при разных увеличениях, даваемых электронным микроскопом. Визуально эти фотографии сильно различаются. Поэтому далее исследовался вопрос о том, как влияет увеличение на фрактальные характеристики.

В проводившихся в рамках настоящей работы расчетах изучались прежде всего две фрактальные характеристики микроструктуры наномодифицированных бетонов: фрактальная размерность D и лакунарность L с использованием программы ImageJ с установленным расширением (плагином) FracLac (http://imagej.net/Welcome дата обращения 15.02.2015).

Рассмотрим подробнее различные аспекты их определения. Фрактальная размерность (D) показывает, насколько плотно и равномерно элементы данного множества заполняют евклидово пространство размерности E ($D \leqslant E$). Величина D может использоваться в качестве количественной меры геометрической сложности [4]. Фрактальная размерность в отличие от евклидовой при-

* Работа была выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №13-03-97511-р_центр_а).
* The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (Project №13-03-97511-r_tsentr_a).

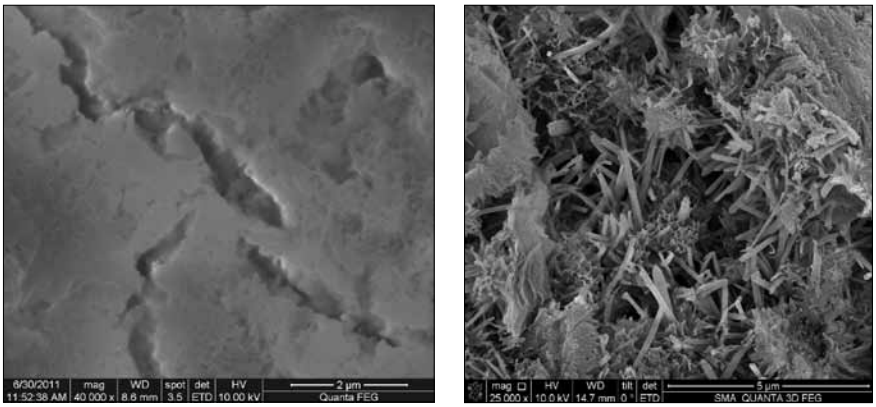

Рис. 1. Микроструктура бетона через 28 сут твердения

нимает дробные значения. Имеются различные виды дробной размерности и соответствующие методы и алгоритмы их определения. Наиболее известны следующие три вида: размерность подобия, размерность Хаусдорфа, размерность Минковского. Рассмотрим каждую из них.

Размерность подобия основана на следующем принципе: если фигуру уменьшить в M раз (отмасштабировать), то она будет укладываться в исходной M^D раз, т. е.

$$N = M^D, \qquad (1)$$

где N – количество уменьшенных частей.

Выполним логарифмическое преобразование ф. (1) для получения формулы вычисления фрактальной размерности D:

$$\ln N = \ln M^D \Rightarrow D = \frac{\ln N}{\ln M}. \qquad (2)$$

Для правильных идеальных геометрических фигур вычисленная таким образом размерность совпадает с евклидовой целой размерностью.

Размерность Хаусдорфа обобщает понятие размерности действительного векторного пространства и является естественным способом определения размерности подмножества в метрическом пространстве. Например, размерность Хаусдорфа n-мерного (размерность в смысле векторного пространства) унитарного пространства (особый случай векторного пространства) будет тоже равна n. Представим полное покрытие множества X шарами радиуса не более чем r и обозначим количество этих шаров за N(r). Значение N(r) будет расти при уменьшении r (для полного покрытия будет требоваться все больше шаров). Размерностью Хаусдорфа (D_H) множества X будет являться такое уникальное число d, что N(r) будет расти как $1/r^d$ при стремлении r к нулю.

Размерность Минковского – это один из способов задания фрактальной размерности ограниченного множества в метрическом пространстве, который определяется следующим образом:

$$D = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{\ln N(\varepsilon)}{\ln 1/\varepsilon} = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{\ln N(\varepsilon)}{-\ln \varepsilon}, \qquad (3)$$

где N(ε) – минимальное число множеств диаметра ε, которыми можно покрыть исходное множество.

Если предел не существует, то рассматривают верхний и нижний пределы и говорят соответственно о верхней и нижней размерностях Минковского. Верхняя и нижняя размерности Минковского тесно связаны с размерностью Хаусдорфа.

В вышеупомянутом программном обеспечении, применявшемся авторами для фрактального моделирования, путем выбора соответствующих настроек можно реализовать тот или иной алгоритм вычисления фрактальной размерности. Для анализа структуры наномодифицированного бетона [5] предполагается использовать алгоритм определения фрактальных размерностей по box-count (BC) методу, при котором изображение разбивается сеткой на ячейки заданных размеров. Сканирование изображения осуществляется за несколько циклов, при этом на каждом последующем цикле размеры ячеек сетки увеличиваются.

Фрактальная размерность анализируемого бинарного изображения вычисляется по ф. (3) с подстановкой величин: ε – размер ячейки сетки; N(ε) – количество ячеек размера ε, содержащих пиксели изображения агрегата. Размер ячейки (ε) определяется как отношение площади ячейки к общей площади изображения. Геометрически фрактальная размерность Dβ в программном модуле FracLac определяется по наклону регрессионной линии [6], рассчитанной по методу наименьших квадратов, в координатах (–lnε) – lnN(ε). График получается неидеально ровным. Наклон этого графика вычисляется методом наименьших квадратов. Недостатком этого метода является то, что используемое покрытие неминимально. Поиск минимального покрытия – нетривиальная задача. Затраты на его вычисление могут оказаться огромными, а полученное улучшение небольшим. Также одним из эффектов вычислений может служить ступенчатое поведение графика. Этот эффект проявляется при плавном изменении ε между итерациями. На приведенном рис. 2 разница ε между соседними точками составляет около 1%. Описанный способ расчета фрактальной размерности для BC метода не единственный. Другая процедура в отличие от описанной основана на зависимости суммы пикселей (среднего числа точек в ячейке сетки, μ) от размера ячейки (ε).

$$D_M = \lim_{\varepsilon\to 0} [\ln \mu_\varepsilon / \ln \varepsilon]. \qquad (4)$$

Геометрически такая размерность определяется аналогично стандартной – наклоном линии регрессии (–lnε) – $\ln \mu_\varepsilon$.

Для получения среднестатистического значения фрактальной размерности изображения месторасположение точки отсчета для сканирования изображения сеткой изменяется несколько раз. Такие начальные позиции генерируются случайным образом. Число расчетных позиций сетки указывается в настройках FracLac. Чем выше число позиций, тем больше вероятность нахождения более эффективного покрытия и тем меньше скорость расчета. После определения фрактальных размерностей для различных точек отсчета вычисляется

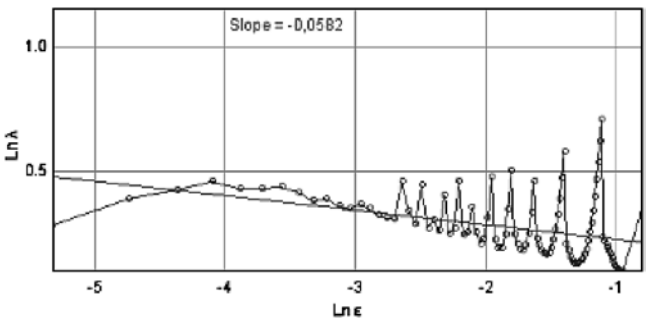

Рис. 2. Линия регрессии лакунарности

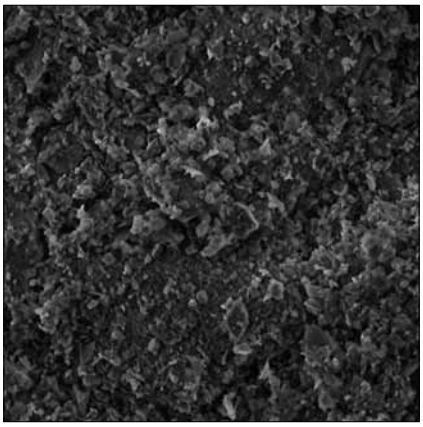

Рис. 3. Микроструктура наномодифицированного бетона с добавлением метакаолина

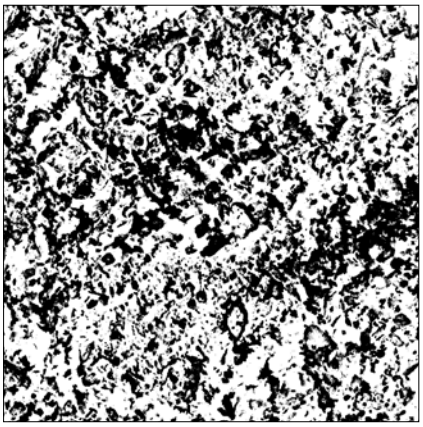

Рис. 4. Вид микроструктуры после бинаризации

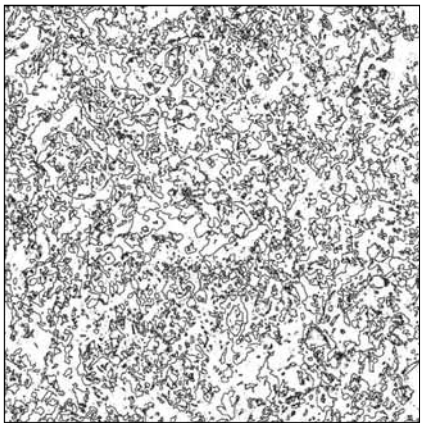

Рис. 5. Вид микроструктуры после выделения контуров

среднее значение, которое и является фрактальной размерностью изображения:

$$\overline{D} = \sum_{g=1}^{G} Dg / G , \quad (5)$$

где Dg – фрактальная размерность; g – положения сетки; G – общее число положений сетки.

Важным параметром для описания фрактальных структур является лакунарность. Термин «лакунарность» был впервые использован Б. Мандельбротом [4] для описания неравномерности распределения галактик в наблюдаемой части Вселенной. Фактически лакунарность является мерой неоднородности заполнения пространства объектом. Чем выше лакунарность, тем больше в изучаемом распределении имеется пустых областей. Мерой лакунарности (L) в использованной программе является изменение плотности изображения при сканировании сеткой с ячейками различных размеров. Таким образом, лакунарность зависит от размера ячейки сетки (ε) и, очевидно, позиции сетки (g). Для ее расчета используется следующая формула:

$$L = (\sigma/\mu)^2 , \quad (6)$$

где σ – стандартное отклонение количества пикселей (для бинарного изображения) фрактального агрегата в ячейках сетки заданного размера ε; μ – среднее значение массы агрегата в ячейках заданного размера ε.

Как и фрактальная размерность, лакунарность определяется по наклону регрессионной линии в координатах (–lnε) – lnL.

При построении графиков лакунарность рассчитывается по формуле:

$$L = (\sigma/\mu)^2 + 1 . \quad (7)$$

Единица в данную формулу включена для равномерного отображения графика при нулевом стандартном отклонении (σ = 0). В таком случае лакунарность будет равна нулю:

$$L = (\sigma/\mu)^2 + 0 . \quad (8)$$

Описанная ситуация возможна при некоторых размерах ячейки сетки ε.

Возникает вопрос о влиянии выбора алгоритма на результат. Для реализации фрактального моделирования в рассматриваемом случае необходимо выполнить предварительно некоторые подготовительные действия. Рассмотрим их на примере анализа микроструктуры бетона с метакаолином в качестве НМ. На рис. 3 представлен исходный снимок.

Сначала выполнялась процедура бинаризации изображения (рис. 4).

Далее выполнялась процедура, выделяющая контуры закрашенных областей. Для этого также используется программа ImageJ. Результат представлен на рис. 5.

В результате вычислений были получены фрактальные характеристики, представленные в табл. 1. Анализ показывает, что во всех случаях, кроме шунгита, введение НМ привело к увеличению фрактальной размерности и уменьшению лакунарности.

В табл. 2 представлены значения предела прочности при сжатии после 28-суточной выдержки бетона и пористости. Эти результаты получены с помощью натурных экспериментов.

В бетоне с НМ по сравнению с контрольным образцом зафиксировано перераспределение пор по размеру в сторону его уменьшения, о чем свидетельствует повышение общей площади поверхности пор от 30940 до 43660 см^2/г (в 1,4 раза) при снижении их объемной доли от 0,0803 до 0,065 см^3/г (в 1,2 раза). Этот вопрос требует отдельного исследования, причем фрактальное моделирование может сыграть здесь существенную роль.

Далее осуществлялось вычисление фрактальных характеристик при различных параметрах алгоритмов и соответствующих настройках компьютерной программы.

Результаты с настройками программы, принятыми по умолчанию, представлены в табл. 3.

Таблица 1

Образец	D	L
Контрольный	1,82	0,244
Волластонит	1,835	0,24
Метакаолин	1,827	0,21
Серпентинит + ПВС	1,825	0,237
Серпентинит + СЗ	1,828	0,244
Шунгит	1,799	0,256
Шунгит + ПВС	1,812	0,284

Таблица 2

Название добавки	Прочность (контр.), МПа	Пористость (контр.), см^3/г	Прочность с добавкой, МПа	Пористость с добавкой, см^3/г
Метакаолин	19,93	0,054	43,8	0,041
Волластонит	26,7	0,061	46,3	0,052
Шунгит	27,7	0,055	57,2	0,045

Таблица 3

Добавка	D	L
Метакаолин	1,827	0,21
Волластонит	1,835	0,24
Шунгит	1,799	0,256

Таблица 4

Добавка	D	L
Метакаолин	1,822	0,226
Волластонит	1,832	0,252
Шунгит	1,791	0,273

Таблица 5

Добавка	D	L
Метакаолин	1,88	0,106
Волластонит	1,884	0,12
Шунгит	1,838	0,139

Таблица 6

Кратность увеличения	D	L
×100	1,848	0,308
×200	1,85	0,262
×10k	1,835	0,24

Результаты расчетов с изменением настроек (анализ с помощью окружностей) см. в табл. 4.

Рассматривалось также отбрасывание ячеек сетки, у которых плотность закрашенных пикселей меньше заданной (коэффициент минимальной плотности 0,2). Фрактальные характеристики (сканирование с отбрасыванием ячеек) представлены в табл. 5.

Из полученных результатов следует, что настройки анализа по-разному влияют на D и L. Величина фрактальной размерности является значительно более инвариантной, чем лакунарность. Важно, что ранжирование образцов по фрактальной размерности и лакунарности совпадает при любых настройках.

Далее осуществлялась проверка влияния увеличения при съемке на фрактальные характеристики на примере наномодифицированного бетона с добавкой волластонита. Для вычислительного эксперимента использовались три изображения структуры материала при увеличении ×100, ×200 и ×10k. Результаты анализа представлены в табл. 6.

Как видно, лакунарность с ростом увеличения съемки уменьшается, а фрактальная размерность меняется мало.

На основе полученных результатов по фрактальному моделированию микроструктуры различных образцов наномодифицированного бетона можно сделать следующие выводы.

Увеличение, с которым сделаны фотографии микроструктуры электронным микроскопом, а также выбор алгоритма, его параметров и соответствующих настроек программы обработки изображений влияют на фрактальные характеристики. Фрактальная размерность меняется сравнительно мало, в то время как лакунарность изменяется сильно. Этот вопрос нуждается в дополнительном изучении.

Важной особенностью является тот факт, что если проранжировать результаты по фрактальной размерности и лакунарности, порядок следования разных НМ не изменяется при разных увеличениях и настройках.

Использованная методика применения фрактального анализа для моделирования структуры композитных материалов является унифицированной и может быть пригодной для описания подобных характеристик для других объектов подобного рода.

Целесообразно проведение дальнейших исследований, направленных на совершенствование фрактальных моделей микроструктуры наномодифицированных бетонов, чтобы эти модели можно было более эффективно использовать для оптимизации.

Список литературы

1. Evelson L., Lukuttsova N. Application of statistical and multi-fractal models for parameter optimization of nano-modified concrete. International // *Journal of Applied Engineering Research*. 2015. Vol. 10. No. 5, pp. 12363–12370.
2. Евельсон Л.И. Параметрическая оптимизация гидрогазового поглощающего аппарата ГА-500 // *Динамика, нагруженность и надежность подвижного состава: Межвуз. сб. научн. тр.* Днепропетровск: ДИИТ, 1985. С. 29–36.
3. Евельсон Л.И., Рыжикова Е.Г. Численный метод оптимизации на основе планирования вычислительного эксперимента // *Вестник БГТУ*. 2015. № 1. С. 14–19.
4. Мандельброт Б. Фрактальная геометрия природы. М.: Институт компьютерных исследований, 2002. 656 с.
5. Лукутцова Н.П., Пыкин А.А. Теоретические и технологические аспекты получения микро- и нанодисперсных добавок на основе шунгитосодержащих пород для бетона. Монография. Брянск: БГИТА, 2014. 216 с.
6. Монтгомери Д.К. Планирование эксперимента и анализ данных. Л.: Судостроение, 1980. 384 с.

References

1. Evelson L., Lukuttsova N. Application of statistical and multi-fractal models for parameter optimization of nano-modified concrete. International. *Journal of Applied Engineering Research*. 2015. Vol. 10. No. 5, pp. 12363–12370.
2. Evel'son L.I. Parametric optimization of thermal gas absorbing apparatus HA-500. *Dynamics, loading and reliability of rolling stock. Interuniversity collection of scientific papers*. Dnepropetrovsk: DTIS. 1985, pp. 29–36. (In Russian).
3. Evel'son L.I., Ryzhikova E.G. A numerical method for optimization through planning computational experiment. *Vestnik BGTU*. 2015. No. 1, pp. 14–19. (In Russian).
4. Mandel'brot B. Fraktal'naya geometriya prirody [Fractal Geometry of Nature]. Moscow: Institute of Computer Science. 2002. 656 p.
5. Lukuttsova N.P., Pykin A.A. Teoreticheskie i tekhnologicheskie aspekty polucheniya mikro- i nanodispersnykh dobavok na osnove shungitosoderzhashchikh porod dlya betona. Monografiya [Theoretical and technological aspects of production of schungite-based micro- and nano-disperse additives to concrete. Monograph]. Bryansk: BGITA. 2014. 216 p.
6. Montgomeri D.K. Planirovanie eksperimenta i analiz dannykh. [Experimental Design and Analysis]. Leningrad: Sudostroenie. 1980. 384 p.