

ПРОСТ ФРАКТАЛОПОДОБЕН МОДЕЛ НА ПОРЕСТИ СРЕДИ

Стилиян Луков¹, Николай Ерохин², Димитринка Томова³, Румен Шкевов¹,
Пламен Тренчев¹, Костадин Шейретски¹

¹Институт за космически изследвания – Българска академия на науките,

²Институт космических исследований – РАН,

³СУ “Св. Климент Охридски” – ДЕО-ИЧС

e-mail: slukov@space.bas.bg

Ключови думи: фрактали, порести среди, моделиране

Abstract: A simple model of a certain type of porous media is considered – mainly activated carbon, based on the use of classical volume fractals. It is shown that the model provides satisfactory description of the main experimentally verifiable characteristics of the considered media. In short, the possibility for further improvement of the model is shown through introduction of random changes in the structure of the initial classical fractal.

1. Въведение

Известно е, че първоизточник при създаването на фракталите и фракталната геометрия са били обекти от реалността, например, безкрайно начупената структура на бреговата ивица [1]. Впоследствие, обаче, се забелязва обратния процес – създадената вече теорията на фракталите започва широко да се прилага за моделиране на редица реални среди и процеси със сложна структура [2, 3]. Пример в това отношение представлява фракталното описание на възникващите пукнатини в напрегнати материали, фракталното моделиране на композитни материали [4], представянето на морската повърхност като фрактал [2] и много други. Тук важно място заема фракталното моделиране на порести и шуплести среди [5, 6]. Въпреки, че изследванията в тази област са започнали сравнително неотдавна, вече са натрупани немалък брой работи, както с теоретичен, така и с експериментален характер. Тези изследвания представляват освен теоретичен, така и немалък практически интерес, като се има предвид възможността за създаване на изкуствени среди с определени свойства.

В настоящия доклад ние разглеждаме един прост модел на определен тип порести среди – главно активен въглен, основан на използването на класически обемни фрактали. Показано е, че този модел описва удовлетворително основните експериментално проверяеми характеристики на разглежданите среди. Накратко се посочва възможността за по-нататъшно усъвършенстване на модела чрез въвеждане на случайни изменения в структурата на изходния класически фрактал.

2. Някои по-важни характеристики на средата

Активираният въглен (АВ), както е известно, е среда, получавана изкуствено чрез изгаряне при специални условия на обвивки от кокосови орехи. Поради изключително високите си абсорбционни свойства, той отдавна намира много широко приложение в химическите изследвания и технологии – например, в абсорберите, противогазите и пр. Сравнително неотдавна АВ започна да се използва (чрез специална технология) за производство на електрически кондензатори с огромен специфичен капацитет (до няколко десетки фарада на куб. см).

АВ се характеризира с пореста структура, т.е. с наличието на множество микроскопични пори или тунели (с диаметър от части от mm до единици nm и по-малки). Тези тунели (или болшинството от тях) са “проходни”, т.е. осигуряват преминаването (филтрацията) на съответни среди – например, газове. Сумарната вътрешна повърхност на образците от АВ се оказва огромна – от единици до десетки хиляди m^2/cm^3 . Това качество, наред с микроскопичния размер на порите осигурява съответните свойства - свръхвисока абсорбционна способност, свръхвисок електрически капацитет на съответните устройства и пр. [4].

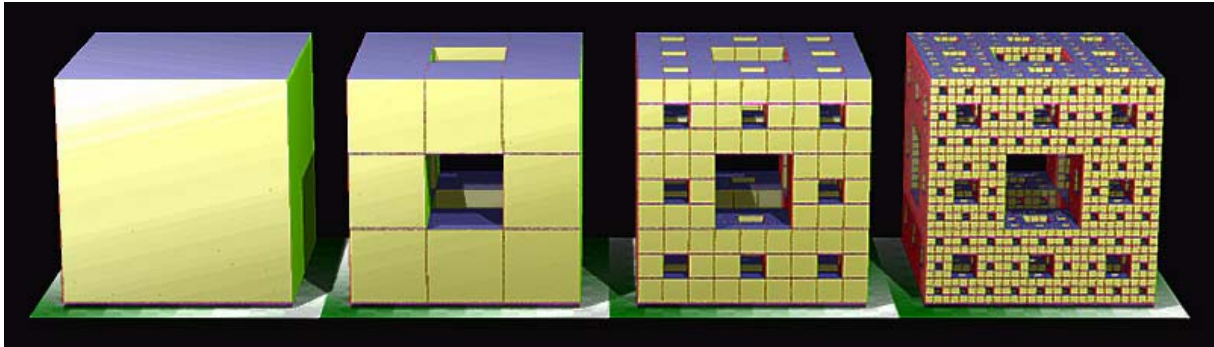
3. Описание на модела

Предлаганият модел се основава на съответни модификации на класическия фрактал “Гъбичка на Менгер”. Последният, както е известно, е от проходен тип, което съответствува на проходния характер на структурата на АВ [7].

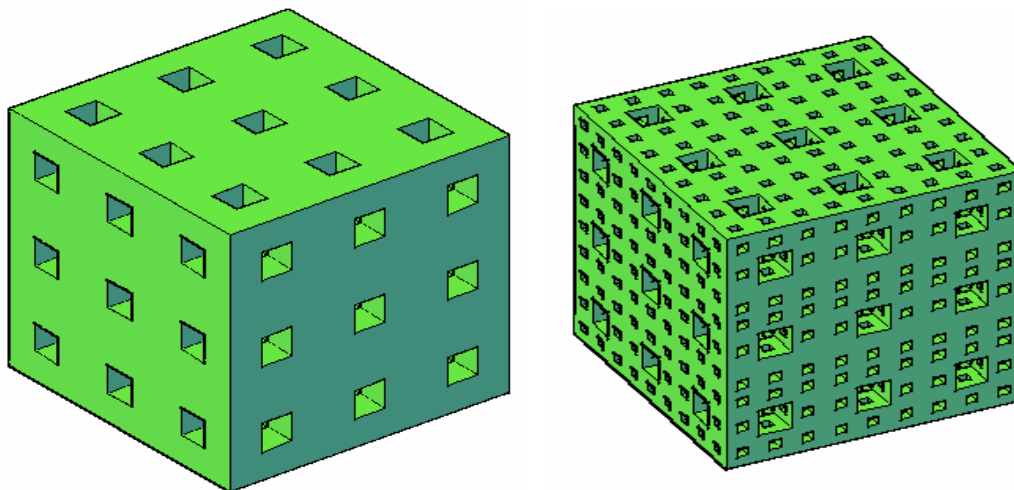
В литературата различават два основни типа фрактали – математически или идеални и физически или реални фрактали [2]. При това, главно отличие на реалните фрактали от идеалните е крайния брой итерации на генерацията алгоритъм и, съответно, крайния брой мащаби. Разбира се, съществуват и други отличия – например, отсъствието на идеална симетрия и пр. Оказва се, че чрез определени процедури един идеален фрактал може да се модифицира, доближавайки се по този начин до съответния реален фрактал.

Една от основните процедури в това отношение е т.н. “орязване” или “отсичане” на фрактала, състояща се в спиране на генерацията алгоритъм след определен брой стъпки (итерации) [2]. Ние ще означаваме указаната процедура като “орязване на фрактала отдолу”, отличавайки я от следващата процедура – “орязване отгоре” или “орязване в началото”, която се предлага от нас и не е описана в литературата.

Процедурата “орязване отгоре” има за цел изглаждане или регуляризация на фрактала и се заключава в изпускане на началните стъпки на алгоритъма и започване на генерацията на фрактала от стадий на по-голямо “издребняване”. Това се илюстрира на фиг.1, където е показан изходния фрактал “Гъбичка на Менгер” (а) и орязания отгоре (първа итерация) фрактал от този тип (b).



Фиг.1. Идеален фрактал тип “Гъбичка на Менгер”



Фиг. 2. Орязан отгоре на първа итерация фрактал тип “Гъбичка на Менгер”.

Орязването отдолу на фрактала се ограничава от минимално допустимия размер на порите, определен от физически съображения или от микроскопско наблюдение на реалната среда. Орязването отгоре е необходимо за изглаждане на модела (в действителност в структурата на активния въглен не се наблюдават единични пори с много големи размери).

Процедурата “рандомизация” се прилага широко за модификация на математическите фрактали и доближаването им по този начин до реалните фрактали. Същата се заключава в добавянето на случайни смущения в детерминирания алгоритъм, генериращ изходния фрактал. Така могат да бъдат получени различни рандомизирани варианти на класическите фрактали – “Крива на Кох”, “Килим на Серпински” и др. [7].

В разглеждания случай рандомизацията на класическия фрактал “Гъбичка на Менгер” е целесъобразна от гледна точка на приближаване на модела до реалната среда. Както е известно, въгленът, в това число и активният въглен, има аморфна структура и отделните пори нямат строго подредено разположение, докато фракталът “Гъбичка на Менгер” има структура, изоморфна на структурата на кристалите с кубична симетрия, като квадратните тунели с намаляващ размер са разположени в строг ред.

Между впрочем, не е изключено и ние го изказваме тук в качеството на хипотеза, да съществуват (или да могат да се създадат изкуствено) други модификации на въглерода, характеризирани се с наличието едновременно, както на кристална, така и на фрактална структури (така, както изкуствено бяха синтезирани неотдавна друг тип въглеродни модификации – фулерените).

4. Основни характеристики на модела

4.1. Формално описание

Формално, алгоритъма на генериране на фрактала “Гъбичка на Менгер” може да се представи така

$$(1) \quad M := \bigcap_{n \in \mathbb{N}} M_n, \quad M_0 - \text{единичен куб,}$$

където $M_{n+1} := \{(x, y, z) \in \mathbf{R}^3; \exists i, j, k \in \{0,1,2\}: (3x - i, 3y - j, 3z - k) \in M_n\}$.

4.2. Фрактална размерност

Фракталната размерност на гъбичката на Менгер, както е известно, е дробна и има следната стойност [7]

$$(2) \quad d_F = \frac{\log N_1}{\log r} = \frac{\log 20}{\log 3} \approx 2,7268,$$

където $r = 3$ - брой на частите, на които се дели страната на куба, $N_1 = 3^3 - 7 = 20$ - брой на частите (субкубовете), оставащи след първата итерация.

По аналогичен начин, за орязаната отгоре (до първата итерация) гъбичка на Менгер, получаваме

$$r^{(1)} = 3^2 = 9; \quad N_1^{(1)} = 3^6 - 3^3 \cdot 7 = 540,$$

$$(3) \quad d_F^{(1)} = \frac{\log N_1^{(1)}}{\log r^{(1)}} = \frac{\log 540}{\log 9} \approx 2,863,$$

а за орязаната отгоре до втората итерация гъбичка имаме

$$r^{(2)} = 3^3 = 27; \quad N_1^{(2)} = 3^9 - 3^6 \cdot 7 = 14580,$$

$$(4) \quad d_F^{(2)} = \frac{\log N_1^{(2)}}{\log r^{(2)}} = \frac{\log 14580}{\log 27} \approx 2,9039.$$

Както се вижда, с увеличаване на броя на орязаните отгоре итерации на генериращия алгоритъм, нараства стойността на дробната размерност на модифицирания фрактал “Гъбичка на Менгер”, стремейки се към числото 3, т.е. към топологичната размерност на изходния куб.

Съгласно литературните данни [8], проведените експериментални измервания по метода на молекулярната абсорбция на образци от активизиран въглен от обвивки на кокосови орехи показват, че размерността на същите се намира в границите на

$$(5) \quad d_F^{AB\text{exp}} \cong 2,80 \pm 0,16.$$

Оттук може да се заключи, че по отношение на фракталната размерност, както немодифицираният модел, така и двете модификации на същия чрез орязване отгоре, съответно, на първа и втора итерации, се вписват в интервала на измерените стойности на този параметър на активния въглен. Все пак, най-близо до средната стойност на този интервал се намира фракталната размерност на орязания отгоре на първа итерация фрактал, което дава основание да се отдаде предпочитание на този модел. Допълнително съображение, което беше отбелязано по-горе, е по-голямата равномерност на фрактала, т.е. по-малкото отличие между размерите на най-големите тунели, което осигурява орязването отгоре на разглеждания фрактал.

4.3. Сумарна площ на тунелите (вътрешна площ)

Както е известно, обемът на оставащата след прорязване на тунелите част на фрактала "Гъбичка на Менгер" има мярка нула [7]. В същото време сумарната вътрешна площ на тунелите на идеалния фрактал е безкрайна. За реалния (орязан отдолу) фрактал тази площ е крайна, но може да достигне много големи стойности след достатъчно голям брой итерации.

За модела във вид на орязана отгоре на първата итерация гъбичка на Менгер сумарната площ на тунелите, т.е. вътрешната площ на фрактала може да се определи от степенния закон

$$(6) \quad S_n = \frac{3^6 8^n 20^{n-2}}{3^{2(n+1)}} a^2,$$

където a е страната на изходния куб, n е броя на итерациите;

При $n < 1$ за множителя 20^{n-2} се приема стойността $20^0 = 1$.

При $a = 1$ (в съответни мерни единици) горната формула всъщност дава относителната (на единица обем) вътрешна площ на разглеждания фрактал

$$(7) \quad S'_n = \frac{S_n}{V} [m^2 / cm^3].$$

Така, за шестата итерация имаме

$$(8) \quad S_6 = \frac{8^6 20^5}{3^8} \cong 1,27 \cdot 10^7 a^2.$$

За начален куб със страна $a = 1\text{cm}$, получаваме за относителната вътрешна площ на фрактала

$$(9) \quad S' \cong 1,27 \cdot 10^7 \cdot 10^{-4} = 1270 m^2 / cm^3.$$

За размера на страната на най-малките тунели имаме

$$(10) \quad a_{\min} = a_6 = \frac{a}{3^6} \cong 0,00137\text{cm} = 13,7 \mu\text{m}.$$

Получените стойности за относителната вътрешна площ и за минималните размери на тунелите на фрактала показват, че по тези показатели разглеждания модел се доближава до типичните измерени стойности на вътрешната площ и на размера на порите на образци от моделираната среда – активиран въглен от обвивки на кокосови орехи [8].

По-нататъшно усъвършенстване на модела и, следователно, по-добро приближаване на същия към характеристиките на реалните среди, може да се постигне, както беше посочено по-горе, чрез прилагане на процедура на рандомизация на изходния фрактал (гъбичка на Менгер или, съответно, орязана отгоре и отдолу гъбичка на Менгер).

По принцип са възможни най-различни методи за рандомизация на разглеждания обемен фрактал – например, чрез замяна на строго подреденото разположение на тунелите чрез въвеждане на случайни малки измествания на същите спрямо началното положение. Друга възможност предоставя въвеждането на случайни изменения на първоначалната строго квадратна форма на сечението на тунелите и пр. На трето място, ние предвиждаме възможност

за рандомизация чрез въвеждане на локални изменения на орязването отгоре и отдолу, които стават по случаен избор – например, чрез разделяне на изходния куб на 3^n субкуба, номериране на отделните субкубове и впоследствие избор на отделните субкубове от цялото множество, в които се въвежда орязване в по-висока степен, чрез процедура за случаен избор. По този начин рандомизирания фрактал “Гъбичка на Менгер” придобива структурата на “мултифрактал”, много по-добре пасващ на естествените (реалните) фрактали.

5. Заключение

Проведеното изследване и получените резултати дават основание да се заключи, че предлагания прост фрактален модел на порести среди (активиран въглен) сравнително добре отговаря на основните характеристики – фрактална размерност, сумарна вътрешна площ, размер на тунелите и пр., на реалните среди. Това дава основание да се предположи, че този модел би могъл да се използва за числено моделиране на различни процеси в тези среди – например, възникване и развитие на дефекти и пр.

Литература:

1. M a n d e l b r o t B. B. The Fractal Geometry of Nature. New York: W.H. Freeman and Company, 1983.
2. П о т а п о в А. А. Фракталы в радиофизике и радиолокации: Топология выборки, М., “Университетская книга”, 2005.
3. Фракталы в физике. Труды VI международного симпозиума по фракталам в физике (МЦТФ, 9-12 июля, 1985).
4. Fractals and Fractional calculus in Continuum Mechanics, International Centre for Mechanical Sciencesq, Ed by A. Carpinteri and F. Mainardi, Springer Wien New York, 1997.
5. L e n o r m a n d R. Fractals and Porous Media: from Pore to Geological Scales, In: [4], p. 173.
6. К у л ь к о в С. Н., Я. Т о м а ш, С. П. Б у я к о в а. Фрактальная размерность поверхностей пористых керамических материалов, Письма в ЖТФ, 2006, том 32, вып. 2, с.51-55.
7. К р о н о в е р Р. М. Фракталы и хаос в динамических системах, пер. С англ. под ред. Т.Э. Кренкеля, “Постмаркет”, М., 2000.
8. V n i r D., D. F a r i n, P. P f e i f e r. Molecular Fractal Surfaces //Nature, 1984, v.308, №5956, p. 261-263.