НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МОДЕЛЮВАННЯ В ЕНЕРГЕТИЦІ
ім. Г.Є. Пухова НАН України

МОДЕЛЮВАННЯ
ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ

ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

СПЕЦІАЛЬНИЙ ВИПУСК

Матеріали міжнародної наукової конференції
«МОДЕЛЮВАННЯ-2010»
«SIMULATION-2010»
(12-14 травня 2010 року)

ТОМ 1

Київ – 2010

ОСЦИЛЛИРУЮЩЕЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЕРАРХИЧЕСКИ СОПОДЧИНЁННЫХ СТРУКТУР ГЕТЕРОГЕННОГО МАТЕРИАЛА

В.Н. Выровой, А.Н. Герега, О.А. Коробко
Одесская государственная академия строительства и архитектуры

Предложена стохастическая модель осциллирующего взаимодействия компонентов структуры композита. Получены аналитические выражения для оценки периода процесса. Аттракторы моделирующей системы уравнений интерпретируются как фигуры Лиссажу в фазовом пространстве энергий.

Введение

Сложная организация композиционных материалов – результат формирования их структуры в многофакторных синергетических процессах. Создание композита происходит в несколько этапов, имеет сложную эволюционную «траекторию», включает процессы, протекающие на всех масштабных уровнях [1].

Если понимать структуру как модель, в которой устанавливается закон эволюции исследуемой системы и порядок в распределении характерных величин [2, 3], то внутренние границы раздела материала (ВГ) – фрактальные поверхности, разделяющие разнородные части тела – можно рассматривать как её атрибутивную составляющую [4].

Включение ВГ в состав структурных параметров материала имеет несколько аспектов. Во-первых, материал представляет собой сложную систему, и, следовательно, *должен* иметь внутренние границы, существование которых является общесистемной закономерностью, и возникновение которых следует рассматривать как механизм реализации одной из её целевых функций – сохранение целостности [5, 6]. Кроме того, ВГ являются неизбежным следствием процессов организации структуры тела, обусловлены произвольностью формы и несоразмерностью кластеров и макроскопических структурных блоков, возникают в ходе становления материала и развиваются под действием внешних влияний и внутренних факторов.

Фрактальный характер структуры композита

Условия нарушения однородности спонтанно возникают в различных участках тела. Когда степень неоднородности материала достаточно возрастает, и появляются коллективные эффекты, – возникает качественно новый этап его эволюции. Когерентное взаимодействие между соразмерными элементами структуры – неоднородностями одного масштабного уровня – приводит к возникновению конфигураций, играющих роль исходных элементов для структуры более высокого уровня [7, 8]. Это провоцируют инфляцию структуры, а значит, способствуют росту неоднородности текстуры материала, приводит к возникновению иерархической соподчинённости, и как следствие, генерации принципиально иных структур.

Материал и внутренние границы – взаимообусловленные и совместно развивающиеся кластерные системы. Перераспределяя деформации в материале, ВГ эволюционируют, изменяя характерные размеры и осваивая новые масштабы, тем самым, модифицируя материал.

Поля деформаций, как известно, существенно зависят от конфигурации неоднородностей. В случае квазилинейных ВГ, (которые интересуют нас в первую очередь), значения компонентов тензоров деформаций пропорциональны r^{-1} [9], и, следовательно, на сравнительно больших расстояниях, многократно превышающих межатомные, их действие может быть существенным.

Ориентации линейных неоднородностей (ЛН), возникающих на ранней стадии образования материала, конечно, неслучайны, но и не скоррелированы. По мере роста их плотности, в ориентации вновь формирующихся ЛН возникает преимущественное направление: поля деформаций активизируют генерацию параллельных, и в наименьшей степени препятствуют их росту в перпендикулярном направлении. Таким образом, рост ЛН происходит преимущественно в двух взаимно перпендикулярных направлениях, и возникает характерная закономерность в расположении эквимасштабных трещин.

Это усугубляет анизотропию, приводит к возникновению самоаффинного мультифрактального узора трещин и внутренних границ, *простейшими* аналогами которого, соответственно, на

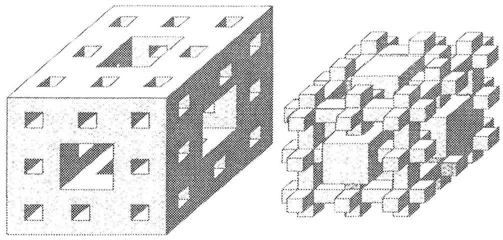

Рис. 1. Губка Менгера и её дополнение [10].

плоскости и в объёме, могут быть модифицированные с помощью аффинного отображения фракталы типа ковра Серпинского, губки Менгера и их дополнений, а также другие подходящие по форме фракталы (рис. 1 и 2). Важно, что они с очевидностью позволяют учесть и такой важный аспект процесса как *множественность* очагов зародышеобразования новых структурных элементов.

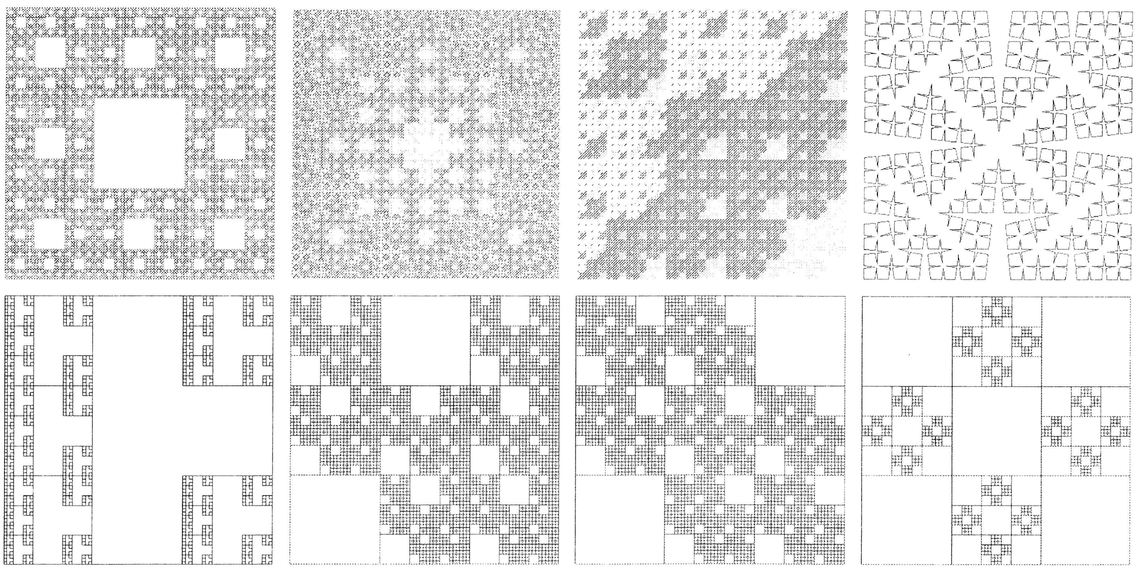

Рис. 2. Несколько фракталов: «вариации» на тему ковра Серпинского.

Если система ВГ находится вблизи точки структурного фазового перехода, то из-за больших размеров кластеров её геометрические характеристики не зависят от природы вещества, обладают универсальными свойствами, а результаты перехода отличаются в зависимости от структуры и свойств бесконечного кластера, по сути, определяющего новое *состояние вещества* [12-15].

Эти кластеры определяют широкий спектр физико-химическим и механических характеристик тела: прочность, процессы переноса, коррозийную устойчивость, долговечность и другие. В рамках перколяционного подхода получают объяснение аномалии процессов переноса, причудливость формы и фрактальность границ их фронта. Всё это позволяет рассматривать бесконечный кластер ВГ как источник изменений свойств материала, выделяет его в самостоятельный объект исследования.

Осциллирующее взаимодействие разномасштабных структур

Силовое поле расположенных случайным образом квазипараллельных ЛН представляет собой сложную интерференционную картину. Один из возможных механизмов взаимодействия структурных неоднородностей, освоения других масштабов также связан с интерференцией.

Когда в некоторой области материала поля эквимасштабных трещин складываясь, образуют локальные области с величиной деформации, превышающей среднее значение, это создаёт энергетические предпосылки для образования более крупных ЛН. Статистическое самоподобие в расположении границ приводит к некой «кратности» в конфигурации полей, проецируют этот механизм на всё большие масштабы, охватывая значительное пространство, создаёт всё более крупные трещины и границы раздела. В свою очередь, более мощные поля деформаций крупных ЛН, воздействуя на неоднородности меньших масштабов, провоцируют их дальнейший рост. Это происходит синхронно во всех масштабах, обнаруживает взаимообусловленность и взаимовлияние различных уровней структурных неоднородностей, существование положительной обратной связи и осциллирующее взаимодействие между ЛН разных структурных уровней.

Рассмотрим эти процессы как быстро затухающую твердотельную колебательную реакцию.

Пусть физическое тело представляет собой колебательную систему в указанном смысле. Это автономная распределённая неконсервативная система с затухающими ангармоническими колебаниями. Если предположить, что в системе действует обобщённая сила сопротивления, пропорциональная скорость распространения энергии в системе между ЛН разных масштабных уровней, то с поправкой на уровень правомерности сделанных допущений уравнение движения будет иметь стандартный вид

$$x'' + 2\gamma x' + \omega^2 x = 0\,,$$

где γ – обобщённый коэффициент затухания, ω – циклическая частота.

Оценим условный период T таких колебаний [16] для системы ЛН прямоугольного параллелепипеда. Введём величину, обратную коэффициенту жёсткости тела – податливость $C = 1/k$, которая определяет сколь далеко по масштабам может распространиться процесс трещинообразования, и для которой существует расчётная формула

$$C = 8a^3/(E h^3 b)\,,$$

где a – длина трещины, h – расстояние он неё до края тела, b – толщина пластины, E – модуль Юнга [17]. Предполагая γ малым, имеем $\omega^2 \approx \omega_0^2 = 1/(m\cdot C)$, тогда

$$T = 4\pi\,(2a^3 m\,/\,E h^3 b)^{1/2}\,,$$

где m – масса тела.

Другую оценку условного периода можно получить, определив логарифмический декремент затухания через последовательные (с интервалом в период) значения энергии системы W_n [16, 18],

$$T = (1/\gamma)\cdot(W_n - W_{n+1})\,/\,(W_n + W_{n+1})\,.$$

Формальная стохастическая модель взаимодействия структурных уровней

Пусть структура материала представляет собой открытую динамическую систему с тремя взаимодействующими масштабными уровнями неоднородностей и её эволюция описывается системой билинейных итерационных уравнений

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n - k_{xy} p x_n^{\,2} + k_{yx} q y_n^{\,2} + x_{in} \\ y_{n+1} = y_n + k_{xy} p x_n^{\,2} - \left(k_{yx} + k_{yz}\right) q y_n^{\,2} + k_{zy} r z_n^{\,2} \\ z_{n+1} = z_n + k_{yz} q y_n^{\,2} - \left(k_{zy} + k_{out}\right) r z_n^{\,2} \end{cases} \qquad (1)$$

где *x, y, z* – динамические переменные, определяющие потенциальную энергию уровня, а x_{in} – энергию внешнего воздействия. Коэффициенты k_{ij} задают долю переходящей между неоднородностями разных масштабов энергии, а коэффициенты *p, q, r* – долю утилизируемой для перестройки энергии, причём, $\{k_{ij}\}$ и $\{p, q, r\} \subset (0,1)$, $\{x, y, z\} \subset R$. Отметим, что определение значений этих коэффициентов для конкретного материала является предметом отдельного исследования.

Рассмотрим характер эволюции такой системы в зависимости от интенсивности подвода энергии и особенностей строения материала.

Для учёта особенностей процесса взаимодействия разномасштабных ЛН реализован алгоритм решения системы, в котором уже в текущей итерации учитываются изменения рассчитанных переменных. Изучение системы, в частности, показало [19-21], что при малых x_{in} в системе существует стационарное состояние, и с ростом x_{in} возможны два варианта эволюции системы.

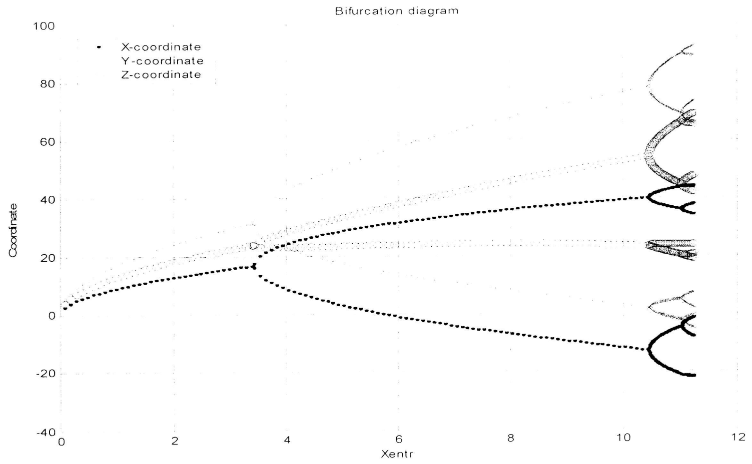

Рис. 3. Бифуркационная диаграмма сценария удвоений периода. Представлены первые три бифуркации для системы с параметрами $k_{xy} = 0.5$, $k_{yx} = 0.4$, $k_{yz} = 0.3$, $k_{zy} = 0.3$, $k_{out} = 0.4$, $p = 0.08$, $q = 0.02$, $r = 0.015$.

В первом – возникает каскад бифуркаций удвоений периода, и реализуется сценарий Фейгенбаума [22, 23] перехода к хаосу (рис. 3). При этом в фазовом пространстве потенциальных энергий уровней наблюдаются аттракторы, состоящие из 2^n точек. Во втором случае, после периодического режима возникает ситуация, аналогичная бифуркации Хопфа [23, 24], приводящей к возникновению квазипериодического режима и появлению аттрактора в виде двух замкнутых линий. Дальнейшее увеличение x_{in} приводит к бифуркации, в результате которой наступает хаотический режим, при этом в фазовом пространстве появляется странный аттрактор.

Помимо рассмотренных сценариев развития хаоса в системе могут наблюдаться их комбинации, когда хаотическое поведение системы на какой-то промежуток времени сменяется периодическим.

Есть основания рассматривать аттракторы, описывающие эволюцию системы итерационных уравнений (1) в фазовом пространстве энергий, как обобщение фигур Лиссажу в случае квазиколебательных процессов, протекающих в трёх направлениях.

Классические фигуры Лиссажу – траектории точки, одновременно совершающей гармонические колебания в двух взаимно перпендикулярных направлениях [25]. Её вид определяется соотношением параметров колебаний, и в простейшем случае равенства периодов представляет собой эллипс. Если разность фаз с течением времени изменяется, то траектория имеет вид сложной незамкнутой, но регулярной линии.

Для системы (1) траектории представляют собой аттракторы (рис. 4). Главное, что роднит их с фигурами Лиссажу – возможность визуально определять характер и особенности процесса.

Выводы

Предложенный подход позволяет с единых позиций описать характер распределения технологических трещин и ВГ в различных асимптотиках гетерогенного материала.

Исследование особенностей колебательной составляющей многофакторных процессов генезиса ВГ даёт новые возможности для влияния на структуру кластеров вещества в формирующемся материале. Подобие свойств фрактальных объектов и кластеров ВГ, в частности, схожесть геометрических характеристик, расширяет возможности релевантного описания структуры последних.

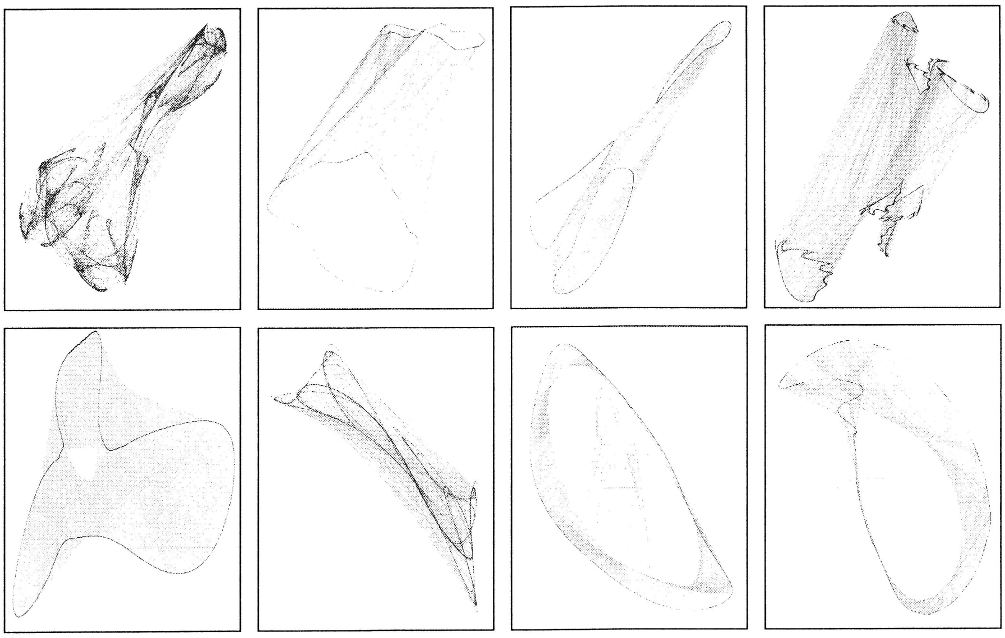

Рис. 4. Некоторые из аттракторов, наблюдаемых в системе.

Математическая модель взаимодействия разномасштабных структур, позволяющая изучать, как открытую нелинейную стохастическую динамическую систему сформулирована как универсальная. Это открывает ещё одну возможность для исследования эволюции абстрактных систем, которые состоят из подсистем, взаимодействующих по произвольным законам.

Литература

1. Герега А.Н., Выровой В.Н., Суханов В.Г. Особенности кластерной организации строительных композитов. //Вісник Одеської державної академії будівництва та архітектури. – 2009. – № 33. – С. 172-180.
2. Хакен Г. Синергетика. Иерархия неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. – М.: Мир, 1985. – 420 с.
3. Змитренко Н.В., Михайлов А.П. Инерция тепла. – М.: Знание, 1982. – 62 с.
4. Герега А.Н., Выровой В.Н. Компьютерное моделирование внутренних границ раздела как элементов структуры материала. /Сборник трудов конференции «Моделирование-2008» ИПМЭ им. Г.Е. Пухова. – Киев, 2008. – С. 195-199.
5. Уёмов А.И. Системы и системные параметры. /Проблемы формального анализа систем (под ред. А.И. Уёмова, В.Н. Садовского). – М.: Высшая школа, 1968. – 170 с.
6. Берталанфи Л. Общая теория систем: критический обзор. /Исследования по общей теории систем. – М.: Прогресс, 1969. – С. 23-82.
7. Олемской А.И., Скляр И.А. Эволюция дефектной структуры твёрдого тела в процессе пластической деформации. //УФН – 1992. – Т. 162, № 6. – С. 29-79.
8. Панин А.Е., Гриняев Ю.В., Данилов В.И. и др. Структурные уровни пластической деформации и разрушения. Новосибирск: Наука, 1990. – 255 с.
9. Косевич А.М. Физическая механика реальных кристаллов. – Киев: Наукова думка, 1981. – 328 с.
10. Божокин С.В., Паршин Д.А. Фракталы и мультифракталы. – Ижевск: НИЦ РХД, 2001. – 128 с.
11. Мандельброт Б. Фрактальная геометрия природы. – М.: ИКИ, 2002. – 656 с.
12. Соколов И.М. Размерности и другие критические показатели в теории протекания. //УФН – 1986. – Т. 150, вып. 2. – С. 221- 255.

13. Берлин А.А., Вольфсон С.А., Ошмян В.Г., Ениколопов Н.С. Принципы создания композиционных полимерных материалов. – М.: Химия, 1990. – 240 с.
14. Trugman S.A., Weinrib A. Percolation with a threshold at zero: a new universality class. //Physical Review B. – 1985. – V. 31, No. 5. – P. 2974 - 2980.
15. Герега А.Н., Выровой В.Н. Управление свойствами композиционных материалов. Перколяционный подход. //Вісник Одеської державної академії будівництва та архітектури. – 2005. – № 20 – С. 56-61.
16. Мандельштам Л.И. Лекции по теории колебаний. – М.: Наука, 1972. – 470 с.
17. Броек Д. Основы механики разрушения. – М.: Высшая школа, 1980. – 368 с.
18. Андронов А.А., Витт А.А., Хайкин С.Э. Теория колебаний. – М.: Наука, 1981. – 568 с.
19. Асланов А.М., Герега А.Н., Лозовский Т.Л. Две модели стохастических процессов в центробежных фильтрах с обратными связями. //Журнал технической физики. – 2006. – Т. 76, вып. 6. – С. 134-135.
20. Герега А.Н., Лозовский Т.Л. Моделирование самоорганизации динамических дисперсных систем. I. Спонтанная организация двухфазного потока. //Электронное моделирование. – 2008. – Т. 30, № 3. – С. 3-12.
21. Bekker M., Herega A., Lozovskiy T. Strange Attractors and Chaotic Behavior of a Mathematical Model for a Centrifugal Filter with Feedback. (Picturepaper). //Advances in Dynamical Systems and Applications. – 2009. – Vol. 1, No. 1. – P. *-*.
22. Фейгенбаум М. Универсальность в поведении нелинейных систем. //УФН – 1983. – Т. 141, вып. 2. – С. 343 - 374.
23. Берже П., Помо И., Видаль К. Порядок в хаосе. – М.: Мир, 1991. – 368 с.
24. Лихтенберг А., Либерман М. Регулярная и стохастическая динамика. – Череповец: Меркурий-пресс, 2000. – 528 с.
25. Хайкин С.Э. Физические основы механики. – М.: Наука, 1971. – 752 с.