

О ВОЗМОЖНЫХ ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫХ ПОДХОДАХ К ИССЛЕДОВАНИЮ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ

Выровой В. Н., д.т.н., проф., Гергега А. Н., к.т.н., доц.

*Одесская государственная академия строительства и архитектуры,
Украина*

Взаимосвязь структуры и свойств гетерогенных материалов рассматривается как характерный феномен сложной системы. Предложена математическая модель эволюции системного комплекса, элементы которого взаимодействуют по произвольным законам, показан осцилляторный характер формирования подсистем, значимость интерьерных границ. Обсуждается взаимовлияние естественнонаучного и общесистемного подходов.

Введение. Едва ли не самое привычное впечатление от окружающего мира - колоссальное количество предметов и огромное разнообразие материалов, из которых они сделаны. Для современных материалов характерно разнообразие компонентов, обилие разномасштабных структурных элементов и типов взаимодействия между ними, а также высокая степень интеграции составляющих, что является отличительными свойствами сложных систем.

Обилие веществ, количество и диапазон их свойств - это, как известно, проявление многообразия структур, следствие целенаправленной разработки и реализации технологий их генезиса. Современные представления о взаимосвязи между структурой и свойствами, пониманий роли самоорганизации в процессе генезиса и функционирования материала позволили выделить в качестве одного из основных направлений науки о материалах - создание композитов. Полученные в последние десятилетия полифункциональные композиционные материалы отвечают многим, подчас противоречивым требованиям, обладают своеобразными, иногда, уникальными свойствами.

Структура вещества. Анализ и исследование объектов любой природы и назначения, как известно, опирается на две принципиально различные по своей философии и взаимно дополняющие фундаментальные парадигмы - континуальную и структурную.

Представление о материале как о сплошной среде легло в основу метамодели, базирующейся на исследовании усреднённых величин. Достижения континуального подхода трудно переоценить, но как всякий метод, он имеет и декларируемые, и открывающиеся в процессе исследования пределы. Они - естественное продолжение достоинств модели: парадигма, созданная для описания определённого круга явлений, не может и не должна порождать «теорию всего».

Другой подход к исследованию вещества, как известно, строится на представлении о дискретности вещества и существовании структуры.

Традиционное представление о структуре как характерном расположении частиц, определённом типе симметрии, виде волновой функции и т.п. отходит в прошлое. В современном естествознании структуру понимают как совокупность модельных величин, неоднородное распределение которых в пространстве характеризует исследуемую систему,

и установленном законе её эволюции [1,2].

В процессе работы исследователь по своему усмотрению может акцентировать внимание на определённых чертах структуры, нивелировать другие. Ниже описаны свойства материала, обусловленные, в первую очередь, структурой промежуточной асимптотики. В этом случае невозможно обойти вниманием кластерную составляющую - атрибутивную часть структуры мезоскопического уровня.

Кластерное строение композитов. Представление о кластерах ввёл в 1661 году Роберт Бойль: так он назвал «группы, которые нелегко разделить на составляющие их части» [3,4]. Интерес к подобным структурам привёл в шестидесятых годах XX века к появлению нового научного направления, предметом изучения которого стали эти широко распространённые специфические объекты, имеющие своеобразные реакционные способности и «глубокие особенности строения»[5].

В материаловедении кластером называют систему конечного числа связанных частиц, имеющую ряд специфических свойств: она обладает статистическим самоподобием в определенном интервале масштабов и «магическими числами» по отношению к физико-химическим свойствам, имеет экстенсивную плотность, значительную величину удельной поверхности [6-11].

Структурными элементами кластеров могут быть вещественные объекты: атомы, ионы, молекулы, отдельные зёрна и их макроскопические агрегаты, объёмы определённых фаз, а можно рассматривать и кластеры трещин, внутренних границ раздела, пустот и т.п.

Происхождение несплошностей в материале может иметь разную природу: характерная форма кластеров вещества, их выраженная фрактальность, приводит к возникновению несплошностей уже на начальной стадии формирования физического тела, а «тектонические» процессы нивелирования избыточных напряжений и множественность центров самоорганизации - в процессе эволюции. Эти группы кластерных систем являются фоном друг для друга, взаимно конкатенируются до заполнения пространства, как образы гравюр М. Эшера.

Существенным для выделения кластерной системы является масштаб (внутри мезоскопической области), в котором изучается явление [12,13]. В зависимости от него можно, например, рассматривать гранулу и как часть кластера некоторой фазы, и как состоящий из зёрен кластер. Примеры можно множить: трещина в зависимости от масштаба рассмотрения - либо часть макротрещины, либо объединение микротрещин, что, кстати, естественным образом вводит представление об иерархии кластеров.

Интерьерные границы. Сложной обычно называют систему, не имеющую простых описаний; это предполагает разнообразие параметров, не сводящихся к элементарным закономерностям, вариативность и нерегулярность связей между элементами, а также определённый количественный ценз [14]. Гетерогенный материал - хороший пример такой системы: налицо и сложность описания, и разнообразие признаков, и набор разнородных взаимодействующих компонентов, свойства которых во многом не совпадают с

характеристиками системы.

Существование интерьерных границ, которые представляют собой фрактальные поверхности, разделяющие разные вещества или различные фазы одного вещества, либо проходящие по дефектам материала [17, 18], - имманентное качество сложной системы, общесистемная закономерность [15,16]. Внутренние границы зарождаются в процессе становления материала, растут и трансформируются в течение всего времени существования.

Методология исследования физических тел как материальных систем предполагает решение двух взаимосвязанных задач: изучение объектов как формы существования и движения реального мира, как проявление его упорядоченности, и, при необходимости, конструирование категорий и представлений, отражающих системные связи объектов и делающей упорядоченным самопознание [19]. В отношении внутренних границ таким упорядочивающим фактором было бы включение их, вопреки сложившейся традиции, в число основных элементов системы. Помимо перечисленного, это обусловлено их ролью в фазовых переходах II рода.

Структурные фазовые переходы. Когда в процессе эволюции материала концентрация элементов некоторой из его подсистем возрастает, и возникает пронизывающая тело однородная область, это может привести к качественному скачку в развитии структуры: возникает перколяционный кластер, происходит структурный фазовый переход [8,20-22].

В момент фазового перехода один из характерных размеров перколяционного кластера становится сравнимым с габаритами физического тела, и как следствие скачкообразно изменяется корреляционная длина, появляется выделенное направление, понижается симметрия объекта. Таким образом, перколяционный кластер, который иногда занимает доли процента объёма тела [23], не просто изменяет ряд его физикохимических параметров, но, по сути, определяет новое состояние вещества.

Параметром порядка структурного перехода является мощность P перколяционного кластера - вероятность того, что элемент объёма принадлежит этому кластеру. Критическое поведение этого параметра при $x \rightarrow x_c$ ($x > x_c$) определяется соотношением $P \sim (x - x_c)^\beta$, где x_c - критическая концентрация конечных кластеров, β - индекс параметра порядка. Характерный пространственный масштаб системы задаёт длина корреляции ζ . В первом приближении ζ - это характерный размер конечных кластеров при $x < x_c$, и характерный размер пустот в перколяционном кластере при $x > x_c$. Критическое поведение этой величины определяется соотношением

Фрактальный характер «структуры композита. Если степень неоднородности продолжает возрастать, то в материале 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 [24, 25]. 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, внутренние границы эволюционируют, изменяя характерные размеры и осваивая новые масштабы, тем самым, модифицируя материал. Поля деформаций, как известно, существенно зависят от конфигурации неоднородностей. В случае квазилинейных внутренних границ значения компонентов тензоров деформаций пропорциональны γ^{-1} [26], и, следовательно, на сравнительно больших расстояниях, многократно превышающих межатомные, их действие может быть существенным.

Ориентации линейных неоднородностей, возникающих на ранней стадии образования материала, конечно, неслучайны, но и не скоррелированы. По мере роста их плотности, в ориентации вновь формирующихся линейных неоднородностей возникает преимущественное направление: поля деформаций активизируют генерацию параллельных, и в наименьшей степени препятствуют их росту в перпендикулярном направлении. Таким образом, рост линейных неоднородностей 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 плоскости и в объёме, могут быть модифицированные с помощью аффинного отображения фракталы типа ковры Серпинского, губки Менгера и их пространственных дополнений, а также другие подходящие по форме фракталы. Важно, что они с очевидностью позволяют учесть и такой важный аспект процесса как множественность очагов зародышеобразования новых структурных элементов.

Осциллирующее взаимодействие разномасштабных структур. Силовое поле расположенных случайным образом квазипараллельных линейных неоднородностей 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 неоднородностей.

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 линейных неоднородностей, 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 неоднородностями 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 скорости распространения энергии в системе между линейными неоднородностями 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 [27].

Формальная стохастическая модель взаимовлияния структурных уровней. Пусть структура материала представляет собой открытую динамическую систему с тремя взаимодействующими типами кластеров, и её эволюция описывается системой билинейных итерационных уравнений [28]

хаотическое поведение системы время от времени сменяется периодическим. Это приводит к появлению в фазовом пространстве странного аттрактора [28].

Как известно, странные аттракторы можно трактовать как стохастические автоколебания, поддерживаемые в динамической системе за счёт внешнего источника. В фазовом пространстве они имеют топологию некоторого клубка траекторий, которые представляют собой множество решений системы нелинейных уравнений [28,32]. Это даёт основание рассматривать аттракторы, описывающие эволюцию системы итерационных уравнений (1) в фазовом пространстве энергий как обобщение фигур Лиссажу в случае квазиколебательных процессов, что открывает возможность визуально определять характер и особенности процесса.

Заключение. Интенсивное развитие теории систем привело к заметным достижениям и убедительным успехам в методологии научных исследований, но всегда непростая задача исследования сложных систем в каждом случае требует оригинального подхода, найти который и большое искусство, и большая удача. В то же время, опыт, накопленный в естественных науках, используемые подходы, разработанные приемы и методы, введенные в научный оборот представления и понятия позволяют продвинуться в направлении алгоритмизации таких исследований.

Примерами такого влияния на методологию исследования композиционных материалов является, в частности, введение представления об интерьерных границ как элементах структуры, констатация осцилляторного характера взаимодействия разномасштабных подсистем, осознание целесообразности определенной произвольности при объединении структурных элементов в кластерные системы, а также понимание значения и роли самих кластерных структур и связанных областей в генезисе структуры и свойств и другое.

SUMMARY

The relationship of a structure and properties of complex systems is researched. The mathematical model for the evolution of complex systems with interacting elements is discussed, and was shown the oscillatory nature of the formation of sub-systems. The interaction of natural science and system-wide approaches is discussed.

Литература

1. Хакен Г. Синергетика. - М.: Мир, 1985. - 420 с.
2. Змитренко Н.В., Михайлов А.П. Инерция тепла. - М.: Знание, 1982.-62 с.
3. Лахно В.Д. Кластеры в физике, химии, биологии. - Ижевск: РХД, 2001. - 256с.
4. Bums D.T. Robert Boyle (1627-1691): A Foundation Stone of Analytical Chemistry in the British Isles, part I. Life and Thought. //Anal. Proceedings. - 1982. - V. 19. - P. 222-233; part II. Literary Style, Specific Contributions to the Principles and Practice of Analytical Chemical Science. - P. 288-295.
5. Губин С.П. Химия кластеров. Основы классификации и строение. -М.: Наука, 1987,- 263 с.

6. Мандельброт Б. Фрактальная геометрия природы. - М.: ИКИ, 2002. - 656 с.
7. Смирнов Б.М. Фрактальные кластеры. //УФН - 1986. - Т. 149, вып. 2. - С. 177-200.
8. Федер Е. Фракталы. - М.: Мир, 1991. - 254 с.
9. Гергега А.Н., Выровой В.Н. Иерархия процессов кластерообразования. // Строительные материалы. Наука. - 2006. - №8. - С. 2-3.
10. Смирнов Б.М. Свойства фрактального агрегата. //УФН - 1989. - Т.157, вып. 2.-С. 357-360.
11. Смирнов Б.М. Процессы в плазме и газах с участием кластеров. //УФН - 1997. - Т. 167, вып. 11. - С. 1169-1200.
12. Вознесенский В.А., Выровой В.Н., Керш В.Я. и др. Современные методы оптимизации композиционных материалов. - Киев: Будивельник, 1983. - 144 с.
15. Дорофеев В.С., Выровой В.Н. Технологическая поврежденность строительных материалов и конструкций. - Одесса, 1998. - 165 с.
14. Математический энциклопедический словарь. - М.: Советская энциклопедия, 1988.- 847 с.
15. 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.
16. Бергаланфи Ж. Общая теория систем: критический обзор. /Исследования по общей теории систем. - М.: Прогресс, 1969. - С. 23- 82.
17. Гергега А.Н., Выровой В.Н. Компьютерное моделирование внутренних границ раздела как элементов структуры материала. /Сборник «Моделирование-2008» ИПМЭ им. Г.Е. Пухова. - Киев, 2008. - С. 195-
- 18 Varzi A. C. Boundaries, Continuity and Contact. // Nous. - 1997.- V. 31.-P- 26-58.
- 19 Каган М.С. О системном подходе к системному подходу. /Избранные труды, т. 1. - СПб.: Петрополис, 2006. - 200 с.
20. Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников. - М.: Наука, 1979. - 416 с.
21. Соколов И.М. Размерности и другие критические показатели в теории протекания. // УФН - 1986. - Т. 150, вып. 2. - С. 221-255.
22. Берлин А.А., Вольфсон С.А., Ошмян В.Г., Ениколопов Н.С. Принципы создания композиционных полимерных материалов. - М.: Химия, 1990. - 240 с.
23. Trugman S.A., Weinrib A. Percolation with a threshold at zero: a new universality class. //Physical Review B. - 1985. - V.31, N.5. - P. 2974- 2980.
24. Олемской А.И., Скляр И.А. Эволюция дефектной структуры твердого тела в процессе пластической деформации. // УФН - 1992. - Т. 162, № 6. - С. 29-79. ;
25. Панин А.Е., Гриняев Ю.В., Данилов В.И. и др. Структурные уровни пластической деформации и разрушения. - Новосибирск: Наука, 1990. - 255 с.
26. Косевич А.М. Физическая механика реальных кристаллов. - Киев: Наукова думка, 1981. - 328 с.
27. Андронов А.А., Витт А.А., Хайкин С.Э. Теория колебаний. - М.: Наука, 1981.-568 с.
28. Гергега А.Н., Лозовский Т.Л. Моделирование самоорганизации динамических дисперсных систем. I. Спонтанная организация двухфазного потока. // Электронное моделирование. - 2008. - Т. 30, № 3. — С. 3-12.

29. 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.
30. Фейгенбаум М. Универсальность в поведении нелинейных систем. // УФН-1983,- Т. 141, вып. 2. - С. 343-374.
31. Берже П., Гюмо И., Видаль К. Порядок в хаосе. - М.: Мир, 1991. - 368 с.
32. Лихтенберг А., Либерман М. Регулярная и стохастическая динамика. - Череповец: Меркурий-пресс, 2000. - 528 с.