

ПРИМЕНЕНИЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ В ТЕХНОЛОГИИ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ И КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ИХ ОСНОВЕ

Л.Е.Трофимова¹, Н.Б.Урьев²

¹*Одесская государственная академия строительства и архитектуры*

²*Институт физической химии и электрохимии Российской АН*

Получение многих композиционных материалов на всех стадиях комплексного химико-технологического процесса неразрывно связано с возникновением характеризующихся сильно развитой межфазной поверхностью многокомпонентных структурированных дисперсных систем, эволюцией формирующихся в них дисперсных структур.

Известно, что в понимании хода многих нелинейных процессов, присущих технологии разнообразных композиционных материалов, большое внимание уделяется диссипативным структурам. Впервые существование неравновесных пространственных структур было предсказано английским ученым Тьюрингом в своей основополагающей работе «Химические основы морфогенеза», опубликованной в 1952 году. Он предложил использовать математические методы для исследования одного из наиболее сложных и интересных биологических процессов – морфогенеза, т.е. эволюции и развития форм. Фундаментальные результаты, полученные им в ходе математического моделирования морфогенеза, были одними из первых когда-либо изучавшихся примеров диссипативных структур. Предложенное Тьюрингом решение этой, так называемой проблемы морфогенеза, не только дало инструмент исследования различным областям знания, но и определило интенсивное развитие целого востребованного научного направления [1, 2].

Тьюринг сформулировал идею и на ее основе разработал модель, дающую возможность объяснить спонтанное возникновение морфологической и физиологической дифференцировки клеток в процессе развития организма. Он предположил, что регулярные повторяющиеся стационарные структуры в первоначально однородных биологических системах генерируются простейшими химическими реакциями и диффузией. По-видимому, благодаря коллективному действию химических и диффузионных процессов возникает гипотетическое химическое вещество «морфоген», которое и выдает «инструкции» клеткам, необходимые для клеточной дифференцировки.

Модель морфогенеза Тьюринга основана на предположении, что для описания наблюдаемого явления необходимо рассматривать по крайней мере два типа таких химических веществ – морфогенов (в дальнейших исследованиях механизма возникновения структуры, проводившихся Гирером и Мейнхардтом, они были гипотетически конкретизированы как «активатор» и «ингибитор»). Распределение этих гипотетических химических реагентов в пространстве и предопределяет характер последующего развития клеток. Такое допущение о ведущей роли именно положения клетки в клеточной ткани, а не наличие в ней какой-либо информации (например, через ДНК) о своей эволюции, получило достаточно убедительное экспериментальное доказательство. При этом необходимо отметить, что сам факт существования морфогенов до настоящего времени не установлен; имеются только некоторые косвенные подтверждения.

В соответствии с подходом Тьюринга этот процесс описывается следующей моделью. Предполагается, что вещество X («активатор») стимулирует развитие клеток, а Y («ингибитор») замедляет его. Учет только химических реакций, в которые вступает эта пара морфогенов, сводил бы все математическое описание к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Но поскольку основной интерес представляют пространственные концентрационные распределения данных реагентов, на которые существенно влияют диффузионные процессы, Тьюрингом была предложена первая модель типа «реакция – диффузия». В этой одной из основных базовых моделей структурообразования и морфогенеза используется система двух уравнений диффузии, дополненных членами, отображающими химический механизм рассматриваемого явления. Возникновение диссипативных структур обусловлено различием коэффициентов диффузии реагентов, а именно, коэффициент диффузии «активатора» должен быть меньше коэффициента диффузии «ингибитора».

Термин «диссипативная структура» был предложен Пригожиным (брюссельская школа), который использовал модификацию базовой модели Тьюринга, известную сейчас как «брюсселятор». Теория диссипативных структур (ДС) вошла как существенная часть в новое научное направление синергетику, развиваемое штурдгартской школой Хакена (термин предложен им же).

Моделированию морфогенеза посвящены также математические статьи основоположника теории катастроф Тома. Этот подход предполагает, что в процессе развития организма происходит ряд качественных скачков. Топологическое моделирование (в отличие от подхода Тьюринга) не позволяет получить информацию о пространственной структуре развивающейся системы, однако в ряде случаев дает возможность выяснить, каким образом внезапно меняются ее качественные черты при плавном изменении внешних

условий или внутренних свойств. Следовательно, совместное использование данных подходов значительно расширяет круг задач технологии композиционных материалов, связанных с многообразием еще недостаточно изученных явлений.

Как указывалось ранее, дисперсные системы в динамических условиях могут трактоваться как самоорганизующиеся, эволюция которых в пространстве и времени сопровождается образованием диссипативных структур. Для большинства таких систем характерны скачкообразные явления, обусловленные нарушением непрерывности развивающихся процессов различных типов. Так, например, в динамических неравновесных условиях с ростом интенсивности внешних воздействий наблюдаются качественные изменения в поведении дисперсных систем: первоначальная структура разрушается и формируется новая слоистая [3, 4]. При этом все разнообразие реальных скачкообразных изменений состояний данных систем (т.е. их качественных перестроек), вызываемых плавно изменяющимися внешними воздействиями, описывается при помощи небольшого числа канонических моделей катастроф [5, 6]. И хотя до сих пор не существует ни строгого критерия эволюции, ни единого мнения по вопросу его выбора, концепция ДС может, видимо, многое дать для понимания проблем самоорганизации и структурообразования.

В теории катастроф эволюционирующая система рассматривается как динамическая, функционирование которой описывается соответствующей системой уравнений вида

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x_j, c_\alpha), i = 1, \dots, n, \quad (1)$$

где: x_j – переменные состояния; c_α – управляющие параметры; f_i – гладкая (т.е. бесконечно дифференцируемая функция)

В общем случае функция f_i не известна и ее не нужно точно определять. В целях упрощения предполагается лишь, что она является потенциалом V описывающим динамику системы; соответственно уравнение (1) приводится к виду

$$\frac{dx_i}{dt} = - \left[\partial V(x_j, c_\alpha) / \partial x_i \right].$$

Развитие системы с одной переменной состояния всегда может быть описана при помощи некоторого потенциала. Такие модельные представления (т.е. канонические потенциальные функции типа "складка" и "сборка" со стандартизированной геометрией) рекомендуется использовать при описании диссипативных структур. Эти модели обладают структурной устойчивостью («грубостью»), то есть способностью сохраняться как качественные особенности при незначительных, а зачастую и при значительных изменениях любых

параметров, и поэтому отражают некий экстремальный режим поведения исследуемых систем. С данных позиций и рассматривается [5] ряд вопросов, связанных с различными аспектами технологии дисперсных строительных композитов. При этом учитывается [4], что такие существенно различные с точки зрения технологии процессы как перемешивание, уплотнение (формование), транспортирование и др. неизбежно сопровождаются возникновением и разрушением дисперсных структур; а объяснение механизма образования и разрушения плотных структурированных слоев как специфики коагуляции в динамических условиях может быть дополнено анализом процессов на основе представлений о ДС в неравновесных системах.

В соответствии с вышеизложенным, структурированные дисперсии, находящиеся вдали от термодинамического равновесия в поле внешних воздействий, являются типичными синергетическими диссипативными системами. В ходе их эволюции в динамических условиях происходит существенная перестройка микроструктуры при некотором критическом значении скорости сдвига (параметра, отвечающего точке бифуркации). Реализуется распад первоначальной структуры на слои (т.е. ограниченные поверхностями скольжения локальные объемы). Внутри этих объемов контакты между частицами дисперсных фаз не нарушаются и сохраняется та степень неоднородности, которая соответствовала моменту возникновения первоначальной (статической) структуры в системе. Наблюдается [4] разрыв поперечных относительно направления потока связей между структурными элементами исходной пространственной сетки ячеистого типа и вытеснение жидкой фазы из зазора между частицами при распаде границ ячеек. Налицо явная тенденция к трансформации ячеистой структуры в слоистую, которая при уменьшении концентрации твердой фазы в достаточных для самоорганизации пределах становится наиболее четко выраженной. Ячейки вытягиваются в направлении сдвига и образуются диссипативные слоистые структуры, развитию которых предшествует [4] уплотнение в локальных объемах микроагрегатов частиц с постепенным формированием плоскостей сдвига в зонах наибольшего скопления дефектов упаковки.

Таким образом, при деформации в дисперсной системе могут происходить необратимые процессы перестройки структуры, вызванные кооперативным взаимодействием дефектов. Деформируемая дисперсия с дефектами (начальными локальными несовершенствами) обнаруживает поведение, которое может изображаться ассиметричной бифуркационной диаграммой. В терминах теории катастроф такой эволюционной картине соответствует упоминавшаяся выше катастрофа «сборка». В

соответствии с этой теорией, какой бы характер не имели несовершенства системы, если она в отсутствие таковых описывается в каноническом виде посредством функции

$$V_c(x) = \frac{1}{4}x^4 + \frac{1}{2}c_2x^2, \quad (2)$$

то при их наличии – функцией

$$V_c(x) = \frac{1}{4}x^4 + \frac{1}{2}c_2x^2 + c_1x. \quad (3)$$

«Совершенной» системе (2) соответствует часто встречающийся в теории бифуркаций график типа «грезубец». Геометрия этой диаграммы регламентирует отсутствие катастрофических скачков, а в системе (3) они должны быть обязательно при переходе с одной устойчивой ветви на другую при увеличении управляющего параметра c_2 . При этом параметр c_1 интерпретируется как начальное несовершенство. Кроме того, в качестве несовершенств допустимо рассматривать статические и динамические воздействия на систему. Такой подход целесообразен при исследовании систем в условиях комплексного нагружения, в частности, процесса виброформования жесткой цементно-песчаной смеси. Для получения экспериментальных результатов эффективен прибор для синхронного определения кинетики уплотнения и вибровязкости системы в зависимости от величины статического пригруза и параметров вибрационного воздействия [3].

Представляется также информативным описывать механизм расслоения дисперсных систем как процесс формирования контрастных диссипативных структур. Поскольку для существования такой структуры наличие набора параметров типа «активатор – ингибитор» в прямом смысле необязательно, то в качестве демпфирующей переменной целесообразно рассматривать начальную неоднородность.

Таким образом, момент возникновения слоистого вида структуры является предвестником перехода к накоплению необратимых повреждений под действием внешних силовых полей. В результате структура материала получается неоднородной, с характерными дефектами в виде «незалеченных разрывов сплошности». Наложение на деформируемую систему вибрации с оптимальными параметрами коренным образом изменяет [3, 5] характер ее разрушения в сдвиговом потоке. Имеет место разрушение уплотненных слоев с лавинным образованием микроагрегатов частиц при одновременном формировании структуры в виде ячеек с ослабленными коагуляционными контактами; при этом зоны скольжения исчезают. С точки зрения синергетики такой эффект может быть объяснен [7] ростом степени неравновесности системы в условиях дополнительного

воздействия вибрацией, вследствие чего структура, как правило, измельчается. Данная трактовка находится в качественном соответствии с результатами экспериментальных исследований [3, 4]: сочетание непрерывного сдвига с ортогонально направленной к нему осцилляцией вызывает распад структуры на агрегаты, размер которых уменьшается, а число увеличивается с ростом интенсивности вибрации. При этом также происходит трансформация микронеоднородностей в направлении уменьшения их размеров и более равномерного распределения по объему, что способствует изотропному разрушению структуры. Как показано в [5], особенности структурных изменений в дисперсных системах по мере роста интенсивности вибрации наглядно иллюстрируются моделью «сборка», обобщающей экспериментальные зависимости в виде реологических кривых [3, 4].

Катастрофа такого типа описывает исследуемый процесс с помощью одной переменной состояния, двух управляющих параметров и изображается качественной моделью (поверхностью) в трехмерном пространстве этих обобщенных координат. В данном случае переменная состояния это интенсивность вибрации, а управляющие параметры амплитуда колебаний и круговая частота. Качественное разнообразие поведения системы, проявляющееся в перестройке хода кривых течения от экстремальных S -образных зависимостей до однозначных, обуславливается различными комбинациями этих управляющих параметров.

Заключение

Таким образом, нарушения непрерывности развивающихся процессов различных видов можно представить в виде стандартных катастроф, находящихся в соответствии с моделями диссипативных структур. Этот факт свидетельствует об устойчивости топологических моделей типа «складка» и «сборка», (т.е. о пригодности для описания реальных систем) [5]. Выявление в экспериментальных графических зависимостях данных четко различимых геометрических структур позволяет сделать заключение об общем характере рассматриваемых явлений. Кроме того, понимание качественной стороны обнаруженных нетривиальных эффектов дает важную отправную точку для дальнейших исследований дисперсий в критических производственных ситуациях, возникающих при получении композитов на их основе.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 12-03-00473).

Summary

Use of new ideas for description of evolution of disperse systems under conditions of various technological operations enables to rise modeling of physicochemical processes on a new level at fabrication of modern composite materials.

Литература

1. Структуры и хаос в нелинейных средах / [Ахромеева Т.С., Курдюмов С.П., Малинецкий Г.Г., Самарский А.А.]. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. – 488 с.

2. Николис Г. Самоорганизация в неравновесных системах / Г. Николис, И. Пригожин; пер. с англ. В.Ф. Пастушенко. – М.: Мир, 1979. – 512 с.

3. Урьев Н.Б. Высококонцентрированные дисперсные системы / Н.Б. Урьев. – М.: Химия, 1980. – 320 с.

4. Урьев Н.Б. Физико-химические основы технологии дисперсных систем и материалов / Н.Б. Урьев. – М.: Химия, 1988. – 256 с.

5. Трофимова Л.Е. Моделирование процессов структурообразования дисперсных систем и материалов / Л.Е. Трофимова, Н.Б. Урьев. – Одесса: Астропринт, 2011. – 36 с.

6. Арнольд В.И. Теория катастроф / В.И. Арнольд. – [3-е изд.] – М.:Наука, 1990. – 128 с.

7. Скворцов Г.Е. О закономерностях неравновесных процессов / Г.Е. Скворцов // Письма в ЖТФ. – 1990. – Т. 16, № 17. – С 15 – 18.