Rabios

ПАВЛОВ Игорь Сергеевич

МЕТОД СТРУКТУРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В МЕХАНИКЕ ОБОБЩЕННЫХ КОНТИНУУМОВ

01.02.04 – механика деформируемого твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте проблем машиностроения Российской академии наук (г. Нижний Новгород).

Научные консультанты: доктор физико-математических наук, профессор

Потапов Александр Иванович,

доктор физико-математических наук, профессор

Ерофеев Владимир Иванович

Официальные оппоненты: Индейцев Дмитрий Анатольевич,

член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, директор Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем машиноведения РАН (г. С.-Петербург);

Лурье Сергей Альбертович,

доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института прикладной механики РАН (г. Москва);

Шоркин Владимир Сергеевич,

доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой "Физика" Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Государственный университет — учебно-научно-производственный комплекс" (г. Орел).

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное

учреждение науки Институт механики сплошных сред УрО РАН, г. Пермь

Защита состоится «18» декабря 2013 г. в $\underline{15^{00}}$ часов на заседании диссертационного совета Д 212.125.05 при ФГБОУ ВПО "Московский авиационный институт" (национальный исследовательский университет):

125993, г. Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в научно-технической библиотеке ФГБОУ ВПО "Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)".

Автореферат разослан «17» сентября 2013 г.

Ученый секретарь диссертационного совета, к.ф.-м.н., доцент

8-

Г.В. Федотенков

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы диссертации. В настоящее время интенсивно развиваются технологии по созданию перспективных конструкционных материалов с микро- и наноструктурой. Для прогноза физико-механических свойств таких материалов и адекватного описания динамических (волновых) процессов в них необходимы математические модели, учитывающие наличие у среды нескольких масштабов (структурных уровней), их самосогласованное взаимодействие и возможность передачи энергии с одного уровня на другой. Обычно выделяют следующие масштабы: атомарный или микроскопический уровень (характерные размеры – ангстремы и нанометры), мезоскопический уровень (от 10^{-8} до 10^{-6} метров), субмакроскопический уровень (от 10^{-6} до 10^{-4} метров) и макроскопический уровень (свыше 10^{-4} подчеркнуть, что реальные значения «микроструктуры» среды в конкретной задаче могут лежать как в области микрон, так и нанометров или ангстрем. Однако с точки зрения методологии теоретического исследования важны не столько их абсолютные значения, сколько малость одних масштабов по отношению к другим.

При математическом моделировании сред c микроструктурой различают два подхода: "от микро к мезо" и от "макро к мезо". Первый заключается в переходе от моделей атомарного уровня к моделям мезомасштаба и опирается на законы квантовой теории. В этом случае среда система частиц, рассматривается как дискретная связанных принципов" взаимодействия, найденными ИЗ "первых (квантовых постулатов). До середины XX-го века господствовало мнение о том, что квантовая механика, по сути, является механикой микромира. Первым фундаментальным шагом квантовой механики в область макроскопических явлений было создание Л.Д. Ландау в 1941 году гидродинамической теории сверхтекучести гелия-ІІ и идея Л. Онсагера (1948 г.) о квантовании в нем вихревых движений. Следующий шаг в этом направлении был сделан И.М. Лифщицем, разработавшими 1969 Андреевым И феноменологическую теорию дефектов в квантовых кристаллах. В ней дефекты рассматривались как делокализованные возбуждения (дефектоны), практически свободно движущиеся сквозь кристалл. В настоящее время подобные исследования составляют предмет квантовой макрофизики.

Второй подход к моделированию сред с микроструктурой предполагает переход от описания среды на макроуровне к моделям мезомасштаба. В его рамках построение математических моделей таких сред идет в трех направлениях. Первое из них — континуально-феноменологическое - связано с построением обобщенных континуальных моделей (обобщенных континуумов) механики деформируемого твердого тела и опирается на законы классической физики. Оно базируется на расширении понятия представительного объема среды, учета ротационных степеней свободы микрочастиц (полярности материала), аффинных деформаций мезообъема и нелокальности материала. Континуальные теории строятся как дедуктивные,

то есть таким образом, чтобы все ее результаты выступали как следствия фундаментальных системы предположений постулатов). Преимуществом такого построения являются логическая непротиворечивость, строгость вывода различных частных возможность последовательной классификации теорий по выбранным признакам. В развитие этого направления решающий вклад внесли работы Э. и Ф. Коссера, К. Трусдела, Р.А. Тупина, Э.Л. Аэро и Кувшинского, Р.Д. Миндлина, К. Эрингена, В. В.А. Пальмова, В.И. Ерофеева, А.И. Потапова, С.А. Лурье, В.П. Матвеенко, И.Н. Шардакова и др. В настоящее время для моделирования структурнонеоднородных материалов широкое распространение получили обобщенные микрополярные теории типа континуума Коссера. Однако в эти теории входит большое число материальных констант, требующих экспериментального определения и связь которых со структурой материала не ясна.

Такого недостатка лишено второе направление – структурное является предметом исследований данной *моделирование*, которое и диссертационной работы. Построение структурной модели начинается с представленного выделения массиве материала, регулярной квазирегулярной решеткой из частиц конечных размеров, некоторого минимального объема – структурной ячейки (аналог ячейки периодичности в кристаллическом материале), - способной отображать основные черты макроскопического поведения этого материала. Как правило, структурная ячейка представляет собой частицу, поведение которой характеризуется взаимодействием c окружением описывается кинематическими И переменными. Роль таких тел-частиц могут играть домены, зерна, фуллерены, нанотрубки, кластеры из наночастиц и т.п. Иногда частицы представляются как материальные точки – т.е. центры сил, наделенные свойствами массы, заряда и т.п. Предполагается, что силы взаимодействия быстро убывают с расстоянием и ими можно пренебречь, если расстояние между точками превышает «радиус молекулярного действия». Это направление ведет свое начало с работ М. Борна по теории кристаллических решеток и до последнего времени развивалось, в основном, в рамках физики твердого тела. Особое внимание в методе структурного моделирования уделяется изучению распространения и взаимодействия элементарных возбуждений – квазичастиц (фононов, магнонов, экситонов и др.) и различного рода дефектам, присущим реальным телам. В рамках этого направления органично «уживаются» как квантовые, так и классические подходы к анализу динамических процессов. В отличие от континуума, в структурные модели явным образом входят геометрические параметры структуры – размеры и форма частиц, от которых в конечном итоге зависят и эффективные модули упругости различного порядка. Меняя эти параметры, мы можем управлять физико-механическими свойствами принципиально среды, нельзя сделать ЧТО рамках континуального описания. Прозрачность связи структуры макропараметрами открывает целенаправленного среды возможность проектирования заданными свойствами. Недостатками материалов

структурного моделирования являются отсутствие универсальности процесса моделирования и сложность учета нелинейных и нелокальных эффектов взаимодействия. Здесь следует отметить работы И.А. Кунина, Е. Кренера, Аскара, Ж. Пуже и Ж. Можена, Э.Л. Аэро и А.Н. Булыгина, Д.А. Индейцева, А.М. Н.Ф. Кривцова, Л.И. Маневича, Морозова, B.H. Потапова, B.C. Николаевского, А.И. Шоркина, Метрикина и Р. де Борста, А.А. Васильева, С.В. Дмитриева, A.B. А.Е. Мирошниченко и др.

Третье направление связано с методом *статистического усреднения* и главным образом, ДЛЯ построения моделей произвольной упаковкой частиц. В рамках этого направления сначала составляются уравнения микродвижений – уравнения движения микрочастиц с учетом их взаимодействия с окружением, а затем с помощью осреднения вводят «макропеременные», описывающие различные типы коллективных форм движения среды, и получают осредненные динамические уравнения, которые имеют много общего с обобщенными континуальными моделями. Это направление включает в себя элементы первых двух, а его достоинством является возможность моделирования динамики неупорядоченных систем. К недостаткам же относится значительная сложность вывода осредненных уравнений движения и вычисления входящих в них констант. Сюда заметный вклад внесли работы В.А. Ломакина, А.А. Ильюшина, В.Н. Николаевского, Т.Д. Шермергора и др.

Цель диссертационной работы. Основной целью диссертационной работы является развитие теоретических основ метода структурного моделирования и построение с его помощью иерархии математических моделей сред с микроструктурой для различных периодических структур, частот и длин волн. Разрабатываемые модели должны давать возможность устанавливать взаимосвязь между макропараметрами среды и параметрами ее внутренней структуры.

Научная новизна диссертационной работы определяется полученными оригинальными результатами:

- 1. Развиты теоретические основы метода структурного моделирования, который учитывает параметры кристаллической решетки, размеры частиц среды, их форму и константы силовых взаимодействий между ними, и поэтому является наиболее подходящим методом для изучения влияния размерных эффектов на физико-механические свойства материала.
- 2. В дискретном и континуальном приближениях построены математические модели кристаллических (зернистых) сред с плотной и неплотной упаковками частиц. Установлена взаимосвязь в аналитическом виде между макропараметрами этих сред и параметрами их микроструктуры. Изучено влияние размеров и формы частиц на скорости распространения в среде упругих и ротационных волн. Продемонстрирована возможность вычисления параметров микроструктуры среды и эффективных модулей

макроупругости по измерениям скоростей упругих волн, распространяющихся в различных направлениях.

- 3. Проведены оценки, показывающие, что скорость волны микровращений в кристаллических структурах, как правило, меньше скоростей трансляционных волн, а ее критическая частота лежит в гиперзвуковом диапазоне. Показано, что в приближении моментной теории упругости (при частотах ниже критической), когда можно пренебречь ротационными степенями свободы, "память" о зернистой структуре среды остается в виде зависимостей между макроскопическими характеристиками среды и параметрами микромодели.
- 4. Получены нелинейные уравнения динамики для квадратных решеток из круглых частиц с тремя степенями свободы, стержней (пять степеней свободы) и сферических частиц (шесть степеней свободы). Найдены зависимости коэффициентов нелинейностей этих моделей от параметров микроструктуры. Продемонстрирована возможность теоретической оценки этих коэффициентов по известным экспериментальным данным.
- 5. С помощью аналитических исследований и численного моделирования продемонстрирована возможность формирования в обобщенных континуумах пространственно-локализованных волн деформации: одномерных солитоноподобных волн и плоских двумерных солитонов. Исследована устойчивость таких волн как по отношению к малым возмущениям, так и по отношению к взаимодействию с себе подобными Установлены зависимости волновых параметров (амплитуда, скорость, ширина, полярность солитонов) от параметров микроструктуры взаимодействия Показано, сценарий одномерных материала. что сверхзвуковых солитоноподобных волн зависит от относительной скорости столкновения. При малой скорости столкновения происходит обменное взаимодействие. При попутном столкновении со сверхзвуковой скоростью могут образоваться один или два пакета квазигармонических волн, распространяющихся стороны. Если противоположные скорость В столкновения превосходит в несколько раз скорость звука, то и при встречном, и при попутном взаимодействиях наблюдается расщепление образованием вторичных солитонов солитона ряд c квазигармонических волн.

Положения, выносимые на защиту.

- 1. Подход к построению математических моделей сред с микроструктурой, учитывающий параметры кристаллической решетки, размеры частиц среды, их форму и константы силовых взаимодействий между ними.
- 2. Иерархия математических моделей обобщенных континуумов для различных периодических структур, частот и длин волн.
- 3. Установленная взаимосвязь между макропараметрами рассмотренных в работе обобщенных континуумов и параметрами их внутренней структуры.
- 4. Проведенные оценки скорости и критической частоты ротационных волн в зернистых средах с гексагональной и кубической симметрией.

- 5. Проведенные оценки коэффициентов нелинейностей в зернистой среде с неплотной упаковкой частиц.
- 6. Результаты аналитических и численных исследований распространения и взаимодействия сильно нелинейных локализованных волн в зернистой среде из круглых частиц.

Практическая значимость результатов работы. Построенные в работе математические модели сред с микроструктурой позволяют не только получить представление о качественном влиянии локальной структуры на эффективные модули упругости соответствующей среды, но и проводить количественные оценки этих величин. Найдены аналитические выражения, позволяющие ПО измерению скоростей акустических вдоль разных кристаллографических направлений, распространяющихся модули зернистого материала. Для определить упругие материалов получена оценка скорости ротационной волны и коэффициентов нелинейностей. Проведенные исследования могут найти применение при проектировании перспективных конструкционных материалов с заранее заданными физико-механическими свойствами.

Также благодаря использованному в работе методу структурного моделирования показано, что в двумерной кристаллической среде возможно распространение плоского солитона деформации, полярность и устойчивость которого относительно поперечных возмущений зависит от параметров микроструктуры среды.

Работы, результаты которых вошли в диссертацию, проводились по темам из основных заданий НИР: "Волны деформации в структурнонеоднородных материалах и элементах конструкций" (2001-2005 гг., № госрегистрации 0104.0 002456, науч. рук. Ерофеев В.И., Потапов А.И.), "Разработка новых принципов акустической диагностики структурнонеоднородных, композитных, микро- и нанокристаллических материалов и элементов конструкций" (2006-2008 гг., № госрегистрации 01.2007 02281, науч. рук. Ерофеев В.И., Мишакин В.В.), "Разработка методов повышения ресурса и надежности сложных технических систем путем применения наноструктурных материалов И градиентных защитных покрытий, диагностики на ранних стадиях повреждения и мониторинга состояния материалов и конструкций в процессе эксплуатации" (2009-2012 гг., № госрегистрации 01200957043, науч. рук. – акад. Митенков Ф.М.). Кроме того, исследования по теме диссертации были поддержаны международным грантом INTAS "Nonlinear wave dynamics of structurally-sensitive media: synergetic approach to analysis of advanced materials" (№ проекта 96-2370), грантами РФФИ (№№ проектов 95-02-05360, 00-02-16582-а, 01-01-00386-а, 01-02-06237-мас, 04-02-17156-а, 07-02-00172-а, 09-02-97053-р поволжье а, 09-08-00827-а, 09-08-97032-р поволжье а, 10-08-01108-а, 12-08-90032-Бел а, 13-08-97103-р поволжье а), грантом Президента РФ для поддержки ведущих научных школ Российской Федерации (проект № НШ-1638.2003.8, научный руководитель - Потапов А.И.), грантом Федерального агентства по науке и инновациям для молодых кандидатов наук (шифр РИ-19.0/002/129, тема "Исследование зависимости физико-механических свойств перспективных материалов от их структуры в микро- и нанометровом масштабах", государственный контракт № 02.442.11.7123, научный руководитель — Павлов И.С.).

Методы исследований и достоверность результатов. Для построения и анализа математических моделей сред с микроструктурой использовались вариационные принципы механики сплошных сред, математический аппарат теории упругости и динамики кристаллической решетки. Для исследования процессов распространения и взаимодействия нелинейных локализованных волн применялись асимптотические методы математической физики и теории волн, в частности, метод многих масштабов.

Достоверность полученных в работе результатов обеспечивается корректным применением теоретических методов исследования, согласованием полученных результатов с известными экспериментальными данными и их сопоставлением с аналогичными результатами, полученными другими авторами.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на международном конгрессе по прикладной математике ICIAM'99 **(**Γ. Эдинбург, Великобритания, 1999 европейской конференции EUROMECH по механике твердого тела (г. Мец, Франция, 2000 г.), 16-м международном симпозиуме по нелинейной акустике ISNA (г. Москва, Россия, 2002 г.), международном семинаре по геометрии и механике гранулированных материалов (г. Дрезден, Германия, 2002 г.), всемирном конгрессе по ультразвуку WCU'03 (г. Париж, Франция, 2003 г.), VI международном конгрессе по математическому моделированию (г. Нижний Новгород, Россия, 2004 г.), международных летних школахконференциях "Advanced problems in mechanics" (г. С-Петербург, Репино, Россия, 2003, 2008, 2010, 2012, 2013 гг.), коллоквиуме EUROMECH 468 "Многомасштабное моделирование в механике твердого тела" (г. Петербург, Репино, Россия, 2005 г.), ІХ и Х Всероссийских съездах по теоретической и прикладной механике (г. Нижний Новгород, 2006, 2011 гг.), 10-ой Зимней школе по механике сплошных сред (г. Пермь, 1995 г.), Всероссийских конференциях "Нелинейные колебания механических систем" (г. Нижний Новгород, 1999, 2002, 2005, 2008, 2012 гг.), XIV Симпозиуме виброударных (сильно нелинейных) систем" (г. Москва-Звенигород, 2003 г.), 2-ой научно-технической конференции "Проблемы машиноведения" (г. Нижний Новгород, 2001 г.), Всероссийских научнотехнических конференциях по волновой динамике машин и конструкций (г. Нижний Новгород, 2004, 2007 гг.), Всероссийской научно-технической "Фундаментальные проблемы машиноведения: конференции технологии и материалы" (г. Нижний Новгород, 2006 г.), Всероссийской конференции "Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях" (г. Москва, 2008 г.), Всероссийской конференции

"Проблемы механики и акустики сред с микро- и наноструктурой: НАНОМЕХ-2009" (г. Нижний Новгород, 2009 г.), XVIII Международном "Динамические и технологические проблемы симпозиуме конструкций и сплошных сред" им. А.Г. Горшкова (г. Москва-Ярополец, 2012г.), конференции "Проблемы машиноведения", посвященной 70-летию ИМАШ РАН (г. Москва, 2008 г.), Всероссийском совещании-семинаре "Инженерно-физические проблемы новой техники" (г. Москва, 2012 г.), сессиях Российского акустического общества (г. Нижний Новгород, 1998, 2000, 2004, 2011 гг.), школах-конференциях "Нелинейные волны" (г. Нижний Новгород, Бор, 1995, 2004, 2006 гг.), научных конференциях по радиофизике (г. Нижний Новгород, 2012, 2013 гг.), научном семинаре "Математическое моделирование динамики систем и процессов управления " (г. Нижний Новгород, 2013 г.).

Личный вклад автора. Представленные в работе научные результаты получены лично автором либо при его непосредственном участии. В работах с соавторами автор участвовал в постановке задач, в аналитических и численных расчетах по теме диссертационной работы и обсуждении результатов. Во всех случаях использования результатов других исследований в работе приведены ссылки на источники информации.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 63 работы, в том числе 26 научных статей в изданиях, рекомендуемых ВАК Минобрнауки РФ для опубликования результатов докторских диссертаций, а также по 1 главе в 2 коллективных монографиях. Некоторые результаты диссертационной работы вошли в цикл работ на тему "Исследование процессов распространения и взаимодействия упругих волн в твердых телах со сложной структурой", за который автор в 2001 году был награжден медалью Российской академии наук с премией для молодых ученых (конкурс 2000 г.).

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, списка литературы и приложения. Объем диссертации составляет 221 страницу, включая 51 рисунок, 7 таблиц и список литературы из 268 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **Введении** обосновывается актуальность темы диссертации, сформулированы цель и основные положения, выносимые на защиту, научная новизна, практическая значимость полученных результатов и их достоверность, а также приведена апробация работы.

В Главе 1 содержится обзор литературы по исследуемой тематике, анализируются методы описания сплошной среды на различных масштабных уровнях, формулируются принципы структурного моделирования, цели и задачи исследования. Обосновывается возможность применения законов классической механики для теоретического описания сред с микро- и наноструктурой. Оговариваются границы применимости моделей,

разрабатываемых в последующих главах диссертации. В частности, подчеркивается, что частицы среды считаются недеформируемыми и однородными, не обладающими собственной внутренней структурой, присутствующей в реальных материалах. Кроме того, в данной работе не рассматриваются диссипация волн и эффекты отражения волн от границы среды, т.к. все моделируемые среды здесь считаются безграничными.

В Главе 2 рассмотрена двумерная гексагональная решетка (среда с плотной упаковкой частиц), состоящая из однородных круглых частиц массы M и диаметра d. (В качестве синонимов слову "частицы" здесь и далее во всей работе используются термины "зерна" и "гранулы". Однако эти термины не собой такую смысловую нагрузку, материаловедении.) В исходном состоянии они расположены в узлах решетки, и расстояние между центрами масс соседних гранул равно a (Рис. 1а). При движении в плоскости каждая частица имеет три степени свободы: смещение центра масс частицы с номером N = N(i, j) по осям x и y(трансляционные степени свободы $u_{i,j}$ и $w_{i,j}$) и поворот относительно центра свободы $\varphi_{i,i}$) (Рис. (ротационная **1б**). Учитывается масс степень взаимодействие частицы с шестью ближайшими соседями по решетке, центры масс которых лежат в вершинах правильного шестиугольника, вписанного в окружность радиуса а (первая координационная сфера) (Рис. 1a,6).

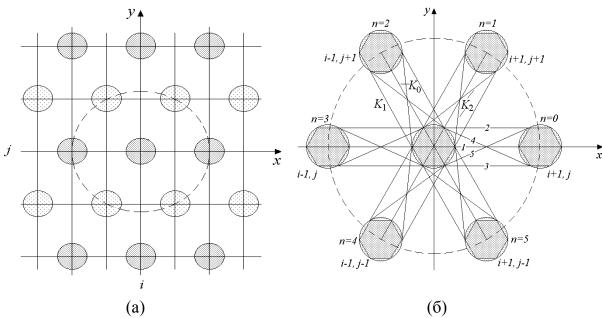


Рис. 1. Гексагональная решетка из круглых частиц (a) и схема силовых взаимодействий (б).

Взаимодействия между частицами моделируются упругими пружинами трех типов: центральными (соответствующая пружина на рис. 2.16 обозначена цифрой 1 и имеет жесткость K_0), нецентральными (2 и 3 с жесткостью K_1) и "диагональными" (4 и 5 с жесткостью K_2). Взаимодействия при растяжении-сжатии материала моделируются центральными и

нецентральными пружинами (Рис. 1б). Через пружины типа K_1 передаются также моменты при поворотах частиц. Пружины с жесткостью K_2 характеризуют силовые взаимодействия частиц при сдвиговых деформациях в материале. Точки соединения пружин K_1 и K_2 совпадают с вершинами правильного шестиугольника, вписанного в частицу.

Получены дифференциально-разностные уравнения, описывающие динамику гексагональной решетки из круглых частиц с квадратичным потенциалом взаимодействия между ними. Такие уравнения можно использовать для численного моделирования отклика системы на внешние динамические воздействия в широком спектре частот, вплоть до критических значений.

В длинноволновом приближении, когда характерная длина акустической волны много больше периода решетки, получена система линейных уравнений в частных производных, описывающих распространение продольных, поперечных и ротационных волн в такой среде:

$$u_{tt} = c_1^2 u_{xx} + c_2^2 u_{yy} + s^2 w_{xy} - \beta \varphi_y,$$

$$w_{tt} = c_2^2 w_{xx} + c_1^2 w_{yy} + s^2 u_{xy} + \beta \varphi_x,$$

$$\varphi_{tt} = c_3^2 (\varphi_{xx} + \varphi_{yy}) - \omega_0^2 \varphi + \frac{\beta}{R^2} (u_y - w_x).$$
(1)

Здесь c_1 , c_2 , c_3 — скорости распространения соответственно продольной, сдвиговой волн и волны микровращений (ротационной волны), s — коэффициент линейной связи между продольными и сдвиговыми деформациями в материале, β — параметр дисперсии, R — радиус инерции частицы, ω_0 — критическая частота ротационной волны, ниже которой она является нераспространяющейся.

Квадраты скоростей волн, входящие в уравнения (1), выражаются через плотность, силовые постоянные K_0 , K_1 , K_2 , K_3 , расстояние между частицами a и их диаметр d:

$$c_{1}^{2} = \frac{3\sqrt{3}}{4\rho} \left(K_{0} + 2K_{1} + (2 - \frac{d^{2}}{a^{2} - ad + d^{2}}) K_{2} \right),$$

$$c_{2}^{2} = \frac{\sqrt{3}}{4\rho} \left(K_{0} + 2K_{1} + (2 + \frac{3d^{2}}{a^{2} - ad + d^{2}}) K_{2} \right),$$

$$c_{3}^{2} = \frac{3\sqrt{3}}{4\rho} \left(2K_{1} + \frac{a^{2}}{a^{2} - ad + d^{2}} K_{2} \right),$$

$$\beta = \frac{3d^{2}\sqrt{3}}{2\rho(a^{2} - ad + d^{2})} K_{2}, \quad s^{2} = c_{1}^{2} - c_{2}^{2}.$$

$$(2)$$

Здесь $\rho = 2M/a^2\sqrt{3}$ — поверхностная плотность двумерной среды с гексагональной симметрией. Критическая частота ω_0 зависит от параметра β и от радиуса инерции частиц $R = d/\sqrt{8}$: $\omega_0 = \sqrt{2|\beta|/R^2} = 4\sqrt{|\beta|/d^2}$, а параметры c_2 , β и s связаны соотношением: $\beta = c_2^2 - s^2/2$, причем в силу последнего равенства (2) $\beta = \frac{1}{2} \left(3c_2^2 - c_1^2 \right)$.

Система (1) описывает динамику зернистой (кристаллической) среды с учетом локальных взаимодействий гранул и совпадает с уравнениями динамики двумерного континуума Коссера, состоящего из центрально-симметричных частиц. От уравнений классической теории упругости эта система отличается появлением дополнительного уравнения для волны микровращений (ротационной волны). Это уравнение, в отличие от первых двух, имеет однородное в пространстве решение, осциллирующее с частотой ω_0 . При континуальном подходе подобное уравнение возникает как следствие закона сохранения момента количества движения, когда вводятся в рассмотрение внутренние моменты частиц среды.

Проанализированы дисперсионные свойства рассматриваемой среды. При анализе каждому нормальному колебанию решетки, как принято в физике твердого тела, поставлен в соответствие определенный тип квазичастицы – фонона. В данном случае в системе имеются акустические продольный и поперечный фононы, а также оптический ротационный фонон. Проведенный анализ продемонстрировал, что коротковолновом (дискретном) приближении гексагональная решетка с круглыми частицами анизотропна по акустическим свойствам, причем поперечные волны становятся анизотропными при меньших частотах, чем продольные. Наибольшее значение частоты продольных фононов достигается на границе первой зоны Бриллюэна. В этой точке групповая скорость обращается в ноль и поэтому сигнал с такой частотой распространяться по кристаллической структуре не может. Подобное ограничение может быть снято только для нелинейных возмущений, когда учитываются ангармонические слагаемые в дифференциально-разностных уравнениях движения. Ротационная мода имеет две критических частоты: максимальную и минимальную. Значения микроструктуры ЭТИХ определяются параметрами Следовательно, изменяя параметры микроструктуры, можно управлять дисперсионными свойствами фононного кристалла.

Дисперсионные свойства рассматриваемой модели в континуальном приближении не зависят от направления распространения волны, т.е. рассматриваемая кристаллическая структура в длинноволновом приближении является изотропной. Ротационная волна обладает дисперсией волноводного (Клейн-Гордоновского) типа представляет И поэтому c_3 асимптотическое значение фазовой и групповой скоростей волны при больших значениях частоты. Анализ коэффициента распределения поперечных и ротационных колебаний в нормальных модах показал, что поперечная и ротационная волны сохраняют свою индивидуальность лишь вдали от точки синхронизма. В ее окрестности их нельзя разделить и необходимо рассматривать как связанное состояние.

В главе 3 рассматривается двумерная прямоугольная решетка, состоящая из однородных зерен (гранул) массы M, имеющих форму эллипса с осями длины d_1 и d_2 . Пространство между частицами представляет собой безмассовую упругую среду, через которую передаются силовые и моментные воздействия. В исходном состоянии расстояние между центрами масс соседних гранул вдоль оси x равно a, а вдоль оси y равняется b (Рис. 2). При движении в плоскости каждая частица имеет три степени свободы: смещение центра масс частицы с номером N=N(i, j) по осям x и y(трансляционные степени свободы $u_{i,j}$ и $w_{i,j}$) и поворот относительно центра масс (ротационная степень свободы $\varphi_{i,j}$). Считается, что частица Nвзаимодействует лишь с восемью ближайшими соседями по решетке (первые четыре из них принадлежат первой координационной сфере, а другие четыре, центры масс которых удалены от центра масс частицы N на расстояние $\sqrt{a^2 + b^2}$, расположены на второй координационной сфере). Центральные и нецентральные взаимодействия соседних гранул моделируются упругими пружинами четырех типов. Пружины первых трех типов (с жесткостями K_0 , K_1 и K_2) присутствовали и в модели среды с плотной упаковкой частиц (см. главу 2), а пружины четвертого типа – с жесткостью K_3 – моделируют взаимодействие с зёрнами второй координационной сферы (Рис. 3). Точки соединения пружин с частицами лежат в вершинах прямоугольника наибольшей площади, вписанного в эллипс. Каждый такой прямоугольник имеет размер $h_1 \times h_2$, где $h_1 = d_1 / \sqrt{2}$, $h_2 = d_2 / \sqrt{2}$.

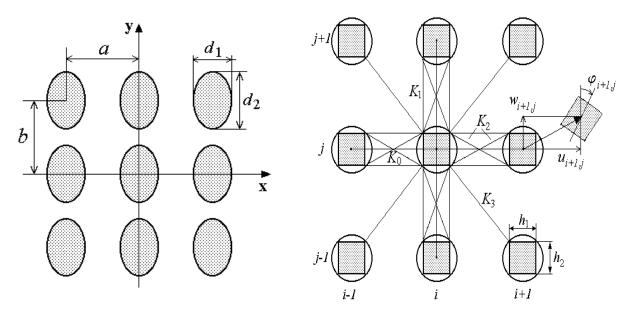


Рис. 2. Прямоугольная решетка из частиц эллипсовидной формы.

Рис. 3. Схема силовых взаимодействий между анизотропными частицами и их кинематика.

Выведены дифференциально-разностные уравнения, описывающие динамику прямоугольной решетки из эллипсовидных частиц с квадратичным потенциалом взаимодействия между ними.

В длинноволновом приближении получена система линейных уравнений в частных производных, описывающих распространение продольных, поперечных и ротационных волн в такой среде.

$$\begin{split} u_{tt} &= c_1^2 u_{xx} + \delta_2 c_2^2 u_{yy} + \frac{1 + \delta_4}{2} s^2 w_{xy} - \delta_5 \beta_1 \varphi_y, \\ w_{tt} &= c_2^2 w_{xx} + \delta_1 c_1^2 w_{yy} + \frac{1 + \delta_4}{2} s^2 u_{xy} + \beta_1 \varphi_x, \\ R^2 \varphi_{tt} &= R^2 c_3^2 (\varphi_{xx} + \delta_3 \varphi_{yy}) + \beta_1 (\delta_5 u_y - w_x) - 2\beta_2 \varphi. \end{split} \tag{3}$$

Здесь c_1 , c_2 , c_3 – скорости распространения соответственно продольной, сдвиговой волн и волны микровращений, *s* - коэффициент линейной связи между продольными и сдвиговыми деформациями в материале, β_1 и β_2 – параметры дисперсии, $R = \sqrt{d_1^2 + d_2^2} / 4$ – радиус инерции частицы, δ_i $(i=1\div 5)$ – поправочные коэффициенты, возникающие анизотропии рассматриваемой среды. В случае, когда $\delta_i \neq 1$ хотя бы при одном i, то уравнения (3) становятся неинвариантными относительно на поворота кристаллической решетки 90° потому являются математической моделью сильно анизотропной среды. Если же параметры анизотропии δ_i равны 1, то полученная система (2) с точностью до коэффициентов совпадает с ранее выведенными уравнениями (1) для гексагональной решетки из круглых частиц.

Найдены в аналитическом виде зависимости скоростей упругих волн и параметра дисперсии от размеров частиц и параметров взаимодействий между ними:

$$c_{1}^{2} = \frac{a^{2}}{M} \left(K_{0} + 2K_{1} + \frac{2(a - h_{1})^{2}}{(a - h_{1})^{2} + h_{2}^{2}} K_{2} + \frac{2(a - h_{1})^{2}}{(a - h_{1})^{2} + (b - h_{2})^{2}} K_{3} \right),$$

$$c_{2}^{2} = \frac{2a^{2}}{M} \left(\frac{h_{2}^{2}}{(a - h_{1})^{2} + h_{2}^{2}} K_{2} + \frac{(b - h_{2})^{2}}{(a - h_{1})^{2} + (b - h_{2})^{2}} K_{3} \right),$$

$$c_{3}^{2} = \frac{a^{2}}{2MR^{2}} \left(h_{2}^{2} K_{1} + \frac{a^{2} h_{2}^{2}}{(a - h_{1})^{2} + h_{2}^{2}} K_{2} + \frac{(ah_{2} - bh_{1})^{2}}{(a - h_{1})^{2} + (b - h_{2})^{2}} K_{3} \right),$$

$$s^{2} = \frac{4a^{2}}{M} \frac{(a - h_{1})(b - h_{2})}{(a - h_{1})^{2} + (b - h_{2})^{2}} K_{3},$$

$$(4)$$

$$\beta_1 = \frac{2a^2}{M} \left(\frac{h_2^2}{(a - h_1)^2 + h_2^2} K_2 + \frac{(b - h_2)(ah_2 - bh_1)}{a((a - h_1)^2 + (b - h_2)^2)} K_3 \right),$$

$$\beta_2 = \frac{1}{M} \left(\left(\frac{a^2 h_2^2}{(a - h_1)^2 + h_2^2} + \frac{b^2 h_1^2}{(b - h_2)^2 + h_1^2} \right) K_2 + \frac{(ah_2 - bh_1)^2}{(a - h_1)^2 + (b - h_2)^2} K_3 \right).$$

При условии подобия формы частиц форме решетки $d_2/d_1 = b/a$ из (4) следует соотношение $\,eta_1=c_2^2-fs^2/2\,,\,$ где $\,f=b/a=h_2/h_1\,$ - параметр формы частиц. Если частицы являются круглыми, то $\beta_1 = \beta_2 = \beta$ и, как и для решетки, $\beta = c_2^2 - s^2/2$. Проанализировано гексагональной параметра формы частиц f и их размера $p=d_1 / a = h_1 \sqrt{2} / a = h_2 \sqrt{2} / b = d_2 / b$ на скорости распространения волн различных типов. Показано, что скорость продольной волны всегда превышает скорость поперечной волны, которая, в свою очередь может быть как больше, так и меньше скорости ротационных волн. В цепочке из анизотропных частиц скорость продольной волны с ростом параметра формы монотонно уменьшается, а скорость поперечной – монотонно увеличивается, причем обе они стремятся к некоторым предельным значениям, зависящим от величины силовых констант K_1 и K_2 . Скорость ротационной волны имеет локальный максимум при некотором значении f, зависящем от размера частиц и параметров силовых взаимодействий. С ростом размера частиц точка этого максимума сдвигается влево. При малых значениях размера частиц изменения скоростей волн происходят более плавно, чем при больших значениях р. Размер зерна не оказывает существенного влияния на величины скоростей волн при малых величинах моментных взаимодействий ($K_2 << K_0$).

Проанализированы дисперсионные свойства рассматриваемой среды при различных значениях параметров формы решётки. Выявлено, что для квадратной решетки с круглыми частицами в области частот $0 \le \varpi < 2.42$ и $3.09 < \varpi \le 3.22$ ($\varpi = \omega \sqrt{M \, / \, K_0}$ - безразмерная частота) в системе имеется две волновые моды (продольная и поперечная — в области низких частот, продольная и ротационная — в области высоких частот), а при $2.42 \le \varpi \le 3.09$ в системе присутствуют все три волновые моды. В случае прямоугольной решетки из анизотропных частиц меняется лишь длина трех вышеуказанных интервалов.

Ротационная мода имеет две критических частоты: наибольшую $\varpi(\pi)$ и наименьшую $\varpi(0)$, причем для эллипсовидных частиц с параметром формы b/a=1,5 у ротационной моды появляется локальный минимум. При вырождении решётки в квадратную с круглыми частицами продольная мода остаётся изотропной до $\varpi<1,5$ а ротационная мода до $\varpi<2,8$. В произвольном случае даже в области низких частот все моды являются анизотропными.

Дисперсионные кривые длинноволнового (континуального) приближения, представлены в нормированном виде в системе координат $(k/k_0, \omega/\omega_0)$, где волновое число $k_0 = \omega_0/c_2$, на рисунке 4.

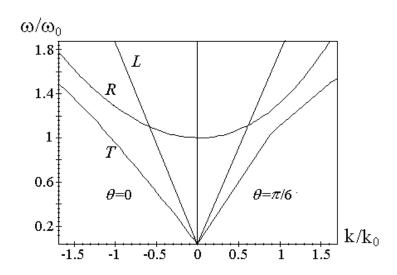


Рис. 4. Дисперсионные кривые для квадратной решетки.

Здесь введены обозначения: L — продольная, T — поперечная, R — ротационная моды. В левой полуплоскости изображены дисперсионные зависимости для волн, распространяющихся вдоль оси x (θ = 0), а в правой полуплоскости — для волн, бегущих под углом θ = π / 6 к оси x. Из рисунка 4 видно, что при распространении волн под углом θ = π / 6 более ярко выражена дисперсия поперечной моды. Таким образом, если в длинноволновом (континуальном) приближении гексагональная решетка изотропна по акустическим свойствам, то квадратная решетка из круглых частиц анизотропна.

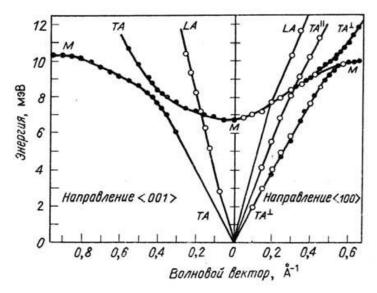


Рис. 5. Экспериментально измеренные зависимости дисперсионных кривых магнонов и фононов в ферромагнетике FeF_2 . TA - поперечный, LA - продольные акустические фононы, M - магноны.

Дисперсионные кривые, изображенные на рисунке 4, качественно совпадают с зависимостями энергии магнонов и фононов в ферромагнетике FeF_2 от величины волнового вектора при температуре 4,2К (рис. 5), которые были получены экспериментально методом неупругого рассеяния нейтронов (см. Heynpyzoe pacceяние Heynpyzoe Heynpyzo

Полученные в данном разделе результаты можно применить при конструировании искусственных периодических структур (в частности, фононных кристаллов) с заранее определенными дисперсионными свойствами, а именно по требуемым наибольшему и наименьшему значениям частоты ротационной моды, благодаря полученным в диссертационной работе соотношениям, можно найти значения параметров микроструктуры среды.

В главе 4 рассмотрено низкочастотное приближение полученных в главах 2 и 3 динамических уравнений зернистых сред. В этом случае можно пренебречь вращательными степенями свободы частиц и исходные уравнения динамики вырождаются в уравнения градиентной теории упругости:

$$u_{tt} - c_1^2 u_{xx} - (c_2^2 - \frac{\beta}{2}) u_{yy} - (s^2 + \frac{\beta}{2}) w_{xy} =$$

$$= \frac{R^2}{4} \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} (u_y - w_x) - c_3^2 \Delta (u_y - w_x) \right], \qquad (5)$$

$$w_{tt} - (c_2^2 - \frac{\beta}{2}) w_{xx} - c_1^2 w_{yy} - (s^2 + \frac{\beta}{2}) u_{xy} =$$

$$= -\frac{R^2}{4} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} (u_y - w_x) - c_3^2 \Delta (u_y - w_x) \right].$$

При этом "память" о структуре остается в виде зависимостей между эффективными макроскопическими характеристиками среды и параметрами микромодели.

Путем сопоставления уравнений (5), описывающих распространение и взаимодействие продольных и поперечных волн в зернистой среде в низкочастотном приближении, с уравнениями классической теории упругости, произведена параметрическая идентификация разработанных в главах 2 и 3 моделей. В частности, показано, что силовые константы модели выражаются через константы упругости 2-го порядка следующим образом:

$$\frac{K_2}{a} = \frac{2(1-p+p^2)\sqrt{2}}{9p^2} (C_{11} - 3C_{12}), \tag{6a}$$

$$\frac{K_1}{a} = \frac{2\sqrt{2}}{9(K+2)} \left[C_{11} + 3C_{12} + \frac{2(p-1)}{p^2} (C_{11} - 3C_{12}) \right] -$$

для гексагональной решетки, и

$$\frac{K_3}{a} = C_{12}, \qquad \frac{K_2}{a} = \left(C_{44} - C_{12}\right) \left(1 + \left(\frac{\sqrt{2}}{p} - 1\right)^2\right), \tag{6b}$$

$$\frac{K_1}{a} = \frac{1}{K + 2} \left[C_{11} - C_{12} - 2\left(C_{44} - C_{12}\right)\left(\frac{\sqrt{2}}{p} - 1\right)^2\right] - C_{12} + C_{12}$$

для квадратной решетки из круглых частиц. Здесь $K = K_0 / K_1$ — отношение между центральными и нецентральными силами взаимодействия, p = d/a — относительный размер частицы.

Выражение для оценки скорости и критической частоты волны микровращений в среде с гексагональной симметрией можно получить из (ба) и (2):

$$c_3 = \sqrt{\frac{1}{\rho_V(K+2)} \left(C_{11} + 3C_{12} + \frac{4p - 2 + K}{2p^2} (C_{11} - 3C_{12}) \right)},$$
 (7a)

$$\omega_0 d = 4\sqrt{|C_{11} - 3C_{12}|/\rho_V}$$
, (8a)

а в среде с кубической симметрией – из (6b) и (4):

$$c_{3} = \sqrt{\frac{2}{\rho_{V}(K+2)}} \left[C_{11} + C_{12} - 2C_{44} + \frac{K + 4p\sqrt{2} - 2}{p^{2}} (C_{44} - C_{12}) \right], \quad (7b)$$

$$\omega_{0}d = 4\sqrt{2|C_{44} - C_{12}|/\rho_{V}}. \quad (8b)$$

Здесь "объемная" плотность равна $\rho_V = \rho \sqrt{6}/2a$ для среды с гексагональной симметрией и $\rho_V = M/a^3$ для среды с кубической симметрией.

Количественные оценки скорости и критической частоты волны микровращений в кристаллах с гексагональной и кубической симметрией, найденные по формулам (7) и (8), приведены в таблице 1.

Выявлена зависимость констант континуума Коссера и коэффициента Пуассона от параметров микроструктуры. Приведены теоретические оценки этих констант для некоторых гипотетических материалов с параметрами, как у кристаллов с гексагональной и кубической симметрией (см. табл. 1). Показано, что при определенных значениях параметров микроструктуры коэффициент Пуассона может быть отрицательным, что соответствует ауксетичным материалам.

Таблица 1. Параметры структуры для кристаллов с гексагональной и кубической симметрией

	Параметры структуры		Кристаллы					
			гексагональные			Кубические		
			Be	Cd	Zn	LiF	NaF	C ₆₀
Эксперименталь- ные данные	Плотность (кг/м ³)	$ ho_{V}$	1816	8642	7140	2600	2800	1720
	Константы упругости (ГПа)	C_{11}	292.3	114.5	161.1	113.0	97.00	14.9
		C_{12}	26.7	39.5	34.2	48.00	25.60	6.9
		C_{44}	-	-	-	63.00	28.00	8.1
Вычисленные характеристики	Скорости волн (м/с)	c_1	12687	3640	4750	6593	5890	2943
		c_2	11470	2027	3603	5477	3295	2325
		c_3	9317	1404	2823	3164	2262	2036
	Критическая частота ротационных волн $\omega_0 d$ (м/с).	$\omega_0 d$	43239	2721	11450	13587	5237	4781
	Коэффици- енты упру- гости в тео- рии Коссера (ГПа)	λ	26.7	39.5	34.2	48.00	25.60	6.9
		μ	132.8	37.5	63.5	63.00	28.00	8.1
		γ/R^2	157.7	17.0	56.9	26.04	14.33	7.1
		K	212.2	-4.0	58.5	30.00	4.8	2.4
	Параметры силовых взаимодей- ствий между частицами (ГПа)	K_0/a	83.81	61.28	65.28	46.01	58.19	6.01
		K_1/a	8.381	6.128	6.528	4.601	5.819	0.601
		K_2/a	74.92	-1.412	20.65	19.89	3.183	1.592
		K_3/a	-	-	-	48.00	25.60	6.90

Проведенные в данной главе исследования позволяют не только получить представление о качественном влиянии локальной структуры на эффективные модули упругости, но и проводить количественные оценки их величин. Результаты этих исследований могут найти применение для развития методов волновой диагностики гранулированных сред, композитных

материалов, нанокристаллических сред и иных сред с микроструктурой, а также для целенаправленного проектирования материалов с заданными физико-механическими свойствами.

В главе 5 методом структурного моделирования получены три нелинейных математических модели для двумерных сред, состоящих из плоских круглых частиц с 3 степенями свободы, из нанотрубок (стержней) с 5 степенями свободы (рис. 6) и из шарообразных частиц с 6 степенями свободы (рис. 7). Выявлена взаимосвязь между макропараметрами таких среды и параметрами их микроструктуры.

В первой части главы уравнения низкочастотного приближения (5) обобщены на нелинейный случай и на их основе проведены теоретические оценки коэффициентов нелинейностей для ряда материалов с кубической симметрией.

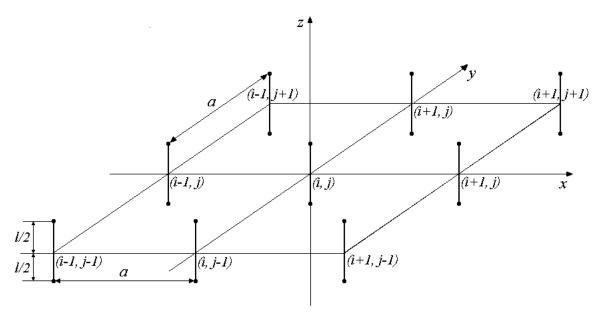


Рис. 6. Квадратная решетка из стержней (нанотрубок).

Во второй модели (см. уравнения (9)) показано, что в линейном приближении продольные (u) и поперечные (v) волны не зависят от остальных мод колебаний, а из всех трансляционных и ротационных мод зависимы лишь изгибная w и ротационная θ (угол θ отсчитывается от оси z в плоскости (x, z), а ϕ характеризует поворот в плоскости (x, y) от оси y).

$$u_{tt} = c_1^2 u_{xx} + c_2^2 u_{yy} + s^2 v_{xy} + \frac{1}{2} \frac{\partial F_1}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial F_2}{\partial y},$$

$$v_{tt} = c_2^2 v_{xx} + c_1^2 v_{yy} + s^2 u_{xy} + \frac{1}{2} \frac{\partial F_3}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial F_4}{\partial y},$$

$$w_{tt} = c_3^2 (w_{xx} + w_{yy}) + \beta \theta_y + \frac{1}{2} \frac{\partial F_5}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial F_6}{\partial y},$$
(9)

$$\frac{l^{2}}{12}(\theta_{tt} - \frac{1}{2}\varphi_{t}^{2}\sin 2\theta) = \frac{l^{2}}{2}(c_{\theta x}^{2}\theta_{xx} + c_{\theta y}^{2}\theta_{yy}) - \beta(\theta + w_{y}) - F_{7},$$

$$\frac{l^{2}}{6}(\varphi_{tt}\sin^{2}\theta + \varphi_{t}\theta_{t}\sin 2\theta) = -\alpha_{6}w_{x}\theta.$$

Уравнение для ф имеет неволновой вид. При замораживании одной из ротационных мод - θ =0 - автоматически исчезает и уравнение для второй ротационной моды - ф. При вырождении стержней (нанотрубок) в материальные точки, равно как и в случае отсутствия взаимодействий при сдвиговых деформациях, не только исчезают все нелинейные слагаемые, пропорциональные поворотам θ, но и изгибные волны нераспространяющимися. Таким образом, в разработанной математической качественные модели произойдут изменения, что согласуется экспериментально известным существенным отличием между физикомеханическими свойствами фуллеренов и углеродных нанотрубок.

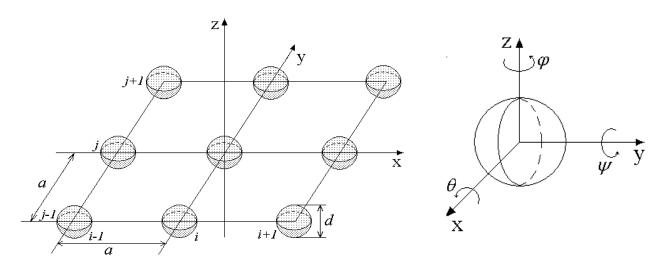


Рис. 7. Квадратная решетка из частиц шарообразной формы и ее ротационные степени свободы.

Третья из рассмотренных в этом параграфе математических моделей имеет следующий вид:

$$\begin{split} u_{tt} &= c_1^2 u_{xx} + c_2^2 u_{yy} + s^2 v_{xy} - \beta \varphi_y + \frac{1}{2} \frac{\partial F_1}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial F_2}{\partial y}, \\ v_{tt} &= c_2^2 v_{xx} + c_1^2 v_{yy} + s^2 u_{xy} + \beta \varphi_x + \frac{1}{2} \frac{\partial F_3}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial F_4}{\partial y}, \\ w_{tt} &= c_3^2 (w_{xx} + w_{yy} + 2\theta_y - 2\psi_x) + \frac{1}{2} \frac{\partial F_5}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial F_6}{\partial y}, \end{split}$$

$$J\varphi_{tt} = M \Big(b^2 c_4^2 (\varphi_{xx} + \varphi_{yy}) + \beta (u_y - v_x - 2\varphi) - F_7 \Big),$$

$$J\theta_{tt} = M \Big(b^2 (c_5^2 \theta_{xx} + c_6^2 \theta_{yy}) - 2c_3^2 (w_y + \theta) - F_8 \Big),$$

$$J\psi_{tt} = M \Big(b^2 (c_6^2 \psi_{xx} + c_5^2 \psi_{yy}) + 2c_3^2 (w_x - \psi) - F_9 \Big).$$
(10)

В уравнениях (10) введены следующие обозначения: c_1 , c_2 , c_3 — скорости распространения соответственно продольной, поперечной и изгибной волн, c_4 , c_5 , c_6 — скорости волн микровращений, s — коэффициент линейной связи между продольными и сдвиговыми волнами, β — параметр дисперсии, F_i (i=1...9) — функции нелинейностей. В предельном случае, когда $w = \theta = \psi = 0$, система (10) вырождается в ранее выведенные уравнения динамики квадратной решетки из круглых частиц (1), которые, в свою очередь, совпадают с уравнениями двумерного континуума Коссера, состоящего из центрально-симметричных частиц

Коэффициенты линейных частей уравнений (10) выражаются через силовые постоянные K_0 , K_1 , K_2 , K_3 (аналогичные тем, что были в прямоугольной решетке из анизотропных частиц, рассмотренной в главе 3), период решетки a и размер частицы $b = d / 2\sqrt{3}$ следующим образом:

$$\rho c_1^2 = \frac{K_0}{a} + \frac{4(a-b)^2}{(a-b)^2 + b^2} \frac{K_1}{a} + \frac{4(a-b)^2}{(a-b)^2 + 2b^2} \frac{K_2}{a} + \frac{K_3}{a},$$

$$\rho c_2^2 = \frac{4b^2}{(a-b)^2 + 2b^2} \frac{K_2}{a} + \frac{K_3}{a},$$

$$\rho c_3^2 = \frac{4b^2}{(a-b)^2 + b^2} \frac{K_1}{a} + \frac{4b^2}{(a-b)^2 + 2b^2} \frac{K_2}{a},$$

$$\rho c_4^2 = \frac{(a-b)^2}{(a-b)^2 + b^2} \frac{K_1}{a} + \frac{a^2}{(a-b)^2 + 2b^2} \frac{K_2}{a},$$

$$\rho c_5^2 = \frac{b^2}{(a-b)^2 + b^2} \frac{K_1}{a}, \quad \rho c_6^2 = \frac{a^2}{(a-b)^2 + b^2} K_1 + \frac{a^2}{(a-b)^2 + 2b^2} K_2,$$

$$\rho s^2 = \frac{2K_3}{a}, \qquad \rho \beta = \frac{4b^2}{(a-b)^2 + 2b^2} \frac{K_2}{a},$$
(11)

где $\rho = M/a^3$ – плотность среды.

Благодаря наличию зависимости (11) можно получить следующие соотношения между макропараметрами среды:

$$\beta + \frac{s^2}{2} = c_2^2, \quad c_4^2 = \frac{(a-b)^2 c_3^2 - (b^2 - 2ab)\beta}{4b^2},$$

$$c_5^2 = \frac{c_3^2 - \beta}{4}, \quad c_6^2 = \frac{a^2}{b^2} \left(\frac{c_3^2}{4}\right).$$
(12)

Следует отметить, что первое из равенств (12) также справедливо для квадратной и гексагональной решеток из плоских круглых частиц (см. главы 2 и 3).

При вырождении линейных частей уравнений (10) в уравнения динамики квадратной решетки из круглых частиц совпадают даже зависимости коэффициентов от параметров микроструктуры, если принимать во внимание, что в случае сферических частиц пружин вида K_1 и K_2 стало вдвое больше.

С помощью (11) и первого соотношения (12) можно получить следующие выражения параметров межчастичного взаимодействия через макропараметры среды:

$$\frac{K_3}{a} = \frac{\rho s^2}{2}, \qquad \frac{K_2}{a} = \frac{\rho}{4} (c_2^2 - \frac{s^2}{2})((\frac{a}{b} - 1)^2 + 2),
\frac{K_1}{a} = \frac{\rho}{4} (c_3^2 - c_2^2 + \frac{s^2}{2})((\frac{a}{b} - 1)^2 + 1),
\frac{K_0}{a} = \rho \left(c_1^2 - \frac{s^2}{2} - \left(\frac{a}{b} - 1\right)^2 c_3^2\right).$$
(13)

Таким образом, если экспериментально определить скорости упругих волн c_1 , c_2 , c_3 (в трехмерной среде с кубической симметрией $c_3 = c_2$) и значение параметра s, то по известной плотности среды ρ и относительному размеру частиц b/a несложно вычислить значения параметров межчастичного взаимодействия, которые затем можно использовать для оценки значений скоростей ротационных волн и коэффициентов нелинейностей. Подробное решение подобного рода задачи параметрической идентификации для квадратной и гексагональной решеток из плоских круглых частиц, а также прямоугольной решетки из эллипсовидных частиц приведено в главе 4.

Глава 6 посвящена исследованию влияния микроструктуры среды на особенности распространения в ней нелинейных волн. В ней показано, что нелинейная двухмодовая система методом многих масштабов приводится к эволюционному уравнению Кадомцева-Петвиашвили относительно сдвиговой деформации, которое имеет решение в виде плоского солитона. Благодаря использованному в работе методу структурного моделирования показано, что в кристаллической среде с параметрами как у NaBr или фуллерита C_{60} (см. табл. 1), плоский солитон неустойчив относительно

двумерных возмущений, в кристалле NaF солитон имеет положительную полярность, а в кристалле LiF – отрицательную полярность.

В рамках нелинейной двухмодовой системы, полученной в главе 5, согласно критерию Лайтхилла найдены области модуляционной неустойчивости (самомодуляции) сдвиговой волны деформации при условии наличия в материале статической продольной деформации. В различных диапазонах длин волн определены зависимости высоты и ширины волнового пакета, сформировавшегося в результате самомодуляции квазигармонической волны, от параметров микроструктуры материала.

Проведено численное исследование встречного и попутного взаимодействий сильно нелинейных солитоноподобных дозвуковых и сверхзвуковых волн в одномерной зернистой среде с внутренними напряжениями, моделируемой не интегрируемой методом обратной задачи рассеяния системой нелинейных уравнений в частных производных:

$$u_{tt} - c_1^2 u_{xx} = \frac{1}{2} \frac{\partial \left(3\alpha_1 u_x^2 + \gamma w_x^2\right)}{\partial x},\tag{14}$$

$$w_{tt} - \tilde{c}_2^2 w_{xx} - \frac{R^2}{4} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial^2 w_x}{\partial t^2} - c_3^2 \frac{\partial^2 w_x}{\partial x^2} \right] = \frac{\partial (\gamma u_x w_x)}{\partial x},$$

где $\tilde{c}_2^{\ 2} = c_2^{\ 2} - \frac{\beta_1^{\ 2}}{2\beta_2} \approx \frac{\delta'_0}{M} K_0$, δ'_0 - предварительная деформация центральных

пружин, моделирующая внутренние напряжения в среде, α_1 и γ -коэффициенты нелинейностей.

Система (14) сводится к имеющему солитонные решения уравнению:

$$\widetilde{w}_{\widetilde{t}\widetilde{t}} - \left(1 \mp \widetilde{w}_{\widetilde{x}}^{2}\right) \widetilde{w}_{\widetilde{x}\widetilde{x}} - \frac{\partial^{2}}{\partial \widetilde{x}^{2}} \left(\widetilde{w}_{\widetilde{t}\widetilde{t}} - c^{2}\widetilde{w}_{\widetilde{x}\widetilde{x}}\right) = 0.$$
(15)

Здесь введены безразмерные перемещение, координата и время: $\widetilde{w} = w/w_0$, $\widetilde{x} = x/X$, $\widetilde{t} = t/T$, причем $X^2 = \alpha T^2 = R^2/4$, $w_0^2 = R^2 c_1^2 \alpha/6 \gamma^2$, a $c^2 = c_3^2/\alpha$,

где α может принимать одно из двух значений: $\alpha^{(1)} = \tilde{c}_2^2$, $\alpha^{(2)} = \tilde{c}_2^2 - \frac{2c_1^2\gamma}{3\alpha_1}$.

Поскольку при отсутствии внутренних напряжений в среде $\beta_1 = 2\beta_2$ и $\tilde{c}_2^2 = 0$, то в этом случае уравнение (15) солитонных решений не имеет.

В зависимости от значений параметров микроструктуры рассматриваемая система может обладать как жесткой (знак "+" в уравнении (15)), так и мягкой (знак "-") нелинейностью.

В системе с мягкой нелинейностью могут существовать дозвуковые солитоноподобные волны, которые устойчиво распространяются начиная с некоторой скорости. Дозвуковые солитоны взаимодействуют неупруго, при этом наблюдается их взаимное ускорение, т.е. отрицательный сдвиг фазы.

В системе с жесткой нелинейностью реализуются сверхзвуковые солитоноподобные волны, которые также неупруго взаимодействуют, однако

сценарий взаимодействия зависит от относительной скорости столкновения. При малой скорости столкновения происходит обменное взаимодействие. При попутном столкновении со сверхзвуковой скоростью могут образоваться один или два пакета квазигармонических волн, распространяющихся в противоположные стороны. Если скорость столкновения превосходит в несколько раз скорость звука, то и при встречном, и при попутном взаимодействиях наблюдается расщепление солитона на ряд вторичных солитонов с образованием пакетов квазигармонических волн.

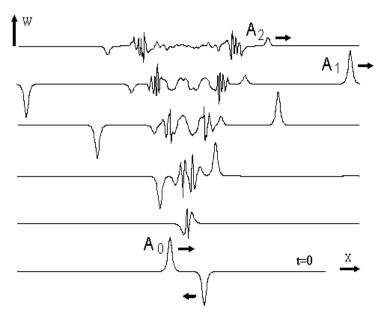


Рис. 8. Расщепление разнополярных солитонов при встречном взаимодействии

На рисунке 8 показано образование двух вторичных солитонов и, естественно, нестационарного волнового процесса. Относительно начальной амплитуды A_0 амплитуды вторичных солитонов распределяются следующим образом: $A_1 = 0.96\,A_0$, $A_2 = 0.27\,A_0$ (относительная точность измерения составляет 1,2%), причем такое распределение амплитуд вторичных солитонов не зависит от значения параметра c^2 в диапазоне $1 < c^2 \le 5$ и от относительной скорости взаимодействия в диапазоне $5 \le v_c \le 16$.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

- 1. Развиты теоретические основы метода структурного моделирования, с помощью которого построена иерархия математических моделей обобщенных континуумов для различных периодических структур, частот и длин волн.
- 2. Получены линейные уравнения динамики для прямоугольной, квадратной и гексагональной решеток. Эти уравнения идентичны между собой и аналогичны хорошо известным уравнениям динамики двумерного континуума Коссера, состоящего из центрально-симметричных частиц. Отличия между всеми этими уравнениями наблюдаются только в

коэффициентах, зависящих от формы и размеров частиц, параметров их взаимодействия и структуры решетки.

- 3. Найдена взаимосвязь В аналитическом виде между макропараметрами рассмотренных сред и параметрами их микроструктуры. Показано, как именно размер и форма частиц, а также параметры межчастичных взаимодействий влияют на скорости распространения в среде упругих и ротационных волн. Продемонстрирована возможность вычисления параметров микроструктуры среды и эффективных модулей макроупругости ПО измерениям скоростей упругих распространяющихся в различных кристаллографических направлениях.
- 4. Анализ дисперсионных свойств сред с плотной и неплотной упаковками частиц показал, что если в длинноволновом (континуальном) гексагональная решетка изотропна свойствам, то квадратная решетка из круглых частиц анизотропна. При этом продольная мода не имеет дисперсии, в то время как ротационная мода обладает дисперсией Клейн-Гордоновского типа и имеет критическую частоту, нераспространяющейся. ниже которой она является коротковолновом (дискретном) приближении рассмотренные являются анизотропными, причем если в случае гексагональной и квадратной решеток из круглых частиц существует область низких частот, где волновые моды являются изотропными, то в прямоугольной решетке из эллипсовидных частиц все волновые моды всюду анизотропны. В отличие континуального приближения, ротационная мода имеет минимальную, максимальную так частоту, значения которых определяются параметрами микроструктуры материала.
- 5. Для ряда материалов с гексагональной и кубической симметрией проведены оценки скорости и критической частоты ротационной волны. Эти оценки показали, что скорость этой волны в кристаллических структурах, как правило, меньше скоростей трансляционных волн, а ее критическая частота лежит в гиперзвуковом диапазоне. При частотах ниже критической (в приближении моментной теории упругости) ротационные степени свободы можно не учитывать, но "память" о зернистой структуре среды остается в виде зависимостей между макроскопическими характеристиками среды и параметрами микромодели.
- 6. В пространстве параметров микроструктуры найдены области, где коэффициент Пуассона изотропной среды, соответствующей гексагональной решетке из круглых частиц, принимает отрицательные значения.
- 7. Продемонстрирована возможность теоретической оценки по известным экспериментальным данным коэффициентов нелинейностей уравнений динамики для квадратных решеток из круглых частиц с тремя степенями свободы, стержней (пять степеней свободы) и сферических частиц (шесть степеней свободы).

- 8. Показано, что в низкочастотном приближении в кристаллической среде возможно распространение плоского солитона деформации, причем в гипотетических материалах с кубической симметрией и с параметрами, как у NaBr или фуллерита C_{60} , плоский солитон неустойчив относительно двумерных возмущений, в кристалле NaF солитон имеет положительную полярность, а в кристалле LiF отрицательную полярность.
- 9. Найдены области модуляционной неустойчивости (самомодуляции) сдвиговой волны деформации при условии наличия в зернистом материале статической продольной деформации. В различных диапазонах длин волн определены зависимости высоты и ширины волнового пакета, сформировавшегося в результате самомодуляции квазигармонической волны, от параметров микроструктуры материала.
- 10. Проведено численное исследование встречного и попутного взаимодействий сильно нелинейных солитоноподобных дозвуковых и сверхзвуковых волн в одномерной зернистой среде с внутренними напряжениями. Показано, что в такой среде в зависимости от значений микроструктуры ΜΟΓΥΤ параметров существовать неупруго взаимодействующие дозвуковые солитоноподобные волны солитоноподобные сценарий сверхзвуковые волны, взаимодействия которых зависит от относительной скорости столкновения. При малой обменное столкновения происходит взаимодействие. попутном столкновении со сверхзвуковой скоростью могут образоваться один или два пакета квазигармонических волн, распространяющихся в противоположные стороны. Если скорость столкновения превосходит в несколько раз скорость звука, то и при встречном, и при попутном взаимодействиях наблюдается расщепление солитона на ряд вторичных солитонов с образованием пакетов квазигармонических волн.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в рецензируемых изданиях из списка ВАК:

- 1. Potapov A.I., Pavlov I.S. Nonlinear waves in 1D oriented media. // Acoustics Letters. 1996. V. 19. N 6. P. 110-115.
- 2. Драгунов Т.Н., Павлов И.С., Потапов А.И. Ангармонические взаимодействия упругих и ориентационных волн в одномерных кристаллах // Физика твердого тела. 1997. Т. 39. № 1. С. 137-144.
- 3. Potapov A.I., Pavlov I.S., Maugin G.A. Nonlinear wave interactions in 1D crystals with complex lattice // Wave Motion. 1999. V. 29. P. 297-312.
- 4. Павлов И.С., Потапов А.И. Нелинейная динамика двумерной решетки. // Прикладные проблемы прочности и пластичности. Численное моделирование физико-механических процессов: Межвуз. сборник. М.: КМК, 1999. С. 66-74.

- 5. Павлов И.С. О возможности измерения материальных констант микрополярной среды по характеристикам упругих волн // Проблемы прочности и пластичности: Межвуз. сборник. Нижний Новгород: Издво Нижегородского госуниверситета, 2000. С. 171-182.
- 6. Potapov A.I., Pavlov I.S., Gorshkov K.A., Maugin G.A. Nonlinear interactions of solitary waves in a 2D lattice // Wave Motion. 2001. V.34. N 1. P. 83-95.
- 7. Павлов И.С., Лисина С.А. Одномерные модели нелинейной динамики микрополярных и гранулированных сред // Известия вузов. Северо-Кавказский регион. Спецвыпуск "Математическое моделирование". Ростов-на-Дону, 2001. С. 132-134.
- 8. Павлов И.С. Гранулированная среда с вращением частиц. Двумерная модель // Проблемы прочности и пластичности: Межвуз. сборник. Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета, 2003. Вып. 65. С. 50-61.
- 9. Павлов И.С. Двумерная модель гранулированной среды // Известия вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки. Нелинейные проблемы механики сплошных сред. Ростов-на-Дону, 2003. С. 274-278.
- 10.Павлов И.С. Упругие волны в двумерной зернистой среде // Проблемы прочности и пластичности: Межвуз. сборник. Нижний Новгород: Издво Нижегородского госуниверситета, 2005. Вып. 67. С. 119-131.
- 11. Милосердова И.В., Павлов И.С., Потапов А.И. Математическая модель нанокристаллической среды с плотной упаковкой частиц // Проблемы прочности и пластичности: Межвуз. сборник. Нижний Новгород: Издво Нижегородского госуниверситета, 2006. Вып. 68. С. 29-39.
- 12.Pavlov I.S., Potapov A.I., and Maugin G.A. A 2D Granular Medium With Rotating Particles // Int. J. of Solids and Structures. 2006. V.43. N 20. P. 6194-6207.
- 13. Милосердова И.В., Павлов И.С., Потапов А.И. Двумерная динамическая модель нанокристаллической среды с гексагональной симметрией // Механика композиционных материалов и конструкций, 2006. Т. 12. № 4. С. 555-565.
- 14. Павлов И.С., Потапов А.И. Двумерная модель зернистой среды // Изв. РАН: Механика твердого тела. 2007. № 2. С. 110-121.
- 15.Павлов И.С., Потапов А.И. Структурные модели в механике нанокристаллических сред // Доклады академии наук. 2008. Т. 421. № 3. С. 348-352.
- 16.Potapov A.I., Pavlov I.S., Lisina S.A. Acoustic Identification of Nanocrystalline Media // Journal of Sound and Vibration. 2009. V. 322. No. 3. P. 564-580.
- 17.Потапов А.И., Павлов И.С., Лисина С.А. Идентификация нанокристаллических сред методами акустической спектроскопии // Акустический журнал. 2010. Т. 56. № 4. С. 558-567.

- 18.Pavlov I.S. Acoustic Identification of the Anisotropic Nanocrystalline Medium with Non-Dense Packing of Particles // Acoustical Physics. 2010. V. 56. N 6. P. 924-934.
- 19.Павлов И.С., Милосердова И.В. Дискретная и континуальная модели анизотропной нанокристаллической среды с неплотной упаковкой частиц // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского, 2011. № 4 (4). С. 1681-1683.
- 20.Васильев А.А., Дмитриев С.В., Павлов И.С. Структурное и континуальное моделирование материалов с учетом конечности размера частиц // Перспективные материалы. 2011. Спец. вып. №.12. С. 87-91.
- 21. Ерофеев В.И., Павлов И.С. Локализованные волны деформации в двумерной кристаллической среде с неплотной упаковкой частиц // Проблемы прочности и пластичности: Межвуз. сборник. Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета, 2012. С. 110-123.
- 22. Ерофеев В.И., Кажаев В.В., Павлов И.С. Самомодуляция сдвиговых волн деформации, распространяющихся в одномерной зернистой среде // Нелинейный мир. 2012. Т. 10. № 9. С. 603-613.
- 23.Павлов И.С. Об оценке коэффициентов нелинейностей зернистой среды методом структурного моделирования // Вестник ННГУ. 2012. № 6. С. 143-152.
- 24. Ерофеев В.И., Кажаев В.В., Павлов И.С. Неупругое взаимодействие и расщепление солитонов деформации, распространяющихся в зернистой среде // Вычислительная механика сплошных сред. 2013. Т. 6. № 2. С. 140-150.
- 25. Никитина Н.Е., Павлов И.С. О специфике явления акустоупругости в двумерной среде с внутренней структурой // Акустический журнал. 2013. Т. 59. № 4. С. 452-458.
- 26. Ерофеев В.И., Павлов И.С., Леонтьев Н.В. Математическая модель для исследования нелинейных волновых процессов в двумерной зернистой среде из сферических частиц // Механика композиционных материалов и конструкций. 2013. Т. 19. № 3. С. 299-308.

Главы в коллективных монографиях:

- 27. Павлов И.С. Структурные модели в микро- и наномеханике // Введение в микро- и наномеханику: математические модели и методы. Под ред. А.И. Потапова. НГТУ им. Р.Е. Алексеева. Нижний Новгород, 2010, с. 117-164.
- 28.Erofeev V.I., Kazhaev V.V., Pavlov I.S. Nonlinear localized strain waves in a 2D medium with microstructure. In: Altenbach H., Forest S., Krivtsov A. (eds.) Generalized Continua as Models for Materials with Multi-scale Effects or under Multi-field Actions. Springer. Berlin, Heidelberg et al., 2013. P. 91-110.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Введение

Глава 1. Идеологическая основа метода структурного моделирования

- 1.1. Обзор литературы.
 - 1.1.1. Дискретные модели сред без учета микровращений
 - 1.1.2. Континуальные модели сред с вращательными степенями свободы частиц
 - 1.1.3. Экспериментальные исследования динамических свойств сред с микроструктурой
- 1.2. Способы описания различных масштабных уровней.
- 1.3. Границы применимости законов классической механики к моделированию обобщенных континуумов.
 - 1.3.1. Квантовое и классическое описание микрочастиц.
 - 1.3.2. Соотношение неопределенности.
 - 1.3.3. Микрочастица как локализованный волновой пакет.
 - 1.3.4. Принцип соответствия.
- 1.4. Принципы структурного моделирования.
- 1.5. Выводы по главе.

Глава 2. Двумерная решетка с плотной упаковкой частиц

- 2.1. Дискретная модель среды с гексагональной симметрией.
- 2.2. Континуальное приближение.
- 2.3. Влияние микроструктуры на акустические свойства среды.
- 2.4. Дисперсионные свойства нормальных волн.
 - 2.4.1. Дисперсионные свойства дискретной модели.
 - 2.4.2. Дисперсионные свойства континуальной модели.
- 2.5. Выводы по главе.

Глава 3. Двумерная решетка с неплотной упаковкой частиц

- 3.1. Дискретная модель анизотропной среды из эллипсовидных частиц.
- 3.2. Континуальное приближение.
 - 3.2.1. Зависимость анизотропии среды от микроструктуры.
 - 3.2.2. Квадратная решетка из круглых частиц.
 - 3.2.3. Цепочка из частиц эллипсовидной формы.
- 3.3. Влияние микроструктуры на акустические свойства среды.
 - 3.3.1. Зависимость скоростей упругих и ротационных волн от формы частиц в случае одномерной решетки.
 - 3.3.2. Зависимость акустических характеристик двумерной анизотропной среды от параметров микроструктуры.
- 3.4. Дисперсионные свойства нормальных волн.
 - 3.4.1. Дисперсионные свойства дискретной модели.
 - 3.4.2. Дисперсионные свойства континуальной модели.
- 3.5. Выводы по главе.

Глава 4. Применение двумерных моделей сред с плотной и неплотной упаковками частиц для решения задач параметрической идентификации

- 4.1. Редуцированные (градиентные) модели теории упругости
- 4.2. Задачи идентификации материалов.
 - 4.2.1. Идентификация среды с гексагональной симметрией.
 - 4.2.2. Идентификация среды с кубической симметрией.
- 4.3. Сопоставление с континуальной теорией Коссера.
- 4.4. Влияние микроструктуры материала на коэффициент Пуассона.
- 4.5. Выводы по главе.

Глава 5. Нелинейные модели сред с микроструктурой

- 5.1. Прямоугольная решетка из эллипсовидных частиц.
- 5.2. Оценка коэффициентов нелинейностей математической модели квадратной решетки из круглых частиц.
- 5.3. Квадратная решетка из стержней.
 - 5.3.1. Дискретная модель.
 - 5.3.2. Континуальное приближение.
 - 5.3.3. Взаимосвязь между макромодулями материала и параметрами его внутренней структуры.
- 5.4. Однослойная среда из сферических частиц.
 - 5.4.1. Дискретная модель.
 - 5.4.2. Континуальное приближение.
 - 5.4.3. Зависимость макропараметров среды от параметров ее микроструктуры.
- 5.5. Выводы по главе.

Глава 6. Распространение и взаимодействие нелинейных волн в обобщенных континуумах

- 6.1. Локализованные волны деформации в двумерной кристаллической среде с неплотной упаковкой частиц.
- 6.2. Сдвиговая волна в условиях продольной статической деформации
- 6.3. Самомодуляция сдвиговых волн деформации, распространяющихся в одномерной зернистой среде
 - 6.3.1. Области модуляционной неустойчивости.
 - 6.3.2. Вид волновых пакетов в случае модуляционной неустойчивости.
- 6.4. Неупругое взаимодействие и расщепление солитонов деформации, распространяющихся в зернистой среде.
 - 6.4.1. Солитонные решения.
 - 6.4.2. Дозвуковые солитоны.
 - 6.4.3. Сверхзвуковые солитоны.
- 6.5. Выводы по главе.

Заключение. Основные результаты работы Литература. Приложения.