

Мишин Алексей Владимирович

**ФОРМАЛИЗМ ОБОБЩЕННОЙ ПРОИЗВОДНОЙ ДЛЯ АНАЛИЗА
ГЕТЕРОГЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ**

1.1.9 – механика жидкости, газа и плазмы,
1.1.8 – механика деформируемого твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича Сибирского отделения РАН (Новосибирск).

Научный руководитель:

Фомин Василий Михайлович, академик, доктор физико-математических наук, профессор.

Официальные оппоненты:

Рудяк Валерий Яковлевич, доктор физико-математических наук, профессор, Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет (НГАСУ) и Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе Сибирского Отделения Академии Наук (ИТ СО РАН) г. Новосибирск.

Кузькин Виталий Андреевич, доктор физико-математических наук, Институт проблем машиноведения Российской Академии наук, г. Москва.

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», г. Москва.

Защита состоится « 21 » апреля 2023 года в «11-00» часов на заседании диссертационного совета 24.1.125.01 в Институте теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН по адресу: 630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, 4/1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН по адресу: 630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, 4/1.

http://itam.nsc.ru/education/dissertation_board.html

Отзыв на автореферат в двух экземплярах, заверенный печатью учреждения, просьба направлять на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Автореферат разослан « ___ » _____ 2023 года.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук



Гапонов С.А.

Общая характеристика работы

Работа посвящена теоретическому исследованию гетерогенных сред. Гетерогенные системы – структурно-неоднородные системы, состоящие из однородных частей (фаз), разделённых поверхностью раздела, химический состав и физические свойства которых во всех частях одинаковы и меняются скачкообразно при переходе между фазами.

Актуальность темы исследования

Гетерогенные среды широко распространены в природе и все чаще встречаются во всех сферах человеческой деятельности вследствие их преимуществ над традиционными материалами (лёгкость, высокая удельная прочность, износостойкость, жесткость, преимущества в тепло- и электропроводности и т.д.). Особенно перспективными свойствами обладают гетерогенные материалы, создаваемые в рамках аддитивных технологий (например, управляемым лазерным воздействием). Потребность в гетерогенных материалах вследствие имеющихся у них свойств с каждым годом возрастает. Для определения и анализа свойств таких сред можно каждый раз использовать эксперимент, но это непрактично, да и к тому же в ряде ситуаций постановка эксперимента весьма затруднительна (например, при определении межфазных взаимодействий). Исходя из этого умение аналитически предсказывать поведение существующих и создаваемых новых гетерогенных материалов является актуальным и необходимым.

Научная и практическая значимость. Степень разработанности темы исследования

Аналитическое моделирование распространения поля по гетерогенной среде представляет собой комплексную задачу с нерешенными проблемами. Данная задача напрямую связана с построением математической модели гетерогенной среды с определенными эффективными коэффициентами переноса, входящими в осредненные уравнения и отображающими микроструктуру системы (геометрию и физические свойства фаз). Для решения данной задачи необходимо учесть коллективное влияние фаз на распространяющееся исследуемое поле по гетерогенной среде, что имеет отношение к задаче многих тел. Задача многих тел для гетерогенной среды связана с описанием влияния на поле конфигурации внутренних границ, разделяющих занятые фазами области с разными физическими свойствами. Сложность задачи заключается в поиске необходимого математического аппарата и последующего нахождения решения.

История теоретического описания микронеднородных сред насчитывает уже более ста лет, начиная с работ Максвелла (эффективные коэффициенты электропроводности, теплопроводности) и Эйнштейна (эффективная вязкость суспензий). К настоящему времени разработан ряд подходов, обладающих широким математическим аппаратом. Этот математический формализм по большей части направлен на получение из исходных уравнений осредненных с входящими в них эффективными коэффициентами переноса, отображающими континуальное “размазывание” истинной среды. При этом границы раздела фаз либо не учитываются (соответственно и размеры), либо их учет производится с

введением упрощений (например, рассмотрение периодической структуры или введение феноменологических коэффициентов). То есть отсутствует математическая концепция по учету микроструктуры гетерогенной среды, отображающая задачу многих тел (коллективное взаимодействие фаз) для гетерогенной среды, на основе которой строится решение. Поэтому получаемые в рамках существующих подходов эффективные коэффициенты переноса ограничены в описании поведения гетерогенной среды на всем интервале объемных концентраций и при существенно различных физических свойствах фаз.

Практическая значимость исследования заключается в улучшении предсказательной способности поведения гетерогенных сред. При этом стоит цель по обоснованию способа создания объемного изделия на основе гетерогенного материала с заданными физико-механическими свойствами и составом, полученного, например, управляемым лазерным воздействием.

Цель работы и задачи

Создание математической модели гетерогенной среды, эффективные коэффициенты переноса которой интегрально учитывают ее микроструктуру и коллективный вклад фаз в распространение поля по гетерогенной структуре, в результате чего предсказываются физико-механические свойства и состав получаемого гетерогенного материала на всем интервале объемной концентрации, включая окрестность структурного фазового перехода.

Для достижения данной цели решаются следующие задачи.

1. Получение эффективных коэффициентов переноса, интегрально учитывающих микроструктуру системы (физические свойства фаз и характерные масштабы) в явном виде. Для этого следует произвести аналитический учет влияния внутренних границ гетерогенной среды на распространение поля упругости по ней. Сформулировать при этом задачу многих тел для гетерогенной среды и найти ее решение, отображающее коллективное влияние фаз на распространение поля по гетерогенной среде.

2. Произвести обобщение эффективных коэффициентов на случай заданной размерности пространства.

3. Из анализа найденных эффективных коэффициентов находить признаки несущей фазы и структурного фазового перехода (перколяции, фазовых переходов первого и второго рода).

4. Разработка математической модели по предсказанию структурно-фазового состава и физико-механических характеристик гетерогенного материала, полученного с помощью управляемой лазерной обработки.

Научная новизна

На основе индикаторной функции, входящей в функционал внутренней энергии, и с использованием вариационного исчисления, получена формула для обобщенной производной, учитывающая влияние внутренних границ гетерогенной среды, разделяющих фазы с разными физическими свойствами, на распространение поля по ней и приводящая к интегро-дифференциальному уравнению переноса.

Использование концепции обобщенной производной приводит к формулам пространственной теоремы осреднения в рамках теории смесей.

На основе введенного формализма сформулирована задача многих тел на функцию Грина для гетерогенной среды и найдено ее решение, отображающее коллективное влияние фаз на распространение поля по гетерогенной среде. Нахождение решения интегро-дифференциального уравнения с разрывами на осредненную функцию Грина основано на анализе соответствующего оператора и имеет вид потенциала Юкавы, характеризующего с физической точки зрения переходный слой, вызванный экранированием зарядов.

Полученные эффективные коэффициенты переноса обобщены на случай заданной размерности пространства и интегрально учитывают микроструктуру системы (упругие, вязкоупругие, электрические свойства фаз и характерные размеры) в явном виде и согласуются в частных случаях с существующими подходами.

Из анализа найденных эффективных коэффициентов, примененного для гетерогенных сред с существенно различающимися свойствами фаз, предсказано наличие несущей фазы и структурного фазового перехода (перколяции).

На основе разработанной математической модели, учитывающей процесс растворения и протекание химической реакции, показано, что итоговое состояние гетерогенного материала есть следствие подаваемой на исходную систему энергии, что дает возможность контролировать состав и свойства конечной структуры.

На основе анализа осредненных уравнений методом условных моментов, с учетом анализа эффективных коэффициентов, представлено нахождение структурного вида коэффициента пропорциональности (для высокопористых сред) в законе Дарси, отражающего микроструктуру среды и удовлетворительно согласовывающегося с экспериментом.

Методология и методы исследования

В работе применялись методы по анализу гетерогенных сред, включающие различный математический формализм (операторный формализм, методы ТФКП, теории вероятностей и функционально анализа). Центральным математическим объектом в работе является обобщенная производная, использованы также: вариационный формализм, аппарат функций Грина, метод условного осреднения, преобразование Фурье.

Основные положения, выносимые на защиту

1. На основе математического формализма обобщенной производной проведение аналитического учета влияния внутренних границ гетерогенной среды, разделяющих фазы с разными физическими свойствами, на распространение поля по ней. Постановку на основе концепции обобщенной производной задачи многих тел для гетерогенной среды и нахождение ее решения. Нахождение решения интегро-дифференциального уравнения с разрывами на осредненную функцию Грина, что основано на анализе соответствующего оператора.

Интегральный учет в полученных эффективных коэффициентах переноса микроструктуры системы (физические свойства фаз и характерные масштабы) в явном виде. Обобщение эффективных коэффициентов на случай заданной размерности пространства.

2. Предсказание наличия несущей фазы и структурного фазового перехода (перколяции), полученное из анализа найденных эффективных коэффициентов, примененного для гетерогенных сред с существенно различающимися свойствами фаз.

3. Разработка математической модели, учитывающей процесс растворения и протекание химической реакции, демонстрирующей, что итоговое состояние гетерогенного материала есть следствие подаваемой на исходную систему энергии, что дает возможность контролировать состав и свойства конечной структуры.

4. Получение на основе анализа осредненных уравнений (полученных методом условных моментов) структурного вида коэффициента пропорциональности (для высокопористых сред) в законе Дарси, отражающего микроструктуру среды. Проведение сравнения полученных формул с экспериментальными данными, показывающего удовлетворительное согласование.

Степень достоверности и апробация работы

Достоверность результатов обеспечивается сопоставлением полученных результатов с данными существующих подходов и сравнением с экспериментальными данными.

Основные результаты научно-квалификационной работы докладывались автором на научных конференциях:

Международная конференция по методам аэрофизических исследований (ICMAR), г. Новосибирск, Россия, 2017; International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (ИЕФМ), пос. Терскол, Кабардино-Балкария, Эльбрус, Россия, 2018, 2021; Equations of State for Matter (EOS), пос. Терскол, Кабардино-Балкария, Эльбрус, Россия, 2022; пленарный доклад на Всероссийской конференции для молодых ученых “34 Сибирский теплофизический семинар”, посвященный 85-летию академика А.К. Реброва, г. Новосибирск, Россия, 2018; Всероссийская конференция молодых учёных-механиков, г. Сочи, Пансионат Буревестник, Россия, 2018; 2021; 2022; XII Всероссийский съезд по фундаментальным и прикладным проблемам теоретической и прикладной механики, г. Уфа, Россия, 2017; XII всероссийской конференции молодых ученых Проблемы механики: теория, эксперимент и новые технологии, пос. Шерегеш, Россия, 2016.

В процессе написания диссертации автор принял участие в проектах: РФФ № 16-19-10300, 2019-2020 и в проекте Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-15-2020-781, 2020-2022 исполнителем, основным исполнителем в РФФ № 21-19-00733, 2021-2023, РФФИ “Аспиранты” 20-31-90090, 2021-2023.

Личный вклад автора

Соискатель принимал участие в постановке задач и впервые для анализа микроструктуры гетерогенной среды ввел формализм обобщенной производной. В результате получена математическая модель гетерогенной среды, эффективные коэффициенты переноса которой интегрально учитывают ее микроструктуру в явном виде.

Структура и объем работы

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы. Материал изложен на 148 страницах и содержит 14 рисунков и список литературы из 76 источников.

Публикации по теме диссертации

По теме диссертации опубликовано 8 статей (из них 6 в научных изданиях, индексированных в Web of Science/Scopus).

Содержание работы

Во введении представляются основные аспекты работы: актуальность темы исследования, цели и задачи работы, научная новизна и практическая значимость результатов. Изложены основные положения, выносимые на защиту, приводится список публикаций и сведения о степени достоверности и об апробации результатов работы.

В главе 1 представлен литературный обзор моделей по описанию гетерогенных сред, показывающий специфику развития области. На основе проведенного исследования указано, что существующий математический аппарат, содержащийся в представленных подходах, либо не учитывает границы раздела фаз, либо вводит их упрощенно (через феноменологические коэффициенты или периодическую структуру). Поэтому, анализ влияния коллективного взаимодействия фаз на распространяющееся по гетерогенной среде поле ограничен. Отсутствие математического аппарата, необходимого для наиболее полного учета внутренних границ раздела фаз гетерогенной среды, приводит к ограниченному анализу влияния микроструктуры системы на распространение поля по ней.

В главе 2 для отображения микроструктуры гетерогенной системы вводится концепция производной в обобщенном смысле. Анализируются результаты и следствия этой концепции. Разбирается корректность постановки задачи для анализируемого уравнения переноса, в котором обычные производные заменены на обобщенные. Для модифицированного обобщенными производными оператора ищется решение на функцию Грина с последующей его интерпретацией. На основе метода условных моментов находятся эффективные коэффициенты переноса. Проводится сопоставление с существующими подходами.

В разделе 2.1 предлагается вывод эффективных коэффициентов линейной теории упругости для гетерогенной среды с учетом внутренних границ на основе концепции обобщенной производной в смысле функционального анализа [Шварц Л., 1966]. Во введенном формализме обобщенной производной поверхностная дельта-функция выражена альтернативным образом относительно подхода Шварца, но не противоречит ему.

Выражение для обобщенной производной, действующей на поле смещений, в случае произвольной размерности пространства имеет вид

$$\nabla_j u_i(\mathbf{r}) = \partial_j u_i(\mathbf{r}) + \sum_k \int_{S_k} [u_i]_x \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j, \quad (1)$$

где ds – вектор, выражающий ориентированную площадку, расстояние до которой определяется радиус-вектором \mathbf{x} , запись $[u_i]_x$ характеризует скачок смещений фаз на границе $[u_i]_x = u_i(\mathbf{x} + \mathbf{0}) - u_i(\mathbf{x} - \mathbf{0})$. Сингулярная составляющая для обобщенной производной ∇ в (1) выражается в подынтегральном выражении конфигурацией дельта-функций на поверхностях разрыва, т.е. соглас-

но формуле (1) каждой точке \mathbf{x} поверхности разрыва соответствует своя дельта-функция $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{x})$.

Обобщенная производная содержит обычную и сингулярную составляющие. Сингулярная часть выражает разрывы поля на поверхности, что является естественным следствием анализа гетерогенной среды, характеризуемой развитой системой внутренних границ, разделяющих фазы с разными физическими свойствами. В рамках данной концепции предлагается решить представленную задачу об учете конфигурации внутренних границ раздела фаз (отобразить микроструктуру гетерогенной системы).

Формула (1) не конкретизирует, какая фаза гетерогенной среды рассматривается в исследуемой области и переход между какими фазами $[u_i]_x$ осуществляется при пересечении границы. Базируясь на выражении (1) определена обобщенная производная для каждой из областей неоднородной системы, занятой фазой 1:

$$\nabla_j u_i^1(\mathbf{r}) = \partial_j u_i^1(\mathbf{r}) + \int_{S_{12}} u_i^1(\mathbf{x} - \mathbf{0}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j. \quad (2)$$

Данная формула следует из (1) при рассмотрении области, соответствующей фазе 1 с учетом равенства $u_i^1(\mathbf{x} + \mathbf{0}) = 0$ и изменения ориентации площадки ds_j (смена S на S_{12} направлена отобразить это). Граничное условие $u_i^1(\mathbf{x} + \mathbf{0}) = 0$ характеризует то, что область вне границы, занимаемой фазой 1, не входит в анализируемую. Аналогичное выражение справедливо и для области, занимаемой фазой 2, с точностью до ориентации площадки.

Сформировано и доказано утверждение о том, что обобщенная производная (1) через соответствующую ей сингулярную составляющую описывает поведение поля на границах раздела фаз гетерогенной среды. Данное утверждение подтверждается тем фактом, что осреднение формул (1), (2) приводит к пространственной теореме осреднения, полученной в рамках теории смесей [Нигматуллин Р.И., 1978]. Для доказательства использованы формулы пространственного осреднения. Пространственной теоремой осреднения предсказывается влияние на поле в пространстве структуры внутренних границ (через поверхностные интегралы отображаются микроструктурные особенности гетерогенной системы). Отмечено, что в имеющихся исследованиях (см. главу 1) границы либо не учитываются (соответственно, и размеры), либо их учет производится с введением упрощений, не отображающих специфику анализируемой структуры.

При постановке задачи рассмотрено стационарное распределение упругого поля в микронеоднородной двухфазной среде в трехмерном пространстве. В качестве исходной модели использована стационарная изотропная модель линейной теории упругости:

$$\begin{aligned} \nabla_j \sigma_{ij} = 0, \quad \sigma_{ij} = \lambda_{ij\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta}, \quad \varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (\nabla_\beta u_\alpha + \nabla_\alpha u_\beta), \\ \nabla_j (\lambda_{ij\alpha\beta} \nabla_\beta u_\alpha) = 0, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\lambda_{ij\alpha\beta} = \left(K - \frac{2}{3}\mu\right) \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} + 2\mu I_{ij\alpha\beta}, \quad I_{ij\alpha\beta} = \frac{1}{2} (\delta_{i\alpha} \delta_{j\beta} + \delta_{i\beta} \delta_{j\alpha}).$$

Координатами в модели (3) выступают микроточки, в каждой из которых находится одна из фаз со своими физическими свойствами. Уравнения (3) дополнены граничными условиями на внутренних и внешней границах.

Обобщенные производные заменяют обычные в исходной модели (3). При этой модификации в исходных дифференциальных уравнениях содержится информация, отображающая поведение поля на внутренних границах.

Замена в исходной модели линейной теории упругости обычных производных на обобщенные сохраняет физическую суть исследуемых уравнений (закон сохранения и закон Гука) и корректность постановки задачи. Доказательство этого утверждения приведено двумя способами.

Первый вариант доказательства основывается на том, что замена обычных производных на обобщенные и последующее пространственное осреднение приводит к формулам пространственной теории смесей. При этом анализируемая область гетерогенной среды (включающая внутренние границы) осталась без изменения, также, как и граничные условия. Исходя из этого, решения также являются одинаковыми.

Второй вариант доказательства основан на формализме формулы Грина, на основе которой сформулировано и доказано утверждение. Использование формализма обобщенных производных (1) приводит к возникновению в дифференциальном уравнении членов, характеризующих поведение поля на внутренних границах гетерогенной системы. Эти члены могут совместно с регулярной составляющей эллиптического оператора формировать действующий оператор, либо их можно рассматривать как источник в модифицированном дифференциальном уравнении. Если эти члены определяют действующий оператор и граничное условие поставлено на внешней границе, то при определении поля в гетерогенной среде в целом информация о внутренних границах присутствует в функции Грина. Полученное решение при этом является структурно идентичным формуле Грина. Исходя из этого физическая суть исследуемых дифференциальных уравнений не нарушается, и постановка задачи является корректной для всей области гетерогенной среды (включающей конфигурацию отдельных областей).

Произведен вывод эффективных коэффициентов упругости методом условных моментов [Хорошул Л.П., 1995]. Функционал данного подхода базируется на формализме функций Грина, условном осреднении и преобразовании Фурье. Методом условных моментов удастся получить осредненные уравнения с эффективными коэффициентами упругости для среды в целом и для каждой фазы отдельно. Уравнения для среды в целом представляются в виде

$$\nabla_j \langle \sigma_{ij} \rangle = 0, \quad \langle \sigma_{ij} \rangle = \lambda_{ij\alpha\beta}^* \langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle, \quad \lambda_{ij\alpha\beta}^* \nabla_j \nabla_\beta \langle u_\alpha \rangle = 0,$$

где $\lambda_{ij\alpha\beta}^*$ – входящий в осредненный закон Гука эффективный изотропный тензор, содержащий искомые эффективные коэффициенты линейной теории упру-

гости K^* и μ^* . Тензоры $\langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle$ и $\langle \sigma_{ij} \rangle$ являются осредненными тензорами деформаций и напряжений соответственно. Необходимая информация о гетерогенной структуре располагается в искомым эффективных коэффициентах K^*, μ^* .

Для оператора $\lambda_{ij\alpha\beta}^* \nabla_j \nabla_\beta$ введено и проанализировано уравнение на функцию Грина с заданием граничного условия на внешней границе и обсуждения условий на внутренних разрывах. Модифицированный обобщенными производными оператор в исходной модели линейной теории упругости приводит к функции Грина, характеризующей микроструктурные особенности гетерогенной среды. Построение решения уравнения на функцию Грина для гетерогенной среды представляет собой нетривиальную задачу. На основе сделанных предположений проанализировано уравнение

$$\lambda_{ijml}^* \partial_j \partial_l \langle G_{mp}^{(1,2)} \rangle = T_{ip}^{(1,2)}, \quad (4)$$

где источник член $T_{ip}^{(1,2)}$ осредненно учитывает микроструктурные особенности системы. Уравнение (4) через источник направлено выразить переходный слой через конфигурацию зарядов и диполей, осредненно удовлетворяющих внутренним граничным условиям. Представлено выражение для введенного источника.

Выражение по вычислению эффективных коэффициентов упругости в методе условных моментов имеет вид

$$\lambda_{jka\beta}^* = \langle \lambda_{jka\beta} \rangle + c_1 c_2 \lambda'_{jkmn} (I_{\gamma\delta mn} + R_{\gamma\delta pq} (\lambda''_{pqmn} - \lambda''_{pqmn}))^{-1} R_{\gamma\delta rv} \lambda'_{rv\alpha\beta}, \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \langle \lambda_{jka\beta} \rangle &= c_1 \lambda_{jka\beta}^1 + c_2 \lambda_{jka\beta}^2, & \lambda'_{ija\beta} &= \lambda_{ija\beta}^1 - \lambda_{ija\beta}^2, \\ \lambda''_{ija\beta} &= c_2 \lambda_{ija\beta}^1 + c_1 \lambda_{ija\beta}^2, & c_1 + c_2 &= 1, & I_{ija\beta} &= \frac{1}{2} (\delta_{ia} \delta_{j\beta} + \delta_{i\beta} \delta_{ja}), \end{aligned}$$

здесь c_1, c_2 – объемные концентрации фаз. В результате применения условного осреднения и преобразования Фурье в рамках метода условных моментов возникает свертка, выделяющая интегралы, содержащие осредненную функцию Грина и корреляционную функцию геометрии структуры. Этими интегралами являются члены R_{ijpq} , отображающие информацию об отклике поля в среде на распространяющееся поле и о геометрии структуры. Вычисление интегралов R_{jkpq} приводит к выражению

$$R_{jkpq} = \frac{\gamma}{3} \frac{1}{\mu^*} I_{jkpq} - \frac{\gamma}{15} \frac{K^* + \frac{1}{3} \mu^*}{\mu^* (K^* + \frac{4}{3} \mu^*)} (\delta_{jk} \delta_{pq} + 2I_{jkpq}), \quad (6)$$

отличающемуся от работы Хорошуна Л.П. 1995 года наличием параметра $\gamma \neq 1$. Параметр интегрально отображает микроструктурные особенности системы и определяется выражением для источника $T_{ip}(\mathbf{r})$. Случаю $\gamma = 1$ соответствует

$T_{ip}(\mathbf{r}) = \delta_{ip}\delta(\mathbf{r})$. Подстановкой вычисленных R_{jkrq} в формулу (5) получены модифицированные эффективные коэффициенты упругости

$$K^* = c_1K_1 + c_2K_2 - \frac{c_1c_2(K_1 - K_2)^2}{c_1K_2 + c_2K_1 + K^*\frac{1-\gamma}{\gamma} + \frac{4}{3\gamma}\mu^*},$$

$$\mu^* = c_1\mu_1 + c_2\mu_2 - \frac{c_1c_2(\mu_1 - \mu_2)^2}{c_1\mu_2 + c_2\mu_1 + \frac{\mu^*\left(\left(\frac{5}{2} - \gamma\right)K^* + 2\left(\frac{5}{3} - \gamma\right)\mu^*\right)}{K^* + 2\mu^*}}. \quad (7)$$

Функция γ содержит характерные масштабы структуры. При $\gamma = 1$ полученные эффективные коэффициенты согласуются с рядом существующих работ.

В результате применения метода условных моментов, базирующегося на функции Грина, в итоговых эффективных коэффициентах упругости интегрально учтена микроструктура системы. Основу данного раздела формирует статья [1].

В разделе 2.2. представлен новый формализм получения обобщенной производной. Для этого использован функционал энергии

$$E = \frac{1}{2} \int_V \sum_v \sigma_v f_v \partial_j (\varphi_v f_v) \partial_j (\varphi_v f_v) dr, \quad (8)$$

где $f_v(\mathbf{r})$ – индикаторная функция, характеризующая фазу v в точке, $v = 1, 2$. Если в точке находится фаза v , то $f_v(\mathbf{r}) = 1$, иначе имеем $f_v(\mathbf{r}) = 0$. Индикаторная функция неотделима от анализируемого поля $\varphi_v f_v$ и коэффициента переноса $\sigma_v f_v$. Анализируемым полем в силу аналогии может являться электрическое, тепловое, диффузионное. Акцент на рассмотрении конкретного поля не делаем, но используем обозначения, соответствующие электрическому полю. Исходная модель является стационарной изотропной линейной моделью.

Для производной от индикаторной функции при этом имеет место формула

$$\partial_j f_v = \int_{S_k} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j, \quad (9)$$

где S_k – внутренняя граница с номером k , \mathbf{x} – координата поверхности. Согласно формуле (9) каждой точке \mathbf{x} поверхности разрыва соответствует своя дельта-функция $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{x})$. Описана схема доказательства формулы (9).

В результате применения к функционалу (8) вариационного формализма и выполнения ряда операций получено уравнение переноса с модифицированным оператором для микронеоднородной двухфазной среды в виде

$$\nabla_j (\sigma \nabla_j \varphi) = 0,$$

$$\nabla_j \varphi(\mathbf{r}) = \partial_j \varphi(\mathbf{r}) + \sum_k \int_{S_k} [\varphi]_x \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j, \quad (10)$$

где обычная производная ∂_j заменена на обобщенную производную ∇_j . Запись $[\varphi]_x$ характеризует скачек поля на границе раздела фаз $[\varphi]_x = \varphi(\mathbf{x} + \mathbf{0}) - \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{0})$. Формула для обобщенной производной (10) следует из формулы $\partial_j(\varphi f) = \nabla_j \varphi$. Индикаторную функцию при обычной составляющей для обобщенной производной можно опустить по аналогии с Римановой производной, при написании которой опускается базисный вектор. Уравнение (10) дополнены заданием граничных условий на внутренних границах: $[j_i] = 0$, $[\varphi] = 0$ и внешней границе [1].

Таким образом, в результате варьирования функционала получено уравнение переноса с модифицированным оператором, где модификация связана с наличием производных, действующих на индикаторную функцию. Данная модификация определяет обобщенную производную.

Показано, что формализм обобщенной производной приводит к формулам Гаусса – Остроградского, Стокса, Ньютона – Лейбница.

Для нахождения эффективного коэффициента переноса σ^* произведено построение решения на осредненную функцию Грина $\langle G \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$, где $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$ – координаты, возникшие в результате осреднения. Функция Грина отображает отклик поля в среде на приложенное воздействие, характеризующий коллективное влияние фаз на распространяющееся по неоднородной системе поле.

Для нахождения осредненной функции Грина с учетом работ [Хорошун Л.П., 1995], [1] рассмотрен оператор $\sigma^* \hat{A} \nabla_j \nabla_j$, где оператор \hat{A} характеризует пространственное осреднение. Оператором $\sigma^* \hat{A} \nabla_j \nabla_j$ определяется искомая осредненная функция Грина $\langle G \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$, определяемая уравнением

$$\begin{aligned} & \partial_i^{(1)} \partial_i^{(1)} \langle G \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) + \\ & + \sum_k \frac{1}{V} \int_{S_k} \left[\partial_i^{(y)} G \right] (\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2) ds_i = \frac{1}{\sigma^*} \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2), \end{aligned} \quad (11)$$

где $\partial_i^{(1)}$ – обычная производная по координате \mathbf{R}_1 , $V = \frac{4}{3} \pi R^3$ – объем осреднения. Осреднение произведено по обеим координатам \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 . В подынтегральном выражении функция Грина осреднена по координате \mathbf{r}_2 , вектор \mathbf{y} выражает расстояние до поверхностей раздела фаз.

Для полной постановки задачи на осредненную функцию Грина дополним уравнение (11) условиями на внутренних границах: $\left[\sigma \partial_i^{(y)} G^{(y,2)} \right]_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} = 0$, $\left[G^{(y,2)} \right]_{\mathbf{y}=\mathbf{x}} = 0$ и условием на бесконечности $\langle G \rangle|_{\infty} = 0$.

Для построения решения интегро-дифференциального уравнения с разрывами (11) произведено преобразование суммы интегралов по поверхности $\sum_k \frac{1}{V} \int_{S_k} \left[\partial_i^{(y)} G \right] (\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2) ds_i$. Идея заключается в переходе от суммы последовательности границ в интеграл. Полученный результат при этом должен являться следствием сходящегося бесконечного в пределе ряда и выражать

осредненные статистически однородные и изотропные свойства гетерогенной структуры. При проведении выкладок учтено, что в силу последовательных переходов между фазами (фаза 1 переходит в фазу 2, затем фаза 2 переходит в фазу 1 и так далее) сумма является знакопеременной. Элементарным структурным элементом фазы 2 является шар с радиусом a . Совокупность переходов для внутренних границ преобразовывается на пары последовательно идущих поверхностей разрыва. Структура полагается статистически однородной и изотропной.

Итоговое уравнение на осредненную функцию Грина имеет вид

$$\begin{aligned} \partial_i^{(1)} \partial_i^{(1)} \langle G \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) - A^2 \langle G \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) &= \frac{1}{B\sigma^*} \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2), \\ A^2 &= \beta \varepsilon \frac{(\sigma_1 - \sigma_2)(c_1 b \sigma_1 - c_2 a \sigma_2) a^2}{4\pi B \sigma_1 \sigma_2 \Delta^5}, \\ B &= 1 + \frac{\beta a^2 (\sigma_1 - \sigma_2)(c_1 b \sigma_1 - c_2 a \sigma_2)}{12\pi \Delta^3 \sigma_1 \sigma_2}, \end{aligned} \quad (12)$$

где β – коэффициент формы ($\beta = 2\pi$), b – характерное расстояние для элементов фазы 2, $\Delta = a + b$, $\omega = \frac{3\varepsilon}{\Delta^2}$, ε – коэффициент [3], связанный с отношением масштаба Δ к масштабу пространственного осреднения R . Решение имеет вид потенциала Юкавы

$$\langle G \rangle(r) = -\frac{1}{4\pi B \sigma^*} \frac{1}{r} e^{-Ar}, \quad (13)$$

известного из квантовой электродинамики и физики плазмы тем, что этим потенциалом с физической точки зрения характеризуется переходный слой A^{-1} , вызванный экранированием зарядов. Зарядами в анализируемом случае гетерогенной среды являются дельта-функции в определении обобщенной производной, а их разные знаки вызваны чередующейся сменой фаз. Совокупность этих дельта-функций как раз и характеризует совокупность точек границ раздела фаз в гетерогенной среде. Безразмерный параметр B в решении (13) также является следствием конфигурации границ раздела фаз в гетерогенной среде и с точки зрения уравнения на функцию Грина (12) определяет эффективный заряд.

Полученный результат является следствием нового подхода к конфигурации интегралов по поверхности в уравнении на функцию Грина (11). Анализ этих интегралов представляет основную проблему теории смесей.

Результат (13) выражает решение задачи многих тел в гетерогенной среде и отображает коллективное влияние фаз на распространяющееся поле по системе.

Произведено получение эффективного модуля σ^* , отображающего искомую информацию о гетерогенной структуре и входящего в осредненные уравнения

$$\partial_i \langle j_i \rangle = 0, \quad \langle j_i \rangle = \sigma^* \partial_i \langle \varphi \rangle,$$

где $\langle j_i \rangle$ – осредненный поток, $\langle \varphi \rangle = c_1 \langle \varphi^1 \rangle + c_2 \langle \varphi^2 \rangle$, $\langle j_i \rangle = c_1 \langle j_i^1 \rangle + c_2 \langle j_i^2 \rangle$.

Для получения модуля σ^* применялся метод условных моментов. Итоговое выражение по вычислению эффективного модуля дается формулой

$$\sigma^* = \langle \sigma \rangle + c_1 c_2 (\sigma')^2 (1 + R(\mathbf{0})(\sigma^* - \sigma''))^{-1} R(\mathbf{0}), \quad (14)$$

где $\sigma' = \sigma_1 - \sigma_2$, $\sigma'' = c_1 \sigma_2 + c_2 \sigma_1$. Интегралы $R(\mathbf{0})$ получаются в результате применения условного осреднения и преобразования Фурье к построенному через функцию Грина решению и входят в соотношение $R_{ij}(\mathbf{k}) = R(\mathbf{k})\delta_{ij}$. С учетом найденной осредненной функции Грина (13) вычисление интегралов $R_{ij}(\mathbf{0})$ приводит к выражению

$$R_{ij} = -\frac{\gamma}{3} \frac{1}{\sigma^*} \delta_{ij}, \quad \gamma = \frac{1}{B} \left(1 - \frac{A^2}{\left(A + \frac{1}{\alpha c_1 a}\right)^2} \right). \quad (15)$$

Подставив результат (15) в формулу (14), получим эффективный коэффициент переноса

$$\sigma^* = c_1 \sigma_1 + c_2 \sigma_2 - \frac{c_1 c_2 (\sigma_1 - \sigma_2)^2}{c_1 \sigma_2 + c_2 \sigma_1 + \frac{3 - \gamma}{\gamma} \sigma^*}. \quad (16)$$

Найденный в рамках метода условных моментов эффективный коэффициент σ^* является следствием рассмотрения производных в обобщенном смысле, в результате которого имеем параметр $\gamma \neq 1$, определяемый выражением (15) и явно учитывающий характерные размеры фаз неоднородной системы (микроструктуру системы). В частном случае $A = 0, B = 1$ параметр $\gamma = 1$ и полученные эффективные коэффициенты согласуются с рядом существующих подходов. Случай $\gamma = 1$ характеризует пренебрежение границами раздела фаз (либо интегральным занулением их влияния на поле).

В разделе 2.3, по аналогии, проведена гомогенизация в вязкоупругих гетерогенных средах с учетом коллективного влияния границ. В качестве исходной модели использована стационарная изотропная модель линейной теории упругости (3). Обобщение на распространение вязкоупругого поля по гетерогенной среде сделано, базируясь на структурной идентичности уравнений линейной теории упругости и вязко-упругости [Кристенсен Р.М., 1982].

На основе модифицированной концепцией обобщенной производной оператора упругого линейного уравнения и проведенного осреднения сформулирована задача многих тел в гетерогенной среде на функцию Грина:

$$\begin{aligned} & \lambda_{ijml}^* \partial_j^{(1)} \partial_l^{(1)} \langle G_{mp} \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) + \\ & + \lambda_{ijml}^* \sum_k \frac{1}{V} \int_{S_k} \left[\partial_l^{(y)} G_{mp}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2) \right] ds_j = \delta_{ip} \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2). \end{aligned} \quad (17)$$

Для полной постановки задачи на осредненную функцию Грина уравнения (17) дополнены условиями на внутренних границах: $\left[\lambda_{ij\alpha\beta} \partial_\beta^{(y)} G_{\alpha p}(\mathbf{R}_1 + \right.$

$\mathbf{y}, \mathbf{R}_2) \Big] = 0$, $[G_{mp}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2)] = 0$ и условием на бесконечности $\langle G_{mp} \rangle \Big|_{\infty} = 0$.
Условие $[G_{mp}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2)] = 0$ учтено при выводе уравнения (17).

Для построения решения интегро-дифференциального уравнения с разрывами (17) следует провести преобразование члена $\lambda_{ijml}^* \sum_k \frac{1}{V} \int_{S_k} [\partial_l^{(y)} G_{mp}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2)] ds_j$. В работе [2] применительно к исследованию электрических свойств гетерогенной среды представлен соответствующий алгоритм действий, основная идея которого заключается в переходе от суммы последовательности внутренних границ в интеграл.

Основываясь на работе [2], приведено итоговое дифференциальное уравнение на осредненную функцию Грина

$$\begin{aligned} (\lambda_{ijml}^* + D_{ijml}) \partial_j^{(1)} \partial_l^{(1)} \langle G_{mp} \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) - \omega D_{ilm} \langle G_{mp} \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \\ = \delta_{ip} \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2), \\ D_{ij\alpha\beta} = D_1 \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} + 2D_2 I_{ij\alpha\beta}, \\ D_1 = \frac{\beta}{6\pi} \frac{a^2}{\Delta^3} \left(K^* - \frac{2}{3} \mu^* \right) \frac{(K_1 - K_2)(c_1 b K_1 - c_2 a K_2)}{K_1 K_2}, \\ D_2 = \frac{\beta}{6\pi} \frac{a^2}{\Delta^3} \mu^* \frac{(\mu_1 - \mu_2)(c_1 b \mu_1 - c_2 a \mu_2)}{\mu_1 \mu_2}. \end{aligned} \quad (18)$$

Проведенные операции по получению уравнения (18) концептуально идентичны работе [2]. Отличие технического плана связано с тензорным видом уравнения (17), что отражается при преобразовании члена $\lambda_{ijml}^* [\partial_l^{(y)} G_{mp}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2)]$ на основе граничного условия $[\lambda_{ij\alpha\beta} \partial_\beta^{(y)} G_{\alpha p}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2)] = 0$.

С учетом представленных гипотез найдено решение этой задачи, характеризующее переходный слой и отображающее коллективное взаимодействие фаз при распространении вязкоупругого поля по гетерогенной среде. Ответ имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \langle G_{ip} \rangle(\mathbf{r}) = - \frac{1}{4\pi} \frac{\delta_{ip}}{\mu^* + D_2} \frac{e^{-\delta_1 r}}{r} + \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\omega(D_1 + 4D_2)} \partial_i \partial_p \frac{e^{-\delta_1 r} - e^{-\delta_2 r}}{r}, \\ \delta_1^2 = \frac{\omega(D_1 + 4D_2)}{\mu^* + D_2}, \quad \delta_2^2 = \frac{\omega(D_1 + 4D_2)}{K^* + \frac{4}{3} \mu^* + D_1 + 2D_2}. \end{aligned} \quad (19)$$

С учетом найденного решения для осредненной функции Грина в рамках метода условных моментов получены эффективные коэффициенты упругости

$$K^* = c_1 K_1 + c_2 K_2 - \frac{c_1 c_2 (K_1 - K_2)^2}{c_1 K_2 + c_2 K_1 + \frac{4}{3} \gamma_2 \mu^*}, \quad (20)$$

$$\mu^* = c_1\mu_1 + c_2\mu_2 - \frac{c_1c_2(\mu_1 - \mu_2)^2}{c_1\mu_2 + c_2\mu_1 + \gamma_2 \frac{\mu^* \left(\frac{3}{2}\gamma_1 K^* + \left(\frac{7}{3}\gamma_2 - \gamma_1 \right) \mu^* \right)}{\gamma_1 K^* + \left(\frac{8}{3}\gamma_2 - \frac{2}{3}\gamma_1 \right) \mu^*}},$$

интегрально учитывающие микроструктуру системы (физические свойства и характерные размеры фаз) в явном виде. Найденное решение выражает решение задачи многих тел в гетерогенной среде, сформулированной на основе формализма обобщенной производной. Данный раздел сформирован статьей [3].

Выводы по главе 2. На основе индикаторной функции, входящей в функционал внутренней энергии, и с использованием вариационного исчисления получена формула для обобщенной производной, учитывающая влияние внутренних границ гетерогенной среды, разделяющих фазы с разными физическими свойствами, на распространение поля по ней и приводящая к интегро-дифференциальному уравнению переноса. Использование концепции обобщенной производной приводит к формулам пространственной теоремы осреднения в рамках теории смесей. На основе введенного формализма сформулирована задача многих тел на функцию Грина для гетерогенной среды и найдено ее решение, отображающее коллективное влияние фаз на распространение поля по гетерогенной среде. Решение интегро-дифференциального уравнения с разрывами на осредненную функцию Грина основано на анализе соответствующего оператора и имеет вид потенциала Юкавы, характеризующего с физической точки зрения переходный слой, вызванный экранированием зарядов. Полученные эффективные коэффициенты переноса интегрально учитывают микроструктуру системы (упругие, вязкоупругие, электрические свойства фаз и характерные размеры) в явном виде и согласуются в частных случаях с существующими подходами.

В главе 3 представляется получение и анализ эффективных коэффициентов линейной теории упругости при произвольной размерности рассматриваемого пространства с учетом формализма обобщенной производной. Полученные эффективные коэффициенты анализируются на всем интервале объемной концентрации при существенно различающихся упругих свойствах фаз. Строятся асимптотические решения, на основе которых исследуются свойства несущей фазы и структурного фазового перехода. Анализируется переход от несвязного распространения поля по системе к макроскопически связному и существование при этом признаков фазовых переходов.

В качестве исходной модели использована стационарная изотропная модель линейной теории упругости в форме

$$\begin{aligned} \nabla_j \sigma_{ij} = 0, \quad \sigma_{ij} = \lambda_{ij\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta}, \quad \varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (\nabla_\beta u_\alpha + \nabla_\alpha u_\beta), \\ \nabla_j (\lambda_{ij\alpha\beta} \nabla_\beta u_\alpha) = 0, \end{aligned} \quad (21)$$

$$\lambda_{ij\alpha\beta} = \left(K - \frac{(n-1)}{n} \mu \right) \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} (n-1) \mu (\delta_{i\alpha} \delta_{j\beta} + \delta_{i\beta} \delta_{j\alpha}),$$

где параметр n характеризует размерность исследуемого пространства, в котором исследуются поля. Тензор $\lambda_{ij\alpha\beta}$ имеет такой вид, чтобы девиаторная составляющая, характеризуемая сдвиговым модулем μ , имела нулевой след, и объемный модуль K определялся шаровой составляющей. При этом учитываются соотношения для символов Кронекера δ_{ij} , $\delta_{ij} \delta_{ij} = n$. Система (21) дополнена граничными условиями на бесконечно удаленной границе и на конфигурации внутренних границ [2]. В системе уравнений (21) производная ∇_α характеризует обобщенную производную (1).

На основе метода условных моментов из исходной модели (21) получен осредненный закон Гука $\langle \sigma_{ij} \rangle = \lambda_{ij\alpha\beta}^* \langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle$, содержащий в эффективном тензоре упругости $\lambda_{ij\alpha\beta}^*$ искомые эффективные коэффициенты K^* , μ^* .

Члены R_{jkrq} при проведении вычислений имеют вид

$$R_{jkrq} = -\gamma \frac{1}{n} \frac{2}{n-1} \frac{1}{\mu^*} I_{jkrq} + \gamma \frac{1}{n^2 + 2n} \frac{\frac{2}{n-1} K^* + \frac{n-2}{n} \mu^*}{\mu^* \left(K^* + \frac{(n-1)^2}{n} \mu^* \right)} (\delta_{jk} \delta_{pq} + 2I_{jkrq}).$$

При получении членов R_{jkrq} проведены выкладки по нахождению функции Грина (с учетом действующих на нее вторых производных) в пространстве размерности n .

Итоговые эффективные коэффициенты имеют вид

$$\begin{aligned} K^* &= c_1 K_1 + c_2 K_2 - \frac{c_1 c_2 (K_1 - K_2)^2}{c_1 K_2 + c_2 K_1 + K^* \frac{1-\gamma}{\gamma} + \mu^* (n-1) \frac{n-1}{\gamma n}} \\ \mu^* &= c_1 \mu_1 + c_2 \mu_2 - \frac{c_1 c_2 (\mu_1 - \mu_2)^2}{c_1 \mu_2 + c_2 \mu_1 + \frac{\mu^* \left(\left(\frac{n}{2\gamma} + \frac{1-\gamma}{\gamma} \right) K^* + \frac{(n-1)}{2\gamma} \left(n+1 - 2\gamma - \frac{2}{n} \right) \mu^* \right)}{K^* + (n-1) \mu^*} \end{aligned} \quad (22)$$

При $\gamma = 1$ и $n = 3$ полученные эффективные коэффициенты согласуются с результатами в рамках ряда существующих методов.

Полученные эффективные коэффициенты анализируются на всем интервале объемной концентрации при существенно различающихся упругих свойствах фаз. Построены асимптотические решения, предсказывающие несущую фазу и структурный фазовый переход. При увеличении относительной разности упругих коэффициентов фаз $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$ эффективные коэффициенты μ^* , K^* по обе стороны от критической концентрации c_{2crit} стремятся к найденным асимптотическим формулам. Для произвольной эффективной размерности n и при $\gamma = 1$ условие на критическую концентрацию имеет вид

$$(n+1)c_{2crit} = 2. \quad (23)$$

При $n = 3$ имеем полученное значение $c_{2crit} = 0.5$. При $n = 2$ следует $c_{2crit} = 2/3$, $n = 1$ дает $c_{2crit} = 1$. Эффективные коэффициенты (22) отображают необ-

ходимость увеличения концентрации проводящей фазы для связанного распространения поля по ней в гетерогенной среде при уменьшении размерности рассматриваемого пространства, в котором распространяется поле. То есть при меньшем числе внутренних связей нужна большая концентрация проводящей фазы.

Получен параметр $\varepsilon \sim \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}$, выражающий -окрестность критической точки.

Исходя из проведенной оценки, показано, что в критической точке $\mu^* \sim \sqrt{\mu_1 \mu_2}$. И при переходе через критическую точку эффективный модуль μ^* совершает существенно увеличивается $\mu^* \ll \sqrt{\mu_1 \mu_2}$ до значения $\mu^* \gg \sqrt{\mu_1 \mu_2}$. Согласно проведенным выкладкам по разные стороны от критической точки при $n = 3$ имеют место разные асимптотики, меняющиеся от $\mu^* \sim \mu_1 (c_{2crit} - c_2)^{-1}$ до $\mu^* \sim \mu_2 (c_2 - c_{2crit})^1$.

В случае $\gamma = 1$ и $n = 3$ при концентрации $c_2 = c_{2crit} = 0,5$ начинает происходить макроскопически связанное распространение исследуемого поля упругости по фазе с параметрами K_2, μ_2 в структуре (эффект перколяции). Описанное поведение иллюстрирует рис. 1.

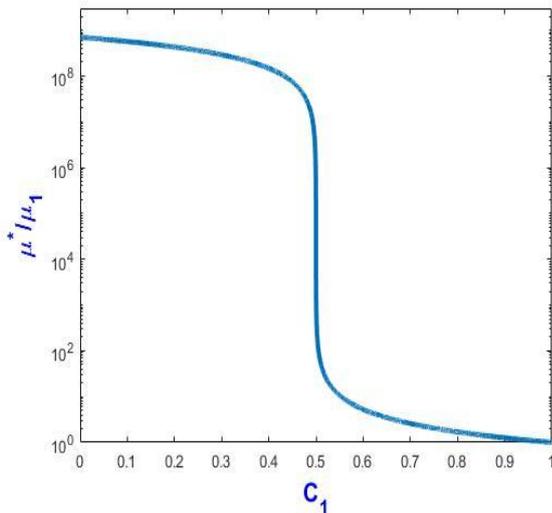


Рис 1. График зависимости эффективного модуля сдвига, нормированного на модуль сдвига фазы 1 от объемной концентрации фазы 1.

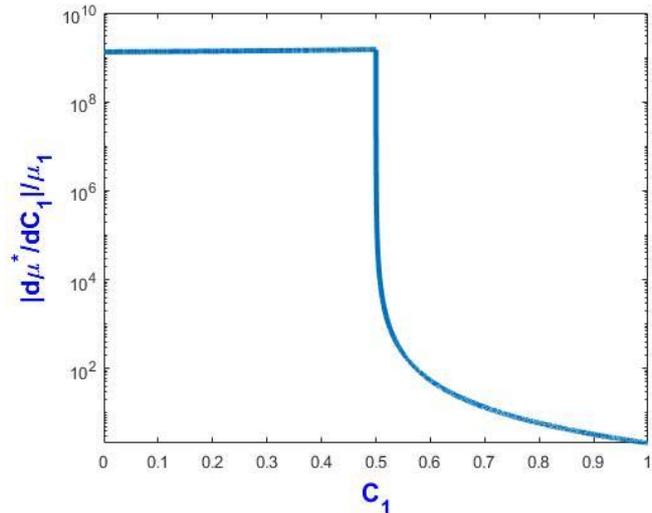


Рис. 2. Поведение модуля производной эффективного сдвигового коэффициента $\left| \frac{d\mu^*}{dc_1} \right|$, нормированного на модуль μ_1 в зависимости от объемной концентрации фазы 1

На рис. 2 отражено поведение модуля производной эффективного сдвигового коэффициента $\left| \frac{d\mu^*}{dc_1} \right|$, нормированного на модуль μ_1 в зависимости от концентрации фазы c_1 при $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$.

Исходя из представленного анализа, при конечном отношении параметров упругости фаз $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$ полученные эффективные коэффициенты K^*, μ^* характеризуются не только существенным изменением своих значений в малой -окрестности критической точки c_{2crit} , но и резким изменением в пове-

дении первых производных от соответствующих эффективных коэффициентов в этой ε -окрестности. Найденная информация о фазовом переходе как первого рода, так и второго отражает нетривиальное поведение эффективных коэффициентов в случае $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$. Наличие малой, но ненулевой ε -окрестности при анализе эффективных коэффициентов возникает как следствие конечного отношения упругих параметров фаз и отображает переходное состояние в поведении структуры.

На основе проведенного анализа дается сопоставление с результатами в рамках существующих подходов и с имеющимися данными по коллоидам, гранулированным средам и суспензиям. Приводится сопоставление с работой [Радин С., 2008], в которой исследуется случайная плотная упаковка сфер. Данная упаковка представляется как состояние гранулированной среды, соответствующее структурному фазовому переходу, проявляющему признаки фазовых переходов первого и второго рода. Указывается на структурный фазовый переход в коллоидах, отображающий изменение сопротивления нагрузке и вклад в упорядоченность структуры (структурное изменение). Основу данной главы формирует статья [4].

Выводы по главе 3. Произведено обобщение эффективных коэффициентов на случай заданной размерности пространства с учетом формализма обобщенной производной. Из анализа найденных эффективных коэффициентов, примененного для гетерогенных сред с существенно различающимися свойствами фаз, найдена критическая точка с соответствующей ей окрестностью и разное асимптотическое поведение по обе стороны от окрестности критической точки. Предсказано наличие несущей фазы и структурного фазового перехода (перколяции). Структурный фазовый переход отображает переход фазы от невязного распространения поля по системе к макроскопически связному.

В главе 4 используются результаты полученной теории для сопоставления с экспериментальными данными и обоснования способа создания объемного изделия на основе гетерогенного материала с заданными физико-механическими свойствами и составом. В рамках анализа гетерогенного материала, полученного методом холодного газодинамического напыления с последующей лазерной обработкой, приводится математическая модель, учитывающая процесс растворения и протекание химической реакции. Проводится сопоставление с экспериментальными данными, включающими сравнение с композитными материалами, пористыми материалами, фильтрационными свойствами, суспензиями.

В разделе 4.1 исследуются упругие свойства материала, полученного методом холодного газодинамического напыления с лазерной обработкой. Изучаются причины уменьшения размера частиц карбида бора B_4C под действием лазерного луча и химический состав материала, в котором содержится “потерянный” материал частиц B_4C . Об изменении микроструктуры исследуемого материала свидетельствует уменьшение в 2–3 раза размера частиц B_4C вслед-

ствии фрагментации под действием лазерного луча [Фомин В.М., и др., 2019]. Одной из причин уменьшения размера частиц B_4C является наличие химических реакций с Ti из подложки, что приводит к изменению состава керамики. По-видимому, основной реакцией является экзотермическая реакция $3Ti + B_4C = TiC + 2TiB_2$, протекающая при температуре, равной $900^\circ C$, что меньше температуры плавления Ti ($1700^\circ C$) и B_4C ($2350^\circ C$). Еще одной причиной уменьшения размеров частиц карбида бора является их растворение в расплавленных металлах Ni и Ti .

Разработана модель, учитывающая процесс растворения и наличие химической реакции $3Ti + B_4C = TiC + 2TiB_2$. Уравнения в нуль-мерном приближении, описывающие химическую реакцию, имеют вид

$$\frac{dn_{B_4C}}{dt} = -\gamma n_{B_4C} - kn_{Ti}^3 n_{B_4C}, \quad \frac{1}{3} \frac{dn_{Ti}}{dt} = -kn_{Ti}^3 n_{B_4C}, \quad (24)$$

где n_{B_4C} – концентрация частиц B_4C в твердом состоянии, n_{Ti} – концентрация в подложке непрореагировавшего Ti ; k – константа химической реакции; параметр γ определяет скорость растворения. В математической модели (24) предполагается, что расплавленная часть B_4C прореагировала с Ti либо растворилась. Параметры γ , k считаются постоянными (в общем случае они зависят от площади контакта компонент, насыщения приграничных слоев и от температуры).

На основе проведенных выкладок и с использованием выражения для концентрации частиц в единице объема n_{B_4C} , а также считая $c_1(t) = V_0 n_{B_4C}(t)$, $c_{10} = n_0 V_0$, где V_0 – объем частицы B_4C , получена формула

$$c_1(t) = c_{10} \exp(-\Gamma t), \quad (25)$$

определяющая объемную концентрацию B_4C . Параметр Γ содержит неизвестные коэффициенты γ и k , которые определяются с использованием эксперимента по значениям концентраций и размеров частиц B_4C в начальной и конечной структурах. Выражение для объемной концентрации B_4C при характерном времени процесса Δt можно представить в виде $c_1(\Delta t) = \frac{4}{3} \pi R^3 M_1$, где M_1 – концентрация частиц B_4C , вычисленная в предположении, что они имеют форму шаров радиусов R . Формула для начальной объемной концентрации B_4C имеет вид $c_{10} = \frac{4}{3} \pi R_0^3 M_0$. С учетом сказанного выше и соотношения (25) получаем равенство $\frac{4}{3} \pi R_0^3 M_0 \exp(-\Gamma \Delta t) = \frac{4}{3} \pi R^3 M_1$, из которого выражается параметр Γ .

С использованием приведенных выше результатов проведены оценки упругих свойств материала, в котором исходный B_4C перешел в соединение с титаном $TiC + 2TiB_2$ и исходный B_4C растворился в Ni .

В качестве исходной модели, позволяющей определить упругие свойства гетерогенного материала, использована стационарная изотропная модель ли-

нейной теории упругости (3). При этом эффективные коэффициенты (22) рассмотрены при $n = 3$, $\gamma = 1$.

Для матричной никелевой фазы имеют место приближения $\mu^* \sim \mu_2 \ll \mu_1$ ($\mu_2/\mu_1 \sim 0.1$), $K^* \sim K_1, K_2 \gg \mu^* \sim \mu_2$, где индексу 1 соответствует фаза включений (карбид бора), индексу 2 – связующая фаза (никель). С учетом этого эффективные модули упругости сводятся к приближенным выражениям

$$\mu^*(t) = \frac{\mu_2}{1 - \frac{10}{3} \pi R_0^3 M_0 \exp(-\Gamma t)}, K^*(t) = \frac{K_1 K_2}{K_1 + \frac{4}{3} \pi R_0^3 M_0 \exp(-\Gamma t) (K_2 - K_1)}. \quad (26)$$

Эффективный сдвиговый модуль при малых концентрациях карбида бора c_1 имеет вид, аналогичный формуле Эйнштейна для вязкости суспензий. При $c_1 = 0.2$ имеем $\mu^* = 2\mu_2$. Объемный модуль упругости соответствует нижней границе вилки Хилла или, что эквивалентно, K^* соответствует формуле обратной теории смесей. В изучаемом материале удается получить объемную концентрацию карбида бора $c_1 \approx 0,1 \div 0,2$. При $c_1 \approx 0,1 \div 0,2$ происходит увеличение модуля сдвига практически в два раза.

Приведены замечания. Первое замечание отображает оценку изменения упругих свойств Ni с растворенным в нем В₄С с позиции теории смесей. Причем объемные концентрации являются функциями времени (анализируемая модель в данном случае отображает смену стационарных состояний). Второе замечание связано с оценкой изменения модулей модифицированного никеля по формулам обратной теории смесей. Полученные эффективные коэффициенты при этом не содержат информации о существенном изменении упругих свойств исходного никеля. Третье замечание связано со случаем полного химического перехода исходного карбида бора в соединения TiB₂ и TiC, при котором исследуемый гетерогенный материал имеет три фазы. Промежуточные состояния являются следствием подаваемой на исходную систему энергии, что дает возможность контролировать состав и свойства конечной структуры.

Для понимания того, сколько тепла следует сообщить в систему, чтобы получить желаемую концентрацию частиц В₄С и продуктов реакции (т.е. фактически получить структуру с необходимыми свойствами), рассмотрена оценочная формула $E = \frac{P}{vh}$, где E [Дж/мм³] выражает количество энергии, которое поступило в единицу объема системы, P [Дж/с] – мощность лазера, v [мм²/с] – скорость сканирования, связанная с перемещением лазерного пятна определенной площади, h [мм] – толщина слоя.

Таким образом, разобрана математическая модель, в которой учитываются процесс растворения частиц В₄С и наличие химической реакции. Показана возможность управления упругими свойствами гетерогенного материала, обладающего развитой микроструктурой, отличающейся от традиционных гетерогенных сред с механической смесью фаз, что является следствием протекания химических реакций и процесса растворения. Основная информация, приведенная в разделе, отображена в статье [5].

В разделе 4.2 впервые представлено предсказание упругих свойств гетерогенного материала на основе титанового сплава Ti64 и борида титана TiB, полученного методом управляемого лазерного воздействия. Анализ проведен в рамках метода условных моментов. Коэффициенты упругости исследуемых фаз титанового сплава и борида титана отличаются менее чем на порядок. Исходя из этого определяемые по формуле (22) эффективные коэффициенты сводятся к упрощенным выражениям (вилки Хилла и Хашина-Штрикмана).

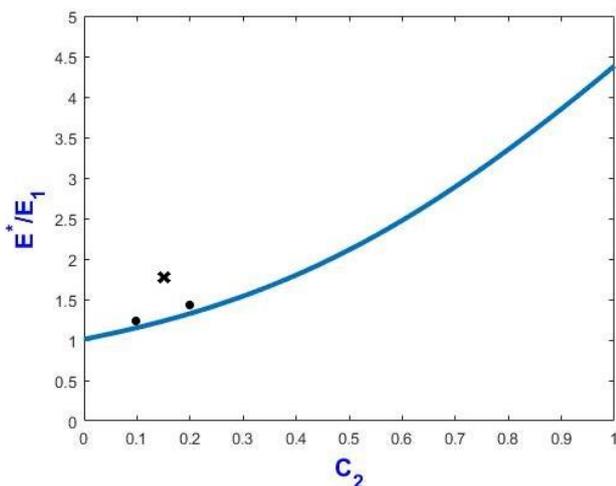


Рис. 3. Зависимость эффективного модуля Юнга, нормированного на модуль Юнга Ti64 от объемной концентрации TiB.

Точки – данные работы [Morsi K., Patel V. V., 2007], крестом обозначен модуль Юнга, полученный в с помощью индентирования.

На рис. 3 показана зависимость модуля Юнга для эффективной среды E^* , нормированного на модуль Юнга Ti64 в зависимости от объемной концентрации TiB.

Согласно данным источника [Morsi K., Patel V.V., 2007] при концентрации TiB $c_2 = 0,1$ эффективный модуль Юнга для получаемого материала вырос примерно на 20%, а при $c_2 = 0.2$ эффективный модуль Юнга вырос примерно на 45%. Используемые формулы для соответствующих концентраций предсказывают возрастание на 15% и 33% процентов соответственно. Отклонение интерпретируется тем, что в формулах (22) при $\gamma = 1$ не учитывается микроструктурная особенность фазы TiB, которая представляет собой вискерсы. Но согласно приведенным в настоящей работе экспериментальным данным в анализируемой структуре вискерсы не образуются.

Указано, что если в формулы (22) при $\gamma = 1$ подставить коэффициенты упругости, полученные в результате проведения индентирования, то при концентрации $c_2 = 0.15$ модуль Юнга E^* увеличится примерно на 12% относительно значения модуля Юнга для матрицы Ti64 и получится результат $E^* = 197$ ГПа. Соответствующий результат близок к значению 200 ГПа, следующему из проведенного индентирования.

Экспериментальные значения удовлетворительно согласуются с полученными данными теоретического предсказания упругих свойств гетерогенной среды в рамках метода условных моментов. Основная информация, приведенная в разделе, отображена в статье [6].

В разделе 4.3 диссертации найденные результаты обобщены на вязкоупругие свойства гетерогенной среды и проведены сопоставления с экспериментальными данными для упругих и вязкоупругих характеристик.

В рамках метода условных моментов получены осредненные уравнения, содержащие информацию о поведении как среды в целом, так и каждой фазы отдельно. На основании данных уравнений исследовано фильтрационное поведение. В рамках вязкоупругого подхода получен закон фильтрации Дарси:

$$\langle v_i^1 \rangle = -\frac{k}{\eta_1} p_{,i}, \quad k = \frac{2}{3} \frac{1}{\alpha^2 c_2} \frac{\eta_1}{\eta^*}, \quad \eta^* = \frac{\eta_1}{1 - \frac{5}{2} c_2}, \quad (27)$$

где η^* – эффективный коэффициент сдвиговой вязкости, α^{-1} – осредненный масштаб неоднородности, c_2 – объемная концентрация твердой фазы. Видно, что при увеличении концентрации твердой фазы c_2 скорость падает (при том же градиенте давления); вследствие обратной зависимости средней скорости жидкой фазы от эффективной сдвиговой вязкости последняя увеличивается при увеличении концентрации твердой фазы c_2 , что ведет к уменьшению скорости фильтрации; при уменьшении масштаба неоднородности α^{-1} скорость фильтрации уменьшается. При концентрации твердой фазы $c_2 > 0.4$ фильтрация для данной модели прекращается.

В рамках вязкого подхода (предел больших частот) коэффициент проницаемости принимает следующий вид:

$$k = \frac{2}{3} \frac{\zeta^* + \frac{11}{6} \eta^*}{\alpha^2 c_2 \left(\zeta^* + \frac{4}{3} \eta^* \right)} \frac{\eta_1}{\eta^*}, \quad \zeta^* = \frac{\frac{4}{3} \eta^* c_2 + \zeta_1}{c_1}, \quad (28)$$

где эффективные коэффициенты вязкости η^* , ζ^* идентичны по структуре эффективным коэффициентам упругости (22). Коэффициент проницаемости получился зависимым от соотношения вязкостей ζ_1/η_1 . При концентрации твердой фазы $c_2 > 0.5$ фильтрация для данной модели становится невозможной, т.к. эффективные свойства системы становятся пропорциональными вязкости твердой фазы.

Таким образом, из анализа осредненных уравнений с эффективными коэффициентами обоснован структурный вид закона фильтрации Дарси с коэффициентом проницаемости, отражающим микроструктуру среды. Исходя из анализа эффективных коэффициентов, выделены условия на существование каркаса и связности пор.

На основе формулы (28) проведено сравнение с экспериментальными данными источника [Дульнев Г.Н., Новиков В.В., 1991, с. 88] по определению зависимости коэффициента проницаемости $k = k(c_1)$ от концентрации пор. Рассмотрено три случая относительно диаметра волокон: $d = 20, 40, 70$ мкм. На рис. 4 представлена соответствующая зависимость.

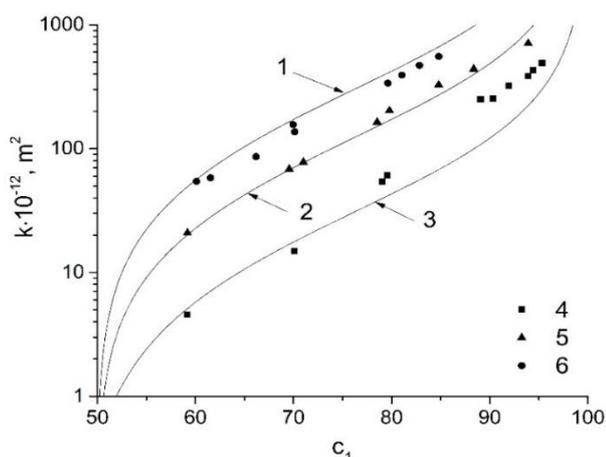


Рис. 4. Проницаемость k медных волокнистых материалов для жидкости в зависимости от концентрации пористости c_1 .

Расчет: $d = 70$ (1), 40 (2), 20 (3) мкм; эксперимент: $d = 70$ (4), 40 (5), 20 (6) мкм [Дульнев Г.Н., Новиков В.В., 1991, с. 88].

Приведенное сопоставление теории (для высокопористых сред) с экспериментом показывает неплохое согласование, что оправдывает используемую однородную и изотропную стохастичность структуры.

Проведено сравнение с экспериментом из статьи [Chong J.S., 1971], где исследуется гетерогенная двухфазная среда, представляющая собой суспензию, состоящую из стекла и полиизобутилена. Хорошее согласование с экспериментом имеется до концентрации включений $c_2 \cong 0,4$. В модели вязкоупругости структурный фазовый переход происходит при концентрации $c_2 = 0,4$, в модели вязкости при концентрации $c_2 = 0,5$, в эксперименте при $c_2 \cong 0,6$.

Ссылаясь на экспериментальные данные работы [Дульнев Г.Н., Новиков В.В., 1991, с. 216], представлена зависимость эффективного модуля Юнга, нормированного на модуль Юнга эпоксидной смолы от концентрации наполнителя. Получено хорошее согласование с экспериментом.

Проведено сравнение с данными работы [Chen L.Y. et al., 2015], в которой исследуется наноккомпозит с включением SiC в матрицу Mg_6Zn . Указано, что для гетерогенных сред, образованных микровключениями с несильно отличными физическими параметрами, получается хорошее совпадение теории и эксперимента.

Проведено сравнение с экспериментом из статьи [Moshev V.V., Kozhevnikova L.L., 2000], где исследуется гетерогенный двухфазный материал, состоящий из резины и эпоксидной смолы. Указано, что предельная концентрация в эксперименте не превышает отметки 0,5. Согласно изложенной теории в случае $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$ концентрация 0,5 является пределом стохастического распределения — точкой структурного фазового перехода в механических смесях. Согласно [Moshev V. V., Kozhevnikova L.L., 2000], начальный угол наклона составляет 2,5. В теории получается такой же результат.

Выводы по главе 4. На основе разработанной математической модели, учитывающей процесс растворения и протекание химической реакции, показано, что итоговое состояние гетерогенного материала есть следствие подаваемой на исходную систему энергии, что дает возможность контролировать состав и свойства конечной структуры. На основе анализа осредненных уравнений ме-

тодом условных моментов, с учетом анализа эффективных коэффициентов, представлено нахождение структурного вида коэффициента пропорциональности (для высокопористых сред) в законе Дарси, отражающего микроструктуру среды. Проведенное сравнение полученных формул с экспериментальными данными показывает удовлетворительное согласование.

В заключении подводятся итоги диссертационного исследования, излагаются его основные результаты:

1. На основе индикаторной функции, входящей в функционал внутренней энергии, и с использованием вариационного исчисления получена формула для обобщенной производной, учитывающая влияние внутренних границ гетерогенной среды, разделяющих фазы с разными физическими свойствами, на распространение поля по ней и приводящая к интегро-дифференциальному уравнению переноса.

2. Использование концепции обобщенной производной приводит к формулам пространственной теоремы осреднения в рамках теории смесей.

3. На основе введенного формализма сформулирована задача многих тел на функцию Грина для гетерогенной среды и найдено ее решение, отображающее коллективное влияние фаз на распространение поля по гетерогенной среде. Решение интегро-дифференциального уравнения с разрывами на осредненную функцию Грина основано на анализе соответствующего оператора и имеет вид потенциала Юкавы, характеризующего с физической точки зрения переходный слой, вызванный экранированием зарядов.

4. Полученные эффективные коэффициенты переноса обобщены на случай заданной размерности пространства и интегрально учитывают микроструктуру системы (упругие, вязкоупругие, электрические свойства фаз и характерные размеры) в явном виде, и согласуются в частных случаях с существующими подходами.

5. Из анализа найденных эффективных коэффициентов, примененного для гетерогенных сред с существенно различающимися свойствами фаз, предсказана несущая фаза и структурный фазовый переход (перколяция).

6. На основе разработанной математической модели, учитывающей процесс растворения и протекание химической реакции, показано, что итоговое состояние гетерогенного материала есть следствие подаваемой на исходную систему энергии, это дает возможность контролировать состав и свойства конечной структуры.

7. На основе анализа осредненных уравнений методом условных моментов, с учетом анализа эффективных коэффициентов, представлено нахождение структурного вида коэффициента пропорциональности (для высокопористых сред) в законе Дарси, отражающего микроструктуру среды.

8. Проведенное сравнение полученных формул с экспериментальными данными показывает удовлетворительное согласование.

Публикации автора по теме исследования

1. Мишин А.В. Обобщенная производная и ее использование для анализа микроструктуры гетерогенной среды // Сибирский журнал индустриальной математики. 2021. Т. 24, № 4. С. 79–96.
2. Мишин А.В. Учет обобщенной производной и коллективного влияния фаз на процесс гомогенизации // Сибирский журнал индустриальной математики. 2022. Т. 25, № 4. С. 86–98.
3. Мишин А.В. Проведение гомогенизации в вязкоупругих гетерогенных средах с учетом коллективного влияния границ // Сибирский журнал индустриальной математики. 2023. Т. 26, № 1. С. 1–7.
4. Мишин А.В., Фомин В.М. Анализ поведения гетерогенных сред с существенно различающимися физическими свойствами с учетом эффективной размерности пространства и формализма обобщенной производной // Прикладная математика и механика. 2022. Т. 86, № 4. С. 551–570.
5. Мишин А.В., Фомин В.М. Исследование упругих свойств материала, полученного методом холодного газодинамического напыления с лазерной обработкой // Прикладная механика и техническая физика. 2021. Т. 62, № 6. С. 89–96.
6. Фомин В.М., А.В. Мишин, А.А. Голышев, А.Г. Маликов, А.М. Оришич, А.А. Филиппов, Т.А. Брусенцева. Создание гетерогенного материала на основе титанового сплава и борида титана методом управляемой лазерной обработки // Прикладная механика и техническая физика. 2021. Т. 62, № 5. С. 58–67.
7. Mishin A.V. Effective coefficients viscosity of the liquid with solid particles // International Conference on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR 2018) (Russia, Novosibirsk, August 13–19, 2018): AIP Conference Proceedings. 2018. Vol. 2027. Art. 030157. 7 p. DOI:10.1063/1.5065251.
8. Mishin A.V. Justification of the asymptotic behavior of the filtration theory regimes by the method of conditional moment // 16th All-Russian Seminar with International Participation on Dynamics of Multiphase Media, DMM 2019 (Russia, Novosibirsk, 30 Sept.–5 Oct. 2019): Journal of Physics; Conference Series. 2019. Vol. 1404, № 1. Art. 012033. 7 p. DOI: 10.1088/1742-6596/1404/1/01203.
9. Мишин А.В. Различные методы осреднения гетерогенных сред. Новосибирск. Редакционно-издательский центр НГУ, 2023. – 227 с.

Ответственный за выпуск А.В.Мишин

Подписано в печать 09.01.2023
Формат бумаги 60×84/16. Усл. печ. л. 1,6
Уч.-изд. л. 1.0. Тираж 100 экз. Заказ №

Отпечатано в типографии ООО «Параллель»
630090, Новосибирск, ул. Институтская, 4/1