Одеський державний екологічний університет
Міністерство освіти і науки України
Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова
Національної академії наук України

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Співак Андрій Ярославович

УДК 538.9:539.215

ДИСЕРТАЦІЯ

Структуризація та динамічні процеси в багаточастинкових мікро-механічних системах під впливом зовнішніх збурень

01.04.02 – теоретична фізика
природничі науки (104 – фізика та астрономія)

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело
_________ А.Я. Співак

Науковий керівник: Герасимов Олег Іванович
доктор фіз.-мат. наук, професор

Одеса – 2021

АНОТАЦІЯ

Співак А.Я. Структуризація та динамічні процеси в багаточастинкових мікро-механічних системах під впливом зовнішніх збурень – Одеський державний екологічний університет, Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ, 2021.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика (природничі науки,104 – фізика та астрономія). – Рукопис.

Досліджуються багаточастинкові мікро-механічні (гранульовані) системи, що формують структуровані власні стани та можуть здійснювати переходи проміж ними які відбуваються під впливом зовнішніх збурень. Модельний розгляд і безпосередній фізичний експеримент свідчать про існування в них квазістаціонарних станів, в яких втрати енергії за рахунок непружних взаємодій скомпенсовані її прибутком внаслідок різного типу зовнішніх збурень. Існування таких станів формально дозволяє застосовувати у їх околі відомі методи статистичної фізики для вивчення структури та окремих динамічних властивостей. Робота присвячена розробці таких моделей та алгоритмів їх застосувань у дослідженнях структури та окремих динамічних процесів для гранульованих матеріалів, які знаходяться у спеціальних умовах (збурення, конфайнменту, та ін.). Показано, наприклад, що адаптоване застосування теорії фазових переходів Гінзбурга-Ландау для дослідження кінетики компактизації у гранульованих матеріалах, свідчить про багато параметричний характер ущільнення із довільного початкового до стану з максимально можливим випадковим характером впакування. Порівняння отриманих даних із результатами експериментів вказує на фракційний характер кінетики відповідних релаксаційних процесів. Запропоновано оригінальну комплексну модель бі-дисперсної суміші на базі теоретичних побудувань Кірквуда-Баффа та Карнахана-

Старлінга, яка дозволяє в рамках єдиного підходу здійснити параметризацію даних експериментальних вимірів компактизації та стисливості при довільних значеннях об'ємної фракції компонентів та добре узгоджується із результатами безпосередніх фізичних експериментів. На прикладі моделі одновимірного силового ланцюжка Герця, розглянуто перенос імпульсу збудження в неоднорідних дискретних системах і виявлені умови формування резонансних мод у лінеаризованій неоднорідній системі, які створюються при формуванні хвильових пакетів з квазінормальних мод типу циліндричних хвиль. Результати аналізу амплітуди розсіяння імпульсу на дефекті добре узгоджуються із відповідними експериментальними даними.

Метою роботи є розробка, розв'язок та застосування моделей структуроутворень та динамічних процесів в гранульованих системах у задачах опису окремих визначених прикладів мікро-механічних системах з урахуванням завданих спеціальних зовнішніх та граничних умов.

При цьому були поставлені такі основні задачі: опис та параметризація структуроутворень, спостерігаємих в гранульованих матеріалах; моделювання кінетики компактизації, в термінах вільного об'єму та параметра впорядкування в гранульованих системах під впливом механічних імпульсних збурень; моделювання та вивчення умов існування і властивостей стаціонарних станів в гранульованих матеріалах; розробка теоретичної моделі опису стисливості та компактизації бі-компонентних гранульованих сумішів в повному інтервалі значень об'ємної фракції компонентів; моделювання динаміки імпульсу збудження у гранульованих системах з урахуванням неоднорідностей.

В дисертаційній роботі отримано такі нові наукові результати:

1. застосування аналітичного розв'язку кінетичної моделі вільного об'єму, для параметризації логарифмічно повільного типу компактизації у гранульованих системах;
2. узагальнення кінетичної моделі вільного об'єму на випадок двохкомпонентної системи, яке дозволяє її застосування для опису впакування, в двох-

компонентних гранульованих системах;

3. визначення критерію формування (руйнації) впорядкованих станів та отримано небольцманівський профіль густини у гравітаційному полі для ентропійної моделі граткового газу у гравітаційному полі;
4. встановлення критеріїв утворення і стійкості та визначення параметрів стаціонарних станів у одновимірній системі непружних частинок, які формуються шляхом розшарування системи на сегменти із внутрішнім періодичним рухом;
5. застосування фракційного підходу до опису кінетики компактизації гранульованої системи на підставі аналізу висновків, що випливають із розв'язків моделі Ландау-Гінзбурга;
6. опис стисливості та компактизації бі-компонентної гранульованої суміші із використанням теорії Кірквуда-Баффа у повному інтервалі значень об'ємних фракцій компонентів;
7. отримання точних розв'язків рівнянь руху механічного імпульсу збудження у одновимірних неоднорідних силових ланцюжках (зокрема, резонансних мод) та встановлення мульти-модового характеру його динаміки.
8. отримання і аналіз солітонного розв'язку типу Нестеренка для нелінійної моделі розповсюдження імпульсів збудження у герцівських ланцюжках; отримання виразу для амплітуди розсіяння солітонного збудження на ізотопічному дефекті.

Отримані результати є внеском у теоретичний опис багаточастинкових мікро-механічних систем, гранульованих матеріалів. Результати дисертаційної роботи можуть бути використані для розв'язку досить широкого класу прикладних та фундаментальних задач, наприклад: в технологіях створення захисних модулів; в розробках елементів хвильової схемотехніки; в технологіях зберігання та транспортування сипучих матеріалів; в технологіях очистки; в будівельних технологіях; для виявлення ролі міжчастинкової взаємодії, анізотропії та дисипативних ефектів в формуванні станів конденсованої системи;

для недеструктивного моніторингу домішок в гранульованих системах; для розбудови теорії аналогів гідростатичних явищ в гранульованих матеріалах; для виявлення критеріїв застосування методів фізики конденсованого стану до вивчення мікро-механічних багаточастинкових систем.

Матеріали дисертаційного дослідження представлено в українських реферованих журналах [1-5] та монографії [6].

Структура дисертаційної роботи. Дисертація складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел, що містять 115 найменувань. Робота написана на 192 сторінках машинописного тексту, містить 37 рисунків та 2 таблиці.

Ключові слова: мікро-механічні системи, гранульовані матеріали, відкриті системи, квазі-стаціонарні стани, кінетика компактизації, кінетика Ландау-Гінзбурга, теорія Кірквуда-Баффа, модель Карнахана-Старлінга, бі-дисперсні гранульовані суміші, неоднорідний ланцюжок Герця, резонанси, квазі-нормальні моди

Список публікацій здобувача:

1. Gerasymov O.I., Khudyntsev N.N., Klymenkov O.A., Spivak A.Ya. The kinetics of processes occurring in granular materials in the field of vibroaccelerations // *Ukrainian Journal of Physics*. 2005. Vol. 50, No. 6. P. 623-631.
2. Gerasymov O.I., Vandewalle N., Spivak A.Ya., Lumay G., Dorbolo S. , Khudyntsev N.N., Klymenkov O.A. Stationary states in a 1D system of inelastic particles // *Ukrainian Journal of Physics*. 2008. Vol. 53, No. 11. P. 1128-1135.
3. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Kinetic model of compaction in granular materials // *Ukrainian Journal of Physics*. 2015. Vol. 60, No. 3. P. 253-257. https://doi.org/10.15407/ujpe60.03.0253
4. Герасимов О.І., Співак А.Я. Солітон в одновимірному силовому ланцюжку з герцівськими контактами // *Доповіді Національної академії наук України*. 2020. № 3. С. 36-46. https://doi.org/10.15407/dopovidi2020.03.036

5. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. On the wave transmission in a gently perturbed weakly inhomogeneous non-linear force chain // *Ukrainian Journal of Physics*. 2020. Vol. 65, No. 11. P. 1008-1016.
https://doi.org/10.15407/ujpe65.11.1008
6. Герасимов О.І., Співак А.Я. *Окремі задачі фізики м'якої матерії* : моногр. / Одеськ. держ. еколог. ун-т. Одеса: Гельветика, 2020. 200 с. ISBN 978-966-992-202-1

ABSTRACT

Spivak A.Ya. Structurization and dynamic processes in many-body micro-mechanical systems under the influence of external perturbations - Odesa State Environmental University, Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2021.

Thesis for the Candidate of Science in Physics and Mathematics degree in speciality 01.04.02 – theoretical physics – Manuscript.

Many-body micro-mechanical (granular) systems that form structured eigenstates and can make transitions between them that occur under the influence of external perturbations are studied. Model consideration and direct physical experiment indicate the existence of quasi-stationary states in which energy losses due to inelastic interactions are compensated by its profit due to various types of external perturbations. The existence of such states formally allows to apply in their vicinity the known methods of statistical physics to study the structure and individual dynamic properties. The work is devoted to the development of such models and algorithms of their applications in the study of the structure and individual dynamic processes for granular materials that are in special conditions (perturbation, confinement, etc.). It is shown, for example, that the adapted application of Ginzburg-Landau phase transition theory to study the kinetics of compaction in granular materials indicates the multi-parametric nature of compaction from an arbitrary initial state to a state with the maximum possible random nature of packing. Comparison of the obtained data with the results of experiments indicates the fractional nature of the kinetics of the corresponding relaxation processes. An original complex model of a bi-dispersed mixture based on the theoretical Kirkwood-Buff and Carnahan-Starling constructions is proposed. On the example of the Hertz one-dimensional force chain model, the excitation pulse transfer in inhomogeneous discrete systems is considered and the conditions for the formation of resonant modes in a linearized inhomogeneous system, which are created during wave packets from quasinormal modes such as cylindrical waves, are revealed. The results of

the analysis of the pulse scattering amplitude on the defect agree well with the corresponding experimental data.

The aim of the work is to develop, solve and apply models of structures and dynamic processes in granular systems in the problems of describing certain identified examples of micro-mechanical systems, taking into account the special external and boundary conditions. The following main tasks were set: description and parameterization of structures formed in granular materials; modeling of compaction kinetics, in terms of free volume and ordering parameter in granular systems under the influence of mechanical impulse perturbations; modeling and studying of the conditions of existence and properties of stationary states in granular materials; development of a theoretical model for describing the compressibility and compaction of bi-component granular mixtures in the full range of values of the volume fraction of components; modeling of excitation pulse dynamics in granular systems taking into account inhomogeneities.

The following new scientific results are obtained in the dissertation:

1. application of the analytical solution of the free-volume model for parameterization of the logarithmically slow type of compaction in granular systems;
2. generalization of the kinetic model of free volume in the case of a two-component system, which allows its use to describe packaging, in two-component granular systems;
3. obtaining the criterion of formation (destruction) of ordered states and obtaining the non-Boltzmann density profile in the gravitational field for the entropy model of the lattice gas;
4. establishing criteria for the formation and stability and determining the parameters of stationary states in a one-dimensional system of inelastic particles, which are formed by stratification of the system into segments with internal periodic motion;
5. The fractional approach is proposed to describe the kinetics of compaction of the granular system based on the analysis of the conclusions arising from the solutions of the Landau-Ginzburg model;

6. description of compressibility and compaction of bi-component granular mixture using Kirkwood-Buff theory in the full range of values of bulk fractions of components;
7. exact solutions of the equations of motion of the excitation pulse in one-dimensional inhomogeneous force chains and the establishment of the multimode nature of its dynamics.
8. obtaining and analyzing a soliton solution of the Nesterenko's type for a nonlinear model of excitation pulse propagation in Hertz chains; obtaining an expression for the amplitude of scattering of soliton excitation on an isotopic defect.

The obtained results are a contribution to the theoretical description of many-body micro-mechanical systems, granular materials. The results of the dissertation can be used to solve a fairly wide class of applied and fundamental problems, for example: in technologies for creating safety modules; in the development of elements of wave circuitry; in technologies of storage and transportation of bulk materials; in cleaning technologies; in construction technologies; to identify the role of interparticle interaction, anisotropy and dissipative effects in the formation of states of the condensed system; for non-destructive monitoring of impurities in complex mixtures; to develop the theory of analogues of hydrostatic phenomena in granular materials; to identify criteria for the application of methods of condensed matter physics to the study of micro-mechanical many-body systems.

Materials of the dissertation research are presented in Ukrainian peer-reviewed journals [1-5] and monography [6].

The structure of the dissertation. The dissertation consists of an introduction, four chapters, conclusions, a list of sources used, containing 115 titles. The work is written on 192 pages of typewritten text, contains 37 drawings and 2 tables.

Keywords: micro-mechanical system, granular materials, open systems, quasi-stationary states, kinetics of compaction, Landau-Ginzburg kinetics, Kirkwood-Buff theory, Carnahan-Starling model, bi-dispersive granular mixtures, non-homogeneous Hertzian chain, resonances, quasi-normal modes

List of applicant's publications:

1. Gerasymov O.I., Khudyntsev N.N., Klymenkov O.A., Spivak A.Ya. The kinetics of processes occurring in granular materials in the field of vibroaccelerations // *Ukrainian Journal of Physics*. 2005. Vol. 50, No. 6. P. 623-631.
2. Gerasymov O.I., Vandewalle N., Spivak A.Ya., Lumay G., Dorbolo S. , Khudyntsev N.N., Klymenkov O.A. Stationary states in a 1D system of inelastic particles // *Ukrainian Journal of Physics*. 2008. Vol. 53, No. 11. P. 1128-1135.
3. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Kinetic model of compaction in granular materials // *Ukrainian Journal of Physics*. 2015. Vol. 60, No. 3. P. 253-257. https://doi.org/10.15407/ujpe60.03.0253
4. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Soliton in a onedimensional force chain with Hertz contacts // Reports of the National Academy of Sciences of Ukraine. 2020. No. 3. P. 36-46. (in Ukrainian) https://doi.org/10.15407/dopovidi2020.03.036
5. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. On the wave transmission in a gently perturbed weakly inhomogeneous non-linear force chain // *Ukrainian Journal of Physics*. 2020. Vol. 65, No. 11. P. 1008-1016. https://doi.org/10.15407/ujpe65.11.1008
6. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. *Some problems of soft matter physics* : monography / Odesa State Environmental University. Odesa: Helvetika, 2020. 200 p. ISBN 978-966-992-202-1 (in Ukrainian)

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ

г.м.	гранульований матеріал
ММС	мікро-механічна система
1D	одновимірний
2D	двовимірний
ДВ	діаграма Вороного
МД	молекулярна динаміка (метод)
ФПУ	Фермі-Паста-Улама (задача, проблема)

ВСТУП

Актуальність теми. Теоретичні та експериментальні дослідження структури та фізичних явищ у багаточастинкових мікро-механічних системах, відноситься до актуальних і водночас складних задач сучасної фізики. До таких систем, зокрема, відносяться гранульовані матеріали (г.м.), які за певних умов показують властивості як звичайних агрегатних станів конденсованої речовини так і цілком незвичайні (такі, скажімо, як ефекти компактизації, сегрегації, арки, бразильського горіху, та деякі інші), притаманні лише ним самім.

Такі об'єкти широко представлені у природному стані у довкіллі у широкому інтервалі від мікро- до макро-масштабів (пісок, гравій, геоморфологічні середовища та багато інших) та характеризуються великим розбігом інших власних параметрів. Вони також інтенсивно використовуються в технологічних процесах (продукція та сировина харчової, фармацевтичної, будівельної, металургійної та деяких інших галузей).

Завдяки тому, що такі матеріали також відносно легко створюються у лабораторних умовах із завданими початковими параметрами, а явища, які в них відбуваються вивчаються практично візуально, на теперішній час накопичений значний експериментальний матеріал, який свідчить про унікальні фізичні властивості таких систем. Показуючи, як типові, звичні для агрегатних станів конденсованої речовини, так і незвичайні властивості гранульовані матеріали є хоча й багаточастинковими, але механічними системами із суттєво відмінними від молекулярних характеристиками.

Теоретичне вивчення гранульованих систем зустрічається із проблемою відсутності універсальної теорії. Тому на сучасному рівні воно базується на розробці теоретичних моделей, які відтворюють основні риси спеціально сконструйованої системи, в якій завдяки конструктивним та детермінованим обмеженням відбуваються надійно контролюємі процеси із наступним отриманням розв'язків та їх порівнянням із експериментом. Перевага при цьому надається простим, наочним моделям, які припускають аналітичні розв'язки та можуть бути використані безпосередньо для параметризації відповідних фізичних експериментів та спостережень. Побудова таких моделей, які використовують підходи та концепції з теорії конденсованої речовини та інших розділів теоретичної фізики, допускають аналітичні розв'язки і адекватно відбивають фізичну поведінку вищезгаданих об'єктів є, таким чином, актуальною задачею.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконана у відповідності з наступними науково-дослідними роботами, що виконувалися на кафедрі загальної та теоретичної фізики в Одеському державному екологічному університеті:

– ”Дослідження структури і динамічних властивостей складних статистичних систем: колоїдних розчинів та сухих гранульованих матеріалів” 1998-2000 рр. (шифр №ДР0201U003438);
– ”Фізика складних систем: динамічні дисипативні матеріали у гранульованих фазах”, 2003 рр. (шифр №62, №ДР0203U008730);
– "Статистична фізика складних систем" 2001-2005 рр. (шифр № ДР0206U004865);
– "Дослідження структурних та динамічних властивостей гранульованих матеріалів" 2007 р. (шифр №106, грант ДФФД №Ф25/604-2007, №ДР0207U010167);
– “Фізика складних систем з дисипативними взаємодіями“ 2006-2010 рр. (шифр №ДР0212U004023);
– “Структура та динаміка мультімасштабних механічних систем“ 2011-2015 рр. (шифр №ДР0216U002209);
– “Теоретичні моделі об'єктів м'якої матерії (гранульованих матеріалів) в задачах фізики та технологіях використання і захисту навколишнього середовища“ 2016-2020 рр. (шифр ДР№0116U008375).

Мета і задачі дослідження. Метою роботи є розробка, розв'язок та застосування моделей структуроутворень та динамічних процесів в гранульованих системах у задачах опису окремих визначених прикладів мікро-механічних системах з урахуванням завданих спеціальних зовнішніх та граничних умов.

Для досягнення поставленої мети необхідно було вирішити такі основні задачі:

1. опис та параметризація структуроутворень, спостерігаємих в гранульованих матеріалах;
2. моделювання кінетики компактизації, в термінах вільного об’єму та параметра впорядкування в гранульованих системах під впливом механічних імпульсних збурень;
3. моделювання та вивчення умов існування і властивостей стаціонарних станів в гранульованих матеріалах;
4. розробка теоретичної моделі опису стисливості та компактизації бі-компонентних гранульованих сумішів в повному інтервалі значень об’ємної фракції компонентів;
5. моделювання динаміки імпульсу збудження у гранульованих системах з урахуванням неоднорідностей.

Об’єкт дослідження – багаточастинкові мікро-механічні системи, (гранульовані матеріали).

Предмет дослідження – структурні та динамічні параметри які визначають властивості багаточастинкових мікро-механічних систем.

Методи дослідження – теоретичне моделювання із використанням методів фізики конденсованого стану та хвильової динаміки та числові розрахунки.

Наукова новизна отриманих результатів

1. застосування аналітичного розв’язку кінетичної моделі вільного об’єму, для параметризації логарифмічно повільного типу компактизації у гранульованих системах;
2. узагальнення кінетичної моделі вільного об’єму на випадок двохкомпонентної системи, яке дозволяє її застосування для опису впакування, в двох-

компонентних гранульованих системах;

3. визначення критерію формування (руйнації) впорядкованих станів та отримано небольцманівський профіль густини у гравітаційному полі для ентропійної моделі браткового газу у гравітаційному полі;
4. встановлення критеріїв утворення і стійкості та визначення параметрів стаціонарних станів у одновимірній системі непружних частинок, які формуються шляхом розшарування системи на сегменти із внутрішнім періодичним рухом;
5. застосування фракційного підходу до опису кінетики компактизації гранульованої системи на підставі аналізу висновків, що випливають із розв’язків моделі Ландау-Гінзбурга;
6. опис стисливості та компактизації бі-компонентної гранульованої суміші із використанням теорії Кірквуда-Баффа у повному інтервалі значень об’ємних фракцій компонентів;
7. отримання точних розв’язків рівнянь руху механічного імпульсу збудження у одновимірних неоднорідних силових ланцюжках (зокрема, резонансних мод) та встановлення мульти-модового характеру його динаміки.
8. отримання і аналіз солітонного розв’язку типу Нестеренка для нелінійної моделі розповсюдження імпульсів збудження у герцівських ланцюжках; отримання виразу для амплітуди розсіяння солітонного збудження на ізотопічному дефекті.

Практичне значення отриманих результатів.

Робота має теоретичний характер. Отримані результати є внеском у теоретичний опис багаточастинкових мікро-механічних систем, гранульованих матеріалів. Результати дисертаційної роботи можуть бути використані для розв’язку досить широкого класу прикладних та фундаментальних задач, наприклад: в технологіях створення захисних модулів; в розробках елементів хвильової схемотехніки; в технологіях зберігання та транспортування сипучих матеріалів; в технологіях очистки; в будівельних технологіях; для виявлення ролі міжчастинкової взаємодії, анізотропії та дисипативних ефектів в формуванні станів конденсованої системи; для недеструктивного моніторингу домішок в гранульованих системах; для розбудови теорії аналогів гідростатичних явищ в гранульованих матеріалах; для виявлення критеріїв застосування методів фізики конденсованого стану до вивчення мікро-механічних багаточастинкових систем.

Особистий внесок здобувача. Автором дисертаційної роботи самостійно проведено аналіз наукової літератури, знайдені аналітичні розв’язки для періоду руху частинок у постульованому квазі-стаціонарному стані та критерію його існування, параметра впакування у кінетичних моделях компактизації, імпульсу збудження у герцівському ланцюжку, також проведені розрахунки методом молекулярної динаміки для модельних систем непружних частинок поблизу постульованих квазі-стаціонарних станів, а також у задачах про розповсюдження збуджень у герцівських ланцюжках. Автором особисто здійснено інтерпретацію попередніх результатів та сформульовані попередні висновки. Разом з науковим керівником д.ф.-м.н. Герасимовим О.І. були визначені мета, задачі роботи та способи їх вирішення, здійснено інтерпретацію отриманих результатів та зроблено остаточні висновки. В опублікованих спільно зі співавторами працях особистий внесок здобувача полягає в наступному: у роботі [1] отримано аналітичний вираз для логарифмічно повільного типу релаксації у кінетичній моделі вільного об’єму, яка застосовується поблизу постульованих квазістаціонарних станів для опису кінетики компактизації гранульованих систем; в роботі [6] отримані аналітичні розв’язки узагальненої кінетичної моделі вільного об’єму на випадок двохкомпонентної системи; в роботах [1,2] отримано аналітичні вирази для періоду квазістаціонарних станів у відкритих одновимірних системах непружних частинок у полі тяжіння, та критеріїв існування та стійкості таких станів; у роботі [3] здійснений порівняльний аналіз розв'язків задачі про кінетику компактизації у системі твердих сфер за сценарієм Гінзбурга-Ландау для визначеного параметру впорядкування, та експериментальних даних на підставі якого запропоновано використання фракційного підходу; у роботі [5] отримано точні розв'язки дискретних і континуальних керуючих рівнянь руху імпульсу механічного збудження у лінеаризованих одновимірних моделях неоднорідних герцівських ланцюжків; у роботі [4] отримано і проаналізовано вирази для солітонного розв'язку типу Нестеренка для нелінійної моделі розповсюдження імпульсів збудження у герцівських ланцюжках; отримано вираз для амплітуди розсіяння солітонного збудження на важкому ізотопічному дефекті.

Апробація результатів дисертації. Матеріали дисертаційної роботи доповідалися та обговорювалися на таких міжнародних та вітчизняних конференціях: "Modern Problems of Soft Matter Theory" (Lviv, Ukraine, 27-31.08.2000), Всеукраїнському з'їзді "Фізика в Україні" (Одеса, Україна, 3-6.10.2005), Bogolyubov Kyiv Conference "Modern Problems of Problems of Theoretical and Mathematical Physics" (Kyiv, Ukraine, 13-16.09.2004, 15-18.09.2009) & "Problems of Theoretical Physics" (Kyiv, Ukraine, 24-26.05.2016, 24-26.09.2019), Ist Belgian-Ukrainian Mini-Symposium "Selected Topics of Soft Matter Physics: Granular Materials". (Odessa, Ukraine, 5-7.09.2012), International multimedia (WEB) Conference "Physics for Interdisciplinary Science and Teaching" (Odesa, 2-5.05.2016), 8th International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems" (Kyiv, Ukraine, 18-22.05.2018), XII Міжнародна конференція «Фізичні явища в твердих тілах» (Харків, Україна, 1-4.12.2015), II-V & VIII-XI Young Scientists Conference «Modern Problems of Theoretical Physics» (Kyiv, Ukraine, 22-24.12.2010, 21-23.12.2011, 23-26.10.2012) & «Problems of Theoretical Physics» (Kyiv, Ukraine, 24-27.12.2013, 12-14.12.2017, 4-5.12.2018, 23-24.12.2019, 21-23.12.2020), 9th International Conference on "Innovation, Modern Applied Science & Environmental Studies" (ICIES'2020) (Kenitra, Morocco, 25-27.12.2020). Основні результати дослідження обговорювалася на семінарі відділу синергетики в Інституті теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України (21.01.2021). Результати дисертації також пройшли апробацію на конференціях молодих вчених та семінарах Одеського державного екологічного університету.

Публікації. Основні результати дисертації опубліковано у 11 статтях, з яких 5 статей у провідних фізичних журналах, 1 монографії, 21 праці та тезах доповідей на вітчизняних та міжнародних конференціях.

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, 4 розділів, висновків, переліку використаних літературних джерел та додатку. Повний обсяг дисертації складає 192 сторінки, дисертація містить 37 рисунків, 2 таблиці, 1 з яких займає окрему сторінку. Список використаних джерел складається зі 115 найменувань та займає 11 сторінок.

РОЗДІЛ 1
ОПИС ТА ПАРАМЕТРИЗАЦІЯ СТРУКТУРИ ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ

Гранульовані матеріали (г.м.) є конгломераціями великого числа дискретних частинок (гранул) з дисперсією у розмірах від декількох мікрометрів до декількох метрів, які взаємодіють між собою головним чином внаслідок міжчастинкових контактів. В більшості випадків, такі контактні взаємодії нелінійні. До природи відноситься також те, що контактні взаємодії між гранулами у загальному випадку дисипативні, тому навіть у стані спокою, такі системи є нерівноважними, і фактично знаходяться у метастабільних станах. Основним масштабом енергії в виступає їх енергія в зовнішньому (гравітаційному) полі, яке, разом з граничними умовами, зрештою визначає також і форму При припиненні підведення енергії ззовні кінетична енергія гранул майже миттєво перетворюється на нуль і таким чином гранульовані матеріали є нетермодинамічними системами.

Перебуваючи дисипативною дискретною мікро-механічною динамічною системою при створенні спеціальних умов, проявляють властивості, як типові для агрегатних станів конденсованої матерії: газів, рідин і твердих тіл, так і принципово відмінні від них. Така багатоскладова поведінка робить завдання опису їх властивостей з точки зору послідовної теорії дуже складною, і, не дивлячись на окремі вдалі моделі, далекою від свого остаточного розв’язку задачею [7-10].

Як наслідок, до сьогоднішнього дня промислове маніпулювання г.м. (а саме, його теоретичне обгрунтування) головним чином засноване на узагальненні емпіричних відомостей про їх поведінку в різних зовнішніх умовах.

Візьмемо, скажімо, відому наочну властивість г.м. - їх компактизацію, яка полягає в зменшенні об'єму, який займає система після обробки полем зовнішніх механічних збурень. Очевидно, що вже розуміння фізичної природи однієї цієї властивості г.м. дозволило б якісно істотно поліпшити ефективність їх промислового застосування і зробити помітний крок в розвитку теорії. Треба зауважити, що дослідження деяких інших об’єктів м’якої матерії (до одної з форм якої і належать г.м.), скажімо, запорошеної плазми, яка принципово відрізняється від вищеописаних гранульованих матеріалів характером міжчастинкової взаємодії, дозволило встановити існування структурного впорядкування [11], ізоморфного тому, який спостерігається у гранульованих матеріалах.

Локальна структура конденсованої речовини суттєво впливає на її поведінку у макромасштабі, зокрема на струкутроутворення, фазові перетворення та динаміку. Кінетика структурних перетворень зазвичай ефективно розвивається у т.з. мезо-масштабі. Мається на увазі масштаб, на якому починається формування або руйнація дефектів, доменів іншої фази і т.ін. Тому параметризація структури у мезомасштабі (у визначеному вище сенсі) є суттєвим елементом на шляху моделювання структури та динаміки об'єктів конденсованої речовини. У гранульованих матеріалах, ми маємо унікальну можливість спостерігати структурні зміни, які відбуваються під впливом зовнішніх збурень, майже неозброєним оком. Моделювання структури та переходів між різними типами структур вимагає мультимасштабного аналізу.

У експериментах із магнітними рідинами, які знаходяться під дією зовнішніх магнітного поля та поля віброструсів [12] спостерігається структуризація крапель із симетрією гексагонального типу. В [13] повідомляється про спостереження подібних впорядкованих структур, які складаються із крапель води, лівітуючих над підігрітою водною поверхнею, доведеною до температури кипіння. Виявлені схожі риси у структуроутворенні у мезомасштабі таких різних за фізичною природою систем може бути наслідком дії (за певних умов) ізоморфних механізмів (скажімо ефекту виключеного об’єму). Нижче проаналізовано деякі аналітичні методи параметризації структури та наслідки їх застосувань до 2D гранульованих матеріалів та запорошеної плазми [14-16].

1.1 Структура 2D гранульованих матеріалів та запорошеної плазми

Дослідження 2D об'єктів м'якої матерії у мезо- та макромаштабах (гранул, порошинок, твердих дисків, крапель води та магнітної рідини) дозволили встановити наявність в їх структурі станів, з точки зору характеру розподілу частинок в них, як типових, так і відмінних від регулярних агрегатних станів: газів, рідин і твердих тіл. Переходи між станами із різним (за симетрією) характером локального впорядкування здійснюються за різними сценаріями, які залежать від початкового стану (точніше, від початкової компактизації у випадку г.м.), розмірності, присутності (та інтенсивності) дисипативних втрат.

У ході проведеного експериментального дослідження мікромеханічна система, яка складалася з твердих дисків, розташованих на горизонтальній площині, збурювалася шляхом послідовних струсів у горизонтальній площині. Діаметр дисків складає 17 мм, прямокутна кювета, яка містила систему, має лінійні розміри $16{,}5 \times 20$ см. Початковий розподіл дисків мав довільний характер. Після припинення підводу енергії ззовні система зупинялася і здійснювалося її фотографування. На Рис.1.1 наведені дані, отримані у вищеописаних спостереженнях. На них ми вочевидь спостерігаємо формування кластерів із гексагональною симетрією у розташуванні гранул.

Цікаво відмітити, що аналогічне структуроутворення спостерігалося у принципово відмінних від гранульованих матеріалів системах, зокрема - у запорошеній плазмі. На Рис.1.2 зображені аналогічні структури, які спостерігалися в експерименті по дослідженню структуроутворень системи, яка складається з порошинок у запорошеній плазмі.

Аналіз формування різних типів локальної структури та її розвиток у мезо- та макромасштабах зручно здійснювати за допомогою методу Вороного.

Побудова фігур Вороного полягає у виділенні простору навколо центру частинки, в якому знаходяться усі точки, що є найближчими до цього центру [17]. На Рис.1.3 та Рис.1.4 представлені фігури Вороного, які відповідають виділеним типам структур у 2D гранульованих матеріалах та запорошеній плазмі наведених на Рис.1.1 та Рис1.2.

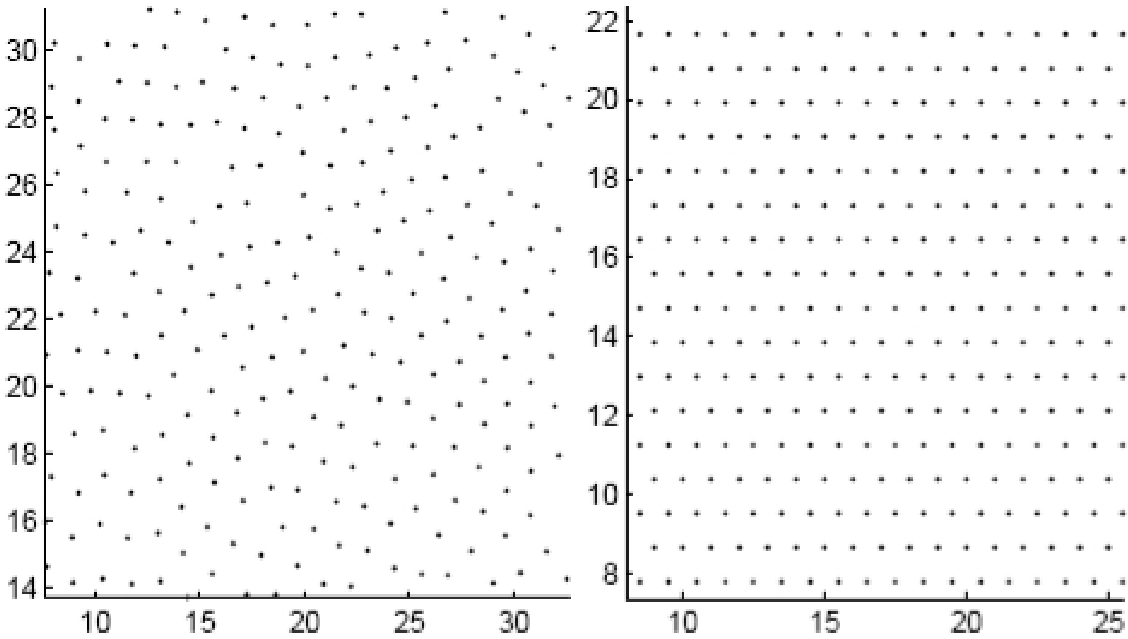


Рис.1.1 Структури, які спостерігалися у двовимірній системі твердих дисків, яка збурювалася шляхом зовнішніх горизонтальних струсів (оцифровані, довільно виділені, стробоскопічні знімки системи). Ліворуч - початковий невпорядкований стан. Праворуч - стан із гексагональним упорядкуванням.

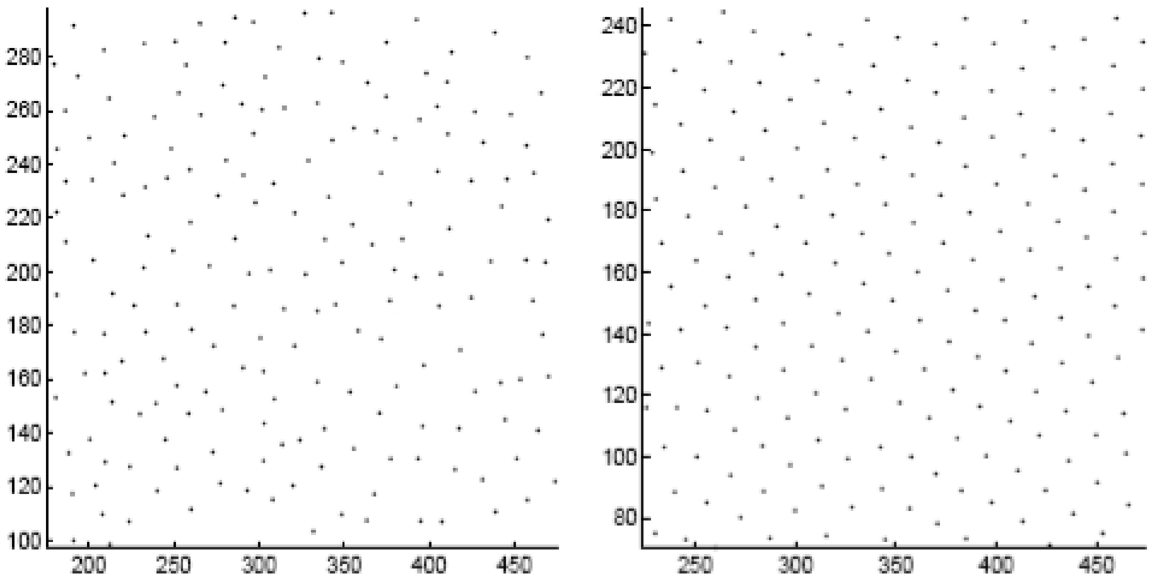


Рис.1.2 Структури, які спостерігалися у 2D запорошеній плазмі (за даними [11]). Ліворуч - початковий невпорядкований стан. Праворуч - структура, в якій переважають домени із гексагональною симетрією.

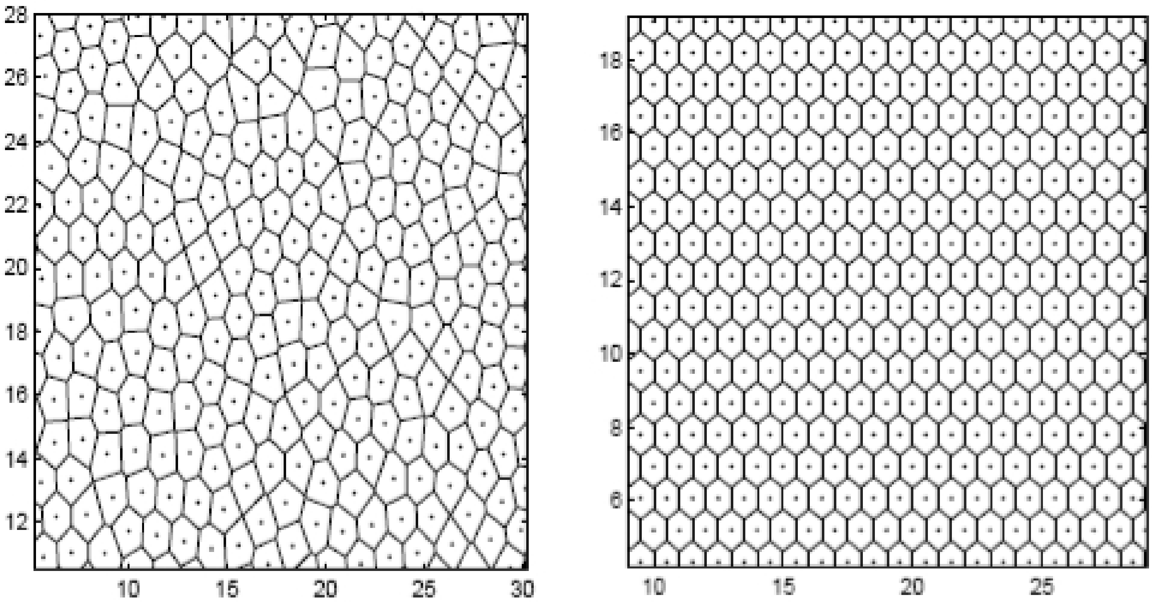


Рис.1.3 Фігури Вороного для структур, які спостерігалися у двовимірній системі твердих дисків, яка збурювалася шляхом зовнішніх горизонтальних струсів. Ліворуч - початковий невпорядкований стан. Праворуч - діаграми, які відповідають структурі із гексагональною симетрією.

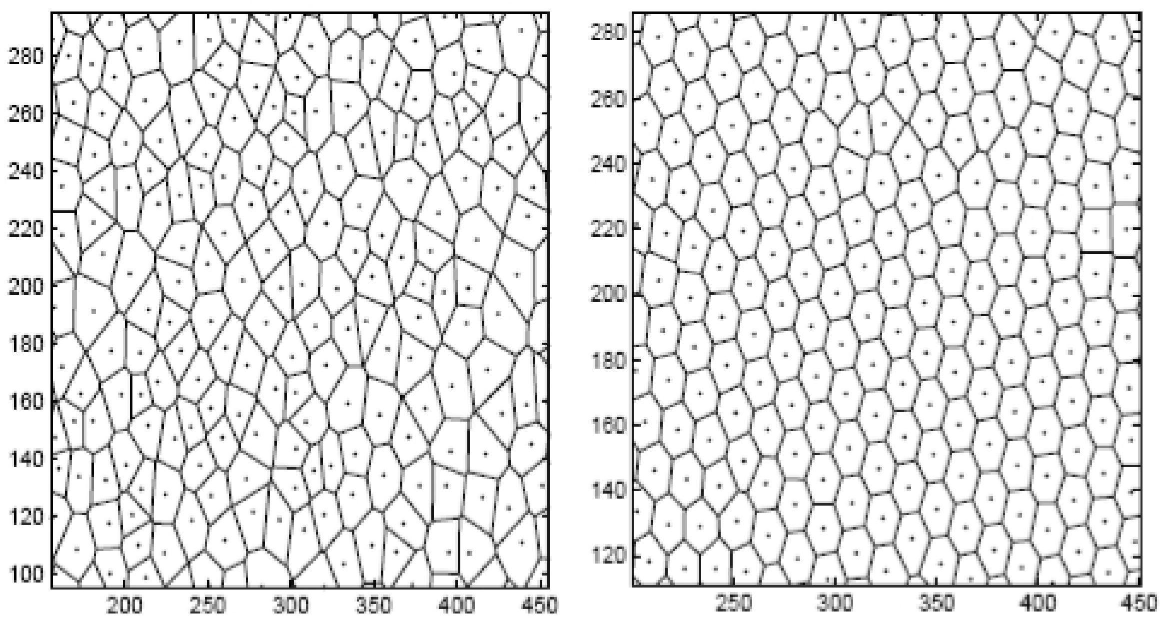


Рис.1.4 Фігури Вороного для структур , які спостерігалися у 2D запорошеній плазмі (за даними [11]). Ліворуч - початковий невпорядкований стан. Праворуч - структура, в якій переважають домени із гексагональною симетрією.

Аналіз даних, приведених на Рис.1.1–1.4 свідчить про те, що в обох, різних по фізичній природі системах, структуроутворення в мезомасштабі має певні схожі риси. Так, скажімо, в обох випадках спостерігається можливість формування ближнього порядку в локальній структурі. При цьому, створенню більш симетричних структур відповідає вища симетрія фігур Вороного. Діаграми Вороного у разі кристалізації домішкових частинок в запорошеній плазмі, а також частинок-гранул в гранульованій системі показують переважно гексагональну симетрію у мезомасштабі із кількісно різними периметричними параметрами.

Наочний опис структуризації може бути здійснено за допомогою розрахунків функції g(r) [18]. Для розглянутих систем розрахунок функції g(r) наведено на Рис.1.5.

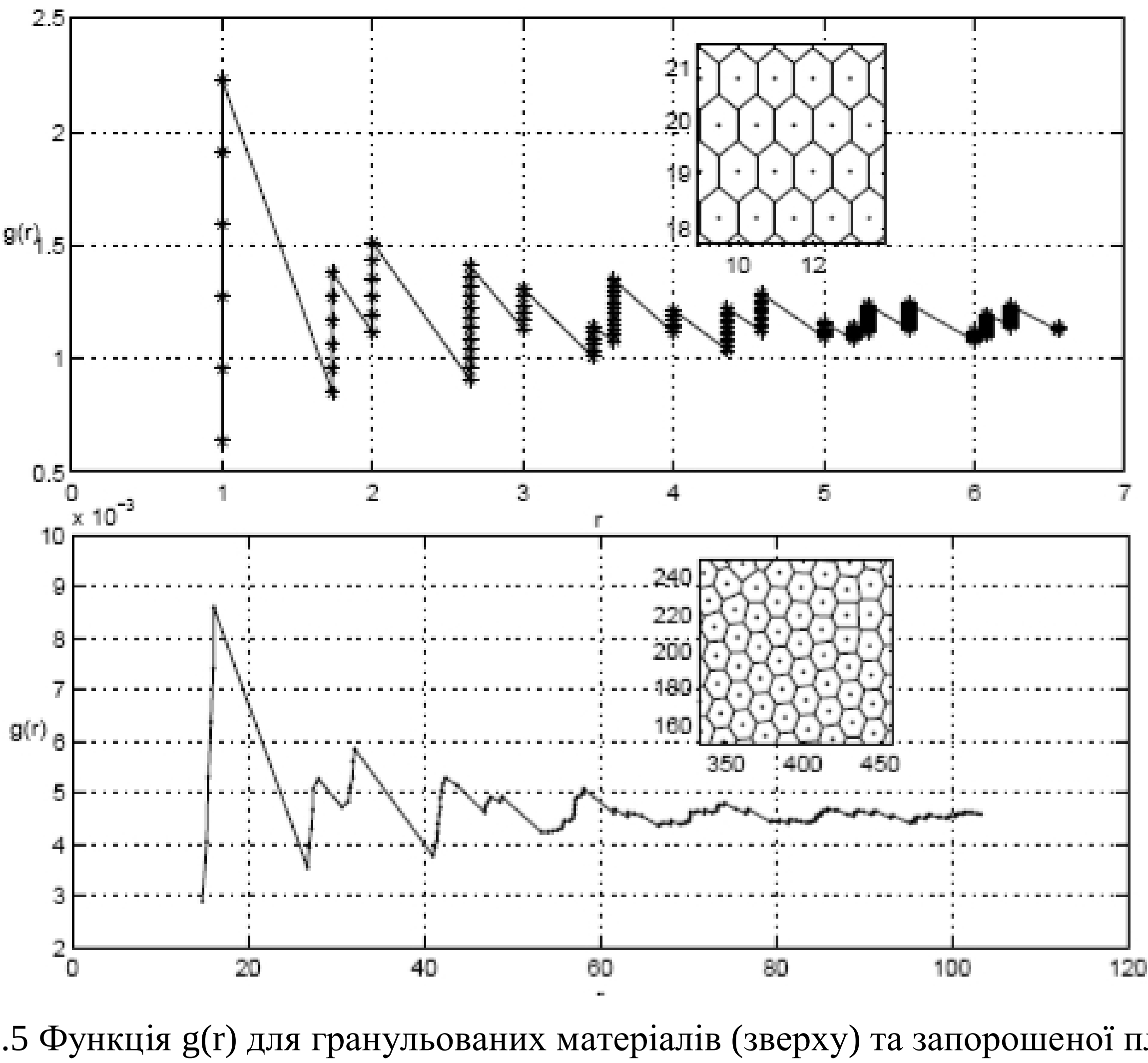


Рис.1.5 Функція g(r) для гранульованих матеріалів (зверху) та запорошеної плазми (знизу). На вставках приведені фігури Вороного для відповідних структур.

Аналіз даних приведених на Рис.1.5 свідчить про те, що розподіл густини у досліджуваних системах відповідає формуванню в них оболонкової структури.

Розглянемо наприклад двовимірне впакування твердих дисків на площині (на Рис.1.6 чорними точками показані положення центрів дисків). Виділимо частинку, яку будемо вважати за таку, що повністю заповнює умовну першу оболонку. Окреслимо навколо неї групу найближчих частинок-сусідів, які, будемо вважати, створюють другу структурну оболонку. На Рис.1.6 зображенні стани, які спостерігаються у системі двохвимірних дисків у мезомасштабі.

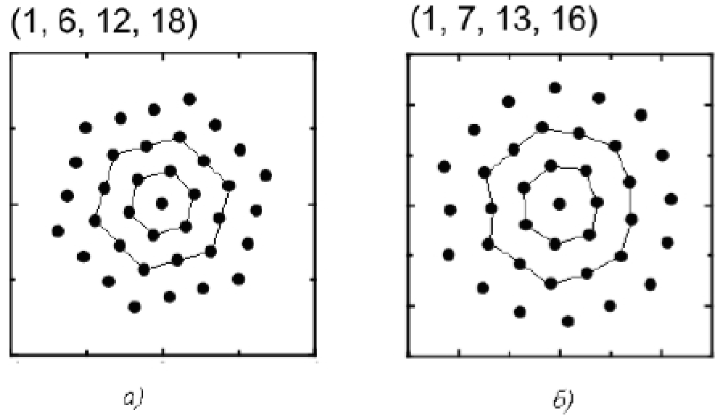


Рис.1.6 Типи локальної структури, які спостерігаються у 2D системах твердих дисків.

Можна бачити, що у випадку наведеного на рисунку 1.6а типу впорядкованої структури навколо центральної частинки у найближчому околі знаходиться 6 частинок-сусідів, які можна інтерпретувати як другу оболонку. У наступній, 3-ій оболонці, знаходиться 12 частинок. На шляху такого оболонкового підходу, структура, яка зображена на Рис.1.6а може бути класифікована як (1;6;12), а числа у дужках показують ступені заповнення відповідних оболонок. Зауважимо, що розглянута структура була кристалічно впорядкованою. Структура, зображена на рисунку 6б, відповідно, має бути класифікована, як (1;7;13). Таким чином структурні зміни типу впорядкування-розупорядкування та переходи між впорядкованими станами із різною симметрією у розташуванні частинок можна також описати в термінах моделі оболонок та притаманних їй флуктуацій чисел заповнення. При цьому повністю заповненим оболонкам відповідають найбільш симетризовані стани. Відповідна фазова діаграма, яка відповідає оболонковій моделі, може бути побудована у термінах параметру впорядкування ϕ який, наприклад, визначається за допомогою чисел заповнення оболонок:

$$\phi = \frac{n_{id} - n_i}{n_{id} + n_i},$$

де n_{id} - кількість частинок у оболонці системи у симетризованому стані; n_i - кількість частинок у оболонці в поточному стані.

Кількісні зміни у розподілі площ фігур Вороного, які відбуваються внаслідок змін у структурі в мезомасштабі, можуть бути також описані за допомогою пробної функції N(s) наступного виду

$$N(s) = \frac{b^a}{\Gamma(a)} s^{a-1} exp(-bs), \tag{1.1}$$

де $s = \frac{S_V}{S_h}$ - нормоване значення площі фігури Вороного; S_V-площа фігури Вороного для конкретної частинки у спостережуваному стані; S_h - площа фігури Вороного у випадку системи із гексагональним впорядкуванням.

Параметризація даних спостережень за допомогою функції (1.1) зводиться до визначення відповідних параметрів a та b. Поведінка функції розподілу (1.1) у випадку систем із різним значенням впакувальної фракції відображено на Рис.1.7.

Із приведених на Рис.1.7 результатів випливає, що із зростанням впакувальної фракції η відбувається зменшення дисперсії відповідного розподілу (1.1). На Рис.1.8 наведений графік дисперсії розподілу D в залежності від впакувальної фракції η.

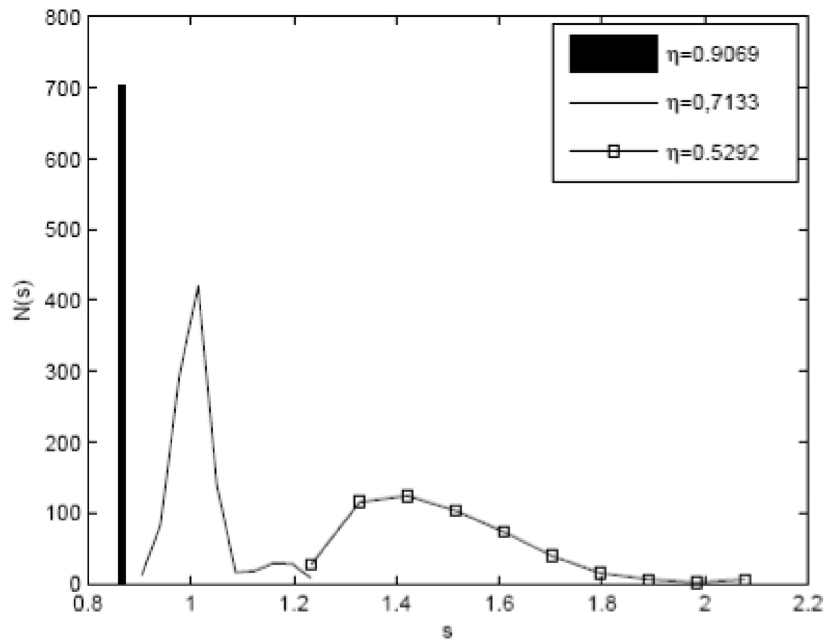


Рис.1.7 Характеристична функція розподілу N(s) для 2D гранульованих матеріалів із різними значеннями впакувальної фракції.

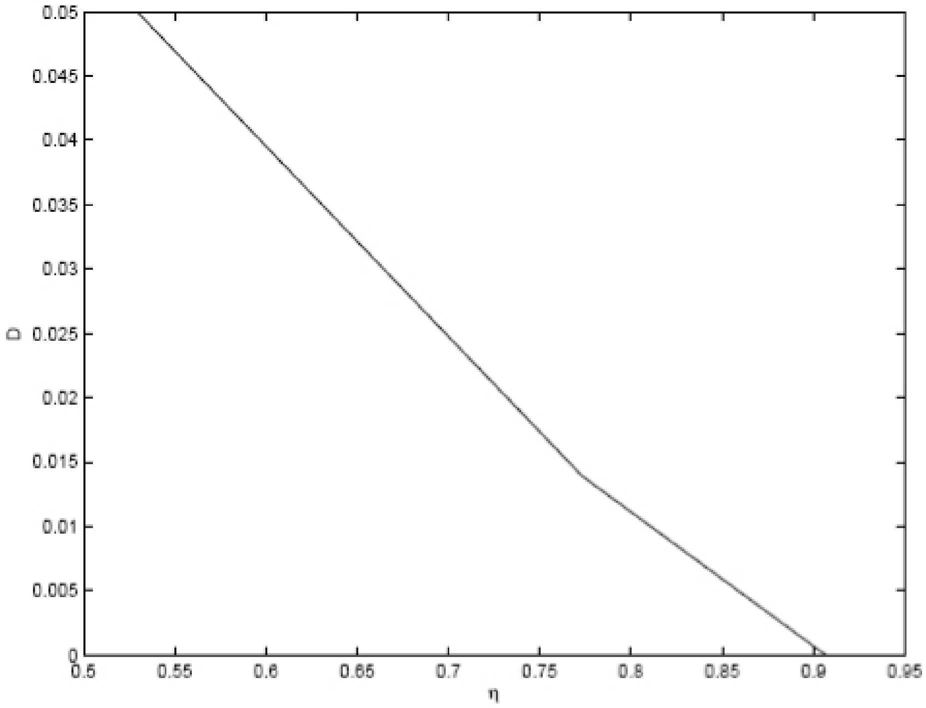


Рис.1.8 Дисперсії розподілу $N(\mathrm{s})$ в залежності від впакувальної фракції η.

Характерно, що вищеописані риси характеристичної функції, є загальними для околу станів, в яких відбувається перехід до впорядкованого стану для (суттєво різних за фізичною природою) досліджених систем.

1.2 Побудови Вороного та класична теорія моментів у застосуванні до параметризації структури гранульованих матеріалів

Гранульовані матеріали (г.м.) являють собою ансамбль великої кількості макроскопічних дискретних твердих частинок із виключно відштовхувальною взаємодією. Вони дуже широко представлені як у природі так і у техносфері. На відміну від звичних агрегатних станів речовини, структуру г.м. (особливо у 2D просторі) можна спостерігати практично неозброєним оком. Тому їх можна вважати ідеальною лабораторією для дослідження широкого спектру явищ які відбуваються внаслідок впливу зовнішніх збурень, граничних умов та таке інше. Специфічність ефектів, які спостерігаються у г.м. з урахуванням їх широкої розповсюдженості дозволяє розглядати останні навіть як окремий стан речовини [7-10].

Прямий опис локальної структури та її перетворень – одне із ключових питань у фізиці г.м. Інтерес до цього питання, головним чином викликаний завдяки багатому різноманіттю макроскопічних властивостей, які є наслідком саме специфічності локальної та мезоскопічної структури г.м. Експериментальні та теоретичні дослідження свідчать про наявність у локальній структурі г.м. ефектів впорядкування (із навіть симетричною структурою!), як у бімодальних так і у моно компонентних системах [19-20]. Відмітимо до того ж, що локальне впорядкування грає визначальну роль при побудові фізичних моделей таких,скажімо явищ, як транспорт енергії та імпульсу, розсіяння випромінювання, та інші. Тому побудова адекватної до природи г.м. міри стану є фундаментальним кроком у їх теоретичному описі.

Зауважимо, що суттєвим ускладненням є неможливість використання методів статистичної механіки до г.м. (системи не є термодинамічними!). З огляду на вказану обставину, домінантну роль у описі структури та динаміки г.м. мають відігравати методи, які враховують їх атермічність. Мова може вестись, скажімо, про геометричні (топологічні) та імовірнісні методи. Вони не потребують використання таких параметрів, як температура та міжчастинковий потенціал, і, з цієї точки зору, є найбільш раціональними та послідовними у застосуванні до г.м.

Опис структурних перетворень проводиться у просторі побудов Вороного. Задля апроксимації розподілів площ фігур Вороного у випадку експериментально безпосередньо спостережуваних станів використовується формула Неванлінни із функціонального аналізу, яка будується із урахуванням теорії ортогональних поліномів Чебишева та класичної теорії моментів.

Метод діаграм Вороного (ДВ) [21] завдяки своїй, суто геометричній природі, дозволяє описувати структуру досить широкого класу систем. Для побудови ДВ для даного набору точок необхідно навколо кожної точки системи виділити простір, в якому знаходяться усі точки, які є найближчими до неї, з урахуванням цієї умови для усіх інших точок системи. Таким чином кожна точка (центр частинки) асоціюється із власним характерним об’ємом (площею). Важливо зауважити, що характер взаємодії проміж частинками не впливає на процедуру розбиття. Більше того, об’єми фігур є адитивними і повністю покривають об’єм системи. Це є важливим у застосуванні до г.м., перш за все, при розв’язку задач про покриття (мінімізації вільного об’єму).

Експериментальні дослідження г.м. дозволяють отримати інформацію про розподіл центрів частинок у певний момент часу і, таким чином, параметризувати структуру за допомогою методу Вороного. Дослідження структури за допомогою методу Вороного базується на аналітичному аналізі розподілів площ ДВ усіх частинок системи. Очевидно, такий підхід дозволяє отримати інформацію не лише про порядок (симетрію) чи безлад у системі, але й про розподіл вільного об’єму та його зміни завдяки зовнішнім збуренням. З огляду на природу системи, вільний об’єм виступає головним керуючим параметром у г.м.. Фото станів, які спостерігалися у експерименті [22] та відповідні до них побудови діаграм Вороного наведено на Рис.1.9-1.10.

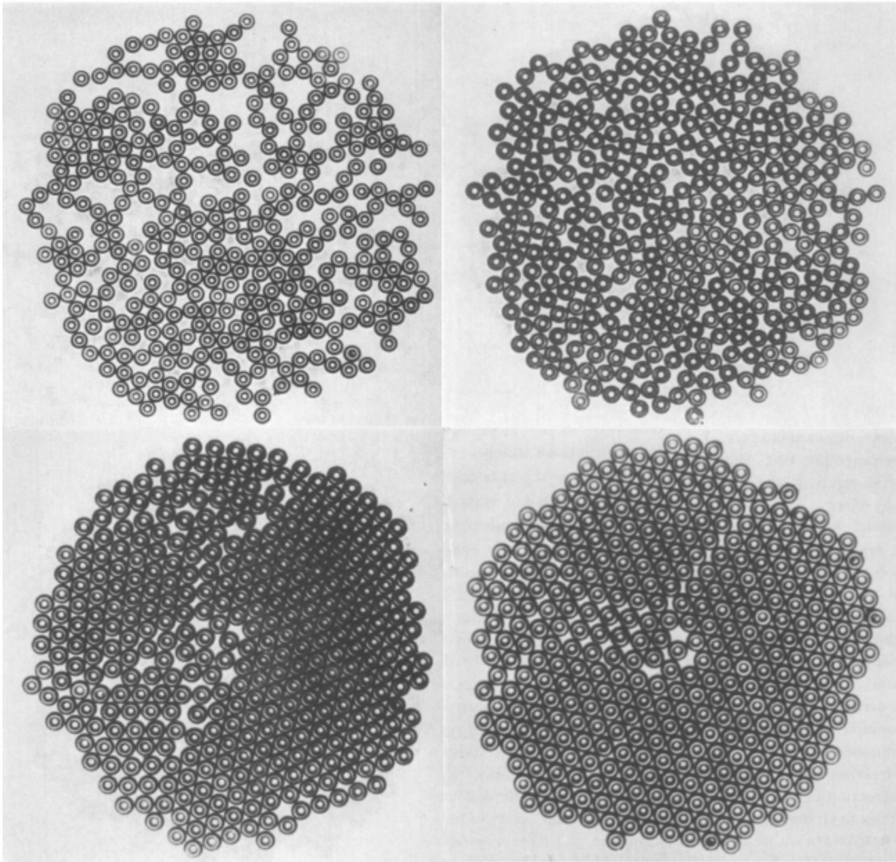


Рис.1.9 Структури, які спостерігаються у гранульованих матеріалах під впливом зовнішніх збурень [22].

Рис.1.10 наочно демонструє одну із фундаментальних властивостей г.м. - здатність впорядковуватися під впливом зовнішніх збурень. Лише з зовнішнього аналізу діаграм Вороного випливає, що під впливом збурень г.м. формують домени (патерни) із майже виключно гексагональною симетрією. На Рис.1.11 наведені розподіли площ фігур Вороного для станів, які спостерігалися у експерименті [22]. Проаналізуємо тепер поведінку форми лінії розподілу величин площ фігур Вороного при зміні ступеня впорядкованості (симетризаціїї) та зменшення величини вільного об’єму у системі. Ці процеси супроводжуються збільшенням пакувальної фракції η.

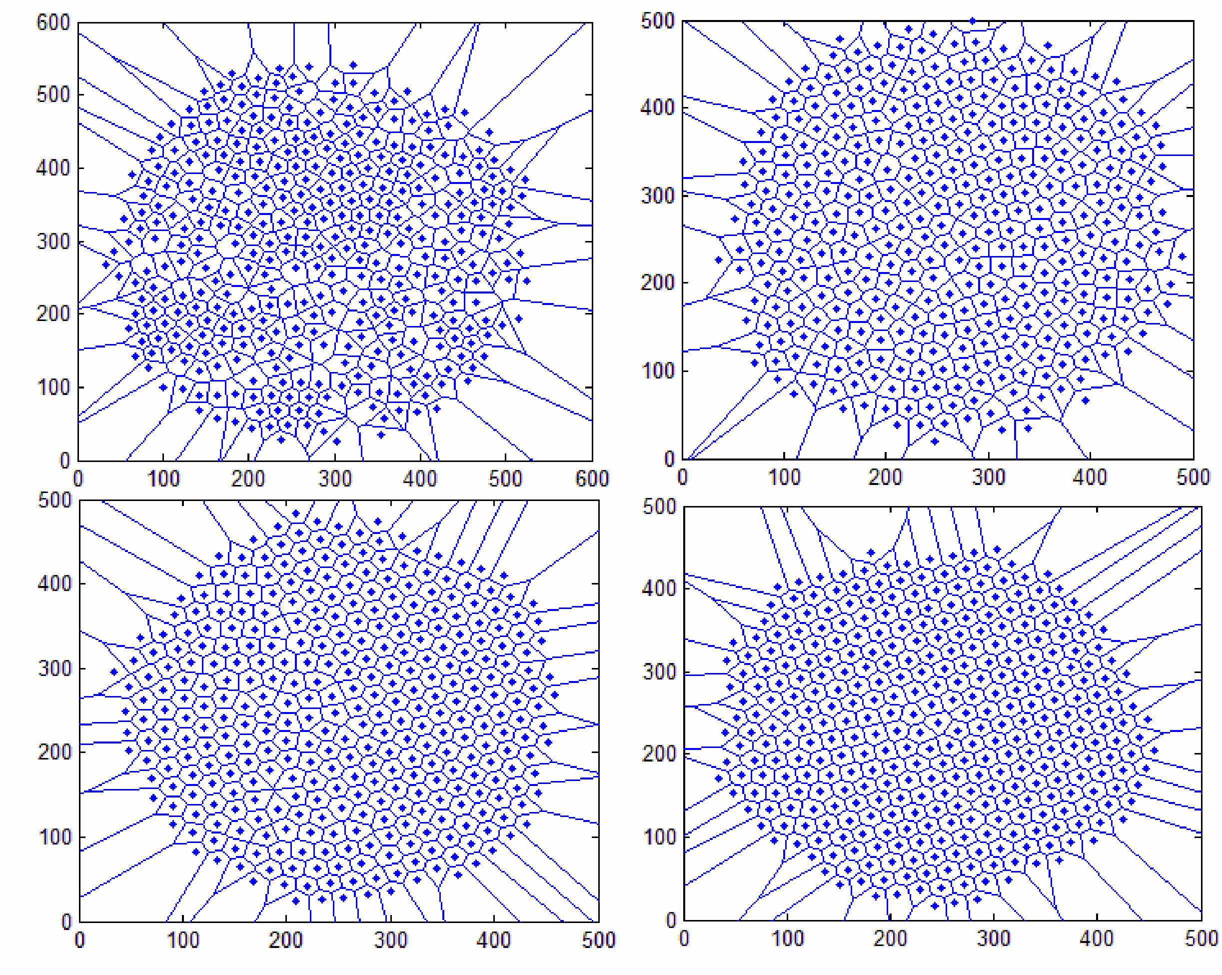


Рис.1.10 Діаграми Вороного для структур які спостерігаються у гранульованих системах під впливом зовнішніх збурень.

На Рис.1.10 представлені відповідні побудови Вороного для структур приведених на Рис.1.9. Метод Вороного дозволяє окрім оцінки ступеня ущільнення судити про симетризацію у розподілі частинок.

Досліджуючи зміни у формі лінії розподілу із збільшенням пакувальної фракції бачимо, що:

– із збільшенням значень пакувальної фракції напівширина розподілу, тобто його дисперсія (другий момент) зростає;
– середнє значення нормованої площі фігури Вороного (перший момент розподілу) зсувається вбік характерного значення площі фігури Вороного для систем із гексагональним впорядкуванням (нормування усіх площ, які отримано при аналізі експериментальних даних, відбувалося на значення

площі фігури Вороного s_0 для систем із гексагональною симетрією у розташуванні дисків);

– із збільшенням пакувальної фракції амплітуда розподілу збільшується.

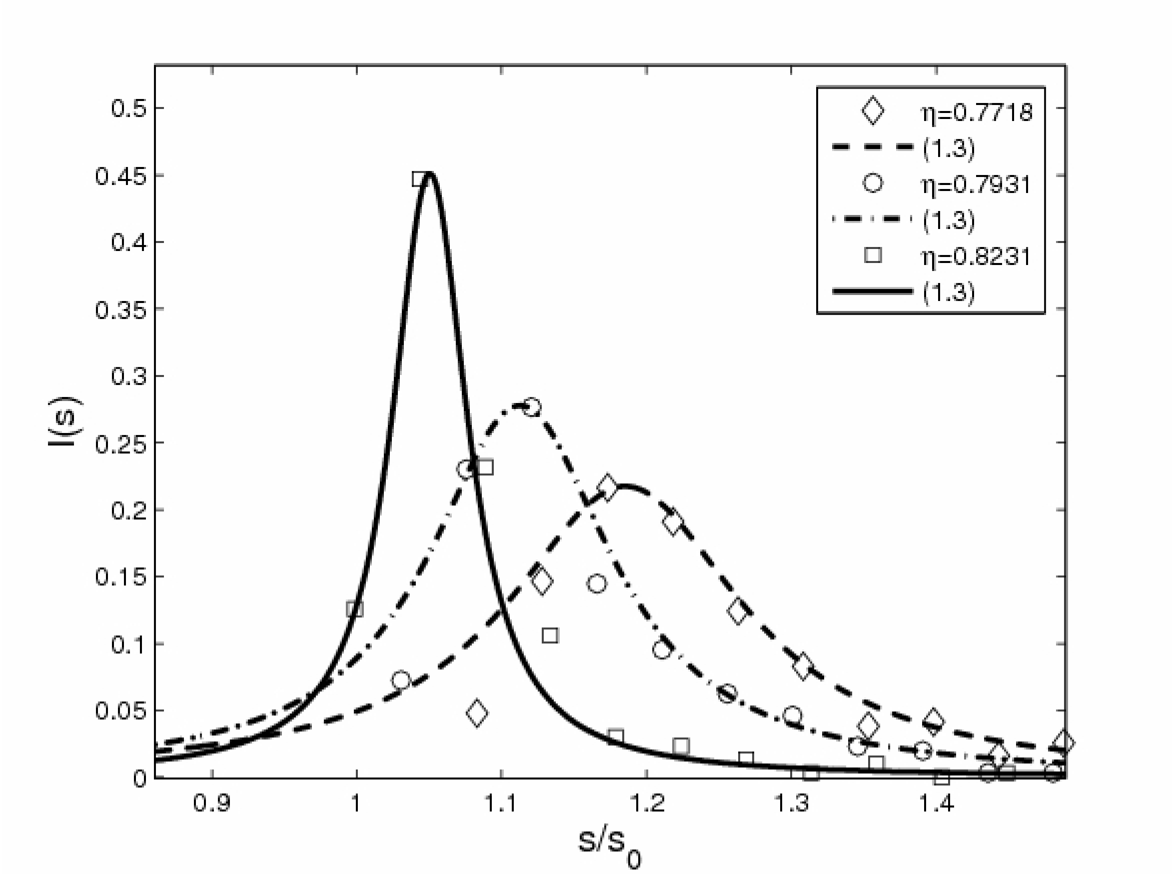


Рис.1.11 Параметризація розподілів площ фігур Вороного для станів, які спостерігалися у експерименті. Суцільні криві – експериментальні дані [22] для системи твердих дисків на площині; пунктиром показані значення отримані за допомогою формули Неванліни (1.3).

Загальноприйнятим підходом при дослідженні структури г.м. за допомогою фігур Вороного є використання аналітичного виразу для характеристичної функції розподілу у вигляді гама розподілу [23]. Цей підхід дозволяє ефективно описати експериментальні дані щодо спостережуваних структур в околі так званих «стиснутих» станів, але його використання потребує більш строгої аргументації, оскільки він базується на використанні принципів статистичної механіки [24], які, строго кажучи, не можуть бути застосовані до такого класу систем як г.м.. Ми пропонуємо для побудови апроксимуючого виразу використовувати методи теорії моментів. Їх застосування потребує знання лише феноменологічної інформації, яка є безпосередньо отримуваною.

Застосуємо методи класичної теорії моментів для опису експериментальних даних. По-перше, пронормуємо перші моменти експериментального розподілу на нульовий

$$m_j(s) = \frac{M_j(s)}{M_0(s)}, \tag{1.2}$$

де $M_j(s) = \int s^j I(s) ds$ - j-ий момент розподілу величини s (у нашому випадку це нормована площа фігур Вороного).

Скористаємося відомим апроксимаційним співвідношенням Неванлінни [25] у термінах моментів експериментальних розподілів:

$$I(s) = \frac{M_0 E_2^4 \delta}{\pi} \left\{ \begin{aligned} &\left[E_2^2 s^2 + \left(E_2^2 + E_1^2\right) s E_1 - \left(E_2^2 + E_1^2\right)^2 + u\left(s + E_1\right)\right]^2 + \\ &+ q^2 \left(s + E_1\right)^2 \end{aligned} \right\}^{-1}. \tag{1.3}$$

де $E_1 = m_1$ та $E_2 = \sqrt{m_2 - m_1^2}$ це перший та другий нормовані моменти експериментальних розподілів відповідно.

Результати застосування виразу (1.3) із відповідною процедурою нормування наведено на Рис.1.11.

У параграфі для теоретичного опису структури гранульованих матеріалів у просторі фігур Вороного використовується формула Неванлінни із функціонального аналізу, яка отримана із урахуванням теорії ортогональних поліномів Чебишева та класичної теорії моментів. Запропонований підхід дозволяє теоретично описати дані безпосередніх спостережень структури г.м. у мікро-, мезо-, та макромасштабах із використанням лише перших двох моментів розподілу керуючих параметрів побудов Вороного (які визначаються безпосередньо з експериментальних даних). Порівняний аналіз із альтернативними підходами, зокрема із моделлю стретч-Гамма функції показує переваги запропонованого підходу, який не потребує використання додаткових припущень щодо застосування концепцій статистичної механіки для опису г.м., які за своєю очевидною природою є мікромеханічними системами.

1.3 Трансляційний та орієнтаційний параметри впорядкування. Анізотропія гранульованих систем

Окремий інтерес дослідження структури матеріалів, які нас цікавлять, складає їхня організація у глобальному (макро) масштабі. Так в роботі [26, 27], структурний аналіз здійснюється за допомогою дискретної множини точок $\{G_i\} \equiv \{\vec{r}^{(\alpha)}\}$ $(\alpha = 0, 1, 2, ...)$ із координатами $\vec{r}_\alpha$ (координати центрів частинок (гранул), що оточують центральну частинку, яка у свою чергу, знаходиться в початку обраної системи координат).

На цьому шляху геометричну структуру $\{G_\alpha\}$ можна визначити порівнянням з альтернативною множиною точок $\{\Gamma_\alpha\}$. Множина $\{\Gamma_\alpha\}$ має бути наперед детермінованою і являти собою зразок ідеальної (впорядкованої) структури (скажімо, гранецентрованої кубічної, гексагональної щільної гратки або ін.). Відомості про $\{\Gamma_\alpha\}$ можна одержати з альтернативних джерел інформації про локальну будову обраних зразків.

Зауважиимо, що, наприклад, у випадку типових рідин вибір $\{\Gamma_\alpha\}$ є суттєво обмеженим внаслідок недостатньо повної інформації про їхню локальну структуру. Щодо г.м., їх структуру достатньо легко можна спостерігати навіть неозброєним оком.

У термінах запропонованого підходу, будь - яка частина системи може бути кількісно описана, як відхилення від обраної «ідеальної», впорядкованої, детермінованої множини $\{\Gamma_\alpha\}$. Іншими словами, ми можемо дивитися на локальну структуру, як на збуджений стан попередньо обраного «ідеального» впорядкованого зразка.

Формальний опис змін у локальній структурі можна здійснити шляхом введення відповідного локального параметра впорядкування та побудові фазових діаграм для нього.

Повертаючись до набору векторів $\{\vec{r}_\alpha\}$, які завдають конфігурації частинок у групі, обмежимо її розмір масштабом r_0. Роль r_0 можуть відігравати, скажімо, радіуси координаційних сфер. Формально, множина $\{\vec{r}_\alpha\}$ - це вже параметр, який описує структурне впорядкування. Для газів параметр $\{\vec{r}_\alpha\}$ сильно флуктуює. Навпаки, для кристалів він майже не змінюється.

Зазвичай вважають, що флуктуації $\{\vec{r}_\alpha\}$, які у випадку г.м. виникають внаслідок зовнішніх збурень, достатньо малі (мова тут іде, безумовно, про інші, у порівнянні до молекулярних, порядки величин малості). Додамо, що флуктуації є наслідком як зміни довжини, так і відносних кутів між векторами множини $\{\vec{r}_\alpha\}$.

Будемо розрізняти орієнтаційний та трансляційний параметри порядку. Орієнтаційний параметр порядку можна визначати так

$$g_n = \frac{1}{N_n}\sum_{1}^{N_n}\exp(iN_n\varphi_n), \tag{1.4}$$

де N_n - кількість частинок у n-ій оболонці; φ_n - відносний кут між радіус-векторами, які завдають положення частинок виділеної оболонки і частинкою, навколо якої вона будується.

Трансляційний параметр порядку запишемо у наступному вигляді

$$u_2^2 = \frac{1}{N}\sum_i\left[\left\langle|\vec{r}_i|^2\right\rangle - \left\langle|\vec{r}_i|\right\rangle^2\right], \tag{1.5}$$

де N - кількість частинок у оболонці; $\left\langle|\vec{r}_i|^2\right\rangle$ - середнє значення квадрату відстані проміж центральною частинкою та і-тим сусідом в оболонці; $\left\langle|\vec{r}_i|\right\rangle^2$ - квадрат середньої відстані проміж центральною частинкою і частинками, які знаходяться у оболонці, для якої проводиться вимір.

Класифікація типів локального впорядкування в термінах параметрів (1.4) та (1.5) детально проведена у [26, 27].

На Рис.1.12-1.13 приведені результати розрахунків параметрів впорядкування за формулами (1.4) та (1.5) для гранульованих матеріалів та для запорошеної плазми, відповідно.

Підсумовуючи бачимо, що обидві системи, які досліджуються, перебувають у анізотропних станах з відмінними від нуля значеннями орієнтаційного параметру впорядкування. Саме анізотропний характер вищезгаданих систем та їх станів ускладнює їх опис з точки зору послідовного теоретичного підходу. Зауважимо, що пошук анізотропної фази у рідинах історично відбувався шляхом досить трудоємких досліджень [28]. У випадку гранульованих систем та закристалізованої запорошеної плазми, як бачимо, ми маємо справу із системами, які перебувають у анізотропному стані вже у природних умовах. Остання обставина дозволяє прогнозувати перспективи їхнього застосування у задачах транспортування механічних збуджень, хвиль, енергії.

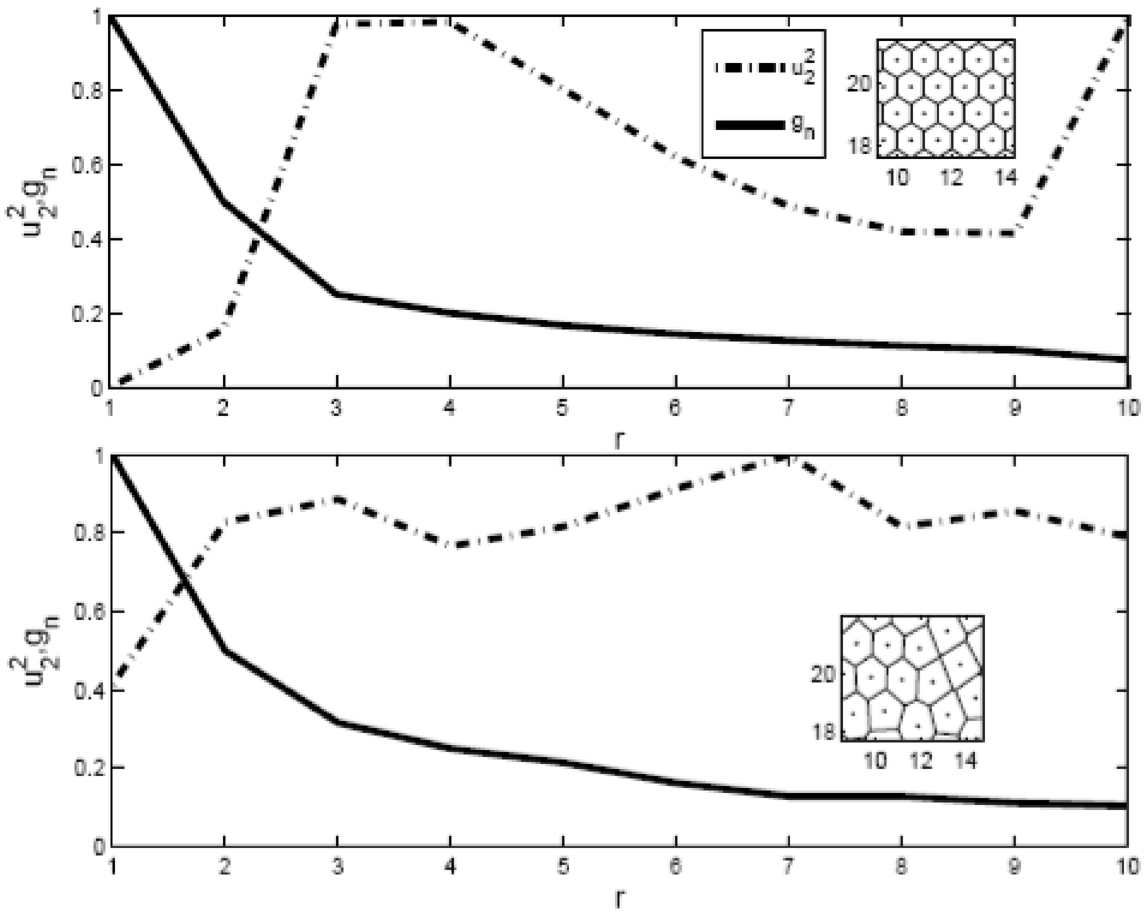


Рис.1.12 Розрахунок параметрів впорядкування (1.4) та (1.5) для гранульованих матеріалів. Результати чисельної обробки даних наведених на Рис.1.1.

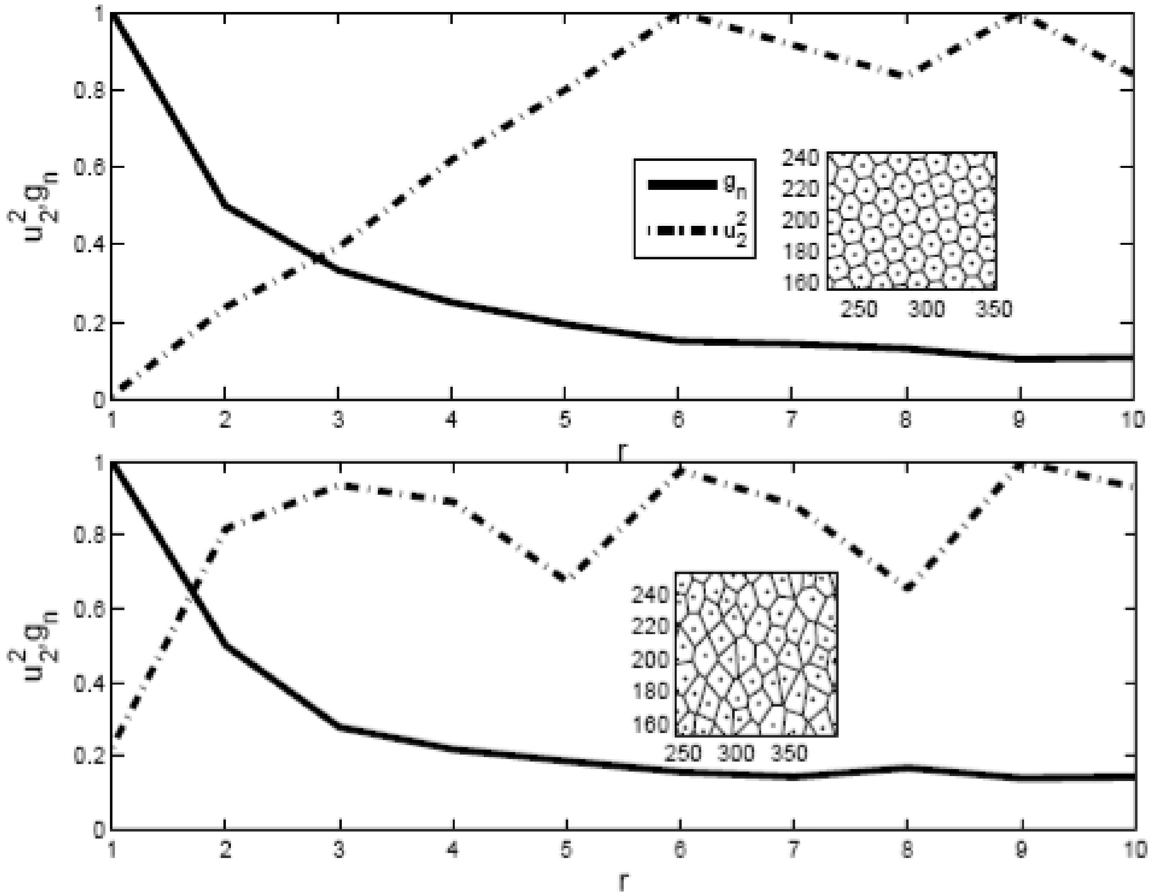


Рис.1.13 Розрахунок параметрів впорядкування (1.4) та (1.5) для запорошеної плазми. Результати чисельної обробки даних наведених на Рис.1.2.

На шляху вивчення локальної структури г.м. та запорошеної плазми у мезомасштабі, яка здійснюється за допомогою аналітичних методів її параметризації, показано, що у різних по фізичній природі об’єктах м’якої матерії, структуроутворення показує певні схожі риси. А саме, у всіх випадках спостерігається формування як ближнього, так і далекодіючого впорядкування.

Оскільки формування симетричних структур в упаковках супроводжується симетризацією відповідних фігур Вороного, вказано на можливість вивчення структурних змін за допомогою модельних характеристичних функцій.

За допомогою вивчення поведінки трансляційного та орієнтаційного параметрів впорядкування показано, що гранульовані матеріали, запорошена плазма, а також деякі інші об’єкти м’якої матерії є прикладами систем, які природно перебувають у анізотропних станах.

1.4 Модель ентропії граткового газу для опису щільності гранульованих матеріалів

Збурення гранульованих систем веде до ущільнення, тобто до зменшення об'єму, який займає система [29]. З огляду на це, постає питання теоретичного обґрунтування та параметризації цього явища. Скористаємося квазістатистичним підходом до опису густини гранульованих матеріалів. На цьому шляху запишемо вираз для функціоналу вільної енергії системи у т.з. «інгерентних» станах [27] у вигляді

$$F(\rho) = E(\rho) - \beta^{-1} S(\rho), \tag{1.6}$$

де енергія системи в гравітаційному полі надається виразом

$$E(\rho) = mg \int\limits_{(V)} z\rho(\vec{r})d\vec{r}\,, \tag{1.7}$$

де z - вертикальна координата; $\beta = \dfrac{1}{k_B T}$ - масштаб енергії; ρ - густина системи.

В якості виразу для $S(\rho)$ скористаємося відомим співвідношенням для ентропії граткового газу [30]

$$S(\rho) = -\int\limits_{(V)} d\vec{r} \left\{ \frac{\rho}{\rho_0} \ln \frac{\rho}{\rho_0} + \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0}\right) \ln\left(1 - \frac{\rho}{\rho_0}\right) \right\}, \tag{1.8}$$

де ρ_0 - максимальна густина системи.

Розрахунок варіаційної похідної $\dfrac{\delta F(\rho)}{\delta\rho}$, породжує рівноважний профіль густини у формі розподілу подібного до функції Фермі

$$\rho(\vec{r}) = \frac{\rho_0}{1 + ce^{\Gamma z}}, \qquad \Gamma = mg\rho_0\beta, \tag{1.9}$$

де c - стала, яка визначається шляхом порівняння з експериментальними даними.

Саме формулу типу (1.8) було використано у [31] для параметризації експериментальних вимірів вертикального профілю густини у гранульованих матеріалах.

Розглянемо нашу систему в околі впорядкованого (симетризованого) стану. Тоді відхилення від цього стану (див. Рис. 1.6а) можна інтерпретувати як руйнування ("плавління") симетризованого ("кристалічного") стану (див. Рис. 1.6б). Зазначимо, що зазвичай, для кількісного визначення руйнації кристалічного впорядкування у твердих тілах (плавління) використовується т.з. параметр Ліндемана [32]. Останній розраховується, як середньоквадратичне відхилення окремої частинки від положення рівноваги

$$\gamma = \sqrt{\left\langle \left(r - \langle r_i \rangle \right)^2 \right\rangle} \Big/ L \,, \tag{1.10}$$

де r_i - відстань проміж частинками-сусідами у спостерігаємому стані; r - відстань проміж частинками-сусідами у симетризованому стані; L - стала гратки.

Для одновимірної системи, побудована фазова діаграма, яка описує поведінку параметру Ліндемана γ в термінах густини (див. Рис.1.14) згідно з отриманим аналітичним виразом:

$$\gamma^2 = \frac{\rho_0}{\Gamma N} \cdot \ln \frac{\frac{\rho_0}{\rho} - 1}{c} \left\{ 1 - \frac{\rho_0}{\Gamma N} \cdot \ln \frac{\frac{\rho_0}{\rho} - 1}{c} \right\} + \frac{\rho_0}{\Gamma N} \cdot \left(\frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right), \tag{1.11}$$

де N - кількість частинок; $c = e^{-\Gamma z_0}$; z_0 - відповідає координаті (висоті) прошарку системи із густиною $\rho_0 / 2$ (що відповідає умовам експерименту [31]). Зважаючи на те, що в дискретних мікро-механічних середовищах, термодинамічні ефекти у звичайному сенсі не впливають на їх поведінку і формування фізичних властивостей, і порівнюючи отримані дані з результатами опису плавлення твердих тіл бачимо, що роль температури умовно виконує параметр компактизації (впакування) η, який є пропорційним до густини ρ. Отримане чисельне значення параметру γ для розглянутої моделі наближене до інтервалу плавлення твердого тіла, який визначається згідно з гіпотезою Ліндемана.

З наведених на Рис.1.14 даних випливає, що отримана експериментально залежність параметра γ від густини, по-перше, якісно відповідає передбаченням запропонованої аналітичної моделі. По-друге, свідчить про те, що профіль ущільнення г.м. у гравітаційному полі не відповідає розподілу Больцмана. Варіація граничного значення густини ρ_0 в межах фізичного змісту моделі (зокрема у напрямку реально досяжних значень параметру впакування), веде до кращого узгодження даних експерименту і отриманих на підставі теоретичної моделі. Реально досяжні значення параметру впакування в вертикальній системі твердих сфер досягають 0.78. Наближуючи початкові умови до цієї границі, ми звужуємо інтервал впакування, в якому розвиваються сценарії структуроутворень. Фактично, це обмежує кінетичні ступені вільності руху частинок-гранул, збільшуючи роль відносних конфігурацій та ентропійних ефектів, які їм відповідають. Порівняльний аналіз теоретичних та експериментальних даних, свідчить про те, що вони майже повністю співпадають у найближчому околі максимального впакування у системі (див. Рис. 1.14).

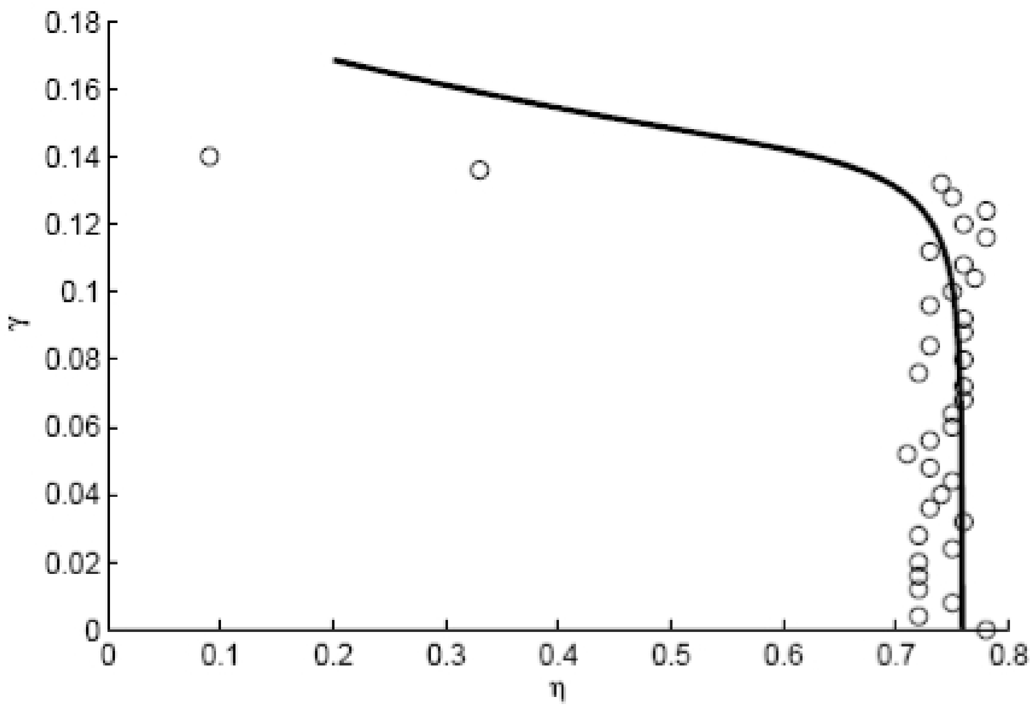


Рисунок 1.14 Залежність параметра γ, який розраховано за (1.11) від параметру впакування. Точками показано дані експерименту [31].

1.5 Висновок

Із застосуванням методу побудов Вороного здійснюється наочний опис та порівняльний аналіз локальної структури впорядкованих і невпорядкованих станів гранульованих матеріалів (г.м.) Запропонована та обґрунтована модель оболонок для опису локальної структури гранульованих систем. За допомогою вивчення відповідно визначених трансляційного та орієнтаційного параметрів впорядкування показано, що гранульовані матеріали, запорошена плазма, а також деякі інші об’єкти м’якої матерії є прикладами багаточастинкових систем, які природно перебувають у анізотропних станах.

Для моделі ґраткового газу у гравітаційному полі, показано існування фермі-профілю густини. За допомогою феноменологічних даних визначений критерій переходу з впорядкованого (кристалічного) до невпорядкованого стану, який знаходиться в межах інтервалу плавлення твердих тіл (критерій Ліндемана).

РОЗДІЛ 2
СТАЦІОНАРНІ СТАНИ В ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛАХ

Існування квазістаціонарних станів, в яких має місце баланс між енергіїю що надходить ззовні та її зменшенням всередині системи за рахунок дисипації, було досліджено чисельним моделюванням [34] (встановлене розшарування системи) та доведено експериментально за конкретних початкових та граничних умов[35-37]. Це створює можливість застосовувати для вивчення процесів в гранульованих матеріалах окремих методів статистичної фізики, фізики твердого тіла та фізики рідкого стану [38]. Привабливим є розгляд одновимірних (1D) систем, де знаходження точних розв’язків є можливим [1, 2, 39-42].

2.1 Моделі стаціонарних станів

Розглянемо одновимірну систему N безструктурних непружних частинок однакової маси, які рухаються вертикально у вакуумі (за відсутності тертя), у полі сили тяжіння $\vec{g}$. Будемо вважати, що втрати енергії, у бінарних зіткненнях між частинками, компенсуються при відбитті частинки 1 від горизонтально розташованої твердої підкладки, яка таким чином відіграє роль резервуара енергії з нескінченною ємністю. Дослідимо можливість існування у такій системі <u>стаціонарного стану</u>, який виглядає як режим руху частинок при якому: *кратність повторення значень швидкості кожної частинки дорівнює кількості її зіткнень з іншою.* Такий режим руху характеризується періодичним повторенням як швидкостей так і координат частинок. При цьому: місце зіткнення відповідних частинок, та проміжок часу між зіткненнями – є сталими величинами.

2.1.1 Стаціонарний стан у системі двох частинок

Найпростішою системою, яка задовольняє вище поставленій задачі, є система з кількістю частинок N=2. Позначимо координати та швидкості частинок, відповідно (h_1, v_1) та (h_2, v_2). Для визначеності, нехай $0 \le h_1 \le h_2$. Покладемо, що з якою б швидкістю падаюча частинка не налітала на підкладку, у момент відбиття швидкість завжди одна і та сама. Таким чином, будучі, взагалі кажучи, розподіленою з деякою імовірністю $\Phi(\omega)$, початкова швидкість у такій моделі задовольняє розподілу у вигляді δ - функції Дірака: $\Phi(\omega) = \delta(\omega - \omega_0)$.

Розглянемо зіткнення, в якому частинки налітають одна на одну з швидкостями ω_1 та ω_2, а розлітаються з швидкостями ω_1' та ω_2', які задовольняють наступним співвідношенням (відомим ще з часів Ньютона):

$$\omega_1' = \omega_1 - \frac{1+\alpha}{2}\omega_{12}, \tag{2.1}$$

$$\omega_2' = \omega_2 + \frac{1+\alpha}{2}\omega_{12}, \tag{2.2}$$

де $\omega_{12} = \omega_1 - \omega_2$, а α - параметр, що характеризує дисипативні зіткнення (коли $\alpha = 1$ зіткнення абсолютно пружні і повна кінетична енергія зберігається, при $\alpha < 1$ має місце дисипація). Позначивши кінетичну енергію частинок 1 та 2 в момент зіткнення E_1^+ та E_2^-, а E_1^- та E_2^+ після зіткнення, знаходимо дисипацію енергії

$$\left[E_1^+ + E_2^-\right] - \left[E_1^- + E_2^+\right] = \frac{1-\alpha^2}{4} m\omega_{12}^2, \tag{2.3}$$

де m- маса частинки.

Комп’ютерна візуалізація руху частинок у такій системі демонструє можливість синхронізації у стаціонарному режимі в якому частинки 1 та 2 здійснюють періодичні коливання з практично однаковими амплітудами (кожна із своєю) [1, 42].

Доведемо можливість існування такого режиму аналітично. Поперед усе, для такого режиму $E_2^- = E_2^+$. З формул (2.1)-(2.3) можна отримати зв’язок ω_1 та ω_2:

$$\omega_1 = \omega_2 \frac{\alpha - 3}{\alpha + 1}. \tag{2.4}$$

Окрім того, періоди руху обох частинок повинні бути однакові. Час, необхідний частинці 1, щоб після зіткнення з підкладкою перейти до стану в якому вона має швидкість ω_1, дорівнює

$$t^+ = \frac{\omega_0 - \omega_1}{g}. \tag{2.5}$$

Час, необхідний частинці 1, щоб досягнути підкладки після її зіткнення з частинкою 2, складає

$$t^- = T - t^+, \tag{2.6}$$

де T- період руху частинок, який можна легко записати у наступній формі

$$T = -\frac{2\omega_2}{g}. \tag{2.7}$$

Визначимо висоту x, на якій відбувається кожного разу зіткнення двох частинок у стаціонарному режимі. Приймаючі до уваги рівноприскорений характер руху у такій системі, прийдемо до системи алгебраїчних рівнянь:

$$\begin{cases} x = 0 + \omega_0 t^+ - \dfrac{g}{2} t^{+2} \\ 0 = x + \omega_1' t^- - \dfrac{g}{2} t^{-2} \end{cases}, \tag{2.8}$$

розв’язуючи яку, спільно з формулами (2.1) та (2.4)-(2.7), приходимо до співвідношення, що пов’язує ω_2 та ω_0 за допомогою α:

$$\omega_2 = -\omega_0 \frac{\alpha + 1}{\alpha + 3}. \tag{2.9}$$

Тепер, підставляючи (2.9) до (2.7), остаточно отримуємо вираз для періоду коливань у такій системі

$$T = \frac{2\omega_0}{g} \cdot \frac{1 + \alpha}{3 + \alpha}. \tag{2.10}$$

Таким чином, можливість існування стаціонарного стану у відкритій системі двох безструктурних непружних частинок однакової маси, які рухаються вертикально у вакуумі (за відсутності тертя), у полі сили тяжіння $\vec{g}$, і до якої підводиться енергія ззовні згідно розподілу у вигляді δ - функції Дірака – доведена аналітично [1].

2.1.2 Стаціонарний стан у системі трьох частинок

Розглянемо систему трьох однакових, безструктурних частинок, які рухаються у полі сил тяжіння, у вакуумі. Нехай втрати енергії, при зіткненнях частинок між собою, компенсуються при відбитті частинки 1 від горизонтальної підкладинки, яка відіграє роль резервуара енергії з нескінченною ємністю.

Покладемо, що розподіл швидкостей частинки 1 поблизу підкладинки підпорядковується розподілу у вигляді δ-функції Дірака $\Phi(\omega) = \delta(\omega - \omega_0)$, тобто з якою б швидкістю ω не налітала б частинка на підкладинку - відбивається вона завжди з однією і тією ж початковою швидкістю ω_0. При зіткненні частинок 1 та 2 із швидкостями ω_1 та ω_2, вони розлітаються із швидкостями ω_1' та ω_2', які відповідно до (2.1) та (2.2) дорівнюють

$$\omega_1' = \omega_1 - \frac{1+\alpha}{2}\omega_{12}$$

$$\omega_2' = \omega_2 + \frac{1+\alpha}{2}\omega_{12},$$

де $\omega_{12} = \omega_1 - \omega_2$ - швидкість відносного руху частинок 1 та 2 під час їх зіткнення.

При зіткненні частинок 2 та 3 зі швидкостями w_2 та w_3, вони розлітаються із швидкостями w_2' та w_3', які мають наступний вигляд

$$w_2' = w_2 - \frac{1+\alpha}{2}w_{23} \tag{2.11}$$

$$w_3' = w_3 + \frac{1+\alpha}{2}w_{23}, \tag{2.12}$$

де $w_{23} = w_2 - w_3$ - швидкість відносного руху частинок 2 та 3 під час їх зіткнення.

Позначивши кінетичну енергію частинок 1 та 2 у момент зіткнення E_1^+ та E_2^-, а E_1^- та E_2^+ після зіткнення, знаходимо дисипацію енергії за один акт зіткнення частинок 1 та 2 відповідно до (2.3)

$$\left[E_1^+ + E_2^-\right] - \left[E_1^- + E_2^+\right] = \frac{1-\alpha^2}{4} m\omega_{12}^2,$$

де m- маса частинки. Аналогічно знаходимо дисипацію енергії при зіткненні частинок 2 та 3

$$\left[E_2^+ + E_3^-\right] - \left[E_2^- + E_3^+\right] = \frac{1-\alpha^2}{4} m w_{23}^2. \quad (2.13)$$

Покажемо аналітично, що у описаній вище системі можливий режим стаціонарного руху частинок, тобто такий режим, у якому кожна з частинок приймає участь у періодичному русі у обмеженій області простору. Насамперед, у такому режимі виконується наступна умова

$$E_3^- = E_3^+. \quad (2.14)$$

Таким чином, втрати енергії при зіткненні частинок 2 та 3, повинні бути скомпенсовані за рахунок віддачі частинкою 2 частки своєї кінетичної енергії частинці 3, при цьому швидкість частинки 3 після зіткнення змінює лише знак

$$w_3' = -w_3. \quad (2.15)$$

Часовий проміжок між зіткненнями частинок позначимо T. Цей період легко виразити через w_3 (за допомогою виразу для швидкості тіла при рівноприскореному русі)

$$T = -\frac{2w_3}{g}, \quad (2.16)$$

де g- прискорення вільного падіння. Однак з початкових умов нам відома лише одна швидкість ω_0, тому значення періоду необхідно пов’язати саме з нею. На даному етапі зробити це неможливо, тому виразимо низку проміжних швидкостей через T.

Підставивши (2.15) у (2.12) та врахувавши (2.16) приходимо до виразу, який пов'язує w_{23} та T

$$w_{23} = \frac{2gT}{(1+\alpha)}. \tag{2.17}$$

У відповідності з рівнянням для швидкості при рівноприскореному русі, швидкість частинки 2 у момент зіткнення її з частинками 1 та 3 відповідно дорівнює

$$\omega_2 = w_2' - gt_2^- \tag{2.18}$$

$$w_2 = \omega_2' - gt_2^+, \tag{2.19}$$

де t_2^- - час, через який частинка 2 змінює свою швидкість з w_2' на ω_2; t_2^+ - час, через який частинка 2 змінює свою швидкість з ω_2' на w_2; $t_2^- + t_2^+ = T$.

Додамо (2.18) з (2.19), а у отриманому результаті замінимо ω_2' та w_2' у відповідності з (2.2) та (2.11). Після спрощень отримуємо, що

$$2gT = (1+\alpha)(\omega_{12} - w_{23}), \tag{2.20}$$

а після підстановки (2.17) у (2.20) приходимо до виразу, який пов'язує ω_{12} та T

$$\omega_{12} = \frac{4gT}{(1+\alpha)}. \tag{2.21}$$

У останньому виразі присутні швидкості двох частинок: ω_1 та ω_2. Знайдемо швидкість частинки 1 у момент зіткнення її з частинкою 2. Для цього скористаємось рівняннями для дисипації енергії. Додамо (2.3) та (2.13) з урахуванням (2.14), при цьому отримуємо

$$\left[E_1^+ - E_1^-\right] = \frac{1-\alpha^2}{4} m\left[\omega_{12}^2 + w_{23}^2\right]. \tag{2.22}$$

Далі розписуючи кінетичну енергію через швидкості та прийнявши до уваги (2.17) з (2.21), після спрощень приходимо до виразу наступного вигляду

$$\omega_1^2 - \omega_1'^2 = \frac{1-\alpha}{1+\alpha} 10 g^2 T^2. \tag{2.23}$$

Подальша підстановка (2.1) та (2.21) у (2.23) дає змогу отримати формулу, яка пов'язує ω_1 та T

$$\omega_1 = \frac{7 - 3\alpha}{2(1 + \alpha)} gT . \tag{2.24}$$

Тепер можна перейти до розгляду динаміки частинки 1. У відповідності з рівнянням для швидкості при рівноприскореному русі, швидкості частинки 1 у момент зіткнення з частинкою 2 та підкладинкою відповідно дорівнюють

$$\omega_1 = \omega_0 - gt_1^+ \tag{2.25}$$

$$\omega = \omega_1' - gt_1^- , \tag{2.26}$$

де t_1^+- час, за який частинка 1 пролітає шлях від підкладинки до зіткнення з частинкою 2; t_1^-- час, за який частинка 1 пролітає до підкладинки з моменту зіткнення її з частинкою 2; $t_1^+ + t_1^- = T$.

Просумувавши (2.25) та (2.26), та підставляючи до результату (2.1), а надалі і (2.21), знаходимо швидкість частинки 1 у момент зіткнення її з підкладинкою

$$\omega = \omega_0 - 3gT . \tag{2.27}$$

Знайдемо час t_1^+, протягом якого частинка 1 летить уверх. Для цього до (2.26) підставимо (2.27), (2.1) та (2.21), а замість t_1^- підставимо $\left(T - t_1^+\right)$. Результатом цих підстановок та спрощень буде вираз наступного вигляду

$$t_1^+ = \frac{\omega_0}{g} + \frac{3\alpha - 7}{2(1 + \alpha)} T . \tag{2.28}$$

У відповідності до рівняння для координати при рівноприскореному русі, координати частинки 1 у момент зіткнення з частинкою 2 та підкладинкою, відповідно дорівнюють

$$x_1 = 0 + \omega_0 t_1^+ - \frac{g t_1^{+2}}{2} \tag{2.29}$$

$$0 = x_1 + \omega_1' \, t_1^- - \frac{g t_1^{-2}}{2} , \tag{2.30}$$

де x_1- висота, на який періодично (з періодом T) відбуваються зіткнення частинки 1 з частинкою 2. Додамо праві та ліві частки співвідношень (2.29) та (2.30), підставляючи замість $t_1^- = \left(T - t_1^+\right)$, а також враховуючи раніше отримані формули (2.1), (2.21), (2.24) та (2.28), знаходимо, що період T стаціонарного режиму руху у системі трьох частинок має наступний вигляд:

$$T = \frac{\omega_0}{g} \cdot \frac{6(1+\alpha)}{(19-\alpha)}. \tag{2.31}$$

Більш повну картину, поведінки частинок у нашій системі, можна отримати визначивши величину лінійного простору у якому опиняється замкненою кожна з частинок. Позначимо величини цих просторів через ℓ_1, ℓ_2 та ℓ_3, відповідно для частинок 1, 2 та 3. Їх можна знайти за координатами зіткнення однієї частинки з іншою (або з підкладинкою)

$$\ell_1 = x_1 - 0, \qquad \ell_2 = x_2 - x_1, \qquad \ell_3 = x_3 - x_2. \tag{2.32}$$

Величина x_2 може бути записана (аналогічно величині x_1 у (2.29)) наступним чином

$$x_2 = x_1 + \omega_2' t_2^+ - \frac{g t_2^{+2}}{2}. \tag{2.33}$$

Розмір простору, де здійснює періодичний рух частинка 3, можна виразити мінуючи пошук x_3, базуючись на точному знанні того, що частинка 3 після зіткнення з частинкою 2 летить угору сягаючи x_3 через час який дорівнює половині періоду $\left(\frac{T}{2}\right)$. Враховуючи це, шлях який вона пройде за $\frac{T}{2}$ дорівнює

$$\ell_3 = \frac{gT^2}{8}. \tag{2.34}$$

Розв'язуючи (2.29) та (2.33), виразимо x_1 та x_2 через ω_0, α, та g, при цьому отримуємо

$$x_1 = \frac{10\omega_0^2}{g} \cdot \frac{(4\alpha - 1)(4 - \alpha)}{(19 - \alpha)^2} \tag{2.35}$$

$$x_2 = \frac{8\omega_0^2}{g} \cdot \frac{\left(-5\alpha^2 + 28\alpha - 5\right)}{(19 - \alpha)^2} \tag{2.36}$$

а підставляючи їх до (2.32) приходимо до наступного результату:

$$\ell_1 = \frac{10\omega_0^2}{g} \cdot \frac{(4\alpha - 1)(4 - \alpha)}{(19 - \alpha)^2} \tag{2.37}$$

$$\ell_2 = \frac{\omega_0^2}{g} \cdot \frac{54\alpha}{(19 - \alpha)^2}\,. \tag{2.38}$$

Розв'язуючи (2.34), отримуємо

$$\ell_3 = \frac{\omega_0^2}{g} \cdot \frac{3(1 + \alpha)^2}{4(19 - \alpha)^2}\,. \tag{2.39}$$

Підставивши (2.39) до (2.32) для ℓ_3 знайдемо x_3

$$x_3 = \frac{\omega_0^2}{g} \cdot \frac{\left(-71\alpha^2 + 466\alpha - 71\right)}{2(19 - \alpha)^2}\,. \tag{2.40}$$

Для аналізу x_1, x_2, x_3, були побудовані графіки їх залежності від параметра α (див. Рис. 2.1).

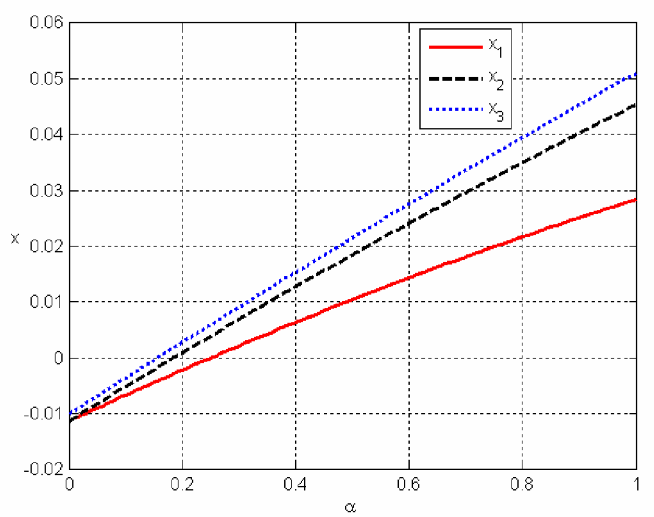


Рис. 2.1 Залежність координат x_1, x_2, x_3, від параметра α.

На їх основі можна зробити висновок про те, що стаціонарний режим трьох частинок можливий не для всіх значень параметра α.

Знайдемо значення α, при якому наш режим зникає. Це може, наприклад, відбутися у такому випадку, коли хоча б одна з трьох частинок не буде здійснювати періодичний рух у рамках свого обмеженого простору (l_1, l_2, l_3), тобто у критичній точці він згортається. Тому прирівнюючи l_1, l_2 та l_3 нулю, та розв'язуючи отримані співвідношення стосовно параметра α, знаходимо, що умова зникнення стаціонарного режиму у системі трьох частинок надається наступним чином [1]

$$\alpha \leq 0.25 . \tag{2.41}$$

Розглянута тут модель демонструє, що динаміка системи трьох частинок виявилася суттєво складнішою ніж система яка складалася лише з двох частинок, де не було виявлено обмежень на стаціонарний режим у всьому спектрі параметра α від 0 до 1.

2.1.3 Стаціонарний стан для системи, що складається з N частинок

Підхід застосований при аналітичному визначенні періоду T, у системі трьох частинок, може бути узагальненим і на випадок N-частинкової системи. Розглянемо систему N однакових, безструктурних частинок, які рухаються у полі сил тяжіння, у вакуумі. Нехай втрати енергії, при зіткненнях частинок між собою, компенсуються при відбитті частинки 1 від горизонтальної підкладинки, яка відіграє таким чином роль резервуара енергії з нескінченною ємністю.

Припустимо, що розподіл швидкостей частинки 1 поблизу підкладинки підпорядковується розподілу у вигляді δ-функції Дірака: $\Phi(\omega) = \delta(\omega - \omega_0)$, тобто з якою б швидкістю ω не налітала б частинка на підкладинку - відбивається вона завжди з однією ж і тією початковою швидкістю ω_0. При зіткненні частинок і та i+1 із швидкостями ω_i та ω_{i+1}, вони розлітаються із швидкостями ω'_i та ω'_{i+1}, відповідно, які задаються відомими співвідношеннями

$$\omega'_i = \omega_i - \frac{1+\alpha}{2}\omega_{i,i+1} \tag{2.42}$$

$$\omega'_{i+1} = \omega_{i+1} + \frac{1+\alpha}{2}\omega_{i,i+1}, \tag{2.43}$$

де $\omega_{i,i+1} = \omega_i - \omega_{i+1}$; i - порядковий номер частинки, починаючи від самої нижньої.

Позначивши кінетичну енергію частинок i та i+1 у момент зіткнення E_i^+ та E_{i+1}^-, а E_i^- та E_{i+1}^+ після зіткнення, знаходимо дисипацію енергії за один акт зіткнення частинок i та i+1

$$\left[E_i^+ + E_{i+1}^-\right] - \left[E_i^- + E_{i+1}^+\right] = \frac{1-\alpha^2}{4} m\omega_{i,i+1}^2, \tag{2.44}$$

де m- маса частинки.

Покажемо аналітично, що у описаній вище системі стаціонарний режим частинок теж можливий. Поперед всього, у такому режимі справедливим є наступне співвідношення

$$E_N^- = E_N^+. \tag{2.45}$$

Таким чином, втрати енергії при зіткненні частинок N-1 та N, повинні бути скомпенсовані за рахунок передачі частинкою N-1 частини своєї кінетичної енергії частинці N, при цьому швидкість частинки N після зіткнення змінює лише знак

$$\omega'_N = -\omega_N. \tag{2.46}$$

Часовий проміжок між зіткненнями частинок позначимо T. Цей період можна легко записати через ω_N (за допомогою виразу для швидкості тіла при рівноприскореному русі)

$$T = -\frac{2\omega_N}{g}, \tag{2.47}$$

де g - прискорення вільного падіння. Під час розгляду моделі для невеликої кількості частинок у системі ($N = 2...5$), було знайдено, що відносна швидкість самої верхньої частинки (N) та найближчої до неї частинки (N-1) дається однаковим виразом для систем з будь-якою кількістю частинок N, та має наступний вигляд

$$\omega_{N-1,N} = \frac{2gT}{(1+\alpha)}, \tag{2.48}$$

а для відносних швидкостей інших частинок знайдено наступне співвідношення

$$\omega_{i,i+1} = (N-i) \cdot \frac{2gT}{(1+\alpha)}. \tag{2.49}$$

Відмітимо, що (2.48) є окремим випадком (2.49), для випадку при якому $i = N - 1$.

Якщо скласти праві та ліві частини виразу (2.44) для i=1..(N-i) з урахуванням (2.45), отримуємо

$$\left[E_1^+ - E_1^-\right] = \frac{1-\alpha^2}{4} m \cdot \sum_{i=1}^{N-1} \omega_{i,i+1}^2. \tag{2.50}$$

Далі розписуючи кінетичну енергію частинки 1 через швидкості та приймаючи до уваги (2.49), після спрощень прийдемо до співвідношення

$$\omega_1 = \frac{N-1}{2} gT + \frac{1-\alpha}{1+\alpha} gT \frac{N(2N-1)}{6}, \tag{2.51}$$

яке пов’язує ω_1 та T.

Розглянемо динаміку частинки 1. Знайдемо час t_1^+, протягом якого частинка 1 летить угору, згідно до (2.25) у вигляді

$$t_1^+ = \frac{\omega_0 - \omega_1}{g}. \tag{2.52}$$

Згідно до рівняння для координат при рівноприскореному русі, координата частинки 1 у момент зіткнення з частинкою 2 та у момент її зіткнення з підкладинкою, відповідно до (2.29) та (2.30) дорівнюють

$$x_1 = 0 + \omega_0 t_1^+ - \frac{g t_1^{+2}}{2}$$

$$0 = x_1 + \omega_1' \, t_1^- - \frac{g t_1^{-2}}{2},$$

де x_1- висота, на якій періодично (з періодом T) відбуваються зіткнення частинки 1 з частинкою 2. Складемо праві та ліві частини виразів (2.29) та (2.30), підставляючи замість $t_1^- = \left(T - t_1^+\right)$, а також, будемо враховувати раніше знайдені формули (2.42), (2.49), (2.51) та (2.52). При цьому вираз періоду коливального руху у шуканому стаціонарному режимі для системи яка містить N частинок було отримано у наступному вигляді [1, 2, 42]

$$T_N = \frac{2\omega_0}{g}\left[N + \frac{(1-\alpha)}{3(1+\alpha)}(N-1)(2N-1)\right]^{-1}. \tag{2.53}$$

Скориставшись (2.53) знайдемо періоди систем, де N=2..5, при цьому отримуємо такі співвідношення

$$T_2 = \frac{\omega_0}{g} \cdot \frac{2(1+\alpha)}{(3+\alpha)}, \tag{2.54}$$

$$T_3 = \frac{\omega_0}{g} \cdot \frac{6(1+\alpha)}{(19-\alpha)}, \tag{2.55}$$

$$T_4 = \frac{\omega_0}{g} \cdot \frac{2(1+\alpha)}{(11-3\alpha)}, \tag{2.56}$$

$$T_5 = \frac{\omega_0}{g} \cdot \frac{2(1+\alpha)}{(17-7\alpha)}. \tag{2.57}$$

Графіки залежності періоду від параметра α, для систем у яких N=2..5, відображені на Рис. 2.2. З цих графіків видно, що із зростанням α збільшується T_N. Аналізуючи (2.53)-(2.57) можна показати, що при $\alpha = 1$ має місце співвідношення

$$\frac{T_N}{T_{N+1}} = \frac{N+1}{N}, \tag{2.58}$$

де N- кількість частинок у системі з періодом T_N; (N-1) – кількість частинок у системі з періодом T_{N+1}.

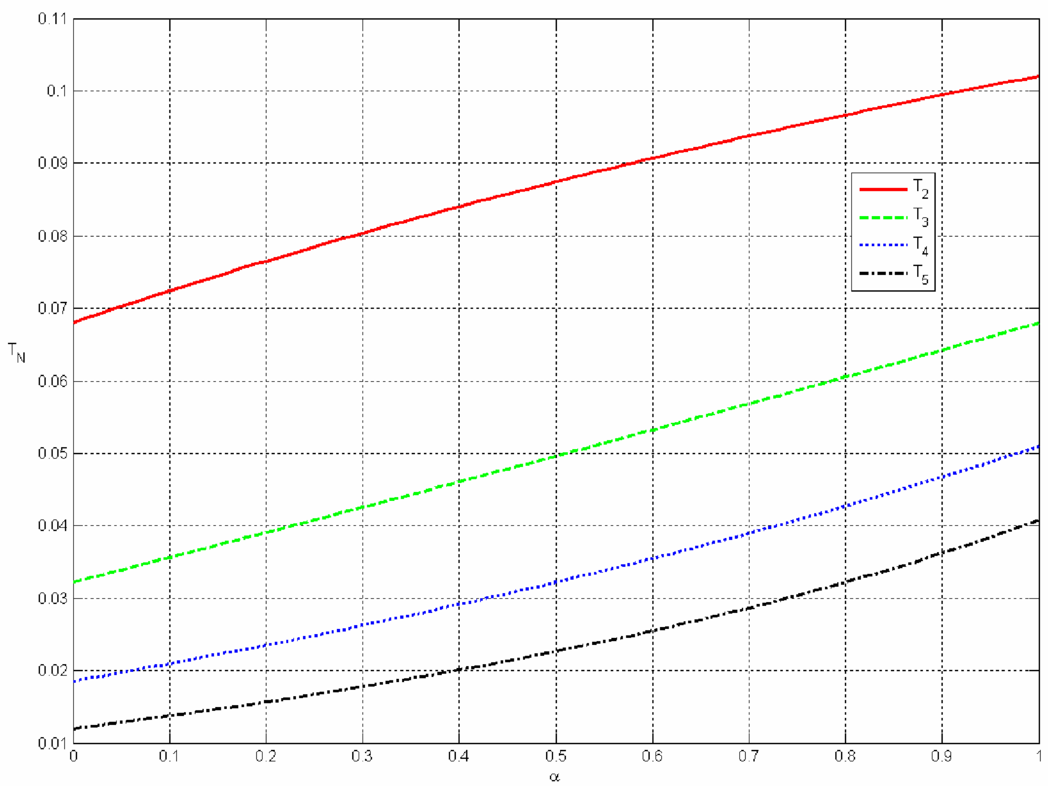


Рис. 2.2 Залежності періоду T_N від параметра α, для систем у яких N=2..5.

Як можна бачити з (2.58), при $\alpha = 1$ відношення періоду більшої на 1 частинку за розміром системи до періоду меншої задовольняє наступній умові

$$\frac{T_{N+1}}{T_N} < 1, \tag{2.59}$$

та у межі, коли $N \to \infty$, це відношення прямує до 1. Як можна бачити, і за Рис.2.2 для 0<α<1, і за (2.59) при $\alpha = 1$, із збільшенням N період зменшується.

Користуючись підходом застосованим для системи $N = 3$, умова зриву стаціонарного режиму руху частинок для системи яка складається з довільної кількості N частинок має наступний вигляд [1, 2, 42]

$$\alpha \le \alpha_c = \frac{N-2}{N+1}. \qquad (2.60)$$

Як можна бачити з Рис.2.3, де зображено залежність критерію α_c від N, при збільшенні кількості частинок, з яких складається система, звужується діапазон параметра α при якому система ще може існувати у розглянутому стаціонарному стані. Так як при $N \to \infty$, $\alpha_c \to 1$, то можна зробити висновок, що при великих значеннях N знайдений тут стаціонарний режим періодичного руху частинок з періодом T_N вироджується.

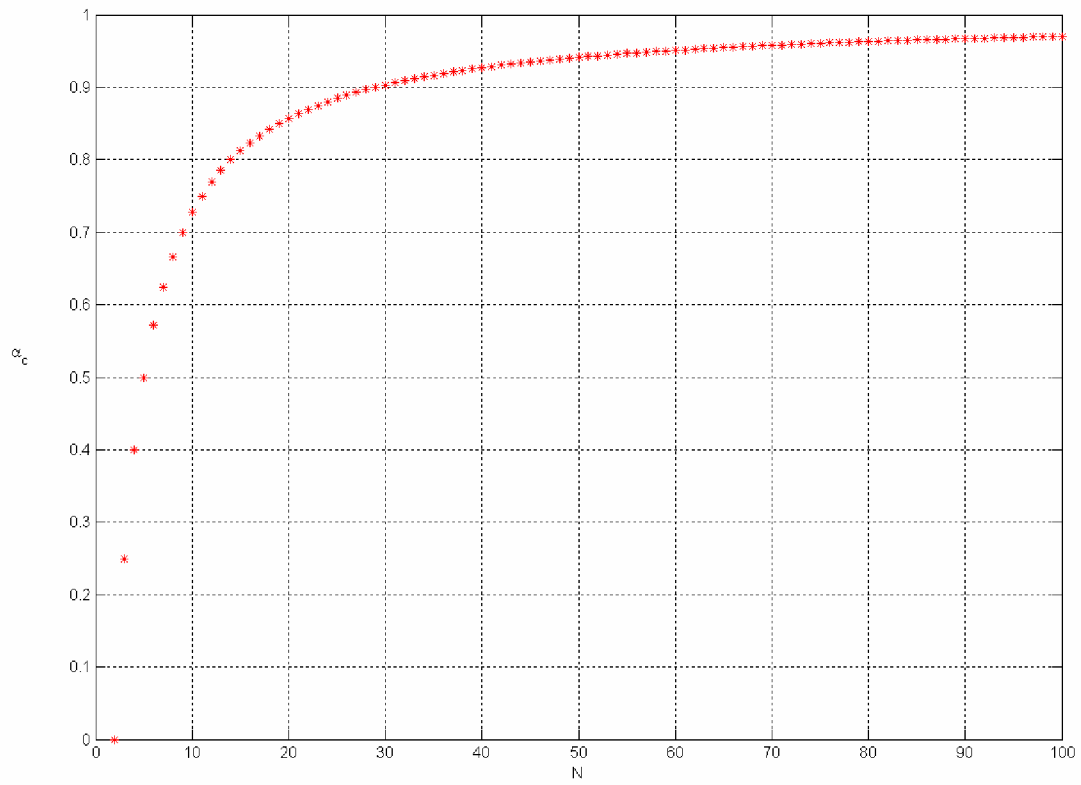


Рис. 2.3 Залежності критерію α_c від $N = 2;3;4;\ldots$.

Стаціонарний рух у такій модельній системі має виглядати як вертикальна стратифікація (тобто розшарування) системи на послідовність інтервалів, у межах яких відповідні частинки здійснюють простий періодичний рух. При цьому зіткнення кожної пари частинок відбувається на відповідних фіксованих висотах.

Розмір системи в якій здійснюється визначений стаціонарний рух, знаходимо за формулою [1, 2, 42]

$$L = \frac{gT^2}{8}\left(1 + 4\sum_{i=1}^{N-1}\frac{A}{(1+A)^2}\left(1 + 2(N-i)\right)\right), \qquad (2.61)$$

де: $A = \dfrac{(1+2\alpha)-(1-\alpha)(N-i)}{(2+\alpha)+(1-\alpha)(N-i)}$ - відношення часу протягом якого і-та частинка летить угору, до часу на протязі якого, вона рухається у зворотному напрямку. Кожний окремий додаток у (2.61) завдає розмір відповідної області у якій періодично рухається і-та частинка. Умова, за якою хоча б один з цих додатків стає завменьшки нуля - визначає критерій зруйнування стаціонарного стану: $\alpha \le \alpha_c = \dfrac{N-2}{N+1}$ і можливого початку кластеризації.

З цього співвідношення, для критичного значення коефіцієнта непружних втрат α_c, витікає, що для системи які вміщують лише одну, чи дві частинки, стаціонарні стани створюються для довільних значень α. Якщо-ж число частинок у системі перевищує дві, стаціонарні стани існують за умов обмеження коефіцієнта непружних втрат енергії внаслідок міжчастинкових зіткнень.

Отримані результати вказують на той факт, що у великих за розмірами системах або системах із сильною дисипацією, для створення умов існування стаціонарних станів недостатньо лише надавати до системи енергію зовні (дисипативні та зовнішні потоки енергії вже не встигають компенсувати один одного).

2.1.4 Моделі стаціонарних станів за відсутності зовнішніх полів

Питання про існування стаціонарних станів у випадку одновимірних систем у яких непружні частинки зіштовхуються за умов відсутності гравітаційних сил будемо вивчати на прикладі системи яка розглядалася вище розташовуючи її у горизонтальному рівні. Подальший аналіз, як і у попередньому випадку, проведемо шляхом постулювання існування у такій системі стаціонарних станів.

Тривіальний стаціонарний стан. Припустимо, що будь-які дві виділені частинки після зіткнення рухаються у протилежних напрямках. Відповідний стаціонарний режим буде виглядати як простий періодичний (коливальний) рух частинок системи з однаковим періодом T (див. Рис. 2.4).

Крім того, у стаціонарному стані 1D системи частинка з номером *i* рухається в межах інтервалу x_i який задовольняє співвідношенню

$$L = \sum_{i=1}^{N} x_i \, . \tag{2.62}$$

де L – розмір всієї системи.

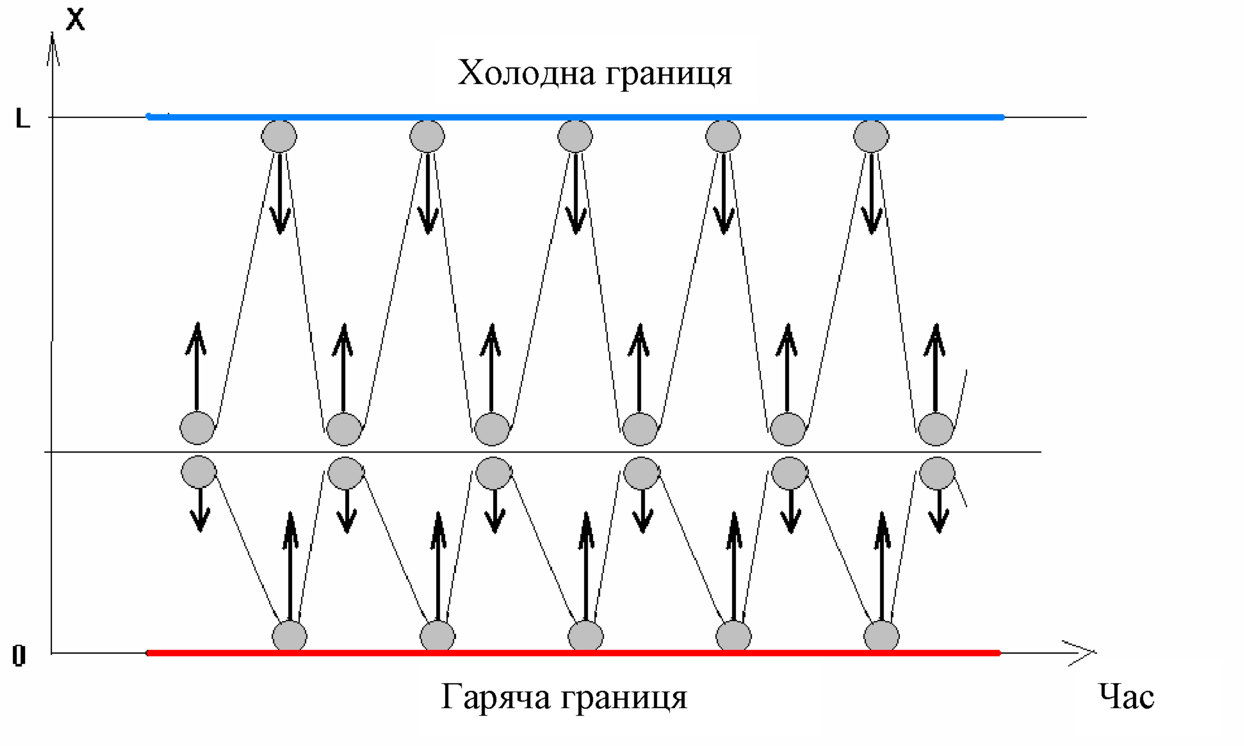


Рис.2.4 Схема тривіального стаціонарного стану.

У визначеному стаціонарному стані швидкість будь-якої частинки будемо позначати як v_i^r, у випадку коли вона рухається зліва-направо, і v_i^l, відповідно коли вона рухається у протилежному напрямку. Абсолютні значення швидкостей частинок безпосередньо перед та після виділеного зіткнення дорівнюють (див. (2.42)-(2.43)):

$$v_i^l = v_1^r - (i-1)v_{12} + (i-2)\frac{1+\alpha}{2}v_{12}, \tag{2.63}$$

$$v_i^r = v_1^r - (i-1)\frac{\alpha - 1}{2}v_{12}, \tag{2.64}$$

де $v_{12} = v_{i,i+1} = v_i^r - v_{i+1}^l$ - відносна швидкість частинок (яка дорівнює сталій).

Розмір області системи x_i, в межах якої *i*-та частинка здійснює періодичні коливання із відповідною сталою амплітудою, у стаціонарному стані, знаходимо за допомогою співвідношення:

$$x_i = \frac{v_i^r v_i^l}{v_i^l - v_i^r}T. \tag{2.65}$$

Період T стаціонарного руху, який задовольняє умовам із (2.62), (2.65) дорівнює [2]

$$T = \frac{L}{\sum\limits_{i=1}^{N} \frac{v_i^r v_i^l}{v_i^l - v_i^r}}. \tag{2.66}$$

Таким чином, як витікає з формул (2.66), (2.63) та (2.64), для визначення періоду T необхідно знайти відносну швидкість частинок v_{12} та задати умови їх відбиття на границях системи. Розглянемо тепер декілька прикладів у яких енергія надається зовні до системи (завдяки цьому і підтримується визначенний стаціонарний стан дисипативної системи).

У випадку, коли енергія надходить з обох границь системи (тобто частинки відбиваються від лівої та правої границь 1D системи з деякими визначеними сталими швидкостями v_1^r і v_N^l), v_{12} знаходимо за допомогою (2.63):

$$v_{12} = \frac{2v_{1N}}{(1-\alpha)N + 2\alpha}, \tag{2.67}$$

де $v_{1N} = v_1^r - v_N^l$.

Якщо енергія надходить до системи з боку однієї із границь (наприклад лівої), покладаємо взаємодію частинки з номером N (яка є найближчою до правої стінки системи) із своєю границею абсолютно пружньою. Тобто її відбиття від границі є дзеркальними, і не призводять до втрат енергії: $v_N^r = -v_N^l$. Приймаючи до уваги (2.64), можна виразити v_N^l через v_{12}. А саме, користуючись (2.67), отримуємо:

$$v_{12} = \frac{4v_1^r}{2(1-\alpha)N + (3\alpha - 1)}. \tag{2.68}$$

Одже, аналітичний розв'язок побудованої моделі отримано.

Зауважимо, що період T визначеного стаціонарного руху залежить від розміру системи L, та коефіцієнта непружних втрат α, а також від енергії, яку система отримує ззовні [2].

Стаціонарний стан із складною структурою. Розглянемо тепер такий різновид руху в системі яка складається із двох частинок, в якому після зіткнення, одна із частинок не встигає долетіти до найближчої до неї стінки, а друга, встигаючи відбитися від протилежної границі, настигає частинку, яка "запізнюється". На наступному кроці (такті) частинки міняються ролями. У такому разі на одне зіткнення частинки із стінкою припадає два її зіткнення з іншою частинкою. Схему, такого стаціонарного стану, зображено на Рис. 2.5. Покажемо, що у такому випадку стаціонарний режим також є принципово можливим.

Будемо позначати швидкість частинки розташованої ближче до "гарячої" стінки, звідки надходить енергія, через v, а швидкість іншої – w. Нехай після першого зіткнення частинок їх швидкості v_1 та w_1 розподілені таким чином, що "запізнюватись" буде перша частинка.

Після пружнього відбиття від стінки частинки 2 вона наздоганяє частинку 1, і вони знову зіштовхуються. При цьому, втрачається кінетична енергія (цей процес визначається коефіцієнтом α), а швидкості якими вони будуть володіти після зіткнення будуть відповідати співвідношенню (2.1)-(2.2) у п.2.1.1. Позначаємо отримані частинками швидкості після 2-го зіткнення через $v_{2,i}$ та $w_{2,i}$ (тут i - індекс завдає номер відповідного двохударного режиму).

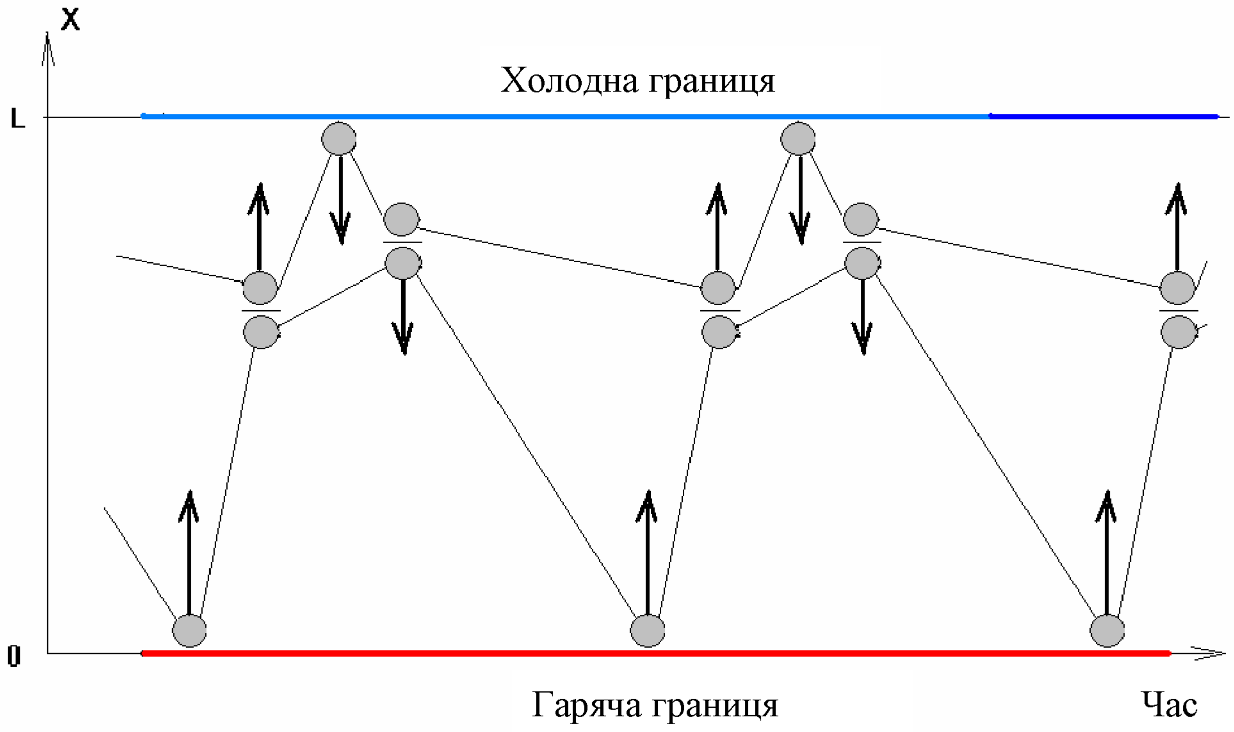


Рис. 2.5 Схема стаціонарного стану із складною структурою.

Далі, на наступному етапі, запізнюється друга частинка. При цьому частинка 1 рухається значно швидше і встигає, відбившись від ”гарячої” стінки із швидкістю v_0, наздогнати частинку 2, раніше, ніж вона відіб’ється від ”холодної” стінки. Після зіткнення частинок, отримані ними швидкості знов задовольняють співвідношенню виду (2.1)-(2.2) у п.2.1.1. Позначимо ці швидкості через $v_{1,i+1}$, $w_{1,i+1}$. На цьому кроці визначений двохударний цикл завершується.

У стаціонарному стані на протязі проміжку часу, який дорівнює періоду для кожної частинки повинні періодично відтворюватися відповідні значення швидкостей і координат. За цих умов, за допомогою (2.1) у п.2.1.1 отримуємо наступні співвідношення

$$w_1 = v_0 \frac{1+\alpha}{2}, \qquad v_1 = v_0 \frac{1-\alpha}{2}, \qquad v_2 = -\alpha v_0, \qquad w_2 = 0. \qquad (2.69)$$

Визначення координат x_1 та x_2 які завдають точки зіткнення частинок дає:

$$x_1 = x_2 = L. \qquad (2.70)$$

Із отриманих співвідношень (2.69) та (2.70) можна бачити, що у постульованому тут стані системи частинка 1 рухається по всьому об'єму системи коли частинка 2 начебто причіплюється до "холодної" стінки. Таким чином остання ефективно стає непружньою у сенсі її взаємодії із частинкою 1.

Період T визначеного типу руху в системі знаходимо у наступному вигляді [2]

$$T = \left(1 + \frac{1}{\alpha}\right)\frac{L}{v_0}. \qquad (2.71)$$

Підстановка $\alpha = 0$ до (2.71) природно призводить до руху із нескінченним періодом. Останній результат можна пояснити злипанням частинок між собою внаслідок абсолютно непружнього зіткнення, після чого частинка 1 вже ніколи не повернеться до "гарячої" стінки (за винятком повернення її у зчепленому із частинкою 2 стані).

Співвідношення (2.71) можна отримати використавши формули (2.62)-(2.68). Для цього, при розгляді системи з однією частинкою, треба припустити, що взаємодія частинки із "холодною" границею відбувається із втратою кінетичної енергії так само, як у випадку зіткнення частинок однакової маси.

2.2 Вплив матеріальних співвідношень на параметри балістичного руху у 1D ММС

2.2.1 Фізичний експеримент

Фізичний експеримент [2], який було спрямовано на спостереження теоретично спрогнозованої поведінки модельної гранульованої системи, полягав у імпульсному збудженні стовпчика металевих кульок сферичної форми у вертикальному напрямку.

За допомогою швидкодіючої цифрової камери (500 кадрів за секунду) визначались траєкторії руху частинок. Точність виміру координат частинок становила 0.5 мм. Використовувались 12 металевих кульок діаметром 8.73 мм, які було розташовано у скляній трубці діаметром 8.9 мм. Маса кожної частинки складала 2.74 г. Коефіцієнт непружних втрат під час центральних бінарних зіткнень частинок дорівнює 0.9. Імпульс збудження дорівнює $0.16\ \text{Н}\cdot\text{с}$.

Змінюючи частоти збудження (від 1 Гц до 14 Гц) вдалось виявити наявність розшарування системи на підсистеми з якісно різним характером руху. Початково частинки знаходяться у спокої у стані безпосереднього контакту одна на одній. При збудженні, з ростом частоти спочатку верхня частинка збільшуючи амплітуду своїх коливань починає коливатися майже періодично відносно решти частинок. При цьому всі інші частинки системи рухаються досить щільною групою (кластером). При подальшому збільшенні частоти збудження спостерігається перехід до стану простого періодичного руху і другої зверху частинки, потім – третьої (див. Рис. 2.6).

З огляду на попередній теоретичний розгляд модельних систем непружних частинок (див. п.2.1.1-2.1.3) цей спостерігаємий тип руху підтверджує постульоване існування вищеописаних стаціонарних станів. При збільшенні рівня енергії, яка надається до системи зовні, до стаціонарного стану (у вигляді простого періодичного руху) переходить наступна (зверху) частинка (тобто створюються умови її стаціонарного стану, які були обговорені у п.2.1.1-2.1.3).

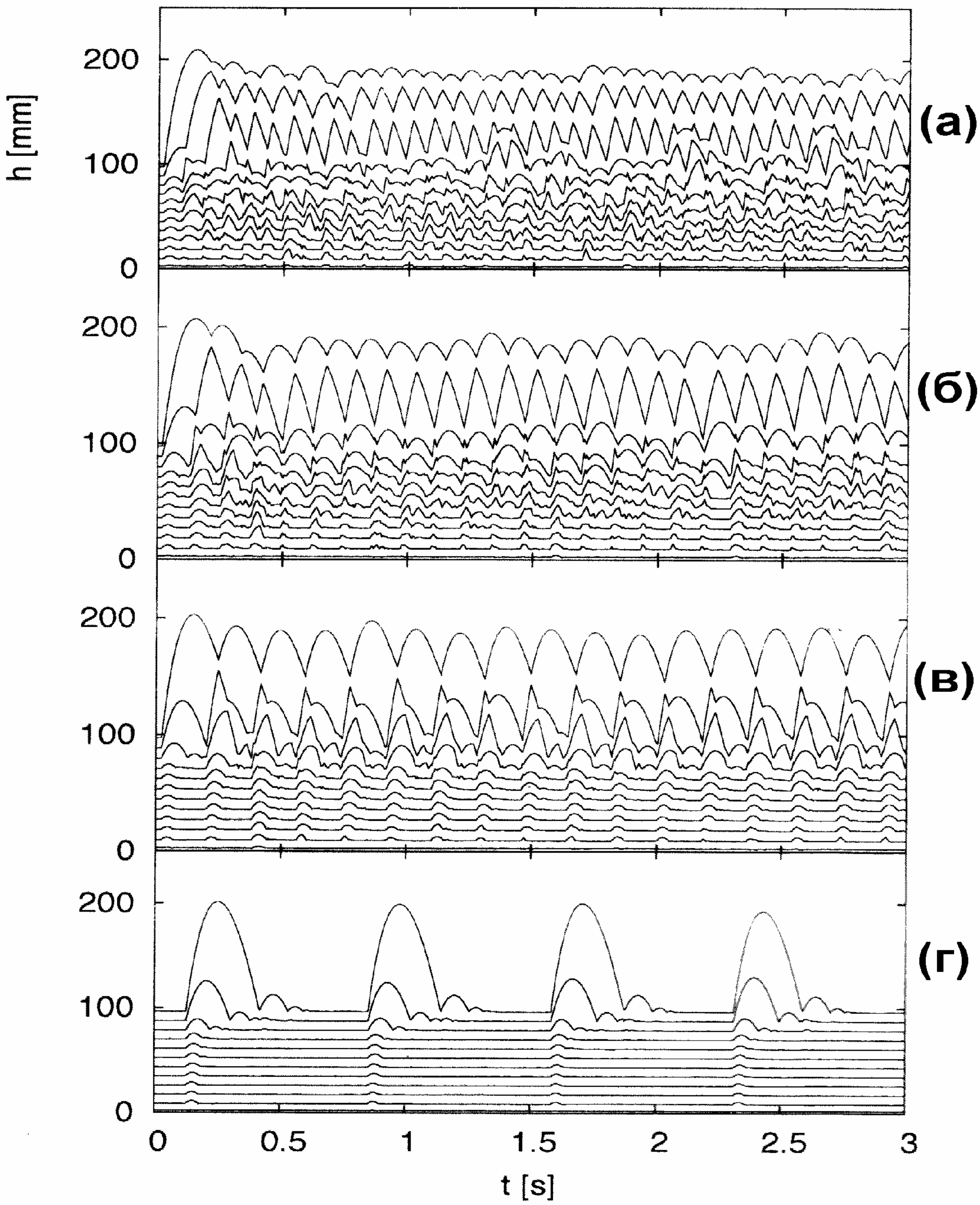


Рис. 2.6 Результати експериментальних вимірів траєкторій руху вертикальної системи з 12-ти металевих кульок, які було отримано за допомогою швидкісної цифрової камери. Частоти збудження дорівнюють, відповідно: а) 13.8 Гц; б) 8.93 Гц; в) 5.61 Гц; г) 1.37 Гц. [2]

Звернемо увагу на те, що найближчі до підкладинки і майже нерухомі частинки практично відіграють роль провідника, який передає енергію найвищій частинці стовпчика, яка переходить до стаціонарного режиму руху. Нижче, у п.2.2.2, для частинок що знаходяться у стаціонарному режимі, були розраховані розміри областей в межах яких вони здійснюють періодичний рух. Порівнюючи ці величини з даними вищеописаних експериментальних спостережень, отримуємо що розмір системи у стаціонарному стані руху добре співвідноситься з теоретично розрахованим значенням L (див. (2.61) п.2.1.3).

Таким чином знайдена у фізичному експерименті асимптотична квазістаціонарна границя руху може вважатися підтвердженням існування теоретично постульованих стаціонарних станів в реальних дисипативних відкритих системах.

2.2.2 Транспорт енергії від підкладинки до осцилюючих частинок

Змоделюємо процес транспортування енергії імпульсу від підкладинки до осцилюючих у стаціонарному стані частинок.

Уявимо собі M частинок у вертикальному стовпчику, які лежать одна на одній. Будемо збурювати цей стовпчик частинок ударами з низу. Нехай частота цих збурень f. Це призводить до розшарування у системі на дві зони: перша, що складається з N верхніх частинок, має низьку густину; друга зона, яка складається з залишившихся $M-N$ частинок, має порівняно більшу густину. Як свідчать експериментальні дані [2], із збільшенням частоти збурень зростає кількість частинок які переходять у стаціонарний стан з періодом T_N (див. Рис.2.6). Останній характеризується періодичним рухом N верхніх частинок, під час якого вони пролітають значно більші відстані, ніж $M-N$ частинки, та зіткаються поблизу одних тих самих точок простору.

Таким чином, нижні $M-N$ частинок утворюють кластер, але внаслідок непружних зіткнень вони, скоріш за все, не знаходяться у стані постійного контакту між собою. У такому разі, для опису транспорту енергії від підкладинки до $M-N$ частинки **можна скористатися розглядом бінарних зіткнень** з урахуванням витрат на дисипацію.

Нехай найнижча частинка кластера отримує внаслідок удару підкладинки такий імпульс, що її швидкість приймає значення u_1. Будемо вважати, що внаслідок дуже малих відстаней між частинками у зоні кластера, перша частинка в момент зіткнення її із наступною **невстигає зменшити власну швидкість** (за рахунок збільшення потенціальної енергії у полі тяжіння $\vec{g}$) на помітну величину. Тобто ми приймаємо, що швидкість зіткнення частинки 1 з частинкою 2 дорівнює u_1.

Слід відзначити, що для визначення швидкості другої частинки u_2, після її зіткнення з нижньою частинкою, необхідно знати швидкості обох частинок під час зіткнення. Прийнявши до уваги непружність зіткнень між частинками, можна припустити, що верхні частинки кластера до зіткнення з нижніми мають значно менші швидкості. Це можна пояснити тим, що після проходження імпульсу крізь кластер, у ньому відбувається велика кількість зіткнень, яка схожа на дрібіжання як і у випадку непружнього колапсу це призводить до ефективної втрати енергії. Тому будемо приймати, що **ці швидкості дорівнюють нулю.**

Таким чином, після удару першої частинки із швидкістю u_1, швидкість другої частинки дорівнює:

$$u_2 = \alpha u_1, \tag{2.72}$$

де α - коефіцієнт непружних втрат енергії.

Неважко збагнути, що для будь-якої j-ої частинки кластеру, її швидкість, яка надається за рахунок удару підкладинки по нижній границі кластера, має наступну форму:

$$u_j = \alpha^{j-1} u_1. \tag{2.73}$$

Верхня частинка кластера, тобто $M-N$ частинка, відіграє роль підкладинки для другої (верхньої) зони системи у стані розшарування. Тому важливо знати швидкість цієї частинки u_{M-N}, яку вона отримує від нижніх частинок:

$$u_{M-N} = \alpha^{M-N-1} u_1. \tag{2.74}$$

Частинки верхньої зони, що знаходяться у стаціонарному стані, здійснюють свій рух згідно до періоду T_N (див. (2.53) п.2.1.3):

$$T_N = \frac{2v_0}{g}\left[N + \frac{1-\alpha}{1+\alpha}\cdot\frac{(N-1)(2N-1)}{3}\right]^{-1},$$

де v_0 - швидкість найнижчої частинки верхньої зони системи, яку вона отримує від підкладинки. У нашому випадку це $M - N + 1$ частинка.

Період T_N стаціонарного стану, у якому знаходяться N верхніх частинок, звичайно, пов'язаний з частотою f збурень всієї системи (нижньої границі кластера):

$$T_N = \frac{1}{f}. \tag{2.75}$$

У найпростішому випадку, можна прийняти, що v_0 визначається за допомогою співвідношення (2.73), а саме:

$$v_0 = u_{M-N+1} = \alpha^{M-N+1-1}u_1 = \alpha^{M-N}u_1. \tag{2.76}$$

Підстановкою (2.76) та (2.75) у (2.53), отримуємо

$$f_N = \frac{g}{2\alpha^{M-N}u_1}\left[N + \frac{1-\alpha}{1+\alpha}\cdot\frac{(N-1)(2N-1)}{3}\right]. \tag{2.77}$$

Формула (2.77) демонструє при якій частоті f_N ударів підкладинки по системі з M частинок, N з них перейдуть до стаціонарного режиму руху.

Для вище згаданого експерименту [25] було розраховане значення швидкості найнижчої частинки після удару:

$$u_1 = (2.78 \pm 0.25)\ \text{м/с}. \tag{2.78}$$

Враховуючи (2.78), а також значення інших параметрів експерименту ($\alpha = 0.9$, $M = 12$, $f_1^{ex} = 5.61$Гц, $f_2^{ex} = 8.93$Гц, $f_1^{ex} = 13.8$Гц), було розраховано за формулою (2.77) відповідні частоти:

$$f_1 = 5.62\,\text{Гц}, \qquad f_2 = 10.39\,\text{Гц}, \qquad f_1 = 14.5\,\text{Гц}. \tag{2.79}$$

З наведених даних можна бачити добре співпадання експериментальних частот з теоретично розрахованими. Абсолютні відхилення значень не переважають $\Delta f < 1.5$ Гц. Відносне відхилення не перевищує 17%.

Невелика різниця, яку ми бачимо у розрахунках та експерименті, пов'язана як з похибкою визначення швидкості u_1 (яка $\approx \pm 9\%$), так і з не зовсім точним визначенням частоти на якій спостерігається стаціонарний стан. Всі ці похибки експериментальні, але є ще і похибка за рахунок деяких спрощень у теоретичному виводі формули (2.77). Справа в тому що вираз (2.76), є лише грубим наближенням, який однак, вже спроможний надати якісне та кількісне пояснення розшарування, що спостерігається у експерименті [2].

Більш точну формулу можна отримати, якщо врахувати що $M-N+1$ частинка у момент зіткнення з нижньою частинкою має відмінну від нуля швидкість v_0'. З теорії стаціонарного стану, який тут розглядається у верхній зоні системи, ця швидкість дається наступним виразом:

$$\mathrm{v}_0' = \mathrm{v}_0 - NgT_N < 0\,. \tag{2.80}$$

Нерівність вказує на той факт, що $M-N+1$ частинка в момент її зіткнення з нижньою сусідкою падає.

Після нескладних перетворень, які враховують бінарне зіткнення вище згаданої пари частинок, що знаходяться на границі двох зон, отримуємо зв'язок між їх швидкостями у наступному вигляді:

$$\mathrm{v}_0 = -NgT_N \frac{1-\alpha}{1+\alpha} + u_{M-N}\,. \tag{2.81}$$

Підставляючи (2.74) у (2.81) матиме таке

$$\mathrm{v}_0 = -NgT_N \frac{1-\alpha}{1+\alpha} + \alpha^{M-N-1} u_1\,. \tag{2.82}$$

Отриманий вираз підставимо разом з (2.75) у (2.53), після декількох спрощень, новий вираз для частоти f_N матиме такий вигляд:

$$f_N = \frac{g}{2\alpha^{M-N-1} u_1} \cdot \frac{1}{1+\alpha}\left[N(3-\alpha) + \frac{1}{3}(1-\alpha)(N-1)(2N-1)\right]. \tag{2.83}$$

Якщо порівняти формулу (2.77) та співвідношення (2.83), то останнє дає трохи меншу похибку, але вона все ж таки має той самий порядок, що і при розрахунках за формулою (2.77). Це може підтверджувати можливість існування вищезгаданих експериментальних похибок, а також ініціює інтерес до вивчення розповсюдження імпульсних збуджень крізь ланцюжок контактуючих частинок (окремі моделі яких розглянуті у Розділі 4).

2.2.3 Зв'язок між параметрами системи та гармонічно осцілюючою підкладинкою

Як показано вище (див. п.2.1.1-2.1.3), 1D система N непружних безструктурних частинок $(g \neq 0)$ може знаходитися у асимптотичному квазістаціонарному стані за умов підведення енергії ззовні. Але необхідна енергія підводиться до енергії імпульсно. Виникає питання: Якими повинні бути умови руху підкладинки для реалізації у такій системі стаціонарного режиму руху частинок? Знайдемо ці умови у вигляді матеріальних співвідношень для гармонічного закону руху підкладинки.

Швидкість частинки після зіткнення (абсолютно пружного) її з підкладинкою дорівнює

$$v_0 = v_m \cos(\omega t) - v_0^{'}, \tag{2.84}$$

де v_m - максимальна швидкість руху підкладинки, $v_0^{'}$ - швидкість найнижчої частинки, з якою та відбивається від осцилюючої підкладинки у момент зіткнення. Швидкість $v_0^{'}$ визначається відповідно до (2.80) наступним чином

$$v_0^{'} = v_0 - NgT < 0 .$$

Підставимо у (2.84) вираз (2.80):

$$v_m \cos(\omega t) = 2v_0 - NgT . \tag{2.85}$$

Так як з (2.53) витікає

$$v_0 = \frac{gT}{2} \cdot \left(N + \frac{1-\alpha}{1+\alpha} \cdot \frac{(N-1)(2N-1)}{3} \right), \tag{2.86}$$

тоді підстановкою (2.86) у вираз (2.85) отримуємо

$$v_m \cos(\omega\, t) = \frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon} \cdot gT \cdot \frac{(N-1)(2N-1)}{3}. \tag{2.87}$$

Так як амплітуда руху підкладинки дорівнює $A = \frac{v_m}{\omega}$, тоді максимальне відносне прискорення підкладинки $\Gamma = \frac{A\omega^2}{g}$ має наступний вигляд:

$$\Gamma = 2\pi \frac{v_m}{gT}. \tag{2.88}$$

Після підстановки (2.87) у вираз (2.88) параметр Γ буде мати наступний вигляд:

$$\Gamma = 2\pi \frac{1-\alpha}{1+\alpha} \cdot \frac{(N-1)(2N-1)}{3\cos(\omega\, t)}. \tag{2.89}$$

Фазу $\varphi = \omega t$ коливання підкладинки, за якої відбувається регулярне передавання порції енергії до системи непружних частинок у стаціонарному стані, з формули (2.89) може бути записано у вигляді

$$\varphi = \arccos\left(2\pi \frac{1-\alpha}{1+\alpha} \cdot \frac{(N-1)(2N-1)}{3\Gamma} \right). \tag{2.91}$$

Вираз (2.90) показує, як змінюється фаза φ в залежності від N, α, або Γ.

Таким чином нами були знайдені матеріальні співвідношення, які поєднують параметри для відповідних стаціонарних станів системи з параметрами підкладинки, з боку якої відбувається підведення енергії необхідної для компенсації дисипативних втрат під час непружних зіткнень частинок.

2.3 Стійкість періодичних станів та фазовий аналіз (стохастизація)

2.3.1 Стійкість стаціонарного стану в горизонтальній системі непружних частинок

Розглянемо тепер питання про стійкість стаціонарного стану, на прикладі одновимірної системи, яка складається з двох непружніх частинок. Гаряча границя системи завдається таким чином, що найближча до неї частинка, нехай перша, завжди відбивається від неї з однією і тією ж сталою швидкістю v_0. Відбиття другої частинки від протилежної границі здійснюється абсолютно пружньо, тобто без будь-яких втрат енергії.

Розглянемо рух частинок у побудованій моделі який відбувається за наступним сценарієм:

- перша частинка з швидкістю v_0 налітає на другу частинку, яка рухається значно повільніше, з швидкістю w_2 на зустріч першій частинці;
- після зіткнення перша частинка продовжує рухатися у своєму ж напрямку, з меньшою швидкістю v_1, а друга частинка змінює напрям руху на зворотній, і починає рухатися швидше за першу частинку з швидкістю w_1;
- коли друга частинка досягне границі системи L, вона відбивається і рухається назустріч перший частинці з швидкістю $-w_1$;
- після наступного зіткнення частинок швидкості розподіляються таким чином, що друга частинка рухається без зміни напрямку свого руху, але з меншою швидкістю w_2, у той час як перша частинка змінює напрямок свого руху, а її швидкість v_2 перевищує швидкість другої частинки;
- далі вищеописаний сценарій повторюється.

Крім номера частинки будемо відрізняти швидкості частинок ще за допомогою номеру періоду руху (p), який описується вищеописаною схемою.

Приймаючи до уваги закони непружнього зіткнення частинок знаходимо відповідні швидкості частинок:

$$w_{2,k+p} = \alpha^p w_{2,k}, \qquad v_{2,k+p} = -\alpha v_0 \tag{2.91}$$

$$v_{1,k+p} = \frac{1-\alpha}{2} v_0 + \frac{1+\alpha}{2} w_{2,k} \alpha^{p-1}, \tag{2.92}$$

$$w_{1,k+p} = \frac{1+\alpha}{2} v_0 + \frac{1-\alpha}{2} w_{2,k} \alpha^{p-1}. \tag{2.93}$$

З (2.91)-(2.93) витікає, що

$$\lim_{p\to\infty} w_{2,k+p} = 0, \qquad v_{2,k+p} = \text{const} \tag{2.94}$$

$$\lim_{p\to\infty} v_{1,k+p} = \frac{1-\alpha}{2} v_0, \qquad \lim_{p\to\infty} w_{1,k+p} = \frac{1+\alpha}{2} v_0 \tag{2.95}$$

Таким чином виявляється, що вищеописана система після серії зіткнень переходить саме до стаціонарного режиму руху (див. (2.69)). Узагальнюючи (2.91)-(2.95) отримуємо для швидкості наступне рекурентне співвідношення [2,42]

$$v_{k+p} = \alpha^p (v_k - v_\infty) + v_\infty, \tag{2.96}$$

де v_∞ - швидкість частинки яка відповідає її руху у стаціонарному стані.

Нехай x_p це координата зіткнення частинок вищеописаного типу руху. На протязі проміжку часу довжиною у період у різних точках простору відбувається - відповідно, два зіткнення частинок проміж собою. Нижній індекс p визначає номер режиму з періодичним рухом. Покладаючи, що рух частинок між зіткненнями відбувається з сталими швидкостями, знаходимо x_p у наступному вигляді [2]

$$x_p = x_0 \sum_{k=1}^{p} B_{k-1} + L \sum_{l=1}^{p} A_{l-1} \prod_{m=1}^{p-l} B_{l+m-1} \tag{2.97}$$

де x_0 - координата першого зіткнення частинок 1 і 2; L – розмір системи;

$$A_j = \frac{2v_{1,j}}{v_0 - w_{2,j}}, \qquad B_j = \frac{v_{1,j} - w_{1,j}}{w_{2,j} - v_0}. \tag{2.98}$$

Користуючись формулами (2.97) і (2.98) можна показати, що $\lim\limits_{p\to\infty} x_p = L$. На підставі (2.94) і (2.95), та (2.97), (2.98) можна зробити висновок, що розглянута система асимптотично прямує до стаціонарного стану з періодом, який визначається формулою (2.71) у п.2.1.4. На Рис. 2.7 наведені данні чисельного моделювання, поведінки розглянутої системи непружних частинок, які наочно підтверджують вище зроблені висновки.

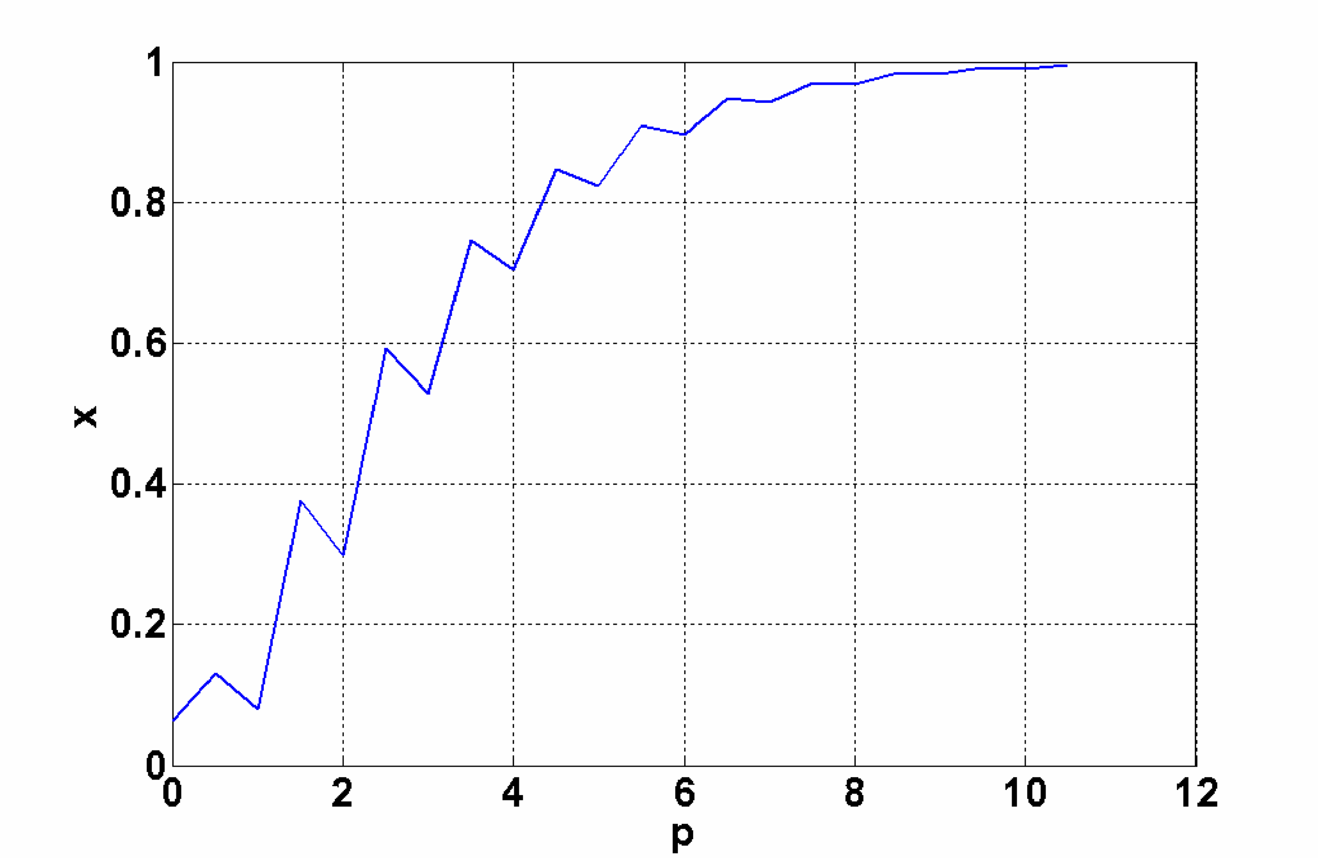


Рис. 2.7 Результати чисельних розрахунків за формулами (2.97), (2.98). Залежність координати зіткнення частинок 1 та 2 між собою від кількості їх зіштовхувань, при наступних параметрах, які визначаються за допомогою граничних та початкових умов: L=1, $v_0 = 1$, $\alpha = 0.5$, $v_1 = 0.0250$, $w_2 = 0.675$, $x = 0.0632$. [2,42]

Деякі кінетичні процеси, що протікають у ГМ визначаються за допомогою так званого параметру впорядкування [43]. Визначимо параметр впорядкування $\phi(p)$ в розглядаємій системі наступним чином:

$$\phi(p) = \left(\frac{v_{k+p}}{v_\infty} - \frac{v_k}{v_\infty}\right) \Bigg/ \left(1 - \frac{v_k}{v_\infty}\right). \tag{2.99}$$

Користуючись (2.96) отримуємо [2, 42]:

$$\phi(p) = 1 - \alpha^{p}. \qquad (2.100)$$

За наступних умов, $p >> 1$, $\alpha \neq 1$, можна записати вираз (2.100) в експоненціальній формі:

$$\phi(p) = 1 - e^{-p(1-\alpha)} \quad . \qquad (2.101)$$

Відомо [43], що в деяких процесах з ГМ (наприклад, радіальна сегрегація частинок за розмірами) залежність відповідно визначеного параметру впорядкування ϕ, який визначає систему, від часу t описується саме експоненціальним законом:

$$\phi(t) = 1 - e^{-\frac{t}{\tau_0}}, \qquad (2.102)$$

де: τ_0 - характерний час релаксації параметра впорядкування.

Порівнюючи (2.101) з (2.102), та враховуючі $p \approx t$, можна оцінити характерний час релаксації τ_0 параметра впорядкування у випадку розглянутої нами вище моделі [2]:

$$\tau_0 = \frac{1}{1-\alpha}. \qquad (2.103)$$

З (2.103) витікає, що із збільшенням коефіцієнта непружніх втрат енергії α - зростає час релаксації τ_0 системи до асимптотичного квазі-стаціонарного стану. При $\alpha \to 1$, $\tau_0 \to \infty$, тобто система навіть асимптотично не прямує до квазі-стаціонарного стану [2, 42]. Зроблені висновки повністю погоджуються з даними чисельних експериментів, які було здійснено за допомогою методів молекулярної динаміки та розрахунків за отриманою шляхом аналітичних розв'язків формулою. Така залежність підтверджується і експериментально [44].

2.3.2 Стохастизація у горизонтальній 1D системі N непружних частинок

Для вивчення динамічних властивостей г.м. використовуються теоретичне, чисельне та натурне моделювання. У зв'язку із складністю опису реальних г.м., часто мають справу із спрощеними моделями, в тому числі із одновимірними. Одним з чисельних методів, що дозволяє моделювати г.м., є метод молекулярної динаміки (МД). Останній має як недоліки, так і переваги перед іншими методами. До позитивного використання МД можна віднести можливість моделювання нерівноважних станів, тобто коли система здійснює перехід з одного квазістаціонарного стану до іншого.

Розглянемо найпростішу одновимірну модельну систему таких частинок (N=2), зіткнення між якими відбуваються непружно, і де надходження енергії до системи відбувається з боку однієї з границь. Як показує чисельне моделювання, у такій модельній системі, для значень зворотного коефіцієнту $\alpha \approx 0.62 \div 1$ тривалість переходу між квазістаціонарними станами – стрімко зростає [45]. При цьому, рух частинок значно ускладнюється у порівнянні із їх рухом поблизу квазі-стаціонарних станів (див. Рис. 2.8), та починає нагадувати стадію «стохастизації» – тобто такий режим, коли параметри системи виглядають випадковими.

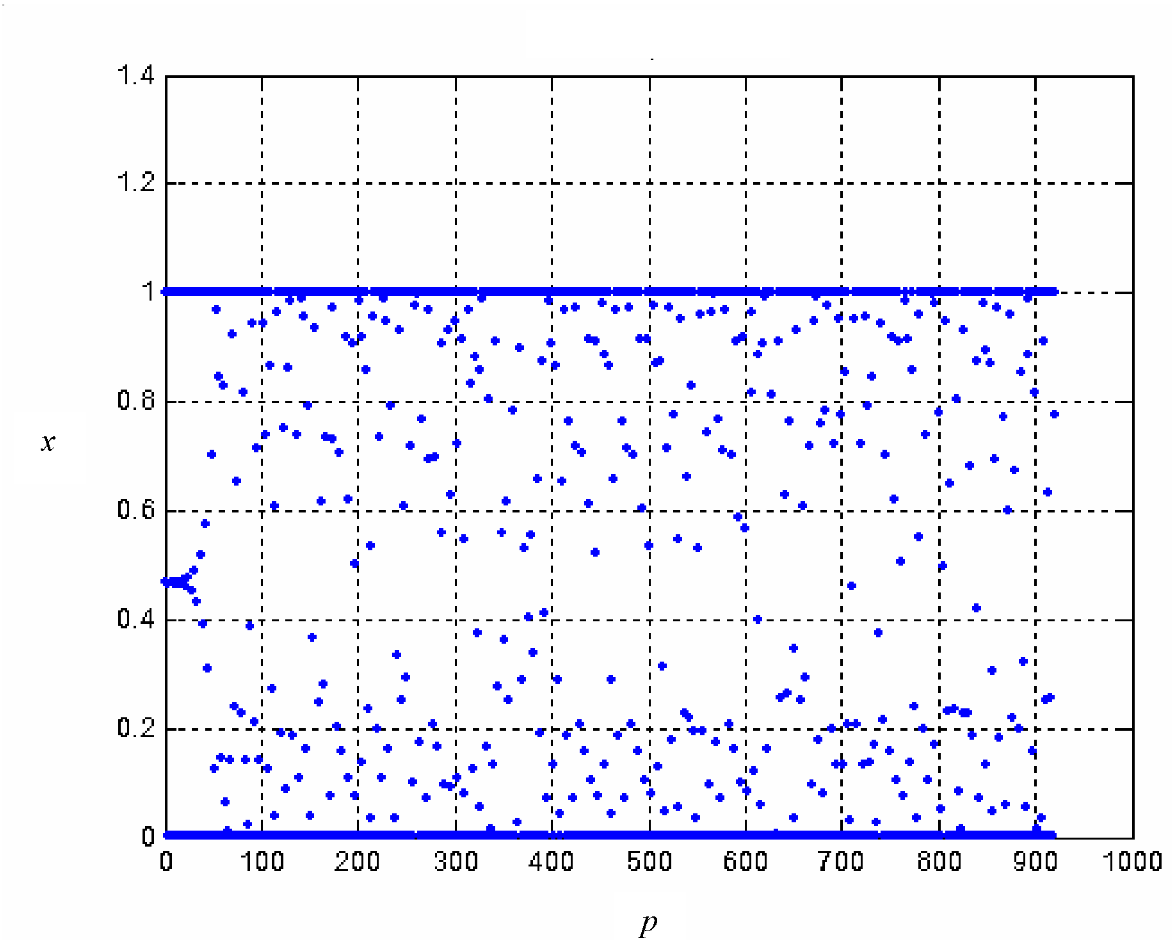


Рис. 2.8 Квазічасова залежність координати зіткнення частинок у модельній дисипативній системі (N=2, p – кількість зіткнень частинок) за результатами чисельного МД моделювання. [45]

Так як цей режим відповідає фазі детермінованого хаосу, то він легко може бути відтворений при чисельному моделюванні. Легко бачити, що розподілення координати зіткнень частинок (для наведеного на Рис. 2.8 випадку) – нерівномірне (так наприклад, на границях системи зіткнення відбуваються частіше). Ця нерівномірність аномально підсилюється із зростанням α, та зовсім зникає для $\alpha \approx 0.62$ та менше.

2.3.3 Рух центру мас горизонтальної 1D системи N непружних частинок

Розглянемо знову 1D систему N непружних частинок, які розташовані проміж ”гарячою” та ”холодною” границями. Покладемо, що в начальному стані швидкості усіх частинок, окрім першої, дорівнюють нулю. Перша частинка, отримавши певну порцію енергії від ”гарячої” границі, рухається із швидкістю v_0 у напрямку решти частинок. Після першого зіткнення з найближчою до неї частинкою, як витікає з (2.43), швидкість k-ї частинки дорівнює

$$v_k = v_0\left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{k-1}, \tag{2.104}$$

а після другого зіткнення, з урахуванням (2.42) –

$$v_k = v_0\left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{k-1}\frac{1-\alpha}{2}, \tag{2.105}$$

де k – номер розглядаємої частинки. У випадку слабкої дисипації у системі під час зіткнень (тобто при $\alpha \approx 1$) можна вважати що після другого зіткнення k-ї частинки її швидкість зменьшується майже до нуля $v_k \approx 0$. У такому випадку легко уявити характер руху частинок після відбиття N-ї частинки від абсолютно пружньої границі системи. А саме: після першого зіткнення маємо:

$$u_k = -v_0\left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{(N-1)+(N-k)}. \tag{2.106}$$

а після другого зіткнення –

$$u_k = -v_0\left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{(N-1)+(N-k)}\frac{1-\alpha}{2}, \tag{2.107}$$

де u_k – швидкість k-ї частинки на шляху від N-ї до 1-ї частинки. Як і у попередньому випадку при $\alpha \approx 1$, можна вважати що після другого за чергою зіткнення k-ї частинки $u_k \approx 0$.

Швидкість руху центру мас V_c отримуємо, приймаючи до уваги, що

$$V_c = V_{in} + V_{out}, \tag{2.108}$$

де $V_{in} = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} v_k$, $V_{out} = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} u_k$.

Відповідно V_c має наступний вигляд:

$$\begin{aligned} V_c &= \frac{2v_0}{N(1-\alpha)}\left[1 - \left(\frac{3+\alpha}{2}\right)\left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{N-1} + \left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{2N-1}\right] = \\ &= \frac{2v_0}{N(1-\alpha)}\left[1 - \sqrt{\frac{(3+\alpha)^2}{8(1+\alpha)}} \cdot 2\sqrt{\frac{1+\alpha}{2}}\left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{N-1} + \left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{2N-1}\right] \end{aligned} \tag{2.109}$$

Враховуючи, що для $1 \geq \alpha \geq 0$, маємо $1 \leq \sqrt{\frac{(3+\alpha)^2}{8(1+\alpha)}} \leq 1.06$, вираз для V_c може бути записано у спрощеному вигляді [2]:

$$V_c \approx \frac{2v_0}{N(1-\alpha)}\left[1 - \left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{N-\frac{1}{2}}\right]^2 \approx \frac{2v_0}{N(1-\alpha)}\left[1 - \exp\left(-\frac{1-\alpha}{2}\cdot\left(N - \frac{1}{2}\right)\right)\right]^2. \tag{2.110}$$

Зауважимо, що $V_c \geq 0$. Тобто центр мас рухається у бік ”холодної” границі. Насправді, центр мас неможе постійно рухатися у одному напрямку тому що система має обмежений розмір (див. Рис. 2.9). Таким чином, отримане значення швидкості дрейфу центру мас не дає повної картини поведінки системи. Але, ця величина дозволяє оцінити швидкість центру мас у граничних випадках великих N та α.

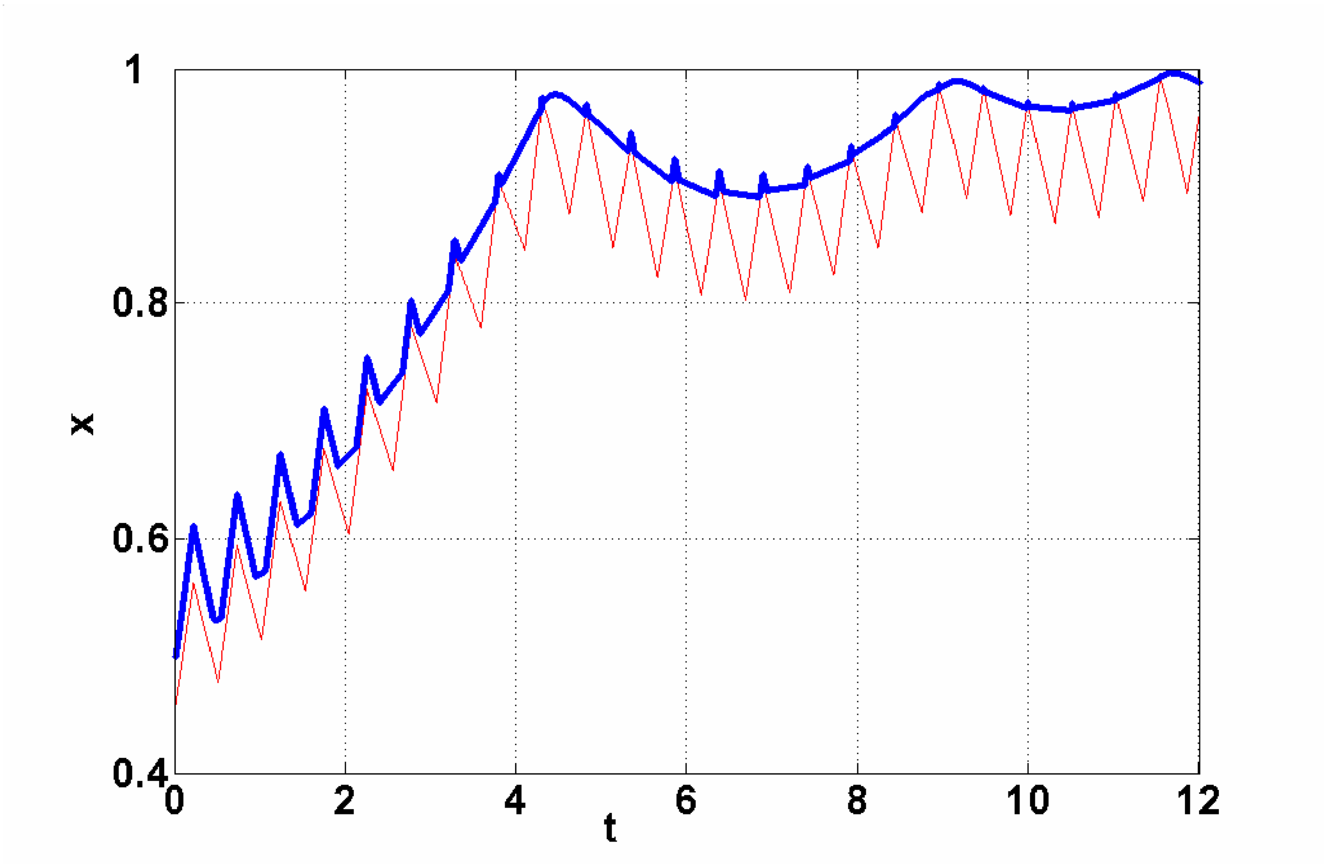


Рис. 2.9 Результати чисельних розрахунків руху центру мас у 1D горизонтальній системі 10-ти непружних частинок. Неконтрасно-суцільна лінія – відповідає руху центру мас системи в цілому; контрасно-суцільна – відтворює рух центру мас N-1 непружної частинки (за винятком руху першої частинки, яка є найближчою до ”гарячої” границі системи); $\alpha = 0.95$, $v_0 = 5$, $\Delta t = 10^{-5}$. [2]

У границі коли $\alpha \to 1$ (або $N \to \infty$), для швидкості центра мас маємо $V_c \to 0$. Таким чином, швидкість центру мас розглянутої системи експоненціально мала у випадку великих за розмірами систем, які складаються з великої кількості частинок, а також - у разі малих непружних втрат енергії які відбуваються під час зіткнень.

На Рис. 2.9 наведені результати чисельного обчислення руху центру мас, які наочно підтверджують отримані вище теоретичні висновки.

2.4 Тактовий аналіз руху у 1D ММС з урахуванням тертя за формулою Стокса

У дослідженні структури та динамічних властивостей нерівноважних матеріалів особливо захоплюючий розвиток отримало визнання спеціального типу кластеризації – так званого непружного колапсу. Мак-Намара (McNamara) та Уільям Юнг (William Young) показали [46], що непружність у зіткненнях частинок, може приводити до нескінченної кількості зіткнень, за кінцевий проміжок часу [7]. У одновимірному випадку, така послідовність зіткнень залишає усі частинки "угрузлими" у замкненому контакті без відносного руху. У великому ступені, непружний колапс зберігається у багатовимірних системах, де він призводить щільні ниткоподібні кластери, і таким чином може бути відповідальним за неоднорідну кластеризацію [47]. Точний зв’язок між непружним колапсом та явищем кластероутворення, яке є початковим кроком до руйнування звичайної гідродинаміки [34], ще потребує з’ясування. Один правдоподібний сценарій такий, що у системі де виникають кластери, для непружного колапсу потрібно щоб втрати енергії у зіткненнях перевищували критичну величину.

Приймаючи до уваги вище сказане, спробуємо визначити які-небудь критичні значення параметрів руху частинок у такому режимі, де ні за яких умов неможлива кластеризація. Таким чином, наш підхід полягає у постулюванні деякого спеціального стаціонарного типу руху частинок, при якому відсутні умови для кластеризації. У подальшому зусилля спрямовуються на пошук критеріїв зриву даного режиму, що, як пропонується, повинно відповідати тому, що за цими критеріями система буде знаходитися у таких станах, коли кластеризація імовірно зможе відбуватись.

2.4.1 Урахування опору середовища за відсутності сили тяжіння

Розглянемо найпростішу систему двох непружних частинок N=2, які знаходяться у одновимірному об’ємі. Витрати енергії компенсуються за рахунок зовнішнього резервуару з нескінченною ємністю у моменти зіткнення частинки 1 с однією з двох стінок (підкладинок), надаючи частинці при цьому завжди одну й ту ж швидкість v_0. Інша стінка забезпечує абсолютно пружну взаємодію з частинкою 2. Такі умови призводять до встановлення стаціонарного стану, у якому кожна частинка i може рухатися лише у обмеженому просторі з лінійними розмірами x_i. Тоді розмір системи L, має вигляд (див. (2.62))

$$L = \sum_{i=1}^{N} x_i \ .$$

Беручи до уваги, що в даному стаціонарному режимі стан системи частинок є схильним до періодичного повторення, знаходимо, що найбільш важливим невідомим параметрам такого руху для нас є його період (T).

Розподіл швидкостей після непружного зіткнення частинок між собою можна описати на підставі закону збереження імпульсу, вводячи для урахування незбереження енергії коефіцієнт удару (α), який характеризує дисипативність зіткнень. У зарубіжній літературі коефіцієнт α відомий як restitution coefficient [8, 34, 48, 49].

Позначаючи швидкості частинок 1 та 2 до зіткнення v_1 та v_2, а після зіткнення v_1' та v_2', отримуємо згідно до (2.1) та (2.2)

$$v_1' = v_1 - \frac{1+\alpha}{2} v_{12}, \qquad\qquad v_2' = v_2 - \frac{1+\alpha}{2} v_{12} \ ,$$

де $v_{12} = v_1 - v_2$ – відносна швидкість руху частинок у момент зіткнення.

У проміжках між зіткненнями, рух сферичної частинки в в'язкому середовищі і в умовах відсутності гравітації (g = 0) – визначається другим законом Ньютона: $ma = - F_s$, де $F_s = 6\pi\eta r v$ – сила Стокса. Введемо позначення $\gamma = \dfrac{6\pi\eta r}{m}$, тоді рівняння руху прийме наступний вигляд

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \gamma v = 0 \ . \tag{2.111}$$

Розв’язок рівняння (2.111), який дозволяє визначити положення та швидкість частинки у момент часу t, якщо відомі значення v_0 та x_0 у початковий момент часу $t_0 = 0$, визначається наступним співвідношеннями

$$\mathrm{v}(t) = \mathrm{v}_0\, \mathrm{e}^{-\gamma t}, \tag{2.112}$$

$$x(t) = x_0 + \frac{\mathrm{v}_0 - \mathrm{v}(t)}{\gamma}\ . \tag{2.113}$$

У режимі, який ми розглядаємо, всі відповідні швидкості і координати в околиці моментів зіткнень - є константами. Виходячи з цього, зауважимо, що і швидкість частинки в момент удару її об стінку, також є такою величиною, що зберігається. Позначимо цю швидкість $\mathrm{v}_0^{'}$ і v, для частинок 1 і 2 відповідно.

Використовуючи прийняті позначення і формули (2.1)-(2.2), (2.112), (2.113), розглянемо низку співвідношень для швидкостей частинок та інших параметрів модельної системи.

Для частинки 1 з (2.1)-(2.2) та (2.113) отримуємо

$$\begin{cases} x_i = \dfrac{\mathrm{v}_0 - \mathrm{v}_1}{\gamma} \\ -x_i = \dfrac{\mathrm{v}_1^{'} - \mathrm{v}_0^{'}}{\gamma} \end{cases} \quad \rightarrow \quad \mathrm{v}_0^{'} = \mathrm{v}_0 - \frac{1+\alpha}{2}\mathrm{v}_{12}\,. \tag{2.114}$$

Для частинки 2 з (2.1)-(2.2) та (2.113) знайдемо v

$$\begin{cases} x_i - L = \dfrac{-\mathrm{v} - \mathrm{v}_2}{\gamma} \\ L - x_i = \dfrac{\mathrm{v}_2^{'} - \mathrm{v}}{\gamma} \end{cases} \quad \rightarrow \quad \mathrm{v} = \frac{1+\alpha}{4}\mathrm{v}_{12}\,. \tag{2.115}$$

Із (2.114) та (2.115) отримуємо v_{12}

$$-L = -\frac{\mathrm{v}_0 - \mathrm{v}_1}{\gamma} + \frac{-\mathrm{v}_2 - \mathrm{v}}{\gamma}; \quad \rightarrow \quad \mathrm{v}_{12} = \frac{4}{3-\alpha}(\mathrm{v}_0 - \gamma L)\,. \tag{116}$$

Розкладемо період на два інтервали $T = t_i^{+} + t_i^{-}$, де час має індекс „+" („-") коли частинка і має позитивну (від'ємну) швидкість. Тоді з (2.112) знаходимо

$$\begin{cases} \mathrm{v}_1 = \mathrm{v}_0 \mathrm{e}^{-\gamma t_1^{+}} \\ \mathrm{v}_0^{'} = \mathrm{v}_1^{'} \mathrm{e}^{-\gamma t_1^{-}} \end{cases} \quad \rightarrow \quad \frac{\mathrm{v}_1 \mathrm{v}_0^{'}}{\mathrm{v}_1^{'} \mathrm{v}_0} = \mathrm{e}^{-\gamma T}, \tag{2.117}$$

$$\begin{cases} \mathrm{v} = \mathrm{v}_2^{'} e^{-\gamma t_2^{+}} \\ \mathrm{v}_2 = -\mathrm{v} e^{-\gamma t_2^{-}} \end{cases} \quad \rightarrow \quad \frac{-\mathrm{v}_2}{\mathrm{v}_2^{'}} = e^{-\gamma T}\,. \tag{2.118}$$

Із (2.117) та (2.118) з використанням виразів (2.1)-(2.2), (2.114), (2.115), отримуємо квадратне рівняння відносно v_2

$$v_2^2 + v_2\left(v_{12} - \frac{2v^2}{v_0 - v}\right) + v_{12}v\frac{v_0 - 2v}{v_0 - v} = 0, \tag{2.119}$$

розв'язок якого із урахуванням потрібного нам знаку запишемо так

$$v_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}. \tag{2.120}$$

Підставляючи (2.1)-(2.2) та (2.115) у співвідношення (2.118), а далі, логарифмуючи, ми знаходимо період руху частинок у стаціонарному режимі

$$T = \frac{1}{\gamma}\ln\left(-\frac{2v}{v_2} - 1\right). \tag{2.121}$$

Зрив режиму можна визначити за відсутності фізичного сенсу у деяких величин розрахованих за допомогою отриманих розв'язків моделі (наприклад, коли координата зіткнення частинок виходить за межі самої системи, або якщо $T < 0$, або коли отриманні комплексно спряжені числа для дійсної величини).

Нам вдалося встановити наявність критичного параметра – мінімальної енергії $E_{\min}$ переданої частинці 1 від резервуара (підкладки), вище якої стає можливою реалізація системи в розглянутому тут стаціонарному стані. Внаслідок того, що в нашому режимі реалізований найпростіший тип руху частинок в стаціонарному стані, то вони рухаються в момент зіткнення назустріч один одному. Тоді обов'язковою умовою такого руху буде позитивність їх відносної швидкості руху. З (2.116) легко бачити, що нашому режиму відповідає така умова

$$v_0 > v_c = \gamma L \qquad \text{або} \qquad E > E_{\min} = \frac{m v_c^2}{2} = \frac{9\pi\eta^2 L^2}{2\rho r}, \qquad (2.122)$$

де ρ - густина матеріалу з якого складаються тверді частинки.

Цей результат узгоджується з результатами чисельного моделювання методом молекулярної динаміки. Координата зіткнення частинок x_c, у розглянутому тут стаціонарному режимі, прямує до нуля (до підкладки) за умови зменшення v_0 до v_c. Для значення $x_c = 0$ режим зривається.

Спочатку перебуваючи в заданому режимі система після малого збурення переходить в інший стан. Згідно до чисельних розрахунків період коливання частинок в цьому новому стані трохи більше ніж в початковому стані. Так як розмір надходження енергії в систему при цьому не змінювався, то можна зробити висновок, що система переходить в цей стан, як в більш енергетично вигідний. У новому стані система споживає від зовнішнього резервуара меншу кількість енергії в одиницю часу. Цьому режиму характерно те, що частинка 2 притискається частинкою 1 до абсолютно пружної («холодної») границі системи і практично припиняє свій рух, в той час як частинка 1 здійснює масштабні коливання між часткою 2 і підкладкою («гарячої» границі).

Слід зазначити, що критерії зриву режиму залежать не тільки від зазначених параметрів (η, ρ, r, L), але також і від α. Критичний параметр α_c, який також пророкує зрив режиму, істотно залежить від розмірів частинок, та уразі їх зменшення прямує до 1.

Як показує чисельне моделювання, параметри α і L, є критеріями зриву стаціонарного режиму і при відсутності середовища як додаткового джерела дисипації енергії в системі [2]. Однак, при цьому зникає вище наведений у (2.122) критерій ($E_{\min}$=0).

Таким чином, поява в моделі критерію $E_{\min}$ зумовлено урахуванням дисипації енергії за рахунок опору середовища, завдяки якому втрата енергії в зіткненні і русі, для $E < E_{\min}$, може перевищувати критичну величину. Це в кінцевому підсумку може призвести до кластеризації в системі, зокрема до явища непружного колапсу.

2.4.2 Урахування опору середовища за наявності сили тяжіння

З огляду на те, що велика кількість процесів відбувається у полі сил тяжіння – корисно розглянути модель аналогічну розглянутої у п.2.4.1 із додаванням до неї взаємодії частинок із зовнішнім полем. Таким чином, в розглядає мій тут моделі: $g \neq 0$ та $\gamma \neq 0$. Спрямовуючи вектор прискорення вільного падіння у бік який є протилежним напрямку осі координат, отримуємо систему, в якій частинки завжди будуть повертатися на підкладку. У цій моделі, для простоти розгляду, можна відмовитися від фіксації розмірів системи деяким параметром L, прибравши границю через яку до системи енергія не надходить. Це можливо, тому що роль повернення частинок тепер бере на себе сила їхнього тяжіння яка спрямована до підкладки.

Припустимо, що в сконструйованій таким чином системі також є можливим стаціонарний стан, який було визначено вище (див. п.2.4.1). Знайдемо період T коливання частинок в такому режимі, приймаючи до уваги, що умови взаємодії частинок між собою і з підкладкою залишаються такими ж як і в моделі п.2.4.1.

Рівняння руху частинки між зіткненнями із доданою силою тяжіння mg, має вигляд:

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \gamma V + g = 0, \tag{2.123}$$

розв’язок якого має вигляд

$$V(t) = \left(V_0 + \frac{g}{\gamma}\right)e^{-\gamma t} - \frac{g}{\gamma}, \tag{2.124}$$

$$x(t) = x_0 + \frac{V_0 - V(t) - gt}{\gamma}. \tag{2.125}$$

З розв’язків (2.124) та (2.125) можна отримати низку корисних співвідношень:

$$V_0 - V(t) - gt = (x(t) - x_0)\gamma, \tag{2.126}$$

$$e^{-\gamma t}=\frac{V(t)+\frac{g}{\gamma}}{V_0+\frac{g}{\gamma}}. \qquad (2.127)$$

Розглянемо рух частинки 2 між зіткненнями протягом часу Т. Поклавши координату зіткнення частинок в стаціонарному режимі такою, що дорівнює x_c і скориставшись виразом (2.116) отримуємо:

$$V_2^{/}-V_2-gT=(x_c-x_c)\gamma=0. \qquad (2.128)$$

Приймаючи до уваги (2.1)-(2.2) знаходимо

$$gT=V_2^{/}-V_2=\frac{1+\alpha}{2}V_{12}, \qquad (2.129)$$

звідки можна записати період T у наступному вигляді:

$$T=\frac{1+\alpha}{2g}V_{12}. \qquad (2.130)$$

Розглянемо рух частинки 1 при русі її від підкладки до зіткнення з частинкою 2 та у зворотньому напрямку. Відповідно до виразу (2.126) отримуємо

$$V_0-V_1-gt_1^{+}=(x_c-0)\gamma, \qquad (2.131)$$

$$V_1^{/}-V_0^{/}-gt_1^{-}=(0-x_c)\gamma, \qquad (2.132)$$

де $T=t_1^{+}+t_1^{-}=t_2^{+}+t_2^{-}$. Нижній індекс відповідає номеру частинки час руху якої розглядається, а верхній індекс відповідає знаку швидкості цієї частинки. Додаючи обидва вирази у (2.131) та (2.132) отримуємо

$$V_0-V_0^{/}+V_1^{/}-V_1-gT=0, \qquad (2.133)$$

звідки із урахуванням (2.1)-(2.2) та (2.129) знайдемо вираз для швидкості з якою частинка 1 налітає (падає) на підкладинку

$$V_0^{/}=V_0-2gT=V_0-(1+\alpha)V_{12} \qquad (2.134)$$

Для частинки 2, з (2.124) із урахуванням (2.1)-(2.2) та (2.129), вираз для швидкості зіткнення її з частинкою 1 може бути знайдено в наступному вигляді

$$V_2=gT\frac{1}{e^{\gamma T}-1}-\frac{g}{\gamma}, \qquad (2.135)$$

звідки з урахуванням (2.128) отримуємо

$$V_2^{/}=\frac{gT}{1-e^{-\gamma T}}-\frac{g}{\gamma}. \qquad (2.136)$$

З (2.130) і (2.135) з урахуванням (2.1)-(2.2), знайдемо V_1 (швидкість частинки 1 у момент зіткнення її з частинкою 2) та $V_1^{/}$ (швидкість частинки 1 відразу після бінарного зіткнення):

$$V_1=gT\left[\frac{2}{1+\alpha}+\frac{1}{e^{\gamma T}-1}\right]-\frac{g}{\gamma}, \qquad (2.137)$$

$$V_1^{/}==gT\left[\frac{1-\alpha}{1+\alpha}+\frac{1}{e^{\gamma T}-1}\right]-\frac{g}{\gamma}. \qquad (2.138)$$

У відповідності до (2.127):

$$e^{-\gamma t_1^+}=\frac{V_1+\frac{g}{\gamma}}{V_0+\frac{g}{\gamma}}; \qquad e^{-\gamma t_1^-}=\frac{V_0^{/}+\frac{g}{\gamma}}{V_1^{/}+\frac{g}{\gamma}}; \qquad e^{-\gamma T}=\frac{V_2+\frac{g}{\gamma}}{V_2^{/}+\frac{g}{\gamma}}. \qquad (2.139)$$

Так як $e^{-\gamma t_1^+}\cdot e^{\gamma t_1^-}=e^{-\gamma T}$, тоді з (2.139) отримуємо вираз

$$\frac{V_1+\frac{g}{\gamma}}{V_0+\frac{g}{\gamma}}\cdot\frac{V_0^{/}+\frac{g}{\gamma}}{V_1^{/}+\frac{g}{\gamma}}=\frac{V_2+\frac{g}{\gamma}}{V_2^{/}+\frac{g}{\gamma}}. \qquad (2.140)$$

Підставляючи (2.134)-(2.138) до виразу (2.140), отримуємо наступне співвідношення

$$\frac{V_0-2gT+\frac{g}{\gamma}}{V_0+\frac{g}{\gamma}}\cdot\frac{gT\frac{1}{1-e^{-\gamma T}}-\frac{g}{\gamma}+\frac{g}{\gamma}}{gT\frac{1}{e^{\gamma T}-1}-\frac{g}{\gamma}+\frac{g}{\gamma}}=\frac{\left[\frac{1-\alpha}{1+\alpha}+\frac{1}{e^{\gamma T}-1}\right]}{\left[\frac{2}{1+\alpha}+\frac{1}{e^{\gamma T}-1}\right]}, \qquad (2.141)$$

звідки знайти *T* як функцію параметрів системи не вдається через трансцендентність виразу. Але, можна знайти швидкість (V_0) відскоку частинки 1 від підкладки у такому вигляді

$$V_0 = gT\left[\frac{1}{1+\alpha e^{-\gamma T}} + \frac{1}{1-e^{-\gamma T}}\right] - \frac{g}{\gamma}. \qquad (2.142)$$

Чисельний аналіз виразу (2.142) дозволив встановити, що для залізних кульок в діапазоні значень $r = 10^{-2} \div 10^{-4}$ м, $\eta = 10^{-3} \div 10^{-5}$ Па $\cdot$ с, він досить добре описується наступною залежністю

$$V_0 \cong \frac{3gT}{2+\alpha}, \qquad (2.143)$$

яка виявляє приблизно лінійний зв'язок між періодом стаціонарного стану в системі, із швидкістю відскоку від підкладинки найнижчої частинки.

2.5 Висновок

За допомогою моделі низьковимірної системи непружно контактуючих тотожних твердих кульок, які здійснюють вертикальний рух у полі сил тяжіння детально вивчаються умови існування та властивості стаціонарних станів у відкритій системі до якої підводиться енергія ззовні. Встановлено, що відповідні стаціонарні стани реалізуються у вигляді розшарування руху частинок на інтервали з періодичним рухом в них, що співпадає із висновками чисельних та безпосередніх фізичних експериментів. Знайдено критерій існування таких станів, згідно до якого у великих за розмірами системах, для створення умов існування стаціонарних станів недостатньо лише надавати до системи енергію зовні (тобто дисипативні та зовнішні потоки енергії в таких системах не встигають взаємно компенсувати один одного). Показано, що у горизонтальній системі, де замість сили тяжіння вводиться пружна границя, існує низка квазістаціонарних станів. Досліджено структуру таких станів та можливість переходу між ними.

РОЗДІЛ 3
КІНЕТИКА СТРУКТУРОУТВОРЕНЬ

Серед найбільш специфічних властивостей гранульованих матеріалів ефекти ущільнення при зовнішніх струсах займають особливе місце [7-10]. У роботах [1, 29, 50] було детально проаналізовано модель середнього поля у застосуванні до опису кінетики вільного об'єму.

3.1 Кінетична модель вільного об'єму

Розглянемо найпростішу кінетичну модель компактизації, яка базується на теорії вільного об'єму. Якщо ρ - густина гранул, а ω - об'єм кожної окремої гранули, тоді об'ємна фракція (параметр компактизації) η, яку займають гранули, надається у такому вигляді

$$\eta = \rho\omega . \tag{3.1}$$

Внаслідок компактизації гранульована система ущільнюється. При цьому повний об'єм системи зменшується, і відповідно зростають значення густини ρ та параметра компактизації η. Можна очікувати, що система досягне стану максимально можливого ущільнення, з відповідною густиною ρ_m і частиною зайнятого об'єму η_m (параметром компактизації), яку позначимо таким чином

$$\eta_m = \rho_m \ \omega. \tag{3.2}$$

У випадку твердих сферичних частинок, розподілених у тривимірному просторі, максимально можливе значення параметра компактизації η_m може бути розраховане точно і дорівнює 0.74 [51].

Система, яка характеризується параметром компактизації η_m має найменше значення середнього вільного об'єму v, у розрахунку на одну гранулу

$$v = \frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_m} = \frac{\omega}{\eta} - \frac{\omega}{\eta_m} = \omega\left(\frac{1}{\eta} - \frac{1}{\eta_m}\right) = \omega\frac{\eta_m - \eta}{\eta\eta_m}. \tag{3.3}$$

Постулюємо, що імовірність для окремої частинки проковзнути крізь отвір між сусідніми частинками (Ω) задовольняє експоненційному розподілу $P(\Omega)$

$$P(\Omega) = \frac{1}{\nu}\exp\left(-\frac{\Omega}{\nu}\right), \tag{3.4}$$

де $\Omega \geq \omega$ - розмір отвору між сусідніми частинками.

Функція розподілу f у цьому випадку має вигляд

$$f = f(\Omega = \omega) = \exp\left(-\frac{\omega}{\nu}\right) = \exp\left(-\frac{\eta\eta_m}{\eta_m - \eta}\right). \tag{3.5}$$

Сформулюємо найпростіше кінетичне рівняння процесу у такому вигляді

$$\frac{d\eta}{d\tau} = k \cdot \exp\left(-\frac{\eta\eta_m}{\eta_m - \eta}\right), \tag{3.6}$$

де k - кінетичний коефіцієнт. Зауважимо, що час ми фактично асоціюємо із кількістю струшувань (циклів струсу), які збурюють систему.

Інтегруючи (3.6), отримуємо функціонал

$$e^{\eta_m} k\tau = \int_{\eta_1}^{\eta} d\eta \exp\left(\frac{\eta_m^2}{\eta_m - \eta}\right), \tag{3.7}$$

де η_1 - початковий параметр компактизації системи у момент часу $\tau = 0$. Зрозуміло, що верхня межа інтегрування (η) може набувати значення у наступному проміжку

$$\eta_1 < \eta < \eta_m. \tag{3.8}$$

Виконуючі заміну

$$\frac{1}{\eta_m - \eta} = x, \tag{3.9}$$

після підстановок (3.9) в (3.7) та елементарних перетворень отримуємо

$$e^{\eta_m} k\tau = -\left.\frac{e^{\eta_m^2 x}}{x}\right|_{x_1}^{x} + \eta_m^2\left[E_1\left(-\eta_m^2 x_1\right) - E_1\left(-\eta_m^2 x\right)\right], \tag{3.10}$$

де $E_1(y)$ - інтегральна експонента [33].

У першому наближенні приблизний розв’язок (3.7) можна надати у наступному вигляді [1]:

$$\eta \approx \eta_m \left(1 - \frac{\eta_m \Gamma}{1 + \Gamma \ln\left(1 + \frac{\tau}{\tau_0}\right)} \right)., \tag{3.11}$$

де τ_0 і Γ, відповідно, характерний час процесу і константа, які визначаються наступним чином

$$\tau_0 = \frac{1}{k}\left(\frac{\eta_m - \eta_1}{\eta_m}\right)^2 \exp\left(\frac{\eta_m \eta_1}{\eta_m - \eta_1}\right), \qquad \Gamma = \frac{\eta_m - \eta_1}{\eta_m^2}. \tag{3.12}$$

Як зазначено у [35, 52], фізичний експеримент та чисельне моделювання з гранульованої компактизації свідчать як раз про виключно логарифмічний характер протікання таких процесів (або близький до нього).

Підкреслимо, що розроблена кінетична модель підтверджує результати безпосередніх фізичних та чисельних експериментів. Зазначимо, що формально, застосована модель не враховує процеси дисипації у гранульованих відкритих системах. Зрозуміло, що застосування формалізму моделі до дисипативної системи можливо лише поблизу стаціонарних станів останньої. Таким чином урахування дисипативних процесів здійснюється так би мовити ефективно у рамках постулювання існування самого стаціонарного стану у нерівноважній системі.

Збудована модель дозволяє поширити наші уявлення про структуру та динаміку перетворень у гранульованих матеріалах шляхом побудови відповідної фазової діаграми. Така діаграма, яка базується на елементарних уявленнях про компактизацію гранульованих матеріалів, зокрема на Рис. 3.1.

Компактизація здійснюється вздовж довільного контуру діаграми, який відповідає співіснуванню у будь-який момент часу фази gravel (крупніші частинки та дисперговані проміж ними дрібні частинки) та pudding (дрібнодисперсна суміш з вкрапленнями великих частинок). Розшарування здійснюється вздовж умовної фазової траєкторії OA, яка розділяє вищенаведені стани. Описана якісна фазова діаграма є за визначенням суттєво асиметричною.

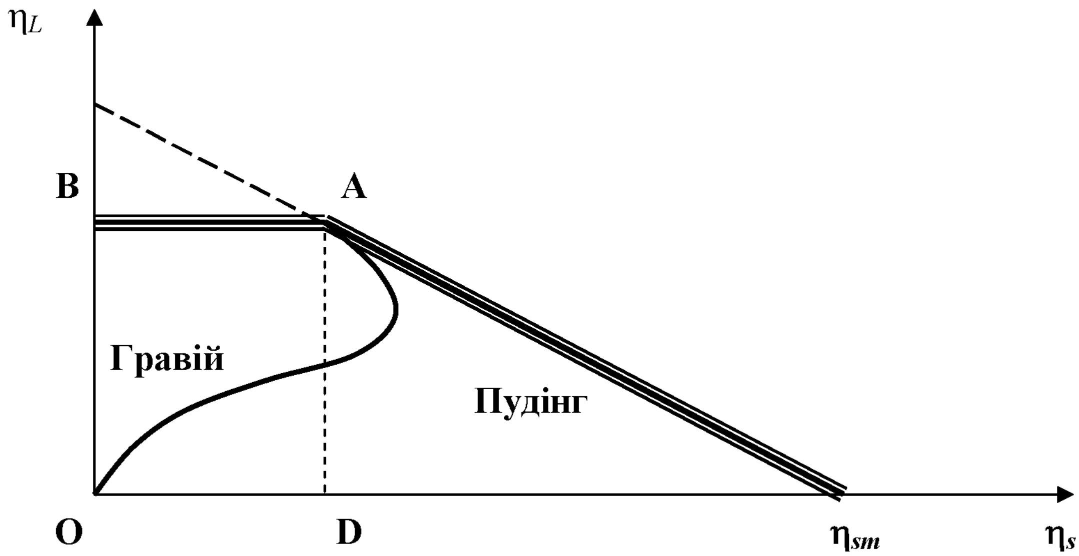


Рис. 3.1 Фазова діаграма суміші гранул [50]

Взагалі кажучи, застосування кінетичної теорії вільного об’єму до багатокомпонентної суміші без будь-яких суттєвих змін може бути здійсненим за тотожністю, що і у винятку однокомпонентної системи. Останнє є наслідком того факту, що однокомпонентна модель вільного об’єму ефективно є двокомпонентною [51].

3.2 Кінетична дисперсійна модель ущільнення гранульованих матеріалів

У попередньому п.3.1, в наближенні пуассонівської апроксимації для функції розподілу вакансій, які припускають заповнення частинками системи, було виявлено логарифмічний характер ущільнення із часом. Узагальнимо кінетичну модель вільного об’єму на випадок квазі-двокомпонентної системи, яка може бути застосована для опису як полідисперсних і багатокомпонентних, так і таких систем, що складаються з перемішаних впорядкованих доменів із різною симетрією ущільнення.

Запропонований підхід [53] базується на парадигмі, яка полягає у тому, що система вважається розподіленою на домени двох типів, що відрізняються максимальним ущільненням вакансій, які можуть заповнюватися. Модель, таким чином, штучно розподіляє систему на конгломерації доменів, які розрізняються різним рівнем ущільнення.

Уявімо, що система складається з суміші доменів двох типів з різним ступенем локальної компактизації (які характеризуються асимптотичними границями η_{m1} та η_{m2}, де $\eta_{m1} < \eta_{m2}$). Тоді кінетичне рівняння, що описує ущільнення, може бути записано у такій формі

$$\frac{\partial\eta}{\partial t} = ce^{-\frac{\eta_{m1}\eta}{\eta_{m1}-\eta}} + (1-c)e^{-\frac{\eta_{m2}\eta}{\eta_{m2}-\eta}}, \tag{3.13}$$

де η_1 - початкова компактизація всієї системи; c - об'ємна фракція доменів з ущільненням гранул до значення η_{m1} (відіграє роль одного з кінетичних коефіцієнтів).

Модель, яка базується на використанні рівняння (3.13), таким чином, узагальнює монодисперсну модель кінетики вільного об'єму на випадок найпростішої (двокомпонентної) полідисперсної системи.

3.2.1 Розв'язок кінетичного рівняння

Формальний розв'язок рівняння (3.13) породжує функціональну форму

$$t = \int_{\eta_1}^{\eta} \frac{d\eta}{ce^{-\frac{\eta_{m1}\eta}{\eta_{m1}-\eta}} + (1-c)e^{-\frac{\eta_{m2}\eta}{\eta_{m2}-\eta}}} = \int_{\eta_1}^{\eta} f(\eta)d\eta, \tag{3.14}$$

яка визначає залежність $\eta = \eta(t)$.

Дослідимо розв'язок інтеграла для різних інтервалів змін значень η. Для цього домножимо підінтегральну функцію $f(\eta)$ на фактор F, якій топологічно впорядковує інтервали змін значень η і конструюється за допомогою θ- функцій Хевісайда таким чином (див. Рис. 3.2):

$$F = \theta(\eta_{m1} - \eta) + \theta(\eta_{m2} - \eta)\theta(\eta - \eta_{m1}). \tag{3.15}$$

a b

|---------------------------(-|-)-------------(-|-)--------------------------------->

0 η_{m1} η_{m2} η

Рис.3.2 Розподіл інтервалів значень η відносно точок η_{m1} та η_{m2}.

З урахуванням (3.15) інтеграл (3.14) має такий вигляд

$$t=\int_{\eta_1}^{\eta}\left[\theta(\eta_{m1}-\eta)\cdot f(\eta)+\theta(\eta_{m2}-\eta)\theta(\eta-\eta_{m1})\cdot f(\eta)\right]d\eta. \qquad (3.16)$$

Розглянемо розв’язки кінетичного рівняння дійсні у різних інтервалах значень η відносно η_{m1} та η_{m2}, які були визначені вище.

а) В інтервалі $0<\eta<\eta_{m1}$, для якого виконується умова $\dfrac{\eta}{\eta_{m1}}<1$ та $\dfrac{\eta}{\eta_{m2}}<1$, інтеграл (3.16) спрощується до

$$t\approx\int_{\eta_1}^{\eta}\theta(\eta_{m1}-\eta)\cdot\frac{e^{\eta}d\eta}{ce^{-\frac{\eta^2}{\eta_{m1}}}+(1-c)e^{-\frac{\eta^2}{\eta_{m2}}}}, \qquad (3.17)$$

точний розв’язок якого є

$$t\approx-\frac{\Gamma}{2}\left[e^{\Gamma}\mathrm{Ei}(-\Gamma+\eta)-e^{-\Gamma}\mathrm{Ei}(\Gamma+\eta)\right]\Big|_{\eta_1}^{\eta}, \qquad (3.18)$$

де $\Gamma=\left(c\dfrac{1}{\eta_{m1}}+(1-c)\dfrac{1}{\eta_{m2}}\right)^{-\frac{1}{2}}$.

Враховуючи властивості інтегральної експоненти [33], за умови $\dfrac{\eta}{\Gamma}<1$, знаходимо

$$\eta\approx\Gamma\sqrt{\ln(t+t_0)}-\frac{1}{2}\Gamma^2, \qquad (3.19)$$

де $t_0=e^{\eta_1+\left(\frac{\eta_1}{\Gamma}\right)^2}$ - стала величина, яка залежить від початкових умов (η_1).

b) В інтервалі $\eta_{m1} < \eta < \eta_{m2}$ ($\frac{\eta_{m1}}{\eta} < 1$; $\frac{\eta}{\eta_{m2}} < 1$), інтеграл (3.16) може бути апроксимовано формою

$$t \approx \int_{\eta_1}^{\eta} \theta(\eta_{m2} - \eta)\theta(\eta - \eta_{m1}) \cdot \frac{d\eta}{ce^{\eta_{m1}\left(1+\frac{\eta_{m1}}{\eta}\right)} + (1-c)e^{-\eta\left(1+\frac{\eta}{\eta_{m2}}\right)}}. \tag{3.20}$$

Розв'язок (3.20) знаходимо у такому вигляді

$$ce^{\eta_{m1}} \cdot t \approx \left\{ \eta e^{-\frac{\eta_{m1}^2}{\eta}} + \eta_{m1}^2 Ei\left(-\frac{\eta_{m1}^2}{\eta}\right) \right\}\Bigg|_{\eta_1}^{\eta}. \tag{3.21}$$

Користуючись (3.21), знаходимо

$$\eta = \frac{\eta_{m1}^2}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\eta_{m1}^4 + 4\left(\eta_{m1}^2 ce^{\eta_{m1}} \cdot t + \eta_1^2 - \eta_{m1}^2 \eta_1\right)}. \tag{3.22}$$

c) У випадку, коли $c \to 0$, з (3.20), отримуємо

$$t \approx \int_{\eta_1}^{\eta} \theta(\eta_{m2} - \eta)\theta(\eta - \eta_{m1}) \cdot \frac{d\eta}{(1-c)e^{-\eta\left(1+\frac{\eta}{\eta_{m2}}\right)}}. \tag{3.23}$$

Розв'язок (3.23) має вигляд

$$(1-c)e^{\frac{\eta_{m2}}{4}} \cdot t \approx \frac{\sqrt{\pi\eta_{m2}}}{2} erfi\left(\frac{1}{\sqrt{\eta_{m2}}}\left(\eta + \frac{\eta_{m2}}{2}\right)\right)\Bigg|_{\eta_1}^{\eta}. \tag{3.24}$$

Користуючись асимптотичним виразом для $erfi$ [33] і розв'язком (3.24), маємо

$$\eta \approx \eta_1 + (1-c)e^{\frac{\eta_{m2}}{4}} \cdot t. \tag{3.25}$$

d) У випадках, коли $\eta \to \eta_{m1}$ $(\eta < \eta_{m1})$ та $\eta \to \eta_{m2}$ $(\eta_{m1} < \eta < \eta_{m2})$, інтеграл (3.16) може бути переписано у такому вигляді

$$t \approx \begin{cases} \dfrac{1}{(1-c)} \displaystyle\int_{\eta_1}^{\eta} e^{\frac{\eta_{m2}\eta}{\eta_{m2}-\eta}} d\eta, & \eta \to \eta_{m1}; \\ \dfrac{1}{c} \displaystyle\int_{\eta_1}^{\eta} e^{\frac{\eta_{m1}\eta}{\eta_{m1}-\eta}} d\eta, & \eta \to \eta_{m2}. \end{cases} \tag{3.26}$$

Розв'язки інтегралів (3.26) були отримані у [1, 29, 50]

$$e^{\eta_m} kt = -(\eta_m - \eta)\exp\left(\frac{\eta_m^2}{\eta_m - \eta}\right)\Bigg|_{\eta_1}^{\eta} - \eta_m^2 E_1\left(-\frac{\eta_m^2}{\eta_m - \eta}\right)\Bigg|_{\eta_1}^{\eta}. \tag{3.27}$$

У границі $\eta \to \eta_{m1}$ з (3.27) отримуємо

$$\eta = \eta_{m2}\left(1 - \frac{\eta_{m2}\gamma_2}{1 + \gamma_2 \ln(1 + t/t_{02})}\right), \tag{3.28}$$

де $k = \dfrac{1}{1-c}$; $t_{02} = \dfrac{1}{k}\left(\dfrac{\eta_{m2} - \eta_1}{\eta_{m2}}\right)^2 \exp\left(\dfrac{\eta_{m2}\eta_1}{\eta_{m2} - \eta_1}\right)$; $\gamma_{02} = \dfrac{\eta_{m2} - \eta_1}{\eta_{m2}^2}$.

Відповідно у границі $\eta \to \eta_{m2}$ маємо

$$\eta = \eta_{m1}\left(1 - \frac{\eta_{m1}\gamma_1}{1 + \gamma_1 \ln(1 + t/t_{01})}\right), \tag{3.29}$$

де $k = \dfrac{1}{c}$; $t_{01} = \dfrac{1}{k}\left(\dfrac{\eta_{m1} - \eta_1}{\eta_{m1}}\right)^2 \exp\left(\dfrac{\eta_{m1}\eta_1}{\eta_{m1} - \eta_1}\right)$; $\gamma_{01} = \dfrac{\eta_{m1} - \eta_1}{\eta_{m1}^2}$.

Проаналізуємо поведінку η у інтервалі $\eta_{m1} < \eta < \eta_{m2}$, поблизу η_{m1} та η_{m2} більш детально.

У першому інтегралі (3.26), який реалізується за умови $\eta \to \eta_{m1}$ $(\eta < \eta_{m1})$, перейдемо до нової змінної $\varepsilon = \eta_{m1} - \eta > 0$. Тоді отримуємо

$$-(1-c)t = \int_{\eta_1}^{\eta} \exp\left(\frac{\eta_{m2}\eta_{m1}}{\eta_{m2} - \eta_{m1}} \cdot \frac{1 - \dfrac{\varepsilon}{\eta_{m1}}}{1 + \dfrac{\varepsilon}{\eta_{m2} - \eta_{m1}}}\right) d\varepsilon, \tag{3.30}$$

де ε - малий параметр. З урахуванням умови $\varepsilon << \eta_{m2} - \eta_{m1}$, розв'язок (3.30) припускає очевидне спрощення

$$(1-c)e^{-\frac{\eta_{m2}\eta_{m1}}{\eta_{m2}-\eta_{m1}}} \frac{\eta_{m2}^2}{(\eta_{m2} - \eta_{m1})^2} t = e^{-\frac{\eta_{m2}^2}{(\eta_{m2}-\eta_{m1})^2}(\eta_{m1}-\eta)}\Bigg|_{\eta_1}^{\eta}. \tag{3.31}$$

З (3.31) знаходимо

$$\eta = \eta_1 + \left(1 - \frac{\eta_{m1}}{\eta_{m2}}\right)^2 \ln\left\{1 + (1-c)e^{\frac{\eta_{m2}\eta_{m1}^2 - \eta_{m2}^2\eta_1}{(\eta_{m2}-\eta_{m1})^2}} \frac{\eta_{m2}^2}{(\eta_{m2}-\eta_{m1})^2} t\right\}. \tag{3.32}$$

З (3.32) випливає, що на малих часах поведінка $\eta(t)$ апроксимується таким наближенням

$$\eta = \eta_1 + (1-c)e^{\left(\frac{\eta_{m1}}{\eta_{m2}}\eta_{m1} - \eta_1\right)/\left(1 - \frac{\eta_{m1}}{\eta_{m2}}\right)^2} t. \tag{3.33}$$

Асимптотично розв’язок (3.32) набуває вигляду

$$\eta = \frac{\eta_{m1}^2}{\eta_{m2}} + \left(1 - \frac{\eta_{m1}}{\eta_{m2}}\right)^2 \ln\left((1-c)\frac{\eta_{m2}^2}{(\eta_{m2}-\eta_{m1})^2} \cdot t\right). \tag{3.34}$$

У (3.34) відсутня η_1, яка несе у собі інформацію про початковий стан компактизації. Таким чином, на великих часах, у певному інтервалі значень η, система може втратити «пам’ять» про початковий стан. Така поведінка характерна для метастабільних станів.

Якщо у другому інтегралі (3.26) перейти до інтегрування за малою величиною $\varepsilon = \eta - \eta_{m1} > 0$, знаходимо вираз для η

$$\eta = \eta_{m1} - \frac{\eta_{m1}^2}{\ln\left(c\frac{e^{\eta_{m1}}}{\eta_{m1}^2} \cdot t + \left(\frac{\eta_1 - \eta_{m1}}{\eta_{m1}^2}\right)^2 e^{-\frac{\eta_{m1}^2}{\eta_1 - \eta_{m1}}}\right)}. \tag{3.35}$$

Якщо у другому інтегралі (3.26) при $\eta \to \eta_{m2}$, перейти до нової змінної $\varepsilon = \eta_{m2} - \eta > 0$, тоді після розв’язку отримуємо вираз для η у вигляді

$$\eta \approx \eta_{m2} + \frac{(\eta_{m2}-\eta_{m1})^2}{\eta_{m1}^2} \cdot \ln\left(e^{-\frac{\eta_{m1}^2}{(\eta_{m2}-\eta_{m1})^2}(\eta_{m2}-\eta_1)} + \frac{\eta_{m1}^2}{(\eta_{m2}-\eta_{m1})^2} c e^{\frac{\eta_{m1}\eta_{m2}}{\eta_{m2}-\eta_{m1}}} \cdot t\right). \tag{3.36}$$

Таким чином, нами отримані точні розв’язки модельного кінетичного рівняння (3.13), які діють в інтервалах змін η і дозволяють побудувати фазову діаграму, яка описує ущільнення гранульованих матеріалів.

Результати розв’язків, які були описані вище, зібрані у Табл. 3.1.

Табл.3.1 Точні розв'язки кінетичного рівняння для дисперсійної моделі [53]

№	Умова існування розв'язку	Тип релаксації	Розв'язок кінетичного рівняння
1	$0<\eta<\eta_{m1}$ ($\frac{\eta}{\eta_{m1}}<1$ та $\frac{\eta}{\eta_{m2}}<1$)	$\sim\sqrt{\ln t}$	$\eta\approx\Gamma\sqrt{\ln(t+t_0)}-\frac{1}{2}\Gamma^2$
2	$\eta_{m1}<\eta<\eta_{m2}$ ($\frac{\eta_{m1}}{\eta}<1$; $\frac{\eta}{\eta_{m2}}<1$)	$\sim\sqrt{t}$	$\eta\approx\frac{\eta_{m1}^2}{2}+C_2\sqrt{1+t/t_{20}}$
3	$\eta_{m1}<\eta<\eta_{m2}$ ($\frac{\eta_{m1}}{\eta}<1$; $\frac{\eta}{\eta_{m2}}<1$), $c\to 0$	$\sim t$	$\eta\approx\eta_1+(1-c)e^{\frac{\eta_{m2}}{4}}\cdot t$
4	$\eta\to\eta_{m1}$	$\sim 1/\ln t$	$\eta=\eta_{m2}\left(1-\frac{\eta_{m2}\gamma_2}{1+\gamma_2\ln(1+t/t_{02})}\right)$
5	$\eta\to\eta_{m2}$	$\sim 1/\ln t$	$\eta=\eta_{m1}\left(1-\frac{\eta_{m1}\gamma_1}{1+\gamma_1\ln(1+t/t_{01})}\right)$
6	$\eta\to\eta_{m1}$ $(\eta<\eta_{m1})$, $\varepsilon=\eta_{m1}-\eta>0$	$\sim\ln t$	$\eta\approx\eta_{m1}+\Delta\eta_2^2(C_6+\ln(1+t/t_{06}))$
7	$\eta\to\eta_{m1}, (\eta>\eta_{m1})$, $\varepsilon=\eta-\eta_{m1}>0$	$\sim 1/\ln t$	$\eta\approx\eta_{m1}-\eta_{m1}^2/(C_7+\ln(1+t/t_{07}))$
8	$\eta\to\eta_{m2}$, $(\eta<\eta_{m2}), \varepsilon=\eta_{m2}-\eta>0$	$\sim\ln t$	$\eta\approx\eta_{m2}+\Delta\eta_1^2(C_8+\ln(1+t/t_{08}))$
де $\Delta\eta_1$ та $\Delta\eta_2$ - прикомпресія нормована на η_{m1} та η_{m2} відповідно; $t_0, t_{20}, t_{02}, t_{01}, t_{06}, t_{07}, t_{08}$ - характерні часи релаксації; $\Gamma, C_2, C_6, C_7, C_8, \gamma_1, \gamma_2$ - сталі.			

3.2.2 Побудова фазової діаграми ущільнення

Отримані розв'язки (див. п.3.2.1) вказують на дисперсіонний характер кінетики ущільнення гранульованих матеріалів. Наприклад, якщо $c\neq 0$, ущільнення (за умови $\eta<\eta_{m1}$) відбувається за законом $\sim\sqrt{\ln t}$ (див. (3.19)). У випадку коли η змінюється в інтервалі $\eta_{m1}<\eta<\eta_{m2}$, компактизація протікає більш швидко, а саме, за законом $\sim\sqrt{t}$ (див. (3.22)). Якщо $c\to 0$, згідно із (3.25) η

змінюється пропорційно часу. Розв'язки (3.28) та (3.29) виявляють логарифмічно повільний закон релаксації η та дозволяють зшити розв'язки (3.19) та (3.22) (і (3.25)) у безпосередньому наближенні до η_{m1} та η_{m2}. З (3.32) зокрема випливає, що поблизу $\eta = \eta_{m1}$ можливі як лінійний (див. (3.33)), так і логарифмічний (див. (3.34)) сценарії релаксації, які діють відповідно на малих та асимптотично великих часах.

Фазова діаграма, побудована за результатами детальних розв'язків поблизу η_{m1} та η_{m2}, які було здійснено у п.3.2.1, представлена на Рис. 3.3. Для визначеності при побудові фазової діаграми було покладено: $\eta_{m1} = 0.6$, $\eta_{m2} = 0.7$, $c = 0.3$.

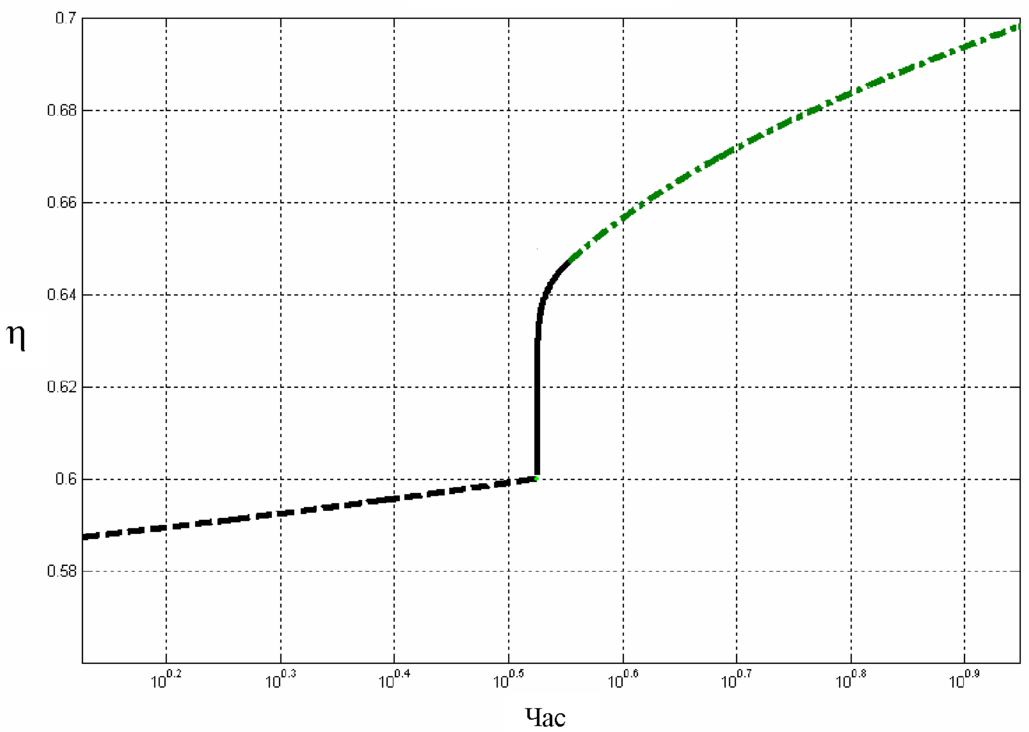


Рис. 3.3 Фазова діаграма ущільнення у гранульованому матеріалі ($\eta_{m1} = 0.6$, $\eta_{m2} = 0.7$, $c = 0.3$). [53]

Перш за все (окрім, дисперсійного характеру кінетики ущільнення, на який вже вказувалось) звернемо увагу на різку зміну характеру кінетики поблизу

$\eta = \eta_{m1}$. Така поведінка нагадує фазову діаграму параметра впорядкування, яка відповідає фазовому переходу [28].

Кінетичні фазові діаграми, побудовані для різних значень об’ємної фракції c кластерів з впорядкуванням першого типу, вказують на те, що характерні часи релаксації ущільнення поблизу η_{m2} можуть бути різними. Зокрема, із зменшенням c характерний час релаксації починає зростати. Вище визначена поведінка добре узгоджується з чисельними експериментальними даними, які свідчать про суттєве уповільнення процесу ущільнення поблизу стану системи, який характеризується максимальним ущільненням.

Якщо кваліфікувати такий сценарій компактизації як критичне уповільнення релаксації параметра впорядкування (critical slowing down), тобто як «застрягання» системи у повільно релаксуючому гетерофазному стані, то встановлений дисперсійний характер релаксації суттєво доповнює картину кінетики фазових перетворювань у конденсованій речовині [28, 54, 55].

З урахуванням вищесказаного можна зробити наступні висновки:

– для опису кінетики полідисперсних гранульованих матеріалів, збурених зовнішніми полями, запропонована модель середнього поля;
– аналітично описаний дисперсійний характер кінетики ущільнення гранульованих матеріалів під впливом зовнішніх збурень. Наявність стаціонарних станів, поблизу яких застосовується модель, підтверджується експериментальними і теоретичними дослідженнями [2, 29];
– побудована фазова діаграма, яка описує ущільнення в рамках моделі і дозволяє параметризувати відповідний процес у термінах характеристик моделі: рівнів ущільнення гранул у доменах різних типів, їх об’ємної фракції у системі, початкового ущільнення системи, прикомпресії (яка є нормованою різницею ущільнення гранул у доменах).

3.3 Застосування рівняння стану Карнахана-Старлінга для опису компактизації у гранульованій системі

Компактизація гранульованих матеріалів під впливом зовнішніх струсів, яка має безпосереднє ефективне практичне застосування, детально вивчалася у низці робіт (див. наприклад [1, 26, 27, 29, 43, 50, 53, 56]). Експериментально встановлено, що кінетична фазова діаграма, яка описує компактизацію, показує асимптотичне насичення до квазірівноважних станів, які відповідають максимальній (або такий, що близька до неї) щільності впакування. У загальному випадку найпростіших систем (твердих кульок) закон релаксації із достатньою точністю відтворює відомий однорідний сценарій Колмогорова-Фогеля-Фулчера [29, 43]. Теоретичні підходи до опису кінетики впакування, серед яких достатньо вказати кінетичну модель вільного об’єму [1, 26, 27, 29, 50, 53] в цілому, задовільно описують асимптотичну поведінку відповідного параметру впорядкування. Водночас, для параметризації експериментальних даних бракує підходів які враховували б матеріальні співвідношення, які належать до фізичної природи та конструкції системи яка розглядається. Зосередимо увагу на вивченні саме деяких аспектів, які належать саме до цього останнього питання.

Як було показано у роботі [56], навіть мінімальна деталізація в описі структури систем із складною внутрішньою морфологією (якими як раз і є гранульовані матеріали) приводить до формулювання рівняння стану у вигляді диференціального рівняння Абеля яке не інтегрується в квадратурах і припускає розв'язки лише в окремих визначених інтервалах значень параметра впакування.

Тут буде розглянуто систему твердих сфер яка задовольняє рівнянню стану Карнахана-Старлінга [57], що формулюється у термінах параметрів компактизації. Просте кінетичне рівняння для відповідно визначеного параметру впорядкування буде проаналізоване за допомогою підходу Ландау [28, 58]. В рамках запропонованого підходу буде проаналізовано вплив параметрів (зокрема - компактизації), які визначають стан системи та її кінетику, на характерні часи релаксації системи до асимптотичного квазістаціонарного стану [1, 2]. На цьому шляху наближення до квазістаціонарного стану відбувається шляхом кусково-неперервних однорідних релаксаційних циклів, які заповнюють повний інтервал впакувальної фракції.

3.3.1 Вільна енергія для монодисперсної системи за рівнянням стану Карнахана-Старлінга

Рівняння стану Карнахана-Старлінга для твердих сфер має вигляд [57]

$$PV = NkT \cdot \frac{1+\eta+\eta^2-\eta^3}{(1-\eta)^3}, \tag{3.37}$$

де P – тиск; V - об'єм; N - кількість частинок; kT - добуток який, покладемо, нехай визначає масштаб енергії частинок; $\eta = \frac{1}{6}\pi\sigma^3 \frac{N}{V}$ – параметр компактизації; σ - діаметр частинок.

Користуючись співвідношенням для визначення тиску $P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T$, енергію F, яка відповідає (3.37), в термінах параметра η отримуємо у наступному вигляді

$$F = NkT\left(\frac{3-2\eta}{(1-\eta)^2} - \frac{3-2\eta_1}{(1-\eta_1)^2} + \ln\frac{\eta}{\eta_1}\right), \tag{3.38}$$

де η, η_1 - відповідно, поточне та початкове значення параметру компактизації.

У граничному випадку, коли розміри частинок прямують до нуля, із (3.38) випливає відоме співвідношення для енергії ідеального газу

$$F = NkT\ln\frac{V}{V_1}.$$

Експериментальні спостереження [29] показують, що система асимптотично насичується (шляхом впакування) до деякого граничного квазістаціонарного стану (див. Рис. 3.4). Для дослідження процесу релаксації системи поблизу насиченого стану введемо параметр впорядкування за наступним правилом [3, 59, 60]

$$\phi(t) = \frac{\eta_\infty - \eta(t)}{\eta_\infty - \eta_1}, \tag{3.39}$$

де $\phi(0)=1$ - відповідає початковому; $\phi(\infty)=0$ - відповідає асимптотичному квазістаціонарному станам системи.

Надане вище визначення параметру впорядкування дозволяє у подальшому скористатися підходом Ландау [58] у описі релаксації поля впорядкування у околі асимптотичного стаціонарного стану.

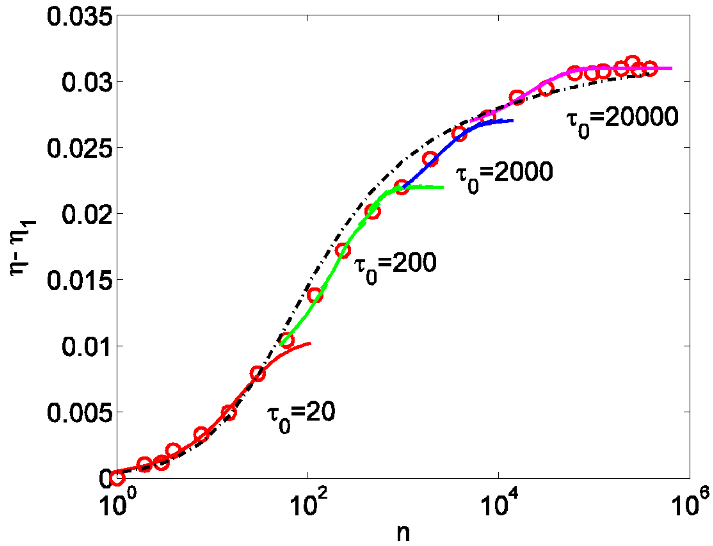


Рис. 3.4 Експериментальна [29] залежність (червоні кола) впакування ($\eta-\eta_1$) у гранульованій системі, де n - кількість струсів; апроксимація експериментальних даних за законом оберненого логарифма (крапка-тире), яка відповідає (3.11) та кусково-безперервна [3] (суцільні лінії) з використанням отриманого тут простого експоненціального закону релаксації (3.48). Дані експерименту [29]: η_1=0.56, η_∞=0.591.

Вільну енергію F яка дається співвідношенням (3.38) (і не враховує флуктуаційні ефекти), як функцію параметра ϕ перепишемо у наступному вигляді

$$\frac{F(\phi)}{NkT}=\frac{3-2\eta_\infty+2(\eta_\infty-\eta_1)\phi}{(1-\eta_\infty+(\eta_\infty-\eta_1)\phi)^2}-\frac{3-2\eta_1}{(1-\eta_1)^2}+\ln\frac{\eta_\infty-(\eta_\infty-\eta_1)\phi}{\eta_1}. \qquad (3.40)$$

Розкладаючі $F(\phi)$ у степеневий ряд:

$$\frac{F(\phi)}{NkT}=A_0+A\phi+B\phi^2+C\phi^3+D\phi^4+\ldots\ , \qquad (3.41)$$

і користуючись (3.40), (3.41) отримуємо рівняння

$$\frac{F(\phi)}{NkT} = A_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \phi^k (\eta_\infty - \eta_1)^k \left[\frac{(3+k) - 2\eta_\infty}{(1-\eta_\infty)^{k+2}} (-1)^k - \frac{1}{k\eta_\infty^k} \right], \qquad (3.42)$$

де $A_0 = \ln\frac{\eta_\infty}{\eta_1} + \frac{3-2\eta_\infty}{(1-\eta_\infty)^2} - \frac{3-2\eta_1}{(1-\eta_1)^2}$.

Можна показати, що сума у виразі (3.42) безпосередньо не залежить від початкового значення впакування η_1 твердих сфер. Вище сказане свідчить про можливість переходу системи, шляхом впакування до одного і того ж асимптотичного квазістаціонарного стану починаючи з різних початкових станів.

3.3.2 Побудова кінетичного рівняння за сценарієм Ландау-Гінзбурга та його розв’язок у лінійному наближенні

Запишемо кінетичне рівняння для параметра впорядкування ϕ у такому вигляді:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\Gamma\frac{\delta F}{\delta\phi}, \qquad (3.43)$$

де Γ - кінетичний коефіцієнт.

Аналіз отриманого для F виразу показує, що функції, отримані обмеженням ряду (3.42) з урахуванням внесків до квадратичного степеня включно, мають у фізичній області значень параметру впакування η один екстремум (а саме мінімум). У околі таких станів можна очікувати сповільнення процесів релаксації модельної системи. Розглянемо у якості прикладу рівняння (3.43) з урахуванням ряду (3.42), обмеженого врахуванням до квадратичного внеску включно.

Відповідне кінетичне рівняння у вище визначеному наближенні набуває вигляду

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} = \alpha - \beta\phi, \qquad (3.44)$$

де $\alpha = -A$; $\beta = 2B$; $\tau = t\cdot(\Gamma NkT)$.

Рівняння (3.18) має тривіальний розв'язок

$$\phi = \frac{\alpha}{\beta} + \left(1 - \frac{\alpha}{\beta}\right) e^{-\beta\tau}. \tag{3.45}$$

Підстановка (3.39) до (3.45) дає

$$\eta(\tau) = \eta_1 + (\eta_c - \eta_1)\left(1 - e^{-\tau/\tau_0}\right), \tag{3.46}$$

де $\tau_0 = \beta^{-1}$ - характерний час релаксації;

$$\eta_c = \eta_\infty - (\eta_\infty - \eta_1)\frac{\alpha}{\beta}. \tag{3.47}$$

Звернемо увагу на самоузгоджене (в рамках моделі) визначення величини η_c.

Рівняння (3.46) показує, що характер релаксації, який описує вище побудована спрощена модель, задовольняє однорідному сценарію Колмогорова-Фогеля-Фулчера [29].

3.3.3 Загальні риси релаксації параметру компактизації

Як витікає з визначення τ_0 (див. (3.44) та (3.46)), із урахуванням виразів (3.44), (3.41) та (3.42), витікає: $\tau_0 \sim (\eta_\infty - \eta_1)^{-2}$, що також узгоджується з оцінками τ_0 у подібних роботах [61, 62]. Тобто, із збільшенням початкового впакування системи ($\eta_1 \to \eta_\infty$), характерний час релаксації τ_0 зростає, помітно уповільнюючи процес ущільнення.

Із співвідношення (3.46) можна бачити, що параметр впакування $\eta(\tau)$ асимптотично прямує до визначеного значення η_c, величина якого складає 0.647. Відхилення значення η_c від η_∞=0.74 пов'язане з обмеженнями при завданні функції F за рахунок обривання степеневого ряду на квадратичному доданку.

Врахування у F внесків до 4-го ступеня включно, веде до формулювання нелінійного рівняння, розв'язок якого, у першому наближені також, як і у випадку лінійного рівняння, показує асимптотичне наближення до впакування η_c, величина якого складає 0.62. Врахування у (3.43) доданків до третього порядку включно, дозволяє сформулювати кінетичне диференціальне рівняння з квадратичною нелінійністю.

Вище визначені нелінійні рівняння можуть бути розв'язані у лінійному наближенні. Остання процедура веде до появи поправок (уточнень) в виразах для α, β, η_c.

Отримані результати показують що в рамках запропонованої моделі впакування відбувається за немонотонним сценарієм. Використання у кінетичному рівнянні (3.43) поліномів з парними степенями, показують що існують певні значення впакування η_c, поблизу яких система наближується до асимптотичного квазістаціонарного стану.

Використання поліномів з непарним степенем у кінетичному рівнянні (3.43), не дає розв'язків з насиченням впакування системи до асимптотичних станів та добре апроксимуються лінійними функціями.

Останнє пов'язано з наявністю мінімуму у поліномів парного степеня та відсутністю його у поліномів непарного степеня у фізичній (для впакування твердих сфер) області. Положення мінімумів в залежності від розміру полінома показані у Табл. 3.2.

Табл. 3.2 Положення мінімумів в залежності від рангу полінома $F(\eta)$ [3]

N	2	4	6	8	10	12	∞
η_c	0.647	0.620	0.602	0.589	0.579	0.570	0.48

Значення η_c=0.647, яке було розраховано за формулою (3.47) з використанням у якості максимально можливого впакування величини η_m=0.74, знаходиться у межах відомого для твердих сфер значення η_{RCP} (random close packing) від 0.63 до 0.65. Зауважимо, що рівняння стану Карнахана-Старлінга, яким ми скористалися для отримання цього результату не враховує деяких присутніх у реальній гранульованій системі чинників: таких як дисипацію енергії, відхилення від сферичності частинок та стан їх поверхні, дисперсію розмірів, інтенсивність та тип збурення системи, а також наявність зовнішніх полів (наприклад тяжіння). Вкажемо, що у багатьох експериментах асимптотичні значення впакування гранульованих матеріалів мають різні значення [20, 29, 35, 63-66].

Таким чином, наближено для використання отриманого результату (3.46) з метою параметризації експериментальних даних, можна замінити розраховане критичне значення впакування η_c на асимптотичне η_∞, яке наприклад спостерігається експериментально. З урахуванням вище зроблених зауважень, простий експоненційний закон релаксації може бути надано у наступному вигляді [7]:

$$\eta(\tau) = \eta_1 + (\eta_\infty - \eta_1)\left(1 - e^{-\tau/\tau_0}\right), \tag{3.48}$$

Як можна бачити з Рис. 3.4, кусково-безперервна аппроксимація експериментальних даних експоненційними законами релаксації параметра впакування (η) з характерними часами (τ_0), що відрізняються один від одного майже на порядок при переході між сусідніми ділянками кінетичної функції впакування, задовільно дозволяє описати експеримент за допомогою характерних ділянок [67]. Останній результат свідчить про немонотонний (нелінійний) характер релаксації. Серед розв'язків нелінійних кінетичних рівнянь які описують релаксацію параметра впакування можна вказати, наприклад, так званий стретч-експоненційний розв'язок [29]

$$\eta(\tau) = \eta_1 + (\eta_\infty - \eta_1)\left(1 - e^{-[\tau/\tau_0]^\alpha}\right), \tag{3.49}$$

та обернений логарифм [7]

$$\eta(\tau) = \eta_\infty - \frac{\eta_\infty - \eta_1}{1 + B\ln(1 + \tau/\tau_0)}, \tag{3.50}$$

(див. Рис. 3.4), які, як правило, використовуються для параметризації відповідних експериментів. Одним з адекватних методів є застосування моделі фракційної кінетики до опису процесу релаксації до асимптотичного квазі-стаціонарного стану. Результат розв'язку відповідного кінетичного рівняння для поля впакування, в такому підході, має наступний вигляд [66]:

$$\eta(\tau) = \eta_\infty - \Delta\eta \cdot E_\alpha\left(-\left(\frac{\tau}{\tau_0}\right)^\alpha\right), \tag{3.51}$$

де $\Delta\eta = \eta_\infty - \eta_1$; E_α - функція Міттаг-Леффлера порядку α, $0<\alpha<1$; η_∞ та η_1, відповідно, параметр впакування у асимптотичному квазістаціонарному стані (поблизу якого відбувалося розкладання функціоналу вільної енергії) та параметр впакування у початковому стані; $\tau = k\Gamma$; Γ - параметр збудження; k - матеріальна стала.

Асимптотично, коли ($\alpha \to 1$), розв'язок (3.51) перетворюється на простий експоненційний закон релаксації (3.48):

$$\alpha \to 1; \Rightarrow E_\alpha\left(-\left(\frac{\tau}{\tau_0}\right)^\alpha\right) \to \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_0}\right), \tag{3.26}$$

який відповідає кінетичному сценарію релаксації Ландау-Гінзбурга у лінійному наближенні, який було описано вище. У випадку коли показник α прямує до нуля асимптотика функції Міттаг-Леффлера змінюється на логарифмічну і описує, як вже згадувалося, закон релаксації повільної компактизації, який спостерігається в експериментах з впакування гранульованих матеріалів [7]. Отримані результати показують, що впакування та властивості мобільності в гранульованих (пористих) матеріалах цілком вписуються у сценарій фракційної (дробової) кінетики, а сам працес є неоднорідним і суттєво залежить від інтервалу значень впакувальної фракції в якому він здійснюється.

Отримані результати свідчать про можливість формального застосування методів статистичної фізики до опису окремих явищ у мікромеханічних багаточастинкових системах (зокрема, компактизації гранульованих матеріалів, які є суто динамічними дисипативними системами) поблизу асимптотичних квазі-стаціонарних станів.

Також проаналізовані можливості використання моделі фракційної кінетики у застосуванні до опису релаксації параметру компактизації, яка є більш загальною у випадку неоднорідного розподілу щільності.

Для моделі твердих сфер, яка задовольняє рівнянню стану Карнахана-Старлінга, сформульовано просте кінетичне рівняння, яке описує релаксацію фактору компактизації до асимптотичного квазістаціонарного стану.

Користуючись підходом Ландау знайдені аналітичні розв’язки моделі, які описують однорідну релаксацію відповідно визначеного параметру впорядкування у послідовній кусково-безперервній низці інтервалів значень параметра впакування. Характерний час релаксації ступеня впорядкування визначено в термінах параметрів моделі. Показано, що задовільний опис компактизації може бути здійснений за допомогою моделі фракційної кінетики, яка у відповідних границях відтворює відомі асимптотичні закони релаксації. Отримані результати добре узгоджуються із даними експериментів в яких безпосередньо вимірюється компактизація гранульованих матеріалів під впливом зовнішніх збурень.

3.4 Бідисперсна гранульована система

Опис, параметризація та прогнозування властивостей суміші в залежності від параметрів компонентів, які утворюють суміш – належить до актуальних напрямів досліджень із статистичної фізики. Зосередимося на розгляді питання про засоби досягнення максимального ущільнення у бі-компонентній гранульованій системі.

Дослідження фізичних властивостей простих бікомпонентних сумішей за допомогою методів статистичної механіки є однією із традиційно актуальних і водночас складних задач статистичної фізики розчинів. Загально відомим теоретичним підходом у цій області, який має статистичне обґрунтування, є підхід Кірквуда–Баффа (КБ) [68], який дозволяє записати основні термодинамічні величини в термінах кореляційних інтегралів. Як відомо, гранульовані суміші (наприклад, двох-компонентні) показують різні за ступенем впакування стани в залежності від асиметрії (співвідношення мольних фракцій та розмірів їх компонент). Хоча граничну фракцію впакування можна параметризувати за допомогою лише геометричних побудов (Вороного-Делоне), динаміка гранул у конгломераціях, які знаходяться під впливом зовнішніх невеликих струсів, залишається достатньо складним для опису, мульти-параметричним процесом. Метод геометричних побудов Вороного завдяки своїй, суто геометричній природі, дозволяє описувати структуру досить широкого класу систем. Для їх побудови для даного набору точок необхідно навколо кожної точки системи виділити простір, в якому знаходяться усі точки, які є найближчими до неї, з трансляцією цієї умови на решту точок системи. Таким чином кожна точка (координата якої визначається положенням центру мас частинки-гранули) асоціюється із власним характерним об’ємом (або площею). Більше того, об’єми фігур є адитивними і повністю покривають об’єм системи. Це є важливою рисою саме для застосування підходу у випадку гранульованих суміші. Важливо зауважити, що характер взаємодії проміж частинками безпосередньо не впливає на процедуру розбиття [14]. Експериментальні дослідження гранульованих сумішей дозволяють отримати інформацію про розподіл центрів частинок у певний момент часу і, таким чином, параметризувати структуру за допомогою методу Вороного. Дослідження структури за допомогою геометричних побудов Вороного базується на аналітичному аналізі розподілів площ усіх частинок системи. Очевидно, такий підхід дозволяє отримати інформацію не лише про порядок (симетрію), чи розупорядкування системи, але й про розподіл вільного об’єму та його зміни, які відбуваються завдяки зовнішнім збуренням. Вільний об’єм виступає головним параметром, який контролює поведінку гранульованих сумішей. Експериментально спостерігалося, що характерний час ущільнення може розходитися за умов наближення співвідношення розмірів частинок-компонентів до деякого критичного значення. При цьому рухливість гранул в упаковці є найнижчою у околі порога просочення (коли дрібні частинки ще можуть проходити через порожнечі, залишені проміж великими). Також з’явились повідомлення про пришвидшення динаміки ущільнення, при достатньо великих значеннях відношення розмірів компонентів [69].

Зважаючи на дані, що свідчать про те що гранульовані суміші впаковуються помітно щільніше за монодисперсні (які складаються з однакових, у найпростішому випадку – сферичних гранул) питання про залежність параметрів таких процесів від складу, а також від розміру частинок постає вельми актуальним. На цьому шляху ведуться, як безпосередні фізичні [70], так і чисельні

[71-73] дослідження. Так, у [74] чисельно вивчається гранульована суміш що складається із зерен різних розмірів. Автори дійшли до висновку про те, що співвідношення розмірів та молярних концентрацій компонентів суміші є основними параметрами, що визначають формування поточної та граничної (максимально досяжної) фракцій впакування. Більше того, зважаючи на те, що вібрація груп частинок, є властивістю, надійно доступною до параметризації лише у чисельних моделюваннях, вона виступає фактором, який фактично перешкоджає спостереженню змін параметрів суміші. Інколи (див. [75]) такого роду складнощі не є предметом обговорення авторів публікацій і це фактично залишає нез'ясованим роль вищезгаданого фактору.

Як запропоновано в роботі [38], можна розглядати два граничні випадки для бінарних сумішей, виготовлених з маленьких та великих кульок. У першому випадку частка великих (за розмірами) частинок висока, так що вони утворюють систему, де менші частинки займають відповідні порожнечі, залишені великими. Коли співвідношення розмірів частинок достатньо велике, менші частинки можуть просочуватися скрізь порожнечі, навколо великих. Навпаки, коли частка малих частинок збільшується, великі частинки опиняються ізольованими в оточенні малих. У першому випадку систему можна умовно кваліфікувати як "гравій", тоді, як у другому, як "пудинг". Зрозуміло, що обидва крайні випадки призводять до різних значень впакування. Однак теоретичний опис таких граничних випадків зазвичай проводиться відокремлено один від одного. Єдиного підходу, який би містив обидва вищезазначені граничні випадки досі не існувало. Саме розбудові такого підходу і буде присвячений цей параграф. На цьому шляху, пропонується використовувати співвідношення статистичної фізики, незважаючи на природно дисипативний характер досліджуваних систем. Практично всі вони володіють низкою квазістаціонарних станів в яких їх можна розглядати такими, що приблизно задовольняють критеріям застосування апарату статистичної механіки для визначення їх макроскопічних властивостей [1, 2].

Класична формула Кірквуда–Баффа для бі-компонентної суміші має вигляд [76]:

$$\beta_T^{(12)} = \frac{1}{k_B T} \cdot \frac{1 + n_1 G_{11} + n_2 G_{22} + n_1 n_2 (G_{11} G_{22} - G_{12}{}^2)}{n_1 + n_2 + n_1 n_2 (G_{11} + G_{22} - 2G_{12})}, \tag{3.53}$$

де $\beta_T^{(12)}$ - ізотермічна стисливість суміші, компоненти якої нумеруються як 1 і 2; $n_1 = \frac{N_1}{V}$ та $n_2 = \frac{N_2}{V}$ - парціальні щільності кількості частинок, відповідно; G_{11}, G_{22} та G_{12} – так звані кореляційні інтеграли; $k_B T$ - масштаб енергії.

Кореляційні інтеграли $G_{\alpha\beta}$ пов'язані із парціальними структурними факторами $S_{\alpha\beta}(0)$ наступним співвідношенням:

$$S_{\alpha\beta}(0) = x_\alpha \delta_{\alpha\beta} + x_\alpha x_\beta n_{12} G_{\alpha\beta}, \tag{3.54}$$

де x_α, x_β – мольні частки компонент суміші; $\delta_{\alpha\beta}$ - дельта символ Кронекера; $n_{12} = \frac{N}{V} = \frac{N_1 + N_2}{V} = n_1 + n_2$ - щільність кількості частинок для суміші.

Користуючись формулою (3.54) отримуємо:

$$S_{11}(0) = (1 - x) + (1 - x)^2 n_{12} G_{11}, \tag{3.55}$$

$$S_{22}(0) = x + x^2 n_{12} G_{22}, \tag{3.56}$$

$$S_{12}(0) = x(1 - x) n_{12} G_{12}, \tag{3.57}$$

де x – мольна частка 2-ї компоненти суміші.

Підставляючи співвідношення (3.55)-(3.57) до формули Кірквуда–Баффа (3.53), знаходимо зв'язок проміж ізотермічною стисливістю бі-компонентної суміші та парціальними структурними факторами у наступному вигляді:

$$\beta_T^{(12)} = \frac{1}{n_{12} k_B T} \cdot \frac{S_{11}(0) S_{22}(0) - S_{12}^2(0)}{x^2 S_{11}(0) - 2x(1 - x) S_{12}(0) + (1 - x)^2 S_{22}(0)}. \tag{3.58}$$

Зважаючи на те що структурний фактор монодисперсної системи визначається як:

$$S(0) = 1 + nG = n k_B T \beta_T , \tag{3.59}$$

та враховуючи (3.55) та (3.56), знаходимо, вирази для парціальних структурних факторів монодисперсних фаз $S_{11}(0)$ та $S_{22}(0)$ із парціальними ізотермічними стисливостями $\beta_T^{(1)}$ та $\beta_T^{(2)}$:

$$S_{11}(0)=(1-x)\cdot n_1 k_B T\beta_T^{(1)}, \tag{3.60}$$

$$S_{22}(0)=x\cdot n_2 k_B T\beta_T^{(2)}. \tag{3.61}$$

Парціальні ізотермічні стисливості $\beta_T^{(1)}$ та $\beta_T^{(2)}$ можуть бути визначені, із використанням модельних рівнянь стану. Наприклад, користуючись рівнянням стану Карнахана-Старлінга [57] для системи твердих сфер, може бути знайдений наступний вираз для стисливості:

$$\beta_T^{(i)}=\frac{1}{n_i k_B T}\cdot\frac{(1-\eta_i)^4}{1+4\eta_i+4\eta_i^2-4\eta_i^3+\eta_i^4}, \qquad i=1;2, \tag{3.62}$$

де $\eta_i=\frac{1}{6}\pi\sigma_i^3 n_i$ - парціальний параметр, який характеризує ступінь компактизації i-ї компоненти суміші.

Використовуючи дані про ізотермічну стисливість суміші $\beta_T^{(12)}$, отримані із альтернативних джерел, наприклад, з експерименту, або шляхом чисельного моделювання, розв’язуючи (3.58) відносно структурного фактора $S_{12}(0)$ отримуємо:

$$S_{12}(0)=x(1-x)f_{12}\pm\sqrt{x^2(1-x)^2 f_{12}^2+S_{11}S_{22}-f_{12}\left\{x^2 S_{11}+(1-x)^2 S_{22}\right\}}, \tag{3.63}$$

де $f_{12}=n_{12}k_B T\beta_T^{(12)}$ – величина, яка у свою чергу, може бути визначена за допомогою рівняння стану бінарної суміші сферичних частинок [77], за формулою:

$$\beta_T^{(12)}=\frac{1}{n_{12}k_B T}\cdot\frac{(1-\eta)^4}{1+a\eta+b\eta^2+c\eta^3+d\eta^4}, \tag{3.64}$$

де a, b, c, d - залежать (відомим чином) від x (або $f=\eta_2/\eta$), та від $\alpha=\sigma_1/\sigma_2$ (де σ_1 та σ_2 - діаметри 1-ї та 2-ї компонент суміші, відповідно).

Наведемо також корисні співвідношення:

$$f=\frac{x}{\alpha^3-(\alpha^3-1)\cdot x}, \qquad x=\frac{\alpha^3\cdot f}{1+(\alpha^3-1)\cdot f}. \tag{3.65}$$

В роботі [69] отримані експериментальні данні для компактизації бінарної суміші сферичних частинок із різною ступінню розбіжності у розмірах $\alpha = 2 \div 35$. Параметризація отриманих даних проводиться фактично у двох характерних границях (станах) суміші в одному з яких переважає вміст більших за розмірами частинок (гравій), а в другому - менших за розмірами (пудинг). В роботі [78] робиться спроба опису отриманих експериментальних даних у всіх проміжних станах із використанням вагових функцій які відіграють роль підгоночних параметрів і, строго кажучи, спрямованих фактично до тих самих граничних станів. Таким чином, незважаючи на попередні результати, теоретичний опис макроскопічних властивостей (зокрема компактизації) бінарної суміші в рамках єдиної теорії досі залишається актуальним завданням.

Тут розвинуто саме єдиний підхід до опису компактизації суміші із використанням елементів статистичної теорії сумішей та модельних рівнянь стану [79, 80]. Отримані результати порівнюються із даними безпосередніх експериментальних вимірювань виконаних в [69].

А саме, із урахуванням формул (3.55)-(3.56), (3.60)-(3.62), та (3.64), знайдемо спочатку $S_{12}(0)$ (формула (3.63)). На Рис.3.5 наведені результаті відповідних чисельних розрахунків величини $S_{12}(0)$ проведених із використанням експериментальних даних отриманих в [69].

Так як якісний склад локальної структури у випадку суміші встановити практично неможливо [38], покладемо величину $S_{12}(0)$ параметром, який визначається шляхом порівняння отриманого теоретично виразу із експериментальними спостереженнями. На цьому шляху, користуючись формулою Кірквуда-Баффа (3.53), з урахуванням отриманих на базі рівнянь стану Карнахана-Старлінга формул (3.62) та (3.64), можна отримати алгебраїчне рівняння 12-ї степені відносно параметра впакування (η). На Рис.3.6 представлені дані чисельних розв'язків такого рівняння у порівнянні із відповідними експериментальними даними.

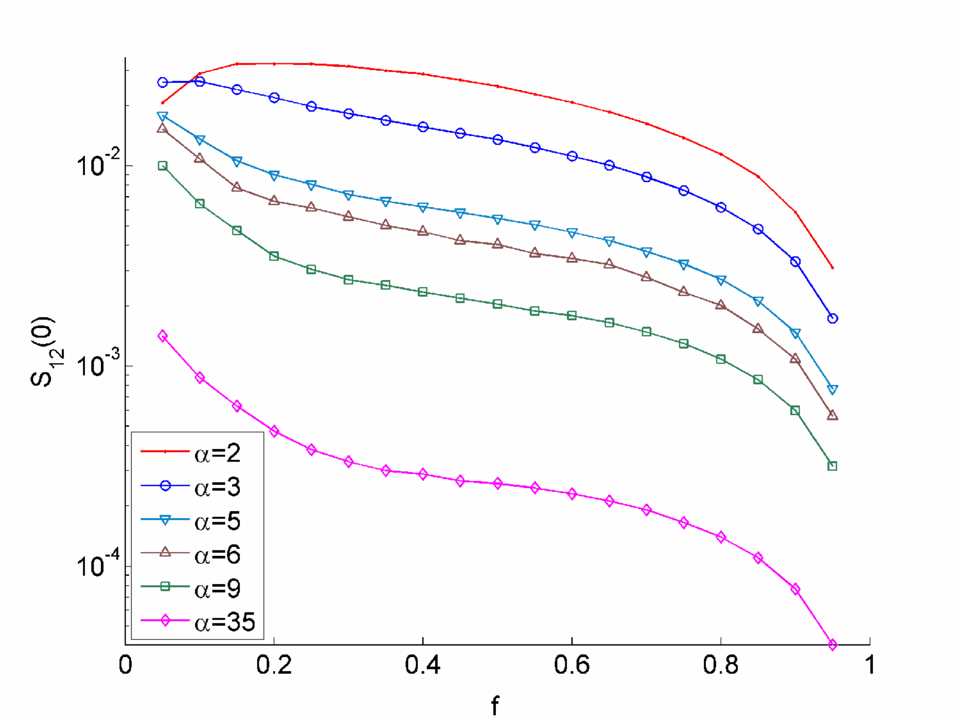


Рис.3.5 Величина парціального структурного фактора $S_{12}(0)$ бінарної суміші, в залежності від об'ємної частки дрібної компоненти (f), розрахованого за формулою (3.63) із використанням експериментальних даних отриманих в [69]. Розбіжність у розмірах частинок компонентів суміші параметрично змінюється у межах $\alpha = 2 \div 35$.

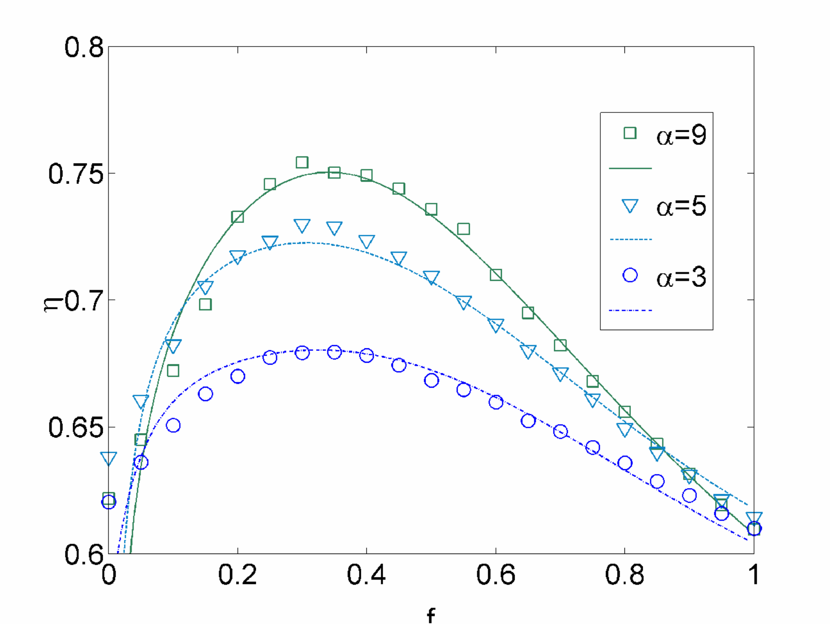


Рис.3.6 Параметр впакування (η) для суміші, як функція (f): суцільна лінія – теоретична апроксимація в рамках побудованого теоретичного підходу; кружечки, трикутники та квадрати – експериментальні дані [69].

Як випливає з Рис.3.6, ми отримали гарне узгодження теоретичного підходу із даними експериментальних спостережень у всьому інтервалі можливих значень об'ємної фракції. Зауважимо, що задіяні теоретичні моделі, на відміну від попередніх підходів, не містять обмежень по відношенню до об'ємної фракції компонентів.

Іще одне зауваження треба зробити по відношенню до швидкості впакування бі-компонентної мікро-механічної суміші для якої в [69], встановлена можливість аномального зростання. Враховуючи, що впакування гранульованої речовини описується відомим логарифмічним законом, отриманим в [35], начебто, ця обставина знаходиться у відповідності до оцінок для характерного часу впакування $\tau \sim \exp\left\{\frac{\eta\eta_\infty}{\eta_\infty - \eta}\right\}$ (де η_∞ – відповідає асимптотичному впакуванню), які випливають із моделі вільного об'єму [1] за умов $\eta \to \eta_\infty$. Однак, треба звернути увагу на те що формула для оцінки τ встановлена для монодисперсної системи, і строго кажучи, її застосування для гранульованої суміші потребує більш змістовного обґрунтування, яке на теперішній час поки що відсутнє.

Задіяні моделі використовують уявлення про частинки-гранули у формі твердих сфер, нехай із різними діаметрами, що для реальних систем є, безумовно, ідеалізацією. Вплив морфології частинок на їх структурну агломерацію вивчався у [29]. Де зокрема, було з'ясовано, що морфологія гранул суттєво впливає на динаміку ущільнення. Анізотропні зерна призводять до двох різних режимів ущільнення, розділених "сплеском" фракції впакування. Присутність тертя, також змінює порядок розміщення зерен у купі. Ці спостереження підтверджується чисельним моделюванням. Можлива поява когезійних сил між частинками може призводити до стримування ущільнення і зниження значень фракції впакування.

Розвинений підхід може бути використаний на випадок деяких рідких сумішей, для яких ефекти впакування (компактизації) відіграють помітну роль [81, 68]. Так, наприклад, використовуючи модель Карнахана-Старлінга та дані експериментів, виконаних в [81], можна показати, що залежність надлишкових факторів компактизації та стисливості від мольної (чи об'ємної) фракції одного із компонентів описуються немонотонними законами, і показують наявність екстремумів (див. Рис.3.7).

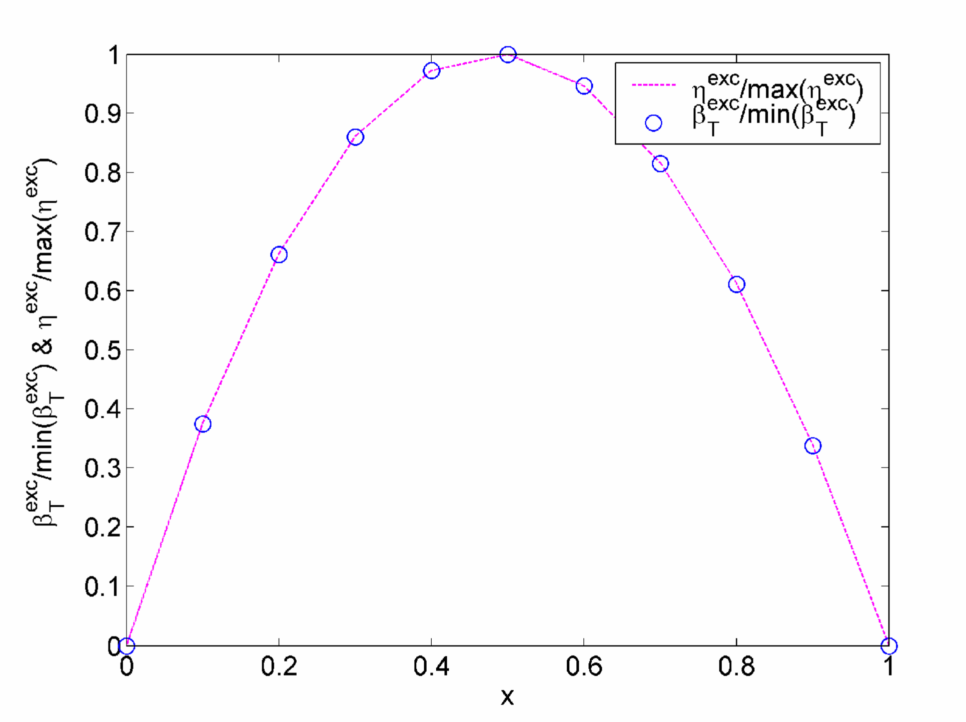


Рис.3.7 Надлишкові фактори компактизації $\eta^{exc} = \eta - \eta^{id}$ та стисливості $\beta_T^{exc} = \beta_T - \beta_T^{id}$ (нормовані на відповідні значення в екстремумах) для рідкої суміші CCl_4+$CHCl_3$ від мольної фракції x другого компонента визначені за допомогою розвиненого в нашій роботі підхода. Значення функцій η^{id} та β_T^{id}, які описують відповідні характеристики так званих «ідеальних» станів наближено визначаються за допомогою їх лінійної апроксимації в інтервалі від $x = 0$ до $x = 1$ (т.з. закон Рауля). В границях визначеного інтервалу x, η^{id} та β_T^{id} описують значення функцій η та β_T для монодисперсних (reference data) станів суміші (тобто чистих компонент).

Встановлені закономірності відкривають можливість застосувань запропонованого підходу до принципово різних за фізичними властивостями систем, як мікромеханічних, так і рідин (із принципово різним характером міжчастинкових взаємодій) з метою формування їх прогнозованих властивостей у відповідності до потреб та умов їх використання в технологічних процесах.

3.5 Висновок

У кінетичній моделі вільного об'єму, для введеної функції розподілу вакансій системи, виявлено логарифмічний характер ущільнення із часом, який підтверджується експериментально.

Узагальнено кінетичну модель вільного об'єму на випадок квазі-двокомпонентної системи, яка може бути застосована для опису як полідисперсних і багатокомпонентних, так і таких систем, що складаються з перемішаних впорядкованих доменів із різною симетрією ущільнення. Побудована фазова діаграма, яка демонструє що процес впакування носить немонотонний характер і містить риси притаманні фазовим переходам в конденсованих середовищах.

Запропонована та досліджується кінетична модель компактизації збурених г.м., яка використовує підхід Гінзбурга-Ландау в рамках якої встановлено експоненціальній закон релаксації параметру впакування, застосування якого для параметризації експериментальних вимірів дозволило запропонувати фракційний підхід до опису впакування.

Для бі-компонентних гранульованих сумішей розроблено підхід до опису стисливості та компактизації із використанням теорії Кірквуда-Баффа у поєднанні з моделями типу твердих сфер Карнахана-Старлінга, який дозволив побудувати фазову діаграму впакування у повному інтервалі значень об'ємної (чи молярної) фракції. Теоретичні результати гарно збігаються із експериментальними.

РОЗДІЛ 4
ДИНАМІКА ЗБУРЕНЬ ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ

Питання про перенесення механічних збуджень в різних середовищах виникає в задачах пов'язаних з ударами, вибухами, сейсмічними хвилями, вібрацією. Причому характер середовища повністю визначає, як поведе себе збурення (ослаблення, трансформація, відбиття, та інше). Маніпулювання властивостями середовища повинно дозволити контролювати енергію збуджень в процесі перенесення. На цьому шляху моделювання неоднорідних середовищ можна проводити за допомогою кусочно-безперервних (шаруватих) моделей.

Незважаючи на те, що в більшості випадків нас цікавить поширення збуджень в тривимірному середовищі, можна очікувати, що розгляд низькорозмірних (зокрема одновимірних) моделей в окремих задачах дозволять отримати адекватні фізичному експерименту результати. Так, наприклад, гранульовані середовища є сильно анізотропними середовищами, що дозволяє виділяти якийсь напрямок, а це вже призводить до зниження розмірності задачі. Низькорозмірні моделі хвильового транспорту, також, дозволяють проаналізувати роль таких факторів як: неоднорідність, нелінійність, невпорядкованність.

Перенесення збуджень в одновимірних моделях досліджувався багатьма вченими. Так добре відома задача ФПУ (названа згодом «проблемою»), в якій досліджується система диференційно-різницевих рівнянь (з нелінійністю типу квадрат / куб) на предмет транспорту збуджень [82]. Різними авторами показано, що наближені розв’язки дискретного і континуального рівнянь задачі не збігаються. Континуальне рівняння дає солітонний розв’язок, а з дискретного отримують бігучі хвилі.

Нижче розглянуті як відомі, так і оригінальні результати, які було опубліковано та опробовано в [4-6, 42, 83-94].

4.1 Перенос імпульсу в неоднорідних гранульованих ланцюжках у лінійному наближенні: дискретний випадок

4.1.1 Загальне нелінійне рівняння в дискретній формі

Розглянемо неоднорідний герцівський ланцюжок на прикладі моделі одновимірної системи N сферичних частинок (в загальному випадку довільних розмірів, мас, пружних констант), які знаходяться в постійному контакті. Положення n-ї частинки описується нелінійним рівнянням такого вигляду:

$$m_n \frac{d^2 z_n}{dt^2} = C_{n-1}\varepsilon_{n-1}{}^{\delta} - C_n \varepsilon_n{}^{\delta} + F_n, \tag{4.1}$$

де z_n - координата n-ої частинки; m_n - маса n-ої частинки; $\varepsilon_n = R_{n+1} + R_n - (z_{n+1} - z_n)$ - величина взаємного перекриття n-ої та $(n+1)$-ої частинок в місці контакту (n-ий контакт); $C_n = \frac{4}{3}\sqrt{\frac{R_n R_{n+1}}{R_n + R_{n+1}}} \Bigg/ \left[\frac{(1-\nu_n{}^2)}{E_n} + \frac{(1-\nu_{n+1}{}^2)}{E_{n+1}}\right]$ - силова стала [95]; R_n та R_{n+1}, E_n та E_{n+1}, ν_n та ν_{n+1} - радіус, модуль пружності Юнга, коефіцієнт Пуассона, відповідно для n-ої та $(n+1)$-ої частинок; $\delta = 3/2$ - величина яка визначає нелінійність контакту (закон Герца); F_n - зовнішня сила діє на n-у частинку (наприклад, для вертикального ланцюжка - це сила тяжіння, а для горизонтального - притискна сила діюча на крайні частинки з боку границь ланцюжка).

У разі однакових частинок для вертикального ланцюжка отримуємо:

$$m\frac{d^2 z_n}{dt^2} = C\varepsilon_{n-1}{}^{\delta} - C\varepsilon_n{}^{\delta} + mg, \tag{4.2}$$

де $C = \frac{E\sqrt{d}}{3(1-\nu^2)}$ - силова стала, d - діаметр частинок, g - прискорення вільного падіння. Причому для границь ланцюжка мають місце такі рівняння руху:

$$m\frac{d^2 z_1}{dt^2} = -C\varepsilon_1{}^{\delta} + mg, \tag{4.3}$$

$$m\frac{d^2 z_N}{dt^2} = 0\,, \tag{4.4}$$

тобто N-на частинка (найнижча частинка вертикального ланцюжку) відіграє роль нерухомої підкладинки.

У разі однакових частинок і горизонтально розташованого ланцюжка, для внутрішніх частинок отримуємо:

$$m\frac{d^2 z_n}{dt^2} = C{\varepsilon_{n-1}}^{\delta} - C{\varepsilon_n}^{\delta}\,, \tag{4.5}$$

а для частинок на його границях:

$$m\frac{d^2 z_1}{dt^2} = -C{\varepsilon_1}^{\delta} + F_1, \tag{4.6}$$

$$m\frac{d^2 z_N}{dt^2} = C{\varepsilon_{N-1}}^{\delta} + F_N\,, \tag{4.7}$$

причому сили в (4.6) та (4.7) протилежно спрямовані ($F_1 > 0$, а $F_N < 0$), а для стаціонарного випадку (тобто до збурення ланцюжка) ще й рівні по модулю ($F_1(0) = -F_N(0) = F$).

Порівнюючи рівняння руху для вертикального (4.2) і для горизонтального (4.5) ланцюжків, можна бачити їх істотну відмінність. А саме: не дивлячись на те, що частинки однакові, вертикальний ланцюжок є неоднорідним, внаслідок нерівномірного стиснення частинок на контактах під дією сили тяжіння, в той час як горизонтальний ланцюжок з однакових частинок є однорідним.

Відзначимо, що в зазначених вище рівняннях (4.1)-(4.7) дисипація енергії не враховується, хоча в реальних системах вона, звичайно ж, має місце. Нехтування дисипативними процесами в цих моделях, обумовлено як спрощенням опису руху частинок, так і знанням впливу дисипації як амплітудного ефекту в першому наближенні експоненціальної форми.

Наведемо тут ще одну форму рівняння руху збудження уздовж ланцюжку в термінах величини перекриттів ε_n частинок. З визначення перекриття ε_n в (4.1), диференціюючи за часом два рази, знаходимо, що:

$$\ddot{\varepsilon}_n = \ddot{z}_n - \ddot{z}_{n+1}, \tag{4.8}$$

тут дві крапки на горі позначають 2-ю похідну за часом. Підставляючи в (4.8) вираз для $\ddot{z}_n$ та $\ddot{z}_{n+1}$ з (4.1), отримуємо рівняння відносно ε_n:

$$\frac{d^2\varepsilon_n}{dt^2} = \frac{C_{n-1}}{m_n}\varepsilon_{n-1}{}^{\delta} - \left(\frac{C_n}{m_n} + \frac{C_n}{m_{n+1}}\right)\varepsilon_n{}^{\delta} + \frac{C_{n+1}}{m_{n+1}}\varepsilon_{n+1}{}^{\delta} + f_n - f_{n+1}, \tag{4.9}$$

де $f_n = F_n / m_n$ - перенормована сила (відзначимо, що для вертикального ланцюжка $f_n = f_{n+1} = g$).

Для однакових частинок розташованих усередині ланцюжка (як у вертикальному, так і у горизонтальному) з (4.9) отримуємо:

$$\frac{d^2\varepsilon_n}{dt^2} = \gamma\left(\varepsilon_{n-1}{}^{\delta} - 2\varepsilon_n{}^{\delta} + \varepsilon_{n+1}{}^{\delta}\right), \tag{4.10}$$

де $\gamma = C / m$ - перенормована силова стала.

У загальному випадку, урахування граничних умов для вертикального ланцюжка з (4.9) дає наступне:

$$\frac{d^2\varepsilon_1}{dt^2} = -2\gamma_1\varepsilon_1{}^{\delta} + \gamma_2\varepsilon_2{}^{\delta}, \tag{4.11}$$

$$\frac{d^2\varepsilon_N}{dt^2} = 0, \tag{4.12}$$

а для горизонтальної:

$$\frac{d^2\varepsilon_1}{dt^2} = -2\gamma_1\varepsilon_1{}^{\delta} + \gamma_2\varepsilon_2{}^{\delta} + f_1. \tag{4.13}$$

$$\frac{d^2\varepsilon_N}{dt^2} = \gamma_{N-1}\varepsilon_{N-1}{}^{\delta} - \gamma_N\varepsilon_N{}^{\delta} + f_N, \tag{4.14}$$

Пошук розв’язків наведених вище рівнянь руху (4.1) можна вести за наступними напрямками: чисельний розв’язок, пошук пробного розв’язку який би задовольнив рівняння, лінеаризація рівняння з подальшим розв’язанням вже лінійного рівняння. Коротко ці методи охарактеризуємо:

– чисельний рахунок за допомогою стандартних алгоритмів дозволяє отримати уявлення про розв’язок, однак, аналіз і фізична інтерпретація таких результатів не можуть вважатися повними;

– підібрати пробний розв’язок вдається не для будь-якого нелінійного рівняння, а в разі його знаходження немає впевненості в тому, що це загальний розв’язок, а не частковий, крім того, може виявитися, що він позбавлений фізичного змісту;
– лінеаризація використовується в таких випадках дуже часто, що дозволяє знаходити аналітичні розв’язки (вони допускають і аналіз і фізичну інтерпретацію), проте лінеаризація повинна бути фізично обгрунтована.

4.1.2 Лінеаризація (обгрунтування)

Для визначеності розглянемо випадок, коли збурення слабо відхиляє частинки від свого початкового (рівноважного) положення. Для цього введемо нову змінну:

$$\varphi_n = z_n - z_n(0), \tag{4.15}$$

де $z_n(0) = z_1(0) + \sum_{i=1}^{n-1}(R_i + R_{i+1}) - \sum_{i=1}^{n-1}\varepsilon_i(0)$ - положення центру мас частинки n в початковий момент часу. Введення нової змінної обумовлено в першу чергу тим, що масштаб характерних змін положення частинок при проходженні збуджуючого імпульсу набагато менше, власних розмірів частинок. Остання обставина, наприклад, робить практично неможливою візуалізацію динаміки збудження ланцюжка, за допомогою центру мас в якості координати для опису руху частинок.

Далі розглянемо лінеаризацію **для горизонтально розташованого ланцюжка**. Розв’язання стаціонарної системи рівнянь, що витікає з (4.1) та із урахуванням (4.5)-(4.7):

$$C_{n-1}\left[R_{n-1} + R_n - (z_n - z_{n-1})\right]^{\delta} - C_n\left[R_n + R_{n+1} - (z_{n+1} - z_n)\right]^{\delta} = 0, \tag{4.16}$$

$$-C_1\left[R_1 + R_2 - (z_2 - z_1)\right]^{\delta} + F = 0,$$

$$C_{N-1}\left[R_{N-1} + R_N - (z_N - z_{N-1})\right]^{\delta} - F = 0,$$

дозволяє знайти взаємну деформацію частинок $\varepsilon_i(0)$ (для незбуреного ланцюжка) в наступному вигляді:

$$\varepsilon_i(0) = \left(\frac{F}{C_i}\right)^{1/\delta} = \left(\frac{C_1 f}{C_i \gamma}\right)^{1/\delta}, \tag{4.17}$$

де F - модуль зовнішньої сили діючої на 1-у та N-у частинки; $f = \dfrac{F}{m_1}$; $\gamma = \dfrac{C_1}{m_1}$.

Користуючись (4.15) отримуємо наступний зв'язок між перекриттям частинок та їх зміщеннями:

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n(0) - (\varphi_{n+1} - \varphi_n), \tag{4.18}$$

яка зручна для лінеаризації рівняння (4.1) за умови досить малого збудження

$$\varepsilon_n > |\varphi_{n+1} - \varphi_n|. \tag{4.19}$$

Із (4.15) випливає, що $\ddot{\varphi}_n = \ddot{z}_n$. Підставивши в рівняння (4.1) вираз (4.18) з урахуванням того, що $\ddot{\varphi}_n = \ddot{z}_n$, отримуємо нелінійне рівняння руху відносно нової змінної φ_n:

$$m_n \frac{d^2\varphi_n}{dt^2} = C_{n-1}\left[\varepsilon_{n-1}(0) - (\varphi_n - \varphi_{n-1})\right]^\delta - C_n\left[\varepsilon_n(0) - (\varphi_{n+1} - \varphi_n)\right]^\delta, \tag{4.20}$$

$$m_1 \frac{d^2\varphi_1}{dt^2} = -C_1\left[\varepsilon_1(0) - (\varphi_2 - \varphi_1)\right]^\delta + F,$$

$$m_N \frac{d^2\varphi_N}{dt^2} = C_{N-1}\left[\varepsilon_{N-1}(0) - (\varphi_N - \varphi_{N-1})\right]^\delta - F.$$

Виділимо в рівнянні (4.20) малий параметр $\dfrac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{\varepsilon_n(0)}$:

$$m_n \frac{d^2\varphi_n}{dt^2} = C_{n-1}\varepsilon_{n-1}^\delta(0)\left[1 - \frac{\varphi_n - \varphi_{n-1}}{\varepsilon_{n-1}(0)}\right]^\delta - C_n\varepsilon_n^\delta(0)\left[1 - \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{\varepsilon_n(0)}\right]^\delta, \tag{4.21}$$

$$m_1 \frac{d^2\varphi_1}{dt^2} = -C_1\varepsilon_1^\delta(0)\left[1 - \frac{\varphi_2 - \varphi_1}{\varepsilon_1(0)}\right]^\delta + F,$$

$$m_N \frac{d^2\varphi_N}{dt^2} = C_{N-1}\varepsilon_{N-1}^\delta(0)\left[1 - \frac{\varphi_N - \varphi_{N-1}}{\varepsilon_{N-1}(0)}\right]^\delta - F.$$

Після процедури лінеаризації рівняння (4.21) приймає наступний вигляд

$$m_n \frac{d^2\varphi_n}{dt^2} \approx C_{n-1}\varepsilon_{n-1}^{\delta}(0)\left[1-\delta\frac{\varphi_n-\varphi_{n-1}}{\varepsilon_{n-1}(0)}\right] - C_n\varepsilon_n^{\delta}(0)\left[1-\delta\frac{\varphi_{n+1}-\varphi_n}{\varepsilon_n(0)}\right]. \quad (4.22)$$

$$m_1 \frac{d^2\varphi_1}{dt^2} \approx -C_1\varepsilon_1^{\delta}(0)\left[1-\delta\frac{\varphi_2-\varphi_1}{\varepsilon_1(0)}\right] + F,$$

$$m_N \frac{d^2\varphi_N}{dt^2} \approx C_{N-1}\varepsilon_{N-1}^{\delta}(0)\left[1-\delta\frac{\varphi_N-\varphi_{N-1}}{\varepsilon_{N-1}(0)}\right] - F.$$

З огляду на те, що $C_n\varepsilon_n^{\delta}(0) = F$ (див. (4.17)), рівняння (4.22) можна записати в такому вигляді:

$$m_n \frac{d^2\varphi_n}{dt^2} = C_n\varepsilon_n^{\delta-1}(0)\delta\cdot(\varphi_{n+1}-\varphi_n) - C_{n-1}\varepsilon_{n-1}^{\delta-1}(0)\delta\cdot(\varphi_n-\varphi_{n-1}), \quad (4.23)$$

$$m_1 \frac{d^2\varphi_1}{dt^2} \approx C_1\varepsilon_1^{\delta-1}(0)\delta\cdot(\varphi_2-\varphi_1),$$

$$m_N \frac{d^2\varphi_N}{dt^2} \approx -C_{N-1}\varepsilon_{N-1}^{\delta-1}(0)\delta\cdot(\varphi_N-\varphi_{N-1}).$$

або

$$\mu_n \frac{d^2\varphi_n}{d\tau^2} = \left(\frac{C_n}{C_1}\right)^{1/\delta}(\varphi_{n+1}-\varphi_n) - \left(\frac{C_{n-1}}{C_1}\right)^{1/\delta}(\varphi_n-\varphi_{n-1}), \quad (4.24)$$

$$\frac{d^2\varphi_1}{dt^2} \approx \varphi_2-\varphi_1, \qquad \mu_N \frac{d^2\varphi_N}{dt^2} \approx -\left(\frac{C_{N-1}}{C_1}\right)^{1/\delta}(\varphi_N-\varphi_{N-1}),$$

де $\tau = \sqrt{f\,\delta}\left(\frac{\gamma}{f}\right)^{\frac{1}{2\delta}} t$ - перенормований час; $\mu_i = \frac{m_i}{m_1}$ - маса i-ої частинки відносно *1*-ої.

Перепишемо рівняння (4.24) в наступному вигляді:

$$\mu_n \frac{d^2\varphi_n}{d\tau^2} = \kappa_n\varphi_{n+1} - (\kappa_n+\kappa_{n-1})\varphi_n + \kappa_{n-1}\varphi_{n-1}, \quad (4.25)$$

де $\kappa_n = \left(\dfrac{C_n}{C_1}\right)^{1/\delta}$ - безрозмірний коефіцієнт, який залежить від властивостей n-го контакту. Із (4.25) видно, що для горизонтального ланцюжка з однакових частинок рівняння руху зводиться до такого:

$$\frac{d^2\varphi_n}{d\tau^2} = \varphi_{n+1} - 2\varphi_n + \varphi_{n-1}, \qquad (4.26)$$

яке відоме також, як дискретне рівняння хвильової дифузії.

Далі розглянемо лінеаризацію **для вертикально розташованого ланцюжка**. Розв'язання стаціонарної системи рівнянь, що витікає з (4.1) та з урахуванням (4.2)-(4.4):

$$\begin{aligned} -C_1\left[R_1 + R_2 - (z_2 - z_1)\right]^{\delta} + m_n g = 0, \\ C_{n-1}\left[R_{n-1} + R_n - (z_n - z_{n-1})\right]^{\delta} - C_n\left[R_n + R_{n+1} - (z_{n+1} - z_n)\right]^{\delta} + m_n g = 0, \\ C_{N-1}\left[R_{N-1} + R_N - (z_N - z_{N-1})\right]^{\delta} + m_n g = 0, \end{aligned} \qquad (4.27)$$

дозволяє знайти взаємну деформацію частинок $\varepsilon_i(0)$ (для незбуреного ланцюжка) в наступному вигляді:

$$\varepsilon_i(0) = \left(\frac{g}{C_i}\sum_{j=1}^{i} m_j\right)^{1/\delta}. \qquad (4.28)$$

Діючи далі, як і у випадку із горизонтально розташованим ланцюжком, знаходимо що рівняння (4.1) записане для вертикального ланцюжка в лінеаризованому вигляді, збігається з рівнянням (4.25)

$$\mu_n \frac{d^2\varphi_n}{d\tau^2} = \kappa_n\varphi_{n+1} - (\kappa_n + \kappa_{n-1})\varphi_n + \kappa_{n-1}\varphi_{n-1},$$

коефіцієнти якого визначаються наступними виразами:

$$\tau = \sqrt{g\delta}\left(\frac{\gamma}{g}\right)^{\frac{1}{2\delta}} t, \qquad \kappa_n = \left(\frac{C_n}{C_1}\right)^{1/\delta}\left(\sum_{i=1}^{n}\mu_i\right)^{\xi}, \qquad (4.29)$$

де τ - перенормований час; κ_n - безвимірний коефіцієнт, який залежить як від пружних властивостей n-го контакту, так і від відносної маси усіх вище розташованих частинок; $\xi = 1 - \frac{1}{\delta}$. Таким чином, задачі про вертикальний і горизонтальний ланцюжки – можуть бути зведені один до одного.

Розглянемо, також, лінеаризацію рівняння (4.10), яке було сформульовано для герцівського ланцюжка (причому, **як горизонтального, так і вертикального) складеного з однакових частинок, в термінах перекриттів частинок** ε_n:

$$\frac{d^2\varepsilon_n}{dt^2} = \gamma\left(\varepsilon_{n-1}{}^{\delta} - 2\varepsilon_n{}^{\delta} + \varepsilon_{n+1}{}^{\delta}\right).$$

Покладемо, що перекриття частинок включає два доданки:

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n(0) + \hat{\varepsilon}_n, \tag{4.30}$$

тобто $\hat{\varepsilon}_n$ - є відхилення величини перекриття від рівноважного (початкового) значення. Проведемо лінеаризацію (4.10) за умови малого відхилення перекриттів частинок ε_n від їх рівноважних значень $\varepsilon_n(0)$:

$$\frac{\hat{\varepsilon}_n}{\varepsilon_n(0)} << 1, \tag{4.31}$$

Для цього, по-перше, виділимо малий параметр в рівнянні (4.10), тоді отримуємо:

$$\frac{d^2\hat{\varepsilon}_n}{dt^2} = \gamma\varepsilon_{n-1}^{\delta}(0)\left[1 + \frac{\hat{\varepsilon}_{n-1}}{\varepsilon_{n-1}(0)}\right]^{\delta} - 2\gamma\varepsilon_n{}^{\delta}(0)\left[1 + \frac{\hat{\varepsilon}_n}{\varepsilon_n(0)}\right]^{\delta} + \gamma\varepsilon_{n+1}{}^{\delta}(0)\left[1 + \frac{\hat{\varepsilon}_{n+1}}{\varepsilon_{n+1}(0)}\right]^{\delta}. \tag{4.32}$$

Утримуючи в розкладах по малому параметру тільки лінійні складові, приходимо до лінеаризованого рівняння такого вигляду:

$$\frac{d^2\hat{\varepsilon}_n}{dt^2} \approx \gamma\varepsilon_{n-1}^{\delta}(0)\left[1 + \delta\frac{\hat{\varepsilon}_{n-1}}{\varepsilon_{n-1}(0)}\right] - 2\gamma\varepsilon_n{}^{\delta}(0)\left[1 + \delta\frac{\hat{\varepsilon}_n}{\varepsilon_n(0)}\right] + \gamma\varepsilon_{n+1}{}^{\delta}(0)\left[1 + \delta\frac{\hat{\varepsilon}_{n+1}}{\varepsilon_{n+1}(0)}\right], \tag{4.33}$$

З огляду на те, що як для горизонтального ланцюжка, так і для вертикального ланцюжка справедливим є

$$\gamma\varepsilon_{n-1}^{\delta}(0) - 2\gamma\varepsilon_n{}^{\delta}(0) + \gamma\varepsilon_{n+1}{}^{\delta}(0) = 0, \tag{4.34}$$

тоді рівняння (4.33) спрощується до такого виду:

$$\frac{d^2\hat{\varepsilon}_n}{dt^2} \approx \gamma\delta\varepsilon_{n-1}^{\delta-1}(0)\hat{\varepsilon}_{n-1} - 2\gamma\delta\varepsilon_n{}^{\delta-1}(0)\hat{\varepsilon}_n + \gamma\delta\varepsilon_{n+1}{}^{\delta-1}(0)\hat{\varepsilon}_{n+1}. \quad (4.35)$$

Використовуючи позначення τ та κ_n (див. (4.24), (4.25) або (4.29), для горизонтального та вертикального ланцюжків, відповідно) отримуємо:

$$\frac{d^2\hat{\varepsilon}_n}{d\tau^2} \approx \kappa_{n-1}\hat{\varepsilon}_{n-1} - 2\kappa_n\hat{\varepsilon}_n + \kappa_{n+1}\hat{\varepsilon}_{n+1}. \quad (4.36)$$

Відзначимо, що порівняння виразів (4.30) та (4.18) показує, що рівняння (4.36) записано відносно змінної:

$$\hat{\varepsilon}_n = -(\varphi_{n+1} - \varphi_n), \quad (4.37)$$

яка в першому наближенні континуальної межі дорівнює $\left(-\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)$, і таким чином має сенс негативного градієнта функції зміщення φ частинок від рівноважного положення.

4.1.3 Задачі Діріхлє, Штурма-Ліувіля

Розглянемо неоднорідне лінеаризоване рівняння (4.25):

$$\mu_n \frac{d^2\varphi_n}{d\tau^2} = \kappa_n\varphi_{n+1} - (\kappa_n + \kappa_{n-1})\varphi_n + \kappa_{n-1}\varphi_{n-1},$$

Будемо шукати його розв'язок в класі періодичних функцій [96, 97]:

$$\varphi_n(\tau) = X_n \cos\omega\tau, \quad (4.38)$$

звідки отримуємо для прискорення

$$\frac{d^2\varphi_n(\tau)}{d\tau^2} = -\omega^2 X_n \cos\omega\tau = -\omega^2\varphi_n(\tau) = \lambda\varphi_n(\tau), \quad (4.39)$$

де X_n - невідома функція, що залежить від положення n та не залежить від часу τ; $\lambda = -\omega^2$ - власні значення функції X_n. Безпосередня підстановка пробного розв'язку (4.38) до рівняння (4.25) призводить до наступної системи алгебраїчних рівнянь щодо невідомої функції X_n:

$$\kappa_n X_{n+1} - (\kappa_n + \kappa_{n-1} + \mu_n\lambda)X_n + \kappa_{n-1}X_{n-1} = 0. \quad (4.40)$$

Коефіцієнти в системі рівнянь (4.40) є елементами трьох-діагональної матриці M, яка має наступний вигляд:

$$M=\begin{pmatrix}
-1-\lambda & 1 & 0 & 0 & & & & & \\
1/\mu_2 & \dfrac{\kappa_2+1}{-\mu_2}-\lambda & \kappa_2/\mu_2 & 0 & & & & & \\
0 & \kappa_2/\mu_3 & \dfrac{\kappa_3+\kappa_2}{-\mu_3}-\lambda & \kappa_3/\mu_3 & \vdots & & \iddots & & \\
0 & 0 & \kappa_3/\mu_4 & \dfrac{\kappa_4+\kappa_3}{-\mu_4}-\lambda & & & & & \\
 & & \cdots & & \ddots & & \cdots & & \\
 & & & & & \dfrac{\kappa_{N-4}}{\mu_{N-3}} & \dfrac{\kappa_{N-3}+\kappa_{N-4}}{-\mu_{N-3}}-\lambda & \kappa_{N-3}/\mu_{N-2} & 0 \\
 & & \iddots & & \vdots & 0 & \kappa_{N-3}/\mu_{N-2} & \dfrac{\kappa_{N-2}+\kappa_{N-3}}{-\mu_{N-2}}-\lambda & \kappa_{N-2}/\mu_{N-1} \\
 & & & & & 0 & 0 & \kappa_{N-2}/\mu_{N-1} & \dfrac{\kappa_{N-1}+\kappa_{N-2}}{-\mu_{N-1}}-\lambda
\end{pmatrix}$$

(4.41)

Так як в матриці (4.41) майже всі параметри (окрім λ) відомі (або можуть бути знайдені з початкових умов), то тоді з умови рівності визначника нулю

$$\det M = 0, \tag{4.42}$$

можна сформулювати характеристичне рівняння відносно власних значень λ. Останнє має ступінь $N-1$, та для ланцюжків які складаються більш ніж з 5 частинок може бути розв'язано (у загальному вигляді) тільки чисельними методами. Розв'язок має вигляд набору $N-1$ власних значень ($\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \ldots, \lambda_p, \ldots, \lambda_{N-2}, \lambda_{N-1}$), які відповідають власним частотам ($\omega_1, \omega_2, \omega_3, \ldots, \omega_p, \ldots, \omega_{N-2}, \omega_{N-1}$) і таким чином відображають спектр задачі.

Остаточно, розв'язок рівняння (4.25) отримано в наступному вигляді [88]:

$$\varphi_n(\tau)=\varphi_k(0)\,\mu_k\sum_{p=1}^{N-1}\frac{\widetilde{X}_n(\lambda_p)\widetilde{X}_k(\lambda_p)}{\sum\limits_{m=1}^{N-1}\mu_m\left[\widetilde{X}_m(\lambda_p)\right]^2}\cos\left(\sqrt{-\lambda_p}\,\tau\right)+$$

$$+\varphi_k'(0)\cdot\int_0^{\tau}\mu_k\sum_{p=1}^{N-1}\frac{\widetilde{X}_n(\lambda_p)\widetilde{X}_k(\lambda_p)}{\sum\limits_{m=1}^{N-1}\mu_m\left[\widetilde{X}_m(\lambda_p)\right]^2}\cos\left(\sqrt{-\lambda_p}\,\tau\right)d\tau, \tag{4.43}$$

де $\varphi_k(0)$ та $\varphi_k'(0)$ - параметри (зміщення та швидкість, відповідно) початкового збудження ланцюжка з боку k-ї частинки; $\widetilde{X}_n = X_n / X_1$ - можуть бути розраховані з рекурентного співвідношення

$$\widetilde{X}_{n+1} = \frac{\kappa_n + \kappa_{n-1} + \mu_n \lambda}{\kappa_n} \widetilde{X}_n - \frac{\kappa_{n-1}}{\kappa_n} \widetilde{X}_{n-1} , \tag{4.44}$$

приймаючи до уваги, що $\widetilde{X}_2 = 1 + \lambda$.

Наприклад, у випадку ланцюжка кінцевої довжини, яка включає $N = 2$ або $N = 3$, однакових частинок використання (4.43), відповідно, дає наступні результати [85]

$$\varphi_1(\tau) = \cos\tau , \tag{4.45}$$

або

$$\begin{aligned} \varphi_1(\tau) &= \frac{1}{1 + (1 + \lambda_1)^2} \cos\omega_1\tau + \frac{1}{1 + (1 + \lambda_2)^2} \cos\omega_2\tau, \\ \varphi_2(\tau) &= \frac{1 + \lambda_1}{1 + (1 + \lambda_1)^2} \cos\omega_1\tau + \frac{1 + \lambda_2}{1 + (1 + \lambda_2)^2} \cos\omega_2\tau, \end{aligned} \tag{5.5.46}$$

де $\omega_i = \sqrt{-\lambda_i}$ - власна частота, та λ_i тут задається таким виразом

$$\lambda_{1,2} = -\frac{\kappa_2 + 2}{2} \pm \sqrt{\frac{\kappa_2 + 2}{2} - \kappa_2} . \tag{4.47}$$

Описаний вище алгоритм може бути без принципових труднощів застосований для неоднорідного ланцюжка довільної довжини.

4.1.4 Багатомодовий аналіз

Наведений точний розв'язок (4.43), який задовольняє рівняння (4.25), не дозволяє відразу уявити собі вигляд розв'язку та й оцінити його параметри (наприклад: форма сигналу, швидкість, дисперсія, загасання). Таке уявлення може дати розв'язок типу «згортки».

Для найпростішого випадку, такого як дискретне рівняння хвильової дифузії (див. (4.26) в п.4.1.2)

$$\frac{d^2\varphi_n}{d\tau^2} = \varphi_{n+1} - 2\varphi_n + \varphi_{n-1},$$

розв'язок має вигляд функції Бесселя 1-го роду:

$$\varphi_n(\tau)=J_{2p}(2\tau), \tag{4.48}$$

де p - будь-яке ціле число. Однак, на границі ланцюжка, наприклад для

$$\frac{d^2\varphi_1}{d\tau^2}=\varphi_2-\varphi_1, \tag{4.49}$$

розв’язок (4.26) перестає бути дійсним. Задовольнити обом рівнянням може лінійна комбінація розв’язків (4.48) наступного вигляду [5, 42, 84]:

$$\varphi_n(\tau)=\varphi_n(0)\left[J_{2n-2}(2\tau)+J_{2n}(2\tau)\right]+\varphi_n'(0)\int_0^\tau\left[J_{2n-2}(2\tau)+J_{2n}(2\tau)\right]d\tau, \tag{4.50}$$

де перший доданок - відповідає зсувному (статичному) збуренню, а другий – динамічному, з амплітудами $\varphi_n(0)$ та $\varphi_n'(0)$, відповідно. Таким чином збурення, у лінійному однорідному ланцюжку (динаміку якого описує рівняння (4.26)), розповсюджується уздовж нього у вигляді суперпозиції циліндричних хвиль. Тобто це справедливо для випадку збудження горизонтального ланцюжку (якщо збудження задовольняє умови лінеаризації).

Для випадку неоднорідного герцівського ланцюжку, який складається з однакових частинок ($\mu_n=1$), лінеаризоване рівняння (4.25) набуває вигляду:

$$\frac{d^2\varphi_n}{d\tau^2}=\kappa_n\varphi_{n+1}-(\kappa_n+\kappa_{n-1})\varphi_n+\kappa_{n-1}\varphi_{n-1}. \tag{4.51}$$

Далеко від границь ланцюжка, коли $\kappa_{n+1}\approx\kappa_n\approx\kappa_{n-1}\equiv\tilde{\kappa}$, тобто для $n>>1$, рівняння (4.51) можна переписати у наступному вигляді

$$\frac{d^2\varphi_n}{d\tau^2}=\kappa_n\left[\varphi_{n+1}-\left(1+\frac{\kappa_{n-1}}{\kappa_n}\right)\varphi_n+\frac{\kappa_{n-1}}{\kappa_n}\varphi_{n-1}\right]\approx$$
$$\approx\tilde{\kappa}\left[\varphi_{n+1}-2\varphi_n+\varphi_{n-1}\right],$$

або

$$\frac{d^2\varphi_n}{dT^2}\approx\varphi_{n+1}-2\varphi_n+\varphi_{n-1}, \tag{4.52}$$

де $T=\sqrt{\tilde{\kappa}}\tau$. Наближений розв’язок рівняння (4.52) може бути наданий у термінах функції Бесселя 1-го роду, а саме:

$$\varphi_n(\tau) = \varphi_0 \cdot J_{2(n-p)}(2T), \tag{4.53}$$

або у вигляді їх комбінацій (такого ж типу як у виразі (4.50)):

$$\begin{aligned} \varphi_n(\tau) &= \varphi_n(0)\left[J_{2n-2}(2T) + J_{2n}(2T)\right] + \\ &+ \varphi_n'(0)\int_0^T \left[J_{2n-2}(2T) + J_{2n}(2T)\right] dT. \end{aligned} \tag{4.54}$$

Корисно проаналізувати **асимптотику розв'язку у вигляді циліндричної хвилі**. Повертаючись у рівнянні (4.53) до вимірного аргументу, отримуємо [98]

$$\varphi_n(t) = \varphi_0\, J_{2n}\left(2\sqrt{ng\delta}\left(\frac{\gamma}{ng}\right)^{1/2\delta} t\right). \tag{4.55}$$

Досліджуючи граничний випадок великих часів $t \to \infty$, з (4.37) отримуємо ([33]):

$$\varphi_n(t) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi\tilde{\tau}}}(ng)^{-1/12} \cos\left(2\tilde{\tau}(ng)^{1/6} - \pi n - \frac{\pi}{4}\right). \tag{4.56}$$

де $\tilde{\tau} = \sqrt{\frac{3}{2}}\gamma^{1/3} t$. Амплітуда $\varphi_n(t)$ згідно до рівняння (4.56) згасає за законом $A_n \sim (ng)^{-1/12}$, а фазова швидкість дається наступним виразом [5]

$$\mathrm{v}_{ph} = \frac{dn}{d\tilde{\tau}} \sim (ng)^{1/6}. \tag{4.57}$$

Зауважимо, що подібні результати (тобто $A(h) \sim h^{-1/12}$ та $\mathrm{v}_{ph} \sim h^{1/6}$) були отримані в [99,100], у континуальній границі керуючого рівняння (4.51). Зміщення хвильового фронту $\mathrm{v}_{ph} \cdot \tilde{\tau}$, як випливає з (4.57), задовольняє $\mathrm{n} \sim \tilde{\tau}^{6/5}$. Аналогічний закон для швидкості фронту хвилі отримано в [98], де було досліджено континуальну форму рівняння (4.51).

З огляду на те, що вертикальний ланцюжок утворений з однакових частинок – є **найпростішим прикладом неоднорідного ланцюжку**, розглянемо розв'язок типу (4.43) для лінійного рівняння (4.51) коли $\mu_i = 1$.

Тут зазначимо, що з урахуванням розкладання у рядок $\cos(t \sin\phi)$ за функціями Бесселя *1*-го роду [33]:

$$\cos(t\sin\phi) = J_0(t) + 2J_2(t)\cos(2\phi) + 2J_4(t)\cos(4\phi) + \ldots, \tag{5.4}$$

(де J_n - функція Бесселя першого роду, ϕ - постійна фаза, яку можна визначити з рівняння (4.61)), ми можемо представити розв’язок для неоднорідного рівняння (4.51) також у наступному вигляді [5]:

$$\varphi_n(0) = \varphi_k(0) \cdot \sum_{j=1}^{\infty} A_j(n) J_{2j-2}\left(2\sqrt{\kappa_N}\tau\right) +$$
$$+ \varphi'_k(0) \cdot \int_0^{\tau} \sum_{j=1}^{\infty} A_j(n) J_{2j-2}\left(2\sqrt{\kappa_N}\tau\right) d\tau, \qquad (5.4)$$

де $A_j(n)$ та ϕ (які використані у (4.43) та (4.58)) задаються наступним чином

$$A_j(n) = \sum_{p=1}^{N-1} \frac{X_n(\lambda_i) X_k(\lambda_i)}{\sum_{m=1}^{N-1} [X_m(\lambda_i)]^2} \cdot \begin{cases} 1, & i = 1, \\ 2\cos[(2j-2)\phi_i], & i > 1, \end{cases} \qquad (4.60)$$

$$\phi_i = \arcsin \frac{\omega_i}{2\sqrt{\kappa_N}}, \qquad (4.61)$$

та у найпростішому випадку ($\kappa_n = 1$) маємо для фази таку форму $\phi_i = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{2i-1}{2N-1}$ (наприклад, якщо $N = 3$, маємо: $\phi_1 = 18^\circ$, $\phi_2 = 54^\circ$, $\phi_3 = 90^\circ$).

Коли $\kappa_n = 1$, точний розв’язок у вигляді лінійної комбінації функцій Бесселя яка дається виразом (4.59), може бути спрощено (наприклад, якщо $j < N$ ми маємо: $A_n(n) = A_{n+1}(n) = 1$, $A_{j \neq n, n+1}(n) = 0$), тобто ми повертаємося до результатів, отриманих у (4.50) та (4.54)).

Тому строгий розв'язок лінеаризованих рівнянь руху, які описують розповсюдження імпульсу у неоднорідному гранульованому ланцюжку, показує коливальну поведінку як функції або масштабованого часу τ, або положення n.

На Рис. 4.1 наведені дані чисельного моделювання для рівняння (4.51), та теоретичні результати, які отримані за допомогою точного розв'язку (рівняння (4.59)), представлені в обох випадках - статичні або динамічні збудження.

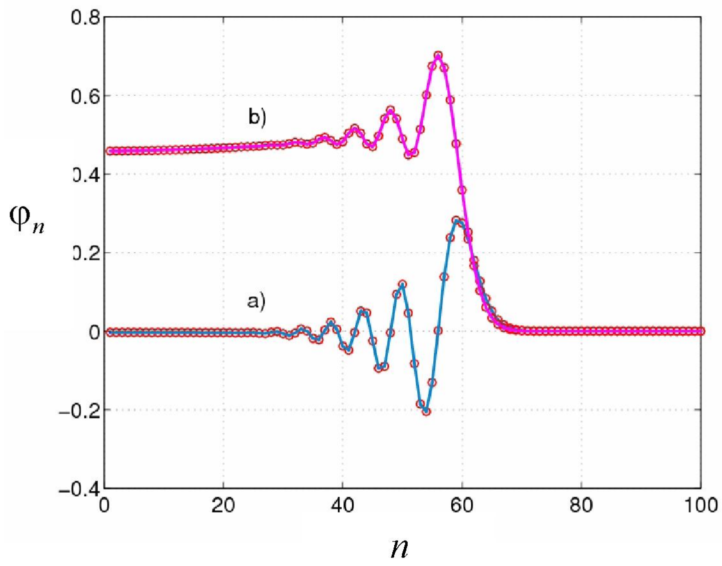


Рис.4.1 Зміщення φ_n $(\delta = 3/2)$ в залежності від положення n у ланцюжку для довільно обраного моменту часу. Позначення: суцільними лініями – результати чисельного моделювання рівняння (4.51); колами - теоретичні дані, які отримані з (4.59). Тип збурення ланцюжку: а) статичне збудження, б) динамічне збудження. [5, 90]

На Рис. 4.2 порівнюються результати чисельного моделювання загального нелінійного рівняння (4.2) та розв'язку його лінеаризованої форми (4.51), які відповідають неоднорідному (внаслідок дії сили тяжіння) герцівському ланцюжку. Для швидкості зміщення частинок $\dot{\varphi}_n$ ланцюжку під впливом однакового імпульсу збудження, в залежності від величини прискорення вільного падіння ми спостерігаємо: добре (для $10g$), задовільне (для $1g$), та незадовільне (для $0.1g$), співпадання між розв'язками. Останній випадок обумовлений більшому впливу нелінійності і як наслідок формуванню солітонної моди. Тобто, слід очікувати нетипову поведінку збуджень за умови низької гравітації.

Також слід зазначити, що строго кажучи, динаміка імпульсу в неоднорідному слабко нелінійному (а на практиці лінеаризованому) гранульованому ланцюжку не може бути описана у одно-хвильовому наближенні, тобто потребує багатомодового сценарію який тут і було розглянуто.

Рис. 4.2 Відносні швидкості зміщення $\dot{\varphi}_n$ частинок у неоднорідному герцівському ланцюжку для моменту $t = 100$ мкс після впливу імпульсу збудження, за різних умов гравітації.

Суцільна (червона) лінія – результати чисельного моделювання нелінійного рівняння (4.2); пунктир (синій) з колами – розв'язок його лінеаризованої форми (4.51).

Динамічний тип збудження: $\varphi_1(0) = 0$, $\dot{\varphi}_1(0) = 0.857$ мм/с.

Для прискорення вільного падіння: a) для $10g$, b) для $1g$, c) для $0.1g$, де $g = 9.81$ м/с^2.

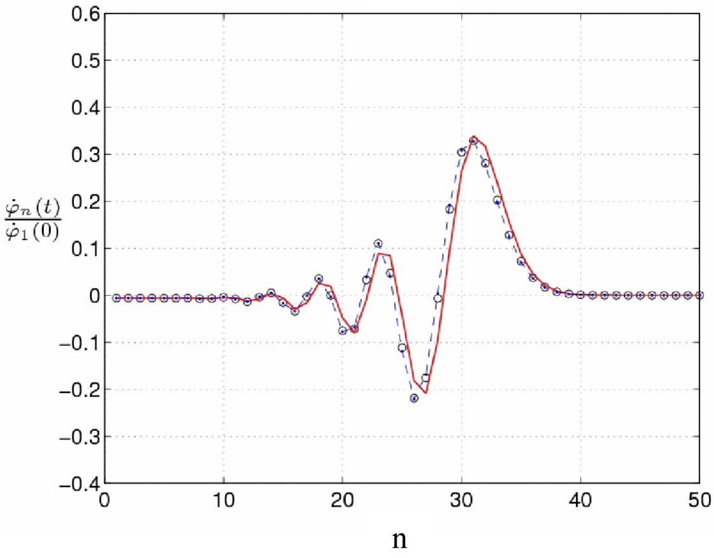
Використано наступні матеріальні співвідношення для сферичних скляних гранул:

ρ=2426 кг/м^3, $E = 62 \times 10^9$ Па,

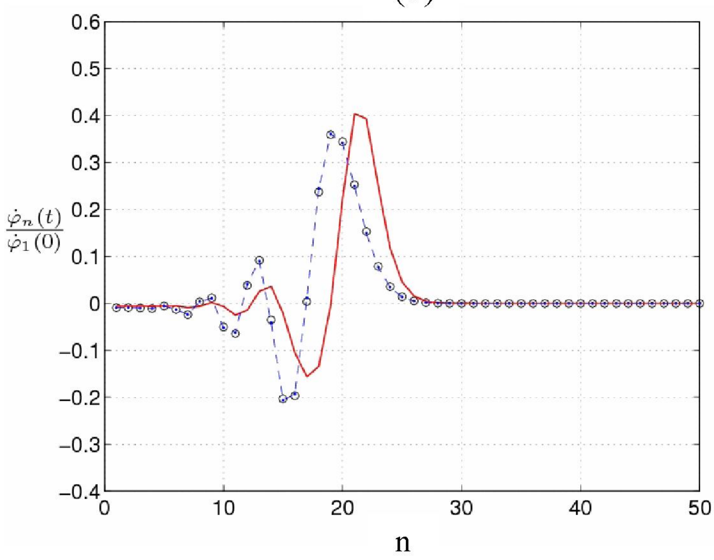
$\nu = 0.2$, $\gamma = 5.3593 \times 10^{14}$ м/с^2.

$d = 0.1$ мм. [5]

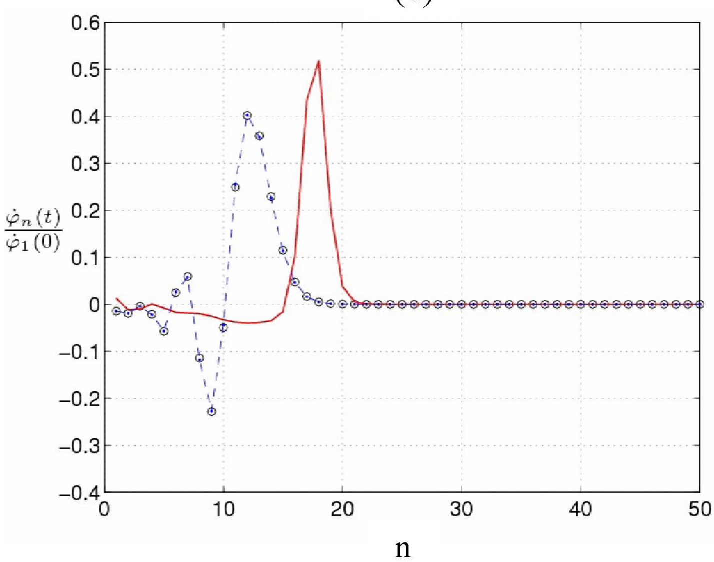
(a)



(b)



(c)



4.1.5 Роль безладу за Дайсоном

Незважаючи на топологічне впорядкування 1D силових ланцюжків, концепція безладу, у сенсі Дайсона [101, 102], може застосовуватися для вивчення відповідних ефектів у хвильовому транспорті крізь таку систему. Як було згадано вище, одновимірні системи топологічно впорядковані. З метою вивчення наслідків безладу в таких системах Дайсоном був запропонований підхід у якому значення безладу адресовано силовій константі [101, 102]. На цьому шляху, для того щоб оцінити (приблизно), як впливає цей фактор безладу на швидкість переміщення частинок у ланцюжку $\dot{\varphi}_n$, ми приймаємо, що силова стала $\{\kappa_n\}$ в рівнянні (4.51) розподілена за Дайсоном. Для цього, ми вводимо наступну характеристичну функцію $\overline{\dot{\varphi}}_m$ (тут верхня риска означає усереднення за Дайсоном) [5]:

$$\overline{\dot{\varphi}}_m = \sum_{n=1}^{N} D_m(\kappa_n)\dot{\varphi}_n(\tau), \tag{4.62}$$

де

$$D_m(\kappa_n) = \frac{m^m}{(m-1)!}(\kappa_n)^m e^{-m\kappa_n}, \tag{4.63}$$

- функція розподілу Дайсона, яка характеризує ступінь безладу; m - параметр (для впорядкованого стану $m \to \infty$, а для безладу $m \to 1$).

Вираз (4.62) розраховано із використанням швидкостей $\dot{\varphi}_n$, які отримано в результаті чисельного моделювання рівняння (4.51). Відповідні дані представлені на Рис. 4.3 та Рис. 4.4. Як можна бачити, збільшення ступеня безладу Дайсона призводить до зменшення усередненої (у сенсі Дайсона) швидкості переміщення). Коли система прагне до упорядкованого стану, відповідне значення швидкості переміщення збільшується. Тому система показує асимптотично зникнення різниці між впорядкованим та невпорядкованим станами з точки зору усередненої (за Дайсоном) швидкості переміщення.

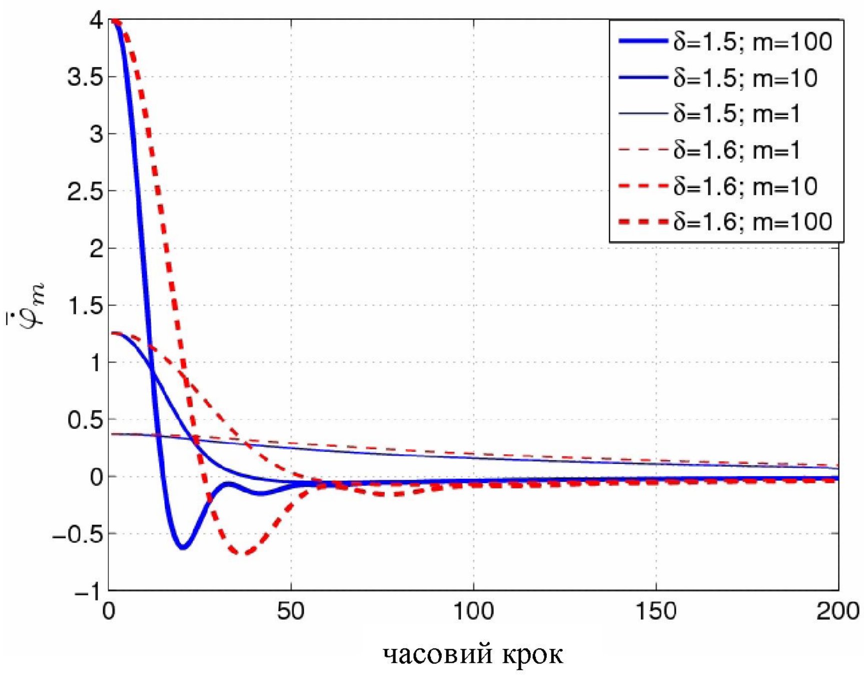


Рис. 4.3 Поведінка характеристичної функції $\bar{\varphi}_m$ (див. (4.62)), що описує вплив безладу за Дайсоном на транспортні властивості герцівського ($\delta = 3/2$) ланцюжка (дроселє-подібний ефект маніпулювання безладом за Дайсоном). [5]

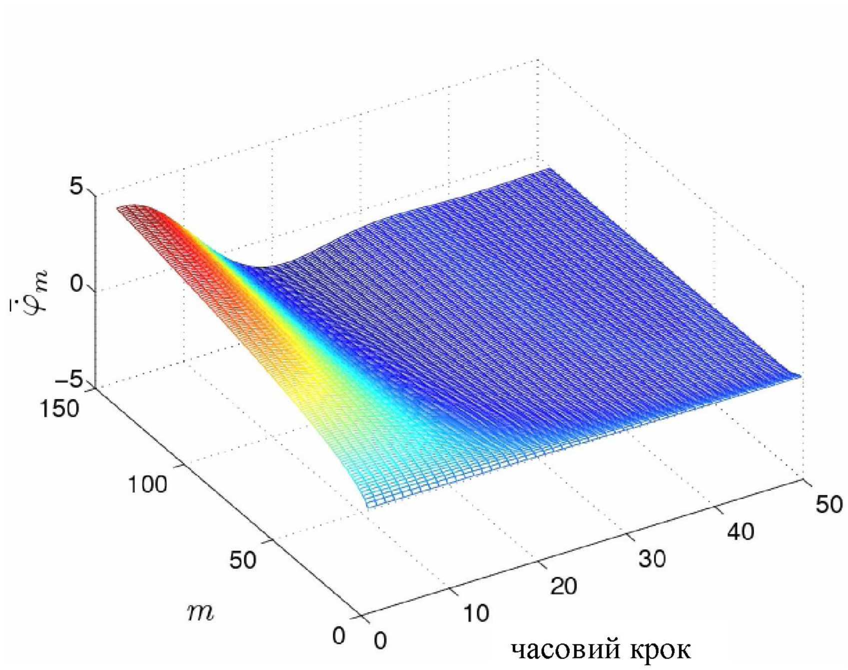


Рис. 4.4 3D-зображення впливу безладу за Дайсоном на хвильовий транспорт у герцієвому ланцюжку ($\delta = 3/2$). [5]

4.2 Перенос імпульсу в неоднорідних гранульованих ланцюжках у лінійному наближенні: континуальна межа

Зосередимо увагу на розгляді слабкої неоднорідності (скажімо такої, яка існує у вертикально розташованому ланцюжку, тобто із початковою прекомпресією внаслідок дії сили тяжіння), а також слабких збурень ланцюжків слабко нелінійних (на практиці лінеаризованих) силових центрів.

Скористаємося отриманим у п.4.1.4 дискретним лінеаризованим рівнянням переносу імпульсу збудження у неоднорідному герцівському ланцюжку (4.51)

$$\frac{d^2\varphi_n}{d\tau^2} = \kappa_n\varphi_{n+1} - (\kappa_n + \kappa_{n-1})\varphi_n + \kappa_{n-1}\varphi_{n-1}.$$

А саме, переходячи у (4.51) до суцільного аргументу $n \to h$, до суцільного зміщення $\varphi_n \to \varphi(h)$; $\varphi_{n+1} \to \varphi(h + \partial h)$, а також до суцільної силової сталої

$$\kappa_n \to \kappa(h) = h^{1/3}; \;\; \kappa_{n+1} \to \kappa(h + \partial h) = (h + \partial h)^{1/3}, \tag{4.64}$$

отримуємо континуальне рівняння:

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial\tau^2} = \frac{\partial}{\partial h}\left(h^{1/3}\frac{\partial\varphi}{\partial h}\right), \tag{4.65}$$

яке описує динаміку слабких збуджень у неоднорідному (вертикально розташованому) герцівському ланцюжку.

Загальний розв’язок рівняння (4.65) формально може бути записаний для довільних початкових та граничних умов за допомогою функції Гріна в класі циліндричних функцій [103]. Зупинимося тут на часткових розв’язках, які задовольняють спеціальним умовам (якім може бути надано конкретний фізичний зміст).

Застосуємо метод змінних які розділяються. Розділяючи у рівнянні (4.65) змінні $\varphi(\tau, h) = T(\tau) \cdot X(h)$:

$$\frac{1}{T}\cdot\frac{\partial^2 T}{\partial\tau^2} = const = \frac{1}{X}\cdot\frac{\partial}{\partial h}\left(h^{1/3}\frac{\partial X}{\partial h}\right), \tag{4.66}$$

та покладаючи $const = -\omega^2$ (де $\omega \sim \frac{1}{\tau}$ - масштаб релаксації), отримуємо систему рівнянь, що складається з рівнянь гармонічного осцилятора (за часом) та Бесселя (в координатному представленні), відповідно:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial \tau^2} + \omega^2 T = 0\,, \qquad \frac{\partial^2 X}{\partial h^2} + \frac{1}{3h}\cdot\frac{\partial X}{\partial h} + \frac{\omega^2}{a^2 h^{1/3}} X = 0\,. \tag{4.67}$$

Періодичним граничним умовам відповідає точний розв'язок (4.67), який виражається через циліндричну функцію [99, 100]:

$$\varphi(\tau, h, \omega) = A e^{i\omega\tau}\cdot h^{1/3} H^{(1)}_{2/5}\left(\frac{6\omega}{5} h^{5/6}\right), \tag{4.68}$$

де: $H^{(1)}_{2/5}\left(\frac{6\omega}{5} h^{5/6}\right)$ - функція Ганкеля 1-го роду; ω - частота; A - константа. Характерними властивостями розв'язку (4.68) є: періодичність у часі, з амплітудою яка спадає у просторі за законом $\sim h^{-1/12}$ (див. Рис.4.5).

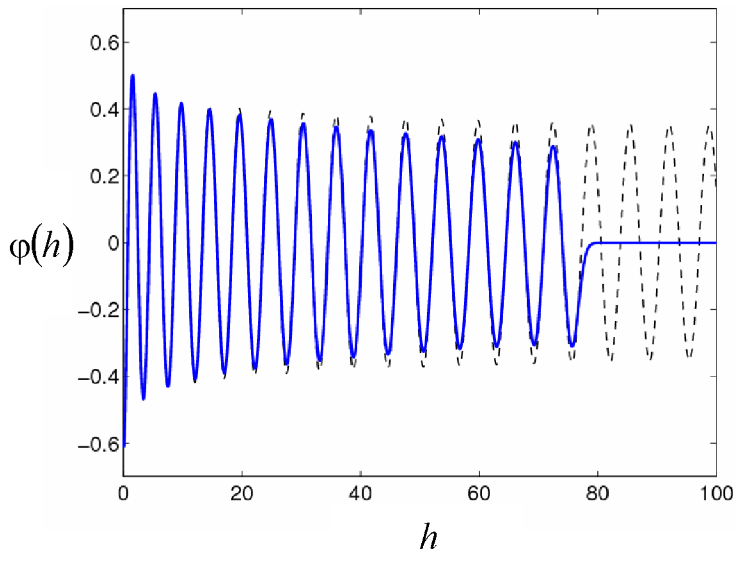


Рис.4.5 Зміщення $\varphi(h)$ у неоднорідному ланцюжку за умови періодичного збудження для виділеного моменту часу, де: суцільна лінія (синя) – результат чисельного моделювання, пунктир (чорний) – розрахунок за формулою (4.68). [5]

Одним з можливих типів граничних умов для рівняння (4.65), може бути ударне збудження ланцюжка, яке характеризується відносно малим часом дії, а також наявністю великої кількості мод (взагалі кажучи, розподілених за деяким законом). Покладемо, наприклад, що розв'язок (4.68) відповідає деякому каналу для поданого на вхід ланцюжка сигналу з виділеною частотою ω. Тоді існує розв'язок рівняння (4.65) для будь якого заданого збудження із відомим спектром $A(\omega)$:

$$\varphi(\tau,h)=\int_0^{\infty} Ae^{i\omega\tau}\cdot h^{1/3}H_{2/5}^{(1)}\left(\frac{6\omega}{5}h^{5/6}\right)d\omega. \qquad (4.69)$$

Коли $A=const$, з (4.69) отримуємо [5]:

$$\varphi(\tau,h)=A\cdot\widetilde{A}\cdot\frac{\left(\tau+\sqrt{\tau^2-\chi^2}\right)^{2/5}-\left(\tau-\sqrt{\tau^2-\chi^2}\right)^{2/5}}{\sqrt{\tau^2-\chi^2}}, \qquad (4.70)$$

де: $\chi=\frac{6}{5}h^{5/6}$; $\widetilde{A}=-2\sin\frac{\pi}{10}\cdot\left(\frac{5}{6}\right)^{2/5}\approx -0.5746$. Із (4.70) можна бачити, що розв'язок містить доданки із особливістю для $\tau=\frac{6}{5}h^{5/6}$, поблизу якої для $\varphi(\tau,h)$ можна було б очікувати різке зростання. Однак, різниця у чисельнику нівелює цю можливість.

Рівняння (4.65) має формально точний розв'язок із розривним характером [98, 104], який може бути отриманий наступним чином. Переходячи в (4.65) до нової змінної $\mu(\tau,h)=(\tau+c_3)^2+\beta h^{\alpha}$, перепишемо його у такому вигляді:

$$\mu\cdot\frac{\partial^2\varphi}{\partial\mu^2}+\frac{11}{10}\cdot\frac{\partial\varphi}{\partial\mu}=0. \qquad (4.71)$$

Розв'язуючи (4.71) та повертаючись до початкових змінних τ та h для рівняння (4.65) отримуємо розв'язок у наступній формі [98, 104]:

$$\varphi(\tau,h)=c_1+c_2\left|(\tau+c_3)^2-\left(\frac{6}{5}h^{5/6}\right)^2\right|^{-\frac{1}{10}}, \qquad (4.72)$$

де: c_1, c_2, c_3 - константи. Характерними властивостями розв'язку (4.72) є: наявність розриву в області значень параметрів визначаючих фронт ударної хвилі, швидкість розповсюдження якої пропорційна $\sim h^{1/6}$. Така хвиля неоднорідно (спочатку швидко, а далі все повільніше) розповсюджується у глиб ланцюжку. В свою чергу на великих часах, тобто для $(\tau + c_3) >> 6/5 \cdot h^{5/6}$ - розв'язок обирає риси сходинки (кінку) з плавно зростаючою амплітудою при наближенні до фронту (див. Рис.4.6). На малих часах $(\tau + c_3) \sim 6/5 \cdot h^{5/6}$ - розв'язок (4.72) має асиметричний профіль, і таким чином нагадує резонанс Фано.

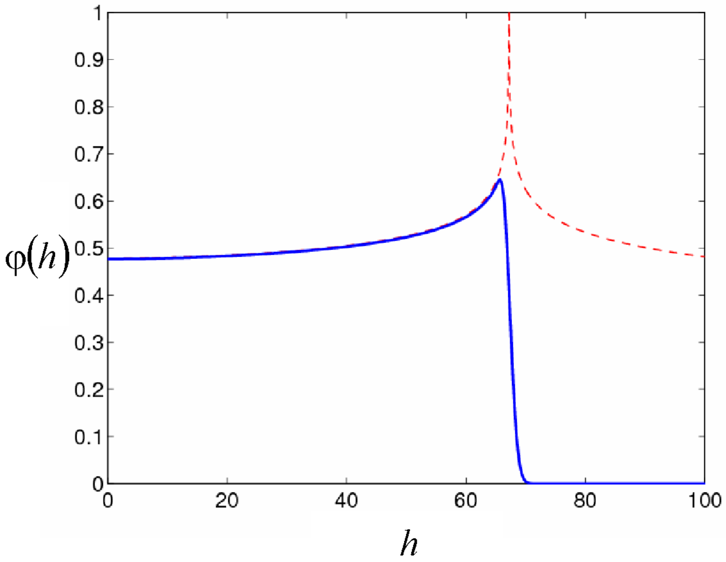


Рис.4.6 Зміщення $\varphi(h)$ у неоднорідному ланцюжку за умови імпульсного збудження для виділеного моменту часу, де: суцільна лінія (синя) – результат чисельного моделювання, пунктир (червоний) – розрахунок за формулою (4.72). [5]

Розв'язок (28) має резонансний характер і суттєво розширює динамічний сценарій переносу імпульсу у неоднорідних ланцюжках. На користь існування таких резонансних мод в динаміці імпульсу збудження у силових ланцюжках свідчать деякі експериментальні повідомлення [105, 106]. Можливість існування розривних розв'язків (хвилі-стиснення та розрядження) для гранульованих ланцюжків була також встановлена у роботі [107], де чисельно досліджувалася трансформація початково симетричного (за законом синуса) збудження герцівського ланцюжку в континуальному наближенні.

Константи c_1, c_2 у (4.72) визначаються з початкових/граничних умов. Наприклад, для так званого динамічного збудження, коли $\varphi(0,0) = 0$ та $\partial\varphi(0,0)/\partial\tau = \dot{\varphi}_0$, маємо:

$$c_1 = 5\dot{\varphi}_0 c_3, \qquad c_2 = -5\dot{\varphi}_0 c_3^{6/5}, \tag{4.73}$$

де c_3 - довільна константа, яка впроваджена для зсуву особливості розв'язку (4.72) в область нефізичних значень.

Як можна бачити за Рис.4.6, зміщення $\varphi(h)$ на великих часах $(\tau + c_3) >> \frac{6}{5}h^{5/6}$, отримані як з розв'язку (4.72) так і за результатами чисельного моделювання добре співпадають. На великих часах, для крайньої частинки що на вільній границі ланцюжка, її зміщення та швидкість добре апроксимується наступними виразами:

$$\varphi(0,\tau) \approx \tau^{-1/5}\dot{\varphi}_0, \qquad \dot{\varphi}(0,\tau) \approx -\frac{1}{5}\tau^{-6/5}\dot{\varphi}_0, \tag{4.74}$$

які витікають з (4.72) за умови $c_1 = c_3 = 0$, $c_2 = \dot{\varphi}_0$.

Можна показати, що лінійна комбінація (інтегрування за всіма частотами) розв'язків (4.68) в класі циліндричних функцій, із ваговим множником $A \sim \omega^{-2/5}$, дає розв'язок з точно таким ж полюсним доданком як у (4.72), а саме [5]:

$$\varphi = \widetilde{A}h^{2/3}\,{}_2F_1\left(\frac{1}{2},\frac{2}{5};\frac{7}{5};\frac{-\chi^2}{\tau^2-\chi^2}\right)\cdot\left|\tau^2-\chi^2\right|^{-\frac{1}{2}} + \widetilde{B}\cdot\left|\tau^2-\chi^2\right|^{-\frac{1}{10}}, \tag{4.75}$$

де ${}_2F_1$ - гіпергеометрична функція Гауса [33]; $\widetilde{A}$ та $\widetilde{B}$ - сталі, що дорівнюють:

$$\widetilde{A} = -\left(\frac{3}{5}\right)^{2/5}\cdot\frac{ctg\frac{2\pi}{5}}{\Gamma\left(\frac{7}{5}\right)} = -0.2985\,; \quad \widetilde{B} = \left(\frac{5}{3}\right)^{2/5}\cdot\frac{\Gamma\left(\frac{1}{5}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{5}\right)}ctg\frac{2\pi}{5} = 1.2287\,.$$

Аргумент гіпергеометричної функції у (4.75) відповідає нерівності $z = \frac{-\chi^2}{\tau^2-\chi^2} \le 0$, а сама функція приймає значення з наступного діапазону $0 \le {}_2F_1(1/2, 2/5; 7/5; z) \le 1$. Доречи на великих часах, для яких $z\left(\frac{\tau}{\chi} \to \infty\right) = 0$, асимптотично отримуємо ${}_2F_1(1/2, 2/5; 7/5; 0) = 1$, а поблизу полюса вона прямує до нуля: ${}_2F_1(1/2, 2/5; 7/5; -\infty) = 0$. У підсумку аналізу розв'язку (4.75) можна зробити висновок про переваження другого доданку (із степенем «$-1/10$») над першим на початку ланцюжку $h \sim 0$, а також поблизу полюса, однак на великих часах та далеко від початку ланцюжка перший доданок (із степенем «$-1/2$») стає суттєвим та підлягає урахуванню.

Отриманий результат в (4.75) базується на наявності у збурення великої кількості мод (інакше неможна було б перейти до інтегрування), що характерно для ударного типу збудження. В наслідок чого утворюється велика кількість каналів пропускання, що збільшує імовірність прозорості середовищ для такого типу збуджень.

Таким чином, можна припустити, що розв'язок типу (4.72) відноситься до хвиль ударного типу, які можуть мати властивості частинки (наприклад, бути локалізованими).

В решті, для лінійного рівняння (4.65), показано існування розв'язків як у вигляді хвилі (4.68) так і у вигляді частинки (4.72) та (4.75). Відзначимо, що зазначені властивості розв'язків можуть виявитися корисними для створення «фотонних» елементів схемотехніки.

З урахуванням вищесказаного можна зробити наступні висновки:

– Для слабко неоднорідного (вертикального) герцівського ланцюжку знайдено розв'язки лінеаризованого континуального рівняння, у вигляді лінійної комбінації циліндричних хвиль (згортки), які показують полюсну поведінку (резонансна мода).
– Отримані аналітичні розв'язки керуючих рівнянь у випадку неоднорідних герцівських ланцюжків, як показано, здібні шляхом накладання циліндричних хвиль (дисперсійних мод) породжувати хвильові пакети, які мають ознаки Фано-резонансів (асиметрія, центрованість на зонах перетину гранул ланцюжку, тощо). Отримані результати вперше виявляють особливості у фізиці хвильового транспорту герцівських ланцюжків, та встановлюють її фізичну причину.
– Отримані результати є практичним теоретичним інструментарієм елементів хвильової схемотехніки (хвильові діод та дросель, вентиль, модовий фільтр, та ін.).

4.3 Перенос енергії в нелінійних гранульованих ланцюжках у континуальній границі

Зведення вивчення реальних систем до розгляду їх одновимірних моделей можливе лише за виконання певних припущень, які у нижче розглянутому вважаємо такими що задовольняються.

4.3.1 Нелінійне рівняння для неоднорідного ланцюжка в термінах перекриття частинок

Розглянемо одновимірний обмежений ланцюжок який складається з N однакових макроскопічних частинок, взаємодіючих лише з близькими сусідами за нелінійним законом. Так наприклад, у випадку частинок сферичної форми така взаємодія може відбуватись за законом Герця (тобто коли сила пружної взаємодії 2-х сферичних частинок, пропорційна дробовій степені $\delta = 3/2$ від деформації ε).

Рівняння руху частинок в загальному випадку при наявності прекомпресії (наприклад, коли ланцюжок стиснутий зовнішньою силою, або розташований вертикально) має вигляд:

$$m\frac{d^2x_n}{dt^2} = C\left(\varepsilon_{n-1}^{\delta} - \varepsilon_n^{\delta}\right) + F_n, \qquad (4.76)$$

де x_n - координата центра n-ої гранули; $C = \dfrac{E\sqrt{d}}{3\left(1-\nu^2\right)}$ - силова стола; E - модуль пружності Юнга; ν - коефіцієнт Пуассона; d та m - діаметр та маса частинки n, відповідно; ε_n - перекриття (взаємна деформація) частинок в межах n-го контакту:

$$\varepsilon_n = d - \left(x_{n+1} - x_n\right); \qquad (4.77)$$

δ - величина яка характеризує ступень нелінійності (для герцівських контактів $\delta = 3/2$); F_n - зовнішня сила, яка діє на частинку n: для вертикального ланцюжка: $F_n = mg$; для горизонтального ланцюжка: $F_1 = -F_N = F_0$, $F_{2\ldots(N-1)} = 0$; для ланцюжка який стиснутий с боків зовнішнією силою, але окрім цього ще й розташований вертикально: $F_1 = F_0 + mg$, $F_{2...(N-1)} = mg$, $F_N = -F_0 + mg$; g - прискорення вільного падіння.

Рівноважному стану, що визначає початкові умови, відповідає стаціонарний розв'язок рівняння (4.76), яке може бути записано у наступному вигляді:

$$\varepsilon_n(0) = \left(\frac{F_0 + nmg}{C}\right)^{1/\delta}. \tag{4.78}$$

З визначення перекриття частинок ε_n (4.77), після диференціювання за часом лівої та правої частини (4.77) знаходимо:

$$\frac{d^2\varepsilon_n}{dt^2} = \frac{d^2 x_n}{dt^2} - \frac{d^2 x_{n+1}}{dt^2}. \tag{4.79}$$

З урахуванням (4.76) та (4.79) отримуємо рівняння руху імпульсу в безвимірній формі в термінах перекриття ε_n частинок:

$$\frac{d^2\varepsilon_n}{d\tau^2} = \varepsilon_{n-1}^{\delta} - 2\varepsilon_n^{\delta} + \varepsilon_{n+1}^{\delta} + \frac{F_n\text{-}F_{n+1}}{C}, \tag{4.80}$$

де $\tau = \sqrt{\gamma} \cdot t$ - перенормований час; $\gamma = C/m$ - силова стала; $F_n\text{-}F_{n+1}$ - величина яка залежить від характеру зовнішніх полів, завдяки яким створюється неоднорідність у ланцюжку.

Враховуючи, що у випадку вертикального ланцюжка $F_n\text{-}F_{n+1} = 0$, хоч він вже є неоднорідним завдяки неоднаковому тиску на верхні, середні та нижчі частини системи за рахунок вищележачих частин ланцюжка навіть в рівноважному (незбуреному) стані, останній доданок у рівнянні (4.80) у нижче наведеному матеріалі буде опущено (як такий, що дорівнює нулю). Відзначимо лише, що для випадку неоднорідних зовнішніх полів останній доданок в (4.80) необхідно буде утримати.

Перейдемо в (4.80) до змінної вигляду $\psi = \varepsilon^{\delta}$:

$$\frac{d^2}{d\tau^2}\left(\psi_n^{1/\delta}\right) = \psi_{n-1} - 2\psi_n + \psi_{n+1}, \tag{4.81}$$

та дослідимо континуальну форму (4.81). Скористаємось стандартним алгоритмом переходу від дискретної змінної $\Psi_n(\tau)$ до континуальної $\Psi(\tau, h)$:

$$\frac{d^2}{d\tau^2}\left(\psi^{1/\delta}\right)=\left(\psi-a\psi'+a^2\frac{\psi''}{2!}-a^3\frac{\psi'''}{3!}+a^4\frac{\psi''''}{4!}-\ldots\right)-2\psi+$$
$$+\left(\psi+a\psi'+a^2\frac{\psi''}{2!}+a^3\frac{\psi'''}{3!}+a^4\frac{\psi''''}{4!}+\ldots\right). \qquad (4.82)$$

де a - масштабний параметр; «штрих» - похідна за координатою, наприклад $\Psi'=\frac{\partial\Psi}{\partial h}$. Утримуючи в отриманому рівнянні доданки які містять a до порядку a^4, включно, отримуємо:

$$\frac{d^2}{d\tau^2}\left(\psi^{1/\delta}\right)=a^2\psi''+\frac{a^4}{12}\psi''''. \qquad (4.83)$$

Слід зазначити, що отримане в (4.83) рівняння є нелінійним, та отримане з дискретного рівняння, що найбільш точно моделює задачу розповсюдження збуджень у гранульованому ланцюжку, лише за континуального наближення та нехтування при цьому доданками що містять шостий та вищі порядки. При цьому рівняння описує окрім однорідного ланцюжка, ще й слабко неоднорідний (такий, наприклад, як вертикальний), лінеаризація та відповідний розв'язок якого вже було розглянуто у п.4.1 та 4.2, відповідно.

4.3.2 Розв'язок задачі для однорідного ланцюжка в термінах перекриття частинок

Рівняння (4.83) для випадку однорідного (наприклад, горизонтального) герцівського ланцюжка ($\delta=3/2$) перепишемо у вигляді [92]:

$$\frac{d^2}{d\tau^2}\left(\psi^{2/3}\right)=a^2\frac{d^2\psi}{dh^2}+\frac{a^4}{12}\cdot\frac{d^4\psi}{dh^4}. \qquad (4.84)$$

або у термінах перекритів

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\tau^2}=a^2\frac{\partial^2}{\partial h^2}\left(\varepsilon^{3/2}\right)+\frac{a^4}{12}\cdot\frac{\partial^4}{\partial h^4}\left(\varepsilon^{3/2}\right). \qquad (4.84a)$$

Неважко переконатися безпосередньою підстановкою, що рівняння (4.84) має точний частковий розв'язок наступного вигляду:

$$\psi(\tau,h)=A\cos^6\left(\frac{h-c\tau}{\lambda}\right), \qquad (4.85)$$

де $A = F_{max}/C$ - величина яка пропорційна максимальній силі F_{max} що розвивається на межі контакту частинок; c - стала, яка пропорційна швидкості переміщення збудження в ланцюжку; λ - множник, який безрозмірізує аргумент косинусу в (4.85). Підстановка розв'язку (4.85) до рівняння (4.84) дозволяє встановити зв'язок між використаними в них сталими, а саме:

$$A^{1/3} = \frac{6c^2}{5a^2}, \qquad \lambda^2 = 3a^2. \tag{4.86}$$

Розв'язок (4.85), описує знайдену нелінійну локалізовану моду, яка демонструє розповсюдження імпульсу збудження. Схожій розв'язок, що відрізняється коефіцієнтами, було отримано у роботах [108] для рівняння

$$\varphi_{tt} = c^2\left\{\frac{3}{2}(-\varphi_x)^{1/2}\varphi_{xx} + \frac{a^2}{8}(-\varphi_x)^{1/2}\varphi_{xxxx} - \frac{a^2}{8}(-\varphi_x)^{-1/2}\varphi_{xx}\varphi_{xxx} - \frac{a^2}{64}(-\varphi_x)^{-3/2}\varphi_{xx}^3\right\}, \tag{4.87}$$

розв'язок якого має вигляд

$$\xi(t,x) = -\varphi_x > 0, \qquad \xi(t,x) = \left(\frac{5\mathrm{v}^2}{4c^2}\right)^2 \cos^4\frac{2(x - \mathrm{v}t)}{\sqrt{10}a}. \tag{4.88}$$

та відомий як солітон Нестеренка.

Враховуючи, що $\psi = \varepsilon^{3/2}$, з формули (4.85) для перекриття частинок отримуємо наступний розв'язок [4, 92]:

$$\varepsilon = \varepsilon_{max}\cos^4\left(\frac{h - \mathrm{v}t}{\sqrt{3}a}\right), \tag{4.89}$$

де $\varepsilon_{max} = A^{2/3}$ - значення перекриття частинок, яке відповідає максимальному наближенню сусідніх частинок при проходженні крізь них імпульсу збудження; $\mathrm{v} = c\sqrt{\gamma}$ - швидкість переміщення солітона уздовж ланцюжка.

Знайдемо тепер величину максимального перекриття частинок ε_{max}. Із урахуванням (4.86) та (4.89), отримуємо [4, 92]:

$$\varepsilon_{max} = \frac{36\mathrm{v}^4}{25a^4\gamma^2}. \tag{4.90}$$

Зазначимо, що такого значення (ε_{max}) перекриття частинок ланцюжка досягають в тому випадку, коли його центр знаходиться точно в центрі солітона. Із (4.90) витікає нелінійний зв'язок амплітуди перекриття частинок та швидкості переміщення збудження уздовж ланцюжку ($\sim \mathrm{v}^4$), що характерно саме для нелінійних хвиль.

Знайдемо швидкість v переміщення солітона в ланцюжку використовуючи матеріальні співвідношення. З виразів у (4.86), визначення A у описі до формули (4.85) та v у (4.89), підставляючи значення силових сталих з (4.76) та (4.80), після простих перетворень, швидкість руху солітона записується у наступному вигляді:

$$\mathrm{v} = \sqrt{\frac{5}{\pi\rho}} \left(\frac{E}{3a(1-\nu^2)} \right)^{1/3} F_{max}^{1/6}, \tag{4.91}$$

Позначимо важливість (як для теорії, так і для експерименту) співвідношення (4.91) у сенсі впливу на швидкість переміщення солітона і значень матеріальних сталих ($\sim a^{1/3}$, $\sim \rho^{-1/2}$, $\sim E^{1/3}$, $\sim \nu^{-2/3}$), та величини самого збудження ($\sim F_{max}^{1/6}$).

Порівнюючи вираз для швидкості солітона який отримано в [109] для солітона Нестеренко:

$$\mathrm{v} = 0.6802 \left(\frac{2E}{a\rho^{3/2}(1-\nu^2)} \right)^{1/3} F_{max}^{1/6}, \tag{4.92}$$

із знайденим нами результатом (4.91)

$$\mathrm{v} = \frac{\sqrt{\frac{5}{\pi}}}{6^{1/3}} \left(\frac{2E}{a\rho^{3/2}(1-\nu^2)} \right)^{1/3} F_{max}^{1/6} \approx 0.6943 \left(\frac{2E}{a\rho^{3/2}(1-\nu^2)} \right)^{1/3} F_{max}^{1/6}, \tag{4.93}$$

отримуємо їх добре співпадання (похибка має порядок 2%).

Величина похибки (~2%), вказує на необхідність відповідної точності експериментальних вимірювань швидкості солітона v (<<2%), для можливості підтвердження того (4.92) чи іншого (4.93) результату.

4.3.3 Розв'язок однорідної задачі в термінах зміщень

Перейдемо до змінних, які часто використовуються багатьма авторами [99, 108-112], і які визначаються зміщенням частинок в ланцюжку відносно їх рівноважного положення:

$$\varphi_n = x_n - x_n(0). \tag{4.94}$$

Підстановка (4.94) в (4.77) дає:

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n(0) + \varphi_n - \varphi_{n+1}. \tag{4.95}$$

Перейдемо в (4.95) до континуальної межі. По аналогії з аргументацією, яка використана для отримання (4.82), у довгохвильовому наближенні отримуємо:

$$\varepsilon \approx \varepsilon(0) - a\frac{\partial\varphi}{\partial h}. \tag{4.96}$$

З урахуванням (4.89) та відповідної для нього умови однорідності $\varepsilon(0) = 0$, відносне зміщення φ шукаємо у вигляді наступного інтегралу:

$$\varphi == -\frac{\varepsilon_{\max}}{a}\int \cos^4\left(\frac{h - \mathrm{v}t}{\lambda}\right)dh. \tag{4.97}$$

Користуючись відомим представленням

$$\cos^4\theta = \frac{1}{8}(\cos 4\theta + 4\cos 2\theta + 3), \tag{4.98}$$

та взявши інтеграл в (4.97) отримуємо [4]:

$$\varphi = -\frac{\lambda\varepsilon_{\max}}{8a}\left(\frac{\sin 4\theta}{4} + 2\sin 2\theta + 3\theta\right), \tag{4.99}$$

де $\theta = \dfrac{h - vt}{\sqrt{3}a}$. Зазначимо, що отриманий у (4.99) розв'язок в термінах зміщення φ частинок для випадку $-\dfrac{\pi}{2} \le \theta \le \dfrac{\pi}{2}$ має профіль гладкої сходинки, яка з часом не змінює форму та рухається уздовж ланцюжка із сталою швидкістю v, і таким чином має усі ознаки кінку.

Знайдемо швидкість зміщення частинок в ланцюжку. Диференціюючи вираз (4.99) за часом t, маємо [4]:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{\mathrm{v}\varepsilon_{\max}}{a}\cos^4\left(\frac{h - \mathrm{v}t}{\lambda}\right). \tag{4.100}$$

Із (4.100) з урахуванням (4.90) витікає, що максимальна швидкість зміщення частинок в ланцюжку дорівнює [4]:

$$\dot{\varphi}_{max} = \frac{36\mathrm{v}^5}{25a^5\gamma^2}. \qquad (4.101)$$

Зазначимо, що такої швидкості ($\dot{\varphi}_{max}$) частинка ланцюжка сягає у тому випадку, коли вона знаходиться точно по центру солітона.

З виразів (4.90), (4.100) та (4.101), легко отримати наступні обмеження:

$$\frac{\varepsilon_{max}}{a} = \frac{\dot{\varphi}_{max}}{\mathrm{v}} = \frac{36\mathrm{v}^4}{25a^5\gamma^2} << 1, \qquad \frac{\mathrm{v}}{a} = \frac{\dot{\varphi}_{max}}{\varepsilon_{max}} >> 1. \qquad (4.102)$$

Таким чином, максимальна швидкість руху частинок при проходженні імпульсу збудження відноситься до його швидкості так, як і максимальне перекриття частинок до їх діаметру, а це у свою чергу означає, що $\dot{\varphi}_{max}$ та ε_{max} приймають на порядки менші значення у порівняння із v та a, відповідно.

Наразі, можна констатувати:

– Отримані декілька класів керуючих рівнянь, які у довгохвильовому (суцільному) наближенні описують перенос механічного імпульсу (збудження), та враховують наявність нелінійних взаємодій. Для всіх визначених рівнянь знайдені аналітичні розв’язки, загальною рисою яких є солітонний розв’язок Нестеренка [108] в якості бази.
– У довгохвильовому наближенні отримані аналітичні розв’язки для перекриття частинок та їх зміщень, які супроводжують перенос імпульсу в ланцюжку. Спеціальна увага була спрямована до розгляду рівнянь руху збудження в термінах взаємних деформацій частинок ланцюжка (зокрема встановлене перетворення типу зсуву, яке поєднує різні типи рівнянь).

4.4 Особливості розповсюдження солітонного збудження крізь гранульований ланцюжок

4.4.1 Дисперсія солітону

В отриманому раніше солітонному розв'язку для перекриття (деформації) частинок (див. (4.89)):

$$\varepsilon = \varepsilon_{max} \cos^4 \theta , \tag{4.103}$$

втім, як і для швидкостей зміщення частинок (див. (4.100)):

$$\dot{\varphi} = \dot{\varphi}_{max} \cos^4 \theta , \tag{4.104}$$

де $\theta = \dfrac{h - \mathrm{v}t}{\sqrt{3}\mathrm{a}}$; солітон визначається однією і тією ж функцією ($\cos^4 \vartheta$). Тому параметри, які характеризують уширення солітону для перекриття ε у (4.103) та швидкості зміщення $\dot{\varphi}$ у (4.104) будуть однаковими. Відзначимо, що аргумент θ у (4.103) та (4.104) змінюється в межах $[-\pi/2;\pi/2]$. Тоді, повна ширина Δh солітону, визначається наступним виразом:

$$\Delta h_{\varepsilon,\dot{\varphi}} = \pi\sqrt{3}a \approx 5.441a . \tag{4.105}$$

Визначимо дисперсію солітону (Δ) – за допомогою повної ширини на напіввисоті. В такому випадку, аргумент солітонного розв'язку повинен змінюватися в межах $[-\vartheta;\vartheta]$, де фаза ϑ визначається з умови: $\cos^4 \vartheta = 1/2$. Тоді для дисперсії отримуємо вираз в такій формі:

$$\Delta_{\varepsilon,\dot{\varphi}} = 2\sqrt{3}a \cdot \arccos\left(2^{-1/4}\right) \approx 1.981a . \tag{4.106}$$

З огляду на параметри (4.105) та (4.106), легко визначити, наприклад:

– у скільки разів дисперсія солітонного розв'язку (4.103)-(4.104) менше ніж повна ширина солітону:

$$\frac{\Delta h_{\varepsilon,\dot{\varphi}}}{\Delta_{\varepsilon,\dot{\varphi}}} = \frac{\pi}{2 \cdot \arccos\left(2^{-1/4}\right)} \approx 2.747 , \tag{4.107}$$

– яку частку від повної ширини солітону становить його дисперсія (тобто відносну дисперсію)

$$\frac{\Delta_{\varepsilon,\varphi\cdot}}{\Delta h_{\varepsilon,\varphi\cdot}} = \frac{2}{\pi}\cdot\arccos\left(2^{-1/4}\right) \approx 36.41\%\,. \tag{4.108}$$

Для солітонного розв'язку в термінах Ψ, яке має наступний вигляд (див. (4.85) та (4.86)):

$$\Psi = \Psi_{\max}\cos^6\left(\frac{h-\mathrm{v}t}{\sqrt{3}a}\right), \tag{4.109}$$

запропоновані раніше параметри уширення солітону такі як повна ширина (Δh) та дисперсія (Δ), відповідно дорівнюють:

$$\Delta h_{\Psi} = \pi\sqrt{3}a \approx 5.441a\,. \tag{4.110}$$

$$\Delta_{\Psi} = 2\sqrt{3}a\cdot\arccos\left(2^{-1/6}\right) \approx 1.633a\,. \tag{4.111}$$

З огляду на параметри (4.110) та (4.111), легко визначити, наприклад:

– у скільки разів дисперсія солітонного розв'язку (4.109) менше ніж

$$\frac{\Delta h_{\Psi}}{\Delta_{\Psi}} = \frac{\pi}{2\cdot\arccos\left(2^{-1/6}\right)} \approx 3.332, \tag{4.112}$$

– яку частку від повної ширини солітону становить його дисперсія (тобто відносну дисперсію)

$$\frac{\Delta_{\Psi}}{\Delta h_{\Psi}} = \frac{2}{\pi}\cdot\arccos\left(2^{-1/6}\right) \approx 30.02\%\,. \tag{4.113}$$

З огляду на те, що величина Ψ пропорційна силі F, яка розвивається в межах контакту між частинками та визначається законом Герца, вирази (4.110)-(4.113) в повній мірі відносяться і до солітону в термінах сили:

$$F = F_{\max}\cos^6\left(\frac{h-vt}{\sqrt{3}a}\right). \tag{4.114}$$

З порівняння параметрів уширення солітону в (4.105)-(4.108) та (4.110)-(4.113) отримуємо:

$$\Delta h_{\varepsilon,\dot{\varphi}} = \Delta h_{\Psi,F}\,, \tag{4.115}$$

$$\Delta_{\varepsilon,\dot{\varphi}} > \Delta_{\Psi,F}\,, \tag{4.116}$$

тобто дисперсія солітону «сил» менше ніж дисперсія солітону «перекриттів».

4.4.2 Енергія в солітоні

Відомо, що в лінійних ланцюжках повна енергія (E) збурень розподіляється нарівно між кінетичною (E_k) та потенційною (E_p) енергіями. Дослідимо, як відбувається їх розподіл у нелінійному ланцюжку з солітонним розв'язком для швидкості змішення частинок (4.104).

Беручи до уваги дискретну природу ланцюжка, припустимо, що в розглянутому солітоні в певний момент часу реалізується таке розташування частинок, що його екстремуму відповідає положення центру мас однієї з них, тоді

$$\frac{E_k}{E_p} = \frac{\sum_{j=1}^{5} E_{kj}}{\sum_{i=1}^{6} E_{pi}}, \tag{4.117}$$

де відповідно до (4.105) повна ширина солітону охоплює 5 частинок і 6 їх контактів (перекриттів).

Із закону Герца $F = C\varepsilon^{3/2}$ потенційна енергія на i-м контакті може бути знайдена у вигляді:

$$E_{pi} = \frac{2}{5} C\varepsilon_i^{5/2}. \tag{4.118}$$

Тоді, потенціальна енергія яка зосереджена в межах контактів частинок, що належать солітонові, з урахуванням (4.118) та (4.103), дорівнює:

$$E_p = \sum_{i=1}^{6} \frac{2}{5} C\varepsilon_i^{5/2} = \frac{2}{5} C\varepsilon_{\max}^{5/2} \sum_{i=1}^{6} \cos^{10} \frac{h_i - \mathrm{v}t}{\sqrt{3}a}. \tag{4.119}$$

Для кінетичної енергії частинок, охоплених солітонним розв'язком (4.104), отримуємо:

$$E_k = \sum_{j=1}^{5} \frac{m\dot{\varphi}_j^2}{2} = \frac{m}{2} \dot{\varphi}_{\max}^2 \sum_{j=1}^{5} \cos^8 \frac{h_j - \mathrm{v}t}{\sqrt{3}a}. \tag{4.120}$$

Підставляючи (4.119) та (4.120) до (4.117), отримуємо відношення кінетичної енергії частинок в солітоні до потенціальної енергії їх міжчастинкових контактів у наступному вигляді:

$$\frac{E_k}{E_p}=\frac{25}{24}\cdot\frac{\cos^8\frac{h_0-\mathrm{v}t}{\sqrt{3}a}+2\cos^8\frac{h_0+a-\mathrm{v}t}{\sqrt{3}a}+2\cos^8\frac{h_0+2a-\mathrm{v}t}{\sqrt{3}a}}{2\cos^{10}\frac{h_0+\frac{a}{2}-\mathrm{v}t}{\sqrt{3}a}+2\cos^{10}\frac{h_0+\frac{3a}{2}-\mathrm{v}t}{\sqrt{3}a}+2\cos^{10}\frac{h_0+\frac{5a}{2}-\mathrm{v}t}{\sqrt{3}a}}, \tag{4.121}$$

де h_0 - положення яке відповідає екстремуму солітону. Тоді, приймаючи в (4.121), що $h_0-\mathrm{v}t=0$, отримуємо:

$$\frac{E_k}{E_p}=\frac{25}{24}\cdot\frac{C_8}{C_{10}}\approx 1.1591, \tag{4.122}$$

де $C_8=1+2\cos^8\frac{1}{\sqrt{3}}+2\cos^8\frac{2}{\sqrt{3}}=1.4874;$

$$C_{10}=2\cos^{10}\frac{1}{2\sqrt{3}}+2\cos^{10}\frac{3}{2\sqrt{3}}+2\cos^{10}\frac{5}{2\sqrt{3}}=1.33675.$$

З (4.122) отримуємо величину вкладу кінетичної енергії:

$$\widetilde{E}_k=\frac{E_k}{E}=\frac{E_k}{E_k+E_p}=\frac{\frac{E_k}{E_p}}{\frac{E_k}{E_p}+1}\approx\frac{1.1591}{1.1591+1}=0.5368. \tag{4.123}$$

$$\widetilde{E}_p=1-\widetilde{E}_k=1-0.5368=0.6432. \tag{4.124}$$

Аналізуючи (4.122)-(4.124) приходимо до висновку про нерівномірний розподіл енергії в нелінійном ланцюжку з солітонним розв’язком (4.104). А саме: повна енергія яка надається під час збурення ланцюжку з часом перерасподіляється так, що на 53.68% складається з кінетичної енергії руху частинок ланцюжка, а 46.32% зосереджено в потенційної енергії пружної взаємодії частинок.

4.4.3 Збудження ланцюжка ідентичною частинкою

Розглянемо тепер задачу про передачу ланцюжку енергії від ідентичної частинки (striker), що налітає на початок ланцюжка (удар центральний) зі швидкістю v_s. Відповідно до закону збереження імпульсу отримуємо:

$$m\mathrm{v}_s = m\sum_{j=1}^{5}\dot{\varphi}_j + m\mathrm{v}'_s, \tag{4.125}$$

де v'_s - швидкість частинки (striker velocity), що вдаряє по ланцюжку, після удару. Підставляючи під знак суми з (4.125) вираз (4.104), отримуємо:

$$\sum_{j=1}^{5}\dot{\varphi}_j = \dot{\varphi}_{\max}\sum_{j=1}^{5}\cos^4\frac{h_j - \mathrm{v}t}{\sqrt{3}a} = C_4\dot{\varphi}_{\max}, \tag{4.126}$$

де $C_4 = 1 + 2\cos^4\frac{1}{\sqrt{3}} + 2\cos^4\frac{2}{\sqrt{3}}$=2.03926. Розділивши вираз (4.125) на m та враховуючи співвідношення (4.126), перепишемо (4.125) у наступному вигляді:

$$\mathrm{v}_s - \mathrm{v}'_s = C_4\dot{\varphi}_{\max}, \tag{4.127}$$

Відповідно до закону збереження енергії, для даної задачі, отримуємо:

$$E_s = \left(E_k + E_p\right) + E'_s, \tag{4.128}$$

де E_s и E'_s - кінетична енергія частинки (striker), яка вдаряє по ланцюжку, відповідно, до та після взаємодії з ланцюжком. З урахуванням (4.122)-(4.123) з (4.128) отримуємо:

$$\mathrm{v}_s^2 - \mathrm{v}'^2_s = \frac{C_8}{\widetilde{E}_k}\dot{\varphi}^2_{\max}. \tag{4.129}$$

Сумісне розв’язання системи з рівнянь (4.127) та (4.129), що випливають із законів збереження імпульсу і енергії відповідно, дає наступні розв’язки для швидкостей вдаряючої частинки:

$$\mathrm{v}_s = \frac{\dot{\varphi}_{\max}}{2}\left(\frac{C_8}{C_4\widetilde{E}_k} + C_4\right), \tag{4.130}$$

$$\mathrm{v}'_s = \frac{\dot{\varphi}_{\max}}{2}\left(\frac{C_8}{C_4\widetilde{E}_k} - C_4\right), \tag{4.131}$$

Підставимо до розв’язків (4.130)-(4.131) значення констант та проведемо обчислення, тоді:

$$\dot{\varphi}_{\max} \approx 0.5886\mathrm{v}_s, \tag{4.132}$$

$$\dot{\varphi}_{\max} \approx -2.9386\mathrm{v}'_s. \tag{4.133}$$

Розділивши (4.131) на (4.130) та виділивши v'_s, після підстановки констант та обчислень отримуємо:

$$v'_s \approx -0.2003 v_s . \tag{4.134}$$

Проаналізуємо розв'язки (4.132)-(4.134). Знак мінус у виразах (4.133)-(4.134) вказує на зміну напрямку руху вдаряючої частинки після взаємодії з ланцюжком. Як напрямок, так і порядок величини v'_s непогано узгоджується з чисельними результатами [113]. Максимальна швидкість зміщення частинки в ланцюжку $\dot{\varphi}_{\max}$, що охоплена солітонним збудженням, за даними [113] оцінюється наступним виразом:

$$\dot{\varphi}_{\max} = 0.682 v_s . \tag{4.135}$$

Теоретичний аналіз, проведений для соліона Несторенка у [114], показав для цієї ж величини наступний результат: $\dot{\varphi}_{\max} = 0.616 v_s$. Порівняння (4.132) та (4.135) показує, що згідно з нашою моделлю максимальна швидкість зміщення частинок в ланцюжку помітно менша ($\sim 15\%$) ніж величина з формули (4.135).

Практична цінність формули (4.132) полягає в тому, що вона дозволяє зв'язати вплив на ланцюжок (v_s) та швидкість поширення солітону (v). Так, з огляду на (4.101) з п.4.3.3

$$\dot{\varphi}_{\max} = \frac{36 v^5}{25 a^5 \gamma^2},$$

отримуємо, що швидкість розповсюдження солітону v залежить від максимальної швидкості $\dot{\varphi}_{\max}$ зміщення частинки яка входить до його складу, в такий спосіб:

$$v = \left(\frac{25}{36} a^5 \gamma^2 \dot{\varphi}_{\max} \right)^{1/5} . \tag{4.136}$$

Підставляючи (4.132) в (4.136), можна надати швидкості солітону наступний вигляд:

$$v = \left(\frac{25}{36} a^5 \gamma^2 0.5886 v_s \right)^{1/5} = 0.8362 \left(\gamma^2 v_s \right)^{1/5} a . \tag{4.137}$$

Як видно з (4.137), швидкість солітону v є пропорційною до діаметру частинок ланцюжка a, а також залежить від матеріальних констант $\sim\gamma^{2/5}$ та початкової швидкості «стрікера» $\sim \text{v}_s^{1/5}$.

4.4.4 Квазідисипативний сценарій опису збудження ланцюжка

Розглянемо тепер задачу про передачу ланцюжку енергії від частинки (striker) довільної маси (m_s), що налітає на початок ланцюжка (удар центральний) зі швидкістю v_s. За аналогією з попереднім пунктом (див. п.4.4.3), запишемо рівняння які випливають із законів збереження імпульсу і енергії:

$$m_s \text{v}_s = m\sum_{j=1}^{5}\dot{\varphi}_j + m_s \text{v}'_s, \qquad E_s = \left(E_k + E_p\right) + E'_s. \tag{4.138}$$

Так як, частина початкової енергії «стрікера» (після взаємодії його з ланцюжком) переходить в потенційну енергію сил пружності (в області міжчастинкових контактів), таку взаємодію можна розглядати як непружну (квазідісипативну), тобто таку, що повна кінетична енергія не зберігається.

Для непружного центрального удару добре відома модель коефіцієнта відновлення (restitution coefficient), закони збереження в якій мають вигляд:

$$m_1\text{v}_1 + m_2\text{v}_2 = m_1\text{v}'_1 + m_2\text{v}'_2, \tag{4.139}$$

$$\frac{m_1\text{v}_1^2}{2} + \frac{m_2\text{v}_2^2}{2} = \frac{m_1\text{v}_1'^2}{2} + \frac{m_2\text{v}_2'^2}{2} + D, \tag{4.140}$$

де $D = \dfrac{1-\alpha^2}{2}\text{v}_{12}^2\mu$ - величина кінетичної енергії яку було виведено з системи дисипативними процесами під час взаємодії; α - коефіцієнт відновлення (restitution coefficient), що відповідає за дисипативність взаємодії частинок 1 та 2 (наприклад, для $\alpha = 0$ - абсолютно непружний удар, а для $\alpha = 1$ - абсолютно пружний удар); $\text{v}_{12} = \text{v}_1 - \text{v}_2$ - відносна швидкість зіткнення частинок; $\mu = \dfrac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ - зведена маса. Розв’язком такої моделі є наступні вирази:

$$\text{v}'_1 = \text{v}_1 - \frac{m_2}{m_1 + m_2}\text{v}_{12}\left(1+\alpha\right), \tag{4.141}$$

$$\mathrm{v}_2' = \mathrm{v}_2 + \frac{m_1}{m_1 + m_2}\mathrm{v}_{12}\left(1+\alpha\right). \qquad (4.142)$$

Встановимо відповідність, між розв'язками (4.141)-(4.142) та нашою задачею.

Із системи рівнянь (4.138), з урахуванням (4.120), (4.122) та (4.126), отримуємо:

$$\mathrm{v}_s^2 - \mathrm{v}_s'^2 = \frac{m}{m_s}C_8\dot{\varphi}_{\max}^2 + \frac{2E_p}{m_s}, \qquad (4.143)$$

$$\mathrm{v}_s - \mathrm{v}_s' = \frac{m}{m_s}C_4\dot{\varphi}_{\max}. \qquad (4.144)$$

Аналогічно, з системи (4.141)-(4.142) отримуємо:

$$\mathrm{v}_1^2 - \mathrm{v}_1'^2 = \frac{m_2}{m_1}\mathrm{v}_2'^2 + \frac{2D}{m_1}, \qquad (4.145)$$

$$\mathrm{v}_1 - \mathrm{v}_1' = \frac{m_2}{m_1}\mathrm{v}_2'. \qquad (4.146)$$

Так як, системи (4.143)-(4.144) та (4.145)-(4.146) еквівалентні (для нашої задачі), тоді:

$$\frac{m_2}{m_1}\mathrm{v}_2'^2 = \frac{m}{m_s}C_8\dot{\varphi}_{\max}^2, \qquad (4.147)$$

$$\frac{m_2}{m_1}\mathrm{v}_2' = \frac{m}{m_s}C_4\dot{\varphi}_{\max}. \qquad (4.148)$$

Розділивши (4.147) на (4.148), отримуємо:

$$\mathrm{v}_2' = \frac{C_8}{C_4}\dot{\varphi}_{\max} \equiv \mathrm{v}_{eff}, \qquad (4.149)$$

де v_{eff} - ефективна швидкість квазічастинки (солітону). Зведемо (4.148) в квадрат та розділимо результат на (4.147), після скорочень та з урахуванням $m_1 = m_s$, отримуємо:

$$m_2 = m \cdot \frac{C_4^2}{C_8} \equiv m_{eff}, \qquad (4.150)$$

де m_{eff} - ефективна маса квазічастинки (солітону).

З систем (4.143)-(4.144) та (4.145)-(4.146) легко помітити, що індекс першої частинки відповідає «стрікеру» (частинці яка б'є по ланцюжку), тоді:

$$\mathrm{v}_1 = \mathrm{v}_\mathrm{s}, \qquad \mathrm{v}'_1 = \mathrm{v}'_\mathrm{s}, \qquad m_1 = m_s, \tag{4.151}$$

а величина дисипації D загальної кількості кінетичної енергії E_s, при взаємодії «стрікера» з ланцюжком, відповідає енергії зосередженій на міжчастинкових контактах солітону, тобто накопиченої у вигляді потенційної енергії E_p:

$$D = E_p. \tag{4.152}$$

Беручи до уваги нерівномірний характер розподілу енергії в солітоні (згідно (4.122)-(4.124)), а також те що енергія передана ланцюжку від «стрікера» дорівнює

$$E = E_\mathrm{k} + E_p = E_\mathrm{s} - E'_s, \tag{4.153}$$

із закону збереження енергії в (4.138) та враховуючи рівність (4.152), отримуємо:

$$1 = \frac{E_k}{E_\mathrm{s} - E'_\mathrm{s}} + \frac{E_p}{E_\mathrm{s} - E'_\mathrm{s}} = \widetilde{E}_k + \frac{D}{E_\mathrm{s} - E'_\mathrm{s}}, \tag{4.154}$$

звідки величину D представимо в наступному вигляді:

$$D = \left(1 - \widetilde{E}_k\right)\cdot\left(E_\mathrm{s} - E'_\mathrm{s}\right) = \widetilde{E}_p \frac{m_\mathrm{s}}{2}\left(\mathrm{v}_\mathrm{s}^2 - \mathrm{v}_\mathrm{s}'^2\right). \tag{4.155}$$

Прирівнюючи визначальний вираз для D в (4.140) з отриманим тут в (4.155), після спрощень отримуємо:

$$\left(1 - \alpha^2\right)\frac{m_\mathrm{eff}}{m_\mathrm{s} + m_\mathrm{eff}} = \widetilde{E}_p\left(1 - \frac{\mathrm{v}_\mathrm{s}'^2}{\mathrm{v}_\mathrm{s}^2}\right). \tag{4.156}$$

Із (4.141) з урахуванням (4.151) та (4.150), знаходимо:

$$\mathrm{v}'_\mathrm{s} = \mathrm{v}_\mathrm{s} - \frac{m_{eff}}{m_\mathrm{s} + m_{eff}}\mathrm{v}_\mathrm{s}\left(1 + \alpha\right), \tag{4.157}$$

звідки отримуємо вираз для відношення швидкостей «стрікера» до та після взаємодії із ланцюжком $\left(\dfrac{\mathrm{v}'_\mathrm{s}}{\mathrm{v}_\mathrm{s}}\right)$:

$$\frac{v_s'}{v_s} = 1 - \frac{m_{eff}}{m_s + m_{eff}}(1+\alpha). \tag{4.158}$$

Підставимо (4.158) до (4.156), тоді:

$$\left(1-\alpha^2\right)\frac{m_{\text{eff}}}{m_s + m_{\text{eff}}} = \widetilde{E}_p\left(1 - \left[1 - \frac{m_{eff}}{m_s + m_{eff}}(1+\alpha)\right]^2\right). \tag{4.159}$$

Розкриваючи квадрат у правій частині (4.159)

$$\left(1-\alpha^2\right)\frac{m_{\text{eff}}}{m_s + m_{\text{eff}}} = \widetilde{E}_p\left(1 - 1 + 2\frac{m_{eff}}{m_s + m_{eff}}(1+\alpha) - \left[\frac{m_{eff}}{m_s + m_{eff}}(1+\alpha)\right]^2\right),$$

проведемо скорочення на $\frac{m_{eff}}{m_s + m_{eff}}(1+\alpha)$, тоді отримуємо:

$$(1-\alpha) = \widetilde{E}_p\left(2 - \frac{m_{eff}}{m_s + m_{eff}}(1+\alpha)\right). \tag{4.160}$$

Наведемо подібні в (4.160)

$$\alpha\left(1 - \widetilde{E}_p\frac{m_{eff}}{m_s + m_{eff}}\right) = 1 - 2\widetilde{E}_p + \frac{m_{eff}}{m_s + m_{eff}}\widetilde{E}_p. \tag{4.161}$$

Із (4.161) знаходимо вираз для α:

$$\alpha = \frac{1 - 2\widetilde{E}_p + \dfrac{m_{eff}}{m_s + m_{eff}}\widetilde{E}_p}{1 - \widetilde{E}_p\dfrac{m_{eff}}{m_s + m_{eff}}}. \tag{4.162}$$

Спрощуючи (4.162), з урахуванням (4.123) та (4.124), для α знаходимо корисне співвідношення:

$$\alpha = \frac{1 + \dfrac{m_{eff}}{m_s} - \dfrac{E_p}{E_k}}{1 + \dfrac{m_{eff}}{m_s} + \dfrac{E_p}{E_k}}, \tag{4.163}$$

звідки підстановкою (4.122) та (4.150) остаточно отримуємо для коефіцієнта α такий вираз:

$$\alpha = \frac{C_8 + \dfrac{m}{m_s} C_4^2 - \dfrac{24}{25} C_{10}}{C_8 + \dfrac{m}{m_s} C_4^2 + \dfrac{24}{25} C_{10}}, \tag{4.164}$$

який, як видно з (4.164), залежить тільки від співвідношення маси частки в ланцюжку (m) та маси «стрікера» (m_s). Наприклад, для $m_s = m$, з (4.164) отримуємо: $\alpha = 0.63$.

Підставляючи (4.163)-(4.164), (4.149)-(4.151) в (4.142), отримуємо:

$$v_{eff} = \frac{2\mathrm{v}_s}{1 + \dfrac{m_{eff}}{m_s} + \dfrac{E_p}{E_k}}, \tag{4.165}$$

$$\dot{\varphi}_{\max} = \frac{2C_4}{C_8 + \dfrac{m}{m_s} C_4^2 + \dfrac{24}{25} C_{10}} \mathrm{v}_s. \tag{4.166}$$

Для $m_s = m$ вираз (4.166) дає такий ж результат що й розв’язок (4.132) у п.4.4.3: $\dot{\varphi}_{\max} = 0.5886 \cdot \mathrm{v}_s$.

Визначимо, для якої маси «стрікеру» його швидкість після взаємодії з ланцюжком обертається на нуль: $\mathrm{v}_s' = 0$. Із (4.158) отримуємо:

$$\alpha = \frac{m_s}{m_{eff}}. \tag{4.167}$$

Підставляючи (4.167) в (4.163), з урахуванням (4.123) та (4.124), знаходимо:

$$m_s = m_{eff} \widetilde{E}_k, \tag{4.168}$$

звідки з урахуванням (4.150) отримуємо

$$\frac{m_s}{m} = \frac{C_4^2}{C_8} \widetilde{E}_k = 1.50, \tag{4.169}$$

відзначимо, що при цьому $\alpha = \widetilde{E}_k = 0.54$. Таким чином, для того щоб «стрікер», вдаряючий по ланцюжку з однакових частинок, після взаємодії зупинився, потрібно щоб його маса відповідала формулі (4.169).

4.4.5 Енергія децентрованого солітона

Нехай в деякий момент реалізується такий стан частинок в солітоні, що в його центрі знаходиться контакт, тоді (4.117) перепишемо так:

$$\frac{E_k}{E_p} = \frac{\sum_{j=1}^{6} E_{kj}}{\sum_{i=1}^{5} E_{pi}}, \tag{4.170}$$

де у відповідності до виразу (4.105) повна ширина солітону охоплює 6 центрів мас частинок і 5 їх контактів (перекриттів).

Замість (4.119) з (4.170) отримуємо:

$$E_p = \sum_{i=1}^{5} \frac{2}{5} C \varepsilon_i^{5/2} = \frac{2}{5} C \varepsilon_{\max}^{5/2} \sum_{i=1}^{5} \cos^{10} \frac{h_i - \mathrm{v}t}{\sqrt{3}a}, \tag{4.171}$$

а замість (4.120) із (4.170) отримуємо:

$$E_k = \sum_{j=1}^{6} \frac{m\dot{\varphi}_j^2}{2} = \frac{m}{2} \dot{\varphi}_{\max}^2 \sum_{j=1}^{6} \cos^8 \frac{h_j - \mathrm{v}t}{\sqrt{3}a}. \tag{4.172}$$

За аналогією із виразом у (4.121), підставимо (4.171)-(4.172) до (4.170), тоді:

$$\frac{E_k}{E_p} = \frac{25}{24} \cdot \frac{2\cos^8 \dfrac{h_0 + \dfrac{a}{2} - \mathrm{v}t}{\sqrt{3}a} + 2\cos^8 \dfrac{h_0 + \dfrac{3a}{2} - \mathrm{v}t}{\sqrt{3}a} + 2\cos^8 \dfrac{h_0 + \dfrac{5a}{2} - \mathrm{v}t}{\sqrt{3}a}}{\cos^{10} \dfrac{h_0 - \mathrm{v}t}{\sqrt{3}a} + 2\cos^{10} \dfrac{h_0 + a - \mathrm{v}t}{\sqrt{3}a} + 2\cos^{10} \dfrac{h_0 + 2a - \mathrm{v}t}{\sqrt{3}a}} =$$

$$= \frac{25}{24} \cdot \frac{2\cos^8 \dfrac{1}{2\sqrt{3}} + 2\cos^8 \dfrac{3}{2\sqrt{3}} + 2\cos^8 \dfrac{5}{2\sqrt{3}}}{1 + 2\cos^{10} \dfrac{1}{\sqrt{3}} + 2\cos^{10} \dfrac{2}{\sqrt{3}}} = \frac{25}{24} \cdot \frac{\widetilde{C}_8}{\widetilde{C}_{10}}, \tag{4.173}$$

де $\widetilde{C}_8 = 1.4884$, $\widetilde{C}_{10} = 1.3414$. Таким чином, відношення кінетичної енергії до потенційної, у новій конфігурації заданій на початку пункту, має вигляд:

$$\frac{E_k}{E_p} = \frac{25}{24} \cdot \frac{\widetilde{C}_8}{\widetilde{C}_{10}} \approx 1.1558. \tag{4.174}$$

Із (4.174) отримуємо величину вкладу кінетичної енергії:

$$\widetilde{E}_k = \frac{E_k}{E} = \frac{E_k}{E_k + E_p} = \frac{\dfrac{E_k}{E_p}}{\dfrac{E_k}{E_p} + 1} \approx \frac{1.1558}{1.1558 + 1} = 0.5361\,. \qquad (4.175)$$

$$\widetilde{E}_p = 1 - \widetilde{E}_k = 1 - 0.5361 = 0.4639\,. \qquad (4.176)$$

Аналогічно (4.126) для доданка в законі збереження імпульсу, отримуємо:

$$\sum_{j=1}^{6} \dot{\varphi}_j = \dot{\varphi}_{\max} \sum_{j=1}^{6} \cos^4 \frac{h_j - \mathrm{v}t}{\sqrt{3}a} = \widetilde{C}_4 \dot{\varphi}_{\max}\,, \qquad (4.177)$$

де $\widetilde{C}_4 = 2\cos^4 \dfrac{1}{2\sqrt{3}} + 2\cos^4 \dfrac{3}{2\sqrt{3}} + 2\cos^4 \dfrac{5}{2\sqrt{3}} = 2.04181.$

У відповідності до співвідношень (4.150) для m_{eff}, (4.164) для α та (4.166) для $\dot{\varphi}_{\max}$, отримуємо:

$$m_{eff} = 2.801m\,, \qquad (4.178)$$

$$\alpha = \frac{\widetilde{C}_8 + \dfrac{m}{m_s}\widetilde{C}_4^2 - \dfrac{24}{25}\widetilde{C}_{10}}{\widetilde{C}_8 + \dfrac{m}{m_s}\widetilde{C}_4^2 + \dfrac{24}{25}\widetilde{C}_{10}} = 0.62916\,, \qquad (4.179)$$

$$\dot{\varphi}_{\max} = \frac{2\widetilde{C}_4}{\widetilde{C}_8 + \dfrac{m}{m_s}\widetilde{C}_4^2 + \dfrac{24}{25}\widetilde{C}_{10}} \mathrm{v}_s = 0.5880\,. \qquad (4.180)$$

Для випадку $m_s = m$, із (4.179) та (4.180), маємо:

$$\alpha = 0.62916\,, \qquad (4.181)$$

$$\dot{\varphi}_{\max} = 0.5880\mathrm{v}_s\,. \qquad (4.182)$$

Таким чином, було показано – у гранульованому ланцюжку існують такі характеристичні параметри солітону, які в довільний момент часу визначені лише з деякою мірою точності, хоча розкид значень і становить малі частки відсотка. Дана обставина формально дає можливість розглядати явища пов'язані з поширенням солітону в гранульованому ланцюжку з точки зору квантової системи, для якої невизначеність є характерною рисою.

4.4.6 Пружний сценарій збудження ланцюжка

У раніше розглянутій взаємодії «стрікеру» із ланцюжком (див. п.4.4.4) ми використовували формули для зіткнення частинок з втратою енергії. Під дисипацією там розумівся перехід кінетичної енергії в потенційну енергію пружної деформації на міжчастинкових інтерфейсах. Однак, оскільки пружна деформація в розглянутому випадку оборотна, то насправді таке збудження ланцюжка може бути розглянуто і з позиції абсолютно-пружного удару. Відзначимо, що в реальних ланцюжках близькими до абсолютно-пружних можна вважати частинки наприклад зі сталі.

Як і раніше, розглянемо тут передачу енергії від «стрікеру» довільної маси m_s до ланцюжку складеного із сферичних частинок масою m. Однак, будемо використовувати тут найпростіші формули для абсолютно-пружного удару.

Закони збереження імпульсу та енергії при цьому абсолютно ідентичні з (4.138). Використовуючи (4.123), можна показати:

$$\left(E_k + E_p\right) = E_k \cdot \frac{E_k + E_p}{E_k} = \frac{E_k}{\widetilde{E}_k}. \tag{4.183}$$

Підставляючи (4.183) до рівняння для закону збереження енергії (4.138), отримуємо:

$$E_s = \frac{1}{\widetilde{E}_k} \cdot E_k + E'_s, \tag{4.184}$$

звідки з урахуванням (4.120) та (4.122)

$$v_s^2 - v_s'^2 = \frac{1}{\widetilde{E}_k} \cdot \frac{m}{m_s} C_8 \dot{\varphi}_{\max}^2. \tag{4.185}$$

Порівнюючи (4.144) та (4.185), із відповідними виразами для абсолютно-пружного удару (4.145) та (4.146), тобто для $D = 0$, по аналогії із (4.149) та (4.150) отримуємо:

$$v'_2 = \frac{1}{\widetilde{E}_k} \cdot \frac{C_8}{C_4} \dot{\varphi}_{\max} \equiv \frac{v_{eff}}{\widetilde{E}_k} = \widetilde{v}_{eff}, \tag{4.186}$$

$$m_2 = m \frac{C_4^2}{C_8} \cdot \widetilde{E}_k \equiv m_{eff} \cdot \widetilde{E}_k = \widetilde{m}_{eff}, \tag{4.187}$$

де $\tilde{v}_{eff}$ та $\tilde{m}_{eff}$ - відповідно, ефективна швидкість та ефективна маса квазічастинки (солітону) в найпростішому - «бездисипативному» випадку.

Із (4.187) випливає, що ефективна маса $\tilde{m}_{eff}$ солітонної квазічастинки, яка задовольняє співвідношенням для абсолютно-пружного удару, може бути легко знайдена, з урахуванням різних способів розрахунку, а саме:

- для випадку коли солітон охоплює 5 частинок та 6 контактів

$$\tilde{m}_{eff} = 2.796m \cdot 0.5368 = 1.5009m; \qquad (4.188)$$

- для випадку коли солітон охоплює 6 частинок та 5 контактів

$$\tilde{m}_{eff} = 2.801m \cdot 0.5361 = 1.5016m. \qquad (4.189)$$

Прийнявши значення $\tilde{m}_{eff}$ з (4.188) та (4.189) за межи інтервалу можливих значень, величину його середини можна надати у вигляді:

$$\tilde{m}_{eff} = <\tilde{m}_{eff}> \pm \Delta\tilde{m}_{eff} = (1.50125 \pm 0.00035)m, \qquad (4.190)$$

де навіть крайні відхилення менші за 0,025%.

Таким чином, відповідно до (4.190), ефективна маса солітонної квазічастинки складає – трохи більше ніж півтори маси частинки із складу ланцюжку. Саме цим пояснюється результат в (4.169), а саме: для $m_s = \tilde{m}_{eff}$ (тобто $1.5m$) «стрікер» взаємодіє із солітонною квазічастинкою у ланцюжку як частинкою ідентичною маси, і як наслідок вони просто обмінюються швидкостями. При цьому, налітаючий на ланцюжок «стрікер», можна вважати налітаючим на квазічастинку яка знаходиться у стані спокою, а це означає що після такої взаємодії «стрікер» зупиниться. Схожу ситуацію можна очікувати і при зворотному процесі, тобто коли солітонна квазічастинка проходячи по ланцюжку досягає її краю і взаємодіє з крайньої частинкою, що має полуторну масу у порівнянні з окремою гранулою ланцюжка. В такому випадку, відбитий солітонний сигнал спостерігатися не буде, так як при ударі солітонна квазічастинка зупиниться.

Розглянута в попередньому абзаці ситуація може бути використана у відомій моделі колиски Ньютона. Відомо, що запущений в колисці Ньютона імпульс з часом починає розгойдувати всю систему, що пов'язано в свою чергу з тим, що складаючись з частинок однієї маси, після кожного зіткнення «стрікеру» із ланцюжком, «стрікер» не зупиняється, а відскочує у протилежному напрямку хоч і з невеликою швидкістю.

Таким чином, якщо по краях в колисці Ньютона встановити кулі з масою в $1.5m$, тоді запущений в системі імпульс буде циркулювати по системі не розгойдуючи її, та згасаючи тільки завдяки справжніх дисипативних сил (тертя, опору середовища, незворотної деформації, ...).

4.4.7 Солітон в декорованому «дефектами» ланцюжку

Розглянемо взаємодію нашої солітонної квазічастинки з ізотопічним дефектом всередині ланцюжка масою $M \geq m$

Як відомо, при центральному пружному зіткненні двох частинок, одна з яких знаходилася у стані спокою, швидкості налітаючої частинки даються співвідношенням:

$$-\frac{\mathrm{v}_1'}{\mathrm{v}_1} = \frac{m_2 - m_1}{m_1 + m_2}. \tag{4.191}$$

У нашому випадку, коли при використанні формул абсолютно-пружного удару ми повинні користуватися ефективними швидкостями та масами, з урахуванням (4.191), отримуємо:

$$-\frac{\tilde{v}'_{eff}}{\tilde{v}_{eff}} = \frac{\tilde{M} - \tilde{m}_{eff}}{\tilde{M} + \tilde{m}_{eff}}, \tag{4.192}$$

де $\tilde{M}$ - деяка ефективна маса дефекту, яка відрізняється від істинної маси (M) внаслідок того факту, що при ударі дефект «підпирається» (з протилежного від налітаючого на дефект солітону боку) частинками ланцюжка масою m та при цьому стає «ефективно» більш важким.

З огляду на те, що в ланцюжку без дефекту (тобто коли $M = m$) солітонне збудження поширюється без відбиття (тобто $-\dfrac{\tilde{v}'_{eff}}{\tilde{v}_{eff}} = 0$), тоді для однорідного ланцюжка з (4.192) отримуємо:

$$\tilde{M} = \tilde{m}_{eff} \approx 1.5m, \tag{4.193}$$

$$\Delta M = \tilde{M} - M = 1.5m - m = 0.5m, \tag{4.194}$$

де ΔM - маса, яка ефективно додається дефекту за рахунок «підпирання». Припустимо, що $\Delta M = 0.5m$ не тільки в разі $M = m$, але і для $M > m$, тоді з (4.193) та (4.194) для ефективної маси дефекту отримуємо:

$$\tilde{M} = M + 0.5m. \tag{4.195}$$

Підставимо вираз (4.195) в співвідношення (4.192), тоді з урахуванням $\dfrac{\tilde{v}'_{eff}}{\tilde{v}_{eff}} = \dfrac{\dot{\varphi}'_{\max}}{\dot{\varphi}_{\max}}$, знаходимо:

$$-\frac{\dot{\varphi}'_{\max}}{\dot{\varphi}_{\max}} = \frac{M - m}{M + 2m}. \tag{4.196}$$

Відносна амплітуда $\dfrac{F_r}{F_i} = \left(\left|\dfrac{v_r}{v_i}\right|\right)^{6.5}$ відбиття солітонного збудження від важкого ізотопічного дефекту у герцівському ланцюжку, з урахуванням (4.196) дорівнює [4]:

$$\frac{F_r}{F_i} = \left(\frac{M - m}{M + 2m}\right)^{6/5}, \tag{4.197}$$

де F_r та F_i - амплітуди (в термінах сил на міжчастинкових контактах) налітаючого на дефект солітона та відбитого від нього, відповідно.

У роботі [115], за припущення, що взаємодія солітону із дефектом розглядається як для вільних частинок, для відносної амплітуди F_r / F_i відбиття солітонного збудження від важкого ізотопічного дефекту у герцівському ланцюжку, для інтерпретації експериментальних даних було використано наступну формулу:

$$\frac{F_r}{F_i} = \left(\frac{M-m}{M+m}\right)^{6/5}. \tag{4.198}$$

Згідно до даних наведених на Рис. 4.7, теоретичні результати отримані за формулою (4.197) краще узгоджується ніж за формулою (4.198) з даними прямого фізичного експерименту у [115].

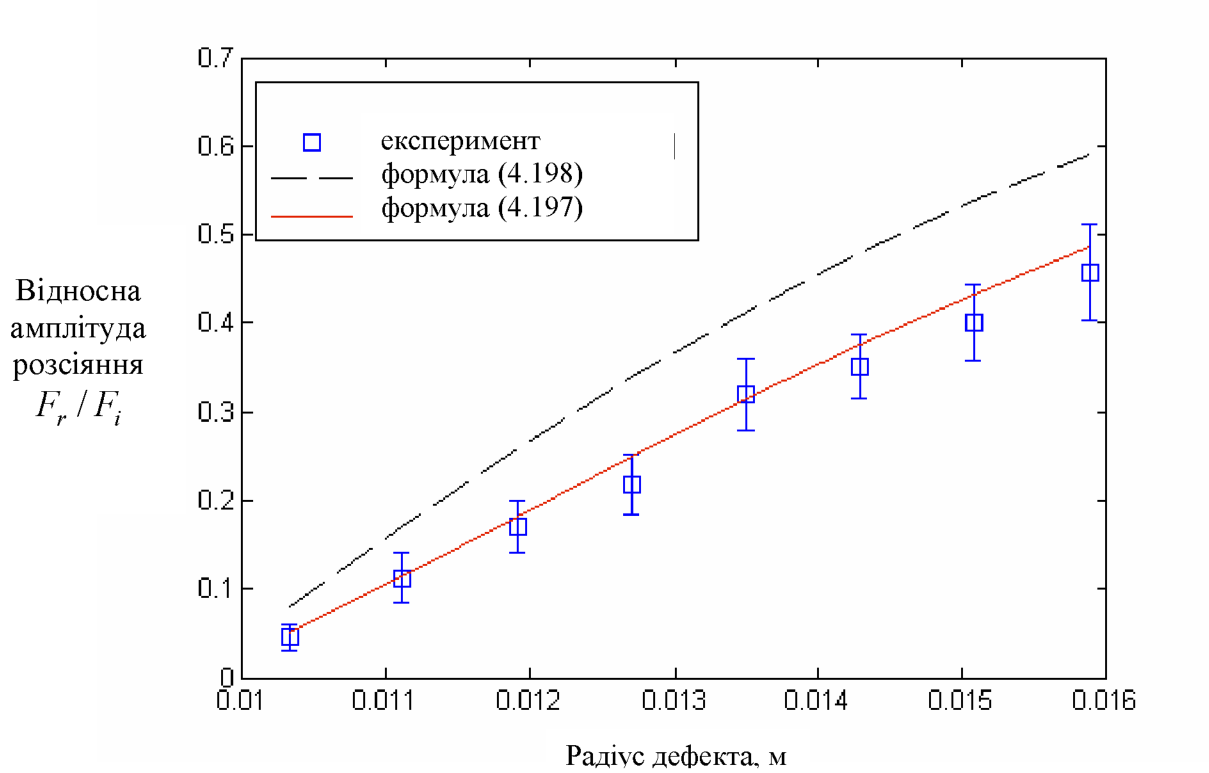


Рисунок 4.7 Відносна амплітуда F_r / F_i відбиття солітонного збудження від важкого ізотопічного дефекту у герцівському ланцюжку, як функція розміру дефекта. Де: суцільна лінія – теоретичні результати з (4.197); пунктир – теоретичні результати отримані з (4.198) та використані у [115]; квадрати - експериментальні дані з роботи [115].

5.3.8 Критерії (матеріальні співвідношення) існування солітону типу Нестеренка

У загальному випадку кроссовер звук (хвиля) – солітон (частинка), відбувається під впливом багатьох факторів. Зокрема, важливу роль відіграють початкові та граничні умови, матеріальні константи, неоднорідність, невпорядкованість, нелінійність, дисипація. Спробуємо визначити критерій зміни режимів за допомогою швидкості (v) солітона.

Критерієм, який визначає початок суттєвого впливу нелінійності, будемо вважати перехід до стану руху солітону із швидкістю (v) більшою, за максимальну швидкість звуку $c_0 = a\varepsilon_0^{1/4}\sqrt{\frac{3}{2}\gamma}$, яка відповідає низькочастотним модам коливань частинок у ланцюжку $(\omega \to 0)$:

$$\mathrm{v} > \mathrm{c}_0. \tag{4.199}$$

Формально, вираз для швидкості солітону $\mathrm{v} = a\varepsilon_{\max}^{1/4}\sqrt{\frac{5}{6}\gamma}$ задовольняє збудженням із довільною амплітудою. Звернемо увагу, що в (4.199) враховані два аспекти (які наразі дозволяють сформулювати критерій зміни режимів). А саме: з одного боку – саме завдяки нелінійності солітон починає рух із швидкістю більше, за максимальну швидкість звуку c_0; з іншого боку – у лінійній, звуковій границі (коли впливом нелінійності можна знехтувати), як можна показати солітон втрачає стійкість.

Підставляючи у (4.199), відповідні значення швидкостей $\mathrm{v} = a\varepsilon_{\max}^{1/4}\sqrt{\frac{5}{6}\gamma}$ та $c_0 = a\varepsilon_0^{1/4}\sqrt{\frac{3}{2}\gamma}$, сформульований вище критерій зміни режимів можна записати у термінах взаємного перекриття частинок:

$$\varepsilon_{\max} > \frac{81}{25}\varepsilon_0 = 3.24\varepsilon_0. \tag{4.200}$$

Із (4.200) витікає, що у випадку коли прекомпресія зростає внаслідок неоднорідності, солітонне збудження починає «розсипатися» (формується так званий солітонний потяг [99]) перетворюючись в решті на хвилю. Аналогічно, можна уявити собі і зворотній процес, коли «хвиля» локалізується і перетворюється на «частинку».

Якщо скористатися моделлю Герця $\mathrm{F} = C\varepsilon^{3/2}$, критерій (4.200) для перекриттів можна записати наступним чином (тобто в термінах герцівських сил):

$$F_{max} > \left(\frac{9}{5}\right)^3 F_0 = 5.832 F_0 . \tag{4.201}$$

Порівнюючи відносний параметр збудження $(\frac{F_{max}}{F_0})$, розрахований за експериментальними даними з роботи [110]) із критерієм з (4.201), бачимо, що незначна частина солітоноподібних збуджень не задовольняє заданому критерію. Зокрема, для таких збуджень $\frac{F_{max}}{F_0} < 5.832$. Тим не менш, вони все одно розглядаються авторами як солітони типу Нестеренко [110]. Формально, зазначений клас імпульсів збуджень слід було б віднести до якогось проміжного типу збуджень (який розділяє звук та солітони, типу Нестеренко моди), скажімо, до солітону типу Кортевега де Вріза (КдВ).

Визначений вище критерій, припускає також вираз через максимальну швидкість $\dot{\varphi}_{max}$ зміщення частинок у ланцюжку. Враховуючи, що $\dot{\varphi}_{max} = \varepsilon_{max} \frac{v}{a}$, та співвідношення (4.199), отримуємо:

$$\dot{\varphi}_{max} > \varepsilon_{max} \frac{c_0}{a} , \tag{4.202}$$

маніпулюючи (4.201) та матеріальними співвідношеннями, отримуємо наступне співвідношення:

$$\dot{\varphi}_{max} > \frac{81}{25}\sqrt{\frac{3}{2}\gamma} \cdot \varepsilon_0^{5/4} = 3.968\sqrt{\gamma} \cdot \varepsilon_0^{5/4} . \tag{4.203}$$

Вираз (4.203) вказує – на співвідношення між швидкостями зміщення частинок у солітоні, відносно звуковий хвилі.

На підставі вищесказаного можна отримати оцінку величини параметру збудження (v_s) необхідної для утворення солітону типу Нестеренко. Скориставшись виразом $\dot{\varphi}_{max} = 0.5886 v_s$ (де v_s - швидкість стрікера (збуджуючої частинки), маса якого вибирається ідентичною до частинок ланцюжка), та підставляючи його у співвідношення (4.203), тоді отримуємо:

$$\mathrm{v}_s > \frac{1}{0.5886} \cdot \frac{81}{25}\sqrt{\frac{3}{2}\gamma} \cdot \varepsilon_0^{5/4} = 6.7417\sqrt{\gamma} \cdot \varepsilon_0^{5/4}. \qquad (4.204)$$

Критерій (4.204), безпосередньо пов’язує параметр (швидкість) збудження (v_s) як із матеріальніми константами (γ), так і з граничними (перекриття) умовами (ε_0). Не безпосередньо, але фактично, критерій (4.203) пов'язаний також із нелінійним характером системи, оскільки і визначає умову, коли роль нелінійності стає суттєвою.

4.5 Висновок

Розв’язана аналітично модель розповсюдження імпульсних збуджень у неоднорідних герцівських ланцюжках. Розв’язок представлений у вигляді лінійної комбінації циліндричних хвиль (нескінченний ряд). В континуальній границі отримані резонансні розв’язки розривного типу, які, як показано можуть формуватися з пакетів циліндричних хвиль. Теоретичні висновки добре співпадають із результатами чисельного моделювання методом молекулярної динаміки.

Нелінійне рівняння розповсюдження імпульсних збуджень, сформульовано в термінах взаємного перекриття частинок. Отримано його розв’язок у вигляді солітону типа Нестеренка. Досліджено умови формування такого солітонного розв’язку. Для декорованого ізотопічною домішкою ланцюжка, отримана амплітуда розсіяння збудження від важкого дефекту, вираз для якої добре узгоджується із даними відповідних експериментальних досліджень.

ВИСНОВКИ

1. Із застосуванням методу побудов Вороного здійснюється наочний опис та порівняльний аналіз локальної структури впорядкованих і невпорядкованих станів гранульованих матеріалів (г.м.) Запропонована та обґрунтована модель оболонок для опису локальної структури гранульованих систем. За допомогою вивчення відповідно визначених трансляційного та орієнтаційного параметрів впорядкування показано, що гранульовані матеріали, запорошена плазма, а також деякі інші об'єкти м'якої матерії є прикладами багаточастинкових систем, які природно перебувають у анізотропних станах.

Для моделі ґраткового газу у гравітаційному полі, показано існування фермі-профілю густини. За допомогою феноменологічних даних визначений критерій переходу з впорядкованого (кристалічного) до невпорядкованого стану, який знаходиться в межах інтервалу плавлення твердих тіл (критерій Ліндемана).

2. За допомогою моделі низьковимірної системи непружно контактуючих тотожних твердих кульок, які здійснюють вертикальний рух у полі сил тяжіння детально вивчаються умови існування та властивості стаціонарних станів у відкритій системі до якої підводиться енергія ззовні. Встановлено, що відповідні стаціонарні стани реалізуються у вигляді розшарування руху частинок на інтервали з періодичним рухом в них, що співпадає із висновками чисельних та безпосередніх фізичних експериментів. Знайдено критерій існування таких станів, згідно до якого у великих за розмірами системах, для створення умов існування стаціонарних станів недостатньо лише надавати до системи енергію зовні (тобто дисипативні та зовнішні потоки енергії в таких системах не встигають взаємно компенсувати один одного). Показано, що у горизонтальній системі, де замість сили тяжіння вводиться пружна границя, існує низка квазістаціонарних станів. Досліджено структуру таких станів та можливість переходу між ними.

3. У кінетичній моделі вільного об'єму, для введеної функції розподілу вакансій системи, виявлено логарифмічний характер ущільнення із часом, який підтверджується експериментально.

Узагальнено кінетичну модель вільного об’єму на випадок квазі-двокомпонентної системи, яка може бути застосована для опису як полідисперсних і багатокомпонентних, так і таких систем, що складаються з перемішаних впорядкованих доменів із різною симетрією ущільнення. Побудована фазова діаграма, яка демонструє що процес впакування носить немонотонний характер і містить риси притаманні фазовим переходам в конденсованих середовищах.

Запропонована та досліджується кінетична модель компактизації збурених г.м., яка використовує підхід Гінзбурга-Ландау в рамках якої встановлено експоненціальній закон релаксації параметру впакування, застосування якого для параметризації експериментальних вимірів дозволило запропонувати фракційний підхід до опису впакування.

4.Для бі-компонентних гранульованих сумішей розроблено підхід до опису стисливості та компактизації із використанням теорії Кірквуда-Баффа у поєднанні з моделями типу твердих сфер Карнахана-Старлінга, який дозволив побудувати фазову діаграму впакування у повному інтервалі значень об’ємної (чи молярної) фракції. Теоретичні результати гарно збігаються із експериментальними.

5. Розв’язана аналітично модель розповсюдження імпульсних збуджень у неоднорідних герцівських ланцюжках. Розв’язок представлений у вигляді лінійної комбінації циліндричних хвиль (нескінченний ряд). В континуальній границі отримані резонансні розв’язки розривного типу, які, як показано можуть формуватися з пакетів циліндричних хвиль. Теоретичні висновки добре співпадають із результатами чисельного моделювання методом молекулярної динаміки.

Нелінійне рівняння розповсюдження імпульсних збуджень, сформульовано в термінах взаємного перекриття частинок. Отримано його розв’язок у вигляді солітону типа Нестеренка. Досліджено умови формування такого солітонного розв’язку. Для декорованого ізотопічною домішкою ланцюжка, отримана амплітуда розсіяння збудження від важкого дефекту, вираз для якої добре узгоджується із даними відповідних експериментальних досліджень.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Gerasymov O.I., Khudyntsev N.N., Klymenkov O.A., Spivak A.Ya. The kinetics of processes occurring in granular materials in the field of vibroaccelerations // *Ukrainian Journal of Physics*. 2005. Vol. 50, No. 6. P. 623-631.
2. Gerasymov O.I., Vandewalle N., Spivak A.Ya., Lumay G., Dorbolo S. , Khudyntsev N.N., Klymenkov O.A. Stationary states in a 1D system of inelastic particles // *Ukrainian Journal of Physics*. 2008. Vol. 53, No. 11. P. 1128-1135.
3. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Kinetic model of compaction in granular materials // *Ukrainian Journal of Physics*. 2015. Vol. 60, No. 3. P. 253-257.
4. Герасимов О.І., Співак А.Я. Солітон в одновимірному силовому ланцюжку з герцівськими контактами // *Доповіді Національної академії наук України*. 2020. № 3. С. 36-46
5. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. On the wave transmission in a gently perturbed weakly inhomogeneous non-linear force chain // *Ukrainian Journal of Physics*. 2020. Vol. 65, No. 11. P. 1008-1016.
6. Герасимов О.І., Співак А.Я. *Окремі задачі фізики м'якої матерії* : моногр. / Одеськ. держ. еколог. ун-т. Одеса: Гельветика, 2020. 200 с.
7. Jaeger H.M., Nagel S.R., Behringer R.P. The physics of granular materials. // *Rev. Mod. Phys.* 1996. Vol. 68. P. 1259-1272.
8. Duran J. *Sands, Powders and Grains*. NY.: Springer-Verlag, 2000. 214 p.
9. Kadanoff L. Built upon sand: theoretical ideas inspired by granular flows. // *Rev. Mod. Phys*. 1999. Vol. 71. P. 435-447.
10. De Gennes P.G. Granular matter: a tentative view. // *Rev.Mod.Phys*. 1999. Vol. 71, No. 2. P. S374-S382.
11. Hartmann P., Douglass A., Reyes J.C., Matthews L.S., Hyde T.W., Kovács A., Donkó Z. Crystallization dynamics of a single layer complex plasma. // *Phys. Rev. Lett.* 2010. Vol. 105, No. 11, P. 115004.

12. Boyer F., Falcon E. Two-Dimensional Melting of a Crystal of Ferrofluid Spikes. // *Phys. Rev. Lett.* 2009. Vol. 103, No.14. P.144501.

13. Шавлов А. В., Джуманджи В. А. Геометрические параметры кластера из капель воды //*Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2012. Т. 141. №. 2. С. 288-291.

14. Gerasymov O.I., Zagorodny A.G., Somov M.M. Toward the analysis of the structure of granular materials // *Ukrainian Journal of Physics*. 2013. Vol. 58, No. 1. P. 32-39.

15. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya., Golovko O.V. Parameterization of the Local Structure of Micro-Mechanical Systems (Granular Materials) // Bogolyubov Kyiv Conference "*Problems of Theoretical and Mathematical Physics*", September 24-26, 2019, Kyiv, Ukraine, P.73.

16. Spivak A., Gerasymov O. Towards understanding of condensed matter via study granular systems // Book of Abstracts. X Young Scientists Conference "*Problems of Theoretical Physics*", December 23-24, 2019, Kyiv, Ukraine, P.16-17.

17. Вороной Г.Ф. *Собр. соч.* Т. 2. К.: Изд-во АН УССР, 1952.

18. Герасимов О.И. *Рассеяние излучений в статистических системах: Решаемые модели.* Одесса: Маяк, 1999. 284 с.

19. Bideau D., Gervois A., Oger L., Troadec J.P. Geometrical properties of disordered packings of hard disks. // *Journal de Physique*. 1986. Vol. 47, No. 10. P. 1697-1707.

20. Lumay G., Vandewalle N. Experimental study of granular compaction dynamics at different scales: grain mobility, hexagonal domains, and packing fraction // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 95, No. 2. P. 028002.

21. Voronoi G. Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques. Deuxième mémoire. Recherches sur les parallélloèdres primitifs // *Journal für die reine und angewandte Mathematik*. 1908. Vol. 1908, No. 134. P. 198-287.

22. Quickenden T.I., Tan G.K. Random packing in two dimensions and the structure of monolayers. // *Journal of Colloid and Interface Science*. 1974. Vol. 48, No. 3. P. 382-393.

23. Aste T., Matteo T.D. Emergence of Gamma distributions in granular materials and packing models. // *Phys. Rev. E.* 2008. Vol. 77, No. 2. P. 021309.
24. Edwards S.F. The full canonical ensemble of a granular system. // *Physica A*. 2005. Vol. 353. P. 114-118.
25. Ахиезер Н.И. *Классическая проблема моментов и некоторые вопросы анализа, связанные с нею*. Москва: Физматгиз, 1961. С. 312.
26. Gerasymov O.I. Structure and dynamics of granular materials perturbed by external fields. // *Ukrainian Journal of Physics*. 2010. Vol. 55, No. 5. P. 560-567.
27. Герасимов О.І. Структура та динаміка гранульованих матеріалів. // *Доповіді НАН України*. 2010. № 11. С. 59-65.
28. Паташинский А.З., Покровский В.Л. *Флуктуационная теория фазовых переходов*. Москва: Наука, 1982. 381 с.
29. Vandewalle N., Lumay G., Gerasimov O., Ludewig F. The influence of grain shape, friction and cohesion on granular compaction dynamics. // *Eur. Phys. J. E.* 2007. Vol. 22, No. 3. P. 241-248.
30. Исихара А. *Статистическая физика*. Москва: Мир, 1973. 471 с.
31. Kokstein H., Quinn Sr. P.V. Fermi statistics applied to a weakly excited column of granular particles in a vibrating bed. // *Physica A*. 2007. Vol. 374, No. 1. P. 66-76.
32. Киттель Ч. *Введение в физику твёрдого тела*. Москва: Наука, 1978. 791 с.
33. Abramowitz M, Stegun I.A. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables.* Washington: US GPO, 10th, 1972. 1046 p.
34. Du Y., Li H., Kadanoff L. Breakdown of Hydrodynamics in a One-Dimensional System of Inelastic Particles // *Phys. Rev. Lett.* 1995. Vol. 74, No. 8. P. 1268-1271.
35. Knight J.B., Fandrich C.G., Lau C.N., Jaeger H.M., Nagel S.R. Density relaxation in a vibrated granular materials. // *Phys. Rev. E.* 1995. Vol. 51, No.5. P. 3957-3963.
36. Richard P., Nicodemi M., Delannay R., Ribiere P., Bideau D. Slow relaxation and compaction of granular systems. // *Nature materials.* 2005. Vol. 4, No. 2. P. 121-128.
37. Schröter M., Goldman D.I., Swinney H.L. Stationary state volume fluctuations in a granular medium. // *Phys. Rev. E.* 2005. Vol. 71, No. 3. P. 030301(R).

38. Boutreux T., de Gennes P.G. Compaction of granular mixtures: a free volume model. // *Physica A*. 1997. Vol. 244, No.1-4, P. 59-67.

39. Gerasimov O.I., Spivak A.Ya., Idomskyy V.A. Stationary states in model 1D systems with dissipative interactions. //Workshop on "*Modern Problems of Soft Matter Theory*". 27-31 August 2000, Lviv, Ukraine. P.129.

40. Gerasymov O.I., Khudyntsev N.N., Klymenkov O.A., Spivak A.Ya. Kinetics of driven granular materials. // Book of Abstracts. Bogolyubov Kyiv Conference: "*Modern Problems of Mathematics and Theoretical Physics*", 13-16 September 2004, Kyiv, Ukraine. P.63.

41. Герасимов О.І., Клименков О.А., Співак А.Я. Кінетика гранульованих матеріалів у полі віброприскорювань. //Всеукраїнський з'їзд «*Фізика в Україні*». Тези доповідей. Україна, Одеса, 3-6 жовтня 2005р. Одеса: Астропринт, 2005. С.90.

42. Gerasymov O., Spivak A. Performing of the momentum dynamics in 1D models of granular systems // Book of extended Abstracts. I-st Belgian-Ukrainian Mini-Symposium "*Selected Topics of Soft Matter Physics: Granular Materials*", September 5-7, 2012, Odessa, Ukraine. P.34-40.

43. Gerasimov O.I., Schram P.P.-J.M., Kitahara K. Kinetics of granular segregation. // *Ukrainian Journal of Physics*. 2003. Vol. 48, No. 8. P. 885-896.

44. Cantelaube F., Bideau D. Radial segregation in a 2D drum: An experimental analysis. // *Europhysics Letters*. 1995. Vol. 30, No. 3. P. 133-138.

45. Спивак А.Я., Герасимов О.И. Свойства низкоразмерных модельных систем неупруго сталкивающихся частиц в фазе детерминированного хаоса. //Тези доповідей VI Наукової конференції молодих вчених. Одеса: *ОДЕКУ*, 2006. С.83.

46. McNamara S., Young W.R. Inelastic collapse in two dimensions. // *Phys. Rev. E*. 1994. Vol. 50, No. 1. P. R28-R31.

47. Goldhirsch I., Zanetti G. Clustering instability in dissipative gases. // *Phys. Rev. Lett.* 1993. Vol. 70, No. 11. P. 1619-1622.

48.Luding S., Herrmann H. J., Blumen A. Simulations of two-dimensional arrays of beads under external vibrations: Scaling behavior // *Phys. Rev. E.* 1994. Vol. 50, No. 4. P. 3100-3108.

49.Poschel T., Schwager T., Saluena C. Onset of fluidization in vertically shaken granular material // *Phys. Rev. E.* 2000. Vol. 62, No. 1. P. 1361-1367.

50.Герасимов О.І., Клименков О.А., Співак А.Я., Худинцев М.М. Кінетика гранульованих матеріалів у полі віброприскорювань. // *Вісник Одеського державного екологічного університету.* 2006. № 3. С. 247-252.

51.Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. *Молекулярная теория газов и жидкостей:* Москва: Иностранной литературы, 1961. 930 с.

52.Villarruel F.X., Lauderdale B.E., Mueth D.M., Jaeger H.M. Compaction of rods: Relaxation and ordering in vibrated, anisotropic granular material. // *Phys. Rev. E.* 2000. Vol. 61, No. 6. P. 6914-6921.

53.Герасимов О.І., Співак А.Я. Кінетична дисперсійна модель середнього поля для ущільнення гранульованих матеріалів. // *Вісник Одеського державного екологічного університету.* 2010. № 9. С. 190-197.

54.Gerasimov O.I., Fischer I.Z., Lisy V. The kinetic of phase transitions in systems with nonconservative order parameter. // *Czechoslovak Journal of Physics B.* 1982. Vol. 32, No. 7. P. 772-776.

55.Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. *Физическая кинетика.* Москва: Наука, 1979. 528 с.

56.Gerasimov O.I., Schram P.P.J.M. Differential equation of state of a model system with a singular measure: application to granular materials in steady states. // *Physica A.* 2002. Vol. 312. P. 172-180.

57.Carnahan, N. F., Starling, K. E. Equation of state for nonattracting rigid spheres. // *The Journal of chemical physics.* 1969. Vol. 51, No. 2. P. 635-636.

58.Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая физика*, Т.V. *Статистическая физика.* Часть 1. Москва: Наука, 1976. 584 с.

59. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Landau-Ginzburg kinetics for granular materials. // Book of Abstracts. Bogolyubov Kyiv Conference "*Modern Problems of Theoretical and Mathematical Physics*", September 15-18, 2009, Kyiv, Ukraine. P.156.
60. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Kinetics of compaction for granular materials. // Program & Abstracts. Young Scientists Conference "*Modern Problems of Theoretical Physics*", December 22-24, 2010, Kyiv, Ukraine, P.55.
61. Герасимов О.І., Співак А.Я. Кінетична модель ущільнення у гранульованих матеріалах. // *Вісник Одеського державного екологічного університету*. 2010. №10. С.266-231.
62. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Landau-Ginsburg kinetics of granular fluid compaction. // Abstracts of the 8th International Conference, "*Physics of Liquid Matter: Modern Problems*" (PLMMP-2018), Kyiv, Ukraine, May 18-22, 2018. P.150.
63. Nicodemi M., Coniglio A., Herrmann H.J. Frustration and slow dynamics of granular packings. // *Phys. Rev. E.* 1997. Vol. 55, No. 4. P. 3962-3969.
64. Nowak E.R., Knight J.B., Ben-Naim E., Jaeger H.M., Nagel S.R. Density fluctuations in vibrated granular materials. // *Phys. Rev. E.* 1998. Vol. 57, No. 2. P. 1971-1982.
65. Philippe P., Bideau D. Compaction dynamics of a granular medium under vertical tapping. // *Europhysics Letters*. 2002. Vol. 60, No. 5. P. 677-683.
66. Arsenović D. , Vrhovac S.B. , Jakšić Z.M. , Budinski-Petković L., Belić A. Simulation study of granular compaction dynamics under vertical tapping. // *Phys. Rev. E*. 2006. Vol. 74, No. 6. P. 061302.
67. Reis P.M., Ingale R.A., Shattuck M.D. Crystallization of a quasi-two-dimensional granular fluid. // *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 96, No. 25. P. 258001.
68. Gerasymov O.I., Somov M.M. Statistical description of excess properties of many-particle binary systems // *Ukrainian Journal of Physics*. 2015. Vol. 60. No. 4. C. 324-327.

69. Pillitteri S., Lumay G., Opsomer E., Vandewalle N. From jamming to fast compaction dynamics in granular binary mixtures. // *Scientific Reports*. 2019. Vol. 9, No. 1. 7281.
70. Roquier G. The 4-parameter compressible packing model (cpm) including a new theory about wall effect and loosening effect for spheres. // *Powder Technology*. 2016. Vol. 302. P. 247-253.
71. Farr R.S., Groot R.D. Close packing density of polydisperse hard spheres. // *The Journal of chemical physics*. 2009. Vol. 131, No. 24. P. 244104.
72. Danisch M., Jin Y., Makse H.A. Model of random packings of different size balls. // *Physical Review E*. 2010. Vol. 81, No. 5. P. 051303.
73. Chen D., Torquato S. Confined disordered strictly jammed binary sphere packings. // *Physical Review E*. 2015. Vol. 92, No. 6. P. 062207.
74. Hopkins A.B., Jiao Y., Stillinger F.H., Torquato S. Phase diagram and structural diversity of the densest binary sphere packings. // *Physical Review Letters*. 2011. Vol. 107, No. 12. P. 125501.
75. Behringer R.P., Chakraborty B. The physics of jamming for granular materials: a review. // *Reports on Progress in Physics*. 2018. Vol. 82, No. 1. P. 012601.
76. Kirkwood J.G., Buff F.P. The statistical mechanical theory of solutions. I. // *The Journal of chemical physics*. 1951. Vol. 19, No. 6. P. 774-777.
77. Mansoori G.A., Carnahan N.F., Starling K.E., Leland Jr. T.W. Equilibrium Thermodynamic Properties of the Mixture of Hard Spheres. // *The Journal of Chemical Physics*. 1971. Vol. 54, No. 4. P. 1523-1525.
78. Pillitteri S., Opsomer E., Lumay G., Vandewalle N. How size ratio and segregation affect the packing of binary granular mixtures. // *Soft Matter*. 2020. Vol. 16, No. 39. P. 9094-9100.
79. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya., Sidletska L. Compressibility and compactivity of bi-dispersive many-particle conglomerations (liquid and granular mixtures) // XI Conference of Young Scientists "*Problems of Theoretical Physics*", December 21-23, 2020, Kyiv, Ukraine, P.49.

80. Gerasymov O., Spivak A., Andrianova I., Sidletska L., Kuryatnikov V., Kilian A. Micro-mechanical (granular) mixtures for environmental safety technologies // *E3S Web of Conferences*. 2021. Vol. 234. P. 00075 (6 pages).
81. Aliotta F., Gapiński J., Pochylski M., Ponterio R.C., Saija F., Salvato G. Excess compressibility in binary liquid mixtures. // *The Journal of chemical physics*. 2007. Vol. 126, No. 22. P. 224508.
82. Fermi E., Pasta J., Ulam S. Studies of non linear problems. // *Los Alamos Sc. Lab. Rep.* 1955. Vol. LA-1940. P. 978-988.
83. Герасимов О.І., Співак А.Я., Худинцев М.М., Клименков О.А. Транспорт енергії (імпульсу) в модельних низьковимірних дисипативних системах. // *Вісник Одеського державного екологічного університету*. 2008. №6. С.225-233.
84. Герасимов О.І., Співак А.Я. Моделювання руху механічних збуджень у одновимірних неоднорідних гранульованих ланцюжках: вплив граничних умов. // *Вісник Одеського державного екологічного університету*. 2012. № 14. С. 217-223.
85. Герасимов О.І., Співак А.Я. Перенесення збудження у 1D гранульованих ланцюжках в умовах конфайнменту. // *Вісник Одеського державного екологічного університету.* 2014. № 18. С. 204-211.
86. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Asymmetric waves transportation in 1D granular chain. // Program & Abstracts. III Young Scientists Conference “*Modern Problems of Theoretical Physics*”, December 21-23, 2011, Kyiv, Ukraine, P.122.
87. Gerasymov O., Spivak A. Performing of the momentum dynamics in 1D models of granular systems. // Program & Abstracts. IV Young Scientists Conference “*Modern Problems of Theoretical Physics*”, October 23-26, 2012, Kyiv, Ukraine, P.83-84.
88. Gerasymov O., Spivak A. Momentum dynamics in nonlinear models of granular systems influenced by constitutive relations. // Program & Proceedings. V Young Scientists Conference “*Problems of Theoretical Physics*”, December 24-27, 2013, Kyiv, Ukraine, P.54.
89. Герасимов О.І., Співак А.Я. Розповсюдження хвиль у низько вимірних ланцюжках силових центрів // Матеріали XII Міжнародної наукової

конференції «*Фізичні явища в твердих тілах*», 1-4 грудня, 2015, Харків, Україна, С.133.

90. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. and Vandewalle N. Multiscaled analysis of impulse/energy transport in 1D nonhomogeneous Herzian chain // Proceedings of International multimedia (WEB) Conference *"Physics for Interdisciplinary Science and Teaching"* (PhysIST-2016), 2-5 May, 2016, Odesa. P.11-13.
91. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Multiscale analysis of impulse transmission in nonhomogeneous low-dimensional systems // Program & Abstracts. Bogolyubov Conference *"Problems of Theoretical Physics"*, May 24-26, 2016, Kyiv, Ukraine. P.14.
92. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Mechanical impulse transmission through 1D nonlinear chains // VIII Conference of Young Scientists "*Problems of Theoretical Physics*" (December 12 – 14, 2017), Kyiv, Ukraine, P.12.
93. Spivak A., Gerasymov O. Towards the problem of the Nesterenko's soliton waves propagation in nonlinear inhomogeneous Hertzian chains // Book of Abstracts. IX Conference of Young Scientists "*Problems of Theoretical Physics*", December 4-5, 2018, Kyiv, Ukraine. P.2.
94. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Wave Dynamics of Impulse Perturbations in 1D Force-Chains // Bogolyubov Kyiv Conference "*Problems of Theoretical and Mathematical Physics*", September 24-26, 2019, Kyiv, Ukraine, P.39.
95. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая фізика* : уч. пособ. в 10т. Том 7. *Теория упругости* /4-е изд., испр. М.: Наука, 1987. 248 с.
96. Pinney E. *Ordinary Difference-differential equations*. Berkley and Los Angeles: University of California Press, 1955. 500 p.
97. Bateman H. Some simple differential difference equations and the related functions // *Bulletin of the American Mathematical Society*. 1943. Vol. 49, No. 7. P. 494-512.
98. Герасимов О.І., Вандевалле Н. Щодо точних розв'язків задачі про перенесення імпульсу у неоднорідному гранульованому ланцюжку. // *Доповіді НАН України*. 2012. № 8. С. 67-72.

99. Sen S., Hong J., Bang J., Avalos E., Doney R. Soliton-like waves in low-dimensional granular systems // *Phys. Rep.* 2008. No. 462, P. 21-66.

100. Hong J., Ji J.-Y. and Kim H. Power laws in nonlinear granular chain under gravity. // *Phys. Rev. Lett.* 1999. Vol. 82, No. 15. P. 3058-3061.

101. Dyson F.J. The dynamics of a disordered linear chain // *Physical Review* . 1953. Vol. 92, No. 6. P. 1331-1338.

102. March N.H., Parrinello M. *Collective effects in solids and liquids*. Bristol: Adam Hilger, 1982. 274 p.

103. *Справочник по дифференциальным уравнениям с частными производными: точ. решения* / В.Ф. Зайцев, А.Д. Полянин. Москва: Междунар. прогр. образ., 1996. 495 с.

104. Герасимов О.І. *Фізика гранульованих матеріалів* : монографія. Одеса: ТЕС, 2015. 264 с.

105. Lydon J., Theocharis G., Daraio C. Nonlinear resonances and energy transfer in finite granular chains // *Phys. Rev. E.* 2015. Vol. 91, No. 2. P. 023208.

106. Kevrekidis P.G., Stefanov A.G., Xu H. Traveling waves for the mass in mass model of granular chains // *Letters in Mathematical Physics*. 2016. Vol. 106, No. 8. P. 1067-1088.

107. Yasuda H., Chong C., Yang J., Kevrekidis P.G. Emergence of dispersive shocks and rarefaction waves in power-law contact models. // *Physical Review E.* 2017. Vol. 95, No. 6. P. 062216.

108. Нестеренко В.Ф. Распространение нелинейных импульсов сжатия в зернистых средах. // *Журн. прикл. мех. техн. физ.* 1983. № 5. С. 136-148.

109. Daraio C., Nesterenko V.F., Herbold E.B. and Jin S. Tunability of solitary wave properties in one-dimensional strongly nonlinear photonic crystals. // *Phys. Rev.* E. 2006. Vol. 73. P. 026610.

110. Coste C., Falcon E., Fauve S. Solitary waves in a chain of beads under Hertz contact. // *Phys. Rev. E.* 1997. Vol. 56, No. 5. P. 6104-6117.

111. Hascoet E., Herrmann H.J. and Loreto V. Shock propagation in a granular chain. // *Phys. Rev. E.* 1999. Vol. 59, No. 3. P. 3202-3206.

112. Hascoet E., Herrmann H.J. Shocks in non-loaded bead chains with impurities. // *The European Physical Journal B*. 2000. Vol. 14. P. 183-190.

113. Chatterjee A. Asymptotic solution for solitary waves in a chain of elastic spheres. // *Phys. Rev. E*. 1999. Vol. 59, No. 5. P. 5912-5919.

114. Job S., Melo F., Sokolow A., Sen S. Solitary wave trains in granular chains: experiments, theory and simulations. // *Granular Matter*. 2007. Vol. 10, No. 1, P. 1320.

115. Li F., Zhao L., Tian Zh., Yu L. and Yang J. Visualization of solitary waves via laser Doppler vibrometry for heavy impurity identification in a granular chain. // *Smart Mater. Struct*. 2013. Vol. 22. P. 035016.

ДОДАТОК А
СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗА ТЕМОЮ ТА ВІДОМОСТІ ПРО АПРОБАЦІЮ

Публікації, що містять головні результати дисертації:

1. Gerasymov O.I., Khudyntsev N.N., Klymenkov O.A., Spivak A.Ya. The kinetics of processes occurring in granular materials in the field of vibroaccelerations // *Ukrainian Journal of Physics*. 2005. Vol. 50, No. 6. P. 623-631.
2. Gerasymov O.I., Vandewalle N., Spivak A.Ya., Lumay G., Dorbolo S. , Khudyntsev N.N., Klymenkov O.A. Stationary states in a 1D system of inelastic particles // *Ukrainian Journal of Physics*. 2008. Vol. 53, No. 11. P. 1128-1135.
3. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Kinetic model of compaction in granular materials // *Ukrainian Journal of Physics*. 2015. Vol. 60, No. 3. P. 253-257.
4. Герасимов О.І., Співак А.Я. Солітон в одновимірному силовому ланцюжку з герцівськими контактами // *Доповіді Національної академії наук України*. 2020. № 3. С. 36-46.
5. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. On the wave transmission in a gently perturbed weakly inhomogeneous non-linear force chain // *Ukrainian Journal of Physics*. 2020. Vol. 65, No. 11. P. 1008-1016.
6. Герасимов О.І., Співак А.Я. *Окремі задачі фізики м'якої матерії* : моногр. / Одеськ. держ. еколог. ун-т. Одеса: Гельветика, 2020. 200 с. ISBN 978-966-992-202-1

Публікації, які додатково висвітлюють результати дисертації:

7. Герасимов О.І., Клименков О.А., Співак А.Я., Худинцев М.М. Кінетика гранульованих матеріалів у полі віброприскорювань. // *Вісник Одеського державного екологічного університету.* 2006. №3. С.247-252.
8. Герасимов О.І., Співак А.Я., Худинцев М.М., Клименков О.А. Транспорт енергії (імпульсу) в модельних низьковимірних дисипативних системах. // *Вісник Одеського державного екологічного університету*. 2008. №6. С.225-233.

9. Герасимов О.І., Співак А.Я. Кінетична дисперсійна модель середнього поля для ущільнення гранульованих матеріалів. // *Вісник Одеського державного екологічного університету.* 2010. №9. С.190-197.

10. Герасимов О.І., Співак А.Я. Кінетична модель ущільнення у гранульованих матеріалах. // *Вісник Одеського державного екологічного університету.* 2010. №10. С.266-231.

11. Герасимов О.І., Співак А.Я. Моделювання руху механічних збуджень у одновимірних неоднорідних гранульованих ланцюжках: вплив граничних умов. // *Вісник Одеського державного екологічного університету.* 2012. №14. С.217-223.

12. Герасимов О.І., Співак А.Я. Перенесення збудження у 1D гранульованих ланцюжках в умовах конфайнменту. // *Вісник Одеського державного екологічного університету.* 2014. №18. С.204-211.

Результати отримані в дисертації апробовано на вітчизняних та міжнародних конференціях та опубліковано у вигляді наступних праць та тез:

13. Gerasimov O.I., Spivak A.Ya., Idomskyy V.A. Stationary states in model 1D systems with dissipative interactions. //Workshop on "*Modern Problems of Soft Matter Theory*". 27-31 August 2000, Lviv, Ukraine. P.129.

14. Gerasymov O.I., Khudyntsev N.N., Klymenkov O.A., Spivak A.Ya. Kinetics of driven granular materials. // Book of Abstracts. Bogolyubov Kyiv Conference: "*Modern Problems of Mathematics and Theoretical Physics*", 13-16 September 2004, Kyiv, Ukraine. P.63.

15. Герасимов О.І., Клименков О.А., Співак А.Я. Кінетика гранульованих матеріалів у полі віброприскорювань. //Всеукраїнський з'їзд *«Фізика в Україні».* Тези доповідей. Україна, Одеса, 3-6 жовтня 2005р. Одеса: Астропринт, 2005. С.90.

16. Спивак А.Я., Герасимов О.И. Свойства низкоразмерных модельных систем неупруго сталкивающихся частиц в фазе детерминированного хаоса. //Тези

доповідей VI Наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ. 10-16 травня, 2006, Одеса, Україна. С.83.

17. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Landau-Ginzburg kinetics for granular materials. // Book of Abstracts. Bogolyubov Kyiv Conference "*Modern Problems of Theoretical and Mathematical Physics*", September 15-18, 2009, Kyiv, Ukraine. P.156.
18. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Kinetics of compaction for granular materials. // Program & Abstracts. Young Scientists Conference "*Modern Problems of Theoretical Physics*", December 22-24, 2010, Kyiv, Ukraine, P.55.
19. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Asymmetric waves transportation in 1D granular chain. // Program & Abstracts. III Young Scientists Conference "*Modern Problems of Theoretical Physics*", December 21-23, 2011, Kyiv, Ukraine, P.122.
20. Gerasymov O., Spivak A. Performing of the momentum dynamics in 1D models of granular systems // Book of extended Abstracts. I-st Belgian-Ukrainian Mini-Symposium "*Selected Topics of Soft Matter Physics: Granular Materials*", September 5-7, 2012, Odessa, Ukraine. P.34-40.
21. Gerasymov O., Spivak A. Performing of the momentum dynamics in 1D models of granular systems. // Program & Abstracts. IV Young Scientists Conference "*Modern Problems of Theoretical Physics*", October 23-26, 2012, Kyiv, Ukraine, P.83-84.
22. Gerasymov O., Spivak A. Momentum dynamics in nonlinear models of granular systems influenced by constitutive relations. // Program & Proceedings. V Young Scientists Conference "*Problems of Theoretical Physics*", December 24-27, 2013, Kyiv, Ukraine, P.54.
23. Герасимов О.І., Співак А.Я. Розповсюдження хвиль у низько вимірних ланцюжках силових центрів // Матеріали XII Міжнародної наукової конференції «*Фізичні явища в твердих тілах*», 1-4 грудня, 2015, Харків, Україна, С.133.
24. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya., Vandewalle N. Multiscaled analysis of impulse/energy transport in 1D nonhomogeneous Herzian chain // Proceedings of

International multimedia (WEB) Conference *“Physics for Interdisciplinary Science and Teaching”* (PhysIST-2016), 2-5 May, 2016, Odesa. P.11-13.

25. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Multiscale analysis of impulse transmission in nonhomogeneous low-dimensional systems // Program & Abstracts. Bogolyubov Conference *“Problems of Theoretical Physics”*, May 24-26, 2016, Kyiv, Ukraine. P.14.
26. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Mechanical impulse transmission through 1D nonlinear chains // VIII Conference of Young Scientists “*Problems of Theoretical Physics*” (December 12 – 14, 2017), Kyiv, Ukraine, P.12.
27. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Landau-Ginsburg kinetics of granular fluid compaction. // Abstracts of the 8th International Conference, "*Physics of Liquid Matter: Modern Problems*” (PLMMP-2018), Kyiv, Ukraine, May 18-22, 2018. P.150.
28. Spivak A., Gerasymov O. Towards the problem of the Nesterenko’s soliton waves propagation in nonlinear inhomogeneous Hertzian chains // Book of Abstracts. IX Conference of Young Scientists “*Problems of Theoretical Physics*”, December 4-5, 2018, Kyiv, Ukraine. P.2.
29. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Wave Dynamics of Impulse Perturbations in 1D Force-Chains // Bogolyubov Kyiv Conference “*Problems of Theoretical and Mathematical Physics*”, September 24-26, 2019, Kyiv, Ukraine, P.39.
30. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya., Golovko O.V. Parameterization of the Local Structure of Micro-Mechanical Systems (Granular Materials) // Bogolyubov Kyiv Conference “*Problems of Theoretical and Mathematical Physics*”, September 24-26, 2019, Kyiv, Ukraine, P.73.
31. Spivak A., Gerasymov O. Towards understanding of condensed matter via study granular systems // Book of Abstracts. X Young Scientists Conference ”*Problems of Theoretical Physics*”, December 23-24, 2019, Kyiv, Ukraine, P.16-17.
32. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya., Sidletska L. Compressibility and compactivity of bi-dispersive many-particle conglomerations (liquid and granular mixtures) // XI

Conference of Young Scientists ”*Problems of Theoretical Physics*”, December 21-23, 2020, Kyiv, Ukraine, P.49.

33. Gerasymov O., Spivak A., Andrianova I., Sidletska L., Kuryatnikov V., Kilian A. Micro-mechanical (granular) mixtures for environmental safety technologies // *E3S Web of Conferences*. 2021. Vol. 234. P. 00075 (6 pages).

Основні результати дослідження обговорювалася на семінарі відділу синергетики в Інституті теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України (21.01.2021). Результати дисертації також пройшли апробацію на конференціях молодих вчених та семінарах Одеського державного екологічного університету.