Національна академія наук України
Інститут теоретичної фізики ім.М.М. Боголюбова

СПІВАК АНДРІЙ ЯРОСЛАВОВИЧ

УДК 538.9:539.215

СТРУКТУРИЗАЦІЯ ТА ДИНАМІЧНІ ПРОЦЕСИ В БАГАТОЧАСТИНКОВИХ МІКРО-МЕХАНІЧНИХ СИСТЕМАХ ПІД ВПЛИВОМ ЗОВНІШНІХ ЗБУРЕНЬ

01.04.02. - теоретична фізика

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня

кандидата фізико-математичних наук

Київ – 2021

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Одеському державному екологічному університеті на кафедрі загальної та теоретичної фізики.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор
Герасимов Олег Іванович,
Одеський державний екологічний університет,
завідувач кафедри загальної та теоретичної фізики

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
Засенко Володимир Іванович,
Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, заступник директора із наукової роботи

доктор фізико-математичних наук, професор
Чалий Олександр Васильович,
Національний медичний університет ім. О.О. Богомольця, завідувач кафедри медичної і біологічної фізики та інформатики

Захист відбудеться «_*27*_» ____*квітня*____2021 р. об _12^{30}_ години на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.191.01 (ауд.____) в Інституті теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України за адресою: 03143 м. Київ, вул. Метрологічна, 14б.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України за адресою: вул. Метрологічна 14-б, м. Київ, 03143, Україна.

Автореферат розіслано «_*26*_» ___*березня*____2021 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 26.191.01
доктор фізико-математичних наук ________________ Кузьмичев В.Є.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

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 р. (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'єктом дослідження є багаточастинкові мікро-механічні системи, (гранульовані матеріали).

Предметом дослідження є структурні та динамічні параметри які визначають властивості багаточастинкових мікро-механічних систем.

Методами дослідження є 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 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.

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. Автор брав участь у розв’язанні задач, отриманні висновків і написанні робіт [1-6]. Зокрема.

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 додатків. 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.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У першому розділі за допомогою методів (побудов Вороного, відповідно визначеного трансляційного та орієнтаційного параметрів впорядкування, параметра Ліндемана) здійснюється опис та параметризація спостерігаємих типів структури гранульованих матеріалів (г.м.).

На Рис.1.в та Рис.1.г представлені фігури Вороного, які відповідають окремим типам структур, які спостерігаються у невпорядкованих (Рис.1.а) і впорядкованих (Рис1.б) 2D гранульованих системах (г.с.) твердих дисків.

(а) (б) (в) (г)

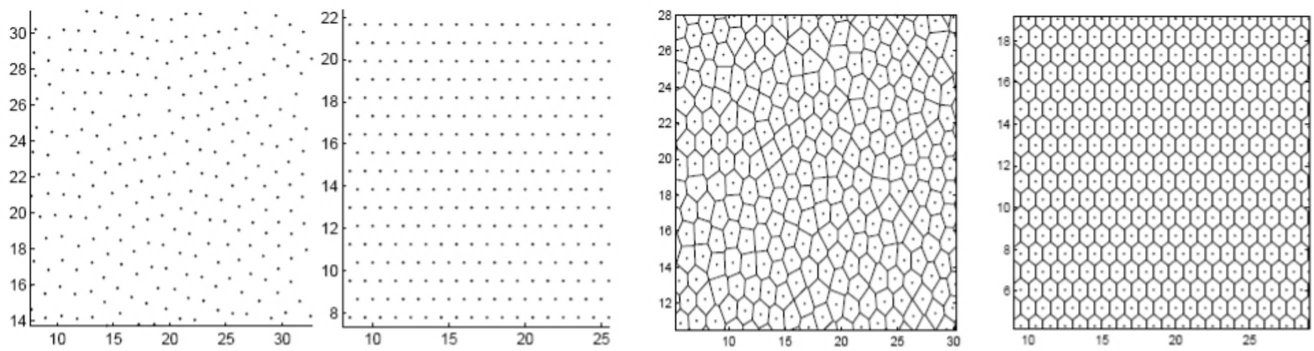

Рис.1 - Структури, які спостерігаються у 2D системі твердих дисків та відповідні побудови Вороного: а) та в) – у невпорядкованому стані; б) та г) – у стані із гексагональним упорядкуванням.

Метод Вороного дозволяє спостерігати структуру, а також є підґрунтям для розрахунку кількісних характеристик структури, які базуються на аналізі параметрів локальної структури та їх співвідношень до периметрів, площин чи об’ємів фігур Вороного.

Виявилося, що найближчі сусіди, які визначаються за допомогою побудов Вороного, утворюють координаційну систему (оболонки) навколо виділеної частинки (див.Рис.2).

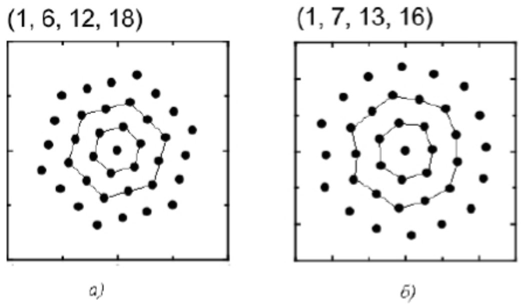

Рис.2 - Типи локальної структури, які спостерігаються у 2D системі твердих дисків. а) – у стані із гексагональним упорядкуванням; б) – у невпорядкованому стані.

Трансляційний та орієнтаційний параметри впорядкування визначаються як:

$$u_2^2 = \frac{1}{N}\sum_i \left[\left\langle \left|\vec{r}_i\right|^2 \right\rangle - \left\langle \left|\vec{r}_i\right| \right\rangle^2\right], \qquad g_n = \frac{1}{N_n}\sum_1^{N_n} \exp\left(iN_n\varphi_n\right), \tag{1}$$

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

На Рис.3 наведені дані чисельних розрахунків орієнтаційного g_n та трансляційного u_2^2 параметрів впорядкування для 2D г.м. в залежності від номера оболонки.

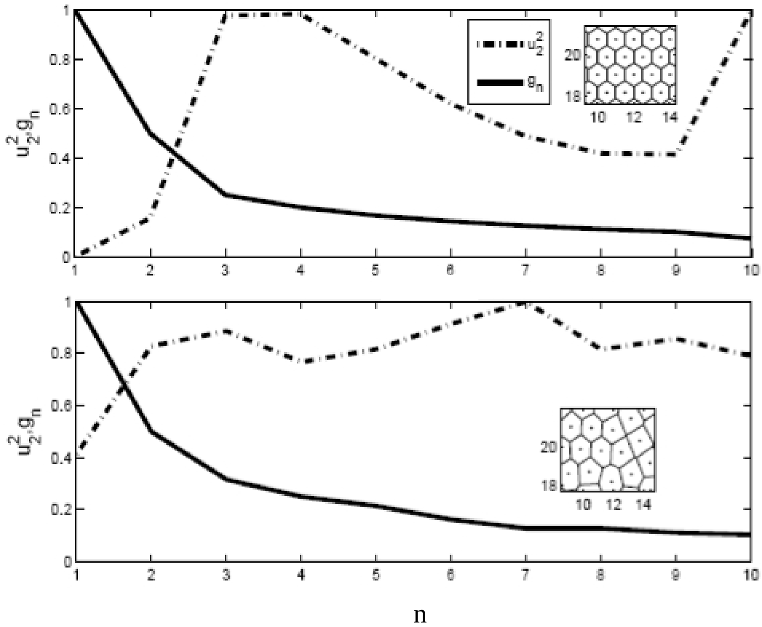

Рис.3 - Результат розрахунків параметрів впорядкування за формулами (1) із використанням експериментальних даних для станів, зображених на Рис.1

Отримані результати свідчать, що орієнтаційний параметр впорядкування g_n в г.м. не прямує до нуля із збільшенням масштабу спостереджень. Подібним чином поводить себе g_n і для запорошеної плазми. Таким чином доведено, що багаточастинкові мікро-механічні системи, є анізотропними.

Збурення (струс, вібрація) гранульованих систем веде до ущільнення, тобто до зменшення об'єму, який займає система. Для теоретичного обґрунтування та параметризації цього явища використано квазістатистичний підхід до опису густини (ρ) г.м. Функціонал вільної енергії системи у зовнішньому гравітаційному полі запишемо у вигляді

$$F(\rho) = E(\rho) - \beta^{-1} S(\rho), \qquad E(\rho) = mg \int_{(V)} z\rho(\vec{r})d\vec{r}, \tag{2}$$

де $E(\rho)$ - енергія системи в гравітаційному полі; z - вертикальна координата; $\beta = (k_B T)^{-1}$ - обернений масштаб енергії; ρ - густина системи; $S(\rho)$ - ентропія. В якості ентропії виберемо енергію граткового газу

$$S(\rho) = -\int_{(V)} d\vec{r} \left\{ \frac{\rho}{\rho_0} \ln \frac{\rho}{\rho_0} + \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0}\right) \ln\left(1 - \frac{\rho}{\rho_0}\right) \right\}, \tag{3}$$

де ρ_0 - максимальна густина системи.

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

$$\rho(z) = \frac{\rho_0}{1 + e^{\Gamma z}}, \qquad \Gamma = mg\rho_0\beta. \tag{4}$$

Перехід до менш впорядкованого стану (див. Рис. 1.б) можна інтерпретувати, як руйнування ("плавлення") симетризованого ("кристалічного") стану (див. Рис. 1.а та 1б). Для кількісного визначення руйнації кристалічного впорядкування у твердих тілах (плавлення) прийнято використовувати критерій Ліндемана, який визначається, як середньоквадратичне відхилення окремої частинки від положення рівноваги

$$\gamma = \sqrt{\left\langle \left(r - \langle r_i \rangle\right)^2 \right\rangle} / L, \tag{5}$$

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.4) згідно з отриманим аналітичним виразом:

$$\gamma^2 = \frac{\rho_0}{\Gamma N} \cdot \ln\left|\frac{1}{c}\left(\frac{\rho_0}{\rho} - 1\right)\right| \cdot \left\{1 - \frac{\rho_0}{\Gamma N} \cdot \ln\left|\frac{1}{c}\left(\frac{\rho_0}{\rho} - 1\right)\right|\right\} + \frac{\rho_0}{\Gamma N} \cdot \left(\frac{\rho_0}{\rho} - 1\right), \tag{6}$$

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 (P.V. Quinn Sr., *Physica A*, 2007). 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.

Відмітимо також, що застосована граткова модель свідчить про можливість небольцманівського характеру зміни густини г.м. у гравітаційному полі. Останнє веде до переформулювання законів гідростатики (наприклад закону Паскаля) у випадку гранульованих систем.

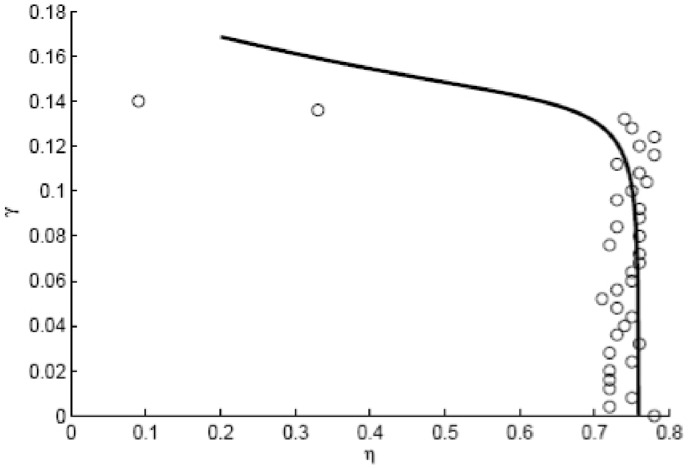

Рис.4 - Залежність параметра Ліндемана γ від параметру впакування η. Суцільна лінія – зображує результати, отримані за допомогою формули (7); кола – відповідають експериментальним даним для 1D системи (P.V. Quinn Sr., *Physica A*, 2007).

Другий розділ присвячений доведенню можливості існування квазістаціонарних станів у низьковимірних відкритих системах непружних частинок за умов компенсації ззовні втраченої під час бінарних зіткнень енергії. Експерименти з реальними г.м. демонструють наявність асимптотичних квазістаціонарних станів, але для їхньої параметризації бракує точних виразів для встановлення зв'язку між внутрішніми параметрами системи та факторами зовнішнього впливу. Таким чином, актуальним стає розгляд одновимірних моделей, які припускають точні розв'язки і дозволяють встановити необхідні зв'язки.

Розглядаючи систему N ідентичних безструктурних частинок розташованих у полі тяжіння $\vec{g}$, покладемо, що розподіл швидкості з якою перша (найнижча) частинка відбивається від границі системи задовольняє δ-функції Дірака $\Phi(\mathrm{v}) = \delta(\mathrm{v} - \mathrm{v}_0)$. Введемо коефіцієнт ($\alpha$) непружних втрат (restitution coefficient). Тоді після бінарного непружного зіткнення пари частинок із швидкостями v_i та v_{i+1}, отримані ними швидкості задовольняють співвідношенням:

$$\mathrm{v}'_{\mathrm{i}} = \mathrm{v}_i - \frac{1+\alpha}{2}\mathrm{v}_{i,i+1}, \qquad \mathrm{v}'_{\mathrm{i+1}} = \mathrm{v}_{i+1} + \frac{1+\alpha}{2}\mathrm{v}_{i,i+!}, \tag{7}$$

де $\mathrm{v}_{i,i+1} = \mathrm{v}_i - \mathrm{v}_{i+1}$; α - коефіцієнт непружних втрат (коли $\alpha = 1$ зіткнення абсолютно пружні і повна кінетична енергія зберігається, для α <1 має місце дисипація).

Чисельне моделювання методом молекулярної динаміки показує можливість синхронізації руху частинок в такій системі характерним параметром якого є період T_N, що визначає тривалість між однаковими зіткненнями. З аналізу балістичного рівноприскореного руху частинок за допомогою кінематичних рівнянь, із врахуванням правил бінарних зіткнень в моделі фіксованих непружних втрат (7), був знайдений аналітичний вираз для T_N:

$$T_N = \frac{2\mathrm{v}_0}{g}\left[N + \frac{(1-\alpha)}{3(1+\alpha)}(N-1)(2N-1)\right]^{-1}. \tag{8}$$

Для розміру системи в якій може здійснюватися визначений стаціонарний рух, знайдено співвідношення

$$L = \frac{gT^2}{8}\left(1 + 4\sum_{i=1}^{N-1}\frac{A}{(1+A)^2}\left(1 + 2(N-i)\right)\right), \tag{9}$$

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 (в стані періодичного руху). Кожний окремий додаток у (9) завдає розмір відповідної області (сегмента) у якій періодично рухається i-та частинка. Встановлено, що відповідні стаціонарні стани реалізуються у вигляді розшарування руху частинок на інтервали з періодичним рухом в них. Останнє добре узгоджується із висновками чисельних та безпосередніх фізичних експериментів (див. Рис.5).

Встановлено критерій існування постульованого вище стану стаціонарного руху:

$$\alpha \geq \alpha_c = \frac{N-2}{N+1}, \qquad (10)$$

який можна сприймати і як критерій початку кластеризації в системі за умов руйнування стаціонарного стану. У великих за розмірами системах, де кількість частинок не задовольняє співвідношенню (10), для створення умов існування стаціонарних станів недостатньо лише надавати до системи енергію зовні (тобто дисипативні та зовнішні компенсуючи потоки енергії в таких системах не встигають взаємно компенсувати один одного).

Згідно до (10), збільшення кількості частинок в системі призводить до виродження стаціонарного стану, що супроводжується кластерізацією за рахунок непружного колапсу. Для решти системи сформовані кластери відіграють роль конфайнменту і виділять інтервали (сегменти) із сформувавшимся періодичним рухом. Отриманий сценарій добре узгоджується з результатами чисельних та фізичних експериментів.

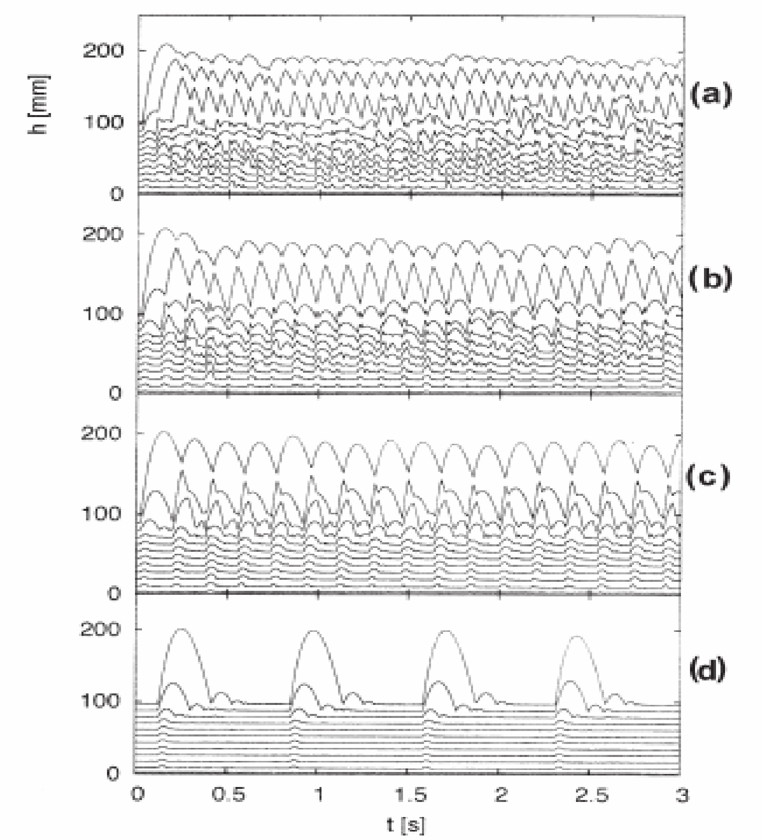

Рис.5-Результати експериментальних спостережень стаціонарних станів у 1D вертикальній системі 10 непружних частинок у полі сил тяжіння. h- вертикальна кордината частинок, t-час
a – частота збурення підкладинки 13.8 Hz; *b* – 8.93 Hz; *c* – 5.61 Hz; *d* – 1.37 Hz. [2]

Вивчення шляхом чисельного моделювання залежності вище визначених стаціонарних станів відносно зміни початкових координат та швидкостей частинок дозволило встановити їх стійкий характер в околі критерію формування.

Для горизонтально розташованої проміж «холодною» і «гарячою» стінками системи (та $\vec{g} = 0$), для якої функцію відбиття крайньої частинки у бік «гарячої» границі (де вона отримує компенсуючу енергію) приймає на себе абсолютно пружна обмежуюча стінка, також показана можливість існування квазістаціонарних станів. На відміну від моделі з гравітацією, де був знайдений лише один стійкий стан, у горизонтальній системі, яка містить, скажімо дві частинки їх виявилося два, причому лише один з них є стійким. Досліджено перехід системи між цими, виявленими в останньому випадку станами.

Доведення існування квазістаціонарних станів у розглянутих моделях, дає можливість застосування в їхньому околі для моделювання поведінки г.м., які перебувають під впливом зовнішніх механічних імпульсних збурень, окремих методів та підходів із статистичної фізики, фізики твердого тіла та фізики рідкого стану.

У третьому розділі вивчається явище компактизації в г.м., яке полягає у зміні системою дискретних частинок об'єму, який вона займає, під впливом механічних збуджень. Запропоновані кінетичні сценарії поведінки параметру впакування η, який в загальному випадку визначають, як частку об'єму системи зайнятого частинками.

У підрозділі 3.1 розглянута кінетична модель вільного об'єму яка базується на припущенні, що імовірність для окремої частинки просочуватися завдяки збуренню крізь зазор між сусідніми частинками (Ω) задовольняє експоненційному розподілу $P(\Omega)$

$$P(\Omega)=\frac{1}{\mathrm{v}}\exp\left(-\frac{\Omega}{\mathrm{v}}\right), \tag{11}$$

де $\Omega \geq \omega$ - відповідає розміру отвору між сусідніми частинками; $\mathrm{v}=\omega\frac{\eta_m-\eta}{\eta\eta_m}$ - вільний об'єм, що припадає на одну гранулу, і який прямує до нуля $\mathrm{v}\to 0$ за умови наближення параметра впакування до максимально можливого $\eta \to \eta_m$; ω - об'єм однієї гранули.

Постулюємо, що як тільки отвір $\Omega=\omega$ стає розміром з частинку, вона неодмінно просковзне крізь нього.

Сформулюємо найпростіше кінетичне рівняння процесу компактизації, вважаючи що швидкість зміни впакування пропорційна імовірності просковзнути крізь отвір, у наступному вигляді:

$$\frac{d\eta}{d\tau}=k\cdot\exp\left(-\frac{\eta\eta_m}{\eta_m-\eta}\right), \tag{12}$$

де k - кінетичний коефіцієнт. Зауважимо, що хід часу ми фактично асоціюємо із послідовністю струсів.

У першому наближенні розв'язок (12) можна надати у наступному вигляді:

$$\eta \approx \eta_m-\frac{\eta_m^2\Gamma}{1+\Gamma\ln(1+\tau/\tau_0)}, \tag{13}$$

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

$$\tau_0=k^{-1}e^{\frac{\eta_m\eta_1}{\eta_m-\eta_1}}(\eta_m-\eta_1)^2/\eta_m^2, \qquad \Gamma=(\eta_m-\eta_1)/\eta_m^2. \tag{14}$$

де η_1 - відповідає початковому значенню впакування. Фізичний експеримент та чисельне моделювання з гранульованої компактизації свідчать як раз про переважно логарифмічний характер протікання таких процесів (або близький до нього).

У підрозділі 3.2 узагальнено кінетичну модель вільного об’єму на випадок двохкомпонентної системи, яка може бути застосована для опису як полідисперсних і багатокомпонентних, так і таких систем, що складаються з перемішаних впорядкованих доменів із різною симетрією впакування. Для системи, яка складається з суміші доменів двох типів з різним ступенем локального впакування (які характеризуються асимптотичними границями η_{m1} та η_{m2}, де $\eta_{m1} < \eta_{m2}$), кінетичне рівняння компактизації постулюємо у наступній формі

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = ce^{-\frac{\eta_{m1}\eta}{\eta_{m1}-\eta}} + (1-c)e^{-\frac{\eta_{m2}\eta}{\eta_{m2}-\eta}}, \qquad (15)$$

де η_1 - початкова компактизація всієї системи; c - об’ємна фракція доменів з ущільненням гранул до значення η_{m1} (відіграє роль кінетичного коефіцієнта).

Аналіз розв’язків (15) для різних значень параметра компактизації показує, що сукупність можливих законів релаксації, які описуються моделлю, включає наступні кінетичні сценарії для η: $\sim\sqrt{\ln t}$, $\sim\ln t$, $\sim\sqrt{t}$, $\sim t$, $\sim 1/\ln t$.

На Рис.6 побудована фазова діаграма, яка описує впакування в розглянутій моделі і дозволяє параметризувати відповідний процес в термінах її характеристик: величин ущільнення гранул у доменах різних типів η_{m1} та η_{m2}, їх об’ємної фракції у системі c, та початкового ущільнення системи η_1.

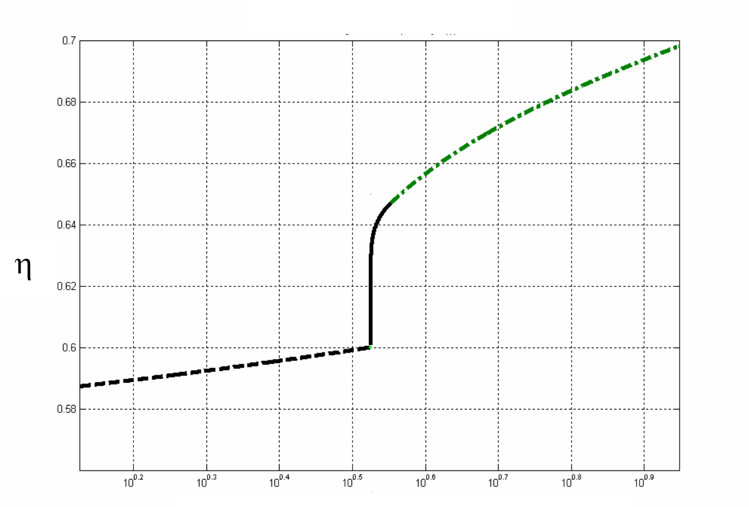

Рис.6 - Фазова діаграма ущільнення у гранульованому матеріалі ($\eta_{m1} = 0.6$, $\eta_{m2} = 0.7$, $c = 0.3$) побудована із використанням розв’язків моделі (15) [6].

Як випливає з даних приведених на Рис.6, фазовій діаграмі відповідають послідовні зшивання різних можливих законів релаксації на границях їх існування, що встановлені в розглянутій моделі. Процес впакування носить немонотонний характер і містить риси притаманні фазовим переходам в конденсованих середовищах, що узгоджується із експериментальними спостереженнями.

У підрозділі 3.3 запропоновано кінетичну модель компактизації яка базується на використанні підходу Ландау-Гінзбурга в теорії фазових переходів. Експериментальні спостереження компактизації гранульованих матеріалів показують, що система асимптотично насичується (шляхом впакування) до деякого граничного квазістаціонарного стану (див. Рис. 7). Для дослідження процесу релаксації системи поблизу насиченого стану був введений параметр впорядкування за наступним правилом

$$\phi(t) = \frac{\eta_\infty - \eta(t)}{\eta_\infty - \eta_1}, \tag{16}$$

де $\phi(0) = 1$ - відповідає початковому; $\phi(\infty) = 0$ - відповідає асимптотичному квазістаціонарному станам системи. Надане визначення параметру впорядкування дозволяє у подальшому скористатися підходом Ландау у описі релаксації поля впорядкування у околі асимптотичного стаціонарного стану.

Функціонал вільної енергії $F(\phi)$ моделі, визначаємо для системи твердих сфер за рівнянням Карнахана-Старлінга, у вигляді нескінченного ряду за степенями параметра впорядкування ϕ наступним чином:

$$\frac{F(\phi)}{NkT} = A_0 + A\phi + B\phi^2 + C\phi^3 + D\phi^4 + \ldots = A_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \phi^k (\eta_\infty - \eta_1)^k \left[\frac{(3+k) - 2\eta_\infty}{(1-\eta_\infty)^{k+2}} (-1)^k - \frac{1}{k\eta_\infty^k} \right], \tag{17}$$

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

Кінетичне рівняння для параметра впорядкування ϕ постулюємо за допомогою принципу Онсагера: $\partial\phi / \partial t = -\Gamma \delta F / \delta\phi$, де Γ - кінетичний коефіцієнт. Розглянемо це рівняння використовуючи розклад (17), і обмежимося врахуванням складових до квадратичного включно. Відповідне кінетичне рівняння у вище визначеному наближенні є лінійним і має точний розв’язок, який у термінах параметру впакування має наступний вигляд:

$$\eta(\tau) = \eta_1 + (\eta_c - \eta_1)\left(1 - e^{-\tau/\tau_0}\right), \tag{18}$$

де $\tau = t \cdot (\Gamma NkT)$; $\tau_0 = (2B)^{-1}$ - характерний час релаксації; $\eta_c = \eta_\infty + (\eta_\infty - \eta_1)A/(2B)$ - величина параметра впакування до якого система прямує з довільного початкового стану η_1.

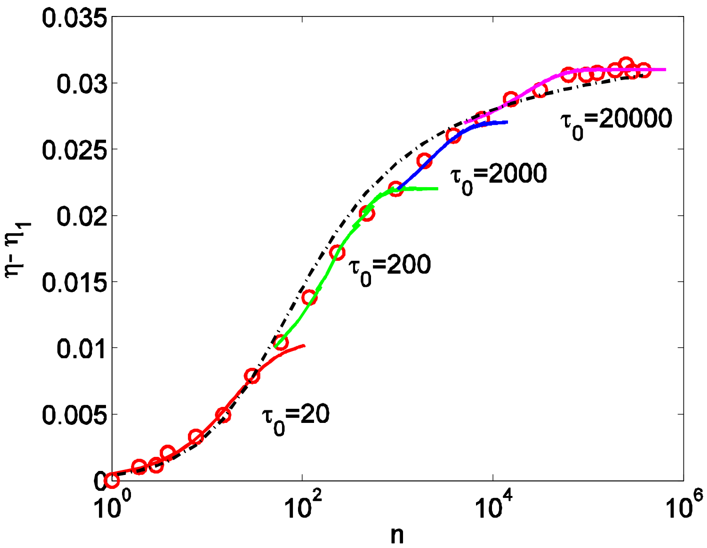

Рис.7-Фазова діаграма компактизації для системи сферичних частинок в термінах $(\eta - \eta_1)$, як функції кількості струсів (n). Позначення: (червоні кола) - дані експерименту з впакування у 3D г.с. (N. Vandewalle, *Eur. Phys. J. E*, 2007), із покладанням η_1=0.56, η_∞=0.591; (крапка-тире) – теоретичні результати (рівняння (13)); (суцільні лінії) - кусково-безперервна апроксимація з використанням отриманого в (18) експоненціального закону релаксації [3].

Знайдений із використанням підходу Ландау розв’язок (18), використовується для опису експериментальних даних (див. Рис.7) шляхом кусково-безперервного зшивання фрагментів із різними кінетичними параметрами. Отримані результати добре узгоджуються із даними експериментів в яких безпосередньо вимірюється компактизація гранульованих матеріалів під впливом зовнішніх збурень.

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-експоненціальний розв'язок $\eta(\tau)=\eta_1+(\eta_\infty-\eta_1)\left(1-e^{-[\tau/\tau_0]^\alpha}\right)$, та обернений логарифм (13), які, як правило, використовуються для параметризації відповідних експериментів. Аналіз експериментів показує, що можливим узагальнюючим підходом до опису процесу релаксації до асимптотичного квазі-стаціонарного стану є застосування моделі фракційної кінетики. Результат розв'язку відповідного кінетичного рівняння для поля впакування, в такому підході, має наступний вигляд:

$$\eta(\tau)=\eta_\infty-\Delta\eta\cdot E_\alpha\left(-(\tau/\tau_0)^\alpha\right), \tag{19}$$

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 та у початковому стані; $\tau=k\Gamma$; Γ - параметр збудження; k - матеріальна стала. Асимптотично, коли $\alpha\to 1$, розв'язок (19) перетворюється на експоненціальний закон релаксації: $E_\alpha\left(-(\tau/\tau_0)^\alpha\right)\to\exp(-\tau/\tau_0)$, який відповідає кінетичному сценарію релаксації Ландау-Гінзбурга у линійному наближенні (18). У випадку коли показник $\alpha\to 0$ 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. Таким чином за допомогою моделі фракційної кінетики у відповідних границях можуть бути описані усі можливі (і спостерігаємі) сценарії процесу компактизації.

У підрозділі 3.4 вивчається бі-компонентні гранульовані суміші, для яких розроблено підхід до опису стисливості та компактизації у повному інтервалі значень об’ємної (чи молярної) фракції.

Експериментальні дані для компактизації бі-компонентної суміші зазвичай не вдається описати єдиним підходом і для умовно позначеної фази «гравій» (коли великі частинки переважають) і для фази «пудінг» (коли домінують маленьки частинки). Для розв’язання цієї проблеми запропоновано використати теорію Кірквуда-Баффа у поєднанні з моделями типу твердих сфер (Карнахана-Старлінга).

Згідно з теорією Кірквуда-Баффа ізотермічна стисливість бі-компонентної суміші може бути записана у термінах парціальних структурних факторів у вигляді:

$$\beta_T^{(12)}=\frac{1}{n_{12}k_BT}\cdot\frac{S_{11}(0)S_{22}(0)-S_{12}^2(0)}{x^2S_{11}(0)-2x(1-x)S_{12}(0)+(1-x)^2S_{22}(0)}. \tag{20}$$

де $\beta_T^{(12)}$ - ізотермічна стисливість суміші, компоненти якої нумеруються як 1 і 2;

$S_{11}(0)=(1-x)\cdot n_1 k_B T\beta_T^{(1)}$, $S_{22}(0)=x\cdot n_2 k_B T\beta_T^{(2)}$, $S_{12}(0)=x(1-x)n_{12}G_{12}$ - парціальні структурні фактори; G_{12} – кореляційний інтеграл, який вимагає знання радіальної функції розподілу частинок суміші; $n_1=N_1/V$ та $n_2=N_2/V$ - парціальні щільності кількості частинок компонентів суміші 1 та 2, відповідно; $n_{12}=n_1+n_2$ - щільність кількості частинок для суміші; k_BT - масштаб енергії; f та x – об'ємна та мольні частки 2-ї (меншої за розміром) компонент суміші.

Для визначення парціального структурного фактора, який фігурує в формулі (20) (що фактично робить її незамкненою завдяки тому, що містить невідому величину $S_{12}(0)$), запропоновано використання виразу для ізотермічної стисливості, який витікає з рівняння стану Карнахана-Старлінга для системи твердих сфер:

$$\beta_T^{(12)}=\frac{1}{n_{12}k_BT}\cdot\frac{(1-\eta)^4}{1+a\eta+b\eta^2+c\eta^3+d\eta^4}, \qquad (21)$$

де a,b,c,d - сталі, які відомим чином залежать 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).

Результати відповідних розрахунків $S_{12}(0)$ наведені на Рис.8 для різних значень співвідношення між розмірами частинок. З формул (20) та (21) було також отримане алгебраїчне рівняння 12-ї степені відносно компактизації η, яке розв'язувалося чисельно. Результати відповідних розрахунків у порівнянні із експериментальними даними отриманими в (N. Vandewalle, *Scientific Reports*, 2019) для трьох можливих значень параметра α наведені на Рис.9. Отримано гарне узгодження теоретичного підходу із даними експериментальних спостережень у всьому інтервалі можливих значень об'ємної фракції f.

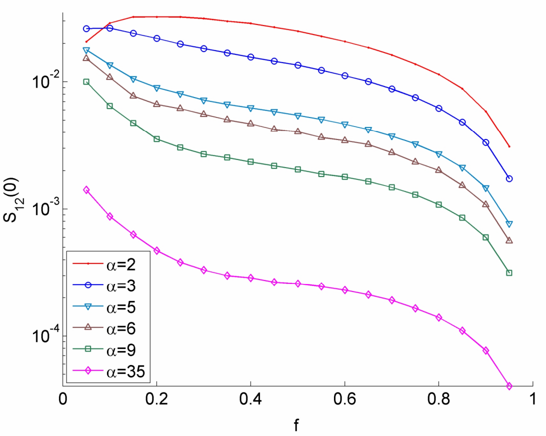

Рис.8 - Парціальний структурний фактор $S_{12}(0)$ бінарної суміші, в залежності від об'ємної фракції дрібної компоненти (f), розрахований за допомогою формул (20) та (21). Розбіжність у розмірах частинок компонентів суміші змінюється у межах $\alpha=2\div35$.

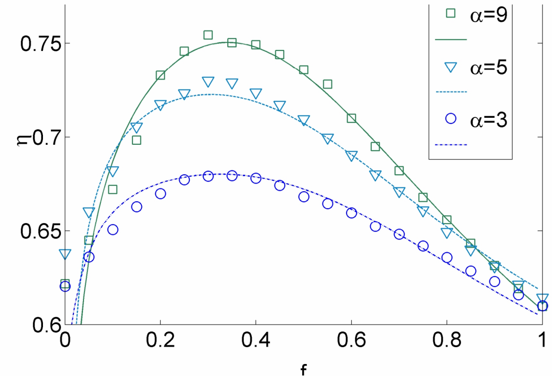

Рис.9 - Параметр впакування η для суміші, як функція f: суцільна лінія - відображує результат теоретичної апроксимації в рамках побудованого підходу; кола, трикутники та квадрати - відображають дані експериментальних вимірів (N. Vandewalle, *Scientific Reports*, 2019).

У четвертому розділі вивчається перенесення імпульсу збудження крізь неоднорідні силові ланцюжки взаємодіючих силових центрів. Розглянута 1D модель перенесення імпульсу збудження у неоднорідному герцівському ланцюжку. Розв'язки для функцій зміщення (φ) центрів мас частинок ланцюжка відносно рівноважного незбуреного стану та у вигляді функції перекриття (ε) частинок внаслідок деформації на контакті знайдені у аналітичному вигляді.

У загальному вигляді, рівняння руху n-ї частинки можна записати у наступній формі:

$$m_n \frac{d^2 z_n}{dt^2} = C_{n-1}\varepsilon_{n-1}{}^{\delta} - C_n \varepsilon_n{}^{\delta} + F_n, \tag{22}$$

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; $C_n = \frac{4}{3}\sqrt{\frac{R_n R_{n+1}}{R_n + R_{n+1}}} \Big/ \left[\frac{(1-\nu_n{}^2)}{E_n} + \frac{(1-\nu_{n+1}{}^2)}{E_{n+1}}\right]$ - силова стала; 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 степінь нелінійності контакту; F_n - зовнішня сила, яка діє на n-у частинку (наприклад, для вертикального ланцюжка - це сила тяжіння, а для горизонтального - притискаюча сила діюча на крайні частинки з боку границь ланцюжка).

У підрозділах 4.1-4.2 Детально вивчається динаміка імпульсу в ланцюжку розташованому вертикально у полі тяжіння. Така система є неоднорідною із сформованим розподілом перекриттів між сусідніми частинками вздовж ланцюжка.

Для випадку вертикального ланцюжка, дискретне лінеаризоване рівняння руху збурення в термінах зміщень має вигляд

$$\frac{d^2\varphi_n}{d\tau^2} = \kappa_n \varphi_{n+1} - (\kappa_n + \kappa_{n-1})\varphi_n + \kappa_{n-1}\varphi_{n-1}, \tag{23}$$

де $\tau = \sqrt{3/2}\gamma^{1/3} g^{1/6} t$ - перенормований час; $\kappa_n = n^{1/3}$; $\gamma = E\sqrt{d}\,/\left[3m(1-\nu^2)\right]$ - силова стала; d - діаметр частинок; g - прискорення вільного падіння. Користуючись алгоритмом Бейтмана для розв'язку задачі Штурма-Ліувіля на власні значення λ_i, точний розв'язок (23) знайдено у вигляді лінійної комбінації (накладання) циліндричних хвиль (див. Рис.10):

$$\varphi_n(\tau) = \varphi_k(0)\cdot \sum_{j=1}^{\infty} A_j(n) J_{2j-2}\left(2\sqrt{\kappa_N}\,\tau\right) + \dot{\varphi}_k(0)\cdot \int_0^{\tau} \sum_{j=1}^{\infty} A_j(n) J_{2j-2}\left(2\sqrt{\kappa_N}\,\tau\right) d\tau, \tag{24}$$

де $\varphi_k(0)$ та $\dot{\varphi}_k(0)$ - параметри початкового збудження ланцюжка з боку k-ї частинки (зміщення та швидкість, відповідно); $A_j(n)$ та ϕ задаються наступним чином

$$A_j(n) = \sum_{p=1}^{N-1} \frac{\tilde{X}_n(\lambda_i)\tilde{X}_k(\lambda_i)}{\sum_{m=1}^{N-1}\left[\tilde{X}_m(\lambda_i)\right]^2} \cdot \begin{cases} 1, & i = 1, \\ 2\cos\left[(2j-2)\phi_i\right], & i > 1; \end{cases}$$

де $\phi_i = \arcsin\dfrac{\omega_i}{2\sqrt{\kappa_N}}$; $\tilde{X}_2 = 1+\lambda$; $\tilde{X}_{n+1} = \tilde{X}_n(\kappa_n + \kappa_{n-1} + \mu_n\lambda)/\kappa_n - \tilde{X}_{n-1}\kappa_{n-1}/\kappa_n$.

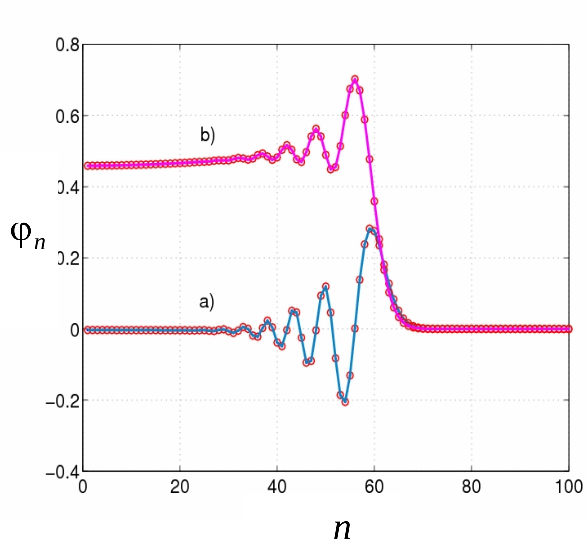

Рис.10 - Зміщення φ_n (для герцівського ланцюжка $\delta = 3/2$) в залежності від положення n у ланцюжку для довільно обраного моменту часу. Суцільні лінії відображають результати чисельного розв'язку рівняння (23); кола - теоретичні дані, які описуються рівнянням (24), а) «статичне збудження», $\varphi_1(0) = x_0$, $\dot{\varphi}_1(0) = 0$, б) «динамічне збудження», $\varphi_1(0) = 0$, $\dot{\varphi}_1(0) = v_0$. [5]

На Рис.10 наведені результати аналітичних та чисельних розрахунків рівняння (23), які практично співпадають і демонструють відгук вертикального герцівського ланцюжка на імпульсне збудження з боку першої (найверхньої) частинки для двох різних типів збудження («статичного» та «динамічного»).

Лінеаризоване рівняння руху, для вертикального ланцюжка у континуальній границі приймає вигляд:

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial\tau^2} = \frac{\partial}{\partial h}\left(h^{1/3}\frac{\partial\varphi}{\partial h}\right), \tag{25}$$

для якого існує відомий розв'язок у вигляді циліндричної хвилі: $\varphi(\tau,h,\omega) = Ae^{i\omega\tau}\cdot h^{1/3}H^{(1)}_{2/5}\left(\frac{6\omega}{5}h^{5/6}\right)$, де: $H^{(1)}_{2/5}\left(\frac{6\omega}{5}h^{5/6}\right)$ - функція Ганкеля 1-го роду; ω - частота; A - константа.

Було знайдено також новий розв'язок рівняння (25) який має вигляд :

$$\varphi(\tau,h) = c_1 + c_2\left|(\tau + c_3)^2 - \left(\frac{6}{5}h^{5/6}\right)^2\right|^{-\frac{1}{10}}, \tag{26}$$

де c_1, c_2, c_3 - сталі. Розв'язок (26) 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 (C. Daraio, *Phys. Rev. E*, 2015; P.G. Kevrekidis, *Lett. Math. Phys.*, 2016). Зображення функції (26) у порівнянні із результатами чисельного розв'язку (25), отриманого із використанням методу молекулярної динаміки, наведено на Рис.11.

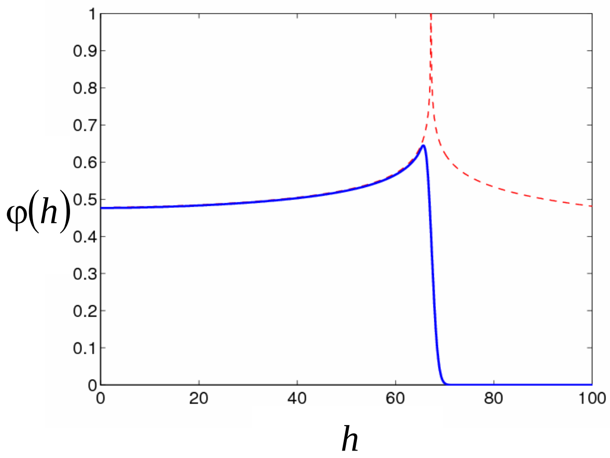

Рис.11 - Зміщення $\varphi(h)$ у неоднорідному ланцюжку за умови імпульсного збудження для виділеного моменту часу, де: суцільна лінія (синя) демонструє результати чисельного розв'язку (25), пунктир (червоним) – результати розрахунку за формулою (26). [5]

Було показано, що за умови $A \sim \omega^{-2/5}$ хвильовий пакет з циліндричних хвиль має форму розв'язку (26). Теоретичні висновки добре співпадають із результатами чисельного моделювання методом молекулярної динаміки і таким чином свідчать про можливість мульти-модового сценарію переносу імпульсу в неоднорідних силових ланцюжках.

У підрозділі 4.3 сформульоване нелінійне континуальне рівняння розповсюдження імпульсних збуджень, в термінах перекриття (ε), у наступному вигляді:

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\tau^2} = a^2 \frac{\partial^2}{\partial h^2}\left(\varepsilon^{3/2}\right) + \frac{a^4}{12} \cdot \frac{\partial^4}{\partial h^4}\left(\varepsilon^{3/2}\right), \tag{27}$$

де a - масштабний коефіцієнт континуального переходу. Безпосередньою підстановкою можна показати що наступний вираз [4]

$$\varepsilon = \varepsilon_{\max}\cos^4\left(\frac{h - \mathrm{v}t}{\sqrt{3}a}\right), \qquad \varepsilon_{\max} = \frac{36\mathrm{v}^4}{25a^4\gamma^2}, \tag{28}$$

є розв'язком рівняння (27). Розв'язок (28) є подібним до відомого солітонного розв'язку типа Нестеренка, із кількісними відмінностями в амплітуді та дисперсії.

У підрозділі 4.4 вивчається нерівномірний розподіл енергії у солітонному збуджені та розглянуто модель солітонної квазічастинки, в якій приймалося що солітонне збудження взаємодіє із іншими частинками ланцюжка, як класична частинка з певними ефективною масою та швидкістю. Досліджуються умови формування такого солітонного розв'язку.

Для декорованого ізотопічною домішкою ланцюжка, знайдена відносна амплітуда відбиття солітонного збудження від ізотопічного дефекту у герцівському ланцюжку, у наступному вигляді [4]

$$\frac{F_r}{F_i} = \left(\frac{M - m}{M + 2m}\right)^{6/5}, \tag{29}$$

де F_r та F_i - амплітуди налітаючого на дефект солітона та відбитого від нього, відповідно; M та m - маса дефекту та окремої частинки ланцюжка, відповідно. Теоретичний результат (29) гарно узгоджується з даними фізичного експерименту (J.Yang, *Smart Mater. Struct.*, 2013).

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 ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ 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
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.
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).

АНОТАЦІЯ

Співак А. Я. Структуризація та динамічні процеси в багаточастинкових мікро-механічних системах під впливом зовнішніх збурень. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України, Київ, 2021.

Досліджуються окремі теоретичні моделі багаточастинкових мікро-механічних (гранульованих) систем, в яких під впливом зовнішніх збурень формуються структуровані власні стани та здійснюються переходи проміж ними. Вивчається вплив початкових та зовнішніх умов на структуру таких станів, та встановлено критерій типу Ліндемана структурного впорядкування. Кінетика структурних перетворень (компактизації) у гранульованих матеріалах вивчається за допомогою моделі вільного об'єму, а також, теорії фазових переходів Гінзбурга-Ландау. Запропоновано фракційний сценарій кінетики релаксаційних процесів відповідно визначеного параметру впорядкування. Розроблена модель бі-компонентної мікромеханічної суміші на базі теоретичного підходу Кірквуда-Баффа, для опису та параметризації стисливості та компактизації при довільних значеннях об'ємної фракції компонентів. Перенос імпульсу збудження в неоднорідних середовищах в мультимодових режимах із урахуванням впливу розупорядкованості розглянуто на прикладі неоднорідного силового ланцюжка із нелінійними контактами. Отримано солітонний розв'язок типу Нестеренка та вираз для амплітуди розсіяння солітонного збудження на важкому ізотопічному дефекті.

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.

АННОТАЦИЯ

Спивак А. Я. Структуризация и динамические процессы в многочастичных микромеханических системах под влиянием внешних возмущений. – Рукопись.

Диссертация на получение научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. Институт теоретической физики им. М. М. Боголюбова НАН Украины, Киев, 2021.

Исследуются отдельные теоретические модели многочастичных микромеханических (гранулированных) систем, в которых под влиянием внешних возмущений формируются структурированные собственные состояния и происходят переходы между ними. Изучается влияние начальных и граничных условий на структуру и свойства таких состояний, и установлен критерий типа Линдемана структурного упорядочения. Кинетика структурных превращений (компактизации) в

гранулированных материалах изучается с помощью модели свободного объема, а также, теории фазовых переходов Гинзбурга-Ландау. Предложен фракционный сценарий кинетики компактизации гранулированных систем в терминах соответственно определенного параметра порядка. Предложена модель би-компонентной микромеханической смеси на базе теоретического подхода Кирквуда-Баффа, для описания и параметризации сжимаемости и компактизации при произвольных значениях объемной фракции компонентов. Перенос импульса возбуждения в неоднородных средах в мультимодовых режимах с учетом влияния разупорядоченности рассмотрен на примере неоднородной силовой цепочки с нелинейными контактами. Получено солитонное решение типа Нестеренко и выражение для амплитуды рассеяния солитонного возбуждения на тяжелом изотопическом дефекте.

Ключевые слова: микро-механические системы, гранулированные материалы, открытые системы, квази-стационарные состояния, кинетика компактизации, кинетика Ландау-Гинзбурга, теория Кирквуда-Баффа, модель Карнахана-Старлинга, би-дисперсные гранулированные смеси, неоднородная цепочка Герца, резонансы, квази-нормальные моды.

ABSTRACT

Spivak A.Ya. The structurization and dynamic processes in many-body micro-mechanical systems under the influence of external perturbations. –Manuscript.

Thesis for the Candidate of Science in Physics and Mathematics degree in speciality 01.04.02 – theoretical physics. Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2021.

Theoretical models of multi-particle micro-mechanical (granular) systems in which under the influence of external perturbations structured eigen-states are formed and transitions between them are carried out has been studied. The influence of initial and external conditions on the structure of such states is investigated.

Using the method of Voronoi's constructions, a visual description and comparative analysis of the local structure of ordered and disordered states of granular materials (g.m.) is carried out. A model of shells for the description of the local structure of granular systems is proposed and substantiated. By studying the translation and orientation ordering parameters, it is shown that granular materials, dusty plasma, and some other soft matter objects are examples of multi-particle systems that are naturally anisotropic. For the lattice gas model in the gravitational field, the existence of a Fermi density profile is shown. With the help of phenomenological data, it is found that the criterion for the transition from an ordered (crystalline) to a disordered state, belong to the melting interval of solids (Lindemann's criterion).

Using the model of a low-dimensional system of inelastic contacting identical solid balls that perform vertical motion in the gravitational field, the conditions of existence and properties of stationary states in an open system to which energy is supplied from the outside are studied in detail. It is established that the corresponding stationary states are

realized in the form of stratification of particle motion into intervals with periodic motion in them, which coincides with the conclusions of numerical and direct physical experiments. A criterion for the existence of such states has been found; according to which in large systems it is not enough to provide external energy to the system (i.e. dissipative and external energy flows in such systems do not have time to compensate each other). It is shown that in the absence of external fields in the system exists more than one quasi-stationary state. The structure of such a states and the possibility of transitions between them have been studied.

In the kinetic model of free volume, for the introduced function of distribution of vacancies of the system, the logarithmic character of compaction with time is revealed, which is confirmed experimentally.

The kinetic model of free volume in the case of a two-component system is generalized, which can be used to describe both poly-disperse and multi-component systems, and also systems consisting of mixed ordered domains with different symmetry of compaction. A phase diagram which allows parameterizing the corresponding process in terms of model characteristics (levels of compaction of granules in domains of different types, their volume fraction in the system, initial system compaction, and compression) has been constructed.

A kinetic model of compactification of perturbed g.m. is proposed and investigated, on a basis of Ginzburg-Landau approach, within which the exponential law of relaxation of the packing parameter is established. The application of obtained results for parameterization of experimental measurements allowed offering a fractional approach to description of the kinetics of packing.

For bi-component granular mixtures, an approach has been developed to describe compressibility and compaction using Kirkwood-Buff theory in combination with Carnahan-Starling solid sphere models, which allowed constructing a packing phase diagram in the full range of volume (or molar) fraction values. Theoretical results coincide well with the experimental ones.

The model of pulse excitation propagation in inhomogeneous Hertz chains is solved analytically. The solution is represented as a linear combination of cylindrical waves (infinite series). In the continuum limit, resonant solutions are obtained. It has been shown obtained theoretical results coincide well with the data of numerical modeling obtained by the method of molecular dynamics. The nonlinear equation of motion for propagation of impulse excitations is formulated in terms of mutual overlap of particles. Its solution has been obtained in the form of a soliton of the Nesterenko type. The conditions for the formation of such a soliton solution are investigated. For a chain decorated with an isotopic impurity, the amplitude of excitation scattering from incorporated defect has been obtained. For a chain decorated with an isotopic impurity, the amplitude of excitation scattering from a heavy defect is obtained.

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.

Підписано до друку 11.03.2021 р. Формат 60х84/16
Папір офсетний. Ум. друк. арк.. 1,4
Наклад 100 прим. Замовлення 0152
Видавництво та друкарня "ТЕС"
(Свідоцтво ДК № 771) Одеса, Канатна 81/2.
Тел.: (0482)42-90-98, (0482)42-89-72