МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ЕКОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

О.І. Герасимов

ФІЗИКА ГРАНУЛБОВАНИХ



Монографія

Одеса TEC 2015 МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАІНИ ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ЕКОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

О.І. ГЕРАСИМОВ

ФІЗИКА ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ

Монографія

Одеса ТЕС 2015

ББК 28.081 Г37 УДК 538.9:539.215

Друкується за рішенням Вченої ради інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України (протокол № 9 від 27.11.2014)

Рецензенти:

академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. А.Г. Загородній, член.-кор.АПН України, д.ф.-м.н., проф. О.В. Чалий, д.ф.-м.н., проф. Ш.Д. Курмашев

Г37 Герасимов, Олег Іванович

Фізика гранульованих матеріалів. : Монографія./ Герасимов О.І.; Одеськ. держ-ний екол-ний ун-т. – Одеса, ТЕС, 2015. – 264 с.

Монографія є першою в Україні з актуального сучасного напрямку досліджень - фізики м'якої матерії у гранульованих станах. Детально описані незвичайні властивості цього стану конденсованої матерії, який є відмінним від газів, рідин та твердих тіл. Запропонована класифікація теоретичних методів досліджень таких матеріалів та розглядаються окремі оригінальні задачі із їх застосуванням. Книга спрямована до студентів старших курсів, аспірантів, наукових співробітників та викладачів вищих навчальних закладів та наукових установ за профілем фізика та для всіх, хто, працюючи у міждисциплінарних напрямках, вивчає та застосовує метастабільні системи (екологів, матеріалознавців).

Книга представляет собой первое в Украине изложение методов и результатов исследований в области Физики мягкой материи в гранулированных фазах, которые выступают объектами современных интенсивных исследований. Описаны необычные свойства таких систем, отличающие их от газов, жидкостей или твердых тел. Классифицированы и характеризованы основные теоретические подходы к моделированию гранулированных материалов. На примере оригинальных задач проанализированы сравнительные возможности различных подходов. Благодаря этому, читатель вводится в курс Физики гранулированной материи и стимулируется к дальнейшему углубленному изучению отдельных ее положений.

The actual modern field of Soft Matter Physics, namely – Physics of Granular materials have been described in many details with a particular attention to their properties which has a reminiscence with of typical aggregated states of condensed matter, namely: liquids, gases and solid states. Presented book is a guide to the theoretical basis of investigations of such a complex systems which has no universal methods for their investigation. The methods from classical statistical mechanics, liquid-state and solid-state theories, as well as stereological and probabilistic approaches have been invoiced for the modeling and studying of selected characters of the behavior of granular matter. A reader will obtain an introduction to the new branch of Modern Physics being stimulated to study a particular issues in more details.

ББК 28.081

ISBN 978-617-7054-82-4

© Одеський державний екологічний університет, 2015

3MICT

ПЕРЕД	MOB	BA	6
ГЛАВА 1		ФІЗИКА ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ : СТАН І	
		ПЕРСПЕКТИВ ДОСЛІДЖЕНЬ	11
ГЛАВА 2		ГРАНУЛЬОВАНА МАТЕРІЯ- ТОЙ САМИЙ	
		ЗВИЧАЙНИЙ ПІСОК	23
	2.1	Пісочні замки	27
	2.2	Голос пустелі	29
	2.3	Цементуюча вода	38
ГЛАВА З		МІКРОМЕХАНІЧНІ МОДЕЛІ ГРАНУЛЬОВАНИХ	
		МАТЕРІАЛІВ	41
	3.1	Стрибаючий м'яч, як наочна модель непружного	
		колапсу	41
	3.2	Сили пружності і тертя	46
	3.3	Модель зіткнення	50
	3.4	Задача Герця	53
	3.5	Стаціонарні стани у 1D системі непружних частинок у	
		гравітаційному полі	61
ГЛАВА	4	ДЕЯКІ ФЕНОМЕНОЛОГІЧНІ ПІДХОДИ ДО	
		ВИВЧЕННЯ ФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ	
		ГРАНУЛЬОВАНОЇ МАТЕРІЇ	65
	4.1	Кінетична модель вільного об'єму	65
	4.2	Модель Колмогорова-Вогеля-Фулчера компактизації	69
		у гранульованих системах	
	4.3	Сегрегація у гранульованих матеріалах	71
	4.4	Рівняння стану систем із сінгулярною мірою:	
		матеріальні співвідношення для гранульованих	
		матеріалів поблизу стаціонарних станів	91
	4.5	Збурені гранульовані матеріали поблизу	
		асимптотично стійких станів	97
ГЛАВА 5		ТЕОРЕТИЧНІ ПІДХОДИ ДО ВИВЧЕННЯ	
		ФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ГРАНУЛЬОВАНИХ	
		МАТЕРІАЛІВ	100
	5.1	Статистична механіка для гранульованого стану	100
			100
	5.2	Кінетична теорія і квазі-гідродинаміка	105
	5.3	Кластеризація у гранульованих матеріалах	112

	5.4	Хвильові процеси та структури на поверхнях шарів збурених гранульованих матеріалів. Фігури Хладні	114
ГЛАВА	6	ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ	116
	61	Молепювання гранульованих систем метолом	110
	0.1	молекулярної линаміки (MD)	120
	6.2	Молелювання метолом Монте Карло	121
ГЛАВА	7	РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОМАГНИТНИХ ХВИЛЬ НА	
		ГРАНУЛЬОВАНИХ КОМПЛЕКСАХ	126
	7.1	Розклад плоскої хвилі в термінах координат зсуву	126
	7.2	Розсіяння на окремих сферах	129
	7.3	Вектор трансляційних коефіцієнтів	131
	7.4	Рекурентні формули для коефіцієнтів Гаунта	134
	7.5	Поле розсіяння у хвильовій зоні	136
	7.6	Матрична форма запису для амплітуди розсіяння	138
	7.7	Повний і диференціальний переріз розсіяння та	
		параметри асиметрії	142
	7.8	Розсіяння МІ на структурованих комплексах	149
	7.9	Аналіз даних експериментальних вимірювань	157
	7.10	Скорочена параметризація розсіяння у	
		гранульованих матеріалах за допомогою теорії Мі	160
ГЛАВА	8	СТЕРЕОЛОГІЧНИЙ АНАЛІЗ ЛОКАЛЬНОЇ	
		СТРУКТУРИ БАГАТОЧАСТИНКОВИХ МІКРО-	
		МЕХАНІЧНИХ СИСТЕМ	164
	8.1	Геометричні властивості елементів структури	
		мікромеханічних систем	165
	8.2	Розбиття Вороного	171
	8.3	Структура та динаміка гранульованих матеріалів –	
		деякі загальні зауваження	176
	8.4	Локальна структура у фазовому просторі	
		структурних інваріантів	178
	8.5	Загальна концепція квазістатистичного підходу	180
ГЛАВА	9	МЕТОДИ ОПИСУ ЛОКАЛЬНОЇ СТАТИЧНОЇ	
		СТРУКТУРИ ГРАНУЛЬОВАНИХ СИСТЕМ	183
	9.1	Експериментально спостережувані структури в	
		гранульованих матеріалах і запорошеній плазмі	185
	9.2	Модель Фермі-Дірака розподілу щільності	186
	9.3	Оболонкова модель	187
	9.4	Визначення структурних параметрів	188
	9.5	Топологічні параметри локальної структури ГМ	190

ГЛАВА 1	10	СТАЦІОНАРНІ СТАНИ У 1D СИСТЕМІ				
		НЕПРУЖНИХ ЧАСТИНОК	192			
	10.1	Постульовані стаціонарні стани у вертикальній 1D				
		системі непружних частинок у гравітаційному полі				
		(теоретичне визначення)	193			
	10.2	Стаціонарні стани у 1D горизонтальній системі N				
		непружних частинок	195			
	10.3	Нестаціонарні (проміжні) стани у горизонтальній 1D				
		системі непружних частинок	199			
	10.4	Рух центру мас в горизонтальній 1D системі N				
		непружних частинок	201			
	10.5	Фізичний експеримент	203			
ГЛАВА 1	1	КІНЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ КОГЕРЕНТНИХ				
		СТАНІВ У ЗБУДЖЕНИХ ГРАНУЛЬОВАНИХ				
		СИСТЕМАХ	207			
	11.1	Конгломерації дискретних частинок у полі				
		віброприскорення (загальна проблема ФПУ)	208			
	11.2	Аналог ефекту Лейденфросту у гранульованих				
		матеріалах	209			
	11.3	Кінематична теорія левітації шарів гранульованих				
		матеріалів над вібруючою підкладинкою (аналог				
		ефекту Лейденфроста)	210			
•	11.4	Моделювання стисненого стану у гранульованому				
		середовищі	218			
ГЛАВА 1	12	НАДЛИШКОВІ ВЛАСТИВОСТІ				
		БАГАТОЧАСТИНКОВИХ				
		БІКОМПОНЕТНИХ СИСТЕМ	223			
	12.1	Метод Кірквуда-Баффа та його застосування до				
		визначення ізотермічної стисливості	224			
	12.2	Аналітична модель парної функції розподілу	227			
	12.3	Надлишкова ізотермічна стисливість	229			
	12.4	Новий клас точних розв'язків диференційно –				
		різницевого рівняння руху для механічних збуджень в				
		одновимірному неоднорідному гранульованому				
		ланцюжку	233			
РИСУНК	ид	ОГЛАВ 1-12	239			
ПРЕДМЕ	ПРЕДМЕТНИЙ ПОКАЖЧИК					
СПИСОК	с ци	ТОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ	261			

Моїм рідним, дорогим і щиро любимим батькам: Івану та Ганні, сину Ростиславу, та моїй дружині Ганні із вічною вдячністю присвячується

Автор

ПЕРЕДМОВА

Гранульовані матеріали € невід'ємною складовою нашого повсякденно життя. Вони виступають базовим матеріалом для більшості індустріальних процесів. Внаслідок інтенсивної дисипації енергії з гранульованої системи вони потребують для мобілізації руху підводу енергії зовні. Діючи водночас, ці різні джерела створюють умови існування структурних рівнів організації гранульованої величезної кількості речовини. Перелік таких структур, які за своїм походженням є нерівноважними або асимптотично рівноважними (і безперечно суто нелінійними) явищами, набагато перевищує відомі. скажімо. гідродинамічні нестійкості потоків суцільної речовини і, до того ж, мають абсолютно іншу (дискретну) структуру і фізичну природу. На читача чекає знайомство з матеріалами, які без будь-якої зміни зовнішніх умов і навіть здатні самоузгоджено регулювати довжину (масштаб) щодо можливості зворотного відтворення попередніх станів. Вирішуючи будь-яку конкретну задачу за участю гранульованих матеріалів, ми постійно опиняємося на самоті з абсолютно новою. Невідомою системою і змушені створювати свій індивідуальний суто адекватний підхід до її розгляду. Якщо все це не налякало читача, автор запрошує до знайомства із книгою.

Власне кажучи, мова піде про побудування фізики піску (ну що може бути простішим за пісок?, див.Рис.1.1). На цьому шляху нас чекає дивовижна складність і навіть виклик, який своєю незвичайною поведінкою кидає нам, ця – на перший погляд проста система. Будуть отримані також висновки, які витікають з аналізу цієї складної, як буде з'ясовано (навіть у звичайних для фізичного розуміння аспектах), і навіть не повністю визначеної системи – гранульованої матерії.

Автор намагався дати читачеві певні уявлення про гранульований стан речовини, звернувши увагу перш за все на її незвичайні властивості, у порівнянні з типовими фазовими станами конденсованої матерії, тобто газами, рідинами, твердими тілами.

Теоретичні підходи, або напрямки експериментальних досліджень до вивчення цих надзвичайно цікавих матеріалів переслідують задачу стимулювання інтересу до застосування, як традиційних методів статистичної фізики газів, рідин та твердого тіла, так і новітніх підходів теорії нерівноважних нелінійних систем, з урахуванням зовнішніх факторів (форма, збурення) та внутрішніх процесів (дисипація). Для більш поглибленого вивчення питань, які відображені в монографії, додається список літературних джерел.

Згадуючи початок 90-х, коли починався оновлений інтерес до вивчення таких звичайних для нашої уяви систем, якими є гранульовані матеріали (з палітрою їх екстраординарних з точки зору «нормального» фізика властивостей), автор, який перебував серед ініціаторів цієї тематики, хоче згадати добрим словом тих, хто підтримував його роботу в цій галузі, і висловити їм свою щиру подяку. Це перш за все - мої батько та мати, син, та моя дружина, які витратили багато сил і здоров'я під час моєї роботи над рукописом. Маю висловити щиру вдячність моїм колегам з різних наукових центрів світу, які своїми підказками та вірою у вибраний предмет, методи та результати досліджень стимулювали мій інтерес до написання книги. І перш за все-моїм вчителям, професору І.З.Фішеру з Одеського державного університету, Академіку О.Г.Сітенко з Інституту теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова Національної Академії Наук України (Київ), та професору Ю.Л.Клімонтовичу з Московського університету ім. М.В.Ломоносова(Москва), які щиро ділилися зі мною своїми знаннями і навіть залишивши цей світ, продовжують надихати на творчі думки та дії. Я вдячний Г.Ніколісу та Р.Балєску (який нещодавно, на превеликий жаль, пішов з життя) з університету Брюсселя (Бельгія), П.Шраму з Ейндховенського університету (Нідерланди), С.Райсу з університету Джеймса Франка, Чікаго (Сполучені Штати Америки), К.Кітахара з Токійського університету (Японія), Д.Індекю з університету Лувен (Бельгия), І.Веретєннікофф з Вільного Університету Брюсселя, (Бельгия), Н.Вандеваллє та членам групи GRASP з університету Льєжа (Бельгия), Г.Мондіо, П.Мілліардо, Ф.Аліотта та С.Вазі з університету Мессини (Італія), К.Точчі з університету Палермо (Італія) та, А.Фраталоччі з університету KAUST(Саудівская Аравія), та багатьом іншим (яких за браком місця неможливо перелічити всіх), за стимулюючі дискусії та плідну співпрацю на протязі часу роботи над книгою. Користуючись можливістю, хочу висловити щиру подяку людині, яка найсуттєвішим чином вплинула на мій світогляд у фізиці і у житті, спрямувавши інтерес до вивчення найбільш складних систем та явищ у природі - Лауреату Нобелівської премії, професору І. Р. Пригожину і тим вшанувати його світлу пам'ять.

Хочу висловити велику подяку рецензентам, Академіку України А.Г.Загородньому та Чл.-корр. О.В.Чалому, уважне ставлення яких до

матеріалів монографії і корисні підказки вийшли далеко за межі формальних обов'язків рецензентів і сприяли поліпшенню окремих її розділів.

Велике спасибі за підтримку моїм колегам та друзям з Одеського екологічного університету і особисто - Ректору ОДЕкУ, професору С.М.Степаненко, яку я отримував на протязі роботи над матеріалами, що увійшли до змісту книги. Сподіваюсь, що вона буде корисною викладачам, науковим співробітникам, аспірантам і студентам фізикотехнічних, а також міждисциплінарних спеціальностей (таких, наприклад, як екологія) вищих навчальних закладів і наукових установ, і залишаю читача наодинці з її змістом.

Значною мірою джерелом у формуванні точки зору автора на ефекти, явища та проблеми висвітлені у книзі, були його особисті публікації, присвячені окремим розділам фізики гранульованої матерії, деякі з яких перелічені нижче.

Gerasimov O.I., Mondio G. Electrical conductivity of granular matter. //Progress in Condensed Matter Physics. (Ed. by G.Mondio), Messina (Italy), 2004, 600 p.

Герасимов О.І. Елементи фізики довкілля: Навчальний посібник – Одеса: Вид-во "ТЭС", 2004.-144с.

Gerasimov O.I., Schram P.P.J.M., Zagorodny A.G. Ordering effects in colloidal suspensions within the charged hard-spheres model. //Physica B.-1996.-No3.-P.41.

Gerasimov O.I., Schram P.P.J.M. Static correlations in the ordered colloidal systems. //Cond. Matt. Phys. (Lviv, Ukraine).-1999.-V.2.-№3(19).-P.401.

Gerasimov O.I., Idomskyy V.A., Schram P.P.J.M. Compaction of Granular Graphite in a vertically vibrated container with restricted geometry. //Cond.Matt.Phys. (Lviv, Ukraine).-2001.-V.4.-No1(25).-P.161.

Gerasimov O.I., Schram P.P.J.M. Differential equation of state of model system with singular measure: applications to granular materials in steady states. //Physica A, 2002, 312, p.172.

Gerasimov O.I., Schram P.P.J.M., Kitahara K. Kinetics of granular segregation. //Ukr.J.Phys.-2003.-48.-N8.-P.885.

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. //Ukr.Journ.Phys. -2005.-50, No6. -P.624.

Герасимов О.І. Гранульована матерія: складне в простому. //Вісник ОДЕКУ.-2005.-№1.-С.206.

Герасимов О.І., Співак А.Я., Худинцев М.М., Клименков О.А. Транспорт енергії (імпульсу) в модельних низьковимірних дисипативних системах. //Вісник ОДЕКУ.-2008.-№6.-С.225.

Герасимов О.І., Вандевалле Н., Співак А.Я., Худинцев М.М., Люмє Г., Дорболо С., Клименков О.А. Стаціонарні стани у 1D моделі системи непружних частинок. //Укр. фіз. журн. – 2008. – Т.53, №11.-С.1129.

Герасимов О.І. Структура та динаміка гранульованих матеріалів. //Доповіді НАН України.-2010.-№11.-С.59.

Gerasymov O.I. Structure and dynamics of granular materials perturbed by external fields.//Ukr.Journ.Phys.-2010.-Vol.55, №5.-P.560.

Герасимов О.І., Сомов М.М. Локальна структура гранульованих матеріалів. //Вісник ОДЕКУ.-2010.-№10.-С.221.

Герасимов О.І., Співак А.Я. Кінетична дисперсійна модель середнього поля для ущільнення гранульованих матеріалів. //Вісник ОДЕКУ.-2010.-№9.-С.190.

Герасимов О.І., Співак А.Я. Кінетична модель ущільнення у гранульованих матеріалах.//Вісник ОДЕКУ.-2010.-№10.-С.266.

Герасимов О.И. О новом классе точных решений дифференциально-разностного уравнения движения для механических возбуждений в одномерной неоднородной гранулированной цепочке. //Вісник ОДЕКУ.-2011.-№11.-С.198.

Герасимов О.І., Сомов М.М. Стереологічний аналіз локальної структури гранульованих матеріалів (метод Вороного). //Вісник ОДЕКУ.-2011.-№12.-С.215.

Герасимов О.І., Вандевалле Н. Щодо точних розв'язків задачі про перенесення імпульсу у неоднорідному гранульованому ланцюжку. //Доповіді НАН України.-2012.-№8.-с.67.

Герасимов О.І., Співак А.Я. Моделювання руху механічних збуджень у одновимірних неоднорідних гранульованих ланцюжках: вплив граничних умов. //Вісник ОДЕКУ.-2012.- №14.-с.217.

Герасимов О.І., Сомов М.М. Ентропійна модель для опису вертикального профілю густини у гранульованих матеріалав у гравітаційному полі. //Вісник ОДЕКУ. – 2012.-№14.-с.224.

Lumay G, Dorbolo S, Gerasymov O and Vandewalle N., Experimental study of a vertical column of grains submitted to a series of impulses. //Eur. Phys. J. E -2013.-Vol.36.- N16.

Герасимов О.І., Загородній А.Г., Сомов М.М. Щодо аналізу структури гранульованих матеріалів. //Укр.фіз.журн. – 2013.-Т.58, №1.- с.32.

Герасимов О.И., Худынцев Н.Н. Распространение электромагнитных волн в модели 1D гранулированной системы в приближении виртуальной упорядоченности. //Вісник ОДЕКУ.-2013.- №15.-с.197.

Gerasymov O., Spivak A. Kinetic model of compaction in granular materils.//Ukr.J.Phys.2015.Vol.60,N5.-p.253.

Герасимов О.І.,Сомов М.Статистчний опис надлишкових властивостей бікомпонентних систем .//Укр,фіз.журн.2015.т.60,N4,с.326.

О.І.Герасимов, Одеса, травень, 2015.

ГЛАВА 1

ФІЗИКА ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ : СТАН І ПЕРСПЕКТИВИ ДОСЛІДЖЕНЬ

Монографія присвячена огляду методів та стану досліджень в актуальному напрямі сучасної фізики м'якої матерії, що нестримно розвивається: фізиці гранульованих матеріалів, які виявляють унікальні властивості, проміжні по відношенню до відомих агрегатних станів - газів, рідин, аморфних і твердих тіл і є складними, багаточастинковими, істотно нелінійними, динамічними, дисипативними, мікромеханічними системами.

Висвітлюються деякі типові, навіть екстраординарні структурні і динамічні властивості, а також обговорюються окремі напрями їх досліджень. Розглядаються методи, проблеми і перспективи розвитку загальної теорії, фізичного і чисельного моделювання таких матеріалів, їх адекватність, а також можливості їхніх практичних застосувань.

Перелік тем та питань, присвячених опису сучасного стану досліджень, перспектив розвитку і застосування в новітній галузі фізики м'якої матерії, пов'язаної вивченням фізичних 3 властивостей гранульованих матеріалів (ГМ), низка тем, на яких сфокусовані зусилля теоретиків і експериментаторів в цій області, вражає, як широтою охоплення, так і концептуальною глибиною опрацювання базових положень. Якщо до цього додати без перебільшення екстраординарний мало не більшості основних властивостей, що проявляються характер а також можливість їх дослідження гранульованою матерією, за допомогою спостережень практично неозброєним оком, унікальний характер цієї галузі фізики стає очевидним. Глобальний масштаб, в якому представлені гранульовані матеріали в довкіллі, перетворює завдання розуміння законів їх поведінки на затребуване вже з точки зору забезпечення самої безпеки життєдіяльності людства. Як приклад, що ілюструє відзначену обставину на рис. 1.1, 1.2, 1.3 наведені лише деякі катастрофічні ситуації пов'язані з проявом гранульованою матерією її окремих, унікальних з точки зору фізики і катастрофічно небезпечних для спілкування з ними, властивостей (дюни, що поширюються в пустелі, "поїдаючи" оазиси цивілізації, непружний колапс і пов'язана з ним критична напруга, що спричиняє руйнування конструкцій місткостей зберігання, в'язкопружні властивості хитких пісків). І це тільки незначна частина в переліку подібних властивостей і пов'язаних з ними явищ!

Як вже відзначалося, дослідження структури і фізичних властивостей ГМ становлять дуже значну частину зусиль фізиків, як теоретиків, так і експериментаторів [1-6]. Серед причин, що привели до такої концентрації зусиль, зазвичай вказується прояв ГМ незвичайних для типових агрегатних

станів речовини властивостей. І дійсно, наприклад, такі явища як, скажімо, флюїдизация сухих ГМ під дією зовнішніх полів (осипання похилих насипів), насичення тиску у вертикальній ємкості, що містить ГМ (ефект "арки"), сегрегація (розподіл сухих сумішей, наприклад, ефект "Бразильського горіха") і деякі інші проявляються тільки в ГМ.

Інтерес до вивчення ГМ також зумовлений важливістю розуміння їх фізичних властивостей для раціоналізації промислового виробництва і можливістю створення на їх основі принципово нових наукомістких технологій. ГМ широко представлені в довкіллі і використовуються у виробництві (пудра, пісок, цемент, графіт, вугілля, зерно, сипкі порошки і суміші в харчовій, будівельній і хімічній промисловості, металургії, грунт і навіть Всесвіт - ось далеко неповний список такого роду об'єктів, див. Рис.1.5).

За деякими оцінками, більше 60% усього світового промислового виробництва повністю засноване ,або частково використовує ГМ різної дисперсності: від мікропудр з розмірами гранул близько декількох мікрон до геологічних структур з розмірами окремих кам'яних монолітів в декілька метрів і більш. Нарешті Всесвіт, з деякими обмовками, також може бути віднесений до одного з прикладів розріджених гранульованих систем (гранульований газ, див. Рис. 1.6).

Багато унікальних властивостей гранульованої матерії спостерігалися досить давно. В зв'язку з цим, досить згадати спостереження Фарадеєм нелінійних хвиль на поверхні піщаного шару, поміщеного в поле віброприскорень, здійснене їм близько 160 років тому.

Матеріали, з якими ми стикаємося в нашому повсякденному житті, ми зазвичай класифікуємо з точки зору їх агрегатного стану ,як гази, рідини або тверді тіла. А до якого з перерахованих станів конденсованої матерії, можна віднести гранульоване середовище? Адже вона може "текти" з похилої площини, як лавина (див. Рис.1.7), або набувати форми посудини, куди ми її поміщуємо (насипаємо) подібно до рідини. Кожна, окремо взята гранула, скажімо пісок, безумовно - тверде тіло, проте конгломерація гранул вже показує властивості абсолютно нетипові для звичайних агрегатних станів (і для твердих тіл зокрема).

12



Рис.1.7 Флюїдизація приповерхневого шару на похилій площині

Поведінка гранульованих матеріалів при маніпуляціях над ними дійсно виглядає абсолютно специфічно. Так, наприклад, якщо повільно насипати пісок на підкладинку, то пагорб ростиме, зберігаючи конусоподібну форму, поки кут біля основи розчину не досягне деякого критичного значення. Після досягнення цього критичного параметра починається осипання верхніх шарів насипу, яке зовні нагадує лавину. Причому в лавиноподібному русі беруть участь лише частки, що належать шару деякої товщини, - поблизу поверхні конусоподібного насипу, тоді як інший масив залишається в стані спокою. Дуже багато матеріалів, які оточують нас в повсякденному житті, становлять основу різних галузей індустрії (будівельної, хімічної, фармакологічної, харчової) знаходяться, стані. гранульованому Взагалі. серед якраз, В споживаних 1 використовуваних людством матеріалів в переважній більшості, на тій або іншій стадії виробництва, обробки, або споживання, вони знаходяться, переважно, або в рідкому, або в гранульованому станах.

Тим більше дивно, що розуміння фізичної природи багатьох процесів, що відбуваються в гранульованих матеріалах, досі відсутнє або досягнуто частково. Такий стан справ привів навіть до того, що деякі виробництва, що використовують гранульовані матеріали, зустрілися з явищами, які можливо пояснити лише визнавши існування специфічних властивостей гранульованих матеріалів (непружний колапс), що проявляються під впливом зовнішніх обурень.

Ми, наприклад, на власному досвіді можемо легко переконатися, що змочений деякою кількістю води пісок, здатний утримувати форму конструкції (піщані замки, які ми із задоволенням зводимо на пляжі, див. Рис.1.8).

Та ж сама вода, але вже в більшій кількості, здатна розмити конструкції з сирого піску, позбавивши її стійкості. Відомо, що під час землетрусу мокрі грунти пливуть подібно до рідин. А, скажімо, з явищем, що дістало назву "Хиткі піски", добре знайомі, принаймні, ті з нас, хто ризикнув пересуватися по піщаному ґрунту (наприклад, в пустелі) на транспортному засобі.

Таким чином, окрім перспектив ефективного застосування гранульованих матеріалів у зв'язку з їх унікальними властивостями, в технологіях, розвиток фундаментальної теорії, яка дозволила б зрозуміти і передбачати особливості їх поведінки, є дуже актуальним завданням.

На перший погляд, побудова фізичної теорії в основній своїй частині повинна враховувати такі аспекти:

Тертя між частками, що власне обумовлює дисипативний характер системи і, як наслідок, її незвичайну (нелінійну) поведінку залежить від природи, форми, розмірів часток - гранул, а також від середовища, в яке вони поміщені (наприклад, вода).

Властивості і поведінка гранульованих матеріалів часто нагадують статистичні, хоча за своєю природою гранульований матеріал - механічна система, яка лише зовні показує колективну поведінку ізоморфну статистичній,як вважається, внаслідок своєї нелінійності. Саме "колективний характер" поведінки гранульованих матеріалів мають на увазі, коли використовують термін "статична механіка гранульованих матеріалів". Насправді, як вже вказувалося вище, йдеться про їх колективну поведінку, зовні ізоморфну поведінці статистично визначених систем.

Сказане стає зрозумілим, якщо помітити, що в упакованому стані в гранульованому матеріалі кожна окрема частка торкається тільки декількох найближчих сусідніх гранул - частинок (що знаходяться в межах першої, або найближчої визначеної координаційній сфери). Така система з, так званим, ближнім порядком в локальній структурі, внаслідок нелінійності. обумовленої дисипативними процесами, глобально поводиться в істотній залежності саме від локальної міри впорядкованості. Слід зауважити, що вплив дисипативних ефектів часто маскується властивостями вільного об'єму, незайнятого гранулами в ході динаміки. Саме цей останній ефект оголошується відповідальним за формування макроскопічних властивостей гранульованих матеріалів. Насправді, нелінійні сценарії в поведінці гранульованих матеріалів, такі скажемо, як поверхневі збудження (хвилі, осцилони, левітуючі шари і багато інших) зобов'язані своїм походженням саме дисипативним процесам.

Як вже говорилося вище, гранульовані матеріали можуть (за спеціальних умов) проявляти окремі властивості рідин. Втім, слід зазначити, що йдеться все-таки про властивості не цілком звичайних (сухих?) рідин. Згадаємо, наприклад, що шар гранул у вертикальному полі віброприскорень, за певних умов збурення, демонструє колективну поведінку, яка нагадує конвективний рух неоднорідно підігрітої рідини. Або, за певних умов, явище спливання фрагменту гранульованого шару над періодично збурюваній платформі (аналог ефекту Лейденфроста в

14

рідинах) .Обидва вказаних явища мають абсолютно самостійну фізичну природу, відмінну від своїх, так би мовити, класичних прототипів.



Рис.1.10 Конвективний рух та аналог ефекту Лейденфроста у збуджених гранульованих шарах

Шар гранул більшої товщини на однорідно збуреній у вертикальному напрямі горизонтальній підкладинці покривається сіткою осередків (патернів), що мають симетрію (наприклад - гексагональну), залежну від умов збудження, товщини шару і типу гранул. Вищеописане явище зовні нагадує те, що спостерігається під час тектонічних явищ на поверхні грунтів, причому, "рідка" гранульована фаза співіснує з "твердотілою". Описана властивість зовні виглядає ізоморфно по відношенню до явища формування комірців Бенара при конвективній нестійкості в шарі рідини, що підігрівається знизу, в гравітаційному полі. Хоча, знову звернемо увагу на те, вона має абсолютно відмінну від прототипа фізичну природу.



Рис.1.11 Нелінійні хвилі(патерни) на поверхні гранульованого шару, який збуджується через підкладинку

Гранульовані матеріали демонструють також явище, яке умовно можна було б назвати "скипанням". Воно спостерігалося в спрямовано збурюваному вертикально горизонтальному шарі гранульованого матеріалу (металеві дробинки). Це явище отримало назву осцилона. За деяких умов осцилони виникають парами і навіть групами, наочно демонструючи нелінійну природу.

Усі перелічені вище приклади, а також багато інших, які не були згадані, але відомі нам з повсякденного спілкування з гранульованими матеріалами в лабораторних умовах і в довкіллі, дозволяють вважати такі системи унікальною лабораторією для вивчення природи локального впорядкування і рівноваги, а також формування впорядкованих структур в мезо- і в макро-масштабах, що є одним з ключових питань фізики конденсованого стану речовини. Причому, відповідні спостереження можуть бути здійснені, якщо можна так висловитися, практично неозброєним оком. Можна сказати, що природа відкриває нам можливість вивчати можливість існування унікального явища - скейлинга при масштабуванні структури та макроскопічних властивостей конденсованої матерії! Масштабність застосування гранульованих матеріалів в різних промислових технологіях, низька енергоємність в маніпулюванні ними, а також їх присутність у натуральному вигляді в довкіллі вражає і не залишає сумнівів у важливості вивчення їх структури і динаміки поведінки в зовнішніх полях різної природи, розуміння механізмів формування їх властивостей і можливості управління ними. Перейдемо тепер ЛО які обговорення методів, застосовуються для вивчення окремих спостережуваних властивостей гранульованих матеріалів, поміщених в різні зовнішні умови.

Незважаючи на наявність численних досліджень, ще до порівняно недавнього часу існувало дуже обмежене розуміння тих фізичних законів, які лежать в основі спостережуваних в ГМ ефектів і явищ. Можна сказати, що і до теперішнього часу не існує загальновизнаного теоретичного підходу до опису багатьох спостережуваних фізичних властивостей ГМ. Відомий прогрес в їх вивченні вдалося досягнуть на шляху чисельного моделювання окремих властивостей на основі фізичних моделей, екстрапольованих із статистичної фізики, фізики твердого тіла, фізики суцільного середовища, а також з теорії динамічних систем [1-6,9-24].

Перед тим, як перейти до опису досліджень, які нині інтенсивно здійснюються на шляху вивчення фізичних властивостей гранульованої матерії, ще раз коротко нагадаємо деякі з її загальних ознак. Гранульовані системи є конгломератами з великого числа дискретних макроскопічних (з дисперсією від декількох мікрон до кілометрів!) часток, що взаємодіють лише за допомогою сил відштовхування. Їх зовнішня форма повністю визначається завданням граничних умов (наприклад, формою об'єму включення) і(чи) дією зовнішніх полів (наприклад, гравітаційних). Істотним є те, що діючі між гранулами в точці контакту сили відштовхування є за своєю природою дисипативними (наприклад, навіть в стані спокою, діють сили герцевского статичного тертя). Гранульований матеріал, таким чином, є нерівноважною, нелінійною, дисипативною,

17

багаточастинковою механічною системою, динаміка якої, вимагає, взагалі кажучи, спеціального визначення і безумовно відноситься до числа в рівній мірі актуальних і виключно складних завдань сучасної фізики.

Внаслідок своєї фізичної складності, гранульовані матеріали, незважаючи на уявну зовнішню простоту (ну що, насправді може бути простіше піску, який ми звично відчуваємо ступаючи по пляжу, або розчинної кави і ложки цукру до нього?), взагалі кажучи, поводяться відмінним чином в порівнянні з газами, рідинами і твердими тілами, хоча за деяких зовнішніх умов і можуть проявляти окремі ознаки вище перелічених типових агрегатних станів.

Необхідно постійно пам'ятати. ЩО будь-яка спостережувана поведінка гранульованого матеріалу, що зовні нагадує поведінку газу, рідини, твердого тіла - це насправді динамічне явище (адже гранульована матерія це механічна система!). Такі, зовні ізоморфні властивостям суцільного середовища явища, відбуваються тільки за певних спеціальних умов, наприклад, спеціальних рівнях інтенсивності вступу енергії в систему, міри і симетрії упаковки гранул, їх морфології, граничних умов об'ємів включення та ін. Помітимо, також, що внаслідок непружності зіткнень між гранулами, і відповідно, втрат енергії, що мають місце завдяки ним, гранульовані матеріали збурені ззовні практично відразу переходять в стан спокою після того, як припиняється підведення енергії. Далі, скажімо, окрема частка, що впала на підкладинку, навіть непружно відбиваючись від неї, підскакує протягом деякого часу, перш ніж зупинитися. Тоді, як такі ж гранули насипані в мішок, впавши разом з ним на підкладинку практично відразу зупиняються. Наведений приклад, контрастно демонструє відмінність колективної поведінки великого числа гранул від індивідуального (однієї гранули), причиною якого виступають непружні зіткнення між гранулами, що ведуть до дисипації повної енергії в системі.

Прогнозування властивостей, що проявляються ГМ при різних зовнішніх впливах може ґрунтуватися на моделюванні їх поведінки за допомогою теоретичних моделей і чисельних розрахунків. Складність полягає в тому, що досить непросто здійснити послідовний розрахунок взаємодії навіть двох частинок, що мають складну форму поверхні та відрізняються розмірами. Часто для спрощення завдання, приймають, що частинки мають форму твердих сфер, а на них діють сили тяжіння, статичного, або динамічного тертя, в'язкопружності. Сили, дію яких відчувають частки ГМ, - це сили пластичної деформації. Для розрахунку сил, які пов'язані з дисипацією енергії, необхідно знати параметри що характеризують матеріал гранул (такі, наприклад, як модуль Юнга, стала Пуассона). Більш менш реалістичне моделювання гранульованих систем вимагає врахування багатократних зіткнень великого числа часток, що таким чином, збільшує необхідні ресурси машинного часу.

Внаслідок дисипації енергії в гранульованій системі за рахунок герцевского тертя, вона знаходиться в нерівноважному стані навіть в умовах відсутності якого-небудь руху системи, як цілого, або окремих її елементів. Тому стандартні методи механіки, або статистичної фізики не можуть бути безпосередньо застосовані для опису процесів, шо відбуваються в ГМ. Моделі засновані на уявленнях про суцільне середовище, також виглядають, в загальному випадку, неадекватними в застосуванні до ГМ, оскільки останні є дискретними. Застосування флюїдизованої гідродинамічного підходу повелінки до опису гранульованих систем, яка спостерігається за спеціальних умов, хоча і використовується для параметризації, скажімо, стікання гранульованих потоків з похилих поверхонь, проте з точки зору загальної теорії носить досить штучний характер.

Вище відзначені обставини перетворюють завдання загального теоретичного опису гранульованих матеріалів, одночасно в складну, та таку, що інтригує, проблему сучасної фізики, а також суміжних з нею прикладних (зокрема, інженерних) дисциплін. Сучасна теорія динамічних дисипативних систем, поки що далека від завершеної форми і вирішення вище сформульованої задачі, таким чином, має сприяти розширенню концептуальної та елементної бази цієї галузі науки.

Для порівняння, нагадаємо, що у випадку скажемо теорії рідин, яка отримала загальне формулювання завдяки роботам Боголюбова, Борна, Кирквуда, Грина, Ивона (ББКГИ) [7,46] і багатьох інших дослідників, ми стикаємося з принципово іншою проблемою, яка полягає в пошуку методів інтегрування адекватних математичних вже коректно сформульованого завдання (навіть концепції!), у вигляді ланцюжків нелінійних інтегро-диференціальних рівнянь для багаточастинкових функцій розподілу часток. Відсутність загальної теорії динамічних дисипативних систем в гранульованих фазах робить, таким чином, актуальним застосування простих наочних (абстрактних) моделей і методів чисельного моделювання з метою вивчення окремих фізичних процесів, які відбуваються в ГМ за різних внутрішніх і зовнішніх умов (див., зокрема, перелік авторських досліджень, який наведений у передмові).

Дослідження фізичних моделей гранульованих систем, що знаходяться в полі тяжіння і віброприскорень, методами чисельного моделювання, дозволяють отримувати уявлення про динаміку їх поведінки. Скажімо, метод молекулярної динаміки (чи дискретної комп'ютерної механіки, як його ще називають) полягає в розрахунку руху кожної окремої частки з конгломерації великого їх числа і грунтується на формалізмі механіки Ньютона. Чисельне моделювання (чисельний експеримент) включає також методи Монте-Карло і клітинних автоматів. На цьому шляху досягнутий помітний прогрес в описі структури і окремих динамічних властивостей ГМ [5-10].

Істотний інтерес складають дослідження процесів кластеризації в спостережувані в безпосередніх фізичних експериментах ГМ. Деякі явища виглядають такими, що інтригують і до теперішнього часу. Тут варто згадати, експерименти по дослідженню поведінки (кластеризації) гранульованих матеріалів, які проводяться в космічному просторі в умовах повністю відсутньої гравітації. в ході зниженої i яких було експериментально підтверджено існування в ГМ специфічного типу кластеризації, відомого під назвою непружного колапсу (яке полягає в тому що непружні втрати в гранульованих матеріалах можуть призводити до режиму з формально нескінченним числом зіткнень за кінцевий Сценарії поведінки гранульованого матеріалу в стані проміжок часу). різноманітними: виявляються від простого колапсу дуже до неоднорідного. Колапс в дисипативних системах призводить до появи спостережуваних, як безпосередньо в експериментах з ГМ, так при їх чисельному моделюванні, довгих, ниткоподібних, ущільнених розподілів часток, а не до кластерів з сферичною симетрією в розподілі маси, як це можна було б очікувати з точки зору представлень теорії середнього поля. Відмітимо в дужках, що картина спостережуваних ниткоподібних кластерів нагадує розподіл галактик у видимій частині Всесвіту.

Фізичною причиною цього явища є непружний характер зіткнення між частками, що веде до дисипації енергії і, як наслідок, до нелінійного сценарію поведінки.

Якщо канонічне тлумачення про колапс у разі кульки, яка підскокує над підкладинкою в полі гравітації часто інтерпретується, як артефакт чисельного рахунку, то в ГМ такі стани можна вважати такими, що наочно проявляються в ході спостережуваної в них специфічної кластеризації.

Дуже перспективним можливим застосуванням цього явища, яке спостерігається лише в ГМ, в промислових технологіях може стати розробка технології сухого синтезу з прогнозованими фізико-механічними властивостями продукції.

До специфічних ефектів, які також спостерігаються в ГМ, і важливих в сенсі їх практичних застосувань, відноситься явище сегрегації (розподілу) сухих гранульованих сумішей, що відбувається під дією віброзбурень (а також похідний від нього - ефект Бразильського горіха) [3].

Таким чином, вивчення гранульованих матеріалів охоплює широкий перелік явищ, що відбуваються в масштабах від лабораторного до астрономічного, пояснення яких, кидає виклик канонічної мудрості фізики.

Зокрема, такі питання, як: чи являється явище непружного колапсу чимось більшим, ніж красива теоретична концепція, або ж це математичний артефакт; чи має це явище реальні експериментальні підтвердження; чи можливо встановити експериментально відмінність між непружним колапсом і непружною кластеризацією в загальному вигляді, і багато інших все ще чекають свого роз'яснення.

Деякі ідеї і методи, які розвиваються при дослідженні гранульованих матеріалів також можуть застосовуватися при вивченні складних статистичних систем, у формуванні властивостей, у яких істотну роль грають нерівноважні стани. Це фаза піни, хімічно реагуючі системи, колоїдні розчини, запилена плазма і деякі інші.

Серед першочергових завдань тих, що стоять перед дослідниками гранульованої матерії, окрім концептуальних і гносеологічного характеру, спрямованих на розуміння загальних фізичних принципів спостережуваних явищ, що лежать в їх основі, можна вказати на необхідність розвитку фізичних моделей адекватних окремим наочно спостережуваним властивостям гранульованих матеріалів різного типу при заданих внутрішніх і зовнішніх умовах.

На шляху побудови таких простих, наочних моделей, що допускають чисельне, а у ряді випадків і аналітичне рішення, і, як вже говорилося, адекватних тим або іншим рисам спостережуваних в гранульованих матеріалах ефектів, розвиваються, наприклад, підходи, що описують динамічні явища типу компактизації і сегрегації в гранульованих матеріалах, концептуальні підходи, які використовують елементи нелінійної кінетики динамічних дисипативних систем ЛО опису структуризації і дефектоутворення під дією зовнішніх обурень. Також розробляються чисельні алгоритми, які спрямовані на моделювання конкретних спостережуваних явищ в ГМ.

У наступних розділах монографії будуть проаналізовані дослідження деяких властивостей ГМ, що відкривають перспективи побудови як теоретичних концепцій так і їх новітніх технічних застосувань, а саме:

- неоднорідна кластеризація в одновимірних моделях часток; квазістационарні стани і нерівноважні переходи між ними; динамічна природа непружної кластеризації (колапсу);

- особливості асиметричного поширення збурень (наприклад, хвилевого типу) в гранульованих системах змодельованих низькорозмірними розподілами мішеней з урахуванням ефектів розупорядкування і дисипативних втрат, а також декорування;

- повільні критичні моди у релаксації поля щільності в кінетичному сценарії компактизації (сегрегації), заснованому на емпіричних підходах (типу Ландау-Гинзбурга та Канна-Хильярда) до опису кінетики адекватно визначеного поблизу асимптотичних квазістаціонарних станів поля параметра порядку та порівняльний аналіз ролі ефектів виключеного об'єму і непружних втрат.

Як би не були важливі і цікаві самі по собі загальні питання теорії нерівноважних, дисипативних, мікро-механічних систем, якими, як вже говорилося, являються гранульовані матеріали, на шляху їх застосування на практиці, у разі реальних ГМ, нас очікують проблеми, пов'язані з необхідністю врахування матеріальних співвідношень, зокрема: впливу параметрів, що характеризують як морфологію, геометрію, дисперсію і фізичні властивості самих гранул, так і об'єму включення, розмірності простору і численних інших, що кінець кінцем і визначає можливості і шляхи їх використання. Фізичні моделі, що розвиваються, повинні, таким чином, враховувати специфічні внутрішні, початкові і зовнішні умови, в яких реалізується структура і розвивається динаміка ГМ. У напряму з'ясування визначених питань і будуть орієнтовані відповідні розділи монографії.

ГЛАВА 2

ГРАНУЛЬОВАНА МАТЕРІЯ -ТОЙ САМИЙ ЗВИЧАЙНИЙ ПІСОК

Давайте знову повернемося до особливих прикмет якими, за певних умов, характеризується гранульована матерія.

У нашому повсякденному житті ми постійно зустрічаємося з різноманітними сипучими матеріалами - від дрібної пудри й борошна до піску й гравію. Вони настільки звичні, що мало хто замислюється, якими насправді дивними властивостями володіють всі ці системи.

Здавалося б, більшість сипучих матеріалів вже давно описана й вивчена. Однак в останні роки "текучі тверді тіла", і навіть пересічний їхній представник - пісок, усе сильніше приваблюють до себе увагу дослідників. Як з'ясувалося, процеси, що відбуваються в піщаній купі, мають безпосереднє відношення до самого широкого кола фізичних проблем, а загадкове поводження піску й схожих з ним речовин кидає серйозний виклик фізичні науці.

Спробуємо продемонструвати вищесказане на прикладі звичайного піску (див. Рис.2.1).

Якщо замислитися, сама різноманітність властивостей піску гідна подиву. Сухий, він, на нахилений поверхні здібний стікати, подібно воді. Однак, на відміну від рідини, досить легко витримує вагу людини, яка скажімо прогулюється уздовж берега.

А вже невеликої кількості вологи досить, щоб перетворити пісок у відчутно міцний будівельний матеріал (див. Рис.1.8).

Навіть у стані спокою пісок поводиться дивним чином. Здається очевидним, що, виявившись похованим під 30-метровою купою піску, людина відчуває набагато більший тиск, чим під 3-метровою. Як це не дивно, однак це не так.

Тиск типової рідини на дно посудини необмежено зростає пропорційно висоті її рівня. Тиск же гранульованої речовини навпаки, спочатку росте, потім досягає максимуму і далі залишається незмінним, тобто, насичується. Сили, що діють між частинками піску (гранулами) переносять надлишковий тиск на стінки резервуара. Саме тому кількість піщин, що проходять в одиницю часу через отвір, що з'єднує дві колби пісочного годинника, залишається приблизно сталою величиною. Швидкість же витікання води з отвору в баку в міру зниження рівня його заповнення безупинно зменшується у відповідності із законом Бернулллі, та формули Торрічеллі, що витікає с нього.

Щоб одержати інформацію про розподіл тиску усередині сипучої речовини, зазвичай будується фізична модель явища. Наприклад, якщо насипати скляні кульки в суміш води й гліцерину, який має такий же самий коефіцієнт заломлення, що й скло, тоді у звичайному світлі вони будуть непомітними, але у світлі, що є поляризованим експеримент виявить кольорові смуги, які визначають відповідні області неоднорідності напружень. В цьому випадку, кожна кулька буде обертати площину поляризації світла на кут, який є пропорційним до прикладеного тиску. Вимірюючи поляризацію світла, яке пройшло крізь зразок можна судити про розподіл тиску в матеріалі. Саме в таких експериментах було з'ясовано, що вага стовпа сипучої речовини переноситься від частинки до частинки уздовж сильно розгалужених ланцюжків цілком випадковим чином. У результаті на стінки об'єму, який вміщує речовину діє набагато більша частина ваги, ніж на підкладинку (див. Рис.2.2).



Рис.2.2 Зображення розподілу типу арка і діючих при цьому сил

Інші експерименти дозволили виявити дивні явища, які мають місце час від часу на елеваторах: зерно, засипане в бункер, раптово проламує бічну стінку, яка за всіма розрахунками здатна витримати діюче навантаження. Отримані дані свідчать про те що в деяких випадках вага зерна, розподілившись непередбаченим чином, випадково може досягти величезного значення в якомусь визначеному місці (див. Рис.2.2).

Опираючись на результати безпосередніх фізичних експериментів, були запропоновані прості двовимірні теоретичні моделі, засновані на припущенні, що кожна окрема частинка-гранула спирається на три, переносячи (перерозподіляючи) на них свою вагу. Розрахований в такий спосіб нерівномірний розподіл сил усередині сипучої речовини виявився в гарній згоді з даними експериментів і отримав власну назву - ефект арки (англійською мовою - arch-effect). Такі моделі, однак, не враховують тривимірний характер сил взаємодії, що залежать від кутів зіткнення часток і зчеплення (вологі частинки злипаються, а сухі - ні). Врахування згаданих факторів призвело до значного ускладнення моделей і майже однозначно спрямувало задачу їх розв'язку до застосування чисельних методів.

Якщо звичайний пісок просто висипати на стіл, він утворить конусоподібну купу. Відповідні експериментальні дослідження показали, що тиск, з яким вона діє на поверхню столу, сягає максимального значення не в центрі, під піком, а ближче до боків. Теоретичне пояснення цього явища виявилося непростою задачею. Зокрема була висунута гіпотеза, відповідно до якої піщана купа являє собою "лабіринт із арок", що простираються в різних напрямках. Подібно контрфорсам, що підтримують стіни й купол собору, вони перерозподіляють вагу купи до її країв, і таким чином перешкоджають зростанню тиску в центрі (див. Рис.2.3). Ця обставина напевно була добре відома римським будівникам широковідомих віадуків (див. Рис.2.3).

В рамках побудованої моделі було сформульовано повний набір рівнянь розв'язки яких дозволили розрахувати розподіл тиску на підкладинку купи піску. Отримані результати добре підтверджувалися експериментом. В "арковій моделі" робиться припущення, що орієнтація сил, які діють проміж частинками-гранулами кожного шару не залежить від наявності шарів, насипаних пізніше. Виявилося, однак, що використані в моделі математичні співвідношення істотно залежать від способу насипання купи, тобто від того, був весь пісок висипаний відразу, або ж піщини насипалися окремо одна за одною.

В експериментах також було з'ясовано, що розподіл сил суттєво залежить від найменшого прогину поверхні, на якій спочиває пісок. Комп'ютерне моделювання показало, що можливо є й інші механізми передачі сил між частинками, що впливають на розподіл тиску. Імовірно, що у подальшому вдасться об'єднати ідеї про силові ланцюжки й арки в єдину теоретичну картину, яка б пояснила механічне поводження гранульованих матеріалів, як глобально, так і в окремих частинах об'єму.



Рис.2.3 Римський акведук

Аматорам комп'ютерних ігор добре Знайома модель "тетріс", головна мета якої, домогтися найбільш компактного впакування падаючих один на одного блоків різної геометричної форми, обертаючи та пересуваючи їх.

Для багатьох ця гра стала звичним перепровадженням часу. Вона ж наводить на може трохи наївну ідею простої геометричної інтерпретації розміщення гранул (див. Рис. 2.4).



Рис.2.4 Модель "тетріс"

Основна ідея моделі геометричного впакування частинок сипучої речовини за принципом "тетріс" полягає в тому, що різна взаємна орієнтація сусідніх частинок призводить до їх певного фіксованого розташування. Об'єм, який займають частинки, може коливатися в досить великих межах, а перехід системи в більш енергетично вигідний стан перехід можна здійснити за допомогою утруднений. Однак цей зовнішнього струшування системи, яке призводить до більш компактної конфігурації. В результаті - загальний об'єм, який займає система зменшиться, а щільність зросте. При подібних "заторах" частинок у товщі сипучої речовини виникають порожнини й арки. Вони відіграють істотну роль при переході системи з однієї конфігурації в іншу. Відповідна задача дослідження полягає у тому, щоб з'ясувати, як саме спосіб приведення системи частинок у рівноважний (насправді - квазірівноважний) стан відбивається на макроскопічних властивостях її поведінки.

2.1 Пісочні замки

Пісочний замок, споруджений на пляжі, наочно демонструє суттєве розходження властивостей сухого і вологого піску. Вологі піщини легко з'єднуються, демонструючи різке зростання сил зчеплення, які в сухому піску визначаються головним чином нерівностями поверхні гранул (а тому, незважаючи на дисипативний характер, відносно невеликі). Злипатися їх змушують сили поверхневого натягу плівок води, які оточують кожну піщину.

Вода, змочуючи стінки тонкої трубки, може "піднятися" по них нагору на певну відстань Це явище (у англомовній літературі - wetting) пояснюється дією сил поверхневого натягу. Чим менше діаметр трубки, тим вище підніметься стовпчик води, тим відповідно більшою має бути сила, яка втримує його вагу. Коли стикаються дві вологі піщини, сили тієї ж самої природи (тобто сили поверхневого натягу) притягують їх одна до іншої і досить міцно "з'єднують".

Дивує, однак, якої малої кількості рідини потрібно для того щоб спостерігати описане явище у гранульованих системах. Зокрема експеримент із кульками з полістиролу, змоченими рідким маслом (полістирол не має пор, а масло дуже повільно випаровується – а це дозволяє точно контролювати кількість рідини в системі і забезпечує чистоту експерименту) виявив, що плівка рідини товщиною всього 50 нанометрів ($5 \cdot 10^{-6}$ см), що покриває кульки діаметром близько 0.8 міліметра, забезпечує досить сильне зчеплення, приводячи до наочно спостерігає мої монолітної стійкості всієї системи.

Для того щоб піщини, які торкаються міцніше зчіплювалися, воді достатньо лише покривати частинки (або їхні групи) тонкою плівкою, при цьому більша частина простору між ними залишається пустою, тобто заповненою повітрям. А що відбудеться, якщо кількість рідини стане поступово збільшуватися? Як тільки весь простір між піщинами в достатній мірі буде заповнено водою, дія сил поверхневого натягу зменшується і ми отримуємо систему у вигляді суміші піску і води, при цьому така система вже володіє зовсім іншими фізичними властивостями.

Напевно, кожному (особливо тим хто полюбляє голлівудські кінострічки) хоч раз доводилося чути, або читати про людей, що стали жертвами так званих "хитких пісків" (у англомовній літературі - quicksand). У здатності звичайного на вид піску проковтувати предмети і людей є щось містичне, однак це явище (якщо воно взагалі існує) має мати досить просте фізичне пояснення.

Уявіть, що ви крокуєте по пісочному берегу. Під ногами у вас злегка вологий пісок, він твердий і добре витримує вагу тіла. Нехай у цей час під товщею піску на глибині скажімо декількох метрів починає діяти підземне джерело. Якщо потік виявиться досить сильним, вода буде швидко підніматися нагору, заповнюючи простір між частинками і як би розсовуючи їх. Зчеплення різко зменшиться, пісок стане, так би мовити, "рідким", і ґрунт у буквальному порозумінні має попливти у вас із під ніг.

Таким чином, хиткий пісок - це самий звичайний пісок, під товщею якого виявилося висхідне джерело. Якщо рясні грунтові води рухаються в горизонтальному напрямку, точніше, під деяким нахилом, то утворюються так звані піски-пливуни. Взагалі кажучи, вони здібні засмоктувати тіла з поверхні, але оскільки вони менш насичені водою то цей висновок можна залишити і під сумнівом [8].

А що таке є це саме засмоктування? Хоча щільність хиткого піску приблизно в 1.6 рази більше щільності води, можна собі уявити, що плавати в хиткому піску набагато складніше. Він дуже в'язкий, тому будьяка спроба рухатися в ньому зустрічає сильний опір. Повільно рухаючись, поточна піщана маса не встигає заповнити виникаючу за зрушеним предметом порожнину і в ній має виникати розрідження, своєрідний вакуум. Сила атмосферного тиску прагне повернути предмет на колишнє місце і, таким чином, створюється враження, що пісок як би "засмоктує" свою жертву (див. Рис.1.4). Тут слід було б зауважити, що взагалі, пересуватися в хиткому піску можна тільки дуже повільно й плавно тому, що суміш води й твердих часток піску інерційна стосовно швидких рухів і у відповідь на різке збурення вона як би перетворюється на тверду приведений якісний речовину. Тому вище фізичний портрет спостережуваного явища має певні обмеження що до застосування у випадку довільних типів руху.

Найчастіше хиткі піски зустрічаються в горбкуватій місцевості. Спускаючись із гір, потоки води рухаються по каналах усередині доломітових і вапнякових скель. Десь нижче за течією вода може пробити камінь і спрямувати нагору потужним потоком. Якщо на поверхні перебувають піщані відкладення, то потік води, що йде знизу, перетворить їх у хиткі піски. Сонце може підсушувати верхній шар піску, створюючи тонку тверду скоринку, на якому навіть проростає трава. Зовні таке "піщане болото" виглядає цілком спокійно і не викликає жодних підозр. Але ми вже знаємо, що можна очікувати від такої системи внаслідок іі фізичних властивостей.

Можна собі уявити і більш тривіальний механізм перетворення звичайного піску в хиткий: треба просто гарненько його потрясти тобто збурити.

Так 7 червня 1692 року прибережне місто Порт-Ройяль на острові Ямайка став жертвою землетрусу, у результаті якого більша частина міста

зникла в морській безодні. Довгий час вважалося, що місто просто "сповзло" у море під дією підземних поштовхів. Однак останні дослідження показали, що це не так. Виявляється, Порт-Ройяль був "проковтнутий" багатомірними піщаними відкладеннями, на яких він покоївся. Поштовхи землетрусу викликали енергійні коливання окремих піщин. Вібрації зменшили зчеплення між частинками, порушили щільну структуру піску. Збурені піщини відокремилися одна від одної й здобули незалежність у русі. Пісок став плинним, і місто, що втратило монолітну опору, почало "тонути". Коли землетрус припинився, пісок знову "затвердів", поховавши у своїх надрах дві третини міста з більше як двома тисячами жителів. Сучасники цих подій сприйняли катастрофу як прояв гніву Господня, що обрушився на нечестиве місто. Адже в ті часи Порт-Ройяль - місто піратів і найбільший ринок рабів - давно користувався дурною славою, як у Старому, так і у Новому Світі. Наш нескладний якісний сценарій цього явища спонукає до іншої думки ми маємо справу з чисто фізичним ефектом у навколишньому середовищі причому він відбувається саме за суттєвою участю гранульованих матеріалів, які складають предмет книги.

Таким чином, ми дійшли до висновку, що у всякому разі, будувати замки, або пересуватися на піску треба дуже обережно, і про всяк випадок, бути напоготові до можливого протікання описаних явищ (див. Рис.1.4).

2.2 Голос пустелі

"Пісня пісків, пісня сирен, що заманюють мандрівників на неминучу загибель у безводній пустелі, дзвін монастирів, похованих у безодні пісків..." - так описує свої враження англійський дослідник Р. А. Багнолд автор першої книги про співаючі піски, що вийшла у світ в 1954 році [8]. Кочівники, яким доводилося чути ці таємничі звуки, вважали їх голосами примар і демонів, що живуть у піщаних дюнах. І хоча сьогодні фізикам вже відомо, що акустичні коливання виникають у результаті специфічних видів руху шарів піску, повністю пояснити це явище не вдалося до тепер.

Розрізняють два види співучих пісків – "стугонливі" і "свистячі", які відрізняються частотою й тривалістю звуку, а також умовами, за яких він виникає.

Найпоширеніші "свистячі", або піски які пищать, названі так через здатність видавати короткі, триваючі менш чверті секунди, звуки високої частоти - від 500 до 2500 Гц. Прогулюючись по такому піску, можна почути під ногами легке посвистування. Звук відрізняється музичною чистотою й може вміщувати п'ять-шість гармонік-обертонів. Зустрічаються свистячі піски на морських узбережжях, на берегах рік й озер по усьому світу.

Акустичний спектр стугонливих пісків дуже вузький: вони видають звук майже однієї частоти, що триває, завмираючи й підсилюючись на протязі кількох секунд (див. Рис. 2.5)



Рис.2.5 Акустичний спектр стугонливих пісків

Звуки пісків які свистять мають кілька кратних частот (обертонів) і тривають десь біля чверті секунди (див Рис.2.6).



Рис.2.6 Спектр стугонливих пісків

Більш рідким й унікальним явищем вважаються "стугонливі" піски. Почути їх можна тільки знаходячись глибоко в пустелі поблизу окремих великих дюн. Обсипаючись лавинами, такі піски видають голосний звук низької частоти (50-300 Гц), що триває зазвичай кілька секунд(але іноді й до декількох хвилин). Звук може досягати такої сили, що розноситься на відстані у кілько кілометрів, і нерідко супроводжується вібраціями ґрунту (сейсмічними поштовхами), у багато разів більш інтенсивними, ніж звукові коливання. На відміну від свистів звучання стугонливих дюн крім основної частоти містить безліч близьких частот. При цьому ніколи не зустрічається більше однієї гармоніки основного тону.

Протягом сторіч цей "гул" викликав марновірний жах у жителів пустелі, породжуючи масу легенд і сказань. Так, Марко Поло в 1295 році писав про злі пісні пустелі, які "часом наповнюють повітря звуками всіляких музичних інструментів, б'ють у барабани й ляскають у долоні". Звучання стугонливих пісків часом нагадує барабанний дріб, іноді звуки труби, арфи й навіть дзвонів. Сьогодні його нерідко порівнюють із дзижчанням телеграфних проводів або пропелерів літака, що низько летить. Нам відомо більше 30 стугонливих дюн у Північній і Південній Америці, Африці, Азії, на Арабському півострові й на Гавайських островах.

Ту обставину, що свистячі піски зустрічаються в основному на узбережжях, а стугонливі - тільки глибоко в пустелях, можна, очевидно, пов'язати із тим що вони по різному реагують на вологість.

Щоб пісок "загудів", як свідчить дослідницький досвід необхідно як мінімум кілька тижнів посухи: піщини повинні бути абсолютно сухими. Навіть при невеликій атмосферній вологості на їхній поверхні утвориться тонка плівка води, що перешкоджає звучанню, а кількома краплями води можна змусити "замовкнути" цілий літр стугонливого піску.

Свист також виникає тільки в сухому піску. Однак для кращого звучання просто необхідно періодичне промивання свистячого піску водою. У такий спосіб навіть вдається "пожвавити" пісок, що втратив здатність співати. Можливо, це пов'язане з тим, що вода вимиває з піску забруднення, а сам він стає більш пухким. У всякому разі свистячі піски рідко простираються в глиб узбережжя більш ніж на два-три десятки метрів.

Очевидно, що акустичні коливання породжують взаємодію великих об'ємів піску. А чи мають при цьому якісь особливі властивості окремі піщини співучої речовини?

Середній діаметр частинок будь-якого піску складає приблизно 0,3мм. Помічено, що для співучих пісків характерна висока моно дисперсність, тобто відхилення розмірів частинок від середнього значення невелике: піщини стереотипно кажучи "добре підібрані". Це може взагалі кажучи сприяти легкому ковзанню шарів піску, необхідному для виникнення звуку. Тут треба зауважити: існують стугонливі дюни, що складаються з піщин найрізноманітніших розмірів, у той час, як багато пісків з "добірними" частинками мовчать. В цьому ще раз проявляється той виклик, який своїми таємницями і нез'ясованими фізичними властивостями кидає дослідникам гранульована матерія.

Так виглядає "співаючий" пісок під електронним мікроскопом (див. Рис.2.7). Окремі піщини мають розмір від 0.3 до 0.6 мм. Поверхня піщин дуже гладка: висота її нерівностей не перевищує декількох мікронів.



Рис.2.7 "Співаючий" пісок під мікроскопом

Частинки у співучих пісках мають форму, близьку до сферичної і гладку, без грубих нерівностей поверхні. Особливо добре відполіровані піщини стугонливих дюн: розмір їхніх нерівностей не перевищує декількох мікронів). Перш ніж утворити стугонливу дюну, піщини довго блукають по пустелі під дією вітру, зіштовхуються й перекочуються, шліфуючись роками. Таким чином, не випадково, що стугонливі дюни зустрічаються, як правило, ближче до того краю пустелі, убік якого віє пануючий вітер.

Однак, як завжди, коли ми маємо справу з гранульованими матеріалами, і тут не обійшлося без виключень. Дослідження стугонливої Піщаної гори в пустелі Калахарі показали, що далеко не всі піщини мають гладку поверхню й округлу форму. Більше того, в 1936 році в лабораторних умовах було виявлене гудіння кубічних кристалів звичайної повареної солі. З іншого боку, ще нікому не вдалося змусити зазвучати гладкі скляні кульки. Імовірно, що для генерації звуку частинки все-таки повинні мати деяку жорсткість та морфологічну складність.

Який же механізм виникнення акустичних коливань? Найбільш визнана в цей час теорія англійського інженера й дослідника Р.А.Багнолда. Його робота, що вийшла в 1966 році, стала першим систематичним дослідженням феномена звучних пісків [8].

Бэгнолд вважав, що, незважаючи на істотні розходження у властивостях стугонливих і свистячих пісків, виникнення звуку в них керується одним і тим самим механізмом. Розглянемо цей механізм на прикладі стугонливої дюни.

Спочатку дюну треба "створити". Головна роль тут належить вітру. Як тільки сила вітру досягає певного значення (приблизно 10 кілометрів на годину), піщини починають переміщатися стрибками, частота і напрямок яких визначаються силою і напрямком вітру. Піщини, що підскакують, стикаються подібно більярдним кулям, одночасно бомбардуючи поверхню піску під малим кутом. Такий рух часток піску приводить до утворення хвилястого рельєфу на піщаній поверхні, який носить назву дюн. Подібно хвилям на воді, дюни переміщаються в напрямку вітру. Висота їхніх гребенів і відстань між ними ("довжина хвилі") ростуть у міру посилення вітру.

Так виникає "стугонлива" дюна. Вітер довго перекочує піщини по пустелі, і збирає пісок у довгі гряди. Дощ вимиває з піску забруднення й домішки, а сонце висушує його. Чистий сухий пісок утворює схил з деяким кутом нахилу (див. Рис. 2.8).



Рис.2.8 Стугонлива дюна

Пісок по схилу обсипає шарами, які сковзають із різною швидкістю. Окремі піщини при русі обертаються, періодично провалюються в шар, який знаходиться нижче і повертаються назад. Поверхня при цьому, як би вібрує, породжуючи звук (див. Рис. 2.9).

Коли кут нахилу дюни з підвітряної сторони наближається до деякого критичного, пісок починає обсипатися. Фізика цього явища, яке отримало назву лавини, надзвичайно цікава і вміщує багато явищ, що інтригують, зокрема флюїдизацію поверхневого шару та немонотонну поведінку потоку (детальніший аналіз вказаних явищ буде надано у наступних розділах книги). Верхні шари дюни сковзають по нижнім, подібно картам у колоді. У той же час окремі частинки в кожному шарі обертаються навколо своєї осі, періодично провалюючись у нижні шари і знову виштовхуючись із них. Багнолд припустив, що цей вібруючий рух і призводить до виникнення звуку. Чим більший об'єм піску бере участь в утворенні лавини й чим довше окремі шари частинок не змішуються один з одним, зберігаючи свою індивідуальність, тим вище інтенсивність і тривалість звуку.



Рис.2.9 Шарувата поверхня співучої дюни

Теорія Багнолда була заснована на двох ключових поняттях – "шаруватість" й "пухкість". Під першим мається на увазі здатність сипучого матеріалу до пошарового переміщення, обумовленого дією сил тертя; друге виступає мірою порожнього об'єму, який залишається між піщинами й визначається за допомогою відношення середньої відстані між частками до їхнього середнього діаметра (так званий вільний об'єм). Щільно втрамбований пісок проявляє властивості твердого тіла і не може обсипатися, у той час як у дуже пухкому піску дій сил тертя між частинками недостатньо, щоб забезпечити шаруватий рух. Багнолд показав, що опадання звучного піску відбувається при значенні "пухкості" порядку 0.1. Під час пошарового руху, що супроводжується перевертом піщин, відбуваються коливання цієї величини біля деякого середнього
значення. Поверхня шару вібрує подібно мембрані, породжуючи звук. Його частота описується за допомогою емпіричного виразу:

$$f = \sqrt{\frac{gL}{8d}}$$
,

де g - прискорення вільного падіння, d - середній діаметр часток, а L - міра "пухкості".

Проста й наочна фізична модель Багнолда на жаль вельми далека від досконалості. Вона, зокрема, не дозволяє зрозуміти чому гудіння дюни містить у собі кілька різних частот і супроводжується сейсмічними коливаннями. Взагалі описаний моделлю механізм більше підходить для пояснення процесів, що відбуваються у свистячих пісках. Різниця складається лише в тому, що шари свистячого піску зрушуються під дією зовнішнього тиску (скажімо, стопи людини, що йде по піску), у той час, як стугонливий пісок обсипає лавинами під власною вагою.

I все-таки припущення Багнолда про єдиний механізм співу у свистячих і стугонливих пісках, очевидно, недалеко від істини. Як аргумент на його користь можна послатися на лабораторні дослідження, в яких вдалося одержати акустичні коливання високої частоти в піску, узятому зі стугонливої дюни Келсо на південному-сході Каліфорнії. Звук, однак, вийшов менш чистим у порівнянні зі звучанням дійсного свистячого піску.

Англійський фізик Карус-Вильсон наприкінці XIX століття припустив, що провідну роль у виникненні звуку грають сили тертя. Він же помітив характерні риси співаючих піщин - їхню сферичність, гладкість і малу дисперсність (розбіг за розмірами).

Деякі дослідники намагалися пов'язати акустичний ефект із електричною взаємодією між піщинами. Справа в тому, що пісок складається головним чином із двоокису кремнію, тобто кварцу. А частки кварцу мають п'єзоелектричні властивості: під дією тиску протилежні грані нейтральної частинки здобувають заряди різних знаків. Очевидно, що між зарядженими частками повинні виникати сили електростатичного притягання й відштовхування. І дійсно - при спостереженні за лавинами стугонливого піску в пустелі Калахарі було замічено, що піщини, що обсипають, нерідко зчіплюються у тонкі нитки довжиною біля сантиметра. Виміри показали, що вони несуть заряд. Проте всі спроби пов'язати звучання пісків з електричною взаємодією частинок поки не увінчалися успіхом. Можливо, головну роль в акустичному феномені грають все ж таки сили тертя. От вже більше сторіччя дослідники б'ються над загадкою співаючих пісків, однак питань, як і раніше залишається більше, ніж відповідей. Будьяка спроба встановити загальні закономірності зіштовхується з тим, що виключень виявляється більше, ніж правил. Можливо, варто зайнятися дослідженням саме цих виключень?

У цьому сенсі великий інтерес представляють звучні піски Гавайських островів. До тепер мова йшла про піски, що складаються винятково із кварцових частинок. Піски островів Кауаи й Ниихау - єдині звучні піски, що складаються не із кварцу, а із часток карбонату кальцію діаметром порядку половину міліметра, що утворилися з морських черепашок, змішаних із кремнієвими панцирами мікроскопічних водоростей діатомей розміром від однієї тисячної до однієї десятої міліметра. Звучання гавайських пісків нагадує гавкіт собаки. Звичайно ці піски зараховують до стугонливих пісків, хоча багато дослідників схильні виділяти їх в окремий клас "гавкаючих" пісків.

У цей час кількість звучних пісків на нашій планеті стрімко скорочується. Це пов'язане з інтенсивним рухом транспорту на узбережжях й у пустелях, з розвитком масового туризму, забрудненням повітря й води. Можна сказати, що музичні здібності пісків служать природним індикатором екологічного стану Землі.

Захист унікального природного явища від повного знищення вимагає спеціальних мір. Із цією метою 17 листопада 1994 року в японському місті Нима був скликаний Всесвітній симпозіум по "співаючим" піскам. На ньому обговорювалися завдання збереження й відродження звучних пісків на основі міжнародного співробітництва й наукового підходу до проблеми.

Центром руху в захист співаючих пісків від знищення стало японське місто Нима. З березня 1991 року там відкрився Музей піску, де зібрані унікальні колекції пісків із усього миру. Знаменитий цей музей і тим, що в ньому перебуває найбільший у світі пісковий годинник: п'ять метрів у висоту й метр у діаметрі. Протягом цілого року тонна піску пересипається з верхнього резервуара годинника у нижній. В останній день кожного року, рівно опівночі, місцеві жителі акуратно перевертають цей гігантський пісковий календар - і все починається спочатку.

В епоху пліоцену - 300 мільйонів років тому - японське містечко Осодаки перебувало на узбережжі, про що свідчать численні піщані відкладення на його околицях. Тоді ці піски мали музичні властивості, але зараз вони занадто забруднені глинистими відкладеннями, щоб співати.

Жителі Осодаки спробували повернути піску "голос", промивши його водою. Промивання імітувало дію морських хвиль на прибережний пісок і проводилися за допомогою водяного млина, що розташований на гірській річці. Після приблизно 1000 годин роботи пісок, що складається тепер на 99% із чистого кварцу, зазвучав у сухому виді. А ще через 1000 годин промивання він почав звучати й у воді. Пристроєм для одержання звуку служить циліндрик довжиною 12 і діаметром 5 сантиметрів. Усередині перебуває суміш із 100 см³ води й приблизно 100 см³ очищеного піску. Повільно покачавши контейнер, можна почути звук, що нагадує квакання жаби. Так вдалося "пожвавити" пісок, що мовчав мільйони років.

2.3 Цементуюча вода

Найтонша плівка води, що обволікає вологі піщини, "склеює" їх силою поверхневого натягу. Спробуємо оцінити, наскільки велика ця сила.

З боку скривленої поверхні рідини діє сила, спрямована у середину, до центру кривини. Вона створює додатковий тиск, величина якого визначається формулою Лапласа: $\Delta p = \frac{2\alpha}{r}$, де α - коефіцієнт поверхневого натягу рідини, r - радіус кривини її поверхні.

Для простоти будемо вважати піщину кулькою діаметром 300 мікронів або $3 \cdot 10^{-2}$ см. Коли стикаються дві піщини, їхні водяні плівки зливаються, утворюючи щось подібне до циліндрика з торцями радіусом *r*. Коефіцієнт поверхневого натягу води $\alpha = 72.5 \, \text{дин/см}$ (оскільки всі величини дуже малі, є сенс вести розрахунки в системі СГС, а не в міжнародній-СИ). Підставивши ці дані у формулу Лапласа, одержимо величину надлишкового тиску, що стискає піщини:

$$\Delta p_+ = 10^4$$
 дин/см 2 .

Багато це або мало? Оцінимо, з якою силою піщини прагнуть "розчепитися" під дією своєї ваги.

Вага піщини створює "протитиск", зусилля, що розтягує плівку води й відриває піщини одна від одної. Ця вага $p = \frac{4}{3}\pi r^3 \rho g$, де ρ - щільність матеріалу, g - прискорення вільного падіння. Вона прикладена до площі $S = \pi r^2$. Звідси, тиск, що розтягує дорівнює $\Delta p_- = \frac{p}{S} = \frac{4}{3}r\rho g$. Підставивши щільність кварцу $2.4 r/cm^3$, $\pi = 10^3 cm/c^2$, одержимо $\Delta p = 50 \, \text{дин}/cm^2$.

Сила, "закріплююча" піщини, в 200 разів більше сили, що їх розриває (див. Рис.2.10).



Рис. 2.10 Зчеплення вологих піщин

При зменшенні радіуса r частинок це співвідношення дуже різко зростає: вага частинки падає пропорційно r^3 , а сила зчеплення росте лінійно. Чим менше розміри частинок, тим сильніше вони зліплюються одна з одною і прилипають до різних поверхонь. Тому так важко відчистити вологий бруд або глину, що складається із часток розміром порядку 0.01 мм, які відвалюються самі, як тільки висохнуть.

Зате у великих піщин є якийсь "критичний розмір", після перевищення якого сили поверхневого натягу перестають утримувати їхню вагу. Його нескладно відшукати, дорівнявши сили тиску й розтягання $\Delta p_+ = \Delta p_i$ підставивши чисельні дані. Розрахунки дають значення "критичного" радіуса частинки приблизно 0.6 мм. Це цілком узгоджується з досвідом: із грубозернистого піску замка не побудуєш!

Всі, напевно, знають, як засмоктує грузлий вуличний бруд і глинистий грунт, чули, або читали, про підступні болота й хиткі піски (див. Рис.1.4). Всі, певно, розуміють, що при цьому відбувається: коли ми витягаємо ногу із грузлої напіврідкої маси, у ній створюється розрідження. Атмосферний тиск створює додаткову силу, яку доводиться переборювати на кожному кроці. Оцінимо величину цієї сили.

Середня довжина стопи дорослої людини - 28 см (це відповідає 43 розміру взуття), ширина - близько 8 см. Нормальний атмосферний тиск дорівнює 1 кгс/см² (ця "технічна" одиниця дуже наочна: кожен легко уявить собі, скажемо, вага кілограмової пачки цукру. Нехай тиск під стопою впаде на 10% від атмосферного. Тоді, щоб витягти ногу із бруду,

прийдеться прикласти зусилля $F = \Delta p/S = 22.4$ кгс. Отже, ходіння по грузлій глині - важка робота (див. Рис. 2.11).



Рис. 2.11 Ходіння по грузлій глині важка робота

ГЛАВА 3

МІКРОМЕХАНІЧНІ МОДЕЛІ ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ

Взагалі кажучи механічні моделі безструктурних частинок з дисипативними взаємодіями, які визначаються дискретним механізмом втрат енергії виявлять здібності до цілком дивовижної поведінки, зв'язок якої із реальними фізичними явищами, що спостерігаються в лабораторних умовах, чи у довкілля до тепер залишається нез'ясованим. Яскравий приклад такої поведінки є, так зване, явище непружного колапсу, наявність якого було встановлено, у випадку механічної моделі гранульованих систем з постійним коефіцієнтом непружних втрат в [29]. Найкраще собі уявити в чому полягає явище непружного колапсу можна за допомогою всім добре відомої задачі про вертикально стрибаючу на горизонтальній підлозі непружну кульку.

3.1 Стрибаючий м'яч, як наочна модель непружного колапсу

Деякі явища, що спостерігаються у гранульованих матеріалах, носять виключний характер. До таких явищ, поряд з ефектами бразильського горіху, арки, лавинного осипання і флюїдизації, відноситься і кластеризація у вигляді, так званого, непружного колапсу. Останній полягає у переході за скінченний термін часу до характерного "злипання" непружних частинок, що характеризується нескінченною кількістю зіткнень.

Явище виглядає так незвично, що навіть дослідники, які працюють у цій галузі фізики і які зустрічаються з ним, схильні бачити у ньому ні що інше, як математичний артефакт. Покажемо, що це явище, яке називають неупружним колапсом, з'являється (причому аналітично, а не у результаті чисельного розрахунку!) вже з перших кроків при спробі елементарного узагальнення співвідношень класичної механіки на випадок дисипативних процесів.

Кожна людина хоч раз у житті грала у м'яч, або спостерігала за грою зі сторони. От м'яч вдарився о землю, відскочив та знов впав, потім знову підстрибнув... З кожним разом він "підстрибує" все нижче і нижче, поки нарешті взагалі не зупиниться.

Ми могли бачити це багато разів, але, чи замислювались ми, внаслідок, якої причини м'яч нарешті зупиняється і, який час він на це витрачає? Спробуємо розібратися, як класична фізика (точніше її розділ – механіка) відповідає на це питання. Нехай наш м'яч падає з деякої висоти h_1 на підкладинку. Він має деяку масу m. Ми відпускаємо м'яч, таким чином, що він рухається лише під дією сили тяжіння з прискоренням вільного падіння g (см. Рис. 3.1).



Рис. 3.1 М'яч маси т падаючий на підкладинку з початкової висоти h_1

У той момент часу, коли м'яч вдаряється о підкладинку, його швидкість досягає значення V1. З закону збереження енергії (тут ми не будемо враховувати дію сил тертя м'яча о повітря) витікає формула для визначення V1:

$$\operatorname{mgh}_{1} = \frac{\operatorname{mv}_{1}^{2}}{2}.$$
(3.1)

3 (3.1) легко знайти, що:

$$\mathbf{v}_1 = \sqrt{2\mathbf{g}\mathbf{h}_1} \,. \tag{3.2}$$

Скориставшись відомим співвідношенням для визначення шляху, який пройшло тіло при рівноприскореному русі:

$$h_1 = \frac{gt_1^2}{2},$$
 (3.3)

знаходимо час t_1 , за який м'яч підлетить до підкладинки:

$$t_1 = \sqrt{\frac{2h_1}{g}}$$
 (3.4)

Грубо можна прийняти, що при кожному зіткненні з підкладинкою м'яч підскакує у гору вздовж напрямку його падіння, із швидкістю у Е разів меншою, ніж швидкість, з якою він підлітає до підкладинки. У такому разі, маємо:

$$v_2 = Ev_1 = E\sqrt{2gh_1}$$
, (3.5)

де Е – коефіцієнт, що показує у яку кількість разів зменшилась швидкість м'яча у кожному елементарному акті зіткнення із підкладинкою. В фізиці гранульованих матеріалів він має назву коефіцієнта непружних втрат. Ці втрати енергії виникають тому, що частка енергії м'яча губиться при непружному зіткненні із підкладинкою. Коефіцієнт E є безрозмірною величиною, яка не перевищує одиницю E < 1. Максимальне значення E дорівнює одиниці E = 1. Ця межа відповідає випадку абсолютно пружного відбиття м'яча від підкладинки.

Підскочивши до гори від підкладинки, м'яч буде летіти у гору, долаючи тяжіння Землі до тієї пори, поки його кінетична енергія повністю не перейде до потенціальної:

$$\frac{\mathrm{mv}_2^2}{2} = \mathrm{mgh}_2, \qquad (3.6)$$

це відбувається на висоті h₂:

$$h_2 = v_2 t_2 - \frac{g t_2^2}{2}, \tag{3.7}$$

за час t_{2:}

$$t_2 = \frac{v_2}{g} = E_{\sqrt{\frac{2h_1}{g}}},$$
 (3.8)

Із (3.7), (3.8) знаходимо висоту першого "підскоку" м'яча (див. Рис. 3.2):

$$h_2 = E^2 h_1.$$
 (3.9)



Рис. 3.2 Непружне відбиття м'яча від підкладинки

Потім м'яч знову починає вільно падати у низ, вже з висоти h_2 . Його швидкість при повторному падінні на підкладинку, на яке він витратив час t_3 , буде дорівнювати $v_3 = gt_3$. Ця швидкість, з урахуванням закону збереження енергії:

$$\operatorname{mgh}_{2} = \frac{\operatorname{mv}_{3}^{2}}{2},$$
 (3.10)

знов таки легко знаходиться у явному вигляді:

$$v_3 = \sqrt{2gh_2} = E\sqrt{2gh_1}$$
 (3.11)

Знаючі відстань, пройдену м'ячем за час другого падіння:

$$h_2 = \frac{gt_3^2}{2}, \tag{3.12}$$

за допомогою (3.10), (3.11), (3.12) знаходимо t₃:

$$t_3 = \frac{v_3}{g} = \sqrt{\frac{2h_2}{g}} = E\sqrt{\frac{2h_1}{g}}.$$
 (3.13)

Ще раз вдарившись о підкладинку м'яч знову підстрибує у гору, але вже із швидкістю $v_4 = Ev_3$, після чого, витративши порцію енергії $\frac{mv_4^2}{2}$, зупиняється на висоті h_3 :

$$h_3 = E^2 h_2 = E^4 h_{1,} \tag{3.14}$$

витрачаючи на це час t4:

$$t_4 = \frac{v_4}{g} = E^2 \sqrt{\frac{2h_1}{g}}$$
(3.15)

Картина буде повторюватись знов і знов: м'яч буде падати і здійматися, кожного разу на меншу висоту, поки зовсім не зупиниться на підкладці. Знайдемо тепер повний час, за який м'яч падає на підкладку. Виходячи з вище викладеного отримуємо, що загальний час руху м'яча, з початку падіння до повної зупинки, $T = T_{\downarrow} + T_{\uparrow}$: можна знайти як суму членів геометричної прогресії у наступному вигляді:

$$T = \sqrt{\frac{2h_1}{g}} + 2E\sqrt{\frac{2h_1}{g}} + 2E^2\sqrt{\frac{2h_1}{g}} + 2E^3\sqrt{\frac{2h_1}{g}} + ... + 2E^n\sqrt{\frac{2h_1}{g}} = \sqrt{\frac{2h_1}{g}} \left(1 + 2E\left(1 + E^1 + E^2 + ... + E^{n-1}\right)\right).$$
(3.16)

Користуючись відомою формулою для розрахунку суми перших **n** членів геометричної прогресії

$$S_n = \sum_{i=0}^n q^i = \frac{q^n - 1}{q - 1}$$
(3.17)

знаходимо, що повний час руху м'яча складає:

$$T = \sqrt{\frac{2h_1}{g}} \left(1 + 2\frac{E - E^n}{1 - E} \right),$$
(3.18)

де n – кількість переміщень (підстрибувань) м'яча.

Знайдемо тепер повний час падіння м'яча на підкладинку T у межі, коли $n \to \infty$, (E < 1):

$$\lim_{n \to \infty} T = \sqrt{\frac{2h_1}{g}} \left(1 + 2\frac{E}{1 - E} \right).$$
(3.19)

Ми бачимо, що, формально, при нескінченній кількості зіткнень м'яча з непружною підкладинкою час його руху має кінцеву межу, тобто цей час не є нескінченним! Це і є проста механічна модель явища, що отримало назву непружного колапсу, що дивує своєю незрозумілістю з точки зору так званого "здорового глузду".

Якщо ж удар м'яча о підкладинку абсолютно пружний, що відповідає значенню E = 1, то час руху м'яча за відсутності тертя о повітря, як витікає з (3.19), буде нескінченно великим, що і відповідає, очевидній, але, природно ідеалізованій картині.

Явище непружного колапсу, мабуть, пояснює незвичний характер (кластеризації), спостерігається що у гранульованих ущільнення матеріалах під впливом вібрацій. Звичним для фізиків поводженням систем із складною морфологією поверхні є її прагнення перейти у стан з мінімальною поверхневою енергією, котра, як правило, характеризується сферичною симетрією (наприклад, звичайна рідина розбивається на краплі, що мають форму сфери). На відміну від такого звичайного сценарію, гранульовані системи у полі віброприскорення здатні формувати ущільнений стан у вигляді довгих ниткоподібних кластерів. Ниткоподібна морфологія кластеризації з повна може бути наслідком явища неоднорідного непружного колапсу, яке відбувається вздовж периметру ниткоподібного кластеру і відсутнє у будь якій його точці у тангенціальному (дотичному) напрямку.

Цікаво відмітити, що картина ізоморфна описаній, візуально спостерігається у розподіленні галактичної матерії у Всесвіті, ну і, звичайно, у поводженні гранульованих матеріалів у навколишньому середовищі і у лабораторних умовах, а також підтверджується багаточисельними модельними розрахунками гранульованої кластеризації.

Слід відзначити, що введення уточнень до звичних для нас явищ і процесів приховує у собі ще немало екстраординарних сценаріїв поведінки, таких звичайних на перший погляд систем, як багаточастинкові мікромеханічні або такі, що є ізоморфними до них.

3.2 Сили пружності і тертя

Для реальних гранульованих матеріалів розрахунки сил тертя ускладнюються у зв'язку з існуванням невизначеностей у процедурі їх знаходження, які існують внаслідок того, що кожна частинка перебуває у контакті з багатьма частинками у її оточенні і, таким чином, число матеріальних рівнянь балансу, які визначають фракційні сили менше за число компонент діючих напруг. Нажаль, для побудови послідовної теорії у цьому напрямку бракує повного порозуміння цієї проблеми на мікроскопічному рівні.

Зауважимо, що якщо мати справу з більш складною, а саме, гранульованою системою, простір якої проміж частинками-гранулами, скажімо заповнено рідиною, тоді виникнення в'язких сил капілярного походження здібне суттєво змінювати, або навіть повністю визначити її динаміку. Зокрема взаємодія частинок із рідиною складає базу, як активних фізичних так і інженерних досліджень, а також визначає деякі геофізичні процеси, такі, скажімо, як формування дюн [8]. Додамо, що в той же час, як взаємодія невеликих за розміром твердих частинок із оточуючою рідиною більш менш з'ясована, скажімо у межах стоксівського підходу [8], колективна взаємодія описана недостатньо і оперує до тепер майже виключно окремими феноменологічними співвідношеннями і залишається далекою від послідовного вирішення проблемою.

До того ж, частинки гранули можуть мати електричні заряди, і в цих випадках, внаслідок змагання проміж короткодіючими взаємодіями внаслідок зіткнень і далекодіючими взаємодіями внаслідок електромагнітних сил, може мати місце дуже специфічна колективна поведінка [49-51].

Розглянемо набор N сферичних частинок діаметра d_i , де індекс і змінюється від 1 до N. Якщо всі частинки однакові, ми, очевидно маємо $d_i = d$ для всіх величин і. Ми також можемо без проблем передбачити розподіл діаметрів d_i , відцентрованих за величиною d і з відхиленням (Δd_i) . Нехай r_{ij} буде відстанню між центрами двох частинок індексу і та j. У відповідності з умовами Сігноріні, які широко використовуються у матеріалах з механічними контактами, сили контакту починають діяти тільки коли $d_i + d_{ij} > 2r_{ij}$. При виконанні такої умови, включаються, як найменше, три других контактних сили (за умов, що можна знехтувати кутовими моментами). У спрощеній векторній інтерпретації, це наступні сили:

- сила пружного відновлення, яка відноситься до енергії пружності, що існує протягом взаємного проникнення двох частинок. Ця сила подається у наступному вигляді

$$f_{el}^{i} = -K \left[\frac{1}{2} (d_{i} + d_{j}) - r_{ij} \right] n_{ij}$$
 (3.20)

де n_{ij} – одиничний вектор вздовж лінії, що з'єднує центри частинок і та j. Це просто звичайне відношення для деформації пружини із сталою K. Воно безумовно лінійне i, саме тому, не сумісно з моделлю проникнення Герця, яка прогнозує закон сили з показником 3/2, щоб описати, як сила залежить від відстані проникнення. Щоб врахувати цю нелінійність, рівняння (3.20) модифіковано у більш загальну форму:

$$f_{el}^{i} = -K \left[\frac{1}{2} (d_{i} + d_{j}) - r_{ij} \right]^{1+\beta} n_{ij}, \qquad (3.21)$$

де $\beta = 1/2$ у моделі Герця, і $\beta = -1/2$ у випадку м'якої оболонки.

- сила тертя, протилежна напряму розриву контактів. Вона відіграє розсіювальну роль подібну динамічному тертю Ейлера-Кулона. В загальному випадку, визначають дві компоненти. Нормальна компонента:

$$\mathbf{f}_{n}^{i} = -2\mathbf{D}_{n}\mathbf{m}_{ij}\left(\mathbf{V}_{ij} \times \mathbf{n}_{ij}\right)\mathbf{n}_{ij}, \qquad (3.22)$$

де m_{ij} - зведена маса системи двох взаємодіючих частинок і та j; V_{ij} - різниця їх швидкостей, D_n - коефіцієнт розсіювання (мається у на увазі дисипації енергії), який характеризує поділ контакту за напрямком n_{ii} .

- відповідно, тангенціальна компонента сили тертя записується у вигляді:

$$f_t^{(i)} = -2D_t m_{ij} \left(V_{ij} \times t_{ij} \right) t_{ij} , \qquad (3.23)$$

де t_{ij} - векторна дотична до контакту, тобто, перпендикулярна до n_{ij} , вздовж напрямку ковзання, і D_t описує величину відповідної дисипації енергії.

Лінійна апроксимація, що міститься у (3.22) і (3.23), іноді носить неприпустимо обмежуючий характер, тому ці рівняння часто узагальнюються у наступну форму:

$$f_{n}^{(i)} = -2D_{n}m_{ij}(V_{ij}n_{ij})\left[\frac{1}{2}(d_{i}+d_{j})-r_{ij}\right]^{\gamma}n_{ij},$$

яка діє за умови, коли $1/2(d_i + d_j) > r_{ij}$.

Важливо зрозуміти, що дисипативні процеси вводилися у ці рівняння для моделювання динамічного за походженням тертя. Насправді, ці рівняння не приймають до уваги статичні сили тертя Кулона. Таким чином, висвітлена модель відноситься виключно до динамічного аналізу гранульованих матеріалів.

Попередні рівняння вводилися апріорно. Вони можуть, однак, бути інтерпретовані з точки зору більш конкретних моделей, які надають фізичного сенсу параметрам, що в них містяться. Уявлення про найбільш просту аналогію дає зображення на Рис.3.3. Воно представляє собою пружину (яка імітує пружне відновлення) з'єднану з лінійно діючим гальмом.



Рис. 3.3 Механічна модель, що імітує контактну взаємодію з подвійним з'єднанням пружина-короб(останній діє як амортизатор)

Така проста система, напевно, не враховує тонкощі контактної взаємодії, такі, наприклад, як пластичні деформації, які зазвичай відбуваються, коли дві вступаючи у взаємодію сфери проникають одна у іншу. Більш складні варіанти було запропоновано для імітації більш складних ефектів. Наприклад, у деяких з них, використовується механічна модель явища пластичної деформації у вигляді набору зв'язаних пружин, одна з котрих активізує храповий механізм.

Ми повинні мати при цьому на увазі, що такі механічні аналоги мають суттєві обмеження і залишаються грубими відображеннями дійсності. Так, наприклад, врахування пластичної межи все ще не дозволяє відтворити режим нелінійного проникнення Герця.

3.3 Модель зіткнення

Цей розділ має справу з рівняннями, які керують зіткненнями двох частинок. Ми розпочнемо з лінійної пружної моделі і коротко обговоримо нелінійний пружний режим.

Розпочнемо з простого випадку двох сфер, що вступають до центральної взаємодії, тобто, вздовж лінії, яка з'єднує їх центри. Якщо відстань між поверхнями двох частинок, які розрізняються за допомогою індексів i та j позначимо через X, то диференціальне рівняння, яке визначає X має вигляд:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = \frac{f^{(i)}}{m_i} - \frac{f^{(j)}}{m_j},$$

де $f^{(i)} = f^{(i)}_{el} + f^{(i)}_{n}$ (тільки нормальна сила діє під час центрального зіткнення). Для спрощення, тут не вказані векторні позначення. Попереднє рівняння можна застосовувати тільки коли $x = 1/2(d_i + d_j) - r_{ij} > 0$. За вказаних умов, ми отримуємо:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \mu \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = 0, \qquad (3.24)$$

де μ - коефіцієнт, що описує розсіювання, введене раніше у (3.22). Тут ми маємо $\mu = D_n$ і $\omega_0 = \sqrt{K/m_{ij}}$, де, як зазвичай, m_{ij} - зведена маса системи двох частинок. Легко впізнати у цьому рівнянні рівняння загасаючого гармонічного осцилятора, розв'язок якого добре відомий:

$$x(t) = \frac{v_0}{\widetilde{\omega}} \alpha^{-\mu t} \sin\left(\widetilde{\omega} t\right)$$
(3.25)

де V₀- відносна швидкість до зіткнення і $\widetilde{\omega}$ - частота коливань, $\widetilde{\omega} = \sqrt{\left(\omega_0^2 - \mu^2\right)}$. Величина, на яку зміниться відстань X, може бути зведена до наступного вигляду:

$$\frac{\mathrm{dx}}{\mathrm{dt}} = \frac{\mathrm{v}_0}{\widetilde{\omega}} \alpha^{-\mu t} \left[-\mu \sin(\widetilde{\omega}t) + \widetilde{\omega} \cos(\widetilde{\omega}t) \right]$$
(3.26)

Тривалість t_c контакту при цьому дається виразом:

$$t_{c} = \frac{\pi}{\widetilde{\omega}} = \frac{\pi}{\sqrt{(K/m) - (D/m)^{2}}}$$

Контакт завершується, коли $x(t_c)$, стає від'ємним. Підкреслимо, що у такої моделі, t_c не залежить від відносної швидкості частинок. Ми можемо ввести еквівалент коефіцієнта відновлення ε

$$\varepsilon = \frac{\left[dx / dt \right]_{t=t_c}}{\left[dx / dt \right]_{t=0}},$$

що призводить до наступного результату:

$$\varepsilon = \exp\left(-\frac{\pi\mu}{\widetilde{\omega}}\right) = \exp\left(-\frac{D}{2m}t_{c}\right)$$

Цей останній вираз наочно демонструє зв'язок між втратами рухомої сили протягом зіткнення та параметром дисипації D_n (або μ). Зауважимо, що коефіцієнт відновлення також виявляється незалежним від відносної швидкості.

Тепер ми можемо розрахувати максимальну відстань проникнення x_{max} вздовж тієї ж лінії, яку ми використовували для моделі Герця. Максимальне проникнення сфер одна до одної отримаємо у випадку, коли швидкість проникнення dx / dt зникає за часи $t = t_{max}$. Із (3.25) і (3.26), отримуємо наступний результат:

$$x_{\max} = \frac{v_0}{\widetilde{\omega}} \alpha^{-\mu t_{\max}} \sin\left(\widetilde{\omega} t_{\max}\right) = \frac{v_0}{\omega_0} \alpha^{-\mu/\widetilde{\omega}} \sin^{-1}\left(\frac{\widetilde{\omega}}{\omega_0}\right)$$

Якщо система тільки трохи дисипативна (наприклад, коли $\varepsilon > 0.9$), тоді $\omega_0 >> \mu$ і t_{max} досягає величини $2t_c$, як у випадку моделі Герця. При таких умовах, x_{max} зменшується до

$$x_{\max} = \frac{v_0}{\omega_0}$$
.

Іншими словами, відстань проникнення пропорційна відносній швидкості взаємодіючих частинок. Цей результат значно відрізняється від моделі Герця, яка передбачує значно більш слабку залежність. Ми дійшли до висновку, що лінійна пружна модель відхиляється у своїх висновках в значній мірі від фізичної картини реальних зіткнень. Таким чином, необхідно запропонувати більш реалістичну модель, яка б враховувала нелінійну природу контактної взаємодії.

Користуючись аналогічними аргументами, що й в попередньому розгляді, запишемо універсальну форму диференціального рівняння (2.14)

$$\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} + 2\mu x \left(\frac{x}{\mathrm{d}}\right)^{\gamma} + \omega_0^2 x^{1+\beta} = 0,$$

яке може бути надано у більш стандартній формі:

$$\eta \frac{d^2 x}{dt^2} + \eta d \left(\frac{x}{d}\right)^{\gamma} + E d \left(\frac{x}{\beta}\right)^{\beta} x = 0, \qquad (3.27)$$

де Е залежить від модуля Юнга і коефіцієнта Пуасона матеріалу, і залежить від стиснення так само, як і в'язкість. Підкреслимо, що дисипативний член у останньому рівнянні відповідає в'язко-пружній взаємодії. Рівняння (3.27) не враховує пластичні деформації, регулярні викривлення, або розсіювання енергії вібраційного збудження через колективні моди (фонони).

Розглянемо декілька конкретних випадків, які розрізняються величинами показників β і γ:

1) $\beta = 0$ і $\gamma = 0$ відповідає лінійній взаємодії, завданій (3.24).

2) $\beta = 1/2$ і $\gamma = 0$ відповідає ситуації, що описує рівняння Герця.

3) $\beta = 1/2$ і $\gamma = 1/2$ описує універсальний сценарій (модель Кувабара і Коно), в якому в'язко-пружне стиснення додається до нормальної пружної взаємодії. У такій моделі, нелінійність розвивається внаслідок геометричних властивостей проникнення.

З викладеного, має стати зрозумілим, що моделювання зіткнення між частинками вельми складна задача. Фізика контактної взаємодії і досі залишається недостатньо вивченою. Крім того, адекватні цифрові алгоритми для чисельного експерименту непросто розробляти, оскільки вони повинні враховувати масштаби всіх часових інтервалів, які відіграють роль у процесі (такі, наприклад, як тривалість зіткнень, відносні швидкості, час вільного пробігу та інші). Недбалість, неврахування окремих параметрів зіткнень імовірно, призведе до отримання нефізичних результатів.

Найпростіші, бінарні зіткнення можна досить детально описувати, розглянувши просту модель одновимірного ланцюжка сфер, що знаходиться під впливом вертикального синусоїдального збудження [19].

3.4 Зіткнення твердих тіл (задача Герця)

Нехай два твердих тіла стикаються один з одним у точці, яка не є особливою точкою їхніх поверхонь. У цій точці обидві поверхні мають загальну дотичну площину, яку позначимо як X, У. Позитивне направлення осі Z умовимося вважати різним для обох тіл, - для кожного з них будемо відраховувати Z-координату по напрямку в глиб тіла, позначаючи її відповідно як Z i Z'.

Як відомо, поблизу звичайної точки торкання координатної площини (площини X, У) рівняння поверхні може бути написане у вигляді

$$Z = \chi_{\alpha\beta} X_{\alpha} X_{\beta}, \qquad (3.28)$$

де по двічі повторюваних індексах α , β мається на увазі підсумовування за значеннями 1, 2 ($x_1 = x, x_2 = y$), а $\chi_{\alpha\beta}$ є двомірний симетричний тензор, що характеризує кривизну поверхні (головні значення тензора $\chi_{\alpha\beta}$ дорівнюють $\frac{1}{2}R_1$ й $\frac{1}{2}R_2$, де R_1 , R_2 — головні радіуси кривини поверхні в точці торкання). Аналогічне співвідношення для поверхні другого тіла поблизу точки дотику напишемо у вигляді

$$z' = \chi'_{\alpha\beta} x_{\alpha} x_{\beta} \tag{3.29}$$

Припустимо тепер, що обидва тіла здавлюються прикладеними до них силами, у результаті чого вони зближаються на деяку малу відстань h^i . Тоді поблизу точки первісного зіткнення на поверхні тіл виникає вм'ятина, і тіла будуть стикатися вже не в одній точці, а в межах деякої частини їхньої поверхні. Нехай $u_z i u'_z$ — компоненти (відкладені, відповідно, уздовж осей Z i Z') векторів зсуву точок поверхонь обох тіл при здавлюванні. На Рис.3.4 пунктиром зображені поверхні тіл, якими вони були б у відсутності деформації, а суцільною лінією — поверхні здавлених тіл; літери Z i Z' позначають довжини, обумовлені рівняннями (3.28) і (3.29).



Рис. 3.4 Схема зіткнення за моделлю Герця

Як безпосередньо витікає з Рис.3.4, у всіх точках області зіткнення виконується співвідношення

$$(z+u_{z})+(z'+u'_{z})=h_{z}$$

яке також можна записати у наступній формі

$$\left(\chi_{\alpha\beta} + \chi'_{\alpha\beta} \right) x_{\alpha} x_{\beta} + u_{z} + u'_{z} = h .$$
 (3.30)

У точках, які розташовані за межами визначеної області, де обидві поверхні не стикаються, має місце нерівність $z + z' + u_z + u'_z < h$.

Виберемо напрямок осей X, У таким чином, щоб тензор $\chi_{\alpha\beta} + \chi'_{\alpha\beta}$ був приведений до головних осей. Позначаючи головні значення цього тензора за допомогою A і B, перепишемо рівняння (3.30) у наступному вигляді

$$Ax^{2} + By^{2} + u_{z} + u_{z}' = h$$
 (3.31)

Величини A і В пов'язані з радіусами кривизни R₁, R₂, R₁', R₂' обох поверхонь наступними формулами, які приведемо без висновку:

$$2(A+B) = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_1'} + \frac{1}{R_2'}$$

$$4(A-B)^{2} = \left(\frac{1}{R_{1}} - \frac{1}{R_{2}}\right)^{2} + \left(\frac{1}{R_{1}'} - \frac{1}{R_{2}'}\right)^{2} + 2\cos 2\varphi \left(\frac{1}{R_{1}} - \frac{1}{R_{2}}\right) \left(\frac{1}{R_{1}'} - \frac{1}{R_{2}'}\right),$$

де ϕ — кут між тими нормальними перетинами поверхонь, у яких радіуси кривизни — R_1 і R'_1 . Знаки радіусів кривини вважаються позитивними, якщо відповідні центри кривини розташовані в середині тіла, чи поверхні, і негативними — у зворотному випадку.

Позначимо за допомогою $P_z(x, y)$ тиск між обома здавленими тілами в точках їхнього зіткнення (поза областю зіткнення, очевидно, $P_z = 0$). При визначенні залежностей між P_z і зсувами u_z , u'_z можна з достатньою точністю розглядати поверхні тіл, як плоскі. Тоді зсув u_z під впливом нормальних сил $P_z(x, y)$ визначається за допомогою виразів

$$u_{Z} = \frac{1 - \sigma^{2}}{\pi E} \iint \frac{P_{Z}(x', y')}{r} dx' dy',$$

$$u'_{Z} = \frac{1 - {\sigma'}^{2}}{\pi E'} \iint \frac{P_{Z}(x', y')}{r} dx' dy'$$
(3.32)

 $(\sigma, \sigma' \, \breve{u} \, E, \, E' - \kappa oe \phi i цi єнти Пуассона \, \breve{u} модулі розтягування обох тіл);$ поза областю зіткнення $P_Z = 0$. Зауважимо, що із цих формул випливає необхідність співвідношення для u_Z/u_Z' , яке є сталою, що дорівнює:

$$\frac{u_z}{u'_z} = \frac{\left(1 - \sigma^2\right)E'}{\left(1 - {\sigma'}^2\right)E}$$
(3.33)

Співвідношення (3.31) і (3.33) дозволяють безпосередньо визначити розподіл деформації u_Z , u'_Z по області зіткнення (зауважимо, що при цьому, самі по собі формули (3.32) і (3.33) відносяться, також, до точок поза межами цієї області).

Підставивши вираз (3.32) в (3.31), одержуємо

$$\frac{1}{\pi} \left(\frac{1 - \sigma^2}{E} + \frac{1 - {\sigma'}^2}{E'} \right) \iint \frac{P_z(x', y')}{r} dx' dy' = h - Ax^2 - By^2$$
(3.34)

Отримане інтегральне рівняння визначає розподіл тиску P_Z по області зіткнення. Його розв'язок може бути знайдено по аналогії за допомогою теорії потенціалу. На думку скористатися цією аналогією наводить той факт, що, по-перше, інтеграл, що знаходиться в лівій частині рівняння (3.34), відноситься до типових у теорії потенціалу інтегралів, які визначають потенціал, створений деяким розподілом зарядів. По-друге, потенціал поля усередині рівномірно зарядженого еліпсоїда є квадратична функція координат.

Якщо по об'єму еліпсоїда рівномірно розподілений заряд (з постійною об'ємною щільністю ρ), то потенціал поля усередині еліпсоїда визначається співвідношенням

$$\varphi(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z}) = \pi \rho a b c \int_{0}^{\infty} \left\{ 1 - \frac{\mathbf{x}^{2}}{a^{2} + \xi} - \frac{\mathbf{y}^{2}}{b^{2} + \xi} - \frac{\mathbf{z}^{2}}{c^{2} + \xi} \right\} \frac{d\xi}{\sqrt{a^{2} + \xi} b^{2} + \xi (c^{2} + \xi)}.$$

У граничному випадку сильно сплющеного у напрямку осі Z еліпсоїда (що відповідає $\mathbf{c} \to \mathbf{0}$), одержуємо

$$\varphi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \pi \rho a b c \int_{0}^{\infty} \left\{ 1 - \frac{x^{2}}{a^{2} + \xi} - \frac{y^{2}}{b^{2} + \xi} \right\} \frac{d\xi}{\sqrt{(a^{2} + \xi)(b^{2} + \xi)\xi}}$$

Зауважимо, що при переході до границі с $\rightarrow 0$ потрібно, покласти рівною нулю координату Z точок, які належать внутрішній частині еліпсоїда. З іншого боку, потенціал $\phi(x, y, z)$ може бути записаний у вигляді інтегралу

$$\varphi(x, y, z) = \iiint \frac{\rho dx' dy' dz'}{\sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2}},$$

де інтегрування виконується по об'єму еліпсоїда. Переходячи до границі $c \to 0$, ми повинні покласти під коренем z = z' = 0. Виконуючи $(2 + 2)^{1/2}$

інтегрування по dz' в межах $\pm c \left(1 - \frac{{x'}^2}{a^2} - \frac{{y'}^2}{b^2}\right)^{1/2}$, отримуємо

$$\varphi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 2\rho c \iint \frac{dx' dy'}{r} \sqrt{1 - \frac{{x'}^2}{a^2} - \frac{{y'}^2}{b^2}}$$
$$r = \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2},$$

де інтегрування здійснюється по площі усередині еліпса $\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} = 1$. Прирівнюючи обидва вирази для $\phi(x, y)$, одержуємо тотожність:

$$\iint \frac{dx'dy'}{r} \sqrt{1 - \frac{x'^2}{a^2} - \frac{y'^2}{b^2}} = \frac{\pi ab}{2} \int_0^\infty \left(1 - \frac{x^2}{a^2 + \xi} - \frac{y^2}{b^2 + \xi}\right) \frac{d\xi}{\sqrt{(a^2 + \xi)(b^2 + \xi)\xi}}.$$
(3.35)

Порівнюючи отримане співвідношення з рівнянням (3.34), бачимо, що в їхніх правих частинах знаходяться квадратичні функції від X і У однакового виду, а в лівих — інтеграли однакового типу. Тому ми можемо відразу зробити висновок, що область зіткнення тіл (тобто область інтегрування в інтегралі в (3.34)) обмежена еліпсом, рівнянням якого є

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1$$
(3.36)

Відповідно, функція $P_Z(x, y)$ може бути задана у наступному вигляді

$$P_{z}(x,y) = const \sqrt{1 - \frac{x^{2}}{a^{2}} - \frac{y^{2}}{b^{2}}}$$

Вибираючи сталі таким чином, щоб інтеграл $\iint P_z dx dy$ по області зіткнення дорівнював заданій повній силі F, з якою здавлюються обидва тіла, одержуємо

$$P_{z}(x,y) = \frac{3F}{2\pi ab} \sqrt{1 - \frac{x^{2}}{a^{2}} - \frac{y^{2}}{b^{2}}}$$
(3.37)

Формула (3.37) визначає закон розподілу тиску по площі області зіткнення. Відзначимо, що тиск у центрі області в півтора рази перевищує

середній тиск $\frac{F}{\pi ab}$.

Підставимо (3.37) у рівняння (3.34) і враховуючи (3.35), маємо

$$\frac{FD}{\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{1 - \frac{x^{2}}{a^{2} + \xi} - \frac{y^{2}}{b^{2} + \xi}}{\sqrt{a^{2} + \xi}b^{2} + \xi\xi}} d\xi = h - Ax^{2} - By^{2},$$
$$D = \frac{3}{4} \left(\frac{1 - \sigma^{2}}{E} + \frac{1 - {\sigma'}^{2}}{E'} \right)$$

де

Отримане співвідношення має виконуватися при всіх значеннях X, У (в середині еліпсу); тому коефіцієнти при X і У, і вільні члени в обох його частинах повинні бути попарно рівні. Звідси знаходимо наступні співвідношення:

$$h = \frac{FD}{\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{d\xi}{\sqrt{a^{2} + \xi} b^{2} + \xi}; \qquad (3.38)$$

$$A = \frac{FD}{\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{d\xi}{(a^{2} + \xi)\sqrt{(a^{2} + \xi)(b^{2} + \xi)\xi}},$$

$$B = \frac{FD}{\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{d\xi}{(b^{2} + \xi)\sqrt{(a^{2} + \xi)(b^{2} + \xi)\xi}}.$$
(3.39)

Рівняння (3.39) визначають півосі a і b області зіткнення за умов заданої силі F (A і B — відомі для даних тіл величини). Співвідношення (3.38), у свою чергу, визначає залежність силою F від викликаним нею зближенням тіл h. Інтеграли, що знаходяться у правих частинах цих рівнянь відносяться до еліптичного типу.

Таким чином, завдання опису та параметризації зіткнення тіл можна вважати повністю вирішеним. Форма поверхні тіл (тобто зміщення u_Z , u'_Z) поза областю зіткнення визначається тими ж формулами (3.32), (3.37), причому значення інтегралів можна відразу визначити, виходячи з аналогії з потенціалом поля зарядженого еліпсоїда, — цього разу інтегруючи поза його межами. Нарешті, користуючись формулами попереднього параграфа можна було б визначити також і розподіл

59

деформацій за об'ємом тіл (але, звичайно, лише на відстанях, малих у порівнянні з розмірами тіла).

Застосуємо отримані формули до опису зіткнення двох куль із радіусами R і R'. В цьому випадку

$$\mathbf{A} = \mathbf{B} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mathbf{R}} + \frac{1}{\mathbf{R'}} \right).$$

З міркувань симетрії ясно, що a = b, тобто область зіткнення є коло. Користуючись (3.39) одержуємо для радіуса a області зіткнення наступне співвідношення

$$a = F^{1/3} \left(D \frac{RR'}{R+R'} \right)^{1/3}$$
(3.40)

Відмітимо, що h в цьому випадку дорівнює різниці між сумою R + R' і відстанню між центрами куль. За допомогою (3.37) одержуємо для зв'язку між F і h:

$$h = F^{2/3} \left[D^2 \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{R'} \right) \right]^{1/3}$$
(3.41)

Відзначимо, що h пропорційно ступеню $F^{2/3}$ сили, що стискає. У свою чергу сила F пропорційна ступені $h^{3/2}$ викликаної нею деформації тіл. Запишемо вираз для потенціальної енергії U дотичних куль. Зауважуючи, що з очевидністю має бути $(-F) = -\partial U / \partial h$, одержуємо

U =
$$h^{5/2} \frac{2}{5D} \left(\frac{RR'}{R+R'}\right)^{1/2}$$

Нарешті, покажемо, що залежність виду

$$h = \operatorname{const} \cdot F^{2/3}, \quad F = \operatorname{const} \cdot h^{3/2}, \quad (3.42)$$

має місце не тільки для куль, але й при зіткненні інших тіл обмежених розмірів. У цьому легко переконатися з міркувань подібності. Якщо зробити заміну $a^2 \rightarrow \alpha a^2, b^2 \rightarrow \alpha b^2, F \rightarrow \alpha^{3/2}F$, де α — довільна

стала, то рівняння (3.39) залишаться незмінними. У рівнянні ж (3.38) права частина отримає додатковий множник α , і для того щоб воно залишилося незмінним, треба замінити h на α h. Звідси випливає, що F повинна бути пропорційною $h^{3/2}$.

3.5 Стаціонарні стани у 1D системі непружних частинок у гравітаційному полі

Розглянемо систему N безструктурних частинок однакової маси, які рухаються вертикально у вакуумі (при відсутності тертя), в полі сил тяжіння \vec{g} . Втрати енергії, при бінарних зіткненнях між частинками, компенсуються під час відбиття нижньої частинки від горизонтально розташованої твердої підкладинки, яка таким чином термалізує систему.

Спочатку розглянемо найпростіший випадок коли, N=2. Позначимо початкові координати і швидкості частинок, відповідно (h_1, v_1) і (h_2, v_2) . Для визначеності покладемо $0 \le h_1 \le h_2$. Приймемо, що при будь-яких швидкостях зіткнення падаючої частинки з підкладинкою, в момент відбиття швидкість завжди має одне й те саме відокремлене значення, скажемо ω_0 . Таким чином, будучи, взагалі кажучи, величиною розподіленою з деякою ймовірністю $\Phi(\omega)$, початкова швидкість після зіткнення з базою у такій моделі підпорядковується розподілу у вигляді дельта-функції Дирака $\Phi(\omega) = \delta(\omega - \omega_0)$.

За визначенням частинки зіштовхуються із швидкостями ω_1 і ω_2 , та розлітаються із швидкостями ω'_1 і ω'_2 , які задовольняють наступним співвідношенням

$$\omega_1' = \omega_1 - \frac{1+\alpha}{2}\omega_{12}, \quad \omega_2' = \omega_2 + \frac{1+\alpha}{2}\omega_{12}, \quad (3.43)$$

де $\omega_{12} = \omega_1 - \omega_2$; α - коефіцієнт непружних втрат, який характеризує дисипативні процеси зіткнення (коли $\alpha = 1$ то зіткнення є абсолютно пружними, а повна кінетична енергія зберігається, навпаки, коли $\alpha < 1$ має місце дисипація).

Позначаючи кінетичну енергію частинок 1 і 2 під час зіткнення та після нього, відповідно E_1^+ і E_2^- , E_1^- і E_2^+ , запишемо рівняння балансу енергії в системі

$$\left[E_{1}^{+}+E_{2}^{-}\right]-\left[E_{1}^{-}+E_{2}^{+}\right]=\frac{1-\alpha^{2}}{4}m\omega_{12}^{2},\qquad(3.44)$$

де m - маса частинки.

Переходячи до вивчення можливостей існування стаціонарних станів покладемо $E_2^- = E_2^+$ і припустимо, що періоди руху обох частинок дорівнюють один одному, тобто частинки стикаються одна з одною завжди на одній і тій самій висоті Х. Час, який потрібен частинці 1, щоб після зіткнення з підкладинкою набрати швидкість ω_1 , складає t^+ . Для повернення на базу після зіткнення з частинкою 2, їй потрібен час $t^- = T - t^+$, де T - період вищевказаного руху.

Приймаючи до уваги рівноприскорений характер руху частинок, між зіткненнями, після нескладних викладок отримуємо для періоду коливань наступний вираз [19]:

$$T = \frac{2\omega_0}{g} \cdot \frac{\alpha + 1}{\alpha + 3}.$$
 (3.45)

Таким чином, визначений стаціонарний стан є можливим. По-друге, як витікає із (3.45) період коливального руху у стаціонарному стані в побудованій модельній системі залежить від усіх параметрів моделі ω_0 ,

g і α , та змінюється у інтервалі $\left[\frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right] \cdot \frac{2\omega_0}{g}$ і, таким чином, сягає максимальних та мінімальних значень відповідно у границях абсолютно пружних ($\alpha = 1$) та непружних ($\alpha = 0$) зіткнень.

Розглянемо тепер одновимірну систему з трьох непружних точкових частинок, які розташовані відносно бази вертикально у послідовності 1, 2, 3. Користуючись схемою, яка була запропонована у попередньо розглянутому випадку двох частинок, отримуємо, що стан коливань з постійною амплітудою в системі трьох частинок є також можливим (див. Рис.3.6), а відповідний період стаціонарного руху дається наступним співвідношенням:

$$T = \frac{6\omega_0}{g} \cdot \frac{1+\alpha}{19-\alpha}.$$
 (3.46)

Зауважимо, що стаціонарний рух у модельній системі здійснюється у вигляді вертикальної стратифікації (розподілу густини) системи. Остання виглядає, як розшарування системи на чергу масштабів у межах яких здійснюється періодичний рух.



Рис.3.6. Швидкості частинок протягом встановлення стаціонарного режиму у системі трьох частинок за результатами чисельного моделювання

Знайдемо характерний розмір області, в якій відбувається рух, що відповідає визначеному стану. Для першої частинки

$$x_1 = \frac{10\omega_0^2}{g} \cdot \frac{(4\alpha - 1)(4 - \alpha)}{(19 - \alpha)^2}.$$
 (3.47)

Із (3.47), отримуємо умови існування стаціонарного стану:

$$\alpha \le \alpha_{\rm c} = 0.25 \,. \tag{3.48}$$

Таким чином, в моделі з сильно непружними зіткненнями знайдений у попередніх розглядах стан не створюється.

Система з N-частинок, може бути розглянута аналогічно до попереднього аналізу. Неважко знайти відповідний період коливань частинок у визначеному стаціонарному стані:

$$T_{N} = \frac{2\omega_{0}}{g} \cdot \left[N + \frac{(1-\alpha)}{3(1+\alpha)} (N-1)(2N-1) \right]^{-1}.$$
 (3.49)

Параметр α_c у цьому випадку надається наступним співвідношенням:

$$\alpha_{c} = \frac{N-2}{N+1} \tag{3.50}$$

Користуючись (3.50) при N=99, α_c дорівнює 0.97, тобто α_c доволі швидко прямує до 1 із збільшенням числа N. Таким чином визначений стаціонарний стан при достатньо великих N вироджується.

ГЛАВА 4

ДЕЯКІ ФЕНОМЕНОЛОГІЧНІ ПІДХОДИ ДО ВИВЧЕННЯ ФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ГРАНУЛЬОВАНОЇ МАТЕРІЇ

Досить широкий напрямок теоретичних досліджень динамічної поведінки збурених гранульованих матеріалів базується на концепції динамічних фазових переходів у застосування до відповідних процесів [4,6,9].

Зокрема було запропоновано трактувати перехід ГМ до флюїдизованої поведінки під дією зсувних деформацій, як фазовий перехід. Такий підхід супроводжують чисельні визначення розподілів відповідних параметрів впорядкування, які описують локальні стани речовин.

Визначення відповідного параметру впорядкування проводиться, як правило, на підставі феноменологічних аргументів і дає можливість наочно описувати динаміку систем. Інший підхід до вивчення динаміки гранульованої матерії використовує двофазну модель, яка розподіляє систему на дві підсистеми: статична (тобто така, яка описує компоненти, що перебувають у стані спокою) та друга – яка перебуває у динамічному стані (тобто рухається).

На основі евристичних міркувань, які випливають з аналізу експериментальних даних автором був застосований кінетичний (Ландау-Гінзбурга) підхід до опису динаміки гранульованих матеріалів [32]. На цьому шляху був визначений відповідний параметр впорядкування та побудовані керуючі кінетичні рівняння (які за формою є ізоморфними до відомих рівнянь Ландау-Гінзбурга та Кана-Хильярда). За допомогою запропонованого формалізму було здійснено опис релаксації поля впорядкування в окремих задачах про гранульовану речовину.

4.1 Кінетична модель вільного об'єму

Розглянемо спочатку найпростішу кінетичну модель компактизації, яка базується на теорії вільного об'єму ([13,17]). Покладемо, що V-число гранул у одиниці об'єму (аналог густини), ω - об'єм кожної окремої гранули. Тоді об'ємна фракція (параметр компактизації) Ψ , яку займають гранули, надається у наступному вигляді

$$\Psi = v\omega. \tag{4.1}$$

Внаслідок компактизації гранульована система ущільнюється. При цьому повний об'єм системи зменшується, і, відповідно, зростають значення густини ν та параметра компактизації Ψ . Можна очікувати, що система досягне максимально можливого ущільнення відповідної густини ν_m і частиною зайнятого об'єму Ψ_m (параметром компактизації)

$$\Psi_{\mathbf{m}} = \mathbf{v}_{\mathbf{m}} \,\boldsymbol{\omega} \,. \tag{4.2}$$

У найпростішому випадку сферичних частинок, які розподілено у тривимірному просторі, максимально можливе значення параметра компактизації Ψ_m для твердих сфер розраховано точно і становить близько 0.74 [6].

Система з параметром компактизації Ψ_m характеризується найменшим значенням середнього вільного об'єму V, у розрахунку на одну гранулу

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\mathbf{v}} - \frac{1}{\mathbf{v}_{\mathrm{m}}} = \frac{\omega}{\Psi} - \frac{\omega}{\Psi_{\mathrm{m}}} = \omega \left(\frac{1}{\Psi} - \frac{1}{\Psi_{\mathrm{m}}}\right) = \omega \frac{\Psi_{\mathrm{m}} - \Psi}{\Psi\Psi_{\mathrm{m}}}.$$
 (4.3)

Постулюємо, що імовірність для окремої частинки потрапити скрізь отвір між сусідніми частинками задовольняє розподілу Пуассона $P(\Omega)$:

$$P(\Omega) = \frac{1}{v} \exp\left(-\frac{\Omega}{v}\right), \qquad (4.4)$$

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

Кінетичний параметр компактизації у цьому випадку завдається фактором

$$f = f(\Omega = \omega) = \exp\left(-\frac{\omega}{v}\right) = \exp\left(-\frac{\Psi\Psi_m}{\Psi_m - \Psi}\right).$$
(4.5)

Сформулюємо кінетичне рівняння процесу у наступному вигляді

$$\frac{d\Psi}{d\tau} = k \exp\left(-\frac{\Psi \Psi_m}{\Psi_m - \Psi}\right), \qquad (4.6)$$

де k-кінетичний коефіцієнт.

Зазначимо, що поточний час ми асоціюємо з кількістю струшувань (циклів струсу), які діють на систему.

Інтегруючи (4.6) отримуємо функціонал

$$e^{\Psi_{m}}k\tau = \int_{\Psi_{1}}^{\Psi} d\Psi \exp\left(\frac{\Psi_{m}^{2}}{\Psi_{m} - \Psi}\right), \qquad (4.7)$$

де Ψ_1 - початковий параметр компактизації системи у момент часу $\tau=0$. Зрозуміло, що верхня межа інтегрування (Ψ) може приймати значення у наступному інтервалі

$$\Psi_1 < \Psi < \Psi_{\rm m} \,. \tag{4.8}$$

Виконуючі заміну

$$\frac{1}{\Psi_{\rm m} - \Psi} = \mathbf{x},\tag{4.9}$$

після підстановки (4.9) в (4.7) та елементарних перетворень отримуємо

$$e^{\Psi_{m}}k\tau = -\frac{e^{\Psi_{m}^{2}x}}{x}\bigg|_{x_{1}}^{x} + \Psi_{m}^{2}\Big[E_{1}\Big(-\Psi_{m}^{2}x_{1}\Big) - E_{1}\Big(-\Psi_{m}^{2}x\Big)\Big], \qquad (4.10)$$

де Е₁(у) - інтегральна експонента.

У першому наближенні, приблизний розв'язок (4.7) можна надати у наступному вигляді [71]:

$$\Psi \approx \Psi_{\rm m} \left(1 - \frac{\Psi_{\rm m} \Gamma}{1 + \Gamma \ln \left(1 + \frac{\tau}{\tau_0} \right)} \right), \tag{4.11}$$

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

$$\tau_0 = \frac{1}{k} \left(\frac{\Psi_m - \Psi_1}{\Psi_m} \right)^2 \exp\left(\frac{\Psi_m \Psi_1}{\Psi_m - \Psi_1} \right), \qquad \Gamma = \frac{\Psi_m - \Psi_1}{\Psi_m^2}. \tag{4.12}$$

Як свідчить фізичний експеримент з вивчення гранульованої компактизації [1-6,24] (ці свідчення підтверджуються, також, і результатами чисельного моделювання відповідних процесів) логарифмічний розподіл є типовим для поведінки параметру впакування.

Зазначимо, що формально, застосована модель не враховує процеси дисипації у гранульованих відкритих системах. Зрозуміло, що застосування формалізму моделі до дисипативної системи можливо лише поблизу її стаціонарних квазірівноважних станів. Таким чином, урахування дисипативних процесів здійснюється так би мовити ефективно у рамках постулювання самого стаціонарного стану у нерівноважній системі.

Вищеописана 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, представлена на Рис.4.1.



Рис.4.1 Фазова діаграма бінарної суміші гранул

Компактизація здійснюється вздовж довільного контуру діаграми, який відповідає співіснуванню у будь-який момент часу фази гравію (крупніші частинки, та дисперговані проміж ними дрібні частинки), та пудингу (дрібнодисперсна суміш з вкрапленнями великих частинок). Розшарування здійснюється вздовж умовної фазової траєкторії ОА, яка розділяє вищенаведені стани. Описана якісна фазова діаграма є за визначенням суттєво асиметричною. Взагалі кажучи, застосування кінетичної теорії вільного об'єму до багатокомпонентної суміші без будь яких суттєвих змін може бути здійсненим за тією ж схемою, що і у випадку однокомпонентної системи. Останнє є внаслідок того факту, що однокомпонентною.

4.2 Модель Колмогорова-Вогеля-Фулчера компактизації у гранульованих системах

Явище компактизації, тобто ущільнення гранульованих матеріалів, які знаходяться під дією зовнішніх збурень, безумовно належить до кола найбільш наочних проявів незвичайних властивостей таких систем.

Дослідження кінетики зменшення об'єму, який займає гранульована система, що відбувається під впливом зовнішніх струсів, або інших збурень є об'єктом інтенсивних досліджень [1-10]. Треба зауважити, що протягом ущільнення спостерігається велике різноманіття квазі рівноважних станів у вигляді кластерів, які можуть мати навіть кристалічну власну структуру [55]. При цьому на симетрію таких кристалітів, яка може бути різною, впливають разом такі внутрішні і зовнішні параметри, як інтенсивність непружних втрат енергії, геометрична форма та стан поверхні, дисперсія.

Виявляється що на протязі експериментальних спостережень за гранульованою речовиною ми здібні надійно контролювати лише декілька параметрів і одним з найголовніших є визначений на підставі здебільшого евристичних міркувань параметр впорядкування. У найпривабливішому випадку він має трансляційну симетрію, а взагалі кажучи має також описувати наявність орієнтаційних ступенів свободи на протязі ущільнення.

Якщо припустити, що мірою впорядкування у гранульованій системі є величина

$$\int (g(R) - 1) d\vec{R}$$
, (4.13)

де g(R) аналог радіальної функції розподілу. А з іншого боку, прийняти, що об'ємна компактизація $\eta = \frac{4\pi}{3} R^3 \rho$ задовольняє найпростішому кінетичному рівнянню

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -\Gamma \int (g(R) - 1) d\vec{R}$$
(4.14)

То користуючись простою, наочною моделлю для g(R) [46,81]

$$g(\mathbf{r}) = \theta(\mathbf{r} - \sigma_0) + A\delta(\mathbf{r} - \sigma_1)$$
(4.15)

і визначаючи коефіцієнт A за допомогою постульованого співвідношення для "гранульованого" аналога стиснення χ_T

$$\rho E \beta_E = 1 + \rho \int (g(\mathbf{r}) - 1) d\vec{\mathbf{r}}$$
, (4.16)

де Е та $\beta_E = -\frac{1}{V} \frac{\delta V}{\delta p}$ є відповідно, кінетична температура та стисливість, з (4.16), отримуємо

$$A = \frac{\eta + \rho E \beta_E - 1}{4 \pi \rho \sigma_1^2} . \tag{4.17}$$

Після усереднення функції розподілу за завданим об'ємом, можемо отримати кількість частин у ньому(густину).

Сформулюємо тепер найпростіше кінетичне рівняння, яке відповідає змісту задачі

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -k(g(r) - 1) , \qquad (4.18)$$

де k є відповідний кінетичний коефіцієнт. У конструкцію (4.18) увійшла саме частина радіальної функції розподілу, що не приводиться і яка прямує до нуля, коли відносна відстань між частинками необмежено збільшується. Інтегрування (4.18) з точністю до $0 \left(\frac{1}{\rho}\right)$ дає наступне співвідношення

$$\frac{\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}t} = -k(\eta_{\mathrm{m}} - \eta)E\beta_{\mathrm{E}}, \qquad (4.19)$$

де η , як зазвичай, визначає максимальне значення впакувальної фракції частина функції розподілу, що не (ми враховуємо при цьому, що класу функцій обмеженої варіації). приводиться, належить до У загальному випадку стисливість у свою чергу залежить від η та E і таким чином сценарій компактизації залежить від більшої кількості параметрів ніж тільки стисливість. Так, наприклад, було детально досліджено вплив на компактизацію, який відбувається завдяки такому параметру як поверхні частинки-гранули (див. роботи цитовані морфологія V передмові). З (4.18.) можна також отримати сценарій компактизації, який відтворює кінетику впакування у найближчому околі максимально впакованого стану

$$\eta = \eta_{\rm m} - (\eta_{\rm m} - \eta_1) \exp\left(-\widetilde{k} E \beta_{\rm E} t\right). \tag{4.20}$$

Релаксаційний закон компактизації (4.20) надійно спостерігається у експериментах із гранульованими матеріалами. Відповідний релаксаційний час

$$\tau = \frac{1}{kE\beta_E} \tag{4.21}$$

залежить від стисливості і кінетичної температури. Саме ця обставина дозволяє зрозуміти відмінності у компактизації гладких та шаруватих гранул при чому не тільки у найбільш впакованому стані, але й при параметру компактизації. проміжних значеннях Аналіз кінетики гранульованої компактизації показує різні сценарії, які здійснюються в залежності від початкових умов та характеру збурень. Так, зокрема, постійно спостерігається відомий сценарій Колмогорова-Вогеля-Фулчера однорідної релаксації параметру впорядкування, вибір якого здійснюється для кожної конкретної системи окремо. У подальшому ми покажемо як практично виглядає такий підхід на конкретному прикладі визначення міри стану, яка апріорно має бути масштабно-інваріантною.

4.3 Сегрегація у гранульованих матеріалах

Добре відомо, завдяки фізичним та чисельним експериментам, що гранульовані матеріали, поміщені у контейнер, який обертається навколо будь-якої осі, показують специфічну форму динамічної поведінки. Так, якщо система є, скажімо, бі-компонентною і складається з частинок двох сортів, які відрізняються один від одного розміром, вагою, або і тим, і іншим, поміщується в барабан, який обертається, то після декількох обертів переважна більшість менших за розмірами (або за вагою)
частинок-гранул зосереджується у центральній частині барабану поблизу вільної поверхні (див. Рис. 4.3)



Рис. 4.3 Сегрегація гранульованої суміші в барабані Оями

Це явище, яке носить назву радіальної сегрегації, детально вивчалося, для різних за розмірами та формами гранул, у різних інтервалах густин систем [47,55-57]. Сучасні експериментальні методи досліджень у цьому напрямку оперують технологічними можливостями візуалізації розподілу гранул у системі будь-якої розмірності. Мова йде про, так званий, метод магнітно-резонансної візуалізації. Ця методика дозволяє ескортувати і візуалізувати (за допомогою стандартної програми Visiolog) рух виділеної частинки – трасера.

У всіх випадках спостерігався рух гранульованого середовища, який спрямовує менші (легкі) частинки до центру ємності, яка обертається, а більші (важчі), відповідно, до периферії (див. Рис. 4.3). Ніякого перемішування, яке б можна було б очікувати у випадку сумішей звичайних рідин – не спостерігалося. Зважаючи на ті обставини, що багато параметрів, таких як, скажімо: співвідношення між власними розмірами частинок, їх геометричні форми та маса, дія сил тертя, швидкість обертання барабана (блендера), ступінь наповненості ємкості, та деякі інші, мали б впливати на хід та деталі поведінки збуреної обертальним рухом ємкості включення, гранульованої речовини, було розроблено декілька модельних підходів, які враховують ті чи інші риси явищ. Універсальної моделі гранульованої сегрегації до тепер ще не побудовано. Але зважаючи на те, що значна сукупність характеристик цього явища носить прикмети фазового перетворення, автором книги, та його колегами було запропоновано кінетичний підхід до його опису [31]. Це безумовно, в значній мірі, гіпотетична модель гранульованої сегрегації, оскільки система взагалі не є статистично визначеною (завдяки дисипації) і до того ж не є суцільним середовищем взагалі, а складається з дискретної сукупності практично макроскопічних частинок. Останнє, між іншим, означає, що гранульована сегрегація мала б бути трактована, як динамічне механічне явище.

Тим не менше ми розглянемо деяке поле конфігурацій $\xi(\vec{v},t)$, яке припускає визначення відповідних деформацій $\vec{\nabla} \xi(\vec{v},t)$, що мають місце в середині майже нерухомого кластеру. На цьому шляху можна ввести певний параметр, який має сенс параметра впорядкування в теорії фазових перетворень. Він може визначатися, скажімо, феноменологічно, на підставі наочних спостережень за протіканням гранульованої сегрегації та фіксації параметрів (об'єму, форми) асимптотичного квазірівноважного кластера. допомогою цих спостережень може бути визначена За область $\Omega(t)_{t \Rightarrow \infty}$, яку займають маленькі (легші) частинки в повністю сформованому в ході сегрегації центральному кластері. Що до аргументації такого алгоритму, безумовно слід зауважити, що він вимагає визначення поняття центрального кластеру, а також оточуючого простору, який займають частинки певного сорту $\Omega(t)$. Але навіть у порівнянні з іншими характеристиками дисипативних процесів, цей крок не виглядає абсолютно неприйнятним [11-14,66,67]. Прийнявши до уваги вищесказане, ми тепер у змозі ввести до розгляду деякий параметр впорядкування P(t), який за визначенням, змінює своє значення у інтервалі від 0 до 1

$$P(t) = \frac{\frac{\Omega(t)}{\Omega(\infty)} - \frac{\Omega(0)}{\Omega(\infty)}}{1 - \frac{\Omega(0)}{\Omega(\infty)}}$$
(4.22)



Рис. 4.4 Релаксація параметру впорядкування

Експерименти свідчать про наявність виключно простої поведінки параметра P(t) на протязі формування сегрегаційного кластера, яку наведено на Рис. 4.4. Наведені дані надійно описуються за допомогою формули

$$P(t) = P(\infty) \left[1 - \exp(-\frac{t}{\tau_c}) \right], \qquad (4.23)$$

де т - характерний час релаксації.

Така поведінка є наочною ремінісценцією картини релаксації поля впорядкування в теорії фазових перетворень Ландау-Гінзбурга [31].

Ми, таким чином, опиняємось перед спокусою застосування методів цієї теорії до опису зовсім відмінного, від звичайних статистичних систем, за своєю фізичною природою явища, а саме – гранульованої сегрегації. Розглянемо радіальну сегрегацію, як слабо нерівноважний релаксаційний процес у термінах відповідно визначеного параметра впорядкування $\phi(\vec{r},t)$, зосереджуючи увагу на еволюції $\phi(\vec{r},t)$ поблизу стаціонарного стану. Покладемо, що кінетика $\phi(\vec{r},t)$ може бути описана за допомогою керуючого динамічного рівняння типу Ландау-Гінзбурга у випадку неконсервативного поля $\phi(\vec{r},t)$ [31]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta H}{\delta \varphi} \quad , \tag{4.24}$$

або за допомогою рівняння Кана-Хільярда у випадку консервативного поля впорядкування

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\Delta \left\{ -\Gamma \frac{\delta H}{\delta \varphi} \right\}, \qquad (4.25)$$

де Г - кінетичний коефіцієнт, H(ϕ) - нерівноважний потенціальний функціонал, який може бути змодельовано у формі найпростішої бістабільної функції

$$H(\varphi) = \int \left[\frac{c}{2}(\vec{\nabla}\varphi)^2 - \frac{a}{2}\varphi^2 - \frac{b}{4}\varphi^4\right] d\vec{r}$$
(4.26)

Ми вибираємо такий функціонал $H(\phi)$, який якісно забезпечує H(φ) наступний сценарій: протягом часу еволюції зменшується найкрутішою траєкторією доки не буде досягнуто одного із його мінімумів. Нестійкості структур, пов'язані з наявністю екстремуму H(ϕ) типа сідлової точки, що обумовлює величину бар'єра між різними локально стійкими траєкторіями у фазовому просторі-атракторами. Ми будемо використовувати цю модель з метою дослідження природи критичного уповільнення в динаміці (розпаду) у такій критичній області, де система демонструє структурну нестійкість. Такий різновид підходу використовувався для реакційно-дифузійних систем [60-62], де з'ясувалося що еволюція у часі нерівноважного потенціалу Н(ф) демонструє критичне уповільнення у околі стаціонарних станів, причому характерний масштаб часу залежить від розміру системи, а також від відстані до критичної точки.

Підставляючи (4.26) у (4.24), (4.25) ми знаходимо (та переходячи до безрозмірних змінних) наступні рівняння руху для $\tilde{\phi}(\vec{r},t)$:

$$\frac{\partial \widetilde{\varphi}}{\partial \tau} = \Delta' \widetilde{\varphi} + \widetilde{\varphi} - \widetilde{\varphi}^3 \tag{4.27}$$

$$\frac{\partial \widetilde{\varphi}}{\partial \tau'} = -\Delta' \{ \Delta' \widetilde{\varphi} + \widetilde{\varphi} - \widetilde{\varphi} \}^3$$
(4.28)

та

відповідно. Тут ми використали наступні безрозмірні змінні

$$\tau \equiv \Gamma at;$$
 $\tau' \equiv \Gamma ct;$ $\vec{r}' \equiv \sqrt{\frac{a}{c}}\vec{r}$, (4.29)

а величина поля $\phi(\vec{r},t)$ вимірюються у одиницях $\sqrt{\frac{a}{b}}$,тобто:

$$\widetilde{\omega}(\vec{r},t) \equiv \sqrt{\frac{a}{b}} \widetilde{\varphi}(\vec{r}',\tau)$$
(4.30)

Нелінійні диференціальні рівняння у часткових похідних (4.27), (4.28) у загальному випадку не інтегруються у квадратурах. Але поблизу очікуваної точки переходу у стаціонарний стан, нехтуючи флуктуаціями $\tilde{\phi}(\vec{r},t)$ може бути застосована наступна схема квазі-лініаризації [46]:

$$\varphi^{3}(\vec{r},t) = \left\langle \varphi^{2}(t) \right\rangle \varphi(\vec{r},t) , \qquad (4.31)$$

за допомогою якої рівняння може бути розв'язано точно(кутові дужки означають процедуру осереднення за усіма початковими станами). Можна показати, що наближення (4.31) стає все більш адекватним в границях коли флуктуації поля параметра впорядкування $\widetilde{\phi}(\vec{r},t)$ є незначними у порівнянні із квазірівноважним значенням параметра впорядкування [46].

Розглянемо спочатку більш детально польове рівняння руху для випадку неконсервативного параметра впорядкування. Підставляючи (4.31) у (4.27) знаходимо

$$\frac{\partial \widetilde{\varphi}}{\partial \tau} = \Delta' \widetilde{\varphi} + \left(1 - \left\langle \widetilde{\varphi}^2 \left(\tau \right) \right\rangle \right) \widetilde{\varphi} .$$
(4.32)

Рівняння (4.32) є незамкненим внаслідок присутності другого моменту $\langle \widetilde{\varphi}^2(\tau) \rangle$. Але строгий розв'язок рівняння (4.32), як ми покажемо, можна отримати у термінах $\langle \widetilde{\varphi}^2(\tau) \rangle$, тобто для другого моменту $\widetilde{\varphi}(\vec{r},t)$. У термінах Фур'є - перетворення параметр впорядкування позначимо $\widetilde{\varphi}_{\vec{k}}(\tau)$, тоді рівняння (4.32) приймає наступну форму

$$\frac{\partial \widetilde{\varphi}_{\vec{k}}(\tau)}{\partial \tau} = \left(-k^2 + 1 - \left\langle \widetilde{\varphi}^2(\tau) \right\rangle \right) \widetilde{\varphi}_{\vec{k}}(\tau) , \qquad (4.33)$$

$$\sigma_{\vec{k}} = \frac{1}{(2\pi)} \int e^{-i\vec{k}\vec{r}'} \widetilde{\varphi}(\vec{r}',\tau) d\vec{r}'$$

Розв'язок (4.33) дається у вигляді

$$\widetilde{\varphi}_{\vec{k}}(\tau) = \widetilde{\varphi}_{\vec{k}}(0) \exp\left[\left(-k^2 + 1\right)\tau - \int_{0}^{\tau} \langle \widetilde{\varphi}(s) \rangle ds\right], \qquad (4.34)$$

де $\tilde{\phi}_{\vec{k}}(0)$ початкове значення Фур'є компоненти поля параметра впорядкування. Знаходячи модуль квадрата виразу (4.34) та інтегруючи результат по \vec{k} , та користуючись теоремою Парсеваля

$$\int \left| \widetilde{\varphi}_{\vec{k}}(\tau) \right|^2 d\vec{k} = \int \widetilde{\varphi}^2(\vec{r}', \tau) d\vec{r}'$$

отримуємо строгий розв'язок рівняння (4.33) у наступній замкненій формі:

$$\langle \tilde{\varphi}^2(\tau) \rangle \exp\left[2 \int \langle \tilde{\varphi}^2(s) \rangle ds\right] = \exp(2\tau) \int g(\vec{k}) \exp\left(-2\tau k^2\right) d\vec{k}$$
 (4.35)

Після очевидних маніпуляцій з (4.35) маємо

$$\langle \widetilde{\varphi}(\tau) \rangle = \frac{J_1(\tau)}{1 + J_2(\tau)} \exp(2\tau),$$
(4.36)

де

$$J_1(\tau) \equiv \int g(\vec{k}) \exp(-2\tau k^2) d\vec{k}, \qquad (4.37)$$

$$J_2(\tau) \equiv 2 \int_0^{\tau} J_1(s) \exp(2s) ds$$
, (4.38)

$$\mathbf{g}(\vec{\mathbf{k}}) = \left\langle \left| \widetilde{\boldsymbol{\varphi}}_{\vec{\mathbf{k}}}(\mathbf{0}) \right|^2 \right\rangle.$$
(4.39)

Співвідношення (4.36)-(4.39) дають точний розв'язок розглянутої задачі у термінах усередненого квадрата параметра впорядкування. Відмітимо, що розв'язок залежить від початкових умов та статистичної структури початкових станів (остання, визначається за допомогою $g(\bar{k})$ чи статистичного структурного фактора). Далі ми покажемо, що вирази отримані (4.36)-(4.39)для системи нескінченного розміру (y координатному просторі), задовольняють природним часовим граничним умовам $\langle \widetilde{\varphi}(\tau) \rangle \rightarrow \text{const}$ коли $\tau \rightarrow 0$; та $\langle \widetilde{\varphi}(\tau) \rangle \rightarrow 1$ коли $\tau \rightarrow \infty$. Ми не роль збираємося тут вивчати, яку відіграють граничні умови V координатному щоб уникнути просторі, для того математичних Слід також відмітити, що строгий ускладнень. характер отриманих результатів дозволяє використовувати їх для якісних оцінок також у випадку систем обмеженого розміру.

Подальший аналіз розв'язків (4.36)-(4.39) потребує поповнення інформації про статичну картину поля параметра впорядкування.

У багатьох відношеннях проблема опису статичної структури динамічних дисипативних систем в гранульованих фазах виявляється навіть більш ускладненою, ніж вивчення їх динаміки. Наприклад, дослідження кореляційної функції у гранульованому середовищі вказує на присутність далекодіючих кореляцій між гранулами [49,50]. Взагалі, визначення початкового стану, як, теоретично так і в експериментах з гранульованою речовиною, вимагає підвищеної дбайливості, щоб уникати непорозумінь, пов'язаних із відсутністю точних визначень деяких параметрів. Теоретично статистична структура класичних рідин описується набором багаточастинкових функцій розподілу груп частинок [69]. Нехтуючи окремими деталями у поведінці функцій розподілу можливо також моделювати головні риси їх поведінки безпосередньо, узгоджуючи параметри моделі із експериментальною інформацією про макроскопічні властивості змодельованих систем, які визначаються із урахуванням групових функцій розподілу. Так, наприклад, як було показано у $g(\mathbf{r})$ може бути наближеним наступною формою (див. (4.15))

$$g(\mathbf{r}) = C\theta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}) + \theta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) + A(\mathbf{r}_0)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \qquad (4.40)$$

де $\theta(z)$ і $\delta(z)$ - це функції Хевісайда (Heavyside) та дельта-функція Дірака(Dirac), відповідно; $\frac{1}{2}r_0$ - це радіус частинки; С і $A(r_0)$ константа і параметризуюча функція. Параметр A може розглядатися, наприклад, як функція вільної області між двома недеформованими частинками і може бути визначений з допомогою положень нулів g [46]. При цьому, A також має залежати від радіусу частинки $A(r_0)$. Перший внесок до (4.40) відповідає відмінній від нуля вірогідності для недеформованих частинок, перетинати одна одну. Після Фурьєперетворення (4.40), одержуємо

$$\widetilde{g}(\vec{k}) = \delta(\vec{k}) - (1 - C)\sqrt{\frac{2}{\pi}}r_0^3 \frac{j_1(kr_0)}{kr_0} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{A(r_0)}{r_0} j_0(kr_0), \quad (4.41)$$

де: $j_0(z)$ і $j_1(z)$ - це сферичні функції Бесселя. Форма (4.41) грубо відтворює всі основні властивості поведінки типової функції розсіяння [47,81]: існування координаційних сфер, розпад кореляцій, і т.п., і включає також матеріальні параметри. В принципі, за допомогою (4.41) може бути сконструйоване, також, відповідне рівняння стану [63].

Розглянемо тепер часову еволюцію поля параметру впорядкування, користуючись точним розв'язком, знайденим вище, а також використовуючи початкові умови, змодельовані в термінах статичної структурної функції $g(\vec{k})$. Користуючись (4.41), (4.37) і (4.38) одержуємо після відповідних маніпулювань

$$J_{1}(\tau) \equiv J_{1}(\tau, \alpha) = 1 - 2\pi\sqrt{2} \left\{ (1 - C) - \left[\sqrt{\pi} \operatorname{erf}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\tau}}\right) - \alpha \exp\left(-\frac{\alpha^{2}}{\tau}\right) \right] - \frac{1}{4} \frac{A(r_{0})}{r_{0}} \alpha^{3} \frac{1}{\tau\sqrt{\tau}} \exp\left(-\frac{\alpha^{2}}{\tau}\right) \right\}$$

$$(4.42)$$

де $\operatorname{erf}(z)$ - це функція похибок, $\alpha \equiv \frac{r_0}{2\sqrt{2}}$ і

$$J_{2}(\tau) = J_{2}(\tau, \alpha) = \exp(2\tau) - 1 + 4\pi\sqrt{2} \left\{ \left(1 - C\right) \left[\sqrt{\frac{\sqrt{\pi}}{2}} \left(1 - \exp(2\tau) \operatorname{erf}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\tau}}\right)\right) + 4\alpha S(\tau, \alpha) \right] + \left[\left(1 - C\right) \frac{\alpha}{2\sqrt{2}} - \alpha\sqrt{2}A(r_{0}) \right] \frac{\partial}{\partial\alpha} S(\tau, \alpha) \right\}$$

$$(4.43)$$

$$S(\tau,\alpha) = \frac{\sqrt{\pi}}{i4\sqrt{2}} \left\{ \exp\left(i2\sqrt{2\alpha}\right) \exp\left(i\sqrt{2\tau} + \frac{\alpha}{\sqrt{2\tau}}\right) + \exp\left(-i2\sqrt{2\alpha}\right) \exp\left(i\sqrt{2\tau} - \frac{\alpha}{\sqrt{2\tau}}\right) - \exp\left(i2\sqrt{2\alpha}\right) + \exp\left(-i2\sqrt{2\alpha}\right) \right\}^{(4.44)}$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} S(\tau, \alpha) = \frac{\sqrt{\pi}}{i4\sqrt{2}} \left\{ i2\sqrt{2} \left[\exp\left(i2\sqrt{2}\alpha\right) \exp\left(i\sqrt{2}\tau + \frac{\alpha}{\sqrt{2}\tau}\right) - \exp\left(-i2\sqrt{2}\alpha\right) \exp\left(i\sqrt{2}\tau - \frac{\alpha}{\sqrt{2}\tau}\right) - \exp\left(i2\sqrt{2}\alpha\right) - \exp\left(-i2\sqrt{2}\alpha\right) \right] + \exp\left(i2\sqrt{2}\alpha\right) \exp\left(i\sqrt{2}\tau - \frac{\alpha}{\sqrt{2}\tau}\right) + \frac{\alpha}{\sqrt{2}\tau} + \exp\left(-i2\sqrt{2}\alpha\right) \exp\left(i\sqrt{2}\tau - \frac{\alpha}{\sqrt{2}\tau}\right) \right\}$$

$$(4.45)$$

Співвідношення (4.42)-(4.45) дають точний розв'язок рівняння (4.33). Асимптотичні границі отриманих розв'язків визначаються поведінкою функцій $J_1(\tau, \alpha)_i J_2(\tau, \alpha)$ Наприклад, у границі $\tau \to \infty$ рівняння (4.42)-(4.45) призводять до наступних співвідношень:

$$\langle \widetilde{\varphi}(\tau) \rangle \cong \left[1 + \frac{\pi}{2} \frac{A(r_0)}{r_0} \frac{r_0^3}{\tau \sqrt{\tau}} \exp\left(-\frac{r_0^2}{8\tau}\right) \right] \times \\ \times \left[1 + \hat{\Omega}(A, \alpha, C) \frac{1}{\sqrt{\tau}} - B(\alpha, C) \frac{1}{\sqrt{\tau}} \exp\left(-2\tau\right) - \widetilde{\Omega}(A, \alpha, C) \exp\left(-2\tau\right) \right]^{-1}$$

$$(4.46)$$

де

$$\hat{\Omega}(A,\alpha,C) = 2\pi r_0 \left[(1-C)\cos 2\sqrt{2\alpha} - \frac{A(r_0)}{r_0} r_0^2 \sin 2\sqrt{2\alpha} \right],$$

$$B(\alpha,C) = 2\pi\sqrt{2\pi} (1-C)\alpha,$$

$$\widetilde{\Omega}(A,\alpha,C) = 2\pi\sqrt{\pi} \left[(1-C)\sin 2\sqrt{2\alpha} + \frac{A(r_0)}{r_0} r_0^2 \cos 2\sqrt{2\alpha} \right].$$
(4.47)

У граничному випадку, $\langle \widetilde{\varphi}^2(\tau) \rangle$ прямує до 1. Як можна бачити з (4.46) якісно відмінний сценарій ослаблення $\langle \widetilde{\varphi}^2(\tau) \rangle$ також може бути здійснений асимптотично за певних умов, а саме коли

$$\hat{\Omega}(A,\alpha,C)\frac{1}{\sqrt{\tau}} > \widetilde{\Omega}(A,\alpha,C)\exp(-2\tau)$$
(4.48)

В цьому випадку отримуємо

$$\left\langle \tilde{\varphi}^{2}\left(\tau \right) \right\rangle \cong \frac{1}{1 + \frac{\hat{\Omega}}{\sqrt{\tau}}} \approx 1 - \frac{\hat{\Omega}}{\sqrt{\tau}}.$$
 (4.49)

В разі порушення умови (4.48) маємо

$$\left\langle \widetilde{\varphi}^{2}(\tau) \right\rangle \cong \frac{1}{1 - \widetilde{\Omega} \exp(-2\tau)} \approx 1 + \widetilde{\Omega} \exp(-2\tau).$$
 (4.50)

Очевидно, що в межах застосованої моделі початкові умови впливають на характер асимптотичної поведінки поля параметру

впорядкування, забезпечуючи збільшення характерних часів релаксації (ефект пам'яті).

Розглянемо тепер поведінку параметра впорядкування у разі консервативних полів, яка задовольняє рівнянню (4.28). Використовуючи процедуру квазіліанеризації, визначену рівнянням (4.31) і повторюючи схему, розроблену для неконсервативного поля (див.(4.34)), отримуємо співвідношення

$$\langle \widetilde{\varphi}^2(\tau') \rangle = \int d\vec{k} \widetilde{g}(\vec{k}) \exp\left[-2\tau' k^4 + 2k^2 \int_0^{\tau'} \langle \widetilde{\varphi}^2(s) \rangle ds \right],$$
 (4.51)

де: $\tilde{g}(\vec{k})$ надається (4.41), і τ' - це безрозмірний час, що визначається за формулою (4.29). Після відповідних розрахунків, з (4.51) одержуємо

$$\left\langle \widetilde{\varphi}^{2}(\tau') \right\rangle = \frac{2\pi}{\sqrt{2\tau'}} \int_{\underline{\Xi(\tau')}} d\sigma \exp\left(\sigma^{2}\right) \sqrt{\frac{2\sqrt{2\tau'}\sigma + 2\Xi(\tau')}{4\tau'}} \cdot \widetilde{g}\left[\sqrt{\frac{2\sqrt{2\tau'}\sigma + 2\Xi(\tau')}{4\tau'}}\right],$$

$$(4.52)$$

$$_{\mathcal{A}\mathbf{e}} \Xi(\tau') \equiv \tau' - \int_{0}^{\tau'} \langle \widetilde{\varphi}^{2}(\mathbf{s}) \rangle d\mathbf{s}$$

Інтеграл (4.52) експоненціально швидко сходиться в точці і до того ж може бути задовільно оцінений за допомогою виразу

$$\left\langle \widetilde{\varphi}^{2}(\tau') \right\rangle = \frac{\pi \sqrt{\pi}}{2} \frac{\sqrt{\Xi(\tau')}}{\tau'} \exp\left[\frac{\Xi^{2}(\tau')}{2\tau'}\right] \operatorname{erfc}^{2} \left[-\frac{\Xi(\tau')}{\sqrt{2\tau'}}\right] \cdot \widetilde{g}\left[\sqrt{\frac{\Xi(\tau')}{2\tau'}}\right].$$

$$(4.53)$$

Строгий функціонал (4.53) може бути істотно спрощено. Оскільки функція $\exp\left[\frac{\Xi^2(\tau')}{2\tau'}\right] \operatorname{erfc}^2\left[-\frac{\Xi(\tau')}{\sqrt{2\tau'}}\right]$ поводиться експоненціально, і функція $\widetilde{g}\left[\sqrt{\frac{\Xi(\tau')}{2\tau'}}\right]$ показує обмежені варіації в межах інтервалу визначення, без втрати загального характеру аналізу функціонал (4.53), може бути представлений у вигляді

$$\mathbf{y}(\tau') = \gamma \frac{\Xi(\tau')}{\tau'} \exp(\tau'), \qquad (4.54)$$

де

$$y(\tau') \equiv \left\langle \widetilde{\varphi}^2(\tau') \right\rangle, \qquad \gamma \equiv \frac{\pi^3}{4} \widetilde{g}^2\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right).$$

Вираз (4.54) породжує диференціальне рівняння для визначення $y(\tau')$, яке належить до типу Абелевих, а саме

$$\frac{du}{d\tau'} = f_3 u^3 + f_2 u^2 + f_1 u, \qquad (4.55)$$

де

$$f_{3} \equiv -2\nu\gamma^{2}\tau'^{2}\exp(\tau'); \quad f_{2} \equiv \nu\gamma^{2}\exp(\tau'); f_{1} \equiv \beta; \quad u(\tau') \equiv 1/2\tau'^{2}y(\tau');$$

$$(4.56)$$

$$\nu = \begin{cases} 4, & \tau' \to \infty, \\ 1, & \tau' \to 0; \end{cases} \qquad \beta = \begin{cases} -\frac{1}{\tau'}, & \tau' \to 0, \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{\tau'}, & \tau' \to \infty. \end{cases}$$
(4.57)

Рівняння (4.55) не можуть бути проінтегровані в квадратурах, окрім, як в декількох окремих випадках [72-74]. Але в нашому випадку, щоб здійснити якісний аналіз достатньо показати, що експоненціально загасаючі функції належать до класу асимптотичних розв'язків (4.55). Фактично, ми повинні просто показати, що функції типу

$$u(\tau') = \left\lfloor 1 + \varepsilon(\tau') \right\rfloor / 2\tau'^2 , \qquad (4.58)$$

де

$$\varepsilon(\tau') = \begin{vmatrix} \rightarrow 0 \\ \tau' \rightarrow \infty \end{matrix}$$
 $\lim_{\tau' \rightarrow \infty} \varepsilon(\tau') = 0,$

задовольняють (4.55), якщо $\varepsilon(\tau')$ прямує до нуля швидше за будь-який степеневий закон (в принципі, така сильна умова навіть не потрібна). Співвідношення (4.58)задовольняє (4.55),якщо ε $(\tau') = \hat{\Delta} (\tau') e^{-\hat{\Gamma} \tau'}$ (де $\hat{\Delta}(\tau')$ належить до класу функцій з обмеженою варіацією). Тому експоненціальний закон $\left\langle \widetilde{\phi}^{2}(\tau') \right\rangle = 1 - \exp(-\tau'/\tau'_{0})$ загасання параметру впорядкування безумовно і наочно витікає зі сценарію релаксації поля впорядкування, змодельованого вище. Відзначимо, що експериментальні дані щодо параметра впорядкування у ГМ свідчать про наявність його кінетики слабко-немонотонної поведінки ([1,3,33]). Ця поведінка може бути просто описане з допомогою чинника $\hat{\Delta}$ (τ '), який, як можна собі уявити, поводиться також немонотонно (за умови обмеженої варіації в завданому інтервалі). Зауважимо, що розв'язки типу $\hat{\Delta}(\tau') \exp(-\hat{\Gamma}\tau')$ також асимптотично задовольняють (4.55). Як витікає з (4.55), рівняння Абеля, з достатнім ступенем точності, зводиться до диференціального рівняння Рікатті

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\tau'} = \gamma^2 u^2 - \frac{u}{\tau'} \qquad , \tag{4.59}$$

яке має простий інтеграл [74]:

$$u(\tau') = \frac{1}{c\tau' - \gamma^2 \tau' \ln \tau'}.$$
(4.60)

Вираз (4.60) породжує, у свою чергу, функцію

$$\mathbf{y}(\tau') = \left\langle \widetilde{\varphi}^2(\tau') \right\rangle = \frac{\mathbf{c}_1}{2\tau'} - \frac{\gamma^2}{2} \frac{\ln \tau'}{\tau'}, \qquad (4.61)$$

де C₁ - це певна константа. Як випливає з (4.61), на протязі деякого визначеного часу, безрозмірний параметр впорядкування може

поводитися неекспоненційно повільно (ця поведінка може бути інтерпретована, як перебування системи у деякому метастабільному гетерогенному стані). Такий критичний динамічний розпад належить звичайно до детермінованих властивостей розглянутої моделі. Але в той же час, як відомо з експериментів з гранульованими матеріалами [33-38], типовий час релаксації майже не змінюється (або змінюється максимум поведінка можливо відображає існування критичного двічі). Така повільного динамічного режиму (в термінах опису поля параметра впорядкування). Можливо, що в контексті вибраної моделі, картина ослаблення кореляцій може і не залежати (або залежати досить слабко) від параметрів подібних, наприклад, відношенню діаметрів частинок в (бікомпонентній) суміші.

Динаміка поля параметра впорядкування може бути, належним чином, відображена в поведінці так званої функції розсіювання

$$S(\vec{k},t) \equiv \left\langle \vec{\varphi}_{\vec{k}}^2(t) \right\rangle,$$

або за допомогою динамічного структурного фактора $S(\vec{k},\omega)$

$$S(\vec{k},\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} S(\vec{k},t) dt \qquad (4.62)$$

Явні співвідношення для визначення $S(\vec{k}, \omega)$ можуть бути одержані за допомогою (4.34), а також його аналогу у разі консервативних полів параметру впорядкування, а саме

$$S^{(n)}(\vec{k},\tau) = \tilde{g}(\vec{k})exp\left[-2k^{2}\tau + 2\Xi(\tau)\right], \qquad (4.63)$$

$$\mathbf{S}^{(\mathbf{c})}(\vec{\mathbf{k}},\tau') = \widetilde{\mathbf{g}}(\vec{\mathbf{k}}) \exp\left[-2\mathbf{k}^{4}\tau' + 2\mathbf{k}^{2}\Xi(\tau')\right], \quad (4.64)$$

де індекси n i C означають, що функції належать випадку неконсервативного і консервативного поля впорядкування, відповідно. Підстановка (4.35) в (4.63), з урахуванням (4.36)-(4.39), приводить до наступного аналітичного виразу для функції розсіяння $S^{(n)}(\vec{k},\tau)$

$$S^{(n)}\left(\vec{k},\tau\right) = \widetilde{g}\left(\vec{k}\right)\left(1+J_{2}\left(\tau\right)\right)\exp\left[-2k^{2}\tau+2\tau\right], \quad (4.65)$$

де $g(\vec{k})$ і $J_2(\tau)$ визначаються за допомогою співвідношень (4.41) і (4.43, (4.64) сумісно із (4.51-4.53) 4.44). Розглядаючи отримуємо функціональну форму, яка визначає $S^{(c)}(\vec{k}, \tau')$. Характерні масштаби для k визначаються значеннями аргументу структурного фактора $k_n^{(n)} = 0; k_{c_1}^{(c)} = 0; k_{c_2}^{(c)} = \frac{1}{\sqrt{2\tau'}} \sqrt{\Xi(\tau')}$ Таким чином, v разі неконсервативних полів параметру впорядкування домінує м'яка критична $k_{c}^{(n)} = 0$. Це с мода, яка відповідає критичному значенню вектора фазового перетворення другого роду. У разі консервативного прикметою параметра впорядкування, разом з м'якою критичною модою поля спостерігається також можливість жорсткої моди, яка є сценарієм вже фазового переходу першого роду [63-65]. Легко побачити, що в асимптотичній границі, якщо для спрощення покласти $\left< \widetilde{\phi}^2(\tau') \right> \cong l/[1 + \widetilde{A}e^{-2\tau'}]$, ослаблення консервативного поля параметра порядку характеризується певним домінуючим масштабом довжини (масштаб неоднорідності):

$$l_{c} = \frac{2\pi}{k_{c_{2}}^{(c)}} = 2\sqrt{2}\pi \sqrt{\frac{\tau'}{\Xi(\tau')}} = 2\sqrt{2}\pi \sqrt{\frac{\tau'}{\left(1 - \frac{1}{\widetilde{A}}\right)\tau' + \frac{1}{2\widetilde{A}}\ln\left[\frac{1 + \widetilde{A}}{1 + \widetilde{A}\exp(-2\tau')}\right]}$$
(4.66)

У границі коли $\tau' \rightarrow \infty$ (4.66) спрощується і виглядає як:

$$l_{c} \approx \frac{2\sqrt{2}\pi}{\sqrt{1-\frac{1}{\widetilde{A}}}} \left[1 - \frac{\ln\left(1+\widetilde{A}\right)}{4\widetilde{A}} \frac{1}{\tau'} + \frac{1}{4} \frac{\exp(-2\tau')}{\tau'} \right],$$

$$\lim_{\tau' \to \infty} l_{c}(\tau') = 2\sqrt{2}\pi / \sqrt{1 - \widetilde{A}}$$
(4.07)

(A 67)

Оскільки $l_c(\tau')$, очевидно, зменшується з часом, зсув до більш маленьких значень масштабів неоднорідності відбувається із ростом часу. Це означає, що однорідний домен, наприклад, зростає за розмірами. Ця поведінка також супроводжується зростанням амплітуди проміжної функції розсіювання у відповідності до співвідношення

$$\propto \exp\left\{\left(1-\frac{1}{\widetilde{A}}\right)\tau' + \frac{1}{2\widetilde{A}}\ln\left[\frac{1+\widetilde{A}}{1+\widetilde{A}\exp(-2\tau')}\right]\right\}.$$
(4.68)

Вищеописана реструктуризація супроводжується водночас звуженням головного максимуму функції $S^{(c)}(\vec{k}, \tau')$. Якщо припустити, що співвідношення (4.67) все ще дійсне для відносно великих інтервалів часу, таких щоб можна було б забезпечити умови конкуренції між степеневим законом і експоненціальною поведінкою, отримуємо наступний сценарій

$$l_{c}(\tau') = 2\sqrt{2}\pi\sqrt{\frac{\widetilde{A}}{\widetilde{A}-1}} \begin{cases} 1 + \frac{1}{4}\frac{\widetilde{A}}{\widetilde{A}-1}\frac{\exp(-2\tau')}{\tau'}, & \tau' < \tau'_{0} \\ 1 & , & \tau' = \tau'_{0} \\ 1 - \frac{1}{4}\frac{\ln(1+\widetilde{A})}{4\widetilde{A}}\frac{1}{\tau'} & , & \tau' > \tau'_{0}. \end{cases}$$
(4.69)

Таким чином, ми одержуємо, що на певних інтервалах часу, а саме коли

$$\tau'_0 = \frac{1}{2} \ln \frac{\widetilde{A}}{\ln(l + \widetilde{A})}$$
(4.70)

 $l_{x}(\tau')$ стає практично незалежним від часу (це означає також, що $l_{c}(\tau')$ також не залежить від часу в безпосередньому наближенні характерного інтервалу τ'_{0}). На малих часах, $l_{c}(\tau')$ зменшується майже експоненціально $(\widetilde{A} > 1)$.

Якщо $\tau' < \tau'_0$ має місце швидке зростання неоднорідності (тобто інфраструктура домена сильно ускладнюється). За умов $\tau' \cong \tau'_0$ ми маємо, так би мовити, спроможний неоднорідний стан, який у подальшому

розпадається вже неекспоненціально повільно і система прямує до стійкого стану. У цьому проміжному стані розпад домену неоднорідності перетворюється на повільний (неекспоненціальний) процес, що може відбуватися, наприклад, за рахунок конфігураційних ентропійних ефектів [32]. Застосовуючи Фурьє-перетворення до (4.63),(4.64), користуючись асимптотиками, після відповідного інтегрування ([70,71]), відбираючи реальну частину результуючої форми, одержуємо аналітичний вираз для динамічного структурного фактора у наступному вигляді:

$$S^{(n)}(\vec{k},\omega) = \frac{1}{2} \tilde{g}(\vec{k}) \exp\left(\frac{\ln(1+\tilde{A})}{\tilde{A}}\right) \Gamma\left[k^{2} - \left(1 - \frac{1}{\tilde{A}}\right)\right] \cos\tilde{\theta}(\omega,k) \times \prod_{j=0}^{\infty} \frac{\left|j + k^{2} - \left(1 - \frac{1}{\tilde{A}}\right)^{2}\right|}{\sqrt{\frac{\omega^{2}}{4} + \left[j + k^{2} - \left(1 - \frac{1}{\tilde{A}}\right)\right]^{2}}},$$

$$(4.71)$$

$$S^{(c)}(\vec{k},\omega) = \frac{1}{2} \tilde{g}(\vec{k}) \exp\left[\frac{\ln(1+\tilde{A})}{\tilde{A}}k^{2} - 4\left(k^{2} - \left(1 - \frac{1}{\tilde{A}}\right)\right)k^{2}\ln k\right] \times \Gamma\left[k^{2}\left(k^{2} - \left(1 - \frac{1}{\tilde{A}}\right)\right)\right] \cos(2\omega\ln k + \theta(\omega, k)) \times \left(4.72\right) \times \prod_{j=0}^{\infty} \frac{\left|j + k^{4} - \left(1 - \frac{1}{\tilde{A}}\right)k^{2}\right|}{\sqrt{\frac{\omega^{2}}{4} + \left[j + k^{4} - \left(1 - \frac{1}{\tilde{A}}\right)k^{2}\right]^{2}}},$$

де

$$\widetilde{\Theta}(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{\omega}{2} \psi \left[\mathbf{k}^2 - \left(1 - \frac{1}{\widetilde{A}}\right) \right] + \sum_{j=0}^{\infty} \left[\frac{-\frac{\omega}{2}}{j + \mathbf{k}^2 \left(1 - \frac{1}{\widetilde{A}}\right)} - \operatorname{arctanh} \frac{-\frac{\omega}{2}}{j + \mathbf{k}^2 - \left(1 - \frac{1}{\widetilde{A}}\right)} \right],$$

$$(4.73)$$

$$\theta(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{\omega}{2} \psi \left[\mathbf{k}^4 - \left(1 - \frac{1}{\widetilde{A}}\right) \mathbf{k}^2 \right] + \\ + \sum_{j=0}^{\infty} \left[\frac{-\frac{\omega}{2}}{j + \mathbf{k}^4 - \left(1 - \frac{1}{\widetilde{A}}\right) \mathbf{k}^2} - \operatorname{arctanh} \frac{-\frac{\omega}{2}}{j + \mathbf{k}^4 - \left(1 - \frac{1}{\widetilde{A}}\right) \mathbf{k}^2} \right], \qquad (4.74)$$

 $\Gamma(z)$ і $\psi(z)$ - позначають гамма та ді-гамма функції, відповідно. У низько - частотній границі ($\omega \rightarrow 0$) співвідношення (4.71-4.74) переходять у наступні

$$S^{(c)}(\vec{k},\omega) \approx \frac{1}{2} \tilde{g}(\vec{k}) \exp\left[\frac{\ln(1+\tilde{A})}{\tilde{A}}k^2 - 4\left(k^2 - \left(1 - \frac{1}{\tilde{A}}\right)\right)k^2 \ln k\right] \times \cos\left[\omega\left(2\ln k - \frac{1}{2}\right)\psi\left[k^4 - k^2\left(1 - \frac{1}{\tilde{A}}\right)\right]\right],$$

$$(4.75)$$

$$S^{(n)}\left(\vec{k},\omega\right) \cong \frac{1}{2} \widetilde{g}\left(\vec{k}\right) \Gamma\left[k^{2} - \left(1 - \frac{1}{\widetilde{A}}\right)\right] \cos\left[\frac{\omega}{2}\psi\left[k^{2} - \left(1 - \frac{1}{\widetilde{A}}\right)\right]\right] (4.76)$$

Зауважимо, що у границі, коли $k \to 1$ відношення $S^{(c)}(\vec{k},\omega)/S^{(n)}(\vec{k},\omega)$ стає незалежним від початкового стану і залежить виключно від значень параметра А :

$$\frac{\mathbf{S}^{(\mathbf{c})}(\vec{\mathbf{k}},\omega)}{\mathbf{S}^{(\mathbf{n})}(\vec{\mathbf{k}},\omega)} \cong \exp\left(\frac{\ln(\mathbf{l}+\widetilde{\mathbf{A}})}{\widetilde{\mathbf{A}}}\right). \tag{4.77}$$

Рівняння (4.77) показує, що в низько - частотній границі, $S^{(c)}(\vec{k}, \omega)$ і $S^{(n)}(\vec{k}, \omega)$ пропорційні один одному. Тому, для певних значень характерних масштабів неоднорідності $l_c \propto \frac{1}{k} \propto 1$ динаміка розпаду поля параметра впорядкування виглядає майже ідентичною для консервативного і неконсервативного полів. Таким чином, функція $S^{(c)}(\vec{k}, \omega)$, в рамках моделі здібна наочно демонструвати поведінку типу динамічного скейлінгу (масштабування). Із співвідношення (4.64) безпосередньо отримуємо:

$$\frac{S^{(c)}(\vec{k},\omega)}{S^{(n)}(\vec{k},\omega)}_{\omega \to 0} = \exp\left\{\Xi(\tau')k_0^2 \left[-\frac{k^4}{k_0^4} + 2\frac{k^2}{k_0^2} - 1\right]\right\},$$
(4.78)

де

$$k_0^2 = \Xi(\tau')/2\tau',$$
 (4.79)

- це координата головного максимуму піку функції $S^{(c)}(\vec{k}, \tau')$. Взагалі кажучи, масштабування завжди носить наближений характер, оскільки єдиний масштаб довжини невизначено однозначно. Можна показати, що масштабування стає точнішим із зростанням часу і особливо для деяких визначених розпадів $\langle \tilde{\varphi}^2(\tau') \rangle$ в асимпототичній області. Наприклад, таке відбувається коли $\langle \tilde{\varphi}^2(\tau') \rangle$ відповідає (4.49) (цей закон, по суті справи асимптотично задовольняє рівнянню (4.55) і тому належить до класу розв'язків загального рівняння руху типу (4.28)).

Динамічне масштабування, представлене рівнянням (4.78), наочно випливає у границі $\Xi(\tau')k_0^2 \rightarrow 1$, коли $\tau' \rightarrow \infty$. Треба підкреслити, що взагалі кажучи, динамічне масштабування структурного фактора залежать від початкових умов. Проте можна довести, що незначна варіація функції масштабування дозволяє розглядати динамічні функції

масштабування, як універсальні, у сенсі їхньої незалежності від початкових умов та деяких інших кінематичних характеристик.

4.4 Рівняння стану систем із сінгулярною мірою: матеріальні співвідношення для гранульованих матеріалів поблизу стаціонарних станів

Конструкція матеріальних співвідношень, які виконуються поблизу асимптотично рівноважних станів, де можна очікувати адекватність у застосуванні методів статистичної фізики, складає актуальну задачу кінетики гранульованих матеріалів [63].

Інтенсивні дослідження дисипативних систем, що постійно збурюються, вказують на те, що непружні зіткнення ефективно призводять до помітних, далекодіючих внесків до сил між частинками [10-13,48-50]. У такій системи структурний фактор, який характеризує рівноважні стани, має показувати поведінку, яка є залежною від далекодіючих сил. Зокрема, застосування методу молекулярної динаміки дозволяє отримати висновки про те, що дисипативні взаємодії призводять до відповідної парної кореляційної функції g(r), яка вже не дорівнює нулю біля початку координат, а наближається до деякої визначеної сталої. Двочастинкова функція розподілу g(r), як міра імовірності відносних міжчастинкових конфігурацій, може бути умовно введена і для складних нерівноважних наприклад, динамічних дисипативних систем, подібних. сипучим гранульованим матеріалам, якщо вони перебувають поблизу квазістаціонарних, асимптотично стійких станів [16,15,25]. Незважаючи на чисельні модельні наближення [26,27], для сипучих гранульованих матеріалів досі не існує послідовної теорії кінетичних явищ у замкнутій формі, як це зроблено, наприклад, у випадку класичного газу або рідини.

Найбільш практичним (але, звичайно, лише приблизним) шляхом визначення g(r), на теперішній час, є безпосереднє моделювання міри стану, яке враховує деякі головні риси поведінки g(r), які відомі з відповідних фізичних експериментів, молекулярно-динамічних розрахунків, та альтернативних модельних наближень.

Враховуючи вищенаведене, ми пропонуємо тут просту модельну форму для g(r), у термінах узагальнених функцій. Вона містить у собі, окрім (або замість) формальних феноменологічних параметрів, деяку додаткову прикмету, а саме, стисливість, яку введено у вигляді функціонального співвідношення між термодинамічними, кінетичними і термодинамічними, структурними параметрами. Вибір узагальнених функцій не повинен розглядатися, як протиріччя до класичної статистичної механіки, де така міра, як радіальна функція розподілу, присутня лише як вагова функція для статистичного осереднення [47,69].

Знову, як і у попередніх випадках (див.(4.15),(4.40)), постулюємо вираз для модельної радіальної функції розподілу, в термінах узагальнених функцій, у наступній формі

$$g(\mathbf{r}) = \mathbf{c} + (1 - \mathbf{c})\theta(\mathbf{r} - \sigma) + A\delta(\mathbf{r} - \sigma), \qquad (4.80)$$

де $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|;$

 $\vec{r}_1, \ \vec{r}_2$ – координати окремої пари частинок;

 $\theta(z)$ і $\delta(z)$ – узагальнені Хевісайда (step) і Дирака (delta) функції, відповідно;

σ - власний розмір гранули.

Звичайно, що (4.80) дає лише шаблон для g(r), а відповідний статичний структурний фактор $S(\vec{k})$

$$S(\vec{k}) = 1 + n \int (g(r) - 1) \cdot e^{-i \vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{r}$$

розрахований за формулою (4.80), відтворює типовим осцілюючим та загасаючим фрагментам поведінки, які відомі з альтернативних джерел для аморфних середовищ [46,81].

Значення величини A, що міститься у (4.80), можна отримати, наприклад, з відомого співвідношення між середньою енергією, яка припадає на одну частинку \overline{E} у системі N частинок, об'ємом V, тиском P та густиною n = N/V для випадку рівноважного стану системи (при температурі T). Таке співвідношення може бути записано у наступній формі

$$\overline{E} \cdot \frac{\partial n}{\partial p} = 1 + n \cdot \int (g(r) - 1) d\vec{r}$$
(4.81)

Зауважимо, що вираз (4.81) безпосередньо (формально) не залежить від потенціалу взаємодії між частинками.

Спочатку розглянемо величину A, як індивідуальний параметр. Він має феноменологічну природу і його не може бути отримано за допомогою виразу для g(r) (4.80). Підставляючи (4.80) в (4.81) (прийнявши A за

відомий параметр), після розв'язання отриманого диференціального рівняння відносно р, маємо

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 + \overline{\varepsilon} \ln(\mathbf{l} + \mathbf{X}\boldsymbol{\eta}), \tag{4.82}$$

де p_0 - константа інтегрування;

 $\eta = nv_0^3$ - параметр упаковки (компактизації);

$$v_0 = \pi \sigma^3/6, \ \widetilde{A} = A/\sigma, \quad X \equiv 8[c + 3\widetilde{A} - 1], \quad \overline{\varepsilon} = \overline{E}/v_0.$$

Знайдену закономірність можна вважати очікуваною, якщо зробити припущення про поводження тиску, як монотонної (майже логарифмічно повільної) згасаючої функції параметра упаковки η .

Труднощі, які пов'язані з практичним використанням (4.82), витікають з того факту, що зазвичай X є ефективним параметром, який залежить від η (або від $\overline{\epsilon}$).

Щоб зробити аналіз практично більш адекватним до вимог теорії і експерименту, розглянемо наступний підхід.

Підставивши вираз (4.80) до зазначеного вище (4.82), можна отримати вираз для коефіцієнта А у наступному вигляді

$$\widetilde{A} \equiv A/\sigma = \frac{1}{24\eta} \left[\overline{\epsilon} \frac{\partial \eta}{\partial p} - 8(c-1)\eta - 1 \right].$$
(4.83)

З (4.80) і (4.83) випливає, що фізичні властивості середовища, яке розглядається, задовольняють нашій моделі через посередництво найпростішої реологічної характеристики, в якості якої може бути використано, наприклад, коефіцієнт компресії

$$\frac{1}{n}\frac{\partial n}{\partial p} = -\frac{1}{V}\frac{\partial V}{\partial p}.$$
(4.84)

При заданій температурі Т він також має назву - коефіцієнт ізотермічного стиску [69].

Зазначимо, що для нестискуваного, та позбавленого флуктуацій матеріалу

$$\frac{1}{n}\frac{\partial n}{\partial p} = 0, \quad \text{Ta} \qquad \int g(r)d\vec{r} = V.$$

Структура модельного виразу (4.80) дозволяє виразити деякі реологічні властивості середовища у термінах коефіцієнту стиснення, демпфування кореляцій через розпад структурного фактора і положення його головного максимуму.

Розглянемо тепер вираз для тиску, базуючись на інтегральних рівняннях теорії рівноважних статистичних систем, у наступному вигляді:

$$\mathbf{p} = \mathbf{n}\overline{\mathbf{E}} - \frac{\mathbf{n}^2}{6} \int_0^\infty \frac{d\mathbf{U}}{d\mathbf{r}} \mathbf{g}(\mathbf{r}) 4\pi \mathbf{r}^3 d\mathbf{r}, \qquad (4.85)$$

де U – функція, яка формально має описувати потенціал взаємодії між частинками.

Використовуючи позначення наведені у роботі [64], рівняння (4.85) може бути приведено до наступного вигляду:

$$(\mathbf{p} - \alpha_{-}\eta + \beta\eta^{2})\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \eta} = -\gamma\eta, \qquad (4.86)$$

де

$$\alpha_{-,+} \equiv \overline{\varepsilon} \pm \frac{\Xi}{24},$$

$$\beta \equiv \Lambda + \frac{-c+1}{3}\Xi,$$

$$\gamma \equiv \frac{\Xi}{24}\overline{\varepsilon}$$
(4.87)

$$\Lambda = \frac{2\pi}{3} \frac{1}{v_0^2} \left[\int_0^\infty \phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + (\mathbf{c} - 1) \int_0^G \phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right],$$

$$\Xi = \frac{2\pi}{3} \frac{\sigma}{v_0^2} \phi(\sigma),$$
(4.88)

$$\phi(\mathbf{r}) = \mathbf{r}^3 \frac{dU}{d\mathbf{r}}.$$

Рівняння (4.86) належить до класу Абелевих диференційних рівнянь другого роду, та у деяких випадках може бути розв'язано точно [73,74]. Якщо у (4.86) виконується умова

 $\eta << \frac{\alpha_{-}}{\beta} \tag{4.89}$

тоді спрощене рівняння типу

$$(\mathbf{p} - \boldsymbol{\alpha}_{-}\boldsymbol{\eta})\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \boldsymbol{\eta}} = |\boldsymbol{\gamma}|\boldsymbol{\eta}$$
 (4.90)

має розв'язок у вигляді

$$p = \alpha_{-}\eta + \widetilde{U} , \qquad (4.91)$$

де \widetilde{U} - функція, яка задовольняє наступним трансцендентним рівнянням:

$$\ln\left(\widetilde{U}^{2} + \alpha - \eta\widetilde{U} + |\gamma|\eta^{2}\right) + C - 2\frac{\alpha_{-}}{\alpha_{+}} \tanh^{-1}\left(\frac{\alpha_{-}}{\alpha_{+}} + \frac{2}{\eta\alpha_{+}}\widetilde{U}\right), \quad (4.92)$$

або

$$\exp\left(\frac{\eta}{\eta + \widetilde{U}}\right) = \frac{C}{\eta + \widetilde{U}}, \qquad (4.93)$$

 $_{\text{де}}$ $\overline{\varepsilon} = \frac{|\Xi|}{24}$.

Тут ми приймаємо до уваги, що внаслідок того ,що $\phi(\sigma) < 0$ і $\Lambda < 0$, мають місце співвідношення $\Xi < 0$, $\gamma < 0$ та

$$q = 4|\gamma| - \alpha_{-}^{2} = -\left(\overline{\varepsilon} - \frac{|\Xi|}{24}\right)^{2} \equiv -\alpha_{+}^{2} \le 0,$$

де С – стала інтегрування, а (4.93) відноситься до випадку коли $\overline{\epsilon} = \frac{|\Xi|}{24}$. У випадку, коли

$$\eta \gg \frac{\alpha_{-}}{\beta} \tag{4.94}$$

точний розв'язок відповідної скороченої форми рівняння (4.86)

$$(\mathbf{p} - |\beta|\eta^2)\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \eta} = +|\gamma|\eta$$
 (4.95)

має наступну форму :

$$p + c \exp\left(-2\frac{\beta}{|\gamma|}p\right) = \frac{|\gamma|}{2\beta} + \beta\eta^{2}.$$
(4.96)

Розв'язки рівняння (4.86) у деяких граничних випадках мають наступний вигляд:

$$\mathbf{p}_0 = \mathbf{C} \exp\left(-2\frac{\beta}{|\gamma|}\mathbf{p}_0\right) \tag{4.97}$$

$$p \approx \begin{cases} \frac{\gamma}{2\beta} + \beta \eta^{2}, & p > p_{0}, \\ \frac{\gamma}{2\beta} \ln \frac{c}{\frac{\gamma}{2\beta} + \beta \eta^{2}}, & p < p_{0}. \end{cases}$$
(4.98)

Співвідношення (4.98) свідчать, що при деяких значеннях параметру впакування η , розроблена модель здатна описувати немонотонну поведінку тиску, яка до речі, спостерігається у фізичних експериментах з ГМ. На Рис. 4.5 зображено графік лівої частини рівняння (4.96), в залежності від тиску **р**.

4.5 Збурені гранульовані матеріали поблизу асимптотично стійких станів

Нижче ми пропонуємо просту наочну схему конструкції рівняння стану гранульованої системи, яка збурюється за допомогою зовнішнього джерела, базуючись на вище розробленій моделі міри стану у термінах узагальнених функцій. На цьому шляху будуть виявлені деякі нетривіальні режими поведінки систем, які вивчаються, що не можуть бути встановлені за допомогою інших, альтернативних до нашого підходу методів конструкції матеріальних співвідношень.

Почнемо з зауваження, що за умов заданого рівня непружності, навіть зовсім малого, завжди існує масштаб, починаючи з якого система втрачає стабільність. Система, таким чином, здійснює низку переходів проміж станами у вигляді спонтанних змін конфігурацій, або прямує до неоднорідного кластеризованого стану. Для конструювання матеріальних наприклад рівняння стану, необхідно мати справу з співвідношень, рівноважним станом. Це зокрема означає, що ми маємо лімітувати себе умовами слабких дисипативних процесів, та детермінованих систем з кількістю частинок (гранул) N де діють, сповільнюючи за законом 1/N – (наприклад, флуктуаційні) ефекти. Тоді можемо постулювати існування квазітермодинаміки, передбачає леякої локальної яка існування конфігураційних усереднень але, яка є похідною від кінетичних властивостей природно дисипативних систем.

Підкреслимо, що у випадку гранульованих систем не існує аналогів до звичних нам вільної енергії, або термодинамічної ентропії (але існує ентропія конфігураційна). Таким чином, тиск, формально, не може бути визначений за допомогою термодинамічних співвідношень.

Таке визначення може бути здійснено, наприклад, за допомогою феноменологічних віріальних співвідношень, які мають механічну природу. З точки зору змісту, який мають рівняння стану у фізиці, ми маємо сконструювати рівняння, які зв'язують енергію, яка надходить у систему, кількість частинок (гранул) та розмір системи, а також кінетичну енергію самих частинок.

Розглянемо модельну гранульовану систему поблизу асимптотично стаціонарного стану (steady state), або у безпосередньому наближенні до нього [22,23]. Тоді тиск постульовно (на модельному рівні), припускає процедуру квазістатистичного усереднення в межах відповідно визначеної конгломерації (квазі- ансамблю).

За умов об'ємного нагріву частинок у ході збурення (який потрібен, щоб уникнути ефекту непружного колапсу), приймемо, що гранули стикаються непружно, з постійним коефіцієнтом непружних втрат енергії e. Тоді протягом елементарного акту зіткнення, порція енергії

$$\frac{\mu}{2}\left(1-e^2\right)\gamma^2,$$

де μ - приведена маса;

 γ - відносна швидкість частинок;

під час зіткнення втрачається (дисипує). А відповідне надходження енергії у систему у околі квазістаціонарного стану завдається рівнянням

$$Q = \frac{\mu}{2} (1 - e^2) \gamma^2 .$$
 (4.99)

Відповідним аналогом термодинамічної енергії k_БT у гранульованому середовищі, біля стаціонарного стану у нашій модельній дисипативній системі буде "кінетична" температура (енергія)

$$\varepsilon \equiv \frac{\eta}{2} v^2 = \frac{Q}{1 - e^2}$$
(4.100)

Природно, що у границі пружних сфер е має дорівнювати одиниці. Приймаючи постульовано кінетичний ізоморфізм між \mathcal{E} , яка задовольняє рівнянню (4.100), та $\overline{\mathcal{E}}$, ми зосередимось на питанні, чи в змозі отриманий вираз для тиску у нашій моделі описувати критичні явища, такі наприклад, як фазові перетворювання типу розупорядкування, за умов використання деяких реалістичних реологічних параметрів системи.

Інтуїтивно начебто ясно, що у границі великих густин частинки практично блокуються своїм найближчим оточенням і дуже непросто собі уявити, як може змінюватися координаційна структура найближчого оточення. Такі процеси, як структурування, формування арештованих станів та деякі інші будуть детально розглянуті у наступних главах монографії. Незважаючи на те, що кінетична теорія вільного об'єму може бути сформульована, єдиний підхід до опису компактизації гранульованих матеріалів, починаючи з малих і закінчуючи густо впакованими, є актуальною і досі далекою від повного розв'язання задачею [44,49-58].

Маємо підкреслити, що розроблена вище модель координаційної структури гранульованих матеріалів не має обмеження з боку параметра густини і, таким чином, у визначеному сенсі є масштабно-інваріантною. Зокрема, висновки, які витікають з рівняння (4.100) зображені схематично у вигляді залежності тиску р від параметру компактизації п на Рис. 4.6 ми наочно спостерігаємо немонотонну (конкретно-двофрагментну) поведінку р, як функції п в межах деякого визначеного інтервалу компактизації. Останнє, вказує на можливість фазового переходу (скажімо-типу розупорядкування) у відповідній області чисельних значень керуючих параметрів.



Рис. 4.5 Графічний якісний розв'язок рівняння (4.96)



Рис. 4.6 Немонотонна поведінка тиску у моделі із сінгулярною мірою і диференційним рівнянням стану типу Абеля

ГЛАВА 5

ТЕОРЕТИЧНІ ПІДХОДИ ДО ВИВЧЕННЯ ФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ

5.1 Статистична механіка для гранульованого стану матерії

Сучасний стан досліджень гранульованої речовини, яка є яскравим прикладом далеких від термодинамічної рівноваги систем, в значній мірі формується за допомогою, як це не дивно, застосувань інтуїтивних аналогій із теоремами і співвідношеннями класичної статистичної механіки. Система аналогій між динамічними змінними статистично визначених (рівноважних) систем і параметрами, які більш-менш адекватно описують властивості гранульованих матеріалів, будується на підставі постульованих припущень за умов задовільного порівняння отриманих на їх основі результатів із експериментом.

Нагадаємо, що в класичній статистичній механіці термодинамічних систем мікростани, які відповідають можливим конфігураціям систем зображуються за допомогою позицій у фазовому просторі побудованому на змінних координаті q та імпульсі $p - \{q, p\}$. Рівноважна густина імовірності ρ_{eqm} визначає стаціонарні стани еволюційного рівняння Ліувіля і має залежати лише від загальної енергії E [60-62]. Найпростіша форма, яка відповідає цим вимогам у випадку систем із гамільтаніаном H(q, p) це добре відомий мікроканонічний ансамбль:

$$\rho_{\text{eqm}}(E) = \frac{1}{\sum_{\text{eqm}}(E)},$$
(5.1)

де

$$\sum_{\text{eqm}} (E) = \int \delta(E - H(p, q)) dp dq$$
(5.2)

є так звана площа енергетичної поверхні.

Зауважимо, що для усіх мікростанів, які належать до ансамблю, H(q, p) = E. Всі інші стани відповідають нульовому гамільтоніану.

Співвідношення (5.1) встановлює, що всі мікростани мають однакову ймовірність їх реалізації. Його виконання вимагає справедливість ергодичної гіпотези згідно якої, траєкторії руху замкненої системи мають пролягати доволі близько до будь-якої точки у фазовому просторі. Наступний крок – це статистична концепція Больцмана, яка співставляє число мікростанів з термодинамічною ентропією системи за допомогою семінального співвідношення

$$S_{eqm}(E) = k_B \ln \sum_{eqm}(E)$$
(5.3)

Таким чином в рамках класичної статистичної механіки повна енергія системи є суттєвою для визначення густини станів. І саме у випадку термодинамічно визначених систем ми маємо можливість визначення енергії Е і, відповідно, застосування статистичної механіки.

Давайте тепер уявимо що ми маємо справу із гранульованою системою, яка складається із твердих гранул що торкаються одна до одної (і кількість цих контактів та їх параметри постійно змінюються із часом) відповідно до морфології їх поверхні, ступені реформованості. В цьому випадку енергія € визначеною величиною довільного вже не макроскопічного стану. Замість неї адекватною мірою стану можна вважати сукупність контактів проміж гранулами, які відповідають визначеній конфігурації, що характеризується певним об'ємом системи. Аналогією до фазового простору у класичній статистичній механіці може виступати простір таких мікростанів в яких вищеописана конфігураційна міра розглядається в залежності від ступенів свободи системи {ζ}. В такому підході роль ключової макроскопічної характеристики замість ентропії відіграє об'єм, який займає система і який зумовлює характер змін її станів.

Припустимо, що ми маємо справу із системою, яка складається із N гранул, кожна з яких характеризується власною специфічною формою. Тоді, приймаючи до уваги вищесказане, статистична поведінка системи буде визначатися деякою функцією $W(\zeta)$, яка описує залежність макроскопічного об'єму, який займає система від власних внутрішніх специфічних параметрів гранул. В такому підході, як бачимо, замість гамільтоніану систем H(q,p) у випадку гранульованих систем ми вводимо до розгляду функцію об'єму $W(\zeta)$. Причому, усереднення функції $W(\zeta)$ за всіма можливими конфігураціями $\{\zeta\}$ повинно визначати загальний макроскопічний об'єм системи V (так само, як усереднення гамільтоніану H(q,p) у класичній статистичній механіці визначає середню енергію Е).

Одне з ключових питань підходу це коректне визначення об'ємної функції W, статистична поведінка якої здібна забезпечувати адекватний повний опис системи у цілому. На теперішній час тут панує ідея в межах

якої об'ємна функція W розбивається на підсистеми $\{\alpha\}$ з об'ємами $\{W_{\alpha}\}$ у такий спосіб, що загальний об'єм визначеної конфігурації дорівнює

$$W(\zeta) = \sum_{\alpha} W_{\alpha}$$
(5.4)

Можна собі уявити, що розгляд об'єму, так би мовити, першої координаційної сфери (радіус якої приблизно дорівнює середній відстані між виділеною частинкою і оточуючими її найближчими сусідами) буде суттєвим. Тому за допомогою саме таких понять можна визначити сенс представлення (5.4).

Безумовно, що частинки, які розташовані за межами першої координаційної сфери можуть (і навіть суттєво) впливати на колективну поведінку системи завдяки багаточисельним міжчастинковим контактам. В цих випадках вищі координаційні сфери мають бути інкорпоровані в W. На практиці так воно майже завжди і робиться. Але вже врахування ефектів, які виникають завдяки урахуванню перших координаційних сфер є гарним кроком на шляху можливостей, які надаються статистичним підходом.

Можливо, найкоротшим шляхом у визначенні $\{W_{\alpha}\}$ є застосування так званих діаграм Вороного, які розділяють увесь простір на домени, асоційовані із розподілом частинок-гранул (див. Рис. 5.1) у такий спосіб, що будується, як би, скелет замкненої області, побудованої за допомогою апріорних правил.



Рис. 5.1 Різні функції об'єму отримані за допомогою діаграми: а) Вороного; б) Бола та Блюменфілда; в) Едвардса.

Нажаль, побудовам типу Вороного, або розвинутим дослідженням у цьому напрямку складно надати будь-яку аналітичну форму, але роботи по отриманню таких співвідношень інтенсивно проводяться [39-43].

Ефективну версію визначення характеристичного об'єму, який асоціюється із окремою частинкою-гранулою можна надати, скажімо, наступним чином. Для виділеної пари гранул α та β , які знаходяться у контакті (останній приймається як точковий) вводиться конфігураційний тензор C^{α}

$$C^{\alpha}_{ij} = \sum_{\beta} R^{\alpha}_{i} R^{\alpha}_{j}$$
(5.5)

(де $R^{\alpha\beta}$ це вектор, який з'єднує центри α та β гранули), який будується на підставі інформації про будову речовини, отриманої із альтернативних джерел. Тоді об'єм першої координаційної сфери, за визначенням, дорівнює

$$W^{\alpha} = 2\sqrt{\text{Det }C^{\alpha}_{ij}}$$
(5.6)

На Рис. 5.1 наведено приклад цієї функції у випадку двовимірної системи з координаційним числом 3. Відповідний характеристичний домен є трикутником з вершинами розташованими у центрах гранул (P), які контактують із визначеною сферою α .

Як свідчать експериментальні дослідження, така найпростіша конструкція дає непогані уявлення про структуру гранульованої речовини. В деякому сенсі це навіть дивує, бо попередні конструкції було виконано обгрунтовано лише у випадку двовимірних систем. Зауважимо, що аналіз Вороного та його модифікацій до опису структури реальних гранульованих матеріалів є безумовно наближенням, бо об'єми доменів $\{W_{\alpha}\}$ є в дійсності такими, що частково перетинаються.

Але маючи, нехай і наближений спосіб, у який визначається W, ми вже можемо визначити ентропію гранульованого впакування. Кількість мікростанів для завданого об'єму V вимірюється площиною поверхні $W(\zeta) = V$ у фазовому конфігураційному просторі і дається співвідношенням

$$\sum_{\text{jammed}} (\mathbf{V}) = \int \delta(\mathbf{V} - \mathbf{W}(\zeta)) \Theta(\zeta) d\zeta, \qquad (5.7)$$

де фактор $\Theta(\zeta)$ розповсюджує інтегрування тільки на рівноважні конфігурації.

Знов приймаючи, що всі мікростани мають рівну ймовірність реалізації отримуємо для ентропії наступне співвідношення

$$S(V) = \lambda \ln \sum_{jammed} (V) = \lambda \ln \int \delta(V - W(\zeta)) \Theta(\zeta) d\zeta , \qquad (5.8)$$

яке і визначає макроскопічну поведінку системи. Тут λ відіграє ту ж саму роль, що у класичній статистичній фізиці – стала Больцмана. Аналогом термодинамічної температури у гранульованому середовищі виступає величина

$$X_{V}^{-1} = \frac{\partial S}{\partial V}, \qquad (5.9)$$

яка носить назву компактизації. Саме це поняття найбільш наочно зв'язано у нашому уявленні із структурою впакування гранул у конкретних системах. Компактизація це міра, яка визначає ступінь впакування. А саме: мала компактизація – відповідає фазі так званого довільного слабкого впакування (RLP), в той час, як велика компактизація – асоціюється із довільним тісним впакуванням RCP, звичайно, у відношенні до монодисперсної системи твердих сфер.

Таким чином, якщо уявити собі умовну рівноважну фазову діаграму, яка описує впакування гранульованого матеріалу під дією зовнішніх збурень, то більші амплітуди збурень приводять до станів з вищою компактизацією, а відповідно у протилежному випадку ми маємо справу з нижньою границею процесу. Відповідну залежність ентропії можна якісно собі уявити, так, скажімо, як це зображено на Рис. 5.2.



Рис. 5.2 Залежність ентропії та компактизації від параметру впакування Ф

5.2 Кінетична теорія і гідродинаміка

Кінетичний підхід, як завжди, має спиратися на опис станів, які умовно можна визначити як гранульований газ, за допомогою деяких ймовірнісних функцій розподілу. Відповідні рівняння для функцій розподілу (які є подібними до рівнянь Больцмана у класичній кінетичній теорії розріджених газів) у випадку негустих розподілів частинок-гранул з непружними взаємодіями, які описуються за допомогою сталого коефіцієнта непружних втрат енергії можуть бути визначені досить строго. Відомі також такі їх модифікації, в яких поле їх застосування не обмежується границею достатньої розрідженості.

Кінетична теорія гранульованих газів таким чином формується у термінах рівняння Больцмана (у модифікації Енскога) для функції розподілу $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$, яка завдає ймовірність знаходження частинки із швидкістю \vec{v} у точці \vec{r} , на момент часу t. У найпростішому випадку газу, який складається з однакових частинок сферичної форми із радіусом d, за умов відсутності тертя і сталого коефіцієнта непружних втрат e, кінетичне рівняння має наступний вигляд

$$(\partial_t + (\mathbf{v}_1 \cdot \nabla))f((\mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{t}) = \mathbf{I}[\mathbf{f}], \qquad (5.10)$$

де $I[f] - \varepsilon$ так званий інтеграл зіткнень

$$I = d^{2} \int dv_{2} \int dn_{12} \Theta(-v_{12} \cdot n_{12}) |v_{12} \cdot n_{12}| \times \\ \times \left[\chi f(v_{1}', r_{1}, t) f(v_{2}', r_{1} - dn_{12}, t) 0 - f(v_{1}, r_{1}, t) f(v_{2}, r_{1} + dn_{12}, t) \right]$$
(5.11)

 $\chi = \frac{1}{e^2}$, Θ це тета-функція Хевісайда (Heaviside), швидкості частинок перед зіткненням V_{1,2}, та після зіткнення V'_{1,2}, задовольняють співвідношення

$$v'_{1,2} = v_{1,2} \mp \frac{1+e}{2e} [n_{12} (v_1 - v_2)] n_{12}$$
(5.12)

Рівняння типу (5.10) формулюються на підставі, так званої, концепції "молекулярного хаосу, яка базується на припущенні про відсутність будьяких кореляцій проміж частинками, які стикаються.

Безумовно, що у випадках більш густих станів гранульованої матерії (так званих гранульованих рідин та кристалів), внаслідок появи кореляцій проміж швидкостями частинок, обумовлених дисипативними зіткненнями, а також ефектів виключеного об'єму, застосування рівнянь типу (5.10) є обмеженим, або навіть зовсім неприпустимим [34].

Рівняння так званого гідродинамічного підходу, як завжди можуть бути отримані за допомогою обрізання ієрархічної послідовності кінетичних рівнянь для моментів функцій розподілу отриманих на основі відповідних рівнянь Больцмана, модифікованих у наближенні Чепмена – Така [60,61]. процедура кінець кінцем Енскога приводить ЛО формулювання послідовності рівнянь, які визначають змінну моментів та флуктуацій кінетичної енергії (вони визначають температуру гранульованої речовини). Однак, на відміну від гідродинаміки звичайних газів та рідин, як розділу механіки суцільних середовищ, застосування вищеописаної "гранульованої" гідродинаміки багато хто вважає недостатньо обгрунтованим внаслідок відсутності механізмів розділення масштабів мікроскопічного та макроскопічного рухів (кластеризації).

Рівняння гідродинаміки гранульованих середовищ мають наступний вигляд:

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -v\nabla \cdot \mathbf{u} \tag{5.13}$$

$$v\frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla \cdot \sigma + vg \tag{5.14}$$

$$\nu \frac{\partial T}{\partial t} = -\sigma \div \gamma - \nabla \cdot q - \varepsilon \quad , \tag{5.15}$$

де V- це густина гранульованого середовища віднесене до густини матеріалу, з якого складаються гранули.

$$U(\vec{r})$$
 - це поле швидкості;

$$T = \frac{\langle \vec{u}\vec{u} \rangle - \langle \vec{u} \rangle^2}{2}$$
- це кінетична "температура" гранульованого стану;

 $rac{d}{dt} = rac{\partial}{\partial t} + \left(ec{u} \, ec{
abla}
ight)$ - це субстанціональна похідна; $ec{g}$ - прискорення вільного падіння;

 \vec{q} - вектор потоку енергії;

$$\gamma \alpha \beta = \frac{\partial}{\partial_{\alpha}} u_{\beta} + \frac{\partial}{\partial_{\beta}} u_{\alpha} - \text{це тензор напруг;}$$

є ноефіцієнт дисипації енергії.

Зовні, тобто структурно, рівняння (5.13)-(5.15) подібні до відомих рівнянь Навє-Стокса за винятком останньої складової в рівнянні (5.15), яка виникає внаслідок урахування суто дисипативних процесів.

Система рівнянь (5.13)-(5.15) є незамкненою і має бути доповнена відповідними матеріальними співвідношеннями для тензора напруг σ , потоку енергії \vec{q} та коефіцієнта дисипації енергії ϵ , які можуть визначатися скажімо феноменологічно, або у певних наближеннях. Так, наприклад, у випадку розрідженої гранульованої речовини матеріальні співвідношення часто записують у лінійному наближенні

$$\sigma_{\alpha\beta} = \left[p + (\mu - \lambda) Tr \gamma \right] \partial_{\alpha\beta} - \mu \gamma_{\alpha\beta}$$
 (5.16)

$$\mathbf{q} = -\mathbf{k}\nabla\mathbf{T} \tag{5.17}$$

Наприклад, у випадку двовимірного гранульованого газу, який складається із твердих дисків та характеризується вельми слабкою дисипацією під час зіткнень проміж частинками, була запропонована процедура замкнення рівнянь (5.13)-(5.15) за допомогою системи модельних матеріальних співвідношень, яка має наступний вигляд:

$$p = \frac{4\nu T}{\pi d^2} [1 + (1 + e)G(\nu)]$$
(5.18)

$$\mu = \frac{2T^{1/2}}{2\pi^{1/2} dG(\nu)} \left[1 + 2G(\nu) + \left(1 + \frac{8}{\pi}\right) G(\nu)^2 \right]$$
(5.19)
$$\lambda = \frac{8\nu G T^{1/2}}{\pi^{3/2} d}$$
(5.20)

$$k = \frac{2\nu T^{1/2}}{\pi^{1/2} dG(\nu)} \left[1 + 3G(\nu) + \left(\frac{9}{4} + \frac{4}{\pi}\right) G(\nu)^2 \right]$$
(5.21)

$$\varepsilon = \frac{16\nu G(\nu)T^{3/2}}{\pi^{3/2}d^3} (1 - e^2), \qquad (5.22)$$

де $\mu, \lambda, k, \varepsilon$ і $G(\nu)$ - відповідно, є зсувна та об'ємна в'язкості; коефіцієнти термопровідності та непружних втрат, та $G(\nu)$ – значення радіальної функції розподілу в точці (ν).

Скажімо, для двовимірного аналогу відомого співвідношення Карнахана-Старлінга у випадку системи пружних сфер відповідна функція $G_{CS}(v)$ має вигляд :

$$G_{\rm CS}(v) = \frac{v(1 - 7v/16)}{(1 - v)^2}$$
(5.23)

Співвідношення (5.23) діє в межах значень густини середовища, що не перебільшують 0.7.

Для більших густин ефективніше використовується також модельний вираз для функції розподілу, який було розраховано за допомогою теорії вільного об'єму

$$G_{\rm FV} = \frac{1}{(1+e)\left[(v_c/v)^{1/2} - 1\right]},$$
 (5.24)

де $v_c \approx 0.82$ границя довільного щільного впакування.

В літературі інколи використовується, так званий, глобальний вираз для $G_{\Gamma}(\nu)$, який описує кросовер проміж різними режимами структуроутворення у гранульованих системах

$$G_{\rm L} = G_{\rm CS} + (1 + \exp(-(\nu - \nu_0)/m_0))^{-1})(G_{\rm FV} - G_{\rm CS}), \quad (5.25)$$

де параметри $v_0 \approx 0.7$ та $m_0 \approx 10^{-2}$ визначаються емпірично.

Тим не менше, треба зауважити, що будь-які існуючи, на теперішній час, способи замкнень рівнянь гідродинамічного підходу не спроможні описати такі, наприклад, режими у поводженні гранульованих матеріалів, як формування ниткоподібних силових ланцюжків з передачею напруг примусово уздовж периметру ланцюжків, які утримують стабільність протягом існування потоків. Сюди також треба віднести і явище гістерезису у переходах гранульованої речовини від рідиноподібних до твердих станів.

Незважаючи на ці обставини гідродинамічний підхід залишається найбільш поширеним при вивченні колективної поведінки в потоках гранульованих матеріалів, особливо в інженерних дослідженнях, і визнається фізичною спільнотою. Так само, за допомогою суцільномеханічних підходів були обґрунтовані нестійкості у поведінці збурених гранульованих матеріалів у вигляді мікропотоків таких, як гранульований конвекційно-подібний рух (див. Рис. 5.3, 5.4), флотаційні кластери, продовжні вали, структуроутворення під дією вібрації та деякі інші.



(a)



Рис. 5.3 Спостереження "гранульованої конвекції" у квазідвовимірному капілярі: а) широкому; б) високому (на 37 секунді спостережень). У випадку (б) високого капіляру можна бачити утворення кластеру у нижній частині системи час життя якого складає~10 секунд



105 секунда

Рис.5.4 Кінематика трасера у гранульованому конвективному русі

Візуалізація "гранульованої конвекції" виконана для системи з приблизно 40 металевими частинками методом накладання положень усіх частинок протягом 1 секунди (25 точок для кожної частинки).

Треба зауважити, що інколи гідродинамічний підхід застосовується для вивчення потоків з більшою густиною де їхнє застосування, взагалі кажучи, не є обґрунтованим. Використання при цьому додаткових матеріальних співвідношень, які мають цілком евристичну природу навіть отримати порозуміння дозволяє. деяких випадках. теорії V 3 порозуміння строго кажучи досі експериментом. Причини такого залишаються нез'ясованими.

Крім вищеописаних підходів до теоретичного вивчення окремих ефектів та явищ, які спостерігаються у гранульованій матерії існує ще декілька модельних теорій (всі вони базуються на положеннях статистичної фізики), таких скажімо, як теорія Ліфшиця-Сльозова, та деякі інші (див.літературу, цитовану до передмови).

5.3 Кластеризація у гранульованих матеріалах

Як вже вказувалося вище, властивості гранульованої речовини, у так званій, "газовій фазі" внаслідок непружної взаємодії її частинок-гранул проміж собою наочно відхиляються від властивостей звичайного молекулярного газу. Зокрема, не можуть бути застосовані такі притаманні газовій фазі уявлення, як гіпотеза молекулярного хаосу. Навіть виникають (неочікувані для механічних систем) далеко діючі міжчастинкові кореляції. Останнє, в свою чергу, викликає появу незвичних для конденсованої речовини нестабільних структур та переходів проміж ними.

Найпростіша за побудовою гранульована речовина такого типу, яка складається з ізольованої системи гранул, що непружно взаємодіють (стикаються) проміж собою здібна у режимі, так званого, вільного охолодження до нетривіальної поведінки. Зокрема, нетривіальна кластеризація збурених ГМ спостерігалася у ході чисельних експериментів [19,23,24.25]. Зауважимо, що кластероутворення саме по собі може мати просте якісне обґрунтування: локальне зростання густини (кластеризація) веде до збільшення числа дисипативних зіткнень і самої дисипації, і, таким зменшення кінетичної "температури" гранульованого чином, – до середовища.

Згідно з матеріальним співвідношенням (рівнянням стану) це викликає зменшення локального тиску і створює відповідні потоки речовини у напрямках, визначених градієнтом тиску. Останнє, як раз, має призводити до підвищення локальної густини гранульованої системи. Додамо, що це явище має цікаві наочні аналоги: в астрофізиці (кластеризація у газі із гравітаційною взаємодією), а також у між зірковій плазмі (у вигляді конденсації домішок).

У деяких роботах [25-27] було запропоновано трактування початкової стадії гранульованої кластеризації в термінах нестійкості однорідно охолодженого стану, який описується за допомогою густини V та "гранульованої" температури Т. Стан, який однорідно охолоджується, характеризується повною відсутністю гідродинамічної швидкості і зміною температури у відповідності із законом, що випливає із рівняння

$$\partial_t T \sim -T^{3/2}$$
 (5.26)

Розв'язок рівняння (5.26), яке має вигляд $T \sim t^{-2}$ носить назву закону Хаффа .

У випадку достатньо великих за розмірами систем, однорідно охолоджений стан є нестійким і дія закону Хаффа маскується.

У випадку системи непружних частинок з постійним коефіцієнтом непружних втрат енергії є можна отримати вираз для критичного хвильового числа k_c , яке визначає поріг нестійкості відносно процесу кластероутворення

$$k \sim \sqrt{1 - e^2} \tag{5.27}$$

Природно, що у границі пружних частинок е $\rightarrow 1$ цей масштаб прямує до нескінченості.

Порозуміння проміж теоретичним підходом до опису кластеризації у гранульованих матеріалах і експериментальними дослідженнями, яке на застосування "гранульованої" рівнянь досягається шляху гідродинаміки, було досягнуто за умов виконання деяких спеціальних вимог. Треба зауважити, що застосування гідродинамічного підходу у випадку густих "холодних" кластерів є, взагалі кажучи, недостатньо обґрунтованим і вимагає подальших з'ясувань. Роботи у цьому напрямку інтенсивно проводяться також на шляху регуляризації гідродинамічних співвідношень при врахуванні власних розмірів частинок-гранул. Так, на основі деяких евристичних міркувань, пропонується для опису розподілу гідродинамічних швидкостей V у гранульованій речовині керуюче рівняння у вигляді рівняння Бюргерса з довільними початковими умовами

$$\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \nabla \mathbf{v} = \mu_0 \nabla^2 \mathbf{v}, \qquad (5.28)$$

де μ_0 - деякий аналог ефективної в'язкості (яка є безумовно відмінною від зсувної в'язкості у звичайній гідродинаміці).

Тому не дивно виглядає і поява структур, утворених на масштабах, що суттєво перевищують власні розміри частинок. Такий підхід, також, може бути застосовано для опису структуроутворень в космології.

Існує ціла низка феноменологічних підходів до опису динаміки кластерів у "гранульованих газах" на основі аналогій між динамікою впорядкування у конденсованих середовищах, які складаються із двокомпонентної системи та кластеризацією у гранульованих матеріалах. Так, зокрема, застосовується загальна форма керуючих рівнянь руху для полів густини ν та комплекснозначної швидкості $\Psi = v_x + iv_y$ у вигляді

$$\partial_t v = (-\nabla^2)^m [v - v^3 + \nabla^2 v]$$
 (5.29)

$$\partial_t \psi = (-\nabla^2) [\psi - |\psi|^2 \psi + \nabla^2 \psi], \qquad (5.30)$$

де $m \rightarrow 0 + .$

Такий вибір є адекватним до спостерігаємої динаміки кластероутворення та їх еволюції, які не належать до класу дифузійних процесів.

Задача отримання керуючих рівнянь типу Ландау-Гінзбурга та Кана-Хільярда для ГМ з перших принципів була розглянута у [60-62].

5.4 Хвильові процеси та структури на поверхнях шарів збурених гранульованих матеріалів. Фігури Хладні

Збурені зовнішнім полем віброприскорювань гранульовані системи здібні до колективної поведінки у вигляді: зсувних течій, конвективноподібного руху, поверхневих хвиль та структур. Це цілком дивовижно, що навіть тонкі шари гранульованої речовини (навіть менші за товщиною, за масштаб у декілька власних розмірів гранул), під впливом зовнішніх збурень показують формування структур, подібних за зовнішнім виглядом до відповідних явищ у звичайних рідинах (безумовно, що фізичний механізм структуроутворення у гранульованій речовині цілком відмінний від того, що діє у типовій рідині, і до того ж, мають місце, також, суттєві зовнішні відмінності у явищах, що спостерігаються). Найбільш наочна фізична демонстрація таких явищ виглядає, як формування когерентних структур із далекодіючим впорядкуванням, а також локалізованих збуджень, які виникають на поверхнях тонких шарів гранульованої речовини у вертикально-діючому полі віброприскорювань.

Насправді, експерименти, спрямовані на вивчення тонких шарів піску, який збурюється, мають досить довгу історію, яка починається з та Фарадея [1,2]. В цих ранніх добре відомих досліджень Хладні експериментах вже наочно спостерігалося формування контрастних структур на поверхні збуреного вертикальним полем шару піску, які в залежності від частоти збурення, були здібні змінювати геометричні (фігури Хладні-Фарадея). Таким чином, форми вже тоді була запропонована методика детектування нелінійних мод (у вигляді різних за геометрією поверхневих структур) в термінах спектрів збуджень (мембранного типу).

Фізичний механізм цих явищ, строго кажучи, залишається нез'ясованим, а деталізація у його вивченні поставила більше нових питань ніж дала на них відповідей.



Рис. 5.5 "Левітація" у полі віброприскорювань



Рис. 5.6 Вібростенд на якому вивчалися кінематичні явища у збурених гранульованих матеріалах

ГЛАВА 6

ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ

Головною задачею статистичної теорії є розрахунок середніх значень різних величин, що характеризують поведінку системи у стані рівноваги. Існують два підходи що до вирішення цієї загальної задачі.

У першому випадку середнє значення $\langle A \rangle$, деякої властивості A(r, v), яка залежить від сукупності координат (r) та швидкостей (v) частинок, визначають шляхом усереднення множини "міттєвих" значень A[r(t), v(t)], які спостерігаються у послідовні моменти часу t. Такий підхід, що має назву усереднення за часом, виходить з того, що нам відомі закони руху частинок у системі.

Інший шлях до розрахунку середніх значень параметрів системи було запропоновано Больцманом, а далі розвинуто у струнку теорію Гіббсом. Суть метода полягає у тому, що спостережувана властивість розглядається не як середнє за часом, а як середнє за множиною різноманітних станів системи, котрі виникають з певною імовірністю. Такий підхід називають усередненням за ансамблем. Імовірність (або частота) виникнення того чи іншого стану пропорційна його статистичній вазі $\alpha^{-U/kT}$, де U – потенціальна енергія даної конфігурації, k – константа Больцмана, T– абсолютна температура.

Обидва фундаментальних принципа визначення середніх можуть бути покладені до основи схем, що реалізуються у алгоритмах чисельних розрахунків. При цьому необхідно знати потенціальну енергію системи, як функцію координат **r**.

Розглянемо систему, що складається з певної кількості частинок (атомів, молекул, чи гранул). У класичній механіці рух кожної частинки i з масою m_i може бути описано рівнянням Ньютона: $m_i a_i(t) = f_i(t)$. Тут $f_i(t)$ – сила, що діє у дану мить часу t на частинку і з боку всіх останніх частинок системи (ця сила пов'язана з потенціальною енергією відомим співвідношенням: $f_i(t) = -\partial U / \partial r_i$; $a_i(t)$ - прискорення, яке визначається, як $a_i(t) = dV_i(t)/dt = d^2r_i(t)/dt^2$. Якщо ці похідні замінити їх різницевими апроксімаціями, то систему рівнянь Ньютона, записаних для всіх частинок, можна розв'язати чисельно за допомогою комп'ютера. Тобто, знаючи координати частинок r(t) і відповідні їм сили

f(t) у деякий момент часу t, можна знайти нові координати $r(t + \Delta t)$ та сили $f(t + \Delta t)$ у наступний момент часу $t + \Delta t$ і так далі крок за кроком. Розрахунок на кожному кроці потрібних нам параметрів A дозволяє відстежити їх еволюцію у часі, а усереднення за достатньо великою кількістю зроблених кроків дає шукані рівноважні властивості. Таку схему розрахунку прийнято називати чисельним експериментом методом молекулярної динаміки (МД). Використовуються різні варіанти метода МД, у яких поряд з внутрішніми силами, обумовленими взаємодією атомів, враховується також зовнішні сили. Подібні схеми моделювання складають досить поширену групу методів молекулярної динаміки.

Схему, в основі якої лежить альтернативний (імовірнісний), принцип визначення середніх значень, називають методом статистичних алгоритмі або методом Монте-Карло (МК). У цьому методі опис переходів проміж станами системи здійснюються наступним чином. На кожному кроці відібрана частинка (або група частинок) переміщується на невелику відстань у довільному напрямку. Це призводить до зміни потенціальної енергії системи на деяку величину ΔU , яка і визначає імовірність переходу $p = \alpha^{-\Delta U/kT}$ з початкового у новий стан. Відповідні характеристики, або параметри, що складають інтерес, розраховуються на кожному кроці та усереднюються за великою кількістю зроблених кроків.

Неважко зрозуміти, що у обох розглянутих методах відсутні принципові фізичні обмеження. Ці методи базуються на вельми загальних принципах класичної фізики і створюють алгоритм математичної (чисельної) інтерполяції відповідних макроскопічних характеристик системи, які витікають із завданих мікроскопічних законів взаємодії частинок.

Поняття "модель системи" полягає у виборі правил опису взаємодії частинок між собою і/або з зовнішніми полями, тобто у формулюванні виду і засобу розрахунку функції потенціальної енергії.

Комп'ютерна імітація методами молекулярної динаміки або Монте-Карло моделі фізичної системи з метою вивчення її характеристик у залежності від заданих параметрів фактично уявляє собою чисельний (комп'ютерний) експеримент, який, певною мірою є альтернативним до безпосередньо фізичного.

У наведеному вище визначенні термін "експеримент" має двоякий сенс. З одного боку, у комп'ютерному експерименті так само, як і у реальному, досліджуються відгуки системи на ті або інші зміни параметрів (температура, густина, склад), або на зовнішні впливи (механічні, електричні, магнітні поля). Різниця полягає в тому, що експериментатор має діло з реальною системою, тоді як у комп'ютерному експерименті розглядається поведінка математичної моделі реального об'єкту. Можливість отримувати строгі результати для адекватно визначених моделей дозволяє використовувати комп'ютерний експеримент, як альтернативне джерело інформації для перевірки передбачень аналітичних теорій і, як наслідок, у цій якості результати моделювання відіграють роль того ж еталона, що і дані фізичних вимірів.

Із сказаного також витікає існування двох підходів до постановки комп'ютерного експерименту, вибір яких обумовлюється характером розв'язуваної задачі, який визначає вибір модельного опису.

Розрахунки методами МД або МК переслідують чисто утилітарні цілі, пов'язані з прогнозуванням властивостей конкретної реальної системи та їх порівнянням з фізичним експериментом. На цьому шляху можна дослідження робити цікаві прогнози i проводити V таких експериментальних умовах (наприклад, при надвисокому тиску або температурі), коли реальний експеримент, за різних обставин, або взагалі не можливий, або потребує вельми великих матеріальних витрат. Моделювання на комп'ютері часто буває взагалі єдиним шляхом отримання найбільш детальної (мікроскопічної) інформації про поведінку складної системи.

Комп'ютерне моделювання призвело свого роду революцію у науці, згладивши традиційний розподіл природничо-наукових дисциплін на експериментальний і теоретичний напрямки. Без сумніву, що по мірі вдосконалення обчислювальної техніки роль цього підходу буде все більш впливовою.

Класичний метод молекулярної динаміки було розвинуто у середині 50-х років 20 століття, зокрема, Б. Олдером, та Т. Вайнрайтом. Суть його полягає у розрахунку на комп'ютері траєкторій руху частинок, які складають конкретний фізичний об'єкт – зазвичай окрему крупну молекулу, рідину, газ, або тверде чи аморфне тіло. Специфіка будь якої системи відображається у формі потенціалів і сил міжчасткової взаємодії. Оскільки ці потенціали для реальних речовин, або невідомі, або визначаються достатньо приблизно, то при застосуванні методу молекулярної динаміки ми маємо справу лише з більш або менш адекватною моделлю речовини. Крім того, практично всі розрахунки за методом молекулярної динаміки виконуються із використанням класичної механіки Ньютона, і лише відносно недавно цей метод почав комбінуватися з розв'язком рівнянь квантової механіки.

Знання траєкторій кожної частинки у моделі об'єкта – це, вичерпна інформація, яку неможливо отримати ні у якому експерименті з реальною речовиною. Тому метод молекулярної динаміки принципово дозволяє розраховувати будяку властивість системи, як термодинамічну (наприклад, енергію, тиск, ентропію), так і кінетичну (коефіцієнт дифузії, частоти коливань атомів, розмір, динаміку). Для того, щоб почати моделювання, слід задати початкові координати частинок. Можна, наприклад, розташувати їх у вузлах гратки або розкидати випадковим чином у об'ємі куба за допомогою генератора випадкових чисел, забезпечивши при цьому належну густину. Для збільшення ефективного розміру системи і покращення точності розрахунків застосовують, так звані, періодичні граничні умови. Для цього попередньо визначену кількість речовини, яка заповнює, скажімо куб з усім його внутрішнім складом транслюють уздовж трьох осей координат, будуючи, таким чином, просту кубічну супергратку. Частинки взаємодіють не тільки з іншими частинками основного куба, але і з частинками у сусідніх кубах супергратки. Отримана система більш впорядкована, ніж реальна, так що її властивості трохи відмінні від фактичних.

Якщо моделюється речовина при температурі абсолютного нуля (аморфна фаза), то швидкості частинок у розрахунках не фігурують. Якщо ж температура не дорівнює нулеві, то потрібно задати початкові швидкості частинок, враховуючі, що середня кінетична енергія пропорційна температурі. Початковий розподіл швидкості у процесі моделювання швидко наближається до розподілу Больцмана. У подальшому, поступово встановлюється рівноважна структура системи.

Існує багато алгоритмів, що дозволяють розраховувати траєкторії частинок. Основний часовий ресурс займає знаходження рівнодіючих сил. Для цього треба відокремити групу атомів, близьких до вибраного, і знайти суму сил взаємодії з кожним сусідом. Справа ускладнюється у випадку заряджених частинок (наприклад, у моделях солей або оксидів), де неможна нехтувати навіть віддаленими частинками, оскільки кулонівська взаємодія спадає з відстанню дуже повільно. Ще складніше розраховувати міжчасткові сили у системах, де взаємодія нецентральна, тобто залежить не тільки від відстані між частинками, але і від інших (векторних) характеристик, наприклад від напрямків дипольних моментів, величини валентних кутів і т.д. У деяких випадках (особливо для систем із ковалентними зв'язками) приходиться використовувати тричастинкові потенціали, які враховують залежність енергії взаємодії від взаємного розташування (конфігурацій) трійок частинок.

Моделювання методом молекулярної динаміки можна проводити при завданих зовнішніх умовах. Наприклад, термін «NVE - ансамбль» означає, що підтримується сталою кількості частинок, об'єму і енергії. Іноді моделювання треба проводити при таких умовах, коли густина заздалегідь невідома. У такому разі об'єм основного куба вміщення є залежною змінною, а незалежними будуть тиск і температура системи. В такому випадку для позначення системи вводять термін «N р T – ансамбль». Тут при моделюванні треба підтримувати сталою температуру системи. Саме тому треба відповідно, збільшувати, або зменшувати довжину ребра основного куба вміщення і швидкості частинок. Густина такої модельної системи наближається у ході динамічного впливу до рівноважного значення.

При охолоджуванні у молекулярно-динамічних моделей можна спостерігати або поступове згасання теплового руху без різких змін інших структуроутворень, наприклад у структури, або вигляді кристалізації. При охолоджуванні із швидкістю порядка 10¹³-10¹⁵ К/с кристалізації не виникає і в результаті спостерігається структура, яка є типовою для так званої аморфної фази (скло). Контролюючи у процесі охолодження такі параметри, як енергія, тиск, теплоємність і т.д., можна детально спостерігати, як здійснюється перехід системи з рідко-подібного стану у стан скла, у якому практично повністю відсутня дифузія. Якщо ж довго витримувати модельну систему трохи нижче температури кристалізації, то можна спостерігати утворення кристалічних кластерів, які швидко зростають у розмірах. При цьому протікає стрибкоподібна зміна тиску і кінетичної температури, і в результаті система кристалізується у всьому об'ємі.

6.1 Моделювання гранульованих систем методом молекулярної динаміки (MD)

молекулярної динаміки (MД) Методи на сьогоднішній час дозволяють створювати складні багаточастинкові алгоритми спрямовані до вивчення складних систем. Вони здібні імітувати широкий спектр аспектів динаміки гранульованих матеріалів, за умов, деяких штучних часових і просторових параметрів розрахунків. Зазвичай, обмежень відповідна техніка, спрямована до вивчення структуроутворень та динаміки ГМ базується на моделях твердих та м'яких сфер, до яких додаються деякі інші ступені свободи, дисипативні канали та граничні і початкові умови. Відмінністю від випадкових (імовірносних) методів є те, що у МД тривалість часу зіткнення t_с не дорівнює нулю. Застосування метода МД полягає у пошуку розв'язків керуючих рівнянь змінними, у яких виступають лінійні та кутові моменти, вступаючих у взаємодію частинок:

$$\Delta \vec{p} = \Delta \left(m \vec{v} \right) = m \vec{v} - m \vec{v}_0 = \int_0^{t_c} \vec{F}_{cm} dt , \qquad (6.1)$$

$$\Delta(I\omega) = I\omega - I\omega_0 \int_{0}^{t_c} |\vec{r} \times \vec{F}| dt, \qquad (6.2)$$

де I - момент інерції твердого тіла навколо однієї з вільних осей обертання; $\vec{r} \times \vec{F}$ - обертальний момент, обумовлений силою \vec{F} ; \vec{F}_{cm} - компонента сили у системі центра мас.

ця стратегія відмінна від типової для Підкреслюємо, що вірогіднісних моделей. Розв'язок (6.1), (6.2) потребує знання сил \vec{F} і \vec{F}_{cm} , і того, як вони змінюються у часі, а також - тривалості зіткнення $\mathbf{t}_{\mathbf{c}}$. Умовою, при будь якому моделюванні методом молекулярної динаміки, достатньою точністю відтворювати та прогнозувати яка дозволяє із поведінку системи є врахування сили пружної взаємодії і тертя на протязі зіткнень між частинками. Відмітимо складність цієї задачі, яка виникає внаслідок невизначеної (у загальному випадку) поведінки сил діючих проміж частинками у гранульованому середовищі. Наприклад, вони можуть залежати від структури та властивостей попередніх станів, які визначають сценарій еволюції (ефект пам'яті). Ми також недостатньо розуміємо мікроскопічну картину контактної взаємодії між твердими речовинами. Це пояснює неоднозначність форм модельних рівнянь, запропонованих у різними дослідженнях, які спрямовані на вирішення цієї проблеми.

6.2 Моделювання методом Монте Карло

У багатьох дослідження використовується такий алгоритм чисельного моделювання, як метод Монте Карло. Цей метод отримав широке застосування для вирішення деяких фундаментальних проблем статистичної механіки. Ми зупинимося лише на його деталях, які відносяться до специфіки гранульованих матеріалів. Цей метод було ефективно застосовано для моделювання таких, наприклад, явищ як "ефект бразильського горіху" і сегрегація у ГМ. Нижче буде розглянуто алгоритм відомий, як метод найкрутішого спуску, який доказав свою практичну ефективність.

Почнемо із зауваження про те, що інтервал часу має розглядатися у якості контролюючого параметру, забезпечуючи стадію релаксації проміж різними кінетичними змонтованими стадіями розрахунків. Фактично, це перетворює підхід на версію типа методу клітинних автоматів. Ланцюжок

послідовності алгоритмів може бути уявлено у наступній символічній формі.

Покладемо, що Т це період циклу (час релаксації). Спробуємо порозумітися у перевагах та обмеженнях розрахункової стратегії, з урахуванням того, що нам заздалегідь відомо про характер зіткнень та макроскопічну поведінку агломерації (скажімо - насипу) гранул.

Перш за все зауважимо, ця процедура припускає нехтування деталями у опису динамічних властивостей зіткнень. Також можуть бути проігноровані ефекти дисипації, причому, як у статиці так і у динаміці. Зрозуміло, що такий підхід неможливо застосовувати до опису властивостей поведінки сукупності частинок з багатьма зіткненнями. Для визначеності, позначимо через τ_1 інтервал часу між двома найближчими і послідовними подіями, що обумовлені динамікою конкретної системи. Керуючим параметром моделювання одновимірних зіткнень проміж гранулами у полі віброприскорень є т₁ - час між двома послідовними зіткненнями частинок. Відомо, що цей час може стати нескінченно малим (явище, яке фігурує під назвою "непружного колапсу"). Враховуючи такі обставини, відстеження еволюції системи за допомогою MD методу потребує здійснення вибірки з періодом T < τ_1 , що може призвести до обчислювального часу. Окрім того, зростання можливим є ризик неврахування тонкощів механіки систем з великою кількістю зіткнень. Це еквівалентно нехтуванню подіями у малому просторовому масштабі λ (порядок відстані між частинками), що, взагалі кажучи, може призвести до помилкових результатів. Метод Монте Карло має справу з послідовними станами гранульованого середовища в кінетиці його релаксації. Це робить його адекватним для опису кінетики гранульованих об'єктів на великих часових інтервалах. Наприклад, у випадках, коли гранули збуджуються періодично і достатньо повільно, маючи достатньо часу для релаксації проміж послідовними збудженнями. Пам'ятаючи зроблені застереження, слід відзначити важливість згаданих тут методів, задля аналізу явища сегрегації у ГМ. Нижче ми розглянемо схематично деякі практичні кроки необхідні для здійснення моделювання методом Монте Карло.

Методика Монте Карло була застосована для чисельного моделювання "ефекту бразильського горіху" у ГМ. Після деяких удосконалень вона привела до результатів, які збігаються із даними топологічних моделей. Розпочнемо з опису близького до традиційного формулювання методу Монте Карло, та обговоримо деякі деталі його застосування у випадку гранульованих матеріалів.

Хоча більш загальним, звичайно, є обчислення випадку тривимірної конгломерації полідисперсних гранул ми розглянемо більш простішу, двовимірну сукупність дисків однакового розміру d. Приймемо також, що

вони не перетинають один одного і спочатку розташовані в уявному двовимірному контейнері, який не має зовнішніх границь. Фактично, така модель є дуже наближеною за конструкцією до кільцевого контейнеру. Початкова конфігурація такої системи N дисків зображується узагальненим вектором, який залежить від координат усіх центрів $\vec{r} = (\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N)$.

Потенціальна енергія $E_g(\vec{r})$ системи завдається наступним чином

$$E_g(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{N} mg z_j, \qquad (6.3)$$

де m – маса окремого диску, а Z_j - є координата його центру мас. Метод Монте Карло базується на аналізі ймовірності P різноманітних конфігурацій \vec{r} , кожна з яких має енергію $E_g(\vec{r})$. Згідно із положеннями класичної термодинаміки

$$P\left[E_{g}\left(\vec{r}\right)\right] = \frac{1}{Q} \exp\left[-\frac{E_{g}\left(\vec{r}\right)}{kT}\right],$$

де Q – функція розподілу системи, а Т – абсолютна температура. Звернемо увагу, що останній вираз характеризує всі конфігурації, еквівалентні з точки зору енергії у стані рівноваги із температурою Т. Вони фактично відрізняються лише конфігураціями у конгломерації дисків.

Методика чисельного аналізу складається з дослідження імовірності усіх можливих конфігурацій, отриманих переміщенням кожного диску, що належить конгломерації у межах обмеженої області δ^2 . Цей процес може бути змодельований за допомогою набору рівнянь

$$\mathbf{x}'_{\mathbf{j}} = \mathbf{x}_{\mathbf{j}} + \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\delta} \tag{6.4}$$

та

$$\mathbf{z}'_{\mathbf{j}} = \mathbf{z}_{\mathbf{j}} + \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{Z}}\boldsymbol{\delta}, \tag{6.5}$$

де ξ_x та ξ_z - незалежні випадкові змінні рівномірно розподіленні у межах інтервалу [-1,+1], $\delta > 0$. Щоб гарантувати, що диски не перетинають один одного на протязі послідовності випробувань,

зазвичай, вимагають, щоб взаємодія між сусідніми частинками підпорядковувалась потенціальній енергією U(s) виду

$$U(s) = 0, \quad s \ge d \tag{6.6}$$

та

$$U(s) = \infty, \quad s < d \tag{6.7}$$

Випробування проведенні у відповідності з рівняннями (6.3)-(6.7) повинні бути перевірені на правдоподібність за допомогою наступних критеріїв:

• виконується нерівність

$$\Delta E = E\left(\vec{r}'\right) - E\left(\vec{r}\right) \le 0, \qquad (6.8)$$

тоді нова конфігурація має більш низьку енергію ніж початкова. Тому саме її використовують для подальших кроків у розрахунках.

• маємо $\Delta E > 0$. Тоді відповідний розв'язок \vec{r} не обов'язково відкидати, внаслідок можливого реального відхилення за рахунок теплових коливань.

Визначена ймовірність надається у вигляді

$$P(\Delta E) = \frac{P[E(\vec{r}\,')]}{P[E(\vec{r}\,)]} exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right).$$
(6.9)

У свою чергу, ця ймовірність порівнюється з випадковим числом ξ однорідно розподіленим у межах від 0 до 1. Якщо $P(\Delta E) \ge \xi$, тоді розв'язок зберігається. У протилежному випадку, такий розв'язок відкидається, а інший (який підпадає під сформульовані вимоги) знаходиться шляхом нового випробування.

Процедура містить подібну обробку для кожної окремої частинки системи, доти, доки кожен номер сукупності не пройде такі випробування. На цьому ітерація завершується. Нова конфігурація знову використовується вже як нова відправна точка для наступної ітерації, у якій знову усі частинки переміщуються відносно інших та релаксують і так далі.

Метод, який викладено, по суті, аналогічний до традиційного Монте Карло моделювання броунівських систем. Коли він застосовується для макроскопічних об'єктів, таких як гранульовані матеріали, можливість застосування рівнянь, які враховують теплову енергію kT, є припущенням і під нею розуміють кінетичну теплову енергію (яка, у свою чергу, строго кажучи, вимагає спеціального визначення).

Броунівський рух, про який згадувалося, є незначним, наприклад, при кімнатній температурі, коли відношення $mg\Delta z/kT$ становить 10^{12} . Якщо так, тоді вираз (6.9) та критерій пов'язаний з ним дають ймовірність, яка практично завжди дорівнює нулю. Інакше кажучи, єдиним реально припустимим для гранульованих систем є рівняння (6.8), яке має такий сенс, що потенціальна енергія може тільки зменшуватись з кожним кроком ітерації. Це еквівалентно застосуванню сценарію в якому температура системи близька до абсолютного нуля. Зрозуміло, що частинки системи зв'язані потенціалом, завдяки чому, вони не можуть уникнути зіткнень на макроскопічному рівні. У відповідності до раніше обговореного, зрозуміло, що ця стратегія моделювання кількісно нехтує близькодією, зазвичай пов'язана з багаторазовими зіткненнями, розгляд яких є еквівалентним концепції локальній температури гранул. Імовірно, такий підхід є не придатним для систем у станах, в яких система опиняється завдяки релаксації.

Незважаючи на вказані обмеження, цей тип моделювання довів свою ефективність під час моделювання деяких випадків, таких, наприклад, як насипання полідисперсної суміші частинок ГМ у гірку. Підкреслимо, що зовсім природно, що ця специфічна методика незадовільно працює у випадку дослідження нестабільних конфігурацій, у яких частинки лише обмежений час перебувають у безпосередньому контакті.

ГЛАВА 7

РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОМАГНИТНИХ ХВИЛЬ НА ГРАНУЛЬОВАНИХ КОМПЛЕКСАХ

Розсіяння електромагнітного випромінювання € важливим напрямком досліджень, спрямованих на діагностику конденсованих Протягом тривалого часу аналітичні розв'язки цієї задачі систем. лише для високо симетричного одиничного розсіювача. існували Насправді, природні об'єкти, такі, як, наприклад, гранульовані матеріали, мають агреговану структуру і, відповідно, складну морфологію. Лва основних компоненти багатократного розсіяння - взаємодія і інтерференція мають відмінні риси, в порівнянні з розсіянням на одній частинці. Застосування теореми складання для векторних сферичних хвильових функцій (ВСФ) зробило можливим повернутися до проблеми багатократного розсіяння світла на структурованих об'єктах більш обґрунтовано.

7.1 Розклад плоскої хвилі в термінах координат зсуву

Сукупність сфер є непоглинаючим однорідним середовищем, що характеризується діелектричною константою \mathcal{E}_0 і проникливістю μ_0 . Поля, розсіяні кожною окремою часткою, визначаються у відповідних сферичних системах координат. В умовно вибраній системі координат L, декартівські координати початку, нехай дорівнюють (X^j, Y^j, Z^j) , j = 1, 2, ..., L. Вектор падаючої плоскої хвилі завжди спрямований у додатну область Z.

Розв'язок задачі розсіяння на багатьох сферах в рамках наближення Мі дається суперпозицією мультиполей падаючої плоскої хвилі і має вигляд розкладу (в термінах ВСФ) в кожній L сферичної системи координат(z - бігуча плоска хвиля з лінійно поляризованим кутом β_p характеризується хвильовим вектором $k = k\hat{e}_z$, де $k = 2\pi/\lambda$ - є хвильовим числом, λ - довжина падаючої хвилі в навколишньому середовищі і \hat{e}_z разом з $\hat{e}_x \hat{e}_y$ - ортонормовані одиничні вектори в декартівській системі координат). У головній j_0 th системі координат, вектор падаючого електричного поля, є

126

$$\mathbf{E}_{inc} = \mathbf{E}_0 \exp(ikz), \tag{7.1}$$

де $E_0 = E_0 (\hat{e}_x \cos \beta_p + \hat{e}_y \sin \beta_p)$ та $i = \sqrt{-1}$. Гармонійна складова $\exp(-i\omega t)$, де ω - кутова частота опущена. У j_0 th системі координат падаюче електромагнітне поле може бути виражене в ВСФ у наступному вигляді:

$$E_{inc} = -\sum_{n=0}^{N} \sum_{m=-n}^{n} i E_{mn} \Big[p_{mn} N_{mn}^{(1)}(\rho, \theta, \phi) + q_{mn} M_{mn}^{(1)}(\rho, \theta, \phi) \Big],$$

$$H_{inc} = -\frac{k}{\omega \mu_0} \sum_{n=0}^{N} \sum_{m=-n}^{n} E_{mn} \Big[q_{mn} N_{mn}^{(1)}(\rho, \theta, \phi) + p_{mn} M_{mn}^{(1)}(\rho, \theta, \phi) \Big],$$
(7.2)

де $\rho = kr$ та

$$E_{mn} = E_0 i^n \left[\frac{(2n+1)(n-m)!}{n(n+1)(n+m)!} \right]^{1/2}.$$
(7.3)

Необхідно відзначити, що нормований множник знайдений у (7.3) відрізняється від раніше використовуваного, який складає

$$E_{mn} = E_0 i^n (2n+1) \frac{(n-m)!}{(n-m)!}.$$
(7.4)

Векторні сферичні хвильові функції $M_{\it mn}^{(1)}$ та $N_{\it mn}^{(1)}$ мають специфічну складну форму

$$M_{mn}^{(1)}(\rho,\theta,\phi) = \left[\hat{e}_{\theta}i\pi_{mn}(\cos\theta) - \hat{e}_{mn}(\cos\theta)\right]j_{n}(\rho)\exp(im\phi)$$

$$N_{mn}^{(1)}(\rho,\theta,\phi) = = \left\{ \hat{e}_{r}n(n+1)P_{n}^{m}(\cos\theta)\frac{j_{n}(\rho)}{\rho} + \left[\hat{e}_{\theta}\tau_{mn}(\cos\theta) + \hat{e}_{\phi}i\pi_{mn}(\cos\theta)\right]\frac{\Psi_{n}'(\rho)}{\rho} \right\} \exp(im\phi)$$

$$(7.5)$$

де \hat{e}_r , \hat{e}_{θ} , \hat{e}_{ϕ} - базисні ортонормовані вектори в сферичних системах координат, j_n - сферична функція Бесселя першого роду, P_n^m - об'єднана функція Лежандра першого роду, $\psi_n(\rho) = \rho j_n(\rho)$ - одна з функцій Рікаті-Бесселя, позначення похідної від якої має вигляд

$$\pi_{mn}(\cos\theta) = \frac{m}{\sin\theta} P_n^m(\cos\theta),$$

$$\tau_{mn}(\cos\theta) = \frac{d}{d\theta} P_n^m(\cos\theta).$$
(7.6)

Визначення, яке застосовується для модуля узагальненої функції Лежандра P_n^m , витримується з точністю до множника $(-1)^m$. З рівнянь (7.1)-(7.3), (7.5), (7.6) і ортогональності, випливає, що розкладання коефіцієнтів у (7.2) приймає вигляд:

$$p_{mn} = \frac{i \int\limits_{0}^{2\pi} \int\limits_{0}^{\pi} \exp(ikz) \mathbf{E}_{0} \cdot \mathbf{N}_{mn}^{(1)}(\rho, \theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi}{E_{mn} \int\limits_{0}^{2\pi} \int\limits_{0}^{\pi} |\mathbf{N}_{mn}^{(1)}(\rho, \theta, \phi)|^{2} \sin \theta d\theta d\phi},$$

$$q_{mn} = \frac{i \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} \exp(ikz) \mathbf{E}_{0} \cdot \mathbf{M}_{mn}^{(1)}(\rho, \theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi}{E_{mn} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} |\mathbf{M}_{mn}^{(1)}(\rho, \theta, \phi)|^{2} \sin \theta d\theta d\phi}$$
(7.7)

З вище наведеного отримуємо

$$p_{mn}=q_{mn}=0, \quad \mid m \mid \neq 1,$$

$$p_{1n} = q_{1n} = \frac{\sqrt{2n+1}}{2} \exp(-i\beta_p),$$
(7.8)

$$p_{-1n} = -q_{-1} = -\frac{\sqrt{2n+1}}{2} \exp(i\beta_p).$$

Зауважимо, що останні результати відрізняються від тих, що зазвичай фігурують у відповідних роботах з розсіяння, за рахунок зміни нормованого множника E_{mn} . У будь-якій *j*th системі координат, розміщеної на *j*th сфері, розклад падаючого поля має такий же вигляд, що й співвідношення (7.2),

$$\mathbf{E}_{inc}^{j} = \mathbf{E}_{inc} = -\sum_{n=0}^{N^{j}} \sum_{m=-n}^{n} i E_{mn} \Big[p_{mn}^{j} \mathbf{N}_{mn}^{(1)}(\rho^{j}, \theta^{j}, \phi^{j}) + q_{mn}^{j} \mathbf{M}_{mn}^{(1)}(\rho^{j}, \theta^{j}, \phi^{j}) \Big],$$

$$\mathbf{H}_{inc}^{j} = \mathbf{H}_{inc} = -\frac{k}{\omega\mu_{0}} \sum_{n=0}^{N^{j}} \sum_{m=-n}^{n} E_{mn} \Big[q_{mn}^{j} \mathbf{N}_{mm}^{(1)}(\rho^{j}, \theta^{j}, \phi^{j}) + p_{mn}^{j} \mathbf{M}_{mn}^{(1)}(\rho^{j}, \theta^{j}, \phi^{j}) \Big],$$
(7.9)

де $\rho^{j} = kr^{j}$. Враховуючи, що $z^{j} = z - Z^{j}$ падаюче електричне поле можна також записати, як $E_{inc}^{j} = E_{inc} = E_{0} \exp(ikZ^{j}) \exp(ikz^{j})$. Фазова стала $\exp(ikZ^{j})$ прив'язана до початку *j*th системі координат. Це забезпечує те, що записане в *j*th системі координат падаюче поле, не змінюється по фазі відносно центру, який завжди співпадає з початком основної системи координат. Коефіцієнти розкладання падаючого поля в (7.9) задовольняють співвідношенням

$$p_{mn}^{j} = \exp(ikZ^{j})p_{mn}, \qquad q_{mn}^{j} = \exp(ikZ^{j})q_{mn}, \qquad (7.10)$$

Співвідношення (7.10) відрізняються від загальних коефіцієнтів розкладу спрощеним виглядом фазової сталої.

7.2 Розсіяння на окремих сферах

Подібно падаючому полю, окремо розсіянні поля кожної компоненти сферично симетричного розсіяння можуть бути розкладені у відповідних (сферичних) системах координат, а саме

$$E_{sca}^{l} = \sum_{n=1}^{N^{l}} \sum_{m=-n}^{n} i E_{mn} \Big[a_{mn}^{l} E_{mn}^{(3)}(\rho^{l}, \theta^{l}, \phi^{l}) + b_{mn}^{l} M_{mn}^{(3)}(\rho^{l}, \theta^{l}, \phi^{l}) \Big],$$

$$H_{sca}^{l} = \frac{k}{\omega \mu_{0}} \sum_{n=1}^{N^{l}} \sum_{m=-n}^{n} E_{mn} \Big[b_{mn}^{l} E_{mn}^{(3)}(\rho^{l}, \theta^{l}, \phi^{l}) + a_{mn}^{l} M_{mn}^{(3)}(\rho^{l}, \theta^{l}, \phi^{l}) \Big]$$
(7.11)

де $M_{mn}^{(3)}$ та $N_{mn}^{(3)}$ відрізняються від $M_{mn}^{(1)}$ та $N_{mn}^{(1)}$ тільки похідною функції - $h_n^{(1)}$, яка є сферичної функцією Ханкеля першого роду(і замінює j_n сферичну функцію Бесселя першого роду). Врахування граничних умов для коефіцієнтів парціального розсіяння (a_{mn}^l, b_{mn}^l) для кожної компоненти включає в себе спеціальні схеми пошуку повного розв'язку задачі про багатократне розсіяння. Врахування стандартних електромагнітних граничних умов накладених на сферичній поверхні відокремленої кулі дає

$$a_{mn}^{l} = a_{n}^{-l} P_{mn}^{l}, \quad b_{mn}^{l} = b_{n}^{-l} Q_{mn}^{l},$$
 (7.12)

де a_n^l та b_n^l коефіцієнти розсіяння Мі на окремій *l*th сфері. P_{mn}^l та Q_{mn}^l - коефіцієнти розкладу повного падаючого поля для *l*th сфери, які мають вигляд

$$P_{mn}^{l} = p_{mn}^{l} - \sum_{j \neq \nu=1}^{(1,L)} \sum_{\mu=-\nu}^{N^{j}} \sum_{\mu=-\nu}^{\nu} \left(A_{mn\mu\nu}^{jl} a_{\mu\nu}^{j} + B_{mn\mu\nu}^{jl} b_{\mu\nu}^{j} \right),$$
(7.13)

$$Q_{mn}^{l} = q_{mn}^{l} - \sum_{j \neq v=1}^{(1,L)} \sum_{\mu=-v}^{N^{j}} \sum_{\mu=-v}^{v} \left(B_{mn\mu\nu}^{jl} a_{\mu\nu}^{j} + A_{mn\mu\nu}^{jl} b_{\mu\nu}^{j} \right), \tag{7.13}$$

де $A_{mn\mu\nu}^{jl}$ та $B_{mn\mu\nu}^{jl}$ - векторні трансляційні коефіцієнти, які характеризують перетворення розсіяної від *j*th сфери хвилі в падаючу для *l*th сфери. Повне електромагнітне поле, яке падає на визначену частину сфери, що належить угрупуванню, складається з двох частин: (1) падаюча первинна плоска хвиля і (2) розсіяні хвилі від сукупності всіх інших сфер. Рівняння (7.12) та (7.13) включають в себе частково розсіянні поля від всіх взаємодіючих сфер і завдають лінійні системи, які мають невизначені коефіцієнти часткового розсіяння від всіх оточуючих сфер:

$$a_{mn}^{l} / a_{n}^{l} + \sum_{j \neq l}^{(1,L)} \sum_{\nu=1}^{N^{j}} \sum_{\mu=-\nu}^{\nu} \left(A_{mn\mu\nu}^{jl} a_{\mu\nu}^{j} + B_{mn\mu\nu}^{jl} b_{\mu\nu}^{j} \right) = p_{mn}^{l},$$

$$b_{mn}^{l} / b_{n}^{l} + \sum_{j \neq l}^{(1,L)} \sum_{\nu=1}^{N^{j}} \sum_{\mu=-\nu}^{\nu} \left(B_{mn\mu\nu}^{jl} a_{\mu\nu}^{j} + A_{mn\mu\nu}^{jl} b_{\mu\nu}^{j} \right) = q_{mn}^{l}$$
(7.14)

У розв'язках частково розсіяних полів, вектор трансляційних коефіцієнтів $(A_{mn\mu\nu}^{jl}, B_{mn\mu\nu}^{jl})$ відіграє ключову роль. Наступний розділ буде присвячено отриманню аналітичних виразів для $A_{mn\mu\nu}^{jl}$ і $B_{mn\mu\nu}^{jl}$.

7.3 Вектор трансляційних коефіцієнтів

Вектор трансляційних коефіцієнтів можна виразити в термінах Гаунтових коефіцієнтів, а саме

$$A_{mn\mu\nu}^{jl} = C_0 \exp\left[i(\mu - m)\phi^{jl}\right] \sum_{q=0}^{q_{max}} i^p C_p a_q h_p^{(1)}(kd^{jl}) p_p^{\mu - m}(\cos\theta^{jl}),$$

$$B_{mn\mu\nu}^{jl} = C_0 \exp\left[i(\mu - m)\phi^{jl}\right] \sum_{q=1}^{Q_{max}} i^{p+1} b_q h_{p+1}^{(1)}(kd^{jl}) p_{p+1}^{\mu - m}(\cos\theta^{jl}),$$
(7.15)

де

$$p = n + v - 2q,$$

$$q_{\max} = \min[n, v, (n + v - |\mu - m|)/2],$$

$$Q_{\max} = \min[n, v, (n + v + 1 - |\mu - m|)/2],$$

$$C_{0} = \frac{(-1)^{m}}{2} \left[\frac{(2n + 1)(2v + 1)(n - m)!(v + \mu)!}{n(n + 1)v(v + 1)(n + m)!(v - \mu)!} \right]^{1/2},$$

$$C_{p} = n(n + 1) + v(v + 1) - p(p + 1).$$
(7.16)

Тут, $(d^{jl}, \theta^{jl}, \phi^{jl})$ сферичні координати в завданій системі, $a_q = a(-m, n, \mu, \nu, p)$ - коефіцієнти Гаунта, і

$$b_{q} = \frac{2p+3}{A_{p+2}} \Big[(p+2)(p_{1}+1)\alpha_{p+1}a_{q} - (p+1)(p_{2}+2)\alpha_{p+2}a_{q-1} \Big], \quad A_{p+2} \neq 0, \Big]$$

$$b_{q} = \frac{2p+3}{(p+3)(p_{1}+2)A_{p+4}} \times \{ [A_{p+3}A_{p+4} + (p+2)(p+4)(p_{1}+3)(p_{2}+3)\alpha_{p+3}]a_{q-1} - (p+2)(p+3)(p_{2}+3)(p_{2}+4)\alpha_{p+4}a_{q-2} \}, \qquad A_{p+2} = 0,$$

$$A_{p} = -p(p-1)(m+\mu) + (m-\mu)(n-\mu)(n+\nu+1),$$

$$p_1 = p + m - \mu,$$

$$p_{2} = p - m + \mu,$$

$$\alpha_{p} = \frac{\left[p^{2} - (n - v)^{2}\right]\left[p^{2} - (n + v + 1)^{2}\right]}{(4p^{2} - 1)}.$$
(7.17)

Коли $A_{p+2} = A_{p+4} = 0$, A_p прямує до нуля незалежно від значень $p, B_{mn\mu\nu}^{jl} = 0$. Цей сценарій також включає наступні випадки: (*i*) $\mu = m = 0$ та, (*ii*) $\mu = -m$ і $\nu = n$. До того ж, $B_{mn\mu\nu}^{jl} = 0$, коли (*i*) m = n і $\mu = -\nu$, (*ii*) m = -n і $\mu = \nu$. В останньому випадку вираз для b_q має досить просту форму :

(i)
$$q = 1$$
,
 $b_1 = \frac{(2p+3)A_{p+3}}{(p+3)(p_1+2)},$
(7.18)

(*ii*)
$$q = q_{\text{max}}$$
 i $n + v - 2q_{\text{max}} = |n - v| |_{\mathbf{H}} |m + \mu|$,

$$b_{q_{\max}} = -\frac{(2p+3)A_{p+1}}{p(p_2+1)}a_{q_{\max}},$$
(7.19)

(*iii*)
$$q = q_{\max} + 1, n + v - 2q_{\max} = |m + \mu| + 1$$
 $_{\mathbf{H}\mathbf{H}}$ $A_{p+2} \neq 0$,

$$b_{q_{\max}+1} = -\frac{(2p+3)(p+1)(p_2+2)\alpha_{p+2}}{A_{p+2}}a_{q_{\max}}.$$
(7.20)

Рівняння (7.15), які завдають точні вирази для $A_{mn\mu\nu}^{jl}$ та $B_{mn\mu\nu}^{jl}$, включають той же самий набір коефіцієнтів Гаунта $a_q = a(-m, n, \mu, \nu, p)$. Необхідно звернути увагу на знак мінус у виразі (7.20). Як випливає з рівняння (7.15), практичне визначення $A_{mn\mu\nu}^{jl}$ и $B_{mn\mu\nu}^{jl}$ має базуватися на прецезійних розрахунках коефіцієнтів Гаунта.

Вираз для векторних перехідних коефіцієнтів є набагато простішим . Наприклад, у окремому випадку, коли $A^{jl}_{mn\mu\nu}$ і $B^{jl}_{mn\mu\nu}$ існують тільки за умови $m = \mu$, для проекції у додатну область $Z(\cos \theta^{jl} = 1)$, маємо

$$A_{mn\mu\nu}^{jl} = C_0 \sum_{q=0}^{\min(n,\nu)} i^P C_p a_p h_p^{(1)}(kd^{jl}),$$

$$B_{mn\mu\nu}^{jl} = C_0 \sum_{q=1}^{\min(n,\nu)} i^{p+1} b_p h_{p+1}^{(1)}(kd^{jl}),$$
(7.21)

Відповідно у від'ємній області $z (\cos \theta^{jl} = -1)$,

$$A_{mn\mu\nu}^{jl} = (-1)^{n+\nu} C_0 \sum_{q=0}^{\min(n,\nu)} i^P C_p a_p h_p^{(1)}(kd^{jl}),$$

$$B_{mn\mu\nu}^{jl} = -(-1)^{n+\nu} C_0 \sum_{q=1}^{\min(n,\nu)} i^{p+1} b_p h_{p+1}^{(1)}(kd^{jl}),$$
(7.22)

В разі осьової симетрії задачі, коефіцієнти Гаунта включають в себе _{тільки} a(-m, n, m, v, p).

7.4 Рекурентні формули для коефіцієнтів Гаунта

Коефіцієнти Гаунта визначаються за допомогою співвідношень

$$a(s,n,\mu,\nu,p) = \frac{(2p+1)}{2} \frac{(p-s-\mu)!}{(p+s+\mu)!} \int_{-1}^{1} P_n^s(x) P_\nu^\mu(x) P_p^{s+\mu}(x) dx.$$
(7.23)

Альтернативне формулювання коефіцієнтів Гаунта здійснюється за допомогою виразів

$$P_n^s(x)P_v^{\mu}(x) = \sum_{q=0}^{q_{\text{max}}} a_q P_p^{s+\mu}(x), \qquad (7.24)$$

де:

$$p = n + v - 2q, \quad a_q = a(s, n, \mu, v, p),$$
$$q_{\max} = \min[n, v, (n + v - |s + \mu|)/2].$$

Коефіцієнти Гаунта, до того ж, задовольняють наступним рекурентним співвідношенням,

$$c_0 a_q = c_1 a_{q-1} + c_2 a_{q-2}, (7.25)$$

де

$$c_{0} = (p+2)(p+3)(p_{1}+1)(p_{1}+2)A_{p+4}\alpha_{p+1},$$

$$c_{1} = A_{p+2}A_{p+3}A_{p+4} + (p+1)(p+3)(p_{1}+2)(p_{2}+2)A_{p+4}\alpha_{p+2} + (p+2)(p+4)(p_{1}+3)(p_{2}+3)A_{p+2}\alpha_{p+3},$$

$$c_{2} = -(p+2)(p+3)(p_{2}+3)(p_{2}+4)A_{p+2}\alpha_{p+4}.$$
(7.26)

Зауважимо, що A_p, p_1, p_2, α_p в рівняннях (7.26) були визначені за допомогою співвідношень (7.17), та заміни -m на s. Коли $\mu = s$ та $\nu = n$, A_p прямує до нуля, незалежно від p так, що відношення вищенаведених тричленів фактично зводиться до наступних двох умов

$$(p+2)(p_1+1)\alpha_{p+1}a_q = (p+1)(p_2+2)\alpha_{p+2}a_{q-1}.$$
 (7.27)

Зокрема, коли $\mu = s = 0$ (7.27) зводиться до

$$\alpha_{p+1}a_q = \alpha_p a_{q-1}. \tag{7.28}$$

Коли $A_{p+4} = 0$ але $A_{p+6} \neq 0$, то тричление співвідношення (7.25) може бути замінено наступною рекурентною формулою

$$c_0 a_q = c_1 a_{q-1} + c_2 a_{q-2} + c_3 a_{q-3}, (7.29)$$

де

$$c_{0} = (p+2)(p+3)(p+5)(p_{1}+2)(p_{1}+4)A_{p+6}\alpha_{p+1},$$

$$c_{1} = (p+5)(p_{1}+4)A_{p+6}\left[A_{p+2}A_{p+3} + (p+1)(p+3)(p_{1}+2)(p_{2}+2)\alpha_{p+2}\right],$$

$$c_{2} = (p+2)(p_{2}+3)A_{p+2}\left[A_{p+5}A_{p+6} + (p+4)(p+6)(p_{1}+5)(p_{2}+5)\alpha_{p+5}\right],$$

$$c_{3} = -(p+2)(p+4)(p+5)(p_{2}+3)(p_{2}+5)(p_{2}+6)A_{p+2}\alpha_{p+6}.$$
(7.30)

Послідовна схема, для точного і швидкого оцінювання коефіцієнтів Гаунта, базується саме на цих рекурентних співвідношеннях. Для спеціальної групи коефіцієнтів Гаунта рекурентні відношення призводять до

$$\alpha_{p+1}a_q - \left(4m^2 + \alpha_{p+2} + \alpha_{p+3}\right)a_{q-1} + \alpha_{p+4}a_{q-2} = 0.$$
(7.31)

7.5 Поле розсіяння у хвильовій зоні

Як показано вище, всі парціальні розсіяні поля від кожної формально визначаються у компоненти сфер. відповідно вибраній сферичній системі координат. Враховуючи граничні умови для коефіцієнтів розсіяння, на наступному кроці маємо знайти поле повного розсіяння від групи сфер, як комплексу. Цей крок відіграє важливу роль для просування в напрямку знаходження розв'язку задачі багатократного розсіяння світла. Вибираючи довільно розташовану систему координат, повне розсіяне поле може бути визначено аналогічно (7.11). Наприклад, у вибраній системі координат j_0 th, розклад окремого внеску до повного розсіяного поля виглядає, як

$$\mathbf{E}_{sca}^{t} = \sum_{n=1}^{N_{max}} \sum_{m=-n}^{n} i E_{mn} \Big[a_{mn}^{t} \mathbf{N}_{mn}^{(3)} \big(\rho, \theta, \phi \big) + b_{mn}^{t} \mathbf{M}_{mn}^{(3)} \big(\rho, \theta, \phi \big) \Big],$$

$$\mathbf{H}_{sca}^{t} = \frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=1}^{N_{max}} \sum_{m=-n}^{n} E_{mn} \Big[b_{mn}^{t} \mathbf{N}_{mn}^{(3)} (\rho, \theta, \phi) + a_{mn}^{t} \mathbf{M}_{mn}^{(3)} (\rho, \theta, \phi) \Big],$$
(7.32)

де $N_{\text{max}} = \max(N^j), j = 1, 2, ..., L$. Тут, просте співвідношення між коефіцієнтами повного і часткового розсіяння у хвильовій зоні визначається лише завдяки простим фазовим умовам(зсуву). Це можливо завдяки тому, що зсуви проміж системами координат у асимптотичній області набувають простий вигляд, а саме:

$$M_{mn}^{(3)}(\rho^{l},\theta^{l},\phi^{l}) = \exp(-ik\Delta^{l})M_{mn}^{(3)}(\rho,\theta,\phi),$$

$$N_{mn}^{(3)}(\rho^{l},\theta^{l},\phi^{l}) = \exp(-ik\Delta^{l})N_{mn}^{(3)}(\rho,\theta,\phi),$$
(7.33)

де $\Delta^{l} = X^{l} \sin \theta \cos \phi + Y^{l} \sin \theta \sin \phi + Z^{l} \cos \theta$. Для запису розкладання внесків у хвильовій зоні, скористуємося рівнянням (7.33), асимптотичною формою теореми складання у хвильовій зоні, загальною теоремою складання для векторних сферичних функцій:

$$\mathbf{M}_{\mu\nu}^{(3)}(\rho^{l},\theta^{l},\phi^{l}) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{E_{mn}}{E_{\mu\nu}} \Big[\tilde{A}_{mn\mu\nu}^{lj_{0}} \mathbf{M}_{mn}^{(3)}(\rho,\theta,\phi) + \tilde{B}_{mn\mu\nu}^{lj_{0}} \mathbf{N}_{mn}^{(3)}(\rho,\theta,\phi) \Big],$$

$$N_{\mu\nu}^{(3)}(\rho^{l},\theta^{l},\phi^{l}) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{E_{mn}}{E_{\mu\nu}} \Big[\tilde{B}_{mn\mu\nu}^{lj_{0}} \mathbf{M}_{mn}^{(3)}(\rho,\theta,\phi) + \tilde{A}_{mn\mu\nu}^{lj_{0}} \mathbf{N}_{mn}^{(3)}(\rho,\theta,\phi) \Big],$$
(7.34)

Де $(\tilde{A}_{mn\mu\nu}^{lj_0}, \tilde{B}_{mn\mu\nu}^{lj_0})$ - векторні трансляційні коефіцієнти. Різниця між $(\tilde{A}_{mn\mu\nu}^{lj_0}, \tilde{B}_{mn\mu\nu}^{lj_0})$ та $(A_{mn\mu\nu}^{lj_0}, B_{mn\mu\nu}^{lj_0})$ - є похідна функція(відповідно j_n для першого і $h_n^{(1)}$ для другого). Засновані на рівняннях (7.33), коефіцієнти повного розсіяння в рівняннях (7.32) у хвильовій зоні визначаються, як

$$a_{mn}^{t} = \sum_{l=1}^{l} \exp(-ik\Delta^{l}) a_{mn}^{l}, \qquad b_{mn}^{t} = \sum_{l=1}^{l} \exp(-ik\Delta^{l}) b_{mn}^{l}, \qquad (7.35)$$

Зауважимо, що вони не задовольняють теорему складання (7.34) і не враховують векторних трансляційних коефіцієнтів $\left(\tilde{A}_{mn\mu\nu}^{l_0}, \tilde{B}_{mn\mu\nu}^{l_0}\right)$. Підкреслимо, що a_{mn}^t та b_{mn}^t завдані (7.35) залежать від кутових змінних (Δ^l змінюється в залежності від θ та ϕ_{j} .

7.6 Матрична форма запису для амплітуди розсіяння

Строге аналітичне визначення матриці, яка завдає амплітуди розсіяння від сукупності частинок є базовим при формулюванні положень теорії багато часткового розсіяння. Цей підхід зокрема дозволяє аналітично сформулювати основні характеристики розсіяння на сукупностях (групах) розсіювачів.

Для *z* - поляризованої бігучої падаючої плоскої хвилі, співвідношення між падаючою та розсіяною амплітудою в хвильовій зоні, може бути записано в матричній формі:

$$\begin{bmatrix} E_{\square sca} \\ E_{\perp sca} \end{bmatrix} = \frac{\exp\left[ik\left(r-z\right)\right]}{-ikr} \begin{bmatrix} S_2 & S_3 \\ S_4 & S_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{\square inc} \\ E_{\perp inc} \end{bmatrix},$$
(7.36)

де $(E_{\Box inc}, E_{\perp inc})$ та $(E_{\Box sca}, E_{\perp sca})$, відповідно, падаюче поле і розсіяні компоненти поля у хвильовій зоні, паралельні і перпендикулярні площині розсіяння, що задається віссю *z* (тобто спільним напрямком в якому відбуваються, як падіння, так і розсіяння). Для випадку багато часткового розсіяння, амплітуда падаючої хвилі є

$$E_{\Box inc} = E_0 \cos\left(\phi - \beta_p\right) \exp(ikz), \quad E_{\perp inc} = E_0 \sin\left(\phi - \beta_p\right) \exp(ikz), \quad (7.37)$$

Відповідно, чотири компоненти амплітуди матриці розсіяння мають вигляд

$$S_{2}(\theta,\phi) = \sum_{l=1}^{L} \exp\left(-ik\Delta^{l}\right) \sum_{n=1}^{N^{l}} \sum_{m=0}^{n} \frac{1}{1+\delta_{0m}} \times \left\{\Psi_{mn}^{l} \cos\left[(m-1)\phi + \beta_{p}\right] + i\Phi_{mn}^{l} \sin\left[(m-1)\phi + \beta_{p}\right]\right\},\$$

$$S_{3}(\theta,\phi) = \sum_{l=1}^{L} \exp\left(-ik\Delta^{l}\right) \sum_{n=1}^{N^{l}} \sum_{m=0}^{n} \frac{1}{1+\delta_{0m}} \times \left\{ \Phi_{mn}^{l} \cos\left[(m-1)\phi + \beta_{p}\right] - \Psi_{mn}^{l} \sin\left[(m-1)\phi + \beta_{p}\right] \right\},$$

$$S_{4}(\theta,\phi) = \sum_{l=1}^{L} \exp\left(-ik\Delta^{l}\right) \sum_{n=1}^{N^{l}} \sum_{m=0}^{n} \frac{1}{1+\delta_{0m}} \times \left\{-i\Theta_{mn}^{l} \cos\left[(m-1)\phi + \beta_{p}\right] + \Xi_{mn}^{l} \sin\left[(m-1)\phi + \beta_{p}\right]\right\},$$

$$S_{1}(\theta,\phi) = \sum_{l=1}^{L} \exp\left(-ik\Delta^{l}\right) \sum_{n=1}^{N^{l}} \sum_{m=0}^{n} \frac{1}{1+\delta_{0m}} \times \left\{ \Xi_{mn}^{l} \cos\left[(m-1)\phi + \beta_{p}\right] + i\Theta_{mn}^{l} \sin\left[(m-1)\phi + \beta_{p}\right] \right\}.$$
(7.38)

У рівняннях (7.38), δ_{0m} є дельта-символи Кронекера,

$$\Psi_{mn}^{l} = a_{mn}^{l} \tilde{\tau}_{mn} + b_{mn}^{l} \tilde{\pi}_{mn} + (-1)^{m} \left(a_{-mn}^{l} \tilde{\tau}_{mn} - b_{-mn}^{l} \tilde{\pi}_{mn} \right),$$

$$\Phi_{mn}^{l} = a_{mn}^{l} \tilde{\tau}_{mn} + b_{mn}^{l} \tilde{\pi}_{mn} - (-1)^{m} \left(a_{-mn}^{l} \tilde{\tau}_{mn} - b_{-mn}^{l} \tilde{\pi}_{mn} \right),$$

$$\Theta_{mn}^{l} = a_{mn}^{l} \tilde{\pi}_{mn} + b_{mn}^{l} \tilde{\tau}_{mn} - (-1)^{m} \left(a_{-mn}^{l} \tilde{\pi}_{mn} - b_{-mn}^{l} \tilde{\tau}_{mn} \right),$$

$$\Xi_{mn}^{l} = a_{mn}^{l} \tilde{\pi}_{mn} + b_{mn}^{l} \tilde{\tau}_{mn} + (-1)^{m} \left(a_{-mn}^{l} \tilde{\pi}_{mn} - b_{-mn}^{l} \tilde{\tau}_{mn} \right),$$
(7.39)

де $\tilde{\pi}_{mn}$ і $\tilde{\tau}_{mn}$ - нормовані кутові функції, $\tilde{\pi}_{mn} = C_{mn} \pi_{mn}$ и $\tilde{\tau}_{mn} = C_{mn} \tau_{mn}$, с $C_{mn} = i^{-n} E_{mn} / E_0$,

$$C_{mn} = \left[\frac{(2n+1)}{n(n+1)}\frac{(n-m)!}{(n+m)!}\right]^{1/2}.$$
(7.40)

Відповідні рекурентні співвідношення для $\tilde{\pi}_{mn}$ та $\tilde{\tau}_{mn}$ схожі між собою і можуть бути отримані аналогічно π_{mn} і τ_{mn} . Треба пам'ятати, що формули отримані вище вірні для визначеного поляризованого стану падаючої плоскої хвилі з кутом поляризації β_p . Умовним визначенням амплітуди матриці розсіяння є наступне:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} S_2^{(0^{\circ})} & S_3^{(90^{\circ})} \\ S_4^{(0^{\circ})} & S_1^{(90^{\circ})} \end{bmatrix},$$
(7.41)

де елементи S_2 і S_4 відповідають лінійно поляризованим станам падаючої плоскої хвилі $\beta_p = 0^{\circ}$, а елементи S_3 та S_1 відповідно – поляризованому стану з $\beta_p = 90^{\circ}$. З урахуванням вище сказаного, чотири елементи амплітуди матриці розсіяння мають наступний вигляд:

$$S_{2}^{(9^{\circ})}(\theta,\phi) = \sum_{l=1}^{L} \exp(-ik\Delta^{l}) \sum_{n=1}^{N^{l}} \sum_{m=0}^{n} \frac{1}{1+\delta_{0m}} \times \\ \times \left[\Psi_{nm}^{l(9^{\circ})} \cos(m-1)\phi + i\Phi_{mn}^{l(9^{\circ})} \sin(m-1)\phi \right], \\ S_{4}^{(9^{\circ})}(\theta,\phi) = -\sum_{l=1}^{L} \exp(-ik\Delta^{l}) \sum_{n=1}^{N^{l}} \sum_{m=0}^{n} \frac{1}{1+\delta_{0m}} \times \\ \times \left[i\Theta_{mn}^{l(9^{\circ})} \cos(m-1)\phi - \Xi_{nm}^{l(9^{\circ})} \sin(m-1)\phi \right], \\ S_{3}^{(90^{\circ})}(\theta,\phi) = -\sum_{l=1}^{L} \exp(-ik\Delta^{l}) \sum_{n=1}^{N^{l}} \sum_{m=0}^{n} \frac{1}{1+\delta_{0m}} \times \\ \times \left[i\Phi_{mm}^{l(90^{\circ})} \cos(m-1)\phi + \Psi_{mm}^{l(90^{\circ})} \sin(m-1)\phi \right], \\ S_{1}^{(90^{\circ})}(\theta,\phi) = -\sum_{l=1}^{L} \exp(-ik\Delta^{l}) \sum_{n=1}^{N^{l}} \sum_{m=0}^{n} \frac{1}{1+\delta_{0m}} \times \\ \times \left[i\Phi_{mm}^{l(90^{\circ})} \cos(m-1)\phi + \Psi_{mm}^{l(90^{\circ})} \sin(m-1)\phi \right], \\ (7.42)$$

де $\Psi_{mn}^{l(0^{\circ})}$, $\Phi_{mn}^{l(0^{\circ})}$, $\Theta_{mn}^{l(0^{\circ})}$ і $\Xi_{mn}^{l(0^{\circ})}$ визначаються рівняннями (7.39) за умов $a_{mn}^{l(0^{\circ})}$, $b_{mn}^{l(0^{\circ})}$, $a_{-mn}^{l(0^{\circ})}$ і $b_{-mn}^{l(0^{\circ})}$, завданих (7.14) для $\beta_p = 0^{\circ}$, і аналогічно, $\Psi_{mn}^{l(90^{\circ})}$, $\Phi_{mn}^{l(90^{\circ})}$, $\Theta_{mn}^{l(90^{\circ})}$ та $\Xi_{mn}^{l(90^{\circ})}$ завданих для $a_{mn}^{l(90^{\circ})}$, $b_{mn}^{l(90^{\circ})}$, $a_{-mn}^{l(90^{\circ})}$ та $b_{-mn}^{l(90^{\circ})}$ за умов $\beta_p = 90^{\circ}$.

7.7 Повний і диференціальний переріз розсіяння та параметри асиметрії

Базуючись на аналітичних виразах для амплітуди матриці розсіяння сукупності частинок, можуть бути отримані строгі формули для опису фундаментальних властивостей розсіяння, включаючи повний і диференціальний перерізи для екстинкції, розсіяння, поглинання і променевого тиску, а також ефектів асиметрії.

Повний і диференціальний перерізи розсіяння, C_{sca} і C'_{sca} , на сукупностях сфер, завдаються співвідношеннями:

$$C_{sca} = \sum_{l=1}^{L} C_{sca}^{l} = \frac{4\pi}{k^{2}} \sum_{l=1}^{L} \sum_{n=1}^{N^{l}} \sum_{m=-n}^{n} \operatorname{Re}\left[a_{mn}^{l} a_{mn}^{(t)l} + b_{mn}^{l} b_{mn}^{(t)l}\right], \quad (7.43)$$

де

$$a_{mn}^{(t)l} = \sum_{j=1}^{L} \sum_{\nu=1}^{N^{j}} \sum_{\mu=-\nu}^{\nu} \left(\tilde{A}_{mn\mu\nu}^{jl} a_{\mu\nu}^{j} + \tilde{B}_{mn\mu\nu}^{jl} b_{\mu\nu}^{j} \right),$$
(7.44)

$$b_{mn}^{(t)l} = \sum_{j=1}^{L} \sum_{\nu=1}^{N^{j}} \sum_{\mu=-\nu}^{\nu} \left(\tilde{A}_{mn\mu\nu}^{jl} b_{\mu\nu}^{j} + \tilde{B}_{mn\mu\nu}^{jl} a_{\mu\nu}^{j} \right), \qquad (7.11)$$

Слід зазначити, що $\tilde{A}_{mn\mu\nu}^{ll} = \delta_{m\mu}\delta_{n\nu}$ та $\tilde{B}_{mn\mu\nu}^{ll} \equiv 0$. Також, $a_{mn}^{(t)l}$ та $b_{mn}^{(t)l}$ є відмінними, від коефіцієнтів, які характеризують повне розсіяння, a_{mn}^{t} та b_{mn}^{t} розкладені у околі центру сфери l. Параметр асиметрії сукупності сфер $\overline{\cos\theta}$ визначимо за допомогою співвідношень:

$$\overline{\cos\theta} = \frac{4\pi}{k^2 C_{sca}} \sum_{l=1}^{L} \sum_{n=1}^{N^l} \sum_{m=-n}^{n} \operatorname{Re} \{ a_{mn}^{l*} \Big[f_1 b_{mn}^{(t)l} + f_2 a_{mn+1}^{(t)l} + f_3 a_{mn-1}^{(t)l} \Big] + b_{mn}^{l*} \Big[f_1 b_{mn}^{(t)l} + f_2 a_{mn+1}^{(t)l} + f_3 a_{mn-1}^{(t)l} \Big] \},$$
(7.45)

де

$$f_{1} = \frac{m}{n(n+1)},$$

$$f_{2} = \frac{1}{n+1} \left[\frac{n(n+2)(n-m+1)(n+m+1)}{(2n+1)(2n+3)} \right]^{1/2},$$

$$f_{3} = \frac{1}{n} \left[\frac{(n-1)(n+1)(n-m)(n+m)}{(2n-1)(2n+1)} \right]^{1/2}.$$
(7.46)

Повний переріз екстинкції для сукупності сфер може бути записано у наступному вигляді

$$C_{ext} = \sum_{l=1}^{L} C_{ext}^{l} = \frac{4\pi}{k^{2}} \sum_{l=1}^{L} \sum_{n=1}^{N^{l}} \sum_{m=-n}^{n} \operatorname{Re}\left(p_{mn}^{l*} a_{mn}^{l} + q_{mn}^{l*} b_{mn}^{l}\right),$$
(7.47)

де C_{ext}^{l} є *l*th внеском до диференціального перерізу екстинкції *l*th компоненти сфери. Для випадку *z* - бігучої падаючої плоскої хвилі маємо

$$C_{ext} = \frac{2\pi}{k^2} \operatorname{Re} \sum_{l=1}^{L} \exp\left(-ikZ^l\right) \sum_{n=1}^{N^l} \sqrt{2n+1} \times \left[\left(a_{1n}^l + b_{1n}^l\right) \exp\left(i\beta_p\right) - \left(a_{-1n}^l - b_{-1n}^l\right) \exp\left(-i\beta_p\right) \right].$$
(7.48)

Зокрема, типові стани поляризації падаючої плоскої хвилі, $\beta_p = 0^\circ$ (*x*-поляризованої) і $\beta_p = 90^\circ$ (*y*-поляризованої), відповідають наступним перерізам екстинкції:
$$C_{ext}^{(0^{\circ})} = \frac{2\pi}{k^{2}} \operatorname{Re} \sum_{l=1}^{L} \exp\left(-ikZ^{l}\right) \sum_{n=1}^{N^{l}} \sqrt{2n+1} \left[a_{1n}^{l(0^{\circ})} + b_{1n}^{l(0^{\circ})} - a_{-1n}^{l(0^{\circ})} + b_{-1n}^{l(0^{\circ})} \right],$$

$$C_{ext}^{(90^{\circ})} = \frac{2\pi}{k^{2}} \operatorname{Re} \sum_{l=1}^{L} \exp\left(-ikZ^{l}\right) \sum_{n=1}^{N^{l}} \sqrt{2n+1} \left[a_{1n}^{l(90^{\circ})} + b_{1n}^{l(90^{\circ})} + a_{-1n}^{l(0^{\circ})} - b_{-1n}^{l(0^{\circ})} \right].$$
(7.49)

Переріз поглинання може бути знайдено, якщо скористуватися правилом $C_{abs} = C_{ext} - C_{sca}$. Аналогічно, C_{abs} також можна знайти у явній формі перерізи C_{ext} , C_{sca} C_{abs} . Різниця між двома отриманими чисельними результатами для C_{abs} визначає точність розв'язків задачі розсіяння.

Для Z - бігучої падаючої плоскої хвилі, зворотній переріз розсіяння визначається, як

$$C_{bak} = \frac{4\pi}{k^2} \left| S\left(\theta = 180^{\circ}\right) \right|^2,$$
 (7.50)

де $S(180^{\circ}) = S_1(180^{\circ}) = -S_2(180^{\circ})$. Приймаючи до уваги, що $\pi_{mn}(-1)$ та $\tau_{mn}(-1)$ за умов |m| = 1, $\pi_{1n}(-1) = (-1)^{n+1}n(n+1)/2$, та $\tau_{1n}(-1) = -\pi_{1n}(-1)$, рівняння (7.38)-(7.40) призводять до

$$S(180^{\circ}) = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{L} \sum_{n=1}^{N^{l}} (-1)^{n+1} \sqrt{2n+1} \exp(ikZ^{l}) \times \left[\left(a_{1n}^{l} - b_{1n}^{l}\right) \exp(i\beta_{p}) - \left(a_{-1n}^{l} + b_{-1n}^{l}\right) \exp(-i\beta_{p}) \right],$$
(7.51)

За допомогою (7.51) можуть бути отримані повний і диференціальний зворотній перерізи розсіяння на групі (комплексі) сфер.

Розв'язок задачі багатосферного розсіяння можливо отримати з використанням теорії Мі, користуючись T - матричним представленням. Лінійні рівняння, що витікають з граничних умов (7.14), можна записати в компактній формі, Aa=P, де $a = \left[a_{mn}^{l}, b_{mn}^{l}\right]^{T}$, $P = \left[p_{mn}^{l}, q_{mn}^{l}\right]^{T}$, та

 $A = [A^{l_j}], l, j = 1, 2, ..., L, 1 \le n \le N^l, |m| \le n$. А - квадратна матриця. Зворотна до неї $T = A^{-1} \in T$ - матрицею, яка характеризує процес розсіяння сукупністю частинок.

Всі рівняння для елементів матриці розсіяння залишаються незмінними. Коефіцієнти розсіяння в рівняннях (7.39) породжують для сукупності частинок *T* - матрицю наступного виду

$$a_{sn}^{l} = \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^{N_{\max}} \sqrt{2\nu + 1} \left[\left(T_{sn1\nu}^{l11} + T_{sn1\nu}^{l12} - T_{sn,-1\nu}^{l11} + T_{sn,-1\nu}^{l12} \right) \cos \beta_{p} - \left(T_{sn1\nu}^{l11} + T_{sn1\nu}^{l12} + T_{sn,-1\nu}^{l11} - T_{sn,-1\nu}^{l12} \right) i \sin \beta_{p} \right],$$

$$b_{sn}^{l} = \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{max}}} \sqrt{2\nu + 1} \left[\left(T_{sn1\nu}^{l21} + T_{sn1\nu}^{l22} - T_{sn,-1\nu}^{l21} + T_{sn,-1\nu}^{l22} \right) \cos \beta_{p} - \frac{(7.52)}{-\left(T_{sn1\nu}^{l21} + T_{sn1\nu}^{l22} + T_{sn,-1\nu}^{l21} - T_{sn,-1\nu}^{l22} \right) i \sin \beta_{p} \right],$$

де

$$N_{\max} = \max(N^{j})(j=1,2,...,L)$$

та

$$T_{sn\mu\nu}^{lpq} = \sum_{j=1}^{L} \exp\left(ikZ^{j}\right) T_{sn\mu\nu}^{jlpq}, \qquad (7.53)$$

звідки витікає, що $T_{sn\mu\nu}^{jlpq} = 0$, коли $\nu > N^{j}$. Зокрема, для двох типових типів поляризації падаючої хвилі $\beta_{p} = 0^{\circ}$ та 90° , рівняння (7.52) перетворюються на наступні

$$a_{sn}^{l(0^{\circ})} = \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{max}}} \sqrt{2\nu + 1} \left(T_{sn1\nu}^{l11} + T_{sn1\nu}^{l12} - T_{sn,-1\nu}^{l11} + T_{sn,-1\nu}^{l12} \right),$$

$$b_{sn}^{l(0^{\circ})} = \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{max}}} \sqrt{2\nu + 1} \Big(T_{sn1\nu}^{l21} + T_{sn1\nu}^{l22} - T_{sn,-1\nu}^{l21} + T_{sn,-1\nu}^{l22} \Big),$$

$$a_{sn}^{l(90^{\circ})} = -\frac{i}{2} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{max}}} \sqrt{2\nu + 1} \left(T_{sn1\nu}^{l11} + T_{sn1\nu}^{l12} + T_{sn,-1\nu}^{l11} - T_{sn,-1\nu}^{l12} \right), \quad (7.54)$$

$$b_{sn}^{l(90^{\circ})} = \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{max}}} \sqrt{2\nu + 1} \left(T_{sn1\nu}^{l21} + T_{sn1\nu}^{l22} + T_{sn,-1\nu}^{l21} - T_{sn,-1\nu}^{l22} \right),$$

У практичних розрахунках елементи T^{l} - матриці $(T^{lpq}_{mn\mu\nu})$ для кожного l можуть бути знайдені безпосередньо (минаючи стадію визначення компонентів T - матриці $(T^{jlpq}_{mn\mu\nu})$. Така процедура може бути реалізована за допомогою використання відповідних граничних умов для коефіцієнтів неповного розсіяння a^{l}_{mn} і b^{l}_{mn} .

Наведемо без детальних викладок співвідношення, що визначають перерізи розсіяння у загальному випадку багаточасткового розсіяння, а саме:

$$C_{ext} = \frac{\pi}{k^2} \operatorname{Re} \sum_{l=1}^{L} \sum_{n=1}^{N^l} \sum_{\nu=1}^{N_{max}} \sum_{p=1}^{2} \sum_{q=1}^{2} \sqrt{(2n+1)(2\nu+1)} \exp(-ikZ^l) \times \\ \times \{T_{1n1\nu}^{lpq} + (-1)^q T_{1n,-1\nu}^{lpq} \exp(i2\beta_p) + \\ + (-1)^p \Big[T_{-1n1\nu}^{lpq} \exp(-i2\beta_p) + (-1)^q T_{-1n,-1\nu}^{lpq} \Big] \}.$$
(7.55)

$$C_{sca} = \frac{\pi}{k^{2}} \operatorname{Re} \sum_{l=1}^{L} \sum_{n=1}^{N^{l}} \sum_{m=-n}^{n} \sum_{\nu=1}^{N_{max}} \sum_{p=1}^{2} \sum_{q=1}^{2} \sum_{q'=1}^{2} \left[(2\nu+1)(2\nu'+1) \right]^{1/2} \times \left\{ T_{mn1\nu}^{lpq*} \left[T_{mn1\nu'}^{(t)lpq'} + \exp(i2\beta)(-1)^{q'} T_{mn,-1,\nu'}^{(t)lpq'} \right] + (-1)^{q} T_{mn,-1\nu}^{lpq*} \left[\exp(-i2\beta_{p}) T_{mn1\nu'}^{(t)lpq'} + (-1)^{q'} T_{mn,-1,\nu'}^{(t)lpq'} \right] \right\},$$
(7.56)

$$\overline{\cos\theta} = \frac{\pi}{k^2 C_{sca}} \operatorname{Re} \sum_{l=1}^{L} \sum_{n=1}^{N^l} \sum_{m=-n}^{n} \sum_{\nu=1}^{N_{max}} \sum_{p=1}^{N_{max}} \sum_{q=1}^{2} \sum_{q'=1}^{2} \left[(2\nu+1)(2\nu'+1) \right]^{1/2} \times \left\{ T_{mn1\nu'}^{lpq^*} \left[\tilde{T}_{mn1\nu'}^{(l)lpq'} + \exp(i2\beta_p)(-1)^{q'} \tilde{T}_{mn,-1,\nu'}^{(l)lpq'} \right] + (-1)^{q'} T_{mn,-1\nu}^{lpq^*} \left[\exp(-i2\beta_p) \tilde{T}_{mn1\nu'}^{(l)lpq'} + (-1)^{q'} \tilde{T}_{mn,-1,\nu'}^{(l)lpq'} \right] \right\},$$
(7.57)

де

$$T_{mn\mu\nu}^{(t)lpq} = \sum_{l'=1}^{L} \sum_{n'=1}^{N^{l'}} \sum_{m'=-n'}^{n'} \left[\tilde{A}_{mnm'n'}^{l'l} T_{m'n'\mu\nu}^{l'pq} + \tilde{B}_{mnm'n'}^{l'l} T_{m'n'\mu\nu}^{l'(3-p)q} \right],$$

$$\tilde{T}_{mn\mu\nu}^{(t)lpq} = f_1 T_{mn\mu\nu}^{(t)l(3-p)q} + f_2 T_{m,n+1,\mu\nu}^{(t)lpq} + f_3 T_{m,n-1,\mu\nu}^{(t)lpq},$$
(7.58)

 f_1, f_2, f_3 знайденими в (7.46).

$$C_{bak} = \sum_{l=1}^{L} C_{bak}^{l} = \frac{\pi}{4k^{2}} \operatorname{Re} \sum_{l=1}^{L} \sum_{n=1}^{N^{l}} \sum_{\nu=1}^{N} \sum_{l'=1}^{L} \sum_{n'=1}^{N^{l'}} \sum_{p'=1}^{N} \sum_{q=1}^{2} \sum_{p'=1}^{2} \sum_{q'=1}^{2} \sum_{q'=1}$$

При формулюванні T - матриці багато часткового розсіяння, наданої вище, T - матриця одноцентричної сукупності T^t може бути записана у вигляді

$$T_{mn\mu\nu}^{tpq} = \sum_{l=1}^{L} \exp\left(-ik\Delta^{l}\right) T_{mn\mu\nu}^{lpq} =$$
$$= \sum_{l=1}^{L} \sum_{j=1}^{L} \exp\left[i\left(\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}^{j}-k\Delta^{l}\right)\right] T_{mn\mu\nu}^{jlpq}.$$
(7.60)

Обидві матриці T' та T' включають внески від початкового та фазового станів і змінюються разом із змінами падаючої компоненти. Таким чином, T' та T' не є T - матрицями в загальноприйнятому сенсі. Тільки T - матриця повної сукупності частинок і внесків є залежною від падаючого поля.

7.8 Розсіяння МІ на структурованих комплексах

У даному розділі ми представимо деякі практичні приклади для проведення розрахунків багаточасткового розсіяння. Кожний приклад включає в себе теоретичну модель, результати експериментальних вимірювань i_{11} та i_{22} (безрозмірні інтенсивності поляризованого розсіяння, як функції кутових змінних), і графічне порівняння результатів теоретичних розрахунків з експериментальними даними для i_{11} та i_{22} . У обчисленнях поля розсіяння, покладено $i_{11} = |S_1|^2$ та $i_{22} = |S_2|^2$, де S_1 і S_2 є елементами амплітуди матриці розсіяння. Експериментальні дані цитовані з роботи.

Приклад 1

Цей приклад описує дві оптично однорідні сфери, які знаходяться у точковому ідеальному контакті. Розмірний параметр кожної сфери дорівнює 7.86, показник заломлення сфер (2.5155, 0.0213). Орієнтація цієї системи бі-сфер (див. Рис. 7.1.а) вибрана такою, що ось симетрії двох сфер паралельна площині в якій відбувається розсіяння і перпендикулярна до вектора падаючої плоскої хвилі. Рис.7.2 показує порівняння i_{11} та i_{22} отримані за допомогою теоретичних і експериментальних методів дослідження розсіяння від бі-комплексів із детермінованою орієнтацією.

Приклад 2

У цьому прикладі проаналізоване розсіяння на групі, яка складається з 240 ідентичних нейлонових сфер (рис 7.1.д). Розмірний параметр окремої сфери - 0.58 і показник заломлення - (1.235, 0.007) (див. Рис.7.3).

Приклад 3

Цей приклад описує лінійний ланцюжок (див. Рис.7.1.б), який складається з трьох дотичних ідентичних акрилових сфер. Кожна сфера має розмірний параметр - 7.49 і показник заломлення (1.615, 0.008). Орієнтація цього ланцюжка сфер така, що її ось симетрії розташована уздовж області бігучої падаючої плоскої хвилі (див. Рис.7.4).

Приклад 4

Розглянуте розсіяння на сукупності з дев'яти ідентичних акрилових сфер (див. Рис.7.1.в), що геометрично формують квадрат 3×3 . Їх орієнтація така, що площина поверхні квадрата паралельна площині розсіяння і її дві сторони перпендикулярні до області бігучої, падаючої хвилі. Кожна сфера має розмірний параметр - 5.03 і показник заломлення - (1.615, 0.008) (див. Рис.7.5).

Приклад 5

У цьому прикладі розглядається двошарова прямокутна сукупність з 18 ідентичних акрилових сфер (див. Рис.3.1.г). Кожна з конфігурацій складається з шарів вписаних у квадрат 3×3 . Верхні і нижні площині поверхонь квадратів паралельні до площини розсіяння та дві пари сторін, відповідно, паралельні й перпендикулярні до області бігучої падаючої плоскої хвилі. Кожна сфера має розмірний параметр - 5.03 і показник заломлення - (1.615, 0.008) (див. Рис.3.6).



Рисунок 7.1 Сукупності сфер а) 2 акрилові сфери (бі-сфера); б) ланцюжок з 3 акрилових сфер; в) квадрат 3×3 з 9 акрилових сфер; г) паралелепіпед з 18 акрилових сфер; д) сукупність з 240 нейлонових сфер



Рисунок 7.2 Порівняльний аналіз між лабораторними вимірами розсіяння (expt)) і теоретичними розв'язками (theory) для i_{11} і i_{22} для двох ідентичних сфер в одній орієнтації



Рисунок 7.3 Порівняльний аналіз теоретичних розв'язків (theory) і лабораторних вимірювань (expt.) для азимутально-усереднених i_{11} і i_{22} сукупностей 240 ідентичних нейлонових сфер



Рисунок 7.4 Порівняльна аналіз між теоретичними розрахунками та лабораторними вимірами розсіяння для кутової функції розподілу i_{11} і i_{22} лінійного ланцюжка трьох акрилових сфер



Рисунок 7.5 Порівняльний аналіз розрахованих i_{11} і i_{22} з лабораторними вимірами розсіяння для квадрата 3×3 з дев'яти акрилових сфер



Рисунок 7.6 Порівняння i_{11} і i_{22} отриманих теоретично та за лабораторними результатами вимірювань для 18 ідентичних акрилових сфер

7.9 Аналіз даних експериментальних вимірювань

З метою практичного застосування отриманих теоретичних результатів ще раз проаналізуємо висновки, які витікають з графічного порівняння між теоретичними розрахунками та лабораторними вимірами розсіяння для кутових функцій розподілу i_{11} та i_{22} (безрозмірні інтенсивності поляризованого розсіяння, як функції кутового розсіяння) для 2, 3, 9, та 18 ідентичних акрилових сфер, які утворюють різноманітні угруповування (Рис.3.1). У відповідних розрахунках розсіяння приймалося $-i_{11} = |S_1|^2$ та $i_{22} = |S_2|^2$, де S_1 і S_2 є елементами амплітуди матриці розсіяння.

Порівнюючи експериментальні дані графічно, можна помітити, що із збільшенням числа сфер в угрупуванні число піків збільшується, як для графіків розсіяння i_{11} , так і для i_{22} . Особливо чітко це видно на Рис.7.7 та Рис.7.14, на кожному з яких відображено розсіяння на угрупуваннях з 9 та 18 сфер. Найбільш схожими виявилися дані i_{11} , які відповідають розсіянню на 9 та на 18 сферах, наведені на Рис. 7.7. Порівняння i_{22} отриманих експериментальним шляхом для 9 та 18 сфер (Рис.7.14), показують помітну різницю, не мають точок перетину, але в той же час прослідковується наявність чітких прикмет подібності. Це свідчить про те, що діагностика розсіювань на даних конфігураціях малоефективна при досліджені i_{11} та, навпаки, цілком можлива при досліджені i_{22} .

При порівняні i_{11} , отриманих експериментальним шляхом для 3 та 2 сфер (Рис.3.8), просліджується чітка різниця. Для i_{11} , що відповідає 2 сферам, чітко видно мінімум при 135°, також, крива має набагато менше виражених мінімумів та максимумів, ніж крива для випадку 3 сфер. В той же час, порівнюючи i_{22} для тих же 2 та 3 сфер (Рис.7.15), бачимо, що картина розсіяння суттєво змінюється: чітко виділяються дві області значень i_{22} для 2 та 3 сфер:

- при кутах розсіяння від 60° до 90° , значення i_{22} у випадку 2 сфер перевищують відповідні для 3 сфер;
- при кутах розсіяння від 90° до 120°, значення *i*₂₂ для 3 сфер завбільшки ніж у випадку 2 сфер;

поза вищевказаних інтервалів теоретичні і експериментальні криві для *i*₂₂ суттєво не відрізняються.

Таким чином, запропонований метод дозволяє здійснити наочну параметризацію даних розсіяння на структурованих комплексах (які складають моделі гранульованих матеріалів). Порівнюючи дані стосовно i_{22} , отриманих при розсіянні на 2 та 18 сферах (Рис.7.9), чітко спостерігаємо різницю, яка відображується мінімумом кривої i_{22} для 2 сфер та частотою і висотою точок мінімумів та максимумів i_{11} для 18 сфер. Також потрібно відмітити, що структури, які складаються з 2 сфер – є фактично одновимірними, а з 18 сфер – тривимірними. В той же час, порівнюючи отримані експериментальним шляхом дані для i_{22} для 2 та 18 сфер (Рис.7.17), можна помітити їхнє наближення одна до одної, яке відбувається при кутах розсіяння від 110° до 135°.

При порівняні i_{22} отриманих при розсіянні на 2 та 9 сферах (Рис.7.16), що при кутах розсіяння від 10° до 30°, від 50° до 70°, від 115° до 140° та від 155° до 165° значення i_{22} для 2 сфер більші, ніж при розсіянні для 9 сфер, в інших інтервалах кутів цей характер поведінки змінюється. При порівнянні i_{11} отриманих для 2 та 9 сфер (Рис.7.10), подібні області при тих же кутах існують, але вони слабо виражені і частіше обмежуються точками дотику.

При порівнянні i_{22} , отриманих при розсіянні на 3 та 9 сферах (Рис.7.18), спостерігається більше значення i_{22} для 9 сфер на проміжку від 0° до 90°, та більші значення i_{22} для 3 сфер на проміжку від 90° до 180°. При порівняні i_{11} для 3 та 9 сфер (Рис.7.11) спостерігається аналогічна картина.

При порівнянні \dot{i}_{11} , отриманих експериментальним шляхом для 3 та 18 сфер (Рис.7.12), можна помітити наближення двох кривих одна до одної при кутах розсіяння від 80° до 130° . Аналогічне наближення можна спостерігати при порівнянні \dot{i}_{22} , отриманих для розсіяння на 3 та 18 сферах (Рис.7.19) при кутах розсіяння від 110° до 130° . Таким чином на основі порівняльного аналізу експериментально отриманих даних для i_{11} та i_{22} для розсіяння на 2, 3, 9 та 18 сферах, можна зробити наступні висновки:

- найбільш схожими виявилися дані i_{11} , які відповідають розсіянню на 9 та на 18 сферах(Рис. 7.7). Порівняння даних для i_{22} , отриманих експериментальним шляхом для 9 та 18 сфер (Рис.7.14), показують помітну різницю, не мають точок перетину, також прослідковується наочна симетрія кривих. Діагностика розсіяння на даних конфігураціях неефективна із застосуванням даних для i_{11} та можлива при вивченні i_{22} ;
- для \dot{l}_{11} , що відповідає 2 сферам, чітко видно мінімум при 135°, також крива має набагато менше різко виражених мінімумів та максимумів, ніж крива для 3 сфер. В той же час, порівнюючи \dot{l}_{22} для тих же 2 та 3 сфер (Рис.7.15), бачимо інакшу картину: чітко виділяються дві області характерних значень \dot{l}_{22} для 2 та 3 сфер;
- порівняння i₁₁, отриманих при розсіянні на 2 та 18 сферах (Рис.7.9), чітко проявляють різницю, яка виражається мінімумом кривої i₁₁ для 2 сфер та частотою і висотою точок мінімумів та максимумів i₁₁ для 18 сфер ;
- при порівняні \dot{l}_{22} , отриманих при розсіянні на 2 та 9 сферах (Рис.7.16), при кутах розсіяння від 10° до 30°, від 50° до 70°, від 115° до 140° та від 155° до 165° значення \dot{l}_{22} для 2 сфер більші, ніж при розсіянні для 9 сфер, в інших інтервалах. При порівнянні \dot{l}_{11} отриманих для 2 та 9 сфер (Рис.7.10), подібні області при тих же кутах існують, але вони слабко виражені.

Необхідно відмітити, що дана методика аналізу розсіяння на структурах, які складаються з 2, 3, 9 та 18 сфер, дуже зручна, для вивчення одно-, дво- та тривимірності структур. Це чітко підтверджується порівняльним аналізом i_{11} та i_{22} для вище визначених структур.

Дана методика аналізу розсіяння на структурах, які складаються з 2, 3, 9 та 18 сфер, дуже зручна, для визначення одно-, дво- та тривимірності структур, що чітко підтверджується порівняннями i_{11} та i_{22} для вище розглянутих структур. Ще раз підкреслимо, що це підтверджується наступними висновками:

- найбільш схожими виявилися дані i₁₁, які відповідають розсіянні на 9 та на 18 сферах. Це свідчить про те, що діагностика розсіювань на даних конфігураціях майже неможлива при досліджені i₁₁ та доволі актуальна при досліджені на i₂₂, для двовимірної та тривимірної структури;
- для i_{11} що відповідає 2 сферам, чітко видно мінімум при 135°, також крива має набагато менше точок різко виражених мінімумів та максимумів, ніж крива для 3 сфер. В той же час, порівнюючи i_{22} для тих же 2 та 3 сфер, бачимо інакшу картину: чітко виділяються дві області значень i_{22} для 2 та 3 сфер. Обидві структури являються одновимірними;
- порівняння i_{11} , отриманих при розсіянні на 2 та 18 сферах (рис.3.9), чітко показує різницю, яка виражається мінімумом кривої i_{11} для 2 сфер та частотою і висотою точок мінімумів та максимумів i_{11} для 18 сфер. Ці відмінності дають змогу визначити одновимірний та тривимірний характер структури комплексу;
- при порівнянні \dot{i}_{22} , отриманих при розсіянні на 2 та 9 сферах, при кутах розсіяння від 10° до 30°, від 50° до 70°, від 115° до 140° та від 155° до 165° значення \dot{i}_{22} для 2 сфер більші, ніж при розсіянні для 9 сфер, в інших проміжках. При порівнянні \dot{i}_{11} , отриманих для 2 та 9 сфер, подібні області, при тих же кутах існують, але вони слабко виражені.

7.10 Скорочена параметризація розсіяння у гранульованих матеріалах за допомогою теорії Мі

Метод матриці розсіяння часто використовується для дослідження розсіяння світла на парі сфер, що дотикаються, з фіксованою орієнтацією. При цьому показується, що інтерференційна структура в картині розсіяння

для пари сфер значно ускладнюється у порівнянні з випадком із однією монодисперсною сферою. Отримані на цьому шляху результати, зазвичай, використовуються для структурного аналізу кластерів малого розміру, сипучих матеріалів, колоїдів.

Ефективне розсіяння світла на частинках з певними розмірами відбувається, коли з ними порівнюється довжина хвилі падаючого світла. У резонансній області параметрів розмірів частинок, де наближення Релея і геометричної оптики не застосовуються, пропонуються чисельні методи для обчислення розсіяння на основі прямого розв'язання рівнянь Максвела. Підхід, що використовує матрицю розсіяння (Т-матрицю) для опису розсіяння світла, вважається апробованим (див. попередні розділи). Численні дослідження показують, що відомі кооперативні ефекти в композитах, агрегованих системах частинок, як це у випадку, наприклад, сипучих матеріалів, проявляються, у тому числі, у розсіянні світла. Цікавим питанням є вивчення впливу на параметри розсіяння світла властивостей найпростіших систем агрегованих частинок, а саме пари сфер, що дотикаються одна до одної, та припускають ефективні аналітичний та чисельний описи. Проаналізуємо схему, яка полягає у обчисленні елементів матриці розсіяння світла на системі довільно орієнтованих сфер. Отримані дані можуть бути ефективним інструментом у вивченні ефектів агрегації (компактизації) і інших ефектів V гранульованих матеріалах та матеріалах з неевклідівською симетрією.

Перетворення вектора Стокса падаючого світла

=

$$I_{inc} (I_{inc}, Q_{inc}, U_{inc}, V_{inc})$$

до аналогічного вектора, який відповідає світлу, що вже розсіяне

 $\bar{I}_{sca} (I_{sca}, Q_{sca}, U_{sca}, V_{sca})$

від несферичної довільно орієнтованої мішені описується за допомогою = матриці Мюлера Z розміру 4х4:

$${\stackrel{=}{I}}_{sca} = \frac{1}{R^2} {\stackrel{=}{Z}} {\stackrel{=}{g}} {\stackrel{=}{I}}_{inc}, \qquad (7.61)$$

де 9-кут розсіяння (тобто кут між променями до та після розсіяння на мішені), R- відстань між частинкою, що розсіює, і місцем спостереження. У (7.61) ми передбачаємо, що вектори Стокса вказані відносно площини розсіяння. Ми використовуватимемо нормалізовану

(стоксівську), матрицю розсіяння F, яка дається співвідношенням

$$\stackrel{=}{Z}(\vartheta) = \frac{4\pi}{C_{sca}} \stackrel{=}{Z}(\vartheta), \qquad (7.62)$$

де C_{sca} - диференційний переріз розсіяння. Фазова функція $F_{//}$ задовольняє умові нормування

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{4\pi} F_{//}(\vartheta) d\Omega = 1$$
(7.63)

Внаслідок симетрії частинки і випадкової орієнтації нормалізована матриця розсіяння має добре відому діагональну блочну форму :

$$\stackrel{=}{F}(\vartheta) = \begin{vmatrix} F_{11}(\vartheta) & F_{21}(\vartheta) & 0 & 0 \\ F_{21}(\vartheta) & F_{22}(\vartheta) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & F_{33}(\vartheta) & F_{34}(\vartheta) \\ 0 & 0 & -F_{34}(\vartheta) & F_{44}(\vartheta) \end{vmatrix},$$
(7.63)

таким чином, що тільки вісім елементів матриці F є ненульовими і лише шість з них незалежні. На відміну від одиночних сфер, у разі розсіяння на кластері, що складається з двох сфер, елементи матриці розсіяння залежать від кута розсіяння, а також від орієнтації. Тому можна очікувати, що інтерференційна структура елементів матриці розсіяння залежатиме від додаткових параметрів, що визначаються взаємною орієнтацією. На Рис. 7.20. наведені результати чисельного моделювання елементів матриці розсіяння

Як передбачалось, результати обчислень свідчать про критичну роль (в розсіянні електромагнітного випромінювання двокомпонентною кластерною системою сфер) кутових та орієнтаційних параметрів системи розсіювача. Зауважимо, що останнє ствердження знаходиться у порозумінні з властивостями розсіяння Мі на сферичних частинках із спотвореною поверхнею.



Рис. 7.20 Результати чисельного моделювання елементів матриці розсіяння, які було виконано із використанням формули (7.64)

ГЛАВА 8

СТЕРЕОЛОГІЧНИЙ АНАЛІЗ ЛОКАЛЬНОЇ СТРУКТУРИ БАГАТОЧАСТИНКОВИХ МІКРО-МЕХАНІЧНИХ СИСТЕМ

Стереологія - наука яка вивчає зв'язок геометричних параметрів двовимірного відображення тривимірної структури з її реальними властивостями. Ці зображення можна отримати різними способами. Основними є :

- Зображення перетинів структури
- Проекція тривимірної структури у двовимірний простір.

Основні методи стереології можна застосовувати, як у мікро- так і у Ними користуються біології, макро масштабах. медицині. y матеріалознавстві і. звичайно, у фізиці при вивченні структури різноманітних об'єктів. Аналіз зображень являє собою процес отримання візуальної інформації про параметри об'єкту. Таких параметрів досить багато. Серед них розмір елементів структури, їхня форма, положення, площа і тому подібне. Більшість з них не є прямими характеристиками тривимірної структури. Стереологічні співвідношення – це інструменти, зв'язати параметри двовимірного дозволяють відображення які характеристиками тривимірного об'єкту. Існує ряд аргументів, які обгрунтувати дозволяють використання стереологічних саме співвідношень для опису структурних властивостей об'єктів, а саме :

- Двовимірні поверхні, поверхні взаємного торкання елементів, а також об'єкти типу мембран завжди мають скінчену товщину і можуть розглядатися, як двовимірні об'єкти.

2. Криві на зображенні є наслідком взаємного перетину площин або сторін поліедрів. Прикладом таких структур може служити лінія торкання кількох гранул. Іноді зустрічаються об'єкти розміри яких настільки малі, що їх важко розглядати, як одновимірні.

3. Об'єктами у просторі з розмірністю нуль виступають точки. Це, наприклад, точки перетину контурів елементів, які в масштабах даної задачі зручно розглядати, як одновимірні.

Коли площина перетинає тривимірні елементи на зображенні ми отримуємо структури із зменшеною розмірністю простору (Рис.8.1). Об'єми відображаються у площини, площини у лінії, лінії у точки, точки і зникають, бо площина не може перетинати їх. Така площина є наочним прикладом стереологічного опису структури.

8.1 Геометричні властивості елементів структури мікромеханічних систем

Тривимірна структура має геометричні властивості, які поділяють на два типи: топологічні и метричні.

До метричних відносять об'єм, площу поверхні, довжину лінії, кривизну. В переважній більшості випадків ці величини визначаються для всієї системи і нормуються на одиницю виміру у описі структури.

Позначення, що використовуються у стереології записують за допомогою латинських літер V, S, L, та M для об'єму, площі поверхні, довжини, та кривизни, відповідно. Індекс використовують для того, щоб показати умови нормування величин (на одиницю простору з розмірністю 3(об'єм), 2(площина)). Наприклад, S_V площа поверхні в одиниці об'єму структури. Об'єм, площу поверхні, довжину лінії, кривизну можна визначити за допомогою різноманітних процедур вимірювання. Не менш важливішими є також топологічні властивості елементів структури. За допомогою топологічних характеристик можна відновити не лише верхні шари структури але й ті, що належать більш глибшим масштабам. Основними топологічними характеристиками є кількість елементів в одиниці об'єму структури і зв'язність структури.

Визначимо деякі метричні властивості структурованих систем. Для прикладу розглянемо сукупність частинок (гранул) β диспергованих у фазу α . У тривимірному випадку кожна гранула має свій власний об'єм. Якщо розглянути усю сукупність частинок, то існує певний об'ємом. розподіл частинок за Уся сукупність, В свою чергу, сумарним об'ємом. Стереологічні показники дають характеризується узагальнену оцінку такої величини. Звичайно, цю величину нормують на одиницю об'єму структури. Таким чином, ми маємо величину об'ємної фракції Vv. Розглянемо один із способів отримання цієї величини.

Класичні стереології закони являють собою сукупність співвідношень, які поєднують результати відповідних вимірювань характеристиками структури. Головне співвідношення в стереології постулює, що об'ємна фракція компоненту дорівнює його площинній фракції на зображенні $V_V = A_A$. Але не слід категорично вважати, що це завжди так. Для виконання цього постулату система повинна бути ізотропною та випадково структурованою. Отримані нормовані величини (вони позначаються за допомогою <>) відносяться до великої кількості вимірювань. Це робиться для об'єктивної оцінки параметрів структури. Наведемо деякі основні співвідношення для таких величин

Вимірювана величина	Співвідношення	Характеристика структури		
Підсумок точок	$\langle PP \rangle = VV$	Об'ємна		
		фракція		
Перетин з лінією	$\langle PL \rangle = SV/2$	густина		
		площинних		
		елементів		
Підсумок точок	$\langle PA \rangle = LV/2$	Густина		
на площині		довжин ліній		
Площа торкання	< TA > = MV/p	Повна довжина		
Фракція ліній	<LV $>$ = VV	Об'ємна		
		фракція		
Площинна	<aa>=VV</aa>	Об'ємна		
фракція		фракція		
Довжина на	$<$ LA $> = (p/4) \cdot SV$	Густина площі		
одиницю площі		поверхні		

Таблиця. 8.1 Основні стереологічні співвідношення

Довжина лінії, площа поверхні, об'єм називають метричними характеристиками тому, що вони строго залежать від розмірності простору, в якому проводиться вимір. Геометричні властивості, які не залежать від форми, розміру називають топологічними. Однією з головних топологічних характеристик є кількість незв'язних елементів структури. Нормування цієї величини на одиницю простору приводить нас до поняття густини N_V . Другою топологічною мірою є параметр зв'язності системи. Іншими словами, вона описує кількість пустот у структурі. Приклади зв'язності наведені на рисунку.



Рис.8.2 Зв'язність деяких структурованих об'єктів

Досить інформативним топологічні параметром зв'язності системи виступає інваріант Пуанкаре – Ейлера (IПЕ).

Ейлером була відкрита залежність, яка описує зв'язок між кількістю вершин граней та сторін у геометричних фігурах. Якщо число вершин скласти з числом граней фігури та відняти число сторін, то для тривимірного випадку ця величина (характеристика Пуанкаре) завжди дорівнює двом, якщо зв'язність об'єкту не порушена. Пізніше Лурьє показав, що для фігур з порушеною зв'язністю характеристика Ейлера дорівнює нулю. Вона позначається грецькою буквою χ . Зв'язок між χ та кількістю пустот у об'єкті G має вигляд

$$\chi = 2(1-G) \tag{8.1}$$

У загальному випадку інваріант Пуанкаре Ейлера (IПЕ) можна записати у наступному вигляді

$$\mathbf{Y}_{m} = \mathbf{Y}_{i=0}^{m} (-1)^{i} \mathbf{N}_{i}$$
 (8.2)

де i — розмірність простору,

n – кількість елементів з розмірністю простору 1.

Розглянемо тепер деякі методи визначення інваріантів ІПЕ

Для проведення аналізу, спочатку, на зображення наносяться координатні гратки довільного виду та масштабу (Рис.8.3).



Рис.8.3 Приклади координатних граток, які наносяться на зображення

У якості прикладу розглянемо деяку завдану фігуру та спробуємо визначити її характерні параметри, які (як буде з'ясовано нижче) у певній комбінації з деякою точністю описують обраний об'єкт (Рис.8.4).



Рис.8.4 Стереологічний аналіз об'єкту за допомогою масштабних граток

Як бачимо при накладанні на фігуру гратки, до області, що обмежена периметром фігури потрапляють елементи з різною розмірністю. Ці елементи називаються фасетами. Відповідно у двовимірному просторі маємо фасети трьох типів: з розмірністю "2" (комірки, які потрапили до периметру фігури), "1" (лінії), "0"(вузли).

Відповідно величина, яка описує топологічні властивості структури і, не залежно від шляху її визначення, залишається постійною, називається інваріантом (ІПЕ). Аналітично ІПЕ можна записати таким чином

$$\chi = N_1 - N_2 + N_3 , \qquad (8.3)$$

де χ - IПЕ;

N₁ - кількість фасетів з розмірністю "2" (комірки гратки, які потрапляють до області, обмеженої периметром фігури);

 N_2 - кількість фасетів з розмірністю "1" (лінії гратки);

N₃ - кількість фасетів з розмірністю "0" (вузли гратки);

Розглянемо систему, представлену на Рис. 8.4. із застосуванням формули для ІПЕ. Відповідні до Рис.8.4 дані розрахунків зведемо до Таблиці 2.

$N_{1} = 0$	$N_1 = 9$
$N_2 = 12$	$N_2 = 15$
$N_3 = 4$	$N_3 = 7$
$\chi = 1$	$\chi = 1$
$N_1 = 9$	$N_1 = 12$
$N_2 = 16$	$N_2 = 17$
$N_3 = 8$	$N_3 = 6$
$\chi = 1$	$\chi = 1$

Таблиця 2. Параметри ІПЕ для фігури, зображеної на Рис.8.4

Як бачимо з Табл.2 IПЕ приймає дискретні цілочисельні значення і не залежить від шляху його визначення.

Стереологічні методи дозволяють провести кількісний опис локальної структури на основі інформації, яка є візуально доступною для спостережень безпосередньо на двовимірному зображенні (перетині, у випадку тривимірної задачі) об'єкту.

Оскільки інваріант приймає цілочисельні дискретні значення, ми отримуємо можливість проведення аналогії проміж кінетикою такої системи та фазовим перетворенням (скажімо, для моделі Ізінга).

Визначення параметру порядку для систем такого типу можна зробити, наприклад, грунтуючись на феноменологічних даних, шляхом постулювання. В першому випадку параметр порядку η надається наступним виразом

$$\eta = \frac{\chi - \chi_1}{\chi_{AS} - \chi_1} \tag{8.4}$$

де χ - значення IПЕ, яке знаходиться шляхом спостережень ;

 χ_1 - деяке задане умовами експерименту значення IПЕ;

 χ_{AS} - значення, до якого асимптотично прямує інваріант.

Якщо ми постульовано визначаємо параметр порядку, виникає проблема адекватного визначення такого поняття, як «ансамбль», яке необхідне для проведення операції статистичного усереднення (позначається, як ()). З урахуванням вище зроблених зауважень, параметр порядку може бути представлений у наступному вигляді

$$\eta = \frac{\frac{1}{2} \{ \langle \chi_1 \rangle - \langle \chi_2 \rangle \}}{1 - \frac{1}{2} \{ \langle \chi_1 \rangle + \langle \chi_2 \rangle \}}$$
(8.5)

8.2 Розбиття Вороного

Перші спроби, щодо вивчення способів розбиття простору на випуклі фігури зустрічаються у роботі Декарта «Принципи філософії». В ній було запропоновано розбиття простору сонячної системи на випуклі багатокутники (див. Рис.8.5). Декарту, насправді, не вдалося розрахувати протяжність цих багатокутників. А ідея, якою він керувався при побудові цих фігур, полягала у наступному.



Рис.8.5 Розбиття Декарта

Нехай існує простір M і в ньому множина S центрів p. При цьому, кожна точка p оказує вплив на усі точки x множини M. Тоді виділений оточення центру p складається з усіх точок x для яких вплив pнайсильніший для усіх таких, що $\in S$.

Така концепція візуалізації елементів структурного аналізу плідно використовується у багатьох науках: біології та фізіології, у фізиці та хімії (комірки Вігнера - Зейтца), кристалографії (домени впливу), у метеорології полігони Тейсена. Діріхле та Вороной були першими, хто формально сформулювали механізм побудови такого розбиття. Вони розглядали вузли гратки у якості центрів, а фактор впливу інтерпретували в термінах евклідівської відстані. Отримані на цьому шляху побудови називаються розбиттям Діріхлє, або діаграм Вороного.

Розглянемо, наприклад, правила побудова та деякі властивості діаграм Вороного.

Покладемо, що S це множина з n > 3 точок - центрів $p, q, r_{...}$ на площині. Тоді, для точок $p = (p_1, p_2)$ та $x = (x_1, x_2)$ евклідівська відстань задається виразом

$$d(p, x) = \sqrt{(p_1 - x_1)^2 + (p_2 - x_2)^2}$$
(8.6)

Через pq позначимо відрізок, який поєднує p та q. Замкнуту множину A позначатимемо через \overline{A} .

Нехай для $p,q \in S$ виконується співвідношення

$$B(p,q) = \left\{ x | d(p,x) = d(q,x) \right\},$$
(8.7)

де B(p, q) - бісектриса, що є перпендикулярною до відрізку pq і проходить через його центр. Ця бісектриса розбиває площину на дві півплощини.

$$D(p,q) = \left\{ x \middle| d(p,x) < d(q,x) \right\},$$
(8.8)

які містять p D(q,p) та q.

Назвемо

$$VR(p,S) = \bigcap_{q \in S, q \neq p} D(p,q)$$
(8.9)

ділянкою (фігурою) діаграми Вороного для множини *S*. Діаграма Вороного, в свою чергу, задається виразом

$$V(S) = \bigcup_{p,q \in S, p \neq q} \overline{VR(p,S)} \cap \overline{VR(p,S)}$$
(8.10)

За визначенням, окрема фігура VR(p,S) це перетин n-1 відкритих півплощин, в яких міститься p. Тому VR(p,S) відкритий та опуклий, а кожна фігура відокремлена від сусідньої.

Спільна границя двох фігур Вороного, які відносяться до V(S) називається стороною фігури Вороного. Сторона фігури складається більше ніж з однієї точки. Кінцева точка сторони Вороного називається вершиною. Вершина належить не менше ніж трьом фігурам Вороного (див. Рис.8.6).



Рис.8.6 Діаграма Вороного для 11 точок на площині

Випадок, коли центри фігур діаграми Вороного розподілені у просторі випадково та нескорельовано, називаються діаграмами Пуасона – Вороного (ПВД). ПВД є дуже важливим інструментом для моделювання

та вивчення широкого спектру явищ у багатьох складних системах. Їх, зокрема, використовували для побудови імовірнісних граток у квантовій теорії поля при вивченні провідності та протікання у гранульованих композитах. Також, їх застосовували для моделювання росту кластерів в аморфних речовинах, вивченні мікроемульсій, поясненні природи малокутового розсіяння, для опису розподілу тіл у галактиці, дослідження структури геологічних об'єктів, а також у деяких інших сферах (біології, екології, соціології).

Звернімося тепер безпосередньо до вивчення структури, наприклад, двовимірних гранульованих систем. У цьому випадку об'єктом є дослідження розподілу площ ПВД. Адже, знаючи функцію розподілу площ ПВД, ми можемо оцінювати ступінь впорядкованості структури та можливість ущільнення системи.

На відміну від найпростішого одномірного випадку, аналітичний опис розподілу розмірів ПВД для більших розмірностей простору складає ще далеку від точного аналітичного розв'язку задачу.

Існує багато формулювань аналітичної форми функції розподілу f(y) та багато чисельних моделей спрямованих на параметризацію структури ГМ у окремих станах. Наприклад, широко використовується опис розподілу площ ПВД з наступною функцією

$$f(y) = \frac{b^a}{\Gamma(a)} y^{a-1} \exp(-by) , \qquad (8.11)$$

де *a*, *b* - деякі коефіцієнти, Г - гамма функція. Для випадку великої кількості фігур ПВД вираз може приймати дещо інший вигляд, що зумовлено комплексною статистикою. У випадку двовимірної системи функція розподілу може мати наступний вигляд

$$f(y) = \frac{343}{15} \sqrt{\frac{7}{2\pi}} y^{\frac{5}{2}} \exp(-\frac{7}{2}y)$$
(8.12)

Можна показати, що для невеликої кількості частинок (яка не перевищує приблизно 10²) розподіл ПВД у двовимірному просторі підпорядковується саме такого типу функціям і на цій підставі проаналізувати ступінь впорядкованості таких структур.

З метою дослідження міри впорядкування та параметризації структури двовимірних гранульованих систем, ми розглянемо структури зображені на Рис.8.7.



Рис.8.7 Зображення структури двовимірної гранульованої системи (світлі крапки відображають положення геометричних центрів гранулдисків)

За допомогою програмного пакету Matlab нами було проведено чисельний аналіз двовимірної гранульованої структури, а саме - визначення координат центрів дисків, та побудова для них діаграми Пуасона - Вороного. Для наведеного на Рис.8.7 зразку структури діаграма Пуасона – Вороного має вигляд



Рис .8.8 Діаграма Пуасона - Вороного для структури, яка зображена на Рис.8.7

Для отриманої ДПВ побудуємо функцію розподілу площ фігур ДПВ (наведена на Рис.8.9).

На осі X відкладено 20 позицій, які відповідають поточним площам фігур ДПВ. На вісі Y - вірогідність знайти площу, яка відповідає завданій позиції.

Отриману функцію розподілу можна апроксимувати деякими законами, які достатньо точно апроксимують експериментальні дані (див.Рис.8.10), а саме

$$f(y) = c \exp\left(-0.9 \frac{(y - 0.05)^2}{2*0.0145}\right) \quad , \tag{8.13}$$

де *С* – деяка константа, *У* – площа фігури ПДВ.

Можливою є також апроксімація у вигляді

$$f(y) = cy^{\frac{4}{5}} \exp(-\frac{4}{5}y)$$
(8.14)

Як бачимо, для малої кількості частинок розподіл ДПВ припускає наближену за аналітичною формою апроксімацію.

8.3 Структура та динаміка гранульованих матеріалів - деякі загальні зауваження

Як вже згадувалося у вступних главах, гранульовані матеріали (ГМ) є конгломераціями великої кількості дискретних твердих частинок, які можуть бути дисперговані у вакуумі чи у повітрі, або ж поєднані у конденсовану речовину. Зазвичай, проміж окремими гранулами діють лише некогезійні сили відштовхувального характеру, отже, гранульовані набувають форми, яка зумовлена граничними умовами матеріали (наприклад: геометрією об'єму, що її вміщує) та дією гравітаційного поля. Незважаючи на зовнішню простоту гранульованих матеріалів, за певних умов, можуть поводитися як подібно, так і цілком відмінно від звичайних агрегатних станів конденсованої речовини, тобто газів, рідин чи твердих ГМ, які представлені тіл. Різноманітність типів в природі використовуються у промисловості (а це пісок, гравій, грунти, будівельні, харчові, фармакологічні, фармацевтичні матеріали у гранульованій формі та багато інші), зумовлює важливість розуміння природи їх фізичних властивостей. Як не дивно (враховуючи, що історія фізичних досліджень

гранульованих матеріалів є досить довгою і починається з робіт Фарадея та Багнольда), дотепер, не існує єдиної точки зору, щодо можливості опису гранульованих матеріалів за допомогою методів статистичної фізики. B TOMV, що незважаючи на екстраординарну поведінку Справа гранульованих матеріалів, яка зовні часто виглядає, як прояв дії саме колективних ефектів у конденсованому середовищі, вони є суто механічними системами. Поведінка кожної окремої гранули скоріше має сприйматися, як наслідок руху пробної частинки у оточені тотожних сусідів. Наявність непружних зіткнень, а також відкритий характер (відносно зовнішніх збурень різної природи: періодичних, чи імпульсних) нелінійний складний. CVTTEBO характер зумовлює линаміки гранульованих систем[1-5].

Характерною рисою, яка відрізняє поведінку гранульованих матеріалів є сильна (інколи навіть аномальна) залежність параметрів, які її визначають від характеру та деталей взаємодії між окремими частинками – гранулами. Експериментальні дослідження вказують на те, що специфічні явища, які відбуваються у гранульованих матеріалах виникають завдяки непружним взаємодіям між частинками. Причому, ми маємо констатувати, що більшість енергії та кількості моменту імпульсу руху, дисипують внаслідок безпосереднього контакту між частинками, або з границями об'єму, який обмежує систему.

Незважаючи на багаторічні дослідження цієї проблеми, фізичні механізми непружної взаємодії частинок між собою, та з твердою поверхнею вивчені поки що недостатньо.

З вище наведених причин, дослідження динаміки гранульованих матеріалів, на сьогодні, головним чином пов'язані з їх моделюванням та знаходять своє обґрунтування на основі порівняння з даними числового моделювання та результатами фізичних експериментів. На цьому шляху виникає ряд проблем. По-перше, використовувані моделі оперують найчастіше різними уявленнями про фізичну природу явищ та процесів у системі, що, ускладнює побудову загального теоретичного підходу. Подруге, числове моделювання, яке є одним з головних джерел параметризації теоретичних моделей, має використовувати послідовний розрахунок непружної взаємодії, яка, навіть у випадку двох частинок, ще не до кінця вивчена. А реальні системи, окрім суттєво багаточастинкового характеру, ще характеризуються складною формою та дисперсію за розмірами гранул.

На відміну від молекулярних конденсованих систем гранульовані матеріали допускають безпосереднє вивчення локальної структури, як у мікро-, так і у мезо- та макро- масштабах. До того – ж, динаміка структурних змін, які відбуваються під впливом зовнішніх збурень, також спостерігається безпосередньо.

Це особливо наочно виглядає у випадку двовимірних систем. Але і тривимірні системи допускають прецизійне вивчення локальної структури за допомогою методу MRIT (magnetic resonance imaging technique) із використанням сучасної версії програми Visiolog.

Таким чином у випадку гранульованих систем ми маємо майже ідеальну можливість безпосередньо вивчати їхню локальну структуру та динаміку, а також, що є вкрай важливим, - взаємозв'язок між ними. Для того, щоб відповідні експериментальні спостереження були належним чином параметризовані, необхідно мати адекватне визначення локальної міри стану, а також відповідний метод вивчення кінетики структурних перетворень.

У подальшому, ми зупинимося на ряді питань, які дозволяють розвитку. Зараз же зауважимо, що певні вказати шляхи подальшого елементи підходу, які буде запропоновано можуть бути використані, як для молекулярних так і для гранульованих систем. Але методи опису, які використовують елементи статистичного аналізу у випадку гранульованих матеріалів, зокрема, вимагають додаткових умов у вигляді критеріїв існування квазістаціонарних станів. Пошук критеріїв існування стаціонарних станів у багаточастинкових системах з дисипативними взаємодіями сам по собі вже є актуальним напрямком фізики гранульованих матеріалів.

8.4 Локальна структура у фазовому просторі структурних інваріантів

Приймаючи до уваги чутливість структурних інваріантів у ГМ до масштабної ієрархії флуктуацій, ми очікуємо, що для кожної величини l існує характерний масштаб зсуву ξ_l , який відповідає вибраному відхиленню від Ψ_l^k . Флуктуації структурних інваріантів супроводжуються зменшенням ξ_l із зростанням l до границі, коли ξ можна порівняти із відповідним ξ_l . У цих умовах відповідний інваріант Ψ_l^k флуктуює настільки сильно, що система здатна переходити до інших станів із відмінною симетрією.

Якщо тривимірний домен відповідає гранецентрованій кубічній, гексагональній густій або ікосаедрічним симетріям, він має складатися з 1 центральної та 12 "зовнішніх" гранул, які розташовані на однакових відстанях від центральної. При чому, кожна з 12 частинок, які належать до

обраної ділянки, може змінювати своє положення на поверхні сфери радіусом ξ розташованої навколо центральної гранули.

Дотримуючись підходу описаному [87] введемо два параметри порядку, а саме, просторовий - R_{lm} :

$$R_{lm} = \frac{1}{N} \sum_{a} Y_{lm} \left(\Omega^{(a)} \right) \vec{r}^{(a)} \Big|^{l} .$$
(8.15)

і орієнтаційний - Q_{lm} :

$$Q_{lm} = \frac{1}{N} \sum_{a} Y_{lm} \left(\Omega^{(a)} \right).$$
(8.16)

Відповідні структурні інваріанти побудовані за допомогою (8.15), (8.16) можуть бути визначені наступним чином:

$$R_l^2 = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} |R_{lm}|^2, \qquad (8.17)$$

$$Q_l^2 = \frac{2\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} |Q_{lm}|^2 , \qquad (8.18)$$

У відсутності флуктуацій у групі гранул $(R_l = Q_l)$ структурні інваріанти характеризується величинами наведеними у Таблиці 3.

Тип гратка	Q_1	Q_2	Q_3	Q_4	Q_5	Q_6	Q_7	Q_8	Q_9	Q_{10}
Гранецен- трована кубічна гратка	0	0	0	0.1909	0	0.5745	0	0.4039	0	0.0129
Гексагона- льна густа гратка	0	0	0.0761	0.0972	0.2516	0.4848	0.3108	0.3170	0.1379	0.0102
Ікосаедрі- чна гратка	0	0	0	0	0	0.6633	0	0	0	0.3629

Таблиця 3. Структурні інваріанти $\{Q_i\}$
Аналіз даних представлених у Таблиці 3 показує, що, зокрема, інваріант Q_6 є дуже чутливим до будь - якого типу впорядкування, і таким чином є параметром, який характеризує різницю у локальній структурі доменів із різними типами симетрії.

8.5 Загальна концепція квазістатистичного підходу

З метою вивчення обмеженої множини $\{\Gamma_i\}$ обраних зразків введемо розподіл ймовірностей $\rho(\Psi)$ флуктуацій інваріантів Ψ_l у фазовому просторі. Припустимо, що наряду з $\rho(\Psi)$ існує розподіл $\rho_n(\Psi)$. При цьому $\rho_n(\Psi)$ описує стани, які можуть бути інтерпретовані, як деформовані відносно зразків з обраними симетріями. Покладемо, що

$$dW = \rho_n \left(\Psi^{(0)}; \xi \right) d\Psi^{(0)} \tag{8.19}$$

описує ймовірність знайти величину Ψ_l , яка в свою чергу задає флуктуації обраних зразків $\{\Gamma_n\}$ в об'єму $d\Psi^{(0)} = \prod_{(k)} d\Psi_k^{(0)}$ поблизу $\{\Psi_k^{(0)}\}$. Тоді множина нерівностей типу

$$\{\rho_n(\Psi)\} < const, \qquad n = 1, 2, ...$$
 (8.20)

визначає ділянки у фазовому просторі, які відповідають поточним деформованим станам, що спостерігаються.

Коли радіус ξ є малим, розподіли $\rho_1(\Psi)$ та $\rho_2(\Psi)$ не перетинаються. У такому випадку кожна точка Ψ представляє деформований, відносно деякого обраного зразка, стан позначений через $\{\Gamma_i\}$. Зауважимо, що будь – який зразок Γ_i не може одночасно відповідати іншому Γ_j тобто $(i \neq j)$. Із зростанням флуктуацій ξ вище відповідного значення $\xi > \tilde{\xi}$ два сусідні розподіли можуть перетинатися. У цьому випадку Ψ із певною ймовірністю може відповідати двом різним зразкам.

Можна ввести функцію розпізнавання зразків, яка у разі необхідності вибору між двома виділеними станами Γ_1 та Γ_2 , має визначатися за наступним правилом:

$$E = \int \min\{\rho_1(\Psi); \rho_2(\Psi)\} d\Psi$$
(8.21)

Інтегрування в (8.21) виконується за фазовим простором інваріантів, де $\rho_i(\Psi)(i=1,2)$ характеризує флуктуації відносно зразків Γ_1 та Γ_2 . Функція E, яка задовольняє (8.21), відповідає, таким чином, умові мінімізації помилки при розпізнаванні структур зразків.

Припустимо, що статистика флуктуацій інваріантів задається ефективним Гамільтоніаном $F(\Psi)$. Обраний стан $\{\Psi_k^{(0)}\}$ будемо вважати стаціонарним. Тоді густину ймовірностей флуктуацій $\rho(\Psi)$ можемо записати у наступному вигляді

$$\rho(\Psi) \propto \exp\{-F(\Psi)\}$$
(8.22)

Функція $F(\Psi)$ допускає розклад у ряд Тейлора поблизу множини станів $\{\Psi_k^{(0)}\}$, які вважаються найбільш ймовірними, а саме $F(\Psi) = F(\Psi^{(0)}) + \frac{1}{2} \sum_{k,l} \beta_{kl} \Psi_k' \Psi_l' + \frac{1}{4!} \sum_{k,l,m,n} \gamma_{klmn} \Psi_k' \Psi_l' \Psi_m' \Psi_n' + \dots$ (8.23)

Апроксимація розкладу (8.23) квадратичною формою дозволяє отримати багатовимірний розподіл для $\rho(\Psi)$ у Гаусовій формі

$$\rho_{i}\left(\Psi\right) = \prod_{(l)} \rho_{i}^{(l)}\left(\Psi_{l}\right);$$

$$\rho_{i}^{(l)}\left(\Psi_{l}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{i}^{(l)}}} \exp\left\{-\frac{\left(\Psi_{l} - \left\langle\Psi_{l}\right\rangle_{i}\right)^{2}}{2\left(\sigma_{i}^{(l)}\right)^{2}}\right\}$$
(8.24)

де $\sigma_i^{(l)}$ - середньоквадратичні відхилення, $\Psi' = \Psi - \Psi^{(0)}$, β_{kl} та γ_{klmn} є матриці, власні значення яких можуть бути отримані за допомогою експериментальних досліджень локальної структури.

ГЛАВА 9

МЕТОДИ ОПИСУ ЛОКАЛЬНОЇ СТАТИЧНОЇ СТРУКТУРИ ГРАНУЛЬОВАНИХ СИСТЕМ

Останні десятиріччя у фізиці конденсованого стану речовини характеризуються усе зростаючою інтересом до дослідження систем, структура яких організована у мезо- і навіть у макромасштабах (відносно мікромасштаба). атомно-молекулярного, Гранульовані матеріали. запорошена плазма і інші колоїдні системи-далеко не повний перелік таких об'єктів. Можливості, з одного боку, ïχ порівняно нескладного синтезування, а з іншого - розвиток досить адекватних методів аналізу структури таких систем обумовлюють прогресуючий розвиток цього напряму. Вражаюче, але структури, які спостерігаються у вищезгаданих системах характеризуються ознаками рідкої і кристалічної фаз звичайних молекулярних систем. При цьому, спостережувані зміни в структурі їх впорядкованих станів, які відбуваються під дією зовнішніх полів можуть бути класифіковані як зміни кристалічної симетрії (зрозуміло структурні параметри таких станів лежать не в мікро- а в мезо-масштабі). Найважливішим питанням, що вимагає тут свого прояснення є зв'язок між локальною структурою і глобальними властивостями таких систем. Крім того, вимагає вивчення питання про можливість використання для дослідження таких матеріалів методів структурного аналізу, розвинених у фізиці статистично заданих систем (у зв'язку з проявом ними властивостей ізоморфних статистичним об'єктам). Так, наприклад, гранульовані матеріали широко представлені в довкіллі і твердо займають другу позицію найбільш важливих компонентів, які використовуються у промисловості, після води. Їх застосування вражає як масштабом так і фармацевтичної, спектром: починаючи 3 харчової, будівельної промисловості, окремих циклів механічного синтезу в технологічних виробництвах і до геотектонічних і навіть космологічних процесів.

Гранульовані матеріали (такі, скажімо, як пудри або пісок) є конгломераціями великого числа дискретних частинок (гранул) з розмірами в сотні ангстрем і більше, які взаємодіють між собою головним чином внаслідок міжчастинкових контактів. В більшості випадків, такі контактні взаємодії нелінійні (наприклад підкоряються закону Герца). До природи ГМ відноситься також та обставина, що контактні взаємодії між гранулами дисипативні і, таким чином, навіть у стані спокою такі системи нерівноважні, і фактично знаходяться у метастабільних станах. Основним масштабом енергії в гранульованих матеріалах виступає їх енергія в зовнішньому (гравітаційному) полі, яке, разом з граничними умовами,

зрештою визначає також і форму гранульованих матеріалів. При припиненні підведення енергії ззовні кінетична енергія гранул майже перетворюється на нуль і гранульовані матеріали є миттєво не термодинамічними системами. Таким чином, незважаючи на візуальну простоту гранульованих матеріалів їх не можна віднести до простих механічних систем. Так, зокрема гранульовані матеріали, що збурюються віброприскорень зовнішніми різними полями показують складну поведінку. Таким, зокрема, є компактизація (впакування), кластеризація (сегрегація. ефект арки бразильського горіха), флюїдизация i (конвективний рух поверхневих шарів гранульованих матеріалів на похилій площині і у полі вертикальних низькочастотних вібрацій), утворення патернів і метастабільних станів, кристалізація в макро і мезомасштабах в двовимірних шарах, кросовер складають далеко неповний специфічних, часом екстраординарних перелік властивостей гранульованих матеріалів.

Можна сказати, що будучи дисипативною дискретною микромеханічною динамічною системою при створенні спеціальних умов, гранульовані матеріали проявляють властивості, як типові для агрегатних станів конденсованої матерії : газів, рідин і твердих тіл, так і принципово відмінні від них. Така багатоскладова поведінка гранульованих матеріалів робить завдання опису їх властивостей з точки зору послідовної теорії дуже складної, не дивлячись на окремі вдалі моделі, далекою від свого остаточного розв'язку.

Як наслідок, до сьогоднішнього дня промислове маніпулювання гранульованими матеріалами головним чином засноване на узагальненні емпіричних відомостей про їх поведінку в різних зовнішніх умовах.

Візьмемо скажімо просту, але досить фундаментальну властивість гранульованих матеріалів, їх компактизацию, яка полягає в зменшенні який займають частинки під дією зовнішніх механічних об'єму, віброполей. Очевидно, що вже розуміння фізичної природи однієї цієї властивості гранульованих матеріалів дозволило б, як якісно істотно поліпшити ефективність їх промислового застосування, так і зробити вагомий крок в розвитку теорії. Структурний аналіз запорошеної плазми, яка принципово відрізняється від вищеописаних гранульованих матеріалів характером міжчасткової взаємодії, дозволив встановити можливість структурного впорядкування, ізоморфного тому, який спостерігається у гранульованих матеріалах. Опис аналітичних методів дослідження і параметризації локальної структури, їх глобальної організації і переходів між ними і складає мету цієї глави.

9.1 Експериментально спостережувані структури в гранульованих матеріалах і запорошеній плазмі

Дослідження гранульованих матеріалів, збурених зовнішніми полями віброприскорень дозволили встановити наявність в їх структурі станів, з точки зору характеру розподілу частинок (гранул) в них типових для регулярних агрегатних станів: газів рідин і твердих тел.

Переходи між станами з різним характером локального впорядкування здійснюються за різними сценаріями, які істотно залежать від початкового (точніше від початкової компактизації). Так, скажімо, у разі тривимірних гранульованих матеріалах в інтервалі значень ступеню компактизації η від так званої випадково розрідженої (RLP) до випадково-щільної (RCP).

На Рис.9.1 представлені фотографії структур із експериментів по спостереженню структуроутворення в двовимірній запорошеній плазмі і гранульованих матеріалах

a)



Рис.9.1 Фото зображення типових структур, які спостерігаються у: а) запорошеної плазми, б) у двовимірних гранульованих матеріалах

9.2 Модель Фермі-Дірака розподілу щільності

Запишемо вираз для функціоналу вільної енергії системи. в так званих, «інгерентних» станах у такому вигляді

$$F(\rho) = E(\rho) - \beta^{-1} S(\rho) , \qquad (9.1)$$

де енергія системи в гравітаційному полі надається виразом

$$E(\rho) = mg \int_{(V)} z\rho(\vec{r}) d\vec{r} , \qquad (9.2)$$

 $\beta = \frac{1}{k_E T}$ (T- конфігураційна температура тут *Z* - координата, *«configurational temperature»)*

В якості виразу для $S(\rho)$ візьмемо ентропію граткового газу

$$S(\rho) = -\int_{(V)} d\hat{r} \left\{ \frac{\rho}{\rho_0} \ln \frac{\rho}{\rho_0} + \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0} \right) \ln \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0} \right) \right\}, \qquad (9.3)$$

де ρ_0 - максимально можлива щільність системи.

Розрахунок варіаційної похідної $\frac{\delta F(\rho)}{\delta \rho}$, породжує рівноважний профіль щільності у формі розподілу подібного до функції розподілу Фермі-Дірака

$$\rho(\vec{r}) = \frac{\rho_0}{1 + c e^{mg\rho_0\beta z}} \tag{9.4}$$

Зазвичай, для кількісного визначення руйнації кристалічного впорядкування у твердих тілах використовується, так званий, критерій Ліндемана. Останній розраховується, як середньоквадратичний зсув центру мас частинки

$$\gamma_m = \sqrt{\left\langle \left(r - \left\langle r \right\rangle \right)^2 \right\rangle} / L , \qquad (9.5)$$

де *r* – радіус вектор частинки, *L* –відстань проміж частинками сусідами у симетризованому стані.

На Рис.9.2 наведені результати спостережень квазідвовимірних гранульованих систем в термінах залежності критерію Ліндемана від параметру компактизації.

Бачимо, що залежність параметра Ліндемана від впакувальної фракції у середньому (якісно) відповідає поведінці функції Фермі-Дірака до значень пакувальної фракції 0,71.

Приймаючи, що параметр Ліндемана є пропорційний до середньоквадратичної флуктуації густини, та порівнюючи данні експериментальних спостережень із теоретичною кривою, яка випливає із розглянутої моделі, бачимо задовільне якісне співпадання результатів.

На Рис.9.3 наведені результати обробки даних експериментальних спостережень, за структурними перебудовами у запорошеній плазмі в термінах функції $\rho(\vec{r})$.

9.3 Оболонкова модель

Розглянемо, наприклад, наведене на Рис. 9.4 двовимірне впакування твердих дисків на площині (на рисунку чорними точками показані положення центрів дисків). Виділимо частинку, яку будемо вважати такою, що умовно належить до першої оболонки, та окреслимо навколо неї групу найближчих частинок-сусідів. Спробуємо застосувати конструкцію такої оболонкової моделі до класифікації структур, які спостерігаються у досліджуваних матеріалах



Рис.9.4 Оболонкова модель у застосуванні до найпростіших типів локальної структури, які спостерігаються у двовимірних системах (тверді диски на площині)

Можна бачити, що у випадку наведеної на Рис. 9.4б) типу впорядкованої структури навколо центральної частинки у найближчому околі знаходиться 6 частинок-сусідів, які, так би мовити, формують другу уявну оболонку. У наступній, 3-й оболонці, у впорядкованому стані вже знаходиться 12 частинок. На шляху такого оболонкового підходу, структура, яка зображена на Рис.9.46) може бути класифікована як (1:6:12), а числа у дужках показують ступені заповнення відповідних Зауважимо, що розглянута структура кристалічно оболонок. £ впорядкованою. Структура, зображена на Рис. 9.4а), відповідно, має бути класифікована, як (1;7;13). Таким чином у другій і у третій оболонці (внаслідок руйнації симетрії впорядкування) спостерігаються флуктуації чисел заповнення. Можемо констатувати, що структурні зміни типу впорядкування-розупорядкування, та переходи між впорядкованими станами із різною симетрією у розташуванні частинок можуть бути описані в термінах моделі оболонок за допомогою аналізу флуктуацій заповнення. При цьому повністю заповненим оболонкам чисел відповідають найбільш симетризовані стани.

9.4 Визначення структурних параметрів

Обмежимо наш аналіз шляхом розгляду дискретної множини точок $\{G_i\} \equiv \{\vec{r}^{(\alpha)}\}\ (\alpha = 0, 1, 2, ...)$ із координатами \vec{r}_{α} . Ці координати є координатами центрів частинок (гранул), що оточують центральну частинку, яка у свою чергу, знаходиться в початку обраної системи координат.

Будемо вважати, що геометричну структуру $\{G_{\alpha}\}$ можна визначити шляхом її порівняння 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. Зауважимо, що, наприклад, у випадку типових рідин вибір $\{\Gamma_{\alpha}\}$ є суттєво обмеженим внаслідок недостатньо повної інформації про їхню локальну структуру. Щодо гранульованих матеріалів, 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.

Відповідний формальний опис локальної структури можна здійснити шляхом введення відповідного локального параметра впорядкування[6].

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.

У подальшому, ми будемо вважати, що флуктуації $\{\vec{r}_{\alpha}\}$, які у випадку гранульованих матеріалів 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 $\{\vec{r}_{\alpha}\}$.

Введемо до розгляду орієнтаційний та трансляційний параметри порядку. Визначимо орієнтаційний параметр порядку у такому вигляді

$$g_{s_1s_2} = \frac{1}{N_{s_1}} \cdot \frac{1}{N_{s_2}} \sum_{js_1} \sum_{js_2} \exp(iN_{s_1}\varphi_{js_1}) \exp(-iN_{s_2}\varphi_{js_2}), \qquad (9.6)$$

де N_s - кількість частинок у S-й оболонці, φ_{js} - відносний кут між частинками оболонки і частинкою, навколо якої будується оболонка.

Трансляційний параметр порядку запишемо таким чином

$$u_2^2 = \frac{1}{N} \sum_{i} \left[\left\langle \left| \vec{r}_i \right|^2 \right\rangle - \left\langle \left| \vec{r}_i \right| \right\rangle^2 \right], \qquad (9.7)$$

де N - кількість частинок у оболонці;

 $\langle |\vec{r}_i|^2 \rangle$ - середнє значення від квадрата відстані проміж центральною частинкою и сусідніми частинками в оболонці;

 $\langle |\vec{r}_i| \rangle^2$ - квадрат середньої відстані проміж центральною частинкою і частинками, які знаходяться у оболонці для якої проводиться вимір.

Класифікація типів локального впорядкування в термінах параметрів (9.6), (9.7) детально проведена у [88].

На Рис.9.5 приведено результати розрахунку параметрів (9.6) та (9.7) для запорошеної плазми, а на Рис.9.6, відповідно, для квазідвовимірних гранульованих матеріалів.

Аналіз отриманих даних дозволяє зробити висновок про існування у двовимірних гранульованих системах певного стану, який є подібним до анізотропного флюїду[88].

9.5 Топологічні параметри локальної структури ГМ

Опис локальної структури гранульованих матеріалів в термінах фундаментальної топологічної характеристики, інваріанту Пуанкаре – Ейлера (ІПЕ) є ефективним інструментом структурного аналізу систем, які можна представити у вигляді топологічних об'єктів (або їх сукупності) із різним ступенем зв'язності. Розглянемо стисло основні поняття та техніку опису структури систем в термінах топологічних величин.

Спочатку, надамо визначення інваріанту ІПЕ у загальному випадку

$$\chi_m = \sum_{i=0}^m (-1)^m N_i \quad , \tag{9.8}$$

де i – розмірність простору;

N – кількість елементів з розмірністю простору i.

На випадок порушення зв'язності об'єкту (а саме такі випадки є притаманними ГМ), ІПЕ визначимо за формулою Лур'є. Зв'язок між χ та кількістю пор (зв'язністю) у об'єкті G має вигляд

$$\chi = 2(1 - G) \tag{9.9}$$

Проведемо граткові координатні лінії крізь центри частинок. Таким чином, система буде виглядати, як сукупність полігонів (доменів), вершини яких є центрами частинок (Рис. 9.7).

У випадку коли частинки є дисками, утворені запропонованим чином полігони мають різні значення параметру зв'язності, тобто, різну кількість пор в середині полігону (власне кажучи однією з причин зміни параметру зв'язності є зміна типу впорядкування).

Виділимо найбільш ймовірні стани, яким відповідають різні типи полігонів, які зустрічаються у системі та застосуємо модифіковану Лур'є формулу для розрахунку IПЕ.



Рис. 9.7 Зображення (та величини) ІПЕ для деяких типів локального впорядкування

Розбиття на локальні домени можна провести, наприклад, за допомогою методу Вороного.

У загальному випадку інваріант Пуанкаре - Ейлера приймає значення, що залежать від зв'язності [1;2(1-G)]. Також, зручно використовувати таку характеристику, як питомий інваріант Пуанкаре -Ейлера. Таким чином, запропонована топологічна міра може бути використана з метою класифікації спостережуваних у багаточастинкових системах структур локального впорядкування та побудови відповідних кінетичних рівнянь, які описують структурні перебудови.

ГЛАВА 10

СТАЦІОНАРНІ СТАНИ У 1D СИСТЕМІ НЕПРУЖНИХ ЧАСТИНОК

В даній главі ми детально проаналізуємо одновимірну відкриту систему непружних частинок та знайдемо умови існування асимптотичних квазістаціонарних станів. Будуть, також, досліджений вплив початкових та зовнішніх умов на структуру таких станів та переходи проміж ними. Теоретичні та чисельні розрахунки порівнюються з даними проведеного безпосередньо фізичного експерименту. Метою є з'ясування на простих прикладах можливості застосування методів статистичної фізики до вивчення відкритих систем (зокрема – гранульованих матеріалів) поблизу виявлених квазістаціонарних станів.

На протязі близько двох останніх десятиліть помітно зріс інтерес наукової спільноти до вивчення складних відкритих систем, в яких внаслідок дисипації енергії відбуваються суттєво нелінійні динамічні процеси. До переліку таких систем, безумовно відносяться і, так звані, ГМ. ГМ складаються з великої кількості частинок (гранул), що мають складну морфологію поверхні та дисперсію розмірів. Взаємодія між гранулами відбувається тільки завдяки зіткненням, які носять непружний характер. Тобто ГМ є прикладом відкритої системи, для якої зокрема не виконується закон збереження енергії.

Інтерес до досліджень ГМ пов'язаний з перспективою їх практичних застосувань у багатьох галузях виробництва. Вони, також, у величезних кількостях розповсюджені у довкіллі. У якості прикладу достатньо лише згадати звичайний пісок.

ГМ виявляють незвичайні властивості, які відрізняють їх від властивостей типових рідин, газів та твердих тіл. Такі, наприклад як явища непружного колапсу та ниткоподібної кластеризації, компактизації та сегрегації, флюїдізація типу лавиноподібного спливання тонкого шару ГМ, ефекти бразильського горіху та арки (останній веде до насичення тиску під стовпом ГМ у вертикальних контейнерах), анізотропної кластерізації та утворення патернів (дефектів), та інші [1-13].

Складність процесів, що відбуваються у гранульованих матеріалах, спонукає до їх попередніх досліджень за допомогою вивчення динаміки простих модельних систем, де частинки взаємодіють між собою непружно, а дисипація енергії компенсується за рахунок її підведення з боку зовнішніх границь. Безпосередні фізичні експерименти з ГМ вказують на можливість існування в них асимптотичних стаціонарних станів, що у свою чергу відкриває можливості застосувань до їх вивчення методами статистичної механіки.

Як у випадку вивчення структури, так у разі досліджень динаміки гранульованих матеріалів роль, яку відіграють контакти проміж частинками-гранулами – є провідною. Так, скажімо, напруги у статичному гранульованому середовищі, або деформації хвилі у разі їх динамічної поведінки, головним чином, відбуваються та розвиваються саме у межах міжчастинкових контактів, або ж контактів проміж частинками та підкладинкою. До того треба було б додати, що дисипативні втрати енергії, які є однією з головних прикмет ГМ, також, відбуваються майже, виключно, в зонах інтерфейсів.

У визначеному сенсі одновимірні моделі дисипативних систем можуть сприяти кращому порозумінню фізичних процесів у таких – інтерфейсних структурах і мають сприйматися, як перший крок до вивчення реалістичних та безумовно більш складних тривимірних систем.

Нижче розглядається проста, але досить наочна модель системи непружних частинок, яка виявляє деякі цікаві особливості динаміки ГМ. Головною метою є безпосередня демонстрація існування в таких системах асимптотичних квазістаціонарних станів та вивчення критеріїв їх існування, а також властивостей, шляхом порівняння теоретичних результатів з даними чисельних та безпосередніх фізичних експериментів.

10.1 Постульовані стаціонарні стани у вертикальній 1D системі непружних частинок у гравітаційному полі (теоретичне визначення)

Знову, як і у 3.5, розглянемо систему N безструктурних частинок однакової маси, які розташовані вертикально у вакуумі (за відсутності тертя), в полі сил тяжіння \vec{g} . Втрати енергії, при бінарних зіткненнях між частинками, що компенсуються внаслідок відбиття нижньої частинки від горизонтально розташованої "гарячої" твердої підкладинки, яка виступає джерелом термалізації системи. У випадку, коли таке відбиття відбувається абсолютно пружно, система фактично є замкненою. Навпаки, коли гаряча підкладинка здібна надавати до системи довільну (але визначену) енергію – система є відкритою.

Модель, яка пропонується, сконструйована таким чином, що при довільних швидкостях зіткнення падаючої частинки із підкладинкою, в момент відбиття швидкість завжди має одне й те саме стале значення (покладемо ω_0). Взагалі кажучи, ω є величиною яка розподілена із деякою вагою $\Phi(\omega)$. В нашій моделі початкова швидкість після

зіткнення з підкладинкою підпорядковується розподілу у вигляді дельтафункції Дирака $\Phi(\omega) = \delta(\omega - \omega_0)$.

В наслідок бінарного характеру зіткнень частинок їх швидкості перед зіткненням (ω_1, ω_2) та після зіткнення (ω_1', ω_2') задовольняють наступним співвідношенням

$$\omega_1' = \omega_1 - \frac{1+\alpha}{2}\omega_{12}, \quad \omega_2' = \omega_2 + \frac{1+\alpha}{2}\omega_{12}, \quad (10.1)$$

де $\omega_{12} = \omega_1 - \omega_2$; α - коефіцієнт непружних втрат (коли $\alpha = 1$, то зіткнення є абсолютно пружними, а повна кінетична енергія зберігається; навпаки, коли $\alpha < 1$, то мають місце дисипативні втрати енергії).

У постульованому стаціонарному стані періоди руху частинок між зіткненнями дорівнюють деякій сталій $T_{\hbox{N}}$.

Зважаючи на рівноприскорений характер руху частинок між зіткненнями отримуємо для періоду коливань T_N наступний вираз [5]:

$$T_{N} = \frac{2\omega_{0}}{g} \cdot \left[N + \frac{(1-\alpha)}{3(1+\alpha)} (N-1)(2N-1) \right]^{-1}.$$
 (10.2)

Таким чином, як витікає із (10.2) період коливального руху N -ї частинки у стаціонарному стані в побудованій модельній системі залежить від усіх параметрів моделі ω_0 , g і α , та досягає максимальних, або мінімальних значень, відповідно, у границях абсолютно пружних ($\alpha = 1$), та непружних ($\alpha = 0$) зіткнень.

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

$$L = \frac{gT^2}{8} \left(1 + 4\sum_{i=1}^{N-1} \frac{A}{(1+A)^2} (1 + 2(N-i)) \right),$$
 (10.3)

де $A = \frac{(1+2\alpha) - (1-\alpha)(N-i)}{(2+\alpha) + (1-\alpha)(N-i)}$ - відношення часу протягом якого

і-та частинка летить угору, до часу на протязі якого, вона рухається у зворотному напрямку.

Кожний окремий додаток у (10.3) завдає розмір відповідної області у якій періодично рухається і-та частинка. Умова, за якою хоча б один з цих додатків стає менше нуля - визначає критерій зруйнування стаціонарного стану:

$$\alpha \ge \alpha_{c} = \frac{N-2}{N+1}.$$
(10.4)

З співвідношення (10.4) для критичного значення коефіцієнта непружних втрат α_c витікає, що для систем, 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.

Таким чином, в моделі з сильно непружними зіткненнями асимптотичний стан не може існувати. Визначений стаціонарний стан при достатньо великих N, тобто, у випадку великих за розмірами систем, чи систем з багатьох частинок не існує.

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).

10.2 Стаціонарні стани у 1D горизонтальній системі N непружних частинок

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 у розділі 10.1 розташовуючи її у горизонтальному рівні. Подальший аналіз, як і у попередньому випадку, проведемо шляхом постулювання існування у такій системі стаціонарних станів.

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

$$L = \sum_{i=1}^{N} x_{i}, \qquad (10.5)$$

де L – розмір всієї системи.

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.(10.1)):

$$v_i^l = v_1^r - (i-1)v_{12} + (i-2)\frac{1+\alpha}{2}v_{12},$$
 (10.6)

$$\mathbf{v}_{i}^{r} = \mathbf{v}_{1}^{r} - (i-1)\frac{\alpha - 1}{2}\mathbf{v}_{12}, \qquad (10.7)$$

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:

$$x_{i} = \frac{v_{i}^{r} v_{i}^{l}}{v_{i}^{l} - v_{i}^{r}} T$$
(10.8)

Період T стаціонарного руху, який задовольняє умовам із (10.5), (10.8) дорівнює

$$T = \frac{L}{\sum_{i=1}^{N} \frac{v_{i}^{r} v_{i}^{l}}{v_{i}^{l} - v_{i}^{r}}}.$$
(10.9)

Таким чином, як витікає з формул (10.9), (10.6) та (10.7), 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 визначений 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 (6):

$$v_{12} = \frac{2v_{1N}}{(1-\alpha)N + 2\alpha},$$
 (10.10)

 $_{\mathcal{A}\mathbf{e}} \mathbf{v}_{1\mathbf{N}} = \mathbf{v}_1^r - \mathbf{v}_{\mathbf{N}}^l.$

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 пружною. Тобто, її відбиття від границі є дзеркальними і не призводять до втрат енергії: $V_N^r = -V_N^l$. Приймаючи до уваги (10.7), можна виразити V_N^l через V_{12} . А саме, користуючись (10.10), отримуємо:

$$v_{12} = \frac{4v_1^r}{2(1-\alpha)N + (3\alpha - 1)}.$$
 (10.11)

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.

Розглянемо тепер такий різновид руху в системі, яка складається із двох частинок, в якій 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. 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 пружного 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 (10.1). Позначаємо отримані частинками швидкості після 2-го зіткнення

через $V_{2,i}$ та $W_{2,i}$ (тут *i* - індекс завдає номер відповідного двоударного режиму).

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 (10.1). Позначимо ці швидкості через $V_{1,i+1}$, $W_{1,i+1}$. На цьому кроці визначений двоударний 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 (10.1) отримуємо наступні співвідношення

$$w_1 = v_0 \frac{1+\alpha}{2}, \quad v_1 = v_0 \frac{1-\alpha}{2},$$

 $v_2 = -\alpha v_0, \quad w_2 = 0.$
(10.12)

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

$$x_1 = x_2 = L$$
. 10.13)

Із отриманих співвідношень (10.12) та (10.13) можна бачити, що у постульованому тут стані системи частинка 1 рухається по всьому об'єму системи, а частинка 2 начебто причіплюється до "холодної" стінки. Таким чином остання ефективно стає непружною у сенсі її взаємодії із частинкою 1.

Період Т визначеного типу руху в системі знаходимо у наступному вигляді

$$T = \left(1 + \frac{1}{\alpha}\right) \frac{L}{v_0}.$$
 (10.14)

Підстановка $\alpha = 0$ до (10.14) природно призводить до руху із нескінченним періодом. Останній результат можна пояснити злипанням частинок між собою внаслідок абсолютно непружного зіткнення, після чого частинка 1 вже ніколи не повернеться до "гарячої" стінки (за винятком повернення її у зліпленому з частинкою 2 стані).

Співвідношення (10.14) можна отримати використавши формули (10.5)-(10.11). 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.

10.3 Нестаціонарні (проміжні) стани у горизонтальній 1D системі непружних частинок

Розглянемо тепер питання про стійкість стаціонарного стану на прикладі одновимірної системи, яка складається з двох непружних 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 пружно, 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 меншою швидкістю V1, а друга частинка змінює напрям руху на зворотній і починає рухатися швидше за першу частинку з швидкістю W1;

- коли друга частинка досягне границі системи L, вона відбивається і рухається назустріч перший частинці з швидкістю — W1;

- 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 V₂ перевищує швидкість другої частинки;

- далі вищеописаний сценарій повторюється.

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

Приймаючи до уваги закони непружного зіткнення частинок, знаходимо відповідні швидкості частинок:

$$w_{2,k+p} = \alpha^{p} w_{2,k}, \qquad v_{2,k+p} = -\alpha v_{0}$$
 (10.15)

$$v_{1,k+p} = \frac{1-\alpha}{2} v_0 + \frac{1+\alpha}{2} w_{2,k} \alpha^{p-1}, \qquad (10.16)$$

$$w_{1,k+p} = \frac{1+\alpha}{2} v_0 + \frac{1-\alpha}{2} w_{2,k} \alpha^{p-1}.$$
 (10.17)

3 (10.15)-(10.17) витікає, що

$$\lim_{p \to \infty} w_{2,k+p} = 0, \qquad v_{2,k+p} = \text{const}$$
(10.18)

$$\lim_{p \to \infty} v_{1,k+p} = \frac{1-\alpha}{2} v_0, \quad \lim_{p \to \infty} w_{1,k+p} = \frac{1+\alpha}{2} v_0 \quad (10.19)$$

Таким чином виявляється, що вищеописана система після серії зіткнень переходить саме до стаціонарного режиму руху. Узагальнюючи (10.15)-(10.19) отримуємо для швидкості наступне рекурентне співвідношення

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}+\mathbf{p}} = \alpha^{\mathbf{p}} \left(\mathbf{v}_{\mathbf{k}} - \mathbf{v}_{\infty} \right) + \mathbf{v}_{\infty}, \tag{10.20}$$

де $\,V_{\,\infty}\,$ - швидкість частинки яка відповідає її руху у стаціонарному стані.

Нехай ^X р - 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 р у наступному вигляді

$$x_{p} = x_{0} \sum_{k=1}^{p} B_{k-1} + L \sum_{l=1}^{p} A_{l-1} \prod_{m=1}^{p-l} B_{l+m-1}, \qquad (10.21)$$

де X₀ - координата першого зіткнення частинок 1 і 2; L – розмір системи;

$$A_{j} = \frac{2v_{1,j}}{v_{0} - w_{2,j}}, \qquad B_{j} = \frac{v_{1,j} - w_{1,j}}{w_{2,j} - v_{0}}. \qquad (10.22)$$

Користуючись формулами (10.21) і (10.22) можна показати, що $\lim_{p\to\infty} x_p = L$. На підставі (10.18) і (10.19), та (10.21), (10.22) можна зробити висновок, що розглянута система асимптотично прямує до стаціонарного стану з періодом, який визначається формулою (10.14). На Рис.10.1 наведені данні чисельного моделювання поведінки розглянутої системи непружних частинок, які наочно підтверджують вище зроблені висновки.

10.4 Рух центру мас в горизонтальній 1D системі 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 швидкість k-ї частинки

дорівнює
$$v_k = v_0 \left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{k-1}$$
, після другого зіткнення -

 $v_k = v_0 \left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{\kappa-1} \frac{1-\alpha}{2}$ (тут k – номер 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 зменшується майже до нуля $v_k \approx 0$. У такому випадку легко уявити характер руху частинок після відбиття N-ї частинки від абсолютно пружної границі системи. А саме, після першого зіткнення маємо:

$$u_{k} = -v_{0} \left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{(N-1)+(N-k)}$$

Після другого зіткнення :

x 7

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

(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

$$V_{c} = V_{in} + V_{out}$$
, $z_{e} = V_{in} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} v_{k}$, $V_{out} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} u_{k}$

Відповідно
$$V_{c}$$
 має наступний вигляд:
 $V_{c} = \frac{2v_{0}}{N(1-\alpha)} \left[1 - \left(\frac{3+\alpha}{2}\right) \left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{N-1} + \left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{2N-1} \right] =$
 $= \frac{2v_{0}}{N(1-\alpha)} \left[1 - \sqrt{\frac{(3+\alpha)^{2}}{8(1+\alpha)}} \cdot 2\sqrt{\frac{1+\alpha}{2}} \left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{N-1} + \left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{2N-1} \right]$
(10.23)

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

$$V_{c} \approx \frac{2v_{0}}{N(1-\alpha)} \left[1 - \left(\frac{1+\alpha}{2}\right)^{N-\frac{1}{2}} \right]^{2} \approx \frac{2v_{0}}{N(1-\alpha)} \left[1 - \exp\left(-\frac{1-\alpha}{2} \cdot \left(N-\frac{1}{2}\right)\right) \right]^{2}$$

$$(10.24)$$

Зауважимо, що $V_c \geq 0$. Тобто центр мас рухається у бік "холодної" границі. Насправді центр мас не може постійно рухатися у одному напрямку тому, що система має обмежений розмір. 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 .

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

10.5 Фізичний експеримент

Фізичний експеримент, який було спрямовано на спостереження теоретично прогнозованої 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 Н · с.

Змінюючи частоти збудження (від 1 Гц до 14 Гц) вдалось виявити наявність розшарування системи на підсистеми з якісно різним характером руху. Спочатку 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.10.3).

З огляду на попередній теоретичний розгляд модельних систем цей спостережуваний тип руху підтверджує непружних частинок 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). 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. Зокрема, для частинок, які 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 співвідноситься стаціонарному стані руху добре теоретично 3 розрахованим значенням L (див. (10.3)).

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



Рис.10.3. 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

Таким чином, одновимірна модель системи непружних частинок, за найпростіших способів надходження енергії зовні шляхом VMOB дзеркального відбиття, або відбиття із завданим розподілом швидкостей, припускає можливість існування стаціонарних станів у вигляді простого періодичного руху кожної окремої частинки в межах відповідних різних за довжиною інтервалів. Перехід системи до визначеного стану здійснюється асимптотично за різних способів надходження енергії зовні через границі системи. Виявлено існування критерію переходу, який виникає внаслідок умови балансу процесів термалізації та дисипації. Встановлений критерій (див. (4)) мультіпликативно залежить від початкового розміру системи та абсолютної величини коефіцієнта непружних втрат енергії. Відповідні безпосередні фізичні експерименти по спостереженню стаціонарних станів у вертикальній колонці металевих кульок, яка є модельною реалізацією відкритої дисипативної системи, яка збуджується внаслідок імпульсного збудження підкладинки, свідчать про існування прогнозованих теоретично квазістаціонарних станів, до яких асимптотично прямує 1D відкрита система непружних частинок.

ГЛАВА 11

КІНЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ КОГЕРЕНТНИХ СТАНІВ У ЗБУДЖЕНИХ ГРАНУЛЬОВАНИХ СИСТЕМАХ

Сучасні дослідження в галузі фізики м'якої матерії в значній мірі спрямовані структури фізичних властивостей на вивчення та гранульованих систем, які широко представлені у довкіллі та вражають сценаріїв їхньої поведінки, які суттєво відрізняються різноманіттям (навіть, якщо зовні нагадують один одного) від властивостей типових агрегатних станів конденсованої речовини. На шляху вивчення ГМ було встановлено, що вони перебувають у природному метастабільному стані, вони можуть переходити до квазістаціонарних станів, у околі яких є можливість застосування для опису таких а-термічних систем елементів теорії твердого тіла та статистичної механіки. Такі стани можуть бути реалізовані асимптотично, шляхом релаксації параметрів, які характеризують структуру або тактових структурних перетворень, що у локальному та мезо-масштабах, які у певному сенсі є відбуваються ізоморфними до фазових перетворень. Пошук та дослідження таких станів є актуальною задачею ще й з тієї причини, що вони показують унікальні можливості скажімо в сенсі транспортування електромагнітної чи звукової енергії (наприклад, фазовий перехід до стану фотонного кристалу). Метою цієї глави є опис та висвітлення характерних рис стиснутих (jamming) та асимптотично-стаціонарних станів у багаточастинкових мікро-механічних системах ГМ, яке здійснюється шляхом теоретичного та чисельного моделювання на прикладі двовимірної горизонтальної системи твердих пружних дисків та одновимірної, або знову ж таки двовимірної системи непружних кульок у гравітаційному полі. Ми розглянемо, також, чисельні алгоритми моделювання різних типів локальної та доменної структури 2D систем пружних дисків та проаналізуємо шляхи їхньої параметризації у термінах стереологічних побудов Вороного. Асимптотичноквазістаціонарні стани будуть досліджені шляхом постулювання (крок, який базується на даних безпосереднього фізичного експерименту) таких станів у системі непружних кульок, які стикаються та перебувають у стані фізичної кінетики. Зіткнення ми будемо характеризувати постійним коефіцієнтом непружних втрат енергії. На цьому шляху, як показано у Главі 10, теоретично передбачено ефект існування асимптотичноквазістаціонарних станів у вертикальному гранульованому ланцюжку, які розшарування системи на сегменти з балістично виглядають, як періодичним рухом в їхніх межах (існування якого підтверджено експериментально). Ми запропонуємо теоретичний підхід до опису явищ левітації гранульованих шарів, збуджених горизонтальною підкладинкою (аналог ефекту Лейденфроста), який базується на кінематичних співвідношеннях ньютонівської механіки.

Незважаючи на обмеження розмірності в розглянутих моделях метастабільних станів мікромеханічних багаточастинкових систем, отримані висновки вносять практичний внесок до порозуміння фізичних механізмів, о специфічних явищах, що спостерігаються в ГМ та дозволяють розвивати елементну базу для їхніх практичних застосувань, наприклад, в задачах гранульованої фотоніки.

Має сенс також підкреслити, що у подальшому дослідженні ГМ розглядаються, як суто мікро-механічні дисипативні системи, а відповідні теоретичні та чисельні підходи до їх опису використовують саме адаптований механічний підхід, що має, окрім всього, методичне значення і доповнює навчальну базу класичної механіки.

У попередній главі були визначені дерміновані квазі-стаціонарні вертикальному 1D гранульованому ланцюгу у вигляді стани V розшарування на інтервали з періодичним балістичним (кінематичним) рухом. У відомій роботі [89] була розглянута динаміка 1D системи безструктурних непружних частинок під впливом асиметричних збурень. Зокрема, було показано формування густого кластеру частинок біля холодної стінки. Порівнюючи отримані нами результати, з вище вказаними даними, ми доходимо до висновку, що у побудованій моделі з герцівськими контактами роль холодної стінки відіграє відкрита (верхня) границя системи. Незважаючи на відмінності двох моделей (наявність гравітації та постійного контакту між частинками), можна бачити і спільні риси поведінки 1D систем під впливом зовнішніх збурень. У термінах середнього квадрату швидкості частинки (аналог температури), в обох випадках, спостерігається асимптотичне розшарування системи на «гарячу» та «холодну» частини і система, таким чином, демонструє суттєво неергодичну поведінку.

11.1 Конгломерації дискретних частинок у полі віброприскорення (загальна проблема ФПУ)

Нелінійна динаміка відіграє виключно важливу роль у сучасному природознавстві і є однією з галузей науки, що бурхливо розвивається.

Надзвичайно важливими є найпростіші «класичні» моделі, однією з яких виступає запропонована Фермі в 50-х роках минулого століття найпростіша нелінійна модель, що є аналогом одновимірного кристалу, в якій враховується взаємодія тільки між сусідніми частинками. Ця модель, яка отримала назву ланцюга Фермі-Пасти-Улама (ФПУ), чисельно вивчалась на першому потужному комп'ютері MANIAC-1 в Лос-Аламосській національній лабораторії (США) що привело до відкриття цілого ряду важливих особливостей поведінки нелінійних систем, виявленню нових динамічних об'єктів.

Розв'язок проблеми Фермі-Пасти - Улама було отримано на початку 60-х років Крускалом і Забускі [20], які довели, що система Фермі-Пасти-Улама являє собою різницевий аналог рівняння Кортевега-де Вріза і, що рівнорозподілу енергії перешкоджає, так званий, солітон (термін, запропонований Забузькі), який переносить енергію з однієї групи мод в іншу. Ця проблема являється однією з перших спроб упевнитися у справедливості впровадження законів статичної механіки до нелінійної системи з достатньо великим числом ступенів свободи N. У перших роботах це число досягало 64 і, звичайно, було достатньо великим. Не дивлячись на значний проміжок часу, котрий пройшов з тих пір, і на значне число публікацій, присвячених проблемі ФПУ, деякі питання, пов'язані з нею, залишаються не повністю з'ясованими та заслуговують більш детального вивчення.

11.2 Аналог ефекту Лейденфросту у гранульованих матеріалах

Сипучі матеріали мають вражаючу різноманітність властивостей. В залежності від умов, вони можуть поводити себе, як тверді, рідкі чи газоподібні речовини. До речі, завдяки непружним зіткненням між окремими частинками, в них можуть спостерігатися навіть явища, неможливі в звичайній речовині, наприклад, непружний колапс. Однак ізза тої самої непружності теоретичний опис сипучих матеріалів виявляється дуже не простою задачею (огляд окремих теоретичних підходів можна знайти у попередніх главах). Наприклад, лише нещодавно було теоретично доведено, а потім і експериментально показано, що в ГМ може спостерігатися аналог плівкового кипіння, яке носить назву явища Лейденфроста. Явище це полягає в тому, що крапля води, потрапивши на розпечену поверхню, не лежить безпосередньо на поверхні, а ніби парить над нею за рахунок прошарку гарячої пари (див. Рис. 1.10).

Капля води на розпеченій плиті «левітує» за рахунок парового прошарку (див. верхній фрагмент на Рис.1.10). Аналогічне явище, як було нещодавно з'ясовано, має місце і для гранульованих(сипучих) матеріалів. У випадку рідини, крапля на розпеченій підкладинці левітує у гравітаційному полі, дія якого компенсується за рахунок градієнту тиску у тонкому прошарку пару, який розділяє краплю і нагріту поверхню. Схожий ефект, як вже згадувалося, був нещодавно відкритий для ГМ у вібруючому ректангулярному контейнері. Причому, у випадку ГМ над поверхнею левітував прошарок, структура якого могла змінюватися у відповідності до зміни параметрів впливу (наприклад, спостерігалися за структурною класифікацією газова фаза, рідина та кристал у мезо- та макро-масштабах).

В експериментальних дослідженнях контейнер заповнений однаковими піщинками поміщували в поле віброприскорень. Відповідна динаміка частинок при цьому фіксувалось на швидкісну відеокамеру. У результаті виявилось, що дійсно, за певних умов, макроскопічно великий «кристалічний кластер» щільно упакованої сипучої речовини підіймався і утримувався на висоті прошарком, який складався з швидких частинок, які хаотично рухалися (аналог «гарячої пари»).

Була також запропонована гідродинамічна модель, яка дозволила здійснити параметризацію спостережень. Нажаль гідродинамічний підхід не можна визнати адекватним фізичній природі ГМ, які є мікромеханічними і до того ж дисипативними системами [89]. Тому нижче ми запропонуємо механічний (кінематичний) підхід до фізичного обгрунтування спостережуваного явища, яке зовні ізоморфно до відомого ефекту Лейденфроста у нагрітих рідинах.

11.3 Кінематична теорія левітації шарів гранульованих матеріалів над вібруючою підкладинкою (аналог ефекту Лейденфроста)

3 експериментальних спостережень витікає, що якщо вібруюча поверхня покрита шаром частинок-гранул, то при певній частоті ці частинки , як би, "зависають" над поверхнею на певній висоті. У загальному випадку вони не синхронно підстрибуватимуть на різні висоти і ефекту левітуючого шару не буде спостерігатися. Проте, як показано, при деяких частотах і амплітудах коливань вібруючої поверхні предмети підстрибуватимуть, у середньому, на одну й ту ж постійну висоту. Оскільки максимальний час такі частинки проводять в найвищій точці траєкторії, то для ока здається, що предмети, як би, "зависли" (левітують над поверхнею) в цьому положенні. Вищеописане явище отримало назву аналогу ефекту Лейденфроста (завдяки своєму прототипові, який спостерігається у шарі рідини над поверхнею, яка швидко підігрівається). Уявимо собі наступний вібруючій "експеримент". підкладинці розмістимо Для цього на гранульований шар. Неважко здогадатися, що коливання підкладинки викликає відповідне коливання гранульованого шару, а значить всі предмети будуть підстрибувати. Розглянемо умови, при яких всі частинки підстрибуватимуть на однакову висоту. Це, наприклад, буде відбуватися коли удар абсолютно пружний, а час польоту кратний цілому числу напівперіодів періодичного руху підкладинки і предмети торкаються поверхні в її найвищій (або нижчої) точці. Зауважуючи, що висота підскоку дається співвідношенням

$$H = a + g(nT)^{2/8}$$
(11.1)

і вибираючи T = 1 Гц - період коливань, a = 2,54см - амплітуду коливань поверхні, n –ціле число, g = 981 см/с²отримуємо кінематичний сценарій, скетч якого зображений на Рис.11.1.

В цьому випадку частинки, як би, відскакують від нерухомої поверхні (її швидкість у момент удару дорівнює нулю). У випадку коли n=1 відповідний рух зображено на Рис.11.2a (синя крива зображує траєкторію руху самої частинки, а червона - поверхні). Висота підскоку H=49,3 см відповідає положенню точки рівноваги.

Тепер припустимо, що частинка падає на підкладинку з висоти, трохи меншої, ніж положення точки рівноваги. Припустимо, наприклад, з висоти H=94,74 см. Інтуїтивно відчуваємо, що мають початися коливання (висоти підскоку) відносно положення рівноваги. При такій ситуації частинки вже не "зависатимуть" на певній висоті. Якщо на поверхню кинути жменю різних частинок, то над поверхнею спостерігатиметься їхній хаотичний розподіл (Рис.11.26). Зауважимо, що абсолютно пружний удар не відбувається у реальності. Тому, в загалі кажучи, потрібно врахувати втрати енергії, які відбуваються при зіткненнях частинок проміж собою та з підкладинкою. Динаміка системи, у якій внаслідок зіткнень та тертя відбуваються втрати енергії (ми вибрали інтенсивність дисипативних втрат на рівні 10% при кожному ударі) відображена на Рис.11.3. Та ж сама система, у якій амплітуда коливань поверхні збільшена в 10 разів (до 25,4см) показує динаміку, яка зображена на Рис.11.4.



Рис. 11.4 Динаміка системи зображеної на Рис.11.4 у якій амплітуда коливань поверхні збільшена у 10 разів (до 25,4 см)



Рис. 11.5 Ефект "зависання" гранул над поверхнею (левітації)

Збільшимо тепер коефіцієнт втрати енергії при ударі, а частинку вкинемо з висоти 492,76 см. Елементарні розрахунки показують, що, якщо при відскоку тіло втрачало більше 30% енергії, то буде відбуватися стабілізація амплітуди підскоку на рівні трохи меншому, ніж 451,61 см. Причому, при виборі різних значень коефіцієнтів відбиття (скажімо, послідовно: 0,6 ; 0,5 ; 0,3 ; 0,1) підскоки показують тенденцію насичення до стану руху з одним і тим ж періодом. Саме це явище зовні буде спостерігатися, як "зависання" гранул над поверхнею (див. Рис. 11.5).

Треба зауважити, що проміжок часу, протягом якого триває удар, зазвичай вельми малий (на практиці ~10⁻⁴-10⁻⁵ с), а сили (ударні або миттєві), що розвиваються на ділянках контакту співудару тіл, сягають досить великих границь. На протязі удару вони змінюються в широких

межах і досягають значень, при яких середні величини тиску (напруг) на площах контакту мають порядок сотень атмосфер. Зважаючи на малий час удару, імпульсами всіх неударних сил, таких, наприклад, як сила тяжіння, а також переміщеннями точок тіла під час удару, зазвичай, нехтують. Процес зіткнення двох тіл можна розділити на дві фази: 1) зближення дотичних тіл і 2) їх розбіжність. У першій фазі кінетична енергія тіл переходить в енергію деформації, а в другій фазі, накопичена енергія деформації повністю або частково переходить в кінетичну енергію тіл. Для абсолютно пружних тіл механічна енергія до кінця удару відновлюється повністю і швидкість їх зближення до удару рівна відносній швидкості розбіжності. Навпаки, удар абсолютно непружних тіл закінчився б на 1-й фазі і два тіла рухалися б разом (з нульовою відносною швидкістю). При ударі реальних тіл механічна енергія до кінця удару відновлюється лише частково внаслідок втрат на утворення залишкових деформацій, нагрівання тіл. Коефіцієнт відновлення D₀, який контролює відносні зміни імпульсу, вважається залежним головним чином від фізичних властивостей матеріалів тіл і може бути визначений, як

$$D_0 = |v_{01} - v_{02}| / |v_{11} - v_{12}|, \qquad (11.2)$$

де V_{01} , V_{02} - швидкості тіл до зіткнення, а V_{11} , V_{12} - їх швидкості після зіткнення.

Якщо одне з тіл - масивний відбивач, швидкість якого V не змінюється в результаті удару, то

$$D_0 = (V - v) / (u - v), \qquad (11.3)$$

де V - швидкість відбивача, \mathcal{U} - швидкість налітаючого тіла, V - швидкість тіла після віддзеркалення.

Можна також ввести коефіцієнт відносних втрат енергії (який вже розглядувався раніше) при відбитті від нерухомого масивного тіла

$$k = W / W_0 \tag{11.4}$$

де W_0 - кінетична енергія налітаючого тіла, W - кінетична енергія після удару в системі відліку, пов'язаної з масивним відбивачем. При цьому K = Ck.

Коефіцієнт D визначається експериментально, наприклад, вимірюванням висоти h, на яку відскакує кулька, що вільно падає на горизонтальну плиту, з висоти H. В цьому випадку k = h/H. За даними дослідів, при зіткненні тіл з дерева k = 0,25, із сталі k = 0,30, із кістяної речовини k=0,79, зі скла k=0,88. У граничних випадках при абсолютно пружному ударі k=1, а при абсолютно непружному - $D_0 = 0$. Знаючи швидкість U, з якою тіло налітає на відбивач, і коефіцієнт D, в тому випадку, коли він сам рухається із швидкістю V, неважко знайти швидкість тіла V після зіткнення за формулою:

$$V = v(1+Ck) + Ck = vu(1+K) + uK$$
(11.5)

Уявимо, скажімо, що кулька, яка рухається із швидкістю u = 5 м/c, налітає на масивну стінку, що у свою чергу рухається назустріч із швидкістю v = 2 м/с $D_0 = W/W_0 = 0,64$. Швидкість, з якою вона відскакує від стінки дорівнює V = v(1 + Ck) + Ck = 7,6. Ту ж саму відповідь можна одержати користуючись визначенням коефіцієнту відновлення $D_0 = (V - v)/(u - v) = 0,8$ м/с. Для визначення часу удару, ударних сил і викликаних ними в тілах напруг і деформацій необхідно врахувати механічні властивості матеріалів тіл і зміни цих властивостей під час удару, а також характер початкових і граничних умов. Рішення проблеми істотно ускладнюється не тільки через труднощі чисто математичного характеру, але і зважаючи на відсутність достатньо повних даних про параметри, що визначають поведінку матеріалів тіл при ударних навантаженнях, що примушує робити при розрахунках ряд суттєвих спрощень (що, кінець кінцем, призводить до обмежень у застосуваннях отриманих оцінок та результатів).

Найбільш розроблена теорія удару абсолютно пружних тіл, в якій передбачається, що тіла за час удару підкоряються законам пружної деформації і в них не з'являється залишкових деформацій. Деформація, що виникла в місці контакту, розповсюджується в такому тілі у вигляді пружних хвиль з швидкістю, залежною від фізичних властивостей матеріалу. Якщо час проходження цих хвиль через все тіло суттєво менше часу удару, то впливом пружних коливань можна нехтувати і вважати характер контактних взаємодій при ударі таким же, як в статичному стані. На таких припущеннях грунтується контактна теорія удару Герця. Якщо ж час проходження пружних хвиль через тіло наближається до часу удару, то для розрахунків користуються хвильовою теорією удару. Вивчення удару не повністю пружних тіл - задача значно складніша і вимагає обліку, як пружних, так і пластичних властивостей матеріалів.

Розглянемо далі деякі теоретичні аргументи на користь більш адекватної конструкції задачі. В зв'язку із сталою висотою підскоку при

кожному ударі дисипативні втрати енергії компенсуються підкачкою енергії з боку вібруючої поверхні. При цьому для того, щоб реалізувалися умови левітації швидкість u, з якою тіло падає на поверхню, повинна дорівнювати швидкості V, з якою тіло відбивається від поверхні.

$$u = v(1+ck) + uCk \tag{11.6}$$

Звідки отримуємо,

$$v = u(1 - ck) / (1 + \sqrt{k})$$
(11.7)

Інша умова, що накладається на швидкість відскоку U в постульованому стаціонарному стані, виходить з того, що час польоту t = 2u/g повинен бути цілим кратним періоду коливання підкладинки T_n . Тому маємо

$$u = gTn/2 \tag{11.8}$$

Таким чином, в стаціонарному стані швидкість поверхні у момент удару має дорівнювати

$$\mathbf{v} = (gTn/2)(1-ck)/(1+Ck) \tag{11.9}$$

Коливання поверхні підкладинки заздалегідь відбуваються по гармонійному закону з амплітудою А і кутовою частотою Ф.

$$x = A\cos(\omega T) \tag{11.10}$$

Диференціюючи за часом, знайдемо швидкість площини V:

$$x = -A\omega\sin(\omega\tau) \tag{11.11}$$

Прирівнюючи швидкість з (11.9) і (11.11), отримуємо критерій існування стаціонарних станів, в яких спостерігається явище левітації:

$$(gT_{2n}/4rk)(1-ck)/(1+Ck) \le 1$$
(11.12)

Наприклад, при T=1c i k=0,5 перший стаціонарний стан (з n=1) може існувати, якщо амплітуда коливань A > 13,3 см.
Висота підскоку в стаціонарному стані Н дорівнює сумі висоти підскоку від поверхні $g(nT)^{2/8}$ і власне зсуву поверхні у вертикальному напрямі X в момент удару. З (11.9) -(11.11) знаходимо

$$H = g(nT)^{2/8} + (A_2 - (gT_{2n} / 4p)^2 (1 - ck)^2 / (1 + Ck)^2)^{1/2}$$
(11.13)

Якщо T = 1 з, A = 25,4 см і k = 0,5, то H = 144 см. Зауважимо, що залежний від D_0 фрагмент дає зменшення висоти підскоку лише на 2%. Чисельні обчислення вищеописаної системи здійснювалися за умов наступних значень параметрів: T = 1 з, A = 25,4 см, $k = 0,52\pm0,01$. Частинка радіусу 25,4см падала на площину з висоти 508см. Коливання площини відбувалося по синусоїдальному закону. В результаті висота підскоку встановлювалася рівною 170,17 \pm 7,62см, що з урахуванням радіусу кульки співпадає з теоретичними оцінками!

Доречно, також, проаналізувати стійкість розглянутих стаціонарних станів. Так, зокрема, якщо удар тіла о площину не абсолютно пружний, то в стаціонарному стані відскік відбувається трохи раніше, ніж площина досягає максимальної висоти і продовжує рухається вгору з деякою швидкістю. Введемо фазу коливань за допомогою співвідношення $\delta = \omega T$.

Розглянемо стійкість системи відносно малих варіацій ∂ . Для цього припустимо, що удар відбувається саме в той момент часу, коли фаза дорівнює ∂_0 . Знайдемо, фазу коливань δ_1 у момент наступного удару. Для цього виразимо час польоту τ через швидкість площини у момент удару $v = -A \omega \sin \alpha$ і швидкість кульки до удару u = gT/2.

$$\tau = (2/g)(-Aw(1+Ck)\sin\alpha_0 + gTCk/2) . \qquad (11.14)$$

Якщо помножити (11.14) на w знаходимо фазу і, відповідно, $\sigma \delta = \delta_1 - \delta_2$ - зсув фази при двох послідовних ударах.

$$\sigma \delta = -2(Aw2/g)(1+Ck)\sin\alpha_0 - 2p(1-ck)$$
(11.15)

З (11.9) і (11.11) витікає, що в стаціонарному стані

$$-A\omega\sin\delta_{CT} = (gT/2)(1-ck)/(1+ck)$$
(11.16)

Підставляючи (11.16) в (11.15), бачимо, що в стаціонарному стані $y\partial =0$, тобто удари відбуваються при одній і тій же фазі коливань пластини. Якщо ж початкова фаза $\delta 0$ трохи зміщена відносно свого стаціонарного значення, то $\sigma\delta$ буде відмінна від нуля. Покладемо, що удари при кожному відскоку відбуваються пружно, так, що коефіцієнт D близький до одиниці. Тоді зсув фази малий і внесок sin δ_0 в (5.15) можна піддати процедурі ліанеризації. На цьому шляху знаходимо

$$\sigma \delta = -2(Aw2/g)(1+Ck)\sigma \delta_{\theta} \qquad (11.17)$$

Підскоки будуть відповідати умові стійкості, коли $\sigma \delta < 2 \mid Dd_0 \mid$

При більшому $\Delta\delta$ система буде якби "самозбуджуватися". При зміні критерію у формі нерівності на відповідне рівняння, відбуватимуться незгасаючі осциляції висоти підскоку. Отже, критерій стійкості має виглядати наступним чином:

$$A < gT_2 / 4p_2 (1 + ck) \tag{11.18}$$

Наприклад, при T = 1с і k = 0,5 для того, щоб висота підскоку не змінювалася (була стійкою) треба, щоб виконувалася умова: A < 13,8см. У комп'ютерному ж експерименті вдавалося одержувати стійку картину підскоків і при A = 25см. Справа в тому, що при одержанні (11.14) з (11.16) було зроблено припущення про мале відхилення фази від її значення, що відповідає стаціонарному стану і, відповідно, враховано лише перший лінійний член у розкладі синуса в ряд. Якщо умова (11.18) не виконується, то $\sigma \delta_0$ зростатиме і за рахунок нелінійності синусоїди буде досягнуто значення $\sigma \delta_0$, коли $|\sigma \delta| < 2 | Dd_0 |$. Це означає, що в експерименті ми маємо спостерігати невеликі флуктуації висоти підскоку відносно стаціонарного значення. Саме цей сценарій і було встановлено шляхом чисельного експерименту.

Рис. 11.6. приведені результати комп'ютерного моделювання Ha динаміки відскоків кульки радіусу 25,4 см від поверхні, що вібрує по гармонійному закону з частотою 1 Гц. k = 0.51. Синя крива відповідає випадку коли амплітуді вібрації площини дорівнює A=25,4см, а червона крива, відповідно, значенню А=20,32 см. Ми спостерігаємо, що для A = 25.4підскоку стабілізувалася на рівні см висота близько 170,18±7.62см, проте час від часу відбувалися підскоки приблизно в 152,4см і 177,8см. При зменшенні амплітуди коливань площини до 8 дюймів стійкість системи помітно підвищувалася і висота підскоку досить точно стабілізувалася на рівні 163,83 ± 0,25см.

Практичний інтерес складає питання про використовування знайденого ефекту (левітації та модуляції фази) і зокрема визначення умов, за яких можна здійснити сепарацію частинок та їхні розподіли із завданою симетрією локального впорядкування.

11.4 Моделювання стисненого стану у гранульованому середовищі

Стисненим станом гранульованої системи (jamming state) ми будемо називати такий стан, при переході до якого суттєво зменшується свобода руху окремих гранул у межах певної області (домену).

Перехід системи у стиснений стан є зовні ізоморфним з переходом до нового агрегатного стану з іншими макроскопічними властивостями.

Самому стисненому стану можуть відповідати різні за симетрією конфігурації упаковок. Так було показано що, стиснений стан системи, у конфігураційному просторі, в реальному просторі залежить від багатьох факторів: характеру взаємодії між сферами, сили тяжіння, сил тертя у системі, тощо.

Класичні експерименти з моделювання упаковок у монодисперсних системах, як правило, проводяться шляхом внесення сферичних кульок у визначений модельний простір установки, з наступною параметризацією конфігурації цих тіл. Так у випадку двовимірних моделей мова йде про фотографування, для тривимірних, використовують магнітно-резонансну томографію.

Для збільшення щільності упаковок, що досягаються у таких моделях застосовуються різні методи, найбільш розповсюдженим з яких є коливальне збудження за допомогою, зовнішніх вібропристріїв.

У якості модельних частинок у реальному експерименті можуть бути використані, наприклад, кульки здобуті з кулькових підшипників.

Важливо відзначити, що у подібних експериментах велику роль відіграють такі фактори, як параметри вібрації, матеріальні співвідношення, жорсткість кульок, їх форма, тощо, а також властивості границь, що обмежують систему, геометрія, форма поверхні.

Всі вищеперераховані фактори впливу відіграють суттєву роль у процесі формування стисненого стану. Сама ця залежність від умов проведення експерименту і виступає недоліком такого підходу, а також призводить до необхідності у обережному переносі даних комп'ютерного моделювання на реальні процеси. Зауважимо, що як правило, комп'ютерні моделі мають справу з дуже ідеалізованими випадками.

З другого боку в тому полягає цінність комп'ютерних моделей, а саме - через ідеалізацію їх конструкції з'являється можливість виявити окремі принципові закономірності, що у інших випадках можуть бути невизначеними завдяки впливу багатьох альтернативних факторів. Обидва підходи підтверджують, що при деякій щільності система досягає певного стану при якому суттєво змінюються механічні властивості системи і зменшується ступінь рухомості в межах деякого обмеженого домену.

Цей стан, який називається стисненим (jammed), характеризується максимальним для даних умов, координаційним числом для кожної гранули.

До недавнього часу використовувався термін випадкова щільна упаковка (RCP). Проблема цієї термінології полягає у тому, що терміни випадкова і щільна не дуже сумісні, тобто чим більша щільність упаковки, тим менше у ній випадковості у розміщенні гранул.

Для більш точного опису стисненого стану конкретної системи гранул слід було б ввести два параметри: координаційний та трансляційний.

Моделювання упаковок структур у 2D системі твердих дисків ми проводили користуючись стандартним програмним забезпеченням. Доводка програми проводилося у середовищі GNU/Linux для процесору з архітектурою AMD64. (Використовувались дистрибутиви Slackware64 13.37 і Slackware64 14.1) Для збирання використовувався компілятор GCC версії 4.5.2.

Перед зборкою було проведене відповідне налаштування коду, що помітно зменшило кількість вимірів у просторі, в якому працював алгоритм програми (з 3 вимірного до 2 вимірного). Такий крок, між іншим, відповідав фізичному змісту задачі.

Вхідні дані задавались через адаптований файл з вхідними даними. (Зразок був наведений у дистрибутиві програми).

Автоматизація роботи програми проводилась за допомогою скрипта написаного на мові командного інтерпретатору bash. Стисло скетч скрипту (інфраструктури) виглядав як:

1. Модифікація вхідних даних у файлі.

2. Коректний старт програми.

3. Переміщення напрацьованих файлів даних по відповідних каталогах.

4. Кількість частинок доведена до 1000.

5. Для отримання монодисперсної системи, в конфігураційному файлі фракція бі-дисперсності була налаштована на 0.

6. Максимальна ступінь пакування змінювалась у межах 0,6 – 0,84 за лінійним законом, з кроком 0,01.

Подальша обробка результатів проводилась за допомогою бібліотеки voro++ . Що дозволяє здійснити ефективну параметризацію багатокутників Вороного.

Для спряження бібліотеки з наявними даними була розроблена програма на мові C++, яка на основі попередньо отриманих даних, здійснювала зображення багатокутників Вороного та їх параметрів.

Результати були представлені у вигляді побудов типу «паркету» Вороного. Параметри побудов підтвердили припущення про характер переходу моделі до стисненого (jamming) стану. А також, припущення, що з підвищенням щільності упаковки структура моделі асимптотично прямує до кристалоподібної границі.

Подібний сценарій відтворюється, як за допомогою математичного моделювання, так і уході фізичних експериментів.

Побудова «паркету» Вороного добре відображає, структуру модельної системи. При підвищенні щільності розташування дисків, спостерігається симетрізація системи, що відбивається і на побудованих для неї багатокутниках Вороного. Морфологія таких побудов дає уявлення про характер структур, що характеризують стани моделі, а також характер конфігурацій елементів системи.

При малих щільностях системи (коефіцієнт упаковки менше 0,65) диски розташовані хаотично. На Рис.11.7 зображена відповідна побудові «паркету» Вороного. Видно складну морфологію «паркету» багатокутників, їх несиметричність, нерегулярний характер розподілу.



Рис.11.7 Хаотичний паркет багатокутників Вороного при малих щільностях системи

При збільшенні щільності спочатку виникають окремі кластери, в яких має місце формування координаційної структури дисків першої оболонки навкруги центральної частинки.

При подальшому збільшенні щільності спостерігається ріст кластерів, що мають псевдокристалічну структуру, і зазвичай гексагональну симетрію. Але не весь простір виявляється зайнятий такими

утвореннями. Спостерігаємо об'єми зайняті ділянками системи, що мають менший коефіцієнт упаковки, ніж всередині кластерів. Це можуть бути, як ділянки з хаотично розташованими елементами, так і ділянки з симетричним, але альтернативним розміщенням дисків (див.Рис.11.8).



Рис.11.8 Кластери змішані з ділянками з альтернативним за симетрією розміщенням елементів

При більших значеннях упаковок (при коефіцієнтах упаковки у межах 0,8 – 0,84) система представляє собою один, або декілька кластерів з повністю впорядкованою структурою. У будь якому випадку структура може мати дефекти у вигляді локальних зон з альтернативною за симетрією структурою розміщення дисків (див. Рис.11.9)



Рис.11.9 Майже суцільний симетричний кластер(ближче до правого краю спостерігається ділянка з альтернативною симетрією)

Таким чином дійдемо до висновку про можливість ефективної параметризації локальної структури гранульованих систем за допомогою спільного застосування геометричних та чисельних методів аналізу.

ГЛАВА 12

ЩОДО СТАТИСТИЧНОГО ОПИСУ НАДЛИШКОВИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ БАГАТОЧАСТИНКОВИХ ПРОСТИХ БІКОМПОНЕТНИХ СИСТЕМ

Метою цього розділу є аналіз окремих задач фізики гранульованого стану матерії. Як приклад, вибрано теоретичне дослідження надлишкових майже ідеальних бікомпонентних багаточастинкових властивостей сумішей. На цьому шляху запропоновано два альтернативних підходи обидва із використанням теорії Кірквуда-Баффа (КБ), яка спирається на визначення статистичних кореляційних інтегралів. Перший - використовує Перкуса-Йєвіка для функцій розподілу. апроксимацію другому У запропоновано аналітичну модель парної функції розподілу (ПФР) в термінах узагальнених функцій [46,81]. Порівняння результатів першого підходу із даними експериментального визначення стисливості (за допомогою вимірів швидкості звука) та феноменологічних співвідношень свідчить про неоднозначність зв'язку між структурним фактором розсіяння на нульові кути та ізотермічною стисливістю. Ця неоднозначність усувається шляхом введення поправки, яка, як показано, суттєво залежить від компонентного складу і має статистичне обґрунтування. Використання аналітичної моделі ПФР дозволило отримати вирази для кореляційних інтегралів. Виявилося, що модельні вирази КБІ, внаслідок особливостей моделі ПФР, демонструють суттєву залежність від ефектів компактизації.

Дослідження фізичних властивостей навіть простих бікомпонентних сумішей за допомогою методів статистичної механіки є однією із традиційно актуальних і водночас складних задач фізики розчинів. Загальновідомим теоретичним підходом у цій області, який має статистичне обґрунтування є теорія Кірквуда-Баффа [75-77]. В ній визначається зв'язок між флуктуаціями числа частинок і похідними від термодинамічних величин. Флуктуації числа частинок у свою чергу виражаються через інтеграли від парних функцій розподілу. Таким чином, підхід [75-77] дозволяє записати основні термодинамічні величини в термінах кореляційних інтегралів.

Як відомо, у структурі бікомпонентних рідких розчинів, в певному інтервалі концентрацій компонентів, спостерігаються гетерогенні стани метастабільні утворення. Подібний сценарій описується, наприклад, в роботах присвячених експериментальному визначенню інтегралів Кірквуда-Баффа (КБІ) G, які є інтегралами від парних радіальних функцій розподілу. На цьому шляху встановлено, що важливу роль для опису властивостей бімодальних статистичних систем відіграє саме врахування міжчастинкових кореляцій. У низці експериментальних досліджень [77-80,82,83], в яких використовувалися різні методи дослідження (розсіяння рентгенівського випромінювання, нейтронів на малі кути, термодинамічні виміри), які супроводжуються чисельним моделюванням, знайшла підтвердження наявність суттєвих флуктуацій густини в бікомпонентних розчинах. Однак виявилося, що значення КБІ отримані за допомогою різної експериментальної техніки демонструють помітну розбіжність даних.

На шляху практичного застосування КБІ традиційно мають місце складнощі, пов'язані із обмеженим характером теоретичної інформації про парціальні кореляційні фактори, які саме визначають функціонал КБ.

Застосування теорії КБ продемонструвало наявність розбіжностей статистичному визначенні надлишкової ізотермічної стисливості. при Визначену неоднозначність, яка зобов'язана своїм походженням варіаціям при визначенні функцій розподілу і відповідних кореляційних інтегралів запропоновано усунути за допомогою введення спеціальної поправки, визначення якої базується на застосуванні, як положень статистичної так і результатах експериментальних вимірів. В якості механіки. феноменологічної бази були використані дані експериментальних вимірів швидкості звука та зв'язки цієї величини із ізотермічною стисливістю. Запропонований підхід дозволив здійснити адекватний аналітичний опис експериментальних даних по вимірюванню надлишкової стисливості бінарного розчину CCl₄/CHCl₃.

Використання запропонованої у [46,81] моделі ΠΦΡ. яка формулюється в термінах узагальнених функцій, дозволило отримати вирази відповідних кореляційних інтегралів, які містять інформацію про фракції компонентів дозволяють враховувати пакувальні та феноменологічну інформацію про стереологічні параметри локальної структури. Отримані співвідношення дозволяють проаналізувати вплив морфології локальної структури на надлишкові властивості бінарних систем, а також розповсюдити з урахуванням вказаної обставини застосування запропонованого модельного підходу до опису відповідних параметрів бімодальних систем із локальною структурою розвиненою у мезо- та макромасштабах, зокрема - ГМ та деяких інших об'єктів м'якої матерії.

12.1 Метод Кірквуда-Баффа та його застосування до визначення ізотермічної стисливості

Слідуючи [75-77,], розглянемо бінарну багаточастинкову систему, яка складається з частинок сортів α та β та займає характеристичний

об'єм V. Введемо, як зазвичай, одно- та двочастинкові функції $\rho_{\alpha}^{(1)}(r_1)$ та $\rho_{\alpha\beta}^{(2)}(r_1, r_2)$, які завдаються за допомогою інтегрального перетворення :

$$\int_{V} dr_1 \int_{V} dr_2 \Big[\rho_{\alpha\beta}^{(2)}(r_1, r_2) - \rho_{\alpha}^{(1)}(r_1) \Big] = \langle N_{\alpha} N_{\beta} \rangle - \langle N_{\alpha} \rangle \langle N_{\beta} \rangle - \delta_{\alpha\beta} \langle N_{\alpha} \rangle , (12.1)$$

де N_{α} - кількість частинок сорту α в об'ємі V; $\langle \rangle$ - показує усереднення за ансамблем конфігурацій, а $\delta_{\alpha\beta}$ - дельта символ Кронекера.

Перетворення (12.1) веде до визначення парціальних величин

$$\rho_{\alpha}^{(1)}(r) = c_{\alpha} \quad \text{Ta} \quad \rho_{\alpha\beta}^{(2)}(r_{1}, r_{2}) = c_{\alpha}c_{\beta}g_{\alpha\beta}(r_{12}), \quad (12.2)$$

де $c_{\alpha} = \frac{\langle N_{\alpha} \rangle}{V}$ - є густина частинок, а $g_{\alpha\beta}(r_{12})$ - є так звана парціальна парна функція розподілу.

Відповідно кореляційний інтеграл КБ визначається за допомогою співвідношення

$$G_{\alpha\beta}^{V} = \frac{1}{V} \iint_{VV} \left(g_{\alpha\beta}(r_{12}) - 1 \right) dr_{1} dr_{2} = V \frac{\left\langle N_{\alpha} N_{\beta} \right\rangle - \left\langle N_{\alpha} \right\rangle \left\langle N_{\beta} \right\rangle}{\left\langle N_{\alpha} \right\rangle \left\langle N_{\beta} \right\rangle} - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{C_{\alpha}}$$
(12.3)

Як відомо, у великому канонічному ансамблі Гіббса флуктуації числа частинок пов'язані із термодинамічними параметрами системи. Це дозволяє визначити зв'язок кореляційних інтегралів та термодинамічних величин (макроскопічних властивостей).

Зауважимо, що складність використання підходу КБ полягає у обмеженості інформації про парціальні функції розподілу. Як для простих рідин, так і для випадку складних багаточастинкових систем визначеним джерелом отримання інформації про функції розподілу виступають експериментальні виміри статичних структурних факторів $S_{\alpha\beta}(\vec{k})$ із самоузгодженим розв'язком зворотної задачі по реконструкції самої функції розподілу.

Вираз для структурного фактору $S_{\alpha\beta}(\vec{k})$ суміші має вигляд

$$S_{\alpha\beta}(\vec{k}) = x_{\alpha}\delta_{\alpha\beta} + x_{\alpha}x_{\beta}\rho\tilde{h}_{\alpha\beta}(\vec{k}), \qquad (12.4)$$

де x_{α}, x_{β} - парціальні концентрації компонент розчину, $\widetilde{h}_{\alpha\beta}(\vec{k})$ - Фур'є образ функції

$$h_{\alpha\beta}(r) = g_{\alpha\beta}(r) - 1 \tag{12.5}$$

Зв'язок між ізотермічною стисливістю бікомпонентної суміші та структурними факторами надається виразом [75-77,7]

$$\rho k_b T \stackrel{(1,2)}{\beta} = \frac{S_{11}(0)S_{22}(0) - S_{12}^2(0)}{x^2 S_{22}(0) - x(1-x)S_{12}(0) + (1-x)^2 S_{11}(0)}, \quad (12.6)$$

який носить назву формули Кірквуда-Баффа, де парціальні структурні фактори монодисперсних фаз пов'язані із відповідними ізотермічними стисливостями

$$S_{11}(0) = \rho_1 k_b T \beta_T^{(1)},$$

$$S_{22}(0) = \rho_2 k_b T \beta_T^{(2)}$$
(12.7)

Використання співвідношень (12.7), дає можливість переписати рівняння (12.6) у наступному вигляді

$$\rho k_b T \stackrel{(1,2)}{\beta} = \frac{(k_b T)^2 \rho_1 \rho_2 \stackrel{(1)}{\beta_T} \stackrel{(2)}{\beta_T} - S_{12}^2(0)}{\left\{ x^2 \rho_2 \stackrel{(2)}{\beta_T} + (1-x)^2 \rho_1 \stackrel{(1)}{\beta_T} \right\} (k_b T) - x(1-x)S_{12}(0)},$$
(12.8)

Зауважимо, що теоретичне визначення величини $S_{12}(0)$ вимагає знання парціальної функції розподілу $g_{ij}(r)$ і є фактично окремою задачею. Розглянемо формально (12.8) як квадратне рівняння відносно $S_{12}(0)$. Елементарний розв'язок (12.8) веде до визначення формального (1,2)

співвідношення величин $S_{12}(0)$ та β , яке є зовні ізоморфним (12.7)

$$S_{12}(0) = \rho x (1-x) k_b T \beta_{(0)}^{(1,2)} , \qquad (12.9)$$

(1,2) де $\beta_{(0)}$ - ізотермічна стисливість бінарної системи у постульованому стані, рівняння якого має вигляд

$${}^{(1,2)}_{\beta}{}_{(0)} = \frac{\rho_1 \rho_2}{\rho} \frac{\beta_T \beta_T}{x^2 \rho_2 \beta_T^{(2)} + (1-x)^2 \rho_1 \beta_T^{(1)}}.$$
 (12.10)

Сенс отриманих вище співвідношень полягає в тому, що вони (*KB*) (1,2) дозволяють встановити формальний зв'язок між β_T та величиною β_T , яка визначається в альтернативних підходах (скажімо феноменологічних). (*KB*)

Користуючись (12.10) запишемо вираз для β_T у такому вигляді

$$\beta_{T}^{(KB)} = \frac{\beta_{T}^{(1)} \beta_{T}^{(2)} - \left[\beta_{T}^{(1,2)} - \varepsilon\right]^{2}}{\beta_{T}^{(1)} \beta_{T}^{(2)} - 2\left[\beta_{T}^{(1,2)} - \varepsilon\right]},$$
(12.11)

де *Є* деяка допоміжна функція, яка враховує складний характер зв'язку структурних факторів розсіяння на нульові кути та ізотермічної стисливості бінарних систем.

12.2 Аналітична модель парної функції розподілу

Розглянемо тепер модельний вираз, який неодноразово використовувався нами у попередніх моделях (див.(4.15),(4.40),(4.80)) для функції розподілу, і який має наступний вигляд

$$g_{ij}(r) = \Theta(r - d_0^{(ij)}) + A\delta(r - d_1^{(ij)}), \qquad (12.12)$$

де $r = |\vec{r_1} - \vec{r_2}|; \vec{r_1}$ і $\vec{r_2}$ координати виділеної пари частинок; $\theta(z)$ і $\delta(z)$ узагальнені функції Хевісайда та Дірака, відповідно; величини $d_0^{(ij)}, d_1^{(ij)}$ та A_{ij} будуть визначенії нижче.

Детальний розгляд цієї моделі було надано у [46,81]. Функції типу (12.12) відповідають нульовий вірогідностії зближення будь - якої виділеної пари частинок на відносній відстані меншій за $d_0^{(ij)}$. Тому $d_0^{(ij)}$

можна розглядати в якості діаметру твердої сфери (індекси i, j відповідають сорту молекул). Таким чином, модельний вираз (12.12) описує ближнє впорядкування частинок в завданому околі виділеної. Якщо $d_0^{(ij)}$ визначає "діаметр" частинки, тоді параметр $d_1^{(ij)} = b d_0^{(ij)}$ можна визначити за допомогою масштабних параметрів ближнього впорядкування, наприклад, радіусів координаційних сфер b.

Користуючись (12.12) для розрахунку кореляційних інтегралів (12.3) отримуємо

$$G_{ij} = \frac{4}{3} \pi \left\{ d_0^{(ij)^3} - d_1^{(ij)^3} + 3A_{ij} d_1^{(ij)^2} \right\}, \quad G_{ii} = G_i \quad (12.13)$$

Коефіцієнт A_{ij} знаходимо за допомогою умови нормування ПФР

$$\frac{1}{\widetilde{V}} \int_{\widetilde{V}} g_{ij}(r) dr = 1, \quad A_{ij} = \frac{\widetilde{V} - 8V_{ij}N_{ij}}{4\pi N_{ij}b^2 d_0^{(ij)^2}}, \quad (12.14)$$

де \widetilde{V} - це розмір області для якої проводиться розрахунок; N_{ij} - кількість частинок сорту ij у області \widetilde{V} ; V_{ij} - об'єм частинки сорту ij, у випадку коли $i \neq j$, $V_{12} = \frac{4}{3} \pi (r_0^{(12)})^3$. Визначити діаметр молекули сорту

коли $l \neq J$, $r_{12} = \frac{\pi}{3} n (r_0) J$. Визначити діаметр молекули со $d_0^{(1)} + d_0^{(2)}$

 $d_0^{(12)}$ можна, наприклад, покладаючи $d_0^{(12)} = \frac{d_0^{(1)} + d_0^{(2)}}{2}$.

Коефіцієнт нормування A_{ij} являє собою стереологічний параметр, який описує геометрію вільного об'єму в завданому околі частинки. Подібний параметр використовувався у роботі [84] для класифікації типу симетрії та опису змін у локальній структурі при дослідженні фазових перетворень у рідині твердих дисків.

Підставляючи (12.13) у (12.14) отримуємо

$$G_{ij} = V_{ij} \left\{ 2 - \eta_{ij} - 8b_{ij}^{3} \right\}$$
(12.15)

Скористуємося співвідношенням (12.15) для розрахунку ізотермічної стисливості в рамках теорії КБ. Згідно [2] у випадку одно- та бікомпонентної рідини ізотермічна стисливість пов'язана з кореляційним інтегралом за допомогою виразів

$$\beta_{T} = \frac{\rho G + 1}{k_{b} T \rho}$$
(12.16)
$$\beta_{T} = \frac{1}{k_{b} T} \cdot \frac{1 + \rho_{1} G_{1} + \rho_{2} G_{2} + \rho_{1} \rho_{2} (G_{1} G_{2} - G_{12}^{2})}{\rho_{1} + \rho_{2} + \rho_{1} \rho_{2} (G_{1} + G_{2} - 2G_{12})},$$

Підстановка (12.15) у (12.16) дає відповідно

$$\beta_{T} = \frac{1 + \eta \left\{ 2 - \eta - 8b^{3} \right\}}{k_{b}T\rho}, \qquad (12.17)$$

$$\beta_{T}^{(KB)} = \frac{1}{k_{b}T} \cdot \frac{1 + \eta_{1}\Lambda_{1} + \eta_{2}\Lambda_{2} + \eta_{1}\Lambda_{1}\eta_{2}\Lambda_{2} - \rho_{1}\rho_{2}V_{12}^{2}\Lambda_{12}^{2}}{\rho_{1} + \rho_{2} + \rho_{2}\eta_{1}\Lambda_{1} + \rho_{1}\eta_{2}\Lambda_{2} - 2\rho_{1}\rho_{2}V_{12}\Lambda_{12}}$$

(KB)

Отримані співвідношення для β_T наочно демонструють її суттєву залежність від морфології локальної структури. У разі використання аналітичної моделі ПФР для розрахунку стисливості бікомпонентної суміші необхідно знати стереологічні параметри локальної структури та параметр впакування η_{ij} , які в свою чергу залежать від парціальних концентрацій і можуть бути визначені експериментально або за даними чисельного моделювання.

12.3 Надлишкова ізотермічна стисливість

Прийнято вважати, що дослідження надлишкових термодинамічних властивостей є джерелом інформації про міжмолекулярну взаємодію, фазову рівновагу та структурні ефекти в багаточастинкових системах.

Надлишкові властивості, зазвичай, визначаються, як відхилення експериментально вимірюваної (чи теоретично визначеної) характеристики від ідеальної. Зокрема, величина ізотермічної стисливості для, так званого, ідеального стану β_{id} зазвичай, визначається за допомогою закону Рауля

$$\beta_{id} = (1 - x)\beta_1 + x\beta_2 , \qquad (12.18)$$

де x – мольна фракція першої компоненти, β_1, β_2 - парціальні характеристики у монодисперсних границях.

У роботі [12] надлишкові властивості пояснюються присутністю міжмолекулярної взаємодії між компонентами розчину. Зауважимо, що згідно з теоретичним розглядом, який було проведено у [9-10], а також отриманими нами співвідношеннями ізотермічна стисливість набагато більше чутлива до ефектів компактизації.

Надлишкова ізотермічна стисливість β_{exc} за визначенням дорівнює

$$\beta_{exc} = \beta_m - \beta_{id} \,, \tag{12.19}$$

(1, 2)

де β_m - визначається даними експериментальних вимірів чи теоретичного моделювання, β_{id} - задається за допомогою рівняння (12.18).

З метою перевірки отриманих модельних співвідношень для β_T нами проведено розрахунок та порівняння із відповідними значеннями надлишкових величин. У роботі [83] було проведено експериментальні виміри швидкості звуку у розчині CCl₄/CHCl₃ за різних значень x. Значення швидкості звуку будемо вважати пов'язаними із ізотермічною стисливістю за допомогою феноменологічно встановленого співвідношення

$$\beta_T = \frac{1.38 \times 10^{-8}}{\left(6.3 \times 10^{-4} u^{\frac{3}{2}} n\right)^{\frac{3}{2}}},$$
(12.20)

де u - швидкість звуку, n - густина.

Співвідношення (11.20), як показано у [83] добре узгоджується із даними вимірів ізотермічної стисливості для широкого класу систем, в тому числі і бікомпонентних сумішей.

На Рис.12.1 зображені порівняльні дані, стосовно знайденої експериментально стисливості β_m суміші CCl₄/CHCl₃, які було отримано за допомогою виразів (12.10) (з урахуванням введеної поправки) та (12.20).



Рис.12.1 Графік залежності ізотермічної стисливості β_T від концентрації компонент *х* (для розчину CCl₄/CHCl₃). Круги результати розрахунку за формулою (12.20) із використанням експериментальних даних [12]; лінія - результат розрахунку за формулою (12.10) з урахуванням поправки \mathcal{E} , яку наведено у вставці. Пунктиром – значення ідеально визначеної ізотермічної стисливості вираз (12.18)

На Рис.12.2 наведені розрахунки надлишкової стисливості. У якості величини β_m були використані вирази (12.10) та (12.20)



Рис.12.2 Графік залежності надлишкової ізотермічної стисливості β_{exc} від концентрації компонент x (для розчину CCl₄/CHCl₃). Розрахунок за формулою (12.19) із використанням у якості β_m виразів (12.10) (із відповідною поправкою) та (12.20).

З наведених на рисунках результатів видно, що при врахуванні введеної поправки \mathcal{E} результати розрахунку добре узгоджуються із експериментальними даними. Величину поправки \mathcal{E} , яка враховує складний характер зв'язку структурних факторів розсіяння на нульові кути та ізотермічної стисливості можна інтерпретувати, як прояв ефектів кореляції густини та особливостей процесів компактизації, особливо поблизу станів X = 0.5.

Таким чином, результати проведених розрахунків та аналіз надлишкових властивостей бікомпонентних систем в рамках теорії Баффа про ефективність Кірквуда свідчить використання запропонованої аналітичної моделі ПФР, яке дозволило отримати вирази для кореляційних інтегралів. Виявилося, що модельні вирази КБІ. внаслідок особливостей моделі ПФР, демонструють суттєву залежність від ступеня впакування та параметрів вільного об'єму в завданому околі частинки.

12.4 Новий клас точних розв'язків диференційно – різницевого рівняння руху для механічних збуджень в одновимірному неоднорідному гранульованому ланцюжку

Поширення хвиль в нелінійних системах вивчається протягом тривалого часу і результати досліджень детально відображені в літературі (див., наприклад, [85-87]). Останнім часом інтерес до дослідження хвильових рухів у дискретних мікромеханічних системах відновився у зв'язку з інтригуючими результатами, що були отримані в експериментах з гранульованими ланцюжками [88]. У серії робіт ця задача вивчалася експериментально, чисельно і теоретично [89-95,98-100]. Так, наприклад, в лінійному наближенні вдалося показати, що динаміка хвильового руху поширюється гравітаційно імпульсу, який вздовж стисненого гранульованого ланцюжка з нелінійними контактами, описується розв'язками типу дисперсійних хвиль (нормальні моди). Існування розв'язків несолітонного типу, амплітуда яких зменшується за степеневим законом, розширює і доповнює відомі нелінійні хвильові механізми передачі енергії. Розглядаючи загальну задачу такого типу було знайдено новий клас точних рішень відповідного рівняння руху механічного імпульсу у вертикальному гранульованому ланцюжку з нелінійними контактами, який існує у наближенні слабкої нелінійності і формулюється в термінах функцій Беселя першого роду. Знайдений розв'язок стимулює постановку нових експериментів з оптимізації передачі енергії (імпульсу) у дискретних (гранульованих) слабко нелінійних, низьковимірних системах та їх подальшу параметризацію з метою маніпулювання такими процесами.

Розглянемо рівняння для функції зсуву, який супроводжує поширення імпульсу у вертикальному гранульованому ланцюжку зображеному на Рис.12.3.



Рис.12.3 Вертикальний гранульований ланцюжок

$$\frac{d^{2} z_{n}}{dt^{2}} = \gamma \left\{ \left[d - \left(z_{n} - z_{n-1} \right) \right]^{\delta} - \left[d - \left(z_{n+1} - z_{n} \right) \right]^{\delta} \right\} + g, \qquad (12.21)$$

де $\gamma = C/m$, *m* - маса окремої частинки-гранули, *d* - діаметр

недеформованої частинки, $C = \frac{E}{3(1-v^2)} \varepsilon^{1/2}$ - силова константа, E -

модуль Юнга, V - константа Пуассона, E - геометричний фактор, який залежить від параметрів перекривання пари сусідніх частинок. Параметр нелінійності контакту δ здатен приймати різні значення. Наприклад, у випадку контактів між частинками герцівського типу, він дорівнює $\delta = 3/2$

Ми будемо нехтувати роллю дисипативних ефектів, які можуть бути суттєвими при збільшенні ступеня нелінійності та інтенсивності збурень. Зауважимо, що параметр δ , що характеризує область перекривання частинок, що контактують, для горизонтально розташованих систем може вважатися наближено однаковим для будь-якої пари сусідніх частинок в системі. У випадку вертикальної системи цей параметр починає залежати від положення (номера) контакта . Якщо врахувати останню обставину, рівняння руху (1) набуває вигляду

$$\frac{d^{2}z_{n}}{dt^{2}} = \gamma_{n-1} [d - (z_{n} - z_{n-1})]^{\delta} - \gamma_{n+1} [d - (z_{n+1} - z_{n})]^{\delta} + g_{,(12.22)}$$

$$\gamma_{n} = \frac{E}{3(1 - v^{2})n} \varepsilon_{n}^{1/2} = \gamma \varepsilon_{n}^{1/2}.$$

де

Рівняння (12.22) має розглядатися для частинок з номерами від n = 1 до n = N, с початковими умовами виду

$$\dot{z}_1(0) = v, \qquad \dot{z}_n(0) = 0.$$
 (12.23)

Вважаючи, що взаємна деформація (перекривання) сусідніх частинок значно менше твердосферного діаметра

$$\frac{|z_n - z_{n-1}|}{d} << 1 \tag{12.24}$$

після нескладних перетворень (12.22), може бути переписано в наступному, лінеаризованому вигляді

$$\frac{d^2 \widetilde{z}_n}{d\widetilde{t}^2} = \varepsilon_{n+1}^{1/2} \widetilde{z}_{n+1} - \left(\varepsilon_{n+1}^{1/2} + \varepsilon_{n-1}^{1/2}\right) \widetilde{z}_n - \frac{\varepsilon_{n+1}^{1/2} - \varepsilon_{n-1}^{1/2}}{\delta} + \frac{g}{\delta d^\delta \widetilde{\gamma}}, \quad (12.25)$$

$$z_{n} = z_{n}/d, \quad \tilde{t}_{n} = t\sqrt{\delta d^{\delta-1} \tilde{\gamma}}.$$

Записуючи умову рівноваги в точці довільного контакту в найпростішому вигляді

$$\varepsilon_{n+1}^{1/2} + \varepsilon_{n-1}^{1/2} = \frac{g}{d^{\delta} \widetilde{\gamma}}, \qquad (12.26)$$

рівняння (12.25) перепишемо в такій формі

$$\frac{d^{2}\widetilde{z}_{n}}{d\widetilde{t}^{2}} = \varepsilon_{n+1}^{1/2} \left[\widetilde{z}_{n+1} - \frac{\varepsilon_{n+1}^{1/2} + \varepsilon_{n-1}^{1/2}}{\varepsilon_{n+1}^{1/2}} \widetilde{z}_{n} + \frac{\varepsilon_{n-1}^{1/2}}{\varepsilon_{n+1}^{1/2}} \widetilde{z}_{n-1} \right], \quad (12.27)$$

яка відносить його до класу функціонально-диференціальних. Як ми покажемо нижче, воно може бути проінтегрувано точно.

Повертаючись до форми керуючого рівняння (12.21) ми можемо, також перейти до нової змінної φ_n за наступним правилом

$$\varphi_n = z_n - \left\lfloor nd - \sum_{k=1}^n \hat{\varepsilon}_k \right\rfloor.$$
(12.28)

Враховуючи умову рівноваги

$$gk = \gamma \hat{\varepsilon}_k^{\delta} , \qquad (12.29)$$

і умову слабкої нелінійності контакту

$$\left|\varphi_{k+1} - \varphi_k\right| \ll \hat{\varepsilon}_k^{\delta}, \qquad (12.30)$$

керуюче рівняння запишемо в наступному вигляді

$$\frac{d^2 \varphi_n}{dt^2} = \frac{1}{\tau^2} \left\{ \kappa_{n+1} (\varphi_{n+1} - \varphi_n) - \kappa_n (\varphi_n - \varphi_{n-1}) \right\}, \quad (12.31)$$

де величина $\kappa_n = n^{1-1/\delta}$ може бути інтерпретована, як перенормована силова константа, яка внаслідок гравітаційної прекомпрессії залежить від номера контакту. Характеристичний час τ в рівнянні (12.31) визначається виразом

$$\tau = \frac{1}{g\delta} \left(\frac{g}{\gamma}\right)^{1/\delta}.$$
(12.32)

Зауважимо, що зроблене припущення про слабку нелінійність системи перетворює, початково неоднорідне (внаслідок присутності гравітації), керуюче рівняння в однорідне, яке притаманне горизонтально розташованому ланцюжку, але з силовими константами, які залежать від номеру контакту. Вводячи ще одну заміну

$$\psi_n = \kappa_n \varphi_n, \tag{12.33}$$

перепишемо рівняння (12.31) у наступному вигляді

$$\frac{d^2\psi_n}{dT^2} = \psi_{n+1} - \left[1 + \frac{\kappa_{n+1}}{\kappa_n}\right]\psi_n + \frac{\kappa_n}{\kappa_{n-1}}\psi_{n-1}, \qquad (12.34)$$

де $T = t / \tau$.

Зауважимо, що в рівнянні (12.34) коефіцієнти при Ψn і $\Psi n-1$, як можна бачити, вже для $n \ge 3$ менш ніж на 10 відсотків відрізняються від двійки і одиниці, відповідно. Спрощуючи (12.34) (з вищевказаним ступенем точності) отримуємо

$$\frac{d^{2}\psi_{n}}{dT^{2}} = \psi_{n+1} - 2\psi_{n} + \psi_{n-1}.$$
(12.35)

Диференційно-різницеве рівняння (12.35) має точний розв'язок виду

$$\psi_n(T) = J_{2n}(2T),$$
 (12.36)

де J_{2n} - функція Беселя першого роду з цілими індексами.

Розв'язок у вигляді лінійних комбінацій (12.36) відповідає взагалі кажучи довільним початковим умовам. Повертаючись до вихідних змінних, розв'язок (12.36) можемо записати в наступному вигляді

$$\psi_n(t) = J_{2n}\left(\sqrt{g\delta}\left(\frac{\gamma}{g}\right)^{1/2\delta}t\right),$$
 (12.37)

який дозволяє вивчати вплив параметрів системи на хвильовий транспорт і, таким чином, відіграє роль матеріальних співвідношень. Відзначимо, що розв'язок стаціонарної форми рівняння (12.35)

$$\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1} = 0, \qquad (12.38)$$

знаходиться в класі періодичних функцій

$$\psi_n = A\sin(\pi n). \tag{12.39}$$

Користуючись отриманими розв'язками, неважко знайти вирази для швидкості

$$v_n = \kappa_n^{-1} \left[J_{2n-1}(2T) - \frac{n}{T} J_{2n}(2T) \right], \qquad (12.40)$$

потенціалу

$$U_{n} = 2\left(\frac{n}{T}\right)^{2} J_{2n}^{2} \left(2T\right) - \frac{2}{T} J_{2n} \left(2T\right),$$
(12.41)

и повної енергії

$$E_{n} = \frac{1}{2}n^{-2\xi} \left[J_{2n-1} \left(2T \right) - \frac{n}{T} J_{2n} \left(2T \right) \right]^{2} + 2 \left(\frac{n}{T} \right)^{2} J_{2n}^{2} \left(2T \right) - \frac{2}{T} J_{2n} \left(2T \right).$$
(12.42)

Постановка прямих фізичних експериментів з розповсюдження сигналу в одномірної гранульованої системі з параметрами наближеними до умов розглянутої задачі була здійснена автором у співробітництві із колегами з університету м.Льєж (Бельгія) (див. літературу, цитовану у передмові).

Було наочно продемонстровано, що знайдений новий клас точних лінеаризованого рівняння руху для механічного імпульсу у розв'язків вертикальному гранульованому ланцюжку якісно відтворює результати фізичного експерименту. Керуюче рівняння, яке після лінеаризації стає однорідним з перенормованими силовими сталими (які в свою чергу, від номера частинки в системі) відноситься залежать класу ДО диференціально-різницевих та інтегрується точно. Розв'язок знайдено в класі циліндричних функцій Беселя першого роду, лінійна комбінація яких задовольняє довільним початковим умовам. Отримані результати суттєво відомі результати у вигляді розв'язків, доповнюють V вигляді дисперсійних хвиль (нормальні моди) і узагальнюють останні (скажімо, як функції вкладення).

Розглянуті розв'язки, після їх експериментального підтвердження мають сприяти розробці адекватних моделей для параметризації процесів транспорту енергії (імпульсу) у низьковимірних, слабо-нелінійних, дискретних механічних системах, прикладом яких виступають гранульовані ланцюжки.

РИСУНКИ ДО ГЛАВ 1-12



Рис.1.1 Найскладніше, знаходячись в центрі пустелі, це знайти пісок ...



Рис.1.2 Непружний колапс в ємкості зберігання цементу, розташованої поблизу маневрової залізничної магістралі



Рис. 1.3 Дюни, що переміщуються в пустелі, здатні знищувати (поїдати)оазиси цивілізації



Рис.1.4 Автомобіль, що "потопає" в хитких пісках



Рис.1.5 Приклади гранульованих матеріалів, які існують у промисловості та у навколишньому середовищі



Рис.1.6 Фото частини Всесвіту та її скетч у вигляді впорядкованого "планетарного кристалу"



Рис.1.8 Пісчаний замок



Рис.1.9 Збудження("скипання") гранульованого шару:відокремлені осцілони та гратки з осцілонів



Рис.2.1 Той самий звичайний пісок



Рис.4.2 Компактизація гранульованого матеріалу під дією зовнішніх струсів(n)



Рис. 7.7 Порівняння *i*₁₁ отриманих експериментальним та теоретичним шляхом для 18 та 9 сфер



Рис. 7.8 Порівняння *i*₁₁ отриманих експериментальним та теоретичним шляхом для 3 та 2 сфер



Рис. 7.9 Порівняння *i*₁₁ отриманих експериментальним та теоретичним шляхом для 18 та 2 сфер



Рис. 7.10 Порівняння *i*₁₁ отриманих експериментальним та теоретичним шляхом для 2 та 9 сфер



Рис. 7.11 Порівняння *i*₁₁ отриманих експериментальним та теоретичним шляхом для 3 та 9 сфер



Рис. 7.12 Порівняння *i*₁₁ отриманих експериментальним та теоретичним шляхом для 18 та 3 сфер



Рис. 7.14 Порівняння i_{22} отриманих експериментальним та теоретичним шляхом для 18 та 9 сфер



Рис. 7.15 Порівняння *i*₂₂ отриманих експериментальним та теоретичним шляхом для 2 та 3 сфер



Рис. 7.16 Порівняння *i*₂₂ отриманих експериментальним та теоретичним шляхом для 2 та 9 сфер



Рис. 7.17 Порівняння *i*₂₂ отриманих експериментальним та теоретичним шляхом для 18 та 2 сфер



Рис. 7.18 Порівняння *i*₂₂ отриманих експериментальним та теоретичним шляхом для 3 та 9 сфер



Рис. 7.19 Порівняння i_{22} отриманих експериментальним та теоретичним шляхом для 18 та 3 сфер



Рис.8.1 Умовне зображення перетинів елементів площиною



Рис.8.9 Функція розподілу площ фігур ДПВ для структури, наведеної на Рис.8.7



Рис.8.10 Функція розподілу площ фігур ДПВ. Синя крива – експеримент, чорна крива відповідає закону (8.13)



Рис.8.11 Функція розподілу площ фігур ДПВ. Червона крива – експеримент, чорна крива відповідає закону (8.14)


Рис.9.2 Залежність параметра Ліндемана від впакувальної фракції для двовимірної системи твердих дисків



Рис.9.3 Графік функції $\rho(\vec{r})$ в запорошеній плазмі (верхній), для гранульованого матеріалу (нижній)



Рис. 9.5 Параметри локального впорядкування запорошеної плазми



Рис. 9.6 Параметри локального впорядкування гранульованого матеріалу



Рисунок 10.1 Результати чисельних розрахунків за формулами (10.21), (10.22). Залежність координати зіткнення частинок 1 та 2 між собою від кількості їх зіткнень, 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



Рис.10.2. Результати чисельних розрахунків руху центру мас у 1D горизонтальній системі 10-ти непружних частинок. Синя лінія – відповідає руху центру мас системи ; красна – відтворює рух N-1 непружної

частинки ; $\alpha = 0.95$, $v_0 = 5$, $\Delta t = 10^{-5}$



Рис.11.1 Умовне зображення руху частинок, які відбиваються від нерухомої поверхні



Рис.11.2 Гранульований шар над вібруючою поверхнею



Рис. 11.3 Скетч системи у якій відбуваються дисипативні втрати енергії (10% втрат при кожному зіткненні)



Рис. 11.4 Динаміка системи зображеної на Рис.11.4 у якій амплітуда коливань поверхні збільшена у 10 разів (до 25,4 см)



Рис. 11.5 Ефект "зависання" гранул над поверхнею (левітації)



Рис. 11.6 Результати комп'ютерного моделювання відскоків кульки радіусу 10 дюймів від поверхні, що вібрує по гармонійному закону з частотою 1 Гц. k = 0,51

ПРЕДМЕТНИЙ ПОКАЖЧИК

Абеля рівняння	83,95
ББГКІ ланцюжки рівнянь	18
Біжуча хвиля	237
Виключений об'єм	65-68
Впакувальна фракція	66,105
Гексагональна структура	191
Гранульовані матеріали	6,10
Дюни	33
Дельта функія Дірака	61
Ентропія	105
Ефект арки	23,24
Ефект бразильского горіха	19
Ефект Лейденфроста	14,209
Задача Мі	130,150-156
Ізотермічна стисливість	226
Інваріанти Пуанкаре-Ейлера	167
Кана-Хілярда кінетика	75
Кластеризація	113
Когерентні стани	207
Коефіцієнти Гаунта	132,135
Колмогорова-Вогеля-Фулчера модель	69
Комірці Бенара	14
Компактизація	70
Конвективний рух	14
Критерій Ліндемана	187
Коефіцієнт непружніх втрат	98,108
Кінетична температура	108,114
Карнахана-Старлінга рівняння	
Ландау-Гінзбурга кінетика	75
Матриця розсіяння	139
Матриця Стокса	162
Мікроканонічний ансамбль	102
Модель Кірквуда-Баффа	226

Модель Фермі-Дірака розподілу щільності	186
Молекулярна динаміка	118,121
Монте-Карло метод	118,122
Надлишкова стисливість	230
Нелінійні хвилі	208
Наближення Чепмена-Енскога	107
Непружній колапс	45
Навьє-Стокса рівняння	108
Оболонкова модель	187
Переріз розсіяння	143
Параметр впорядкування	73
Плоська хвиля	127
Проблема Фермі-Пасти -Улама	208
Рівняння стану	96
Сегрегація	72
Сила Герця	52
Стаціонарні стани	60,97
Структурний фактор	85
Стисливість	93
Скейлінг	90
Структуровані комплекси	150-156
Стиснений стан(jamming)	218
Стугонливі піски	29,30,31
Тетріс модель	25
Тиск Лапласа	33
Фігури Вороного	104,171
Фігури Хладні	15
Флюїдізація	12
Функція розподілу	70,79
Хиткі піскі	13
Швидкість звука	230

СПИСОК ЦИТОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- 1. Jaeger H., Nagel S., Behringer R. //Rev.Mod.Phys.-1996.-68.-P.1259.
- 2. Faraday M. // Philos. Trans. R. Soc. London.-1831.-52.-P.299.
- 3. Duran J. Sands, Powders and Grains: Introduction to the Physics of Granular Materials.-Springer-Verlag, NewYork.:1999.- p.214.
- 4. Granular Matter. An Interdisciplinary Approach, Mehta A. (Ed).-Springer Verlag.- New.York.:1994.-p. 306.
- Powders & Grains, R. Garcia-Rojo, H. J. Herrmann, S. McNamara. (Ed)Balkema.- Rotterdam-2005.-p.859-865.
 The physics of granular media. H.Hinrichsen and D.E.Wolf (Eds).-

Wiley-VCH, 2004.

- 7. McDonald, Hansen J. Classical Theory of Liquids (Oxford).
- 8. Bagnold R.A. The Physics of Blown Sand and Desert Dunes.-London.-Methuen:1954.-p.265.
- 9. De Gennes P.G. Granular matter: a tentative view. //Rev.Mod.Phys.-1999.-71,S.- P.374-385.
- 10.Luding S., Herrmann H. //Chaos.-1999.-9.-P.673.
- 11.Bocquetetal L. Granular Shear Flow Dymanics and Forces: Experiment and Continuum Theory.-2000.-cond-mat/0012356.
- 12.Shandarin S.F., Zeldovich Ya.B. //Rev.Mod.Phys.-1989.-61.-P.185.
- 13.Ben-Naim E. //Phys.Rev.Lett.-1999.-83.-P.4069.
- 14. Wakou J., Brito R., Ernst M. Towards a Landau-Ginzburg- type Theory for Granular Fluids.-1998 // Phys. Rev. E 57:R4891 .
- 15. Герасимов О.І. Структура та динаміка гранульованих матеріалів. //Доповіді НАН України.-2010.-№11.-С.59-65.
- 16. Gerasymov O.I. Structure and dynamics of granular materials perturbed by external fields. //Ukr.Journ.Phys.-2010.-Vol.55, №5.-P.560-567.
- 17. Герасимов О.І., Співак Кінетична модель ущільнення в гранульованих матеріалах. // Вісник Одеського державного екологічного університету. 2010, вип. 10.-с.
- 18.Герасимов О.І.,Сомов М.М. Локальная структура гранулированных материалов.//Вісник Одеського державного екологічного університету .- 2010, вип.10
- 19. Lumay G , Dorbolo S, Gerasymov O. and N. Vandewalle N., Experimental study of a vertical column of grains submitted to a series of impulses. //Eur. Phys. J. E -2013.-Vol.36, N16.
 Zabusky, N. J.; Kruskal, M. D. Interactions of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of initial states".-1965.
 // Physical Review Letters 15 (6): 240–243.

- 20. Заславский Г.М., Сагдеев Р.З. Введение в нелинейную физику. От маятника до турбулентности и хаоса.-
- Giulio Biroli. Jamming, a new kind of phase transition? // Nature Physics .-2007.vol. 3.- p. 222.
- 22. Torquato S., Stillinger F. Jammed hard-particle packing: From Kepler to Bernal and beyond. . // Review Modern Physics .-2010– vol. 3 №3 .- p. 2633-2672.
- Scott, G. D., Kilgour D. The density of random close packing of spheres // Journal of Physics D: Applied Physics .-1969.- vol. 2 .- p. 863-866
- О.І. Герасимов, Сомов М.М. Локальна структура гранульованих матеріалів // Вісник Одеського державного екологічного університету .-2010.- вип. 10. – с. 221-225.
- 25. Goldhirsch I., G. Zanetti // Phys. Rev. Lett.-1993.-70.-P.1619.
- 26. McNamara S., W.R. Young //Phys. Rev. E.-1996.-53.-P.5089.
- 27. Гольдштик М.А. Процессы переноса в зернистых слоях. Новосибирск, 1984.
- 28. Урьев Н.Б. Физико-химические основы технологии дисперсних систем и материалов. М.: Хімія, 1988.
- 29. Урьев Н.Б., Потанин А.А. Текучесть суспензий и порошков. М.: Хімія, 1992.
- 30. 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. //Ukr.Journ.Phys. -2005.-50, №6. -P.624-632.
- 31. Gerasimov O.I., Schram P.P.J.M., Kitahara K. Kinetics of granular segregation. //Ukr.J.Phys.-2003.-48,N8.-P.885-896.
- 32. Knight J.B., Fandrich C.G., Lau C.N., Jaeger H.M., Nagel S.R. Density relaxation in vibrated granular materials. //Phys.Rev.E.-1995.-51.-P.3957-3965.
- 33. Vilarruel F. Compaction relaxation and ordering in granular materials. //Phys.Rev.E.-2000.-61.-P.6914-6932.
- 34. Boutreux T, .De Gennes P.G.//Physica A.- 1997.-244.-P.59.
- 35. Lumay G.and Vandewalle N. //Phys. Rev. Lett.- 2005.-95.-P.028002.
- 36. Kansal A., S.Torguato, Stillinger F.//Phys. Rev. E.- 2002.-66.-P.041109.
- 37. Lesa_C., Mineau V., D.Picart, Van Damme H. //C.R.Acad. Sci. Paris.-2000.-1,serie IV.-P.647.
- 38. Soto R, Mareschal M, Malek Mansour M, Phys. Rev. E .-2000.-62.p.3836.
- 39. Truskett T., Torquato S., .Debenedetti P.//Phys. Rev. E.-2000.-62.-P.993.
- 40. Persson B., Tosatti. E. //J. Chem. Phys.-2001.-115.-P.5597.
- 41. Yan Z., Buldyrev S., Giovambattista N., Stanley E.//Phys. Rev. Lett.-2005.-95.-P.130604.
- 42. Errington J., Debenedetti P.//J. Chem. Phys.-2003.-118.-P.2256.
- 43. Shell M. //Phys. Rev. E.-2002.-66.-P.011202.

- 44. De Gennes P.G.//Europhys. Lett.- 1996.-35(2).-P.145.
- 45. Aste T., Saadftfar M., Sender T.//Phys. Rev. E.-2005.-71.-P.061302.
- 46. Герасимов О.И. Рассеяние излучений в статистических системах. Решаемые модели. - Одесса: Маяк, 1999.-284с.
- 47. Oyama Y. //Bull.Inst.Phys.Chem.Res. (Tokyo), Rep.-1939.-18.-P.6001.
- 48. Clement E., Rajchenbach J., Duran J. //Europhys.Lett.-1995.-30.-P.7.
- 49. Cantelaube F., Bideau D. //Europhys.Lett.-1995.-30.-P.133.
- 50. Baumann G., Janosi I.M., Wolf E.D. //Phys.Rev.E.-1995.-51.-P.1879.
- 51. Hill K.M., Caprihan A., Kakalios. J. //Phys.Rev.Lett.-1997.-78.-P.50.
- 52. Dury C.M., Ristow G.H. //J.Phys.I.-1997.-7.-P.737.
- 53. Ristow G.H. //Europhys.Lett.-1994.-28.-P.97.
- 54. Metclafe G., Shattuck M. //Physica A.-1996.-233.-P.709.
- 55. Deltour P., Barrat J.-L. //J.Phys.I France.-1997.-7.-P.137.
- 56. Duru C.M., Ristow G.H. //Physics Fluids.-1999.-11.-P.58.
- 57. Porion P., Sommier N., Evesque P. //Europhys.Lett.-2000.-50.-P.319.
- 58. Rankine W.J.W. //Philosoph.Trans.Roy.Soc. London.-1857.-147.-P.9.
- 59. Galavotti G., Cohen E.G.D. //Phys.Rew.Lett.-1995.-74.-P.2694.; //Journ.Stat.Phys.-1995.-80.-P.931.; //Rew.Mod.Phys.-1985.-57.-P.617.
- 60. Dorfman J.R. An Introduction to Chaos in Non-Equilibrium Statistical Mechanics.- Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- 61. Gaspard P. Chaos, Scattering, and Statistical Mechanics.-Cambridge: Cambridge University Press, 1998; Dynamics: Models and Kinetic Methods for Non-equilibrium Many Body systems (Ed. J.Karkhek).-Kluwer,Dordrech: Proceedings of NATO ASI, 2000.
- 62. Patashinsky A.Z., Pokrovsky V.L. Fluctuation theory of phase transitions.- London: Pergamon Press Ltd, 1979.
- 63. Gerasimov O.I., Schram P.P.-J.M. //Physica A.-2002.-312,1-2.-P. 172-180.
- 64. Sander L.M. //Contemporary Physics.-2000.-41.-P.203.
- 65. Gerasimov O.I., Fisher I.Z., Lisy V. //Chech.Journ.Phys.B.-1982.-32.-P.772.
- 66. van Noije T.P.C., Ernst M., Brito R. //Phys.Rev.E.-1999.-57, R.-P.4891.
- 67. van Noije T.P.C., Ernst M., Brito R. //Phys.Rev.Lett.-1997.-79.-P.411.
- 68. Hansen J.P., McDonald I.R. Theory of simple liquids.- London: Academic Press, 1986.
- 70. Prudnicov A.P., Bruchkov Yu.A., Marichev O.I. Integrals and series. Vol Elementary functions.- New York: Cordon and Breach S.P., 1986.
- 71. Gradshtein I.S., Ryzhik I.M. Table of integrals, series, and products.-New York: Academic Press, 1994.
- Kamke E. Differential gleichungen.- Leipzig: Akademishe Verlagsgesselshaft, 1959.
- 73. Murphy G.M. Ordinary differential equations.- New York: D.van Nostrand Company, 1960.

- 74. Polyanin A.D., Zaitsev V.F. Exact solutions of Ordinary differential Equations.- New York: CRC Press, 1995.
- 75. Kirkwood J.,. Buff F.// J. Chem. Phys. -1951.-19, p.774
- 76. Fisher I., Statistical Theory of Liquids; Chicago University Press, 1964
- 77. Nishikawa K.// Chem. Phys. Lett.-1986.- 132,p. 50
- 78. Misawa M., Yoshida K.// J. Phys. Soc. Jn.-2000.- 69, p.3308.
- 79. Almásy L., Cser L., Jancsó G.// J. Mol. Liq.-2002.- 101, p.89.
- 80. S. Dixit, J. Crain, W. C. K. Poon, J. L. Finney, and A. K. Soper.// Nature London .-2002.-416,p. 6883 .
- 81. Hansen J, McDonald I.Theory of Simple Liquids. Academic Press, 1976. 426 p.
- 82. Gerasymov O.I. Scattering of external radiation's in statistical systems. Solved models. - Odessa: Mayak publishers, 1999. - 284 p.
- 83. Герасимов О.І. Функції розподілу груп частинок у статистичній фізиці .- Екологія, 2008.- 84с.
- 84. Moucka F., Nezbeda I.// Phys. Rev. Lett. 2005. 94, 040601 .
- 85. Aliotta F. // J. Phys. Chem.-2007.- 126,p. 224508.
- 86. Vyas V., Pramana V.// J. Phys.-2008.- Vol. 70, No. 4, pp. 731-738.