

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МЕХАНИКИ
ИМ. С.А. ХРИСТИАНОВИЧА
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

Мишин Алексей Владимирович

**ФОРМАЛИЗМ ОБОБЩЕННОЙ ПРОИЗВОДНОЙ ДЛЯ АНАЛИЗА
ГЕТЕРОГЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ**

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

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
Академик, д.ф.-м.н. Фомин В.М.

Новосибирск – 2022 год

План диссертации по главам

Введение	3
Глава 1. Литературный обзор моделей по описанию гетерогенных сред.....	10
Глава 2. Обобщенная производная и ее использование для анализа микроструктуры гетерогенной среды	39
2.1. Использование обобщенной производной для интегрального учета микроструктуры гетерогенной системы	39
2.2. Учет обобщенной производной и коллективного влияния фаз на процесс гомогенизации.....	65
2.3. Учет обобщенной производной и коллективного влияния фаз на процесс гомогенизации в упругих гетерогенных средах.....	80
Глава 3. Анализ поведения гетерогенных сред с существенно различающимися физическими свойствами с учетом эффективной размерности пространства и формализма обобщенной производной	88
3.1. Обобщение эффективных коэффициентов на пространство заданной размерности.....	89
3.2. Анализ эффективных коэффициентов	94
Глава 4. Применение полученной теории для создания гетерогенного материала с заданными физико-механическими свойствами.	111
4.1. Исследование упругих свойств материала, полученного методом холодного газодинамического напыления с лазерной обработкой.	111
4.2. Предсказание упругих свойств гетерогенного материала на основе титанового сплава и борида титана, полученного методом управляемого лазерного воздействия.	119
4.3. Сравнение полученных результатов с экспериментальными данными для вязкоупругих свойств гетерогенной среды	122
Заключение	140
Список литературы	141

Введение

Работа посвящена теоретическому исследованию гетерогенных сред. Гетерогенные системы [1] – структурно-неоднородные системы, состоящие из однородных частей (фаз), разделённых поверхностью раздела, химический состав и физические свойства которых во всех частях одинаковы и меняются скачкообразно при переходе между фазами. Классификация гетерогенных сред приведена в источнике [1].

Актуальность темы исследования.

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

Научная и практическая значимость. Степень разработанности темы исследования.

Аналитическое моделирование распространения поля по гетерогенной среде представляет собой комплексную задачу с нерешенными проблемами. Данная задача напрямую связана с построением математической модели гетерогенной среды с определенными эффективными коэффициентами переноса, входящими в осредненные уравнения и отображающими микроструктуру системы (геометрию

и физические свойства фаз). Для решения данной задачи необходимо учесть коллективное влияние фаз на распространяющееся исследуемое поле по гетерогенной среде, что имеет отношение к задаче многих тел. Задача многих тел для гетерогенной среде связана с описанием влияния на поле конфигурации внутренних границ, разделяющих занятые фазами области с разными физическими свойствами. Сложность задачи заключается в поиске необходимого математического аппарата и последующего нахождения решения.

История теоретического описания микронеоднородных сред насчитывает уже более ста лет, начиная с работ Максвелла (эффективные коэффициенты электропроводности, теплопроводности) и Эйнштейна (эффективная вязкость суспензий). К настоящему моменту разработан ряд подходов, обладающих широким математическим аппаратом. Этот математический формализм по большей части направлен на получение из исходных уравнений осредненных с входящими в них эффективными коэффициентами переноса, отображающими континуальное “размазывание” истинной среды. При этом границы раздела фаз либо не учитываются (соответственно и размеры), либо их учет производится с введением упрощений (например, рассмотрение периодической структуры или введение феноменологических коэффициентов). То есть отсутствует математическая концепция по учету микроструктуры гетерогенной среды, отображающая задачу многих тел (коллективное взаимодействие фаз) для гетерогенной среды, на основе которой строится решение. Исходя из чего получаемые в рамках существующих подходов эффективные коэффициенты переноса ограничены в описании поведения гетерогенной среды на всем интервале объемных концентраций и при существенно различных физических свойствах фаз.

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

Цель работы и задачи.

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

Для достижения данной цели решаются следующие задачи:

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

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

3. Из анализа найденных эффективных коэффициентов находить признаки несущей фазы и структурного фазового перехода (перколяции).

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

Научная новизна.

На основе индикаторной функции, входящей в функционал внутренней энергии, и используя вариационное исчисление, получена формула для обобщенной производной, учитывающая влияние внутренних границ гетерогенной среды,

разделяющих фазы с разными физическими свойствами, на распространение поля по ней и приводящая к интегро-дифференциальному уравнению переноса.

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

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

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

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

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

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

Методология и методы исследования.

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

Основные положения, выносимые на защиту:

1. На основе математической формализма обобщенной производной проведение аналитического учета влияния внутренних границ гетерогенной среды, разделяющих фазы с разными физическими свойствами, на распространение поля по ней. Постановку на основе концепции обобщенной производной задачи многих тел для гетерогенной среды и нахождение ее решения. Нахождение решения интегродифференциального уравнения с разрывами на осредненную функцию Грина, что основано на анализе соответствующего оператора. Интегральный учет в полученных эффективных коэффициентах переноса микроструктуры системы (физические свойства фаз и характерные масштабы) в явном виде. Обобщение эффективных коэффициентов на случай заданной размерности пространства.

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

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

4. Получение на основе анализа осредненных уравнений (полученных методом условных моментов) структурного вида коэффициента пропорциональности

(для высокопористых сред) в законе Дарси, отражающего микроструктуру среды. Проведение сравнения полученных формул с экспериментальными данными, показывающее удовлетворительное согласование.

Степень достоверности и апробация работы.

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

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

ICSMAR 2017, Международная конференция по методам аэрофизических исследований; ПЕФМ, 2018; ПЕФМ, 2021; EOS, 2022; Открывающий доклад на Всероссийской конференции для молодых ученых “34 Сибирский теплофизический семинар”, посвященный 85-летию академика А.К. Реброва, 2018; Всероссийская конференция молодых учёных-механиков, 2018; Всероссийская конференция молодых учёных-механиков, 2021; XII Всероссийский съезд по фундаментальным и прикладным проблемам теоретической и прикладной механики 2017; XII всероссийской конференции молодых ученых Проблемы механики: теория, эксперимент и новые технологии 2016.

В процессе написания диссертации автор принял участие в проектах: РНФ № 16-19-10300 исполнитель, основной исполнитель в РНФ № 21-19-00733, РФФИ “Аспиранты”, исполнитель в проекте 075-15-2020-781.

Публикации и личный вклад автора. Данный текст отражает результат работы автора совместно с научным руководителем и коллегами. Основные результаты опубликованы в работах [2–9] .

Структура и объём научно-квалификационной работы.

Диссертация состоит из введения и 4 глав, содержит 148 страниц, включая 14 рисунков и список литературы из 76 наименований.

Во введении представляются основные аспекты работы. В главе 1 представлен литературный обзор моделей по описанию гетерогенных сред, описывающий специфику развития области.

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

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

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

Глава 1. Литературный обзор моделей по описанию гетерогенных сред.

На данный момент не существует единой модели, позволяющей описывать любую гетерогенную среду в широком спектре условий. Это является следствием огромного количества физических и химических особенностей (агрегатные состояния, состав и геометрическая структура фаз) таких систем. Тем не менее, к настоящему моменту сформирована большая база подходов [10], обладающих различным математическим формализмом. Наиболее полный и взаимодополняющий обзор методов приведен в монографиях [11–13]. Обратимся к истории теоретического описания микронеоднородных сред. Исходя из большого числа существующих подходов сделать их детальный обзор со всеми достоинствами и недостатками представляет собой нетривиальную задачу. В связи с этим проведем описание тенденции развития области преимущественно качественным образом.

Первые аналитические формулы для вычисления эффективных коэффициентов при различных концентрациях включений и отношениях теплопроводностей были представлены в работах Максвелла, Рэлея и др. [14, 15].

Модель Максвелла для диэлектрической проницаемости смеси (представим в терминах эффективной проводимости) [14]. Модель применима для малых концентраций включений, которые не взаимодействуют, и основана на решении задачи об обтекании током единичного сферического включения с заданным однородным электрическим полем на бесконечности. Осреднение осуществляется вычислением интеграла по объему, характеризующего вклад включений в поле и ток, с характерным масштабом много больше расстояния между включениями. Следуя Максвеллу, эффективную проводимость $\sigma^*(\sigma_1, \sigma_2, c_2)$ можно представить в виде

$$\sigma^* = \sigma_1 \left(1 - 3c_2 \frac{(\sigma_1 - \sigma_2)}{\sigma_2 + 2\sigma_1} \right), \quad (1.1)$$

где σ_1 – проводимость среды; σ_2 – проводимость включения; c_2 – объемная концентрация включений, $c_1 + c_2 = 1$. Максвелл также задал вместо поля ток на бесконечности и провел аналогичные выкладки в терминах удельного сопротивления:

$$\rho^* = \rho_1 \left(1 + 3c_2 \frac{(\rho_2 - \rho_1)}{\rho_1 + 2\rho_2} \right). \quad (1.2)$$

Тогда, вновь перейдя к проводимости

$$\sigma^* = \frac{\sigma_1}{\left(1 - 3c_2 \frac{(\sigma_2 - \sigma_1)}{\sigma_2 + 2\sigma_1} \right)} \quad (1.3)$$

и рассматривая $\sigma_2 \gg \sigma_1$ можно получить расхожимость эффективной проводимости, претендующую на описание при $c_2 = 1/3$ перколяционного эффекта. Перколяционный эффект заключается в появлении макроскопической связности элементарных структурных элементов проводящей фазы в гетерогенной среде. Формула (1.1) не описывает перколяционный переход. При больших концентрациях модель Максвелла оказывается не пригодной.

Модель Эйнштейна для суспензий [16]. В данной модели учитывается какое влияние оказывает шар на течение в жидкости с постоянным градиентом скорости в приближении Стокса. Градиент скорости однороден, задан на бесконечности. Предполагается, что шарики вносят малый вклад и не взаимодействуют (малые концентрации и скорости), то есть вклад возмущенного течения, обусловленного включением, мал. Затем находится средний вклад напряжения по бесконечному объему с учетом включений, что дает поправку в коэффициент вязкости. Выражение для эффективной вязкости получается таким

$$\eta^* = \eta_1 + \frac{5}{2} c_2 \eta_1 \quad (1.4)$$

η^* – эффективная вязкость, η_1 – вязкость жидкости, c_2 – концентрация твердого включения (мала).

Модель Релея [15]. Рассматривается двумерная матрица с двоякопериодическим расположением включений круговой формы. Концентрация включений считается малой. Электрическое поле однородно, периодически. Включения не взаимодействуют. В ходе решения уравнения Лапласа для элементарной ячейки периодической структуры вычислялись потенциалы посредством интегрирования по объему ячейки. Для эффективной диэлектрической проницаемости было найдено несколько первых членов вириального разложения – разложение по отношению радиуса включения к полупериоду решетки. В рамках данной модели впервые осуществлено использование вириального разложения для гетерогенных сред, также модель является основой для клеточной теории (см. ниже). Модель согласуется с результатом подхода [2] в случае малой концентрации включений без выполнения вириального разложения.

Метод вириального разложения [11, 17]. Отличие от моделей Максвелла и Эйнштейна основывается на том, что в рамках метода осуществляется разложение эффективных модулей в ряд по объемной концентрации включений, которая предполагается малой. Для разупорядоченных структур по мере разложения в ряд по концентрациям точность почти не увеличивается, т.к. в методе игнорируется искажение поля, обусловленное включениями сферической формы. Как правило, в рамках данного метода наибольший интерес представляет только первый член разложения. Эффективные модули упругости (модули податливости находятся по аналогии) согласно авторам метода М.А. Кривоглаза и А.С. Черевко выглядят следующим образом

$$\begin{aligned} K^* &= K_1 \left[1 + \frac{(1 - \nu_1)(K_2 - K_1)c_2}{2K_1(1 - 2\nu_1) + K_2(1 + \nu_1)} \right], \\ \mu^* &= \mu_1 \left[1 + \frac{15(1 - \nu_1)(\mu_2 - \mu_1)c_2}{\mu_1(7 - 5\nu_1) + 2\mu_2(4 - 5\nu_1)} \right], \end{aligned} \quad (1.5)$$

Здесь K_i, μ_i, ν_i – объемный модуль, модуль сдвига и коэффициент Пуассона фазы i . Из формул (1.5), как частный случай, следует выражение для пористой среды $K_2, \mu_2 = 0$ с малой концентрацией пор:

$$K^* = K_1 \left[1 - \frac{3(1 - \nu_1)c_2}{2(1 - 2\nu_1)} \right], \quad \mu^* = \mu_1 \left[1 - \frac{15(1 - \nu_1)c_2}{7 - 5\nu_1} \right]. \quad (1.6)$$

Для упорядоченных структур, как в моделях типа Релея точность при разложении в ряд по концентрациям увеличивается, но это уже касается клеточной теории. Здесь включения искажают поле.

В ранних работах эффективные материальные тензоры гетерогенных систем определялись правилом механического смешивания, которое можно интерпретировать как соединение в электрических цепях. На примере изотропных модулей упругости [11] имеют место формулы

$$\begin{aligned} \langle K \rangle &= \sum c_i K_i, & \langle \mu \rangle &= \sum c_i \mu_i, \\ \langle 1/K \rangle &= \sum c_i / K_i, & \langle 1/\mu \rangle &= \sum c_i / \mu_i, \end{aligned} \quad (1.7)$$

где суммирование ведется по фазам. Данная модель обобщается комбинацией последовательного и параллельного соединений – модель Такаянаги [11].

Существует подход Хилла – вилка Хилла [11]. Эффективные модули упругости K^*, μ^* ограничены соответственно

$$\langle 1/K \rangle \leq K^* \leq \langle K \rangle, \quad \langle 1/\mu \rangle \leq \mu^* \leq \langle \mu \rangle. \quad (1.8)$$

Существует также эмпирический метод вычисления эффективных модулей упругости

$$\lg K^* = \sum c_i \lg K_i, \quad \lg \mu^* = \sum c_i \lg \mu_i,$$

который так или иначе следует из требования совпадения результатов осреднения тензоров модулей упругости и податливости.

Представленные выше подходы заложили аналитическую основу по исследованию гетерогенных сред. В рамках данных подходов спектр рассматриваемых условий сильно ограничен в силу заложенных в них предположений. Базируясь на данных подходах, далее были созданы более комплексные модели.

Метод самосогласованного поля [11, 13, 19–21]. В рамках этой модели также рассматривается уединенное внешнее включение сферической, цилиндрической форм в однородном поле. Основное отличие от метода вириального разложения

заключается в том, что на большом расстоянии от включения материальные модули принимаются равными эффективным модулям среды, а не модулям матрицы – вводится переходный слой. Эффективными свойствами отображается гетерогенная среда в целом, эти свойства направлены отобразить коллективное поведение фаз. Допущение данной модели заключается в устремлении переходного слоя к нулю. Исходя из данного допущения решение ищется также, как в подходах [14, 17]. Первое применение метода самосогласованного поля – Модель Бруггемана [20]. Подход направлен на описание электропроводности в гетерогенных средах. Эффективная проводимость получается следующей:

$$\sigma^* = \frac{1}{4} \left((3c_2 - 1)\sigma_2 + (2 - 3c_2)\sigma_1 + \sqrt{((3c_2 - 1)\sigma_2 + (2 - 3c_2)\sigma_1)^2 + 8\sigma_1\sigma_2} \right) \quad (1.9)$$

и является наиболее эффективным описанием проводимости в микронеоднородных системах на сегодняшний день – достаточно точно описывает всю область по концентрациям и перколяционный переход [22, 23] при $\sigma_2 \gg \sigma_1$ с критической точкой $c_2 = 1/3$. Однако, исходя из численного расчета и эксперимента при немалых концентрациях (включая критическую область $c_2 \sim 1/3$) формула (1.9) недостаточно точно описывает проводимость в гетерогенной среде.

В рамках данной модели приведем пример полученных эффективных модулей упругости для n -фазного композитного материала с изотропными упругими модулями фаз

$$\sum_{i=1}^n \frac{c_i}{1 + \frac{K^*}{K^* + \frac{4}{3}\mu^*} \left(\frac{K_i}{K^*} - 1 \right)} = 1, \quad (1.10)$$

$$\sum_{i=1}^n \frac{c_i}{1 + \frac{2}{5} \frac{(K^* + 2\mu^*)}{K^* + \frac{4}{3}\mu^*} \left(\frac{\mu_i}{\mu^*} - 1 \right)} = 1.$$

Найденные неявные взаимозависимые формулы сводятся к алгебраическому уравнению четвертой степени на μ^*

Эффективные модули поликристалла впервые найдены в работах Кронекера [21, 24], с учетом подхода Дж. Эшелби для расчета дислокаций [11, 25], в результате которого была построена континуальная теория дислокаций. Подход Дж. Эшелби к получению эффективных коэффициентов переноса отличается в математическом формализме. Для нахождения смещений используется аппарат функций Грина. Причем выделяются разные типы смещений, деформаций и напряжений, действующих на включение. Это связано с принципом взаимодействия с включением в рамках метода. Вначале в извлеченном из матрицы включении создаются пластические деформации (напряжения при этом в нем зануляются). Затем к его поверхности прикладываются такие напряжения, которые возвращают ему начальную форму. Далее включение возвращают в матрицу, где последние напряжения перестают прикладывать. Описанное взаимодействие производится с включением, обладающим искомыми эффективными свойствами.

Полученное в рамках метода самосогласованного поля решение не учитывает границы раздела фаз и, как следствие, ограниченно описывает коллективное взаимодействие фаз. Имеющийся учет коллективного взаимодействия фаз является следствием того, что включение окружено средой с (искомыми) эффективными свойствами. Вероятно, метод самосогласованного следует считать первой наиболее успешной сформировавшейся моделью по описанию гетерогенных сред. *Клеточная модель* [12, 26, 27]. Метод берет начало от модели Релея и получил широкое распространение. Относится к матричным структурам с геометрически правильными включениями (цилиндрическими и сферическими). В этой модели осуществляется поиск решения для элементарной ячейки с одним или несколькими включениями, которое строится методом сопряжения решений для однородных фрагментов. Методу свойственно большее число эффективных постоянных по сравнению с реальными материалами, что обусловлено понижением симметрии вследствие регуляризации структуры. Стохастическая структура материала не рассматривается, а если есть необходимость – заменяется регулярной структурой с определенной периодичностью по координатам.

Теория смесей [11, 12, 28] – континуальная модель, построенная на принципе гомогенизации структурно-неоднородной среды, в основе которой лежит введение средних по каждому компоненту в пределах элементарного макрообъема (макроточки) следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle \varphi^\gamma \rangle(\mathbf{x}) &= \frac{1}{V} \int_{V_\gamma} \varphi^\gamma(\mathbf{x} + \mathbf{x}') dV, \\ \langle \varphi^\gamma \rangle_\gamma(\mathbf{x}) &= \frac{1}{V_\gamma} \int_{V_\gamma} \varphi^\gamma(\mathbf{x} + \mathbf{x}') dV, \\ \langle \varphi^\gamma \rangle &= c_\gamma \langle \varphi^\gamma \rangle_\gamma, \end{aligned} \tag{1.11}$$

где V – объем макроточки – область, достаточно большая по сравнению с характерным размером неоднородностей, V_γ – объем γ фазы в объеме V , $c_\gamma = \frac{V_\gamma}{V}$ – объемная концентрация γ фазы, $\varphi^\gamma(\mathbf{x} + \mathbf{x}')$ – поле γ фазы в макроточке $\mathbf{x} + \mathbf{x}'$, $\langle \varphi^\gamma \rangle(\mathbf{x})$ – осредненное поле γ фазы в макроточке \mathbf{x} , размазанное по объему V , $\langle \varphi^\gamma \rangle_\gamma(\mathbf{x})$ – истинное поле γ фазы в макроточке \mathbf{x} .

Переход к макрополям (осредненным полям) позволяет обойти случайные флуктуации микрополей. Это возможно, если характерные масштабы процессов, происходящих в микронеоднородной среде, значительно превышают соответствующие масштабы неоднородностей. Итак, для корректного использования теории смесей необходима возможность выбора большого числа макроточек, макрополя в которых представляют собой гладкие функции, которые можно интегрировать по произвольным макрообъемам и макроповерхностям. Согласно работе Р.И. Нигматулина [28] эти условия называются устойчивостью, регулярностью и представительностью.

Для получения итоговых осредненных уравнений из стохастических необходимо знать, как происходит процедура осреднения по фазам производных полей по пространственным и временным координатам. Данная процедура называется пространственной теоремой осреднения и имеет вид

$$c_\gamma \langle \partial_i \varphi^\gamma \rangle_\gamma = \partial_i (c_\gamma \langle \varphi^\gamma \rangle_\gamma) + \frac{1}{V} \int_{S_{12}} \varphi^\gamma n_i ds, \quad (1.12)$$

где S_{12} – межфазная поверхность, n_i – нормаль к межфазной поверхности.

Из формулы (1.12) видно, что $\langle \partial_i \varphi^\gamma \rangle_\gamma \neq \partial_i \langle \varphi^\gamma \rangle_\gamma$. Формула (1.12) формирует основу пространственной теории смесей. Вывод формулы (1.12) осуществляется [28] с использованием формулы Гаусса – Остроградского и свойства представительности. Аналогичным образом проводится осреднение по фазам производных полей по времени.

Таким образом, подход теории смесей учитывает конфигурацию внутренних границ раздела фаз. Этим интегралам по межфазным поверхностям $\frac{1}{V} \int_{S_{12}} \varphi^\gamma n_i ds$ нет аналогов в однофазных средах.

С учетом выражения $\sum_\gamma c_\gamma = 1$ задача сводится к построению замкнутой системы уравнений относительно средних параметров и определению эффективных постоянных гетерогенного материала по заданным физическим свойствам компонентов и геометрическим параметрам структуры. На данный момент в рамках теории смесей не существует точного определения и строгого обоснования замкнутых уравнений с входящими в них постоянными параметрами. Соответствующее определение является проблемным как в теоретическом, так и экспериментальном плане. Проблему представляют межфазные интегралы $\frac{1}{V} \int_{S_{12}} \varphi^\gamma n_i ds$ и осреднение нелинейностей по типу $\langle \psi^\gamma \varphi^\gamma \rangle_\gamma$. В подходе теории смесей также, фактически, отсутствует алгоритм нахождения эффективных коэффициентов переноса.

Рассмотрим появление межфазных взаимодействий на примере рассмотрения упругих свойств двухфазной гетерогенной среды в случае малых деформаций при постоянной концентрации фаз.

$$\begin{aligned} \partial_j \sigma_{ij} &= 0, & \sigma_{ij} &= \lambda_{ij\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta}, \\ \varepsilon_{\alpha\beta} &= I_{\alpha\beta mn} \partial_n u_m, & I_{\alpha\beta mn} &= \frac{1}{2} (\delta_{\alpha m} \delta_{\beta n} + \delta_{\alpha n} \delta_{\beta m}). \end{aligned} \quad (1.13)$$

Проведем осреднение системы (1.13):

$$\begin{aligned}
c_\gamma \partial_j \langle \sigma_{ij}^\gamma \rangle - (-1)^\gamma R_i &= 0, & c_\gamma \langle \sigma_{ij}^\gamma \rangle &= c_\gamma \lambda_{ij\alpha\beta}^\gamma \langle \varepsilon_{\alpha\beta}^\gamma \rangle, \\
c_\gamma \langle \varepsilon_{\alpha\beta}^\gamma \rangle &= c_\gamma I_{\alpha\beta mn} \partial_n \langle u_m^\gamma \rangle - (-1)^\gamma K_{\alpha\beta}, \\
R_i &= \frac{1}{V} \int_{S_{12}} \sigma_{ij}^\gamma n_j ds; & K_{\alpha\beta} &= \frac{1}{V} \int_{S_{12}} u_\alpha^\gamma n_\beta ds, \\
c_1 + c_2 &= 1,
\end{aligned} \tag{1.14}$$

где $\gamma = 1, 2$; R_i – межфазная сила взаимодействия; $K_{\alpha\beta}$ описывает межфазные смещения. Число искомых парциальных параметров удвоилось – удвоилось число напряжений, тензоров деформаций (соотношений Коши) и перемещений. Уравнение на смещения для γ фазы запишется в виде

$$c_\gamma \lambda_{ij\alpha\beta}^\gamma \partial_\beta \partial_j \langle u_\alpha^\gamma \rangle - (-1)^\gamma \lambda_{ij\alpha\beta}^\gamma \partial_j K_{\alpha\beta} - (-1)^\gamma R_i = 0. \tag{1.15}$$

Тензоры по типу $K_{\alpha\beta}$ обычно принимаются равными нулю (действие является недостаточно обоснованным).

Анализ межфазных взаимодействий является одной из центральных проблем при описании процессов (вязких, упругих, термоэлектрических и т.д.), происходящих в микронеоднородных системах. Согласно монографии Л.П. Хорошуна [12], в ранних работах межфазные силы R_i упругих сред принимались пропорциональными разности скоростей, по аналогии с вязкими гетерогенными средами. Кроме того, принимались зависимости от парциальных деформаций, скоростей деформаций фаз. Далее, исходя из физических соображений и аналогии с вязкими гетерогенными средами, межфазные силы принимались пропорциональными разности парциальных смещений $R_i \propto \langle u_j^1 \rangle - \langle u_j^2 \rangle$. И, наконец, в ряде работ, посвященных задачам динамики упругих сред, $R_i \propto \langle \dot{u}_j^1 \rangle - \langle \dot{u}_j^2 \rangle$ – так называемый инерционный механизм.

Даже если все эти пропорциональности корректны, это не избавляет от необходимости нахождения соответствующих постоянных теории смесей. В отличие от однофазной среды, где экспериментальное построение строится на создании однородных деформаций или напряжений, в гетерогенных средах такое

экспериментальное осуществление статистически однородных парциальных деформаций и градиентов парциальных деформаций, входящих в межфазную силу невозможно. Математическая формулировка задачи об определении постоянных теории смесей производится для макроскопически неоднородного напряженно-деформированного состояния. Для преодоления проблемы рассматриваются приближенные методы [12].

Аналогично, при рассмотрении вязких сред (суспензии, аэрозоли, эмульсии) вопрос корректного определения межфазной силы остается открытым. В ряде работ, например работе Николаевского, полагается пропорциональность $R_i \propto (\langle v_i^1 \rangle - \langle v_i^2 \rangle)$. Разность скоростей можно интерпретировать как следствие рассмотрения вязких свойств гетерогенной среды, что обобщает решение Стокса по обтеканию шара.

В работе Х.А. Рахматулина [29] в межфазную силу взаимодействия был введен член $-\partial_i c_2 \langle p \rangle$, что позволило корректно описывать вязкие микронеоднородные среды в случае пространственно-неоднородной среды.

При анализе межфазных интегралов используют гипотезу эргодичности [11, 30], при которой пространственное (и/или временное) осреднение совпадает со статистическим осреднением по ансамблю реализаций. Эргодичность случайных полей имеет место для статистически изотропной среды с малым масштабом корреляции относительно характерных масштабов процессов в задаче.

К вышесказанным проблемам, связанным с анализом межфазных интегралов, следует добавить то, что в общем случае параметры компонентов на границе фаз не равны. Например, при рассмотрении микронеоднородной упругой среды могут проявляться эффекты концентрации напряжений, связанные с изгибом, кручением, образованием пор и дефектов. Также гетерогенным средам может быть свойственна расплывчатость границы – ситуация, в которой свойства микронеоднородной системы отклоняются от своего определения и связаны с переходным

слоем, неидеальной связью между компонентами. В термоэлектрических эффектах могут проявляться субмикронные и нанотуннельные контакты, возникающие вследствие малого размера, стохастической неоднородности включений и квазиклассичности описываемых явлений. Например, длина волны электрона сравнима с размером неоднородности. Если размер материала сравним с размером неоднородности, то возникает масштабный эффект.

Другой проблемой осреднения фаз гетерогенной среды по объему является осреднение нелинейных слагаемых в анализируемых уравнениях. Одним из самых известных примеров осреднения нелинейности является осреднение по времени уравнения Навье – Стокса, которое впервые осуществил Рейнольдс описывая явление турбулентности. При осреднении были получены следующие уравнения

$$\rho \left(\frac{\partial V_i}{\partial t} + V_j \frac{\partial V_i}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \rho \overline{v_i v_j} \right), \quad (1.16)$$

где V_i, P – скорость и давление осредненного потока; v_i – турбулентные пульсации скорости $\rho \overline{v_i v_j}$ – тензор напряжений Рейнольдса. Отличие от уравнений Навье – Стокса проявляется в тензоре напряжений Рейнольдса, для замыкания которого нужно использовать дополнительные подходы и гипотезы. Для решения данной проблемы, например, прибегают к статистическим методам, в результате которых в общем случае получается бесконечная цепочка уравнений на моменты различного порядка и типа, демонстрирующая проблему многих тел. Соответствующую цепочку “обрубают” на определенном шаге, основываясь на определенных гипотезах. Простейшим решением при этом является пренебрежение флуктуациями параметров.

Рейнольдс писал уравнения с соответствующим их осреднением для однофазной жидкости. Но существуют работы [31–33] (включающие гипотезу с математическим формализмом), описывающие течение жидкости, как следствие де-

фектов в ней. При этом дефекты ответственны за ламинарно-турбулентный переход. В этом смысле жидкость уже не является однофазной системой, а является гетерогенной.

Перед тем как перейти к рассмотрению статистических подходов, следует отметить методы, связанные с написанием корректного типа уравнений в операторном (функциональном) плане. В гидродинамике уравнения теории смесей строятся путем обобщения силы Босэ, Стокса, Архимеда как пример, – гиперболическая модель В.Ф. Куропатенко [34] для аэрозолей.

Одним из основных принципов, необходимых для получения осредненных уравнений с входящими эффективными коэффициентами, является теория случайных функций [35]. Гетерогенные материалы, как правило, имеют стохастический характер распределения фаз, что оправдывает осреднение по ансамблю реализаций. Применительно к механике сплошной среды математический аппарат осреднения по ансамблю реализаций был развит вначале в теориях турбулентности и рассеяния волн в неоднородной атмосфере. В настоящее время теория случайных функций широко используется для решения самых разнообразных задач.

Задача об определении осредненных свойств формулируется для бесконечного статистически однородного тела, полевые и материальные характеристики которого являются случайными функциями координат. Если тело конечное или нагрузки неоднородны, то получить достаточно точное решение для кусочно-однородных областей практически невозможно. Как правило, для описания физико-механических процессов в структурно-неоднородных телах применяются континуальные модели, построенные на принципе “гомогенизации” структурно-неоднородной среды. Использование этих моделей возможно вследствие того, что характерный масштаб физико-механических процессов и размеры тел значительно превышают характерные размеры неоднородностей.

Прежде чем анализировать методы описания гетерогенных сред статистическими подходами, приведем соответствующие общие сведения. Будем рассматривать

уравнения в безындексной форме на примере теории упругости. Используем символы теории упругости (в большинстве), но это не значит, что акцентируем внимание на теории упругости. Запишем закон Гука

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{r})\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}), \quad (1.17)$$

здесь $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r})$, $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r})$ – полевые тензоры, $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{r})$ – материальный тензор. В статистических подходах данные тензоры являются случайными функциями координат. Проведем статистическое осреднение уравнения (1.17):

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) \rangle &= \langle \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{r})\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) \rangle = \langle \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{r}) \rangle \langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) \rangle + \langle \boldsymbol{\lambda}'(\mathbf{r})\boldsymbol{\varepsilon}'(\mathbf{r}) \rangle, \\ \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) \rangle &= \boldsymbol{\lambda}^* \langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) \rangle, \end{aligned} \quad (1.18)$$

где $\boldsymbol{\lambda}^*$ – искомый эффективный тензор, $\langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) \rangle$, $\langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) \rangle$ – средние значения тензоров полей; $\boldsymbol{\lambda}'(\mathbf{r})$, $\boldsymbol{\varepsilon}'(\mathbf{r})$ – флуктуации материального тензора и тензора поля (деформаций). Получение теоретически точного решения возможно только при полностью известной структуре материала, но для этого также необходимо решить задачу многих тел. В силу линейности рассматриваемых процессов имеем выражение

$$\boldsymbol{\varepsilon}'(\mathbf{r}) = \mathbf{Q}' \langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (1.19)$$

подставляя которое в формулу (1.18), получим выражение

$$\boldsymbol{\lambda}^* = \langle \boldsymbol{\lambda} \rangle + \langle \boldsymbol{\lambda}' \mathbf{Q}' \rangle. \quad (1.20)$$

здесь \mathbf{Q}' – представляет собой интегральный оператор, который в общем случае является набором бесконечной кратности интегралов, что содержит в себе проблему многих тел. Задача сводится к поиску \mathbf{Q}' . В разных теориях проводят замыкание интегрального оператора на определенном шаге, в связи с чем ядра \mathbf{Q}' описывают двух- и многочастичные взаимодействия.

Искомый эффективный модуль $\boldsymbol{\lambda}^*$ входит в осредненное уравнение, которое представим в виде

$$\mathbf{L}^* \langle \mathbf{u} \rangle = -\mathbf{F}, \quad \mathbf{L}^* = \boldsymbol{\lambda}^* \nabla^2, \quad (1.21)$$

где \mathbf{F} – объемный источник процесса, \mathbf{L}^* – эффективный дифференциальный оператор, ∇ – единичная пространственная производная, $\langle \mathbf{u} \rangle$ – осредненный вектор смещений. Уравнение (1.21) получается из исходного уравнения

$$\mathbf{L}(\mathbf{r})\mathbf{Z}(\mathbf{r}) = -\mathbf{F}, \quad \mathbf{L}(\mathbf{r}) = \nabla\lambda(\mathbf{r})\nabla \quad (1.22)$$

путем статистического осреднения

$$\langle \mathbf{L} \rangle \langle \mathbf{u} \rangle + \langle \mathbf{L}' \mathbf{u}' \rangle = -\mathbf{F}. \quad (1.23)$$

С учетом связи, вытекающей из линейности

$$\mathbf{u}' = \mathbf{X} \langle \mathbf{u} \rangle, \quad (1.24)$$

которую для перехода к (1.21) нужно найти, эффективный дифференциальный оператор примет вид

$$\mathbf{L}^* = \langle \mathbf{L} \rangle + \langle \mathbf{L}' \mathbf{X} \rangle. \quad (1.25)$$

Из формулы (1.25) в конечном счете следует (1.20). Представленные ниже методы ставят целью нахождение \mathbf{X} и как следствие \mathbf{Q}' (из оператора \mathbf{X} следует \mathbf{Q}').

Корреляционное приближение теории случайных функций [36, 37]. Является одной из первых моделей, в рамках которой учитываются лишь парные взаимодействия между элементами неоднородностей и, вообще говоря, представляет собой частный случай более точных моделей. Эффективные коэффициенты Ламе находятся при рассмотрении однородных деформаций (схема Фойгта [38]). Эффективные коэффициенты податливости находятся при рассмотрении однородных напряжений (схема Ройсса [39]). Анализируется малый параметр – разность модулей упругости, возникающий как разница уравнений (1.22) и (1.23):

$$\langle \mathbf{L} \rangle \mathbf{u}' + \mathbf{L}' \langle \mathbf{u} \rangle + (\mathbf{L}' \mathbf{u}' - \langle \mathbf{L}' \mathbf{u}' \rangle) = 0. \quad (1.26)$$

Соответствующим членом в скобках пренебрегают. Вводится регулярный оператор \mathbf{M}^0

$$\mathbf{M}^0 \langle \mathbf{L} \rangle = -\mathbf{I}, \quad (1.27)$$

ядром которого является тензор Грина, не имеющий флуктуаций.

Выражение для X как связь \mathbf{u}' с $\langle \mathbf{u} \rangle$ имеет вид

$$\mathbf{u}' = \mathbf{M}^0 \mathbf{L}' \langle \mathbf{u} \rangle, \quad X = \mathbf{M}^0 \mathbf{L}' = \mathbf{G} * \mathbf{L}', \quad (1.28)$$

где \mathbf{G} – тензор Грина, $*$ – операция свертки. Эффективный дифференциальный оператор представится в виде

$$\mathbf{L}^* = \langle \mathbf{L} \rangle + \langle \mathbf{L}' \mathbf{M}^0 \mathbf{L}' \rangle = \langle \mathbf{L} \rangle + \langle \mathbf{L}' \mathbf{G} * \mathbf{L}' \rangle, \quad (1.29)$$

тогда эффективное уравнение запишется как

$$\langle \mathbf{L} \rangle \langle \mathbf{u} \rangle + \langle \mathbf{L}' \mathbf{G} * \mathbf{L}' \rangle \langle \mathbf{u} \rangle = -\mathbf{F}. \quad (1.30)$$

Второй член в (1.30) представляет собой осредненный интеграл от свертки

$$\langle \nabla \lambda'(\mathbf{r}) \nabla \int_V \mathbf{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \nabla_1 \lambda'(\mathbf{r}_1) \nabla_1 \langle \mathbf{u}(\mathbf{r}_1) \rangle d\mathbf{r}_1 \rangle. \quad (1.31)$$

В методе вводится бинарная корреляционная функция

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = \langle \lambda(\mathbf{r}) \lambda(\mathbf{r}_1) \rangle, \quad (1.32)$$

которая для стохастических полей $\mathbf{B}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = \mathbf{B}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) = A\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)$ обращается в нуль на бесконечности. Для сведения к бинарной корреляционной функции осредненный интеграл (1.31) преобразуется путем интегрирования по частям, в результате чего образуется поверхностный интеграл, образующийся в нуль для бесконечной области (исходя из корреляционной функции). Тензор деформаций $\nabla_1 \langle \mathbf{u}(\mathbf{r}_1) \rangle = \langle \nabla_1 \mathbf{u}(\mathbf{r}_1) \rangle$ выносится из под знака интеграла исходя из предположения об однородности или квазиоднородности полей в пределах, где подынтегральная функция существенно отлична от нуля.

В результате получается поправка к $\langle \lambda \rangle$ в виде следующего интеграла:

$$\lambda^* = \langle \lambda \rangle + \int_V \nabla^2 \mathbf{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \mathbf{B}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1, \quad (1.33)$$

который вычисляется при помощи теоремы Парсеваля. Выполнив свертку индексов для \mathbf{A} , получим эффективные модули упругости для двухфазного композитного материала:

$$\begin{aligned}
 K^* &= \langle K \rangle - \frac{c_1 c_2 (K_1 - K_2)^2}{\langle K + \frac{4}{3} \mu \rangle}, \\
 \mu^* &= \langle \mu \rangle - \frac{2c_1 c_2 (\mu_1 - \mu_2)^2 \langle K + 2\mu \rangle}{5\langle \mu \rangle \langle K + \frac{4}{3} \mu \rangle}.
 \end{aligned}
 \tag{1.34}$$

Эти коэффициенты не образуют вилку (как Хилла, так и Хашина – Штрикмана).

Сингулярное приближение теории случайных функций [11, 40], позволяет учесть все типы многочастичных взаимодействий, на основе однородности поля в пределах данного компонента (размазывание). Предположение является следствием интегрального оператора свертки, ядром которого при преобразовании, аналогичном корреляционному приближению, является дифференциальный оператор второго порядка, действующий на тензор Грина, от которого учитывается лишь сингулярная составляющая.

В рамках сингулярного приближения эффективные коэффициенты можно найти разложением интегральных операторов в ряды и базируясь на понятии “тела сравнения”. Представим вначале первый способ.

Но перед этим обсудим концепт: “тело сравнения”. В методах [11, 12, 41–46] информацию о микроструктуре системы пытаются учесть через так называемую гипотезу о теле сравнения. Суть гипотезы заключается во введении феноменологических коэффициентов переноса, которые задаются исходя из данных эксперимента или других соображений. Если эти параметры тела сравнения положить равными искомым эффективным параметрам, то найденные эффективные коэффициенты совпадут с методом самосогласованного поля. На данную эквивалентность указывается в работе [2] на примере исследования упругих свойств гетерогенной среды.

На базе дифференциального оператора L вводится интегральный оператор M , регулярный интегральный оператор M^0 и регулярный дифференциальный оператор L^0 :

$$ML = -I, \quad M^0 \langle L \rangle = -I, \quad \langle M \rangle L^0 = -I. \quad (1.35)$$

Выражение для X как связь u' с $\langle u \rangle$ с учетом (1.28) имеет вид

$$\begin{aligned} u' &= -(ML^0 + I)\langle u \rangle, \\ X &= -(ML^0 + I). \end{aligned} \quad (1.36)$$

Для нахождения интегрального оператора Q' нужно знать X , который находится путем разложения операторов M, L^0 в ряды с учетом (1.35) по аргументу $M^0 L'$. Далее соответствующие ряды подставляются в выражение для X (1.36). Затем в компоненте для эффективного дифференциального оператора $\langle L' X \rangle$ в уравнении (1.25) из каждой свертки, образованной циклическим набором $M^0 L'$, интегрированием по частям (по аналогии с корреляционным методом) выделяется дифференциальный оператор второго порядка, действующий на функцию Грина. Рассматривается лишь сингулярная часть производной. В результате отбрасывания формальной части в уравнении для определения эффективного полевого тензора (1.31) получается интегральный оператор Q' , не зависящий от координаты – операторный ряд свелся к алгебраическому и представляет собой набор центрированных случайных величин, образующих геометрическую прогрессию, из расчета которой получают эффективные модули. По сути, конечный Q' в виде ряда направлен учесть все типы многочастичных взаимодействий. Для композитного двухфазного материала получим:

$$\begin{aligned} K^* &= \langle K \rangle - \frac{c_1 c_2 (K_1 - K_2)^2}{c_1 K_2 + c_2 K_1 + \frac{4}{3} \langle \mu \rangle}, \\ \mu^* &= \langle \mu \rangle - \frac{c_1 c_2 (\mu_1 - \mu_2)^2}{c_1 \mu_2 + c_2 \mu_1 + \frac{\langle \mu \rangle (9K + 8\mu)}{6(K + 2\mu)}}. \end{aligned} \quad (1.37)$$

Такой подход точнее корреляционного метода, который следует как частный случай при пренебрежении всеми членами геометрической прогрессии кроме первого.

Перейдем к сингулярному методу, который базируется на теле сравнения, – *обобщенному сингулярному приближению* [11]. Тело сравнения, как и в вариационном

методе, полагается однородным и является удобным инструментом при нахождении эффективных модулей.

К уравнению (1.22) добавляется аналогичное уравнение для тела сравнения, и система принимает вид

$$\mathbf{L}\mathbf{u} = -\mathbf{F}, \quad \mathbf{L}^c\mathbf{u}^c = -\mathbf{F}, \quad (1.38)$$

где \mathbf{L}^c – дифференциальный оператор тела сравнения $\mathbf{L}^c = \lambda^c \nabla \nabla$, λ^c – материальный тензор тела сравнения, не зависящий от координат. В рамках метода штрихом обозначается разница между истинными величинами и параметрами тела сравнения, двумя штрихами – разность между истинными параметрами и центрированными:

$$\begin{aligned} \lambda - \lambda^c &= \lambda', & \lambda - \langle \lambda \rangle &= \lambda'', \\ \mathbf{u} - \mathbf{u}^c &= \mathbf{u}', & \mathbf{u} - \langle \mathbf{u} \rangle &= \mathbf{u}'', \\ \mathbf{L} - \mathbf{L}^c &= \mathbf{L}', & \mathbf{L} - \langle \mathbf{L} \rangle &= \mathbf{L}''. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Вычитая одно из другого в (1.38), получим

$$\mathbf{L}^c\mathbf{u}' = -\mathbf{L}'\mathbf{u}. \quad (1.40)$$

Вводится функция Грина оператора \mathbf{L}^c и решение представляется в виде

$$\mathbf{u}' = \mathbf{G} * \mathbf{L}'\mathbf{u}. \quad (1.41)$$

Далее, в результате дифференцирования (1.41) и интегрирования по частям

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}' &= \int_S \nabla \mathbf{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \lambda'(\mathbf{r}_1) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}_1) d\mathbf{s}_1 + \\ &+ \int_V \nabla^2 \mathbf{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \lambda'(\mathbf{r}_1) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 \end{aligned} \quad (1.42)$$

где $\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla \mathbf{u}$, $\boldsymbol{\varepsilon}' = \nabla \mathbf{u}'$.

Проводя вычитание между равенством (1.42) и осредненным (1.42), получим

$$\boldsymbol{\varepsilon}' - \langle \boldsymbol{\varepsilon}' \rangle = \int_S \nabla \mathbf{G}(\lambda' \boldsymbol{\varepsilon} - \langle \lambda' \boldsymbol{\varepsilon} \rangle) d\mathbf{s} + \int_V \nabla^2 \mathbf{G}(\lambda' \boldsymbol{\varepsilon} - \langle \lambda' \boldsymbol{\varepsilon} \rangle) d\mathbf{r}_1. \quad (1.43)$$

Индексы координат опущены. В поверхностном интеграле интегрирование ведется по бесконечно удаленной поверхности, размеры которой значительно превышают пространственные масштабы корреляций, что эквивалентно статистическому осреднению – гипотеза эргодичности. В связи с этим центрированный поверхностный интеграл обращается в нуль.

В результате выкладок в равенстве (1.43) ε выражается через $\langle \varepsilon \rangle$ и учитывается лишь сингулярная часть $\nabla^2 \mathbf{G}$, также учитывается равенство $\langle \lambda \varepsilon \rangle = \lambda^* \langle \varepsilon \rangle$, что в итоге определяет λ^* . Для двухфазного композита эффективные упругие модули представляются как

$$\begin{aligned} K^* &= c_1 K_1 + c_2 K_2 - \frac{c_1 c_2 (K_1 - K_2)^2}{c_1 K_2 + c_2 K_1 + \frac{4}{3} \mu^c}, \\ \mu^* &= c_1 \mu_1 + c_2 \mu_2 - \frac{c_1 c_2 (\mu_1 - \mu_2)^2}{c_1 \mu_2 + c_2 \mu_1 + \frac{\mu^c (9K^c + 8\mu^c)}{6(K^c + 2\mu^c)}}. \end{aligned} \quad (1.44)$$

Слагаемые

$$\frac{4}{3} \mu^c \quad \frac{\mu^c (9K^c + 8\mu^c)}{6(K^c + 2\mu^c)}$$

Направлены выразить приближенное решение задачи многих тел. Если их положить равными нулю или бесконечности, то получится вилка Хилла.

При равенстве K^c, μ^c модулям одной из фаз получается вилка Хашина – Штрикмана, о которой пойдет речь далее при рассмотрении вариационного метода. Вообще говоря, варьируя K^c, μ^c можно добиться искомым точных значений K^*, μ^* . В рамках данной работы обсуждается равенство

$$K^c = K^*, \quad \mu^c = \mu^*, \quad (1.45)$$

приводящее к ряду интересных результатов [2, 5].

Теория эффективных модулей [12, 46]. Статистический метод, базирующийся на однородном состоянии полей в стационарном процессе, применительно к теории

упругости – однородное напряженно деформированное состояние. Макроскопические параметры – средние по элементарным макрообъемам, макроповерхностям, подчиняются классическим уравнениям гомогенной смеси. Функции считаются статистически однородными и масштаб корреляции пренебрежимо малым по сравнению с макрообъемом, который по сути представляет бесконечную область. Микроструктура среды, в результате корректной формулировки задачи об определении эффективных модулей, проявляется в эффективных модулях, связывающих макропараметры. Для нахождения эффективных модулей вводится регулярный дифференциальный оператор, на основе гипотезы о теле сравнения. В рамках такого подхода можно отследить проблему многих тел, т.е. общий вид \mathbf{Q}' , который можно упростить обрывом ряда – корреляционным приближением или одноточечным приближением.

Исходное уравнение с нулевыми объемными источниками имеет вид

$$\begin{aligned} \mathbf{L}(\mathbf{r})\mathbf{u}(\mathbf{r}) &= \mathbf{0} \\ \mathbf{L}(\mathbf{r}) &= \nabla\lambda(\mathbf{r})\nabla \end{aligned} \quad (1.46)$$

Рассматриваем ситуацию, в которой микронеоднородная среда находится в статистически однородном состоянии и однородном состоянии полей:

$$\langle \mathbf{u} \rangle = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle \mathbf{r}; \quad \nabla \langle \mathbf{u} \rangle = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle; \quad \mathbf{u} = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle \mathbf{r} + \mathbf{u}'. \quad (1.47)$$

В линейной теории упругости $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$ – осредненный тензор деформации, постоянный в пространстве.

Перепишем (1.46) в виде

$$\mathbf{L}^c \mathbf{u}' = -(\mathbf{L}(\mathbf{r}) - \mathbf{L}^c)\mathbf{u}(\mathbf{r}), \quad (1.48)$$

где \mathbf{L}^c – регулярный дифференциальный оператор, $\mathbf{L}^c = \lambda^c \nabla \nabla$, \mathbf{u}' – флуктуация поля смещений. Тензор λ^c – тензор тела сравнения, являющийся однородным изотропным объектом, с которым сопоставляется искомая гетерогенная среда. В последнем равенстве учтено $\mathbf{L}^c \langle \mathbf{u} \rangle = \mathbf{0}$, что представляет собой гипотезу теории эффективных модулей.

В рамках данной работы понятие тела сравнения представляет особый интерес, и соответствующий анализ будет приведен ниже. Правая часть (1.48) представляет собой объемный источник, являющийся следствием неоднородности рассматриваемой среды.

Для учета эффектов взаимодействия между элементами неоднородности используется тензор Грина – ядро L^c :

$$L^c G = -I\delta. \quad (1.49)$$

Решение (1.49) принимает вид

$$\mathbf{u}' = \mathbf{G} * (\mathbf{L}(\mathbf{r}) - L^c)\mathbf{u}. \quad (1.50)$$

Правая часть (1.50) является сверткой функции Грина с объемным источником, вызванным неоднородностью среды. По аналогии с обобщенным сингулярным методом теории случайных функций продифференцируем (1.50), проинтегрируем по частям и воспользуемся гипотезой эргодичности, переведя интегрирование по бесконечно удаленной поверхности в статистическое осреднение. Итоговое выражение приводится к виду

$$\boldsymbol{\varepsilon}' = \nabla \mathbf{G} * (\mathbf{L}(\mathbf{r}) - L^c)\mathbf{u}. \quad (1.51)$$

Перепишем последнее равенство в явном виде:

$$\boldsymbol{\varepsilon}'(\mathbf{r}) = \int_V \nabla^2 \mathbf{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) [(\lambda(\mathbf{r}_1) - \lambda^c)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}_1) - \langle (\lambda(\mathbf{r}_1) - \lambda^c)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}_1) \rangle] d\mathbf{r}_1. \quad (1.52)$$

Уравнение (1.52) можно разрешить методом теории возмущений, методом моментов и методом условных моментов (метод условных моментов применительно к теории эффективных модулей).

Метод теории возмущений [12] представляет истинное значение материального тензора и флуктуацию полевого тензора в виде

$$\lambda = \lambda^c + \zeta \tilde{\lambda}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}' = \sum_{k=0}^{\infty} \zeta^k \boldsymbol{\varepsilon}_k, \quad (1.53)$$

исходя из которого рекуррентным способом строится бесконечный ряд

$$\begin{aligned} \varepsilon'(\mathbf{r}_1) = & \sum_{k=2}^{\infty} \int_V \nabla^2 \mathbf{G}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \nabla^2 \mathbf{G}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \dots \nabla^2 \mathbf{G}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1}) \times \\ & \times [(\lambda(\mathbf{r}_2) - \lambda^c)(\lambda(\mathbf{r}_3) - \lambda^c) \dots (\lambda(\mathbf{r}_k) - \lambda^c)] d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_k \langle \varepsilon \rangle, \end{aligned} \quad (1.54)$$

(1.53) позволяет найти общий вид \mathbf{Q}' и с учетом (1.54) общий вид эффективного материального тензора

$$\begin{aligned} \lambda^* = \langle \lambda \rangle + & \sum_{k=2}^{\infty} \int_V \nabla^2 \mathbf{G}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \nabla^2 \mathbf{G}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \dots \nabla^2 \mathbf{G}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k-1}) \times \\ & \times \langle \lambda'(\mathbf{r}_1)(\lambda(\mathbf{r}_2) - \lambda^c)(\lambda(\mathbf{r}_3) - \lambda^c) \dots (\lambda(\mathbf{r}_k) - \lambda^c) \rangle d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_k. \end{aligned} \quad (1.55)$$

Метод моментов [12] заключается на умножении уравнения (1.52) на λ' и осреднении, в результате которого возникает новый момент. Аналогичным образом, исходя из того же уравнения (1.52), получаем уравнение на этот новый момент, но при этом появляется еще один незамкнутый момент. Проводя цепочку таких действий, т.е. исключая моменты меньшего порядка, приходим к уравнению (1.55).

Работать с бесконечным рядом в общем случае не представляется возможным. Можно оборвать ряд, и если это сделать на первом шаге, то приходим к корреляционному приближению

$$\lambda^* = \langle \lambda \rangle + \int_V \nabla^2 \mathbf{G}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \langle \lambda'(\mathbf{r}_1)(\lambda(\mathbf{r}_2) - \lambda^c) \rangle d\mathbf{r}_2, \quad (1.56)$$

базирующемуся на двухточечном моменте модулей упругости. В отличие от корреляционного приближения, представленного выше, такое описание содержит тело сравнения и является более точным, способным описывать анизотропию, связанную с формой включений. Если не обрывать ряд и работать с целым рядом, то в рамках данного подхода это удастся сделать методом одноточечного приближения – путем учета всех моментов первого порядка. По сути учет всех одноточечных моментов первого порядка и пренебрежение не одноточечными моментами является следствием рассмотрения только сингулярных составляющих ядер, что схоже с сингулярным методом, базирующемся как на разложении в ряды, так и на теле сравнения.

Учесть все одноточечные моменты можно из уравнения (1.55), можно также воспользоваться уравнением (1.52), умножив его на λ' , затем осреднить посредством совместной одноточечной функции распределения

$$f(\lambda, \varepsilon) = f(\lambda)f(\varepsilon|\lambda),$$

$$f(\lambda) = \sum_{k=1}^n c_k \delta(\lambda - \lambda_k) \quad (1.57)$$

и оставить только одноточечные моменты.

Для двухфазного композита эффективные модули представляются в виде, аналогичном обобщенному сингулярному методу (1.44):

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

$$\mu^* = c_1 \mu_1 + c_2 \mu_2 - \frac{c_1 c_2 (\mu_1 - \mu_2)^2}{c_1 \mu_2 + c_2 \mu_1 + \frac{\mu^c (9K^c + 8\mu^c)}{6(K^c + 2\mu^c)}}. \quad (1.58)$$

Учет только одноточечных моментов слабо описывает анизотропную геометрию включений.

Гипотеза сильной изотропии [47]. В методе сразу отбрасывается формальная часть интегрального оператора свертки, что приводит к постоянному значению поля в пределах компонента. Рассмотрение изначально только сингулярной части свертки позволяет обходить разложение в ряды, свойственное сингулярному методу, базирующемуся на разложении в ряды. Присутствует аналогия с сингулярным методом, базирующемся на теле сравнения. Аналогия заключается в итоговой формуле, но λ' играет роль флуктуаций материального тензора, а не разности $\lambda - \lambda^c$. По сути в теории эффективных модулей полагается сильная изотропия.

В методах [11, 12, 47, 19–21, 25, 41, 45, 46] поле в пределах каждого компонента сразу полагается однородным, что является следствием рассмотрения функ-

ции Грина однородной изотропной среды, не содержащей информации о нелокальности. Это обстоятельство ограничивает исследование границам раздела фаз и, как следствие, микроструктуры системы.

Метод теории возмущений и *метод моментов* являются частью математической модели теории эффективных модулей, но их можно использовать как автономные [12]. Методом теории возмущений строится рекуррентная цепь уравнений посредством (1.55). Статистически нелинейная задача переходит в набор линейных задач. Методом теории моментов строится цепочка уравнений, основанная на появлении и последующем замыкании моментов различного порядка и типа. Обоим методам свойственны громоздкие вычисления с сильно осциллирующими функциями. Вопрос замыкания, т.е. на каком шаге и при каких условиях можно обрывать цепочку уравнений, является ключевым и нерешенным.

Метод условных моментов в теории эффективных модулей [12, 46]. Базируется на условном осреднении решения (1.50), что относительно метода моментов является существенным упрощением задачи. Формула (1.50) осредняется по условной плотности распределения $f(\lambda^{(2)}, \boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}, \boldsymbol{\varepsilon}^{(2)} \Big|_{\nu}^{(1)})$, индексы сверху обозначают точку пространства, ν – характеризует конкретную фазу. Функция плотности распределения читается как вероятность нахождения материальных и полевых тензоров в соответствующих точках при условии, что в точке **(1)** находится фаза ν . В результате осреднения получается система уравнений для N-фазного композита

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon}^{\nu} \rangle = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle + \sum_{k=1}^N \int_V \nabla^2 \mathbf{G} f_{(k)}^{(2)} \Big|_{\nu}^{(1)} (\lambda_k - \lambda^c) \langle \boldsymbol{\varepsilon}^{(2)} \Big|_{k, \nu}^{(2), (1)} \rangle d\mathbf{r}, \quad (1.59)$$

Где выражение $f_{(k)}^{(2)} \Big|_{\nu}^{(1)}$ характеризует вероятность нахождения в точке **(2)** компоненты k при условии того, что в точке **(1)** находится компонента ν ; описывает геометрию включений и расположение их в среде. $\langle \boldsymbol{\varepsilon}^{(2)} \Big|_{k, \nu}^{(2), (1)} \rangle$ – математическое ожидание полевого тензора в точке **(2)** при условии, что в точке **(2)** находится

компонента k и в точке $(\mathbf{1})$ компонента ν . Этот условный двухточечный момент замыкается функцией условной плотности распределения $f(\lambda^{(2)}, \boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}, \boldsymbol{\varepsilon}^{(2)} \mid \nu, k)^{(1)(3)}$, что приводит к образованию условного трехточечного момента. Далее, по аналогии с методом моментов строится цепочка взаимосвязанных уравнений. Чтобы построить цепочку уравнений, необходимо задать условные плотности распределения всех порядков. Подход, основанный на условном осреднении, позволяет избежать рассмотрения только сильно изотропных, разупорядоченных сред.

Как правило, представляет интерес оборвать цепочку на определенном шаге. Если принять

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon}^{(1)} \mid k, \nu \rangle = \langle \boldsymbol{\varepsilon}^\nu \rangle,$$

что соответствует отсутствию флуктуаций соответствующего поля в пределах фазы, то приходим к двухточечному приближению. Рассматривается только сингулярная составляющая $\nabla^2 \mathbf{G}$ в (1.51) и учитывается осредненное соотношение (1.17) одноточечной функцией распределения (1.57) получим выражение

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \sum_{k=1}^N c_k \lambda_k \langle \boldsymbol{\varepsilon}^k \rangle.$$

Полагая композит двухфазным, приходим к формулам (1.58), идентичным сингулярному приближению (1.44), базируемом на теле сравнения и одноточечному приближению.

Метод условных моментов (МУМ) [12, 41]. Подход направлен обобщить предыдущий метод. В рамках данной теории методом функций Грина ищется решение стохастических уравнений, описывающих процессы в бесконечных средах, с использованием представления о теле сравнения. Полученное решение осредняется условной функцией распределения. Затем, используя интегральное преобразование Фурье, в подходе получается набор уравнений относительно изображений. Последующее разложение изображений ядер в ряд по фурье-компонентам и об-

ратное преобразование Фурье позволяют прийти к искомым эффективным дифференциальным уравнениям с эффективными коэффициентами. В нулевом приближении в разложении по ядрам Фурье получается теория эффективных модулей. В первом приближении следуют уравнения четвертого порядка, которые претендуют на описание уравнений теории смесей с определенной межфазной силой. То есть в рамках метода получаются осредненные уравнения с определенными коэффициентами, описывающими как среду в целом, так и обладающие информацией о каждой фазе отдельно.

Несмотря на свои достоинства, в методе условных моментов тензор Грина ищется для однородной изотропной среды. Формальная составляющая тензора Грина, как и в представленных выше методах, отсутствует. Это обстоятельство ограничивает возможности по анализу микроструктуры гетерогенной среды, т.к. информация о границах раздела фаз учитывается ограниченно.

В данной работе делается акцент на описании гетерогенных сред методом условных моментов. Этот метод предлагается обобщить путем модификации действующего оператора в исходном уравнении, что позволит наиболее полным образом учесть геометрические и физические особенности системы.

Перед переходом к вариационному методу следует отметить достоинство приведенных статистических методов. Описанные статистические методы позволяют отследить неоднородность полей в среде, являющихся следствием неоднородности структуры, что приводит к рассеянию волн, диссипации энергии. Математически это проявляется в комплексности эффективных коэффициентов. Неоднородность среды является причиной рассеяния полей, возникают локальные потоки между элементами неоднородности, расчет которых не удастся посчитать точно исходя из проблемы многих тел. Качественные и количественные выкладки представлены в книге Т.Д. Шермергора [11].

Вариационный метод [11, 42–44]. Базируется на нахождении экстремума функционала энергии. В трактовке Хашина и Штрикмана целью вариационного метода

является получение вилки для эффективных коэффициентов процесса. Полученная вилка уже вилки Хилла. В рамках метода в общем случае рассматриваются два геометрически подобных тела: одно – неоднородное и анизотропное, тензор эффективных модулей упругости которого необходимо рассчитать, а другое, играющее роль тела сравнения, – однородное и изотропное. Тело сравнения обладает некоторыми физическими свойствами, например, свойствами одной из фаз.

Приведем исследуемый функционал энергии (не в тензорной записи) на примере упругой деформации [11]

$$U = U_0 - \frac{1}{2} \int_V (\mathbf{p} \mathbf{H} \mathbf{p} - 2\mathbf{p} \boldsymbol{\varepsilon}^0 - \mathbf{p} \boldsymbol{\varepsilon}') dr. \quad (1.60)$$

Здесь $U_0 = \frac{1}{2} \int_V \boldsymbol{\sigma}^0 \boldsymbol{\varepsilon}^0 dr$ – упругая энергия тела сравнения, $\boldsymbol{\varepsilon}$ – тензор деформации, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений; $\mathbf{p} = \boldsymbol{\sigma} - \lambda^0 \boldsymbol{\varepsilon} = \lambda' \boldsymbol{\varepsilon}$ – тензор упругой поляризации, λ – материальный тензор упругих свойств. $\mathbf{H} = (\lambda')^{-1}$.

Нули сверху обозначают параметр тела сравнения λ^0 , штрихи – разность между истинным значением и значением тела сравнения $\lambda' = \lambda - \lambda^0$.

Уравнение линейной теории упругости для исследуемой среды представляется в виде

$$\nabla \lambda^0 \boldsymbol{\varepsilon}' + \nabla \mathbf{p} = 0, \quad (1.61)$$

с граничным условием на отклонение истинных смещений относительно тела сравнения

$$\mathbf{u}'|_S = 0. \quad (1.62)$$

Функционал (1.60) является полной энергией

$$U = \frac{1}{2} \int_V \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\varepsilon} dV \quad (1.63)$$

и обладает свойством экстремальности. Интеграл в (1.60) есть разность полной упругой энергии и энергии тела сравнения и называется дополнительной энергией, которую нужно минимизировать. При этом данный интеграл должен быть тождественно равен нулю.

В рамках метода используются гипотеза эргодичности, гипотеза об однородности поля в пределах данного компонента. Замыкание функционала производится посредством теоремы Парсеваля (тензорная функция $\boldsymbol{\varepsilon}'(\mathbf{p})$ выражается через \mathbf{p}), что, с учетом преобразования Фурье от уравнения процесса (1.61), позволяет получить искомую вилку. В случае двухфазного композита вилка получается следующей:

$$\begin{aligned} -\frac{c_1 c_2 (K_1 - K_2)^2}{K_2 + \frac{4}{3} \mu_2 + c_2 (K_1 - K_2)} \leq K^* - \langle K \rangle \leq -\frac{c_1 c_2 (K_1 - K_2)^2}{K_1 + \frac{4}{3} \mu_1 - c_1 (K_1 - K_2)} \\ -\frac{c_1 c_2 (\mu_1 - \mu_2)^2}{\frac{5\mu_2(3K_2 + 4\mu_2)}{6(K_2 + 2\mu_2)} + c_2 (\mu_1 - \mu_2)} \leq \mu^* - \langle \mu \rangle \leq -\frac{c_1 c_2 (\mu_1 - \mu_2)^2}{\frac{5\mu_1(3K_1 + 4\mu_1)}{6(K_1 + 2\mu_1)} - c_1 (\mu_1 - \mu_2)} \end{aligned} \quad (1.64)$$

Вилка Хилла получается при равенстве параметров тела сравнения нулю и бесконечности соответственно. Если в вариационном методе параметры тела сравнения также положить равными искомым эффективным параметрам, то найденные эффективные коэффициенты совпадут с результатами ряда представленных подходов [2].

В вариационном методе [11, 42–44] совокупность внутренних границ раздела фаз не учитывается. Это следует из вида анализируемого функционала и выполняемых в рамках метода действий. То есть взаимодействием фаз, фактически, пренебрегается.

Модель Мора-Танака [48]. Исследуемое поле для включений находится с учетом осредненных полей в матрице. Таким образом, учитывается взаимодействие между включениями. Модель имеет общие аспекты с методом самосогласованного поля и с методами теории эффективных модулей. Данная модель не учитывает в должной степени различное поведение фаз.

Модель Понте Кастанеда - Виллиса [49] является чисто гомогенной теорией. Эффективные параметры находятся с помощью принципа минимальной потенциальной энергии и принципа минимальной дополнительной энергии. Имеет общие черты с вариационным методом, в котором в связи с получением двойного неравенства, необходимая точность для практических применений ограничена.

Гибридная гомогенизированная модель [50]. В связи с невозможностью рассмотреть все необходимые параметры микронеоднородной среды, в данном подходе проделываются как аналитические, так и феноменологические выкладки, направленные на гомогенизацию реальной стохастической структуры. За основу аналитических выкладок взяты решения в рамках моделей Эшелби, Мори-Танака и Понте Кастанеда - Виллиса. В основе феноменологического подхода находится понятие об эффективном объеме, который исходя из знания эмпирических констант определяет исследуемый неоднородный материал. Применительно практики, данный метод неплохо показал себя, но, в связи с неизвестной степенью применимости феноменологических параметров, возможности данной модели ограничены.

В дополнение к описанным подходам приведем здесь также потенциально перспективную модель для описания гетерогенных сред [51–53], базирующуюся на вероятностном формализме, производящей функции и теории графов.

Выводы по главе 1.

Существующий математический аппарат, содержащийся в представленных подходах, либо не учитывает границы раздела фаз, либо вводит их упрощенно (через феноменологические коэффициенты или периодическую структуру). Исходя из чего, анализ влияния коллективного взаимодействия фаз на распространяющееся по гетерогенной среде поле ограничен. Отсутствие математического аппарата, необходимого для наиболее полного учета внутренних границ раздела фаз гетерогенной среды, приводит к ограниченному анализу влияния микроструктуры системы на распространение поля по ней.

Глава 2. Обобщенная производная и ее использование для анализа микроструктуры гетерогенной среды

2.1. Использование обобщенной производной для интегрального учета микро- структуры гетерогенной системы

Введение раздела

Одним из важных аспектов при аналитическом моделировании гетерогенных сред является определение эффективных коэффициентов переноса неоднородной системы, входящих в осредненные уравнения и отображающих ее микроструктуру (геометрию и физические свойства фаз). Используемый математический аппарат, содержащийся в сформированных подходах (см. главу 1), как правило, ориентирован на получение осредненных уравнений с входящими в них эффективными коэффициентами переноса. При этом, как было указано в прошлой главе, границы раздела фаз либо не учитываются, либо вводятся упрощенно (то есть микроструктура системы отображается частично). Описанная проблема по учету конфигурации внутренних границ имеет отношение к задаче многих тел в гетерогенной среде и представляет собой одну из основных проблем, связанных с аналитическим моделированием распространения поля по гетерогенной среде.

В данном разделе предлагается вывод эффективных коэффициентов линейной теории упругости для гетерогенной среды на основе концепции обобщенной производной в смысле функционального анализа [54]. В рамках данной концепции предлагается решить представленную задачу об учете конфигурации внутренних границ раздела фаз (отобразить микроструктуру гетерогенной системы). Соответствующая производная содержит обычную и сингулярную составляющие. Сингулярная часть выражает разрывы поля на поверхности, что является естественным следствием анализа гетерогенной среды, характеризуемой развитой системой внутренних границ, разделяющих фазы с разными физическими свойствами. Проведение осреднения результата действия на поле производной в обоб-

ценном смысле приводит к пространственной теореме осреднения в рамках теории смесей [28]. Обобщенные производные заменяют обычные в исходной модели, в качестве которой рассматривается линейная стационарная модель теории упругости. Исходя из этого модифицированный оператор в исходной модели содержит информацию о микроструктуре системы. Определяемая действующим оператором функция Грина отображает отклик поля в среде на приложенное воздействие. Исходя из этого ее роль в анализе характера распределения исследуемого поля по неоднородной системе является ключевой. Описание гетерогенной среды осуществляется в рамках МУМ (метода условных моментов) [41]. Функционал данного подхода базируется на формализме функций Грина, условном осреднении и преобразовании Фурье. МУМ удается получить осредненные уравнения с эффективными коэффициентами упругости для среды в целом и для каждой фазы отдельно. В результате применения осреднения и преобразования Фурье в рамках МУМ возникает свертка, выделяющая интегралы, содержащие осредненную функцию Грина и корреляционную функцию геометрии структуры. Это в свою очередь приводит к интегральному учету микроструктуры системы в итоговых эффективных коэффициентах, входящих в осредненные уравнения.

Основу данного раздела формирует статья [2].

Формализм обобщенной производной

Для описания поля в гетерогенной среде с учетом внутренних границ введем концепцию производной в обобщенном смысле в смысле функционального анализа [54]. В одномерном случае выражение для обобщенной производной согласно [54] имеет вид

$$\nabla u(x) = \partial u(x) + \sum_k [u]_{x_k} \delta(x - x_k),$$

где символ ∇ отождествляется с обобщенной производной, символ ∂ характеризует обычную производную, запись $[u]_{x_k}$ характеризует скачек поля на границе $[u]_{x_k} = u(x_k + 0) - u(x_k - 0)$, представляющей собой точку x_k . Обобщенная

производная отличается от обычной наличием сингулярной составляющей, выраженной конфигурацией дельта-функций $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)$ в точках \mathbf{x}_k , в которых поле терпит разрыв.

Обобщим представленное выражение для обобщенной производной, действующей на поле смещений, на случай произвольной размерности пространства:

$$\nabla_j u_i(\mathbf{r}) = \partial_j u_i(\mathbf{r}) + \int_S [u_i]_x \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j, \quad (2.1)$$

где $d\mathbf{s}$ – вектор, выражающий ориентированную площадку, расстояние до которой определяется радиус вектором \mathbf{x} , запись $[u_i]_x$ характеризует скачек смещений фаз на границе $[u_i]_x = u_i(\mathbf{x} + \mathbf{0}) - u_i(\mathbf{x} - \mathbf{0})$. Сингулярная составляющая для обобщенной производной ∇ в (2.1) выражается в подынтегральном выражении конфигурацией дельта-функций на поверхностях разрыва, т.е. согласно формуле (2.1) каждой точке \mathbf{x} поверхности разрыва соответствует своя дельта-функция $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{x})$. Поверхностный интеграл формулы (2.1) включает всю совокупность поверхностей разрыва в исследуемой системе $S = \sum_k S_k$, т.е. имеет место равенство

$$\int_S [u_i]_x \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j = \sum_k \int_{S_k} [u_i]_x \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j.$$

Представленный формулой (2.1) вид обобщенной производной не противоречит формализму источника [54], в котором сингулярная составляющая записывается через так называемую поверхностную дельта-функцию. Дальнейшие выкладки продемонстрируют справедливость представления в формуле (2.1) (далее и формулы (2.2)) поверхностной дельта-функции.

Формула (2.1) не конкретизирует, какая фаза гетерогенной среды рассматривается в исследуемой области, и переход между какими фазами $[u_i]_x$ осуществляется при пересечении границы. Используя выражение (2.1) определим обобщенную производную для каждой из областей неоднородной системы, занятой фазой 1:

$$\nabla_j u_i^1(\mathbf{r}) = \partial_j u_i^1(\mathbf{r}) + \int_{S_{12}} u_i^1(\mathbf{x} - \mathbf{0}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j. \quad (2.2)$$

Данная формула следует из (2.1) при рассмотрении области, соответствующей фазе 1 с учетом равенства $u_i^1(\mathbf{x} + \mathbf{0}) = 0$ и изменения ориентации площадки ds_j (смена S на S_{12} направлена отобразить это). Граничное условие $u_i^1(\mathbf{x} + \mathbf{0}) = 0$ характеризует то, что область вне границы, занимаемой фазой 1, не входит в анализируемую область (подобный прием используется в [54]). Равенство $u_i^1(\mathbf{x} + \mathbf{0}) = 0$ можно интерпретировать тем фактом, что при переходе через границу фаза 1 сменяется фазой 2 и поэтому смещение для фазы 1 там отсутствует. Т.е. формула (2.2) для обобщенной производной является “обрезанной” с точки зрения рассмотрения области, занимаемой определенной фазой. Аналогичное выражение справедливо и для области, занимаемой фазой 2, с точностью до ориентации площадки.

Утверждение. Обобщенная производная (2.1) через соответствующую ей сингулярную составляющую описывает поведение поля на границах раздела фаз гетерогенной среды.

Доказательство. Данное утверждение подтверждается тем фактом, что осреднение формул (2.1), (2.2) приводит к пространственной теореме осреднения, полученной в рамках теории смесей [28]. Для доказательства приведем формулы пространственного осреднения

$$\langle u_i \rangle(\mathbf{R}) = \frac{1}{V} \int_V u_i(\mathbf{R} + \mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad c_1 \langle u_i^1 \rangle(\mathbf{R}) = \frac{V_1}{V} \frac{1}{V_1} \int_{V_1} u_i^1(\mathbf{R} + \mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad (2.3)$$

где V – характерный (представительный [28]) объем системы, V_1 – объем, занимаемый фазой 1, c_1 – объемная концентрация фазы 1, $c_1 = \frac{V_1}{V}$, $c_1 + c_2 = 1$, $\langle u_i \rangle$ – средний вектор смещения в среде: $\langle u_i \rangle = c_1 \langle u_i^1 \rangle + c_2 \langle u_i^2 \rangle$, $\langle u_i^1 \rangle, \langle u_i^2 \rangle$ – осредненные смещения фаз, проведем осреднение выражений (2.1), (2.2):

$$\langle \nabla_j u_i \rangle(\mathbf{R}) = \partial_j \langle u_i \rangle(\mathbf{R}) + \frac{1}{V} \int_S [u_i]_{\mathbf{R}+\mathbf{x}} ds_j, \quad (2.4)$$

$$c_1 \langle \nabla_j u_i^1 \rangle(\mathbf{R}) = c_1 \partial_j \langle u_i^1 \rangle(\mathbf{R}) + \frac{1}{V} \int_{S_{12}} u_i^1(\mathbf{R} + \mathbf{x} - \mathbf{0}) ds_j.$$

Формулы (2.4) выражают собой пространственную теорему осреднения в рамках теории смесей [28]. Если сложить второе выражение в (2.4) с записанным по аналогии выражением для фазы 2 с учетом изменения ориентации площадки (смена S_{12} на S_{21}), то получится первое выражение в (2.4). Пространственной теоремой осреднения предсказывается влияние на поле в пространстве структуры внутренних границ, то есть формулами (2.4) через поверхностные интегралы отображаются микроструктурные особенности гетерогенной системы. Однако анализ поверхностных интегралов в (2.4) является существенной проблемой в рамках теории смесей. Опять же стоит отметить, что в других имеющихся исследованиях (см. главу 1) границы либо не учитываются (соответственно и размеры), либо их учет производится с введением упрощений, не отображающих специфику анализируемой структуры.

Заметим также, что из формализма обобщенной производной можно получить формулу Гаусса-Остроградского. Для этого формулу (2.2) следует проинтегрировать по объему в области с объемом V и границей S и приравнять полученное выражение к нулю. Использование формулы (2.1) также приводит к формуле Гаусса-Остроградского с учетом задания соответствующего граничного условия вне анализируемой области $u_i(\mathbf{x} + \mathbf{0}) = 0$.

Постановка задачи

Рассмотрим стационарное распределение упругого поля в микронеоднородной двухфазной среде в трехмерном пространстве. В качестве исходной модели используем стационарную изотропную модель линейной теории упругости:

$$\nabla_j \sigma_{ij} = 0, \quad \sigma_{ij} = \lambda_{ij\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta}, \quad \varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (\nabla_\beta u_\alpha + \nabla_\alpha u_\beta), \quad (2.5)$$

$$\nabla_j(\lambda_{ij\alpha\beta}\nabla_\beta u_\alpha) = 0,$$

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

Координатами в модели (2.5) выступают микроточки, в каждой из которых находится одна из фаз со своими физическими свойствами. Т.е. объемный $K(\mathbf{r})$ и сдвиговой $\mu(\mathbf{r})$ упругие модули системы являются функциями координат. Если в микроточке находится фаза 1, то материальные коэффициенты упругости принимают значения $K = K_1, \mu = \mu_1$, аналогично и исследуемые поля смещений u_α , деформаций $\varepsilon_{\alpha\beta}$ и напряжений σ_{ij} при этом принимают значения, соответствующие фазе 1.

Для корректной постановки задачи уравнения (2.5) следует дополнить заданием граничных условий на внутренних и внешних границах. С целью последующего интегрального учета микроструктуры гетерогенной среды вместо данной постановки задачи приведем эквивалентную корректную постановку задачи, в которой в исходных уравнениях (2.5) обычные производные заменяются на обобщенные (2.1). При этой модификации в исходных дифференциальных уравнениях появляется составляющая, отображающая поведение поля на внутренних и внешней границах. Докажем двумя способами, что физическая суть анализируемых уравнений (закон сохранения и закон Гука) не нарушается и приведенная постановка задачи является корректной.

Первый вариант доказательства основывается на следующем утверждении.

Утверждение. Если исходные дифференциальные уравнения (2.5) осреднить по формулам пространственной теории смесей [14], то получившиеся осредненные уравнения будут идентичны уравнениям (соответственно, и решениям), полученным в результате модифицирования обобщенными производными (2.1), (2.2) уравнений (2.5) с последующим их осреднением по формулам (2.3).

Доказательство. Осреднение по формуле пространственной теории смесей (2.4) уравнений (2.5) на напряжение и смещение приводит к формулам

$$\partial_j \langle \sigma_{ij}^1 \rangle(\mathbf{R}) + \frac{1}{V} \int_{S_{12}} \sigma_{ij}^1 ds_j = 0,$$

$$c_1 \lambda_{ij\alpha\beta}^1 \partial_j \partial_\beta \langle u_\alpha^1 \rangle(\mathbf{R}) + \frac{1}{V} \lambda_{ij\alpha\beta}^1 \int_{S_{12}} \partial_\beta u_\alpha ds_j + \lambda_{ij\alpha\beta}^1 \partial_j \frac{1}{V} \int_{S_{12}} u_\alpha ds_\beta = 0,$$

характеризующим фазу 1 в гетерогенной среде. Осреднение по формулам (2.3) уравнений (2.5), в которых обычные производные заменены на обобщенные по формуле (2.2), также приводит к данным уравнениям. Если по аналогии записать осредненные уравнения для фазы 2 и сложить их с осредненными уравнениями для фазы 1, то получатся осредненные уравнения, вид которых следует из осреднения по формулам (2.3) уравнений (2.5), в которых обычные производные заменены на обобщенные, определяемые формулой (2.1). В рамках двух подходов полученные осредненные уравнения являются идентичными. При этом анализируемая область гетерогенной среды (включающая внутренние границы) осталась без изменения, также, как и граничные условия. Исходя из этого, решения также являются одинаковыми. Таким образом, с приведенной позиции осредненных уравнений, формализм обобщенных производных не нарушает корректность постановки задачи и физическую суть исследуемых дифференциальных уравнений. Фактически, доказательство является следствием приведенного выше утверждения о том, что замена обычных производных на обобщенные и последующее пространственное осреднение (2.3) приводит к формулам пространственной теории смесей [28].

Второй вариант доказательства основан на формализме формулы Грина [54]. Осреднение уравнений (2.5) при этом не делается. Отметим, что с учетом приведенного далее формализма функций Грина в работе будет построено и проанализировано решение уравнения (2.5) на смещение. Перед рассмотрением гетерогенной среды приведем теорему для частного случая, в котором стоит задача определения поля в области, занимаемой одной фазой.

Теорема. Пусть имеется односвязная область с объемом V замыкаемая поверхностью S с заданными на ней граничными условиями на поле. Тогда описание поля

дифференциальными уравнениями в рассматриваемой области осуществляется с учетом следующих взаимнообратимых утверждений:

1. Выполнение формулы Грина [54], являющейся решением дифференциального уравнения с заданными граничными условиями, эквивалентно рассмотрению дифференциального уравнения, в котором обычные производные заменены на обобщенные.

2. Замена в анализируемом дифференциальном уравнении обычных производных на обобщенные приводит к появлению в дифференциальном уравнении составляющей, отображающей поведение поля на границе. Рассмотрение этой составляющей в качестве источника приводит к формуле Грина.

Доказательство. Выпишем для этого случая решение уравнения (2.5) на смещение, т.е. запишем формулу Грина [11], [54]

$$u_\alpha^{(1)} = \int_S \left[G_{\alpha p}^{(1,2)} \lambda_{pjmn} \partial_n u_m^{(2)} - \partial_n^{(2)} G_{\alpha p}^{(1,2)} \lambda_{pjmn} u_m^{(2)} \right] ds_j^{(2)}, \quad (2.6)$$

в которой учтено, что объемные силы в (2.5) положены равными нулю. В приведенном уравнении и далее верхние индексы в скобках характеризуют соответствующие координаты $\mathbf{r}^{(1)}$, $\mathbf{r}^{(2)}$. Поведение поля на границе определяется граничными условиями $\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{g}$ (задача Неймана, Дирихле или некоторая смешанная постановка). Уравнение на функцию Грина имеет вид

$$\lambda_{ijml} \partial_j^{(1)} \partial_l^{(1)} G_{mp}^{(1,2)} = \delta_{ip} \delta(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)})$$

и также дополняется граничными условиями $\mathbf{K}\mathbf{G} = \mathbf{0}$. Формула (2.6) определяет распределение поля в области (V) исходя из его значения на границе (S). Путем воздействия на решение (2.6) оператором $\lambda_{ij\alpha\beta} \partial_j \partial_\beta$ и использования представленного уравнения на функцию Грина получим преобразованную форму для эллиптического оператора

$$\lambda_{ij\alpha\beta} \left[\partial_j \partial_\beta u_\alpha(\mathbf{r}) - \int_S \partial_\beta u_\alpha(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j - \partial_j \int_S u_\alpha(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_\beta \right] = 0.$$

Это же выражение следует если в уравнениях (2.5) вместо обычных производных применить формализм обобщенных производных (2.2). Из формулы для обобщенной производной (2.1) будет следовать преобразованная форма для эллиптического оператора (2.5):

$$\lambda_{ij\alpha\beta} \left[\partial_j \partial_\beta u_\alpha(\mathbf{r}) + \int_S [\partial_\beta u_\alpha]_x \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j + \partial_j \int_S [u_\alpha]_x \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_\beta \right] = 0, \quad (2.7)$$

из которого также следует решение на смещение (2.6) при положении вне рассматриваемой области площади S граничного условия $u_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{0}) = 0$. Для того, чтобы из найденного модифицированного дифференциального уравнения на смещение получить формулу Грина (2.6) нужно сингулярную составляющую рассмотреть как объемный источник к регулярной части $\partial_j \partial_\beta$ эллиптического оператора. В рамках формализма функций Грина этим объемным источником организуется решение (2.6) модифицированного дифференциального уравнения на смещение; при выводе формулы (2.6) конфигурация дельта-функций исчезает вследствие интегрирования по объему. Таким образом, рассмотрение в дифференциальном уравнении производных в обобщенном смысле вместо обычных производных приводит к отображению в нем поведения поля на границе (соответственно, при этом в дифференциальном уравнении отображаются и граничные условия). Это не нарушает физическую суть исходных уравнений (2.5) и постановку задачи вследствие выполнения формулы Грина (2.6).

Базируясь на приведенной теореме, сформулируем и докажем

Утверждение. Использование формализма обобщенных производных (2.1) приводит к возникновению в дифференциальном уравнении членов, характеризующих поведение поля на внутренних границах гетерогенной системы. Эти члены могут совместно с регулярной составляющей эллиптического оператора формировать действующий оператор, либо их можно рассматривать как источник в модифицированном дифференциальном уравнении. Если эти члены определяют действующий оператор и граничное условие поставлено на внешней границе, то при определении поля в гетерогенной среде в целом информация о внутренних границах

присутствует в функции Грина. Полученное решение при этом является структурно идентичным формуле Грина. Исходя из чего физическая суть исследуемых дифференциальных уравнений не нарушается, и постановка задачи является корректной для всей области гетерогенной среды (включающей конфигурацию отдельных областей).

Доказательство. Формула для обобщенной производной (2.1) не ограничивается рассмотрением некоторой области с соответствующей ей границей. Использование формализма обобщенных производных (2.1) в анализируемом дифференциальном уравнении приводит к появлению составляющей, учитывающей поведение поля на всей совокупности внутренних границ гетерогенной среды $S = \sum_k S_k$. Учитывая это при применении формулы (2.1) к уравнениям (2.5), найдем дифференциальное уравнение

$$\lambda_{ija\beta}(\mathbf{r})\partial_j\partial_\beta u_\alpha(\mathbf{r}) + \int_S [\lambda_{ija\beta}\partial_\beta u_\alpha]_x \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j + \partial_j \int_S [\lambda_{ija\beta}u_\alpha]_x \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_\beta = 0,$$

обобщающее уравнение (2.7) на случай рассмотрения гетерогенной среды в целом. Из полученного уравнения следуют частные решения для каждой из областей гетерогенной среды, занимаемой определенной фазой. Действительно, для рассматриваемой области с границей S_k и заданным на ней граничным условием действие других областей с соответствующими им границами не вносит вклад вследствие зануления дельта-функций (и их производных) на них. И при этом для каждой из областей следуют дифференциальное уравнение (2.7) с решением (2.6). Формально, решение (2.6) получается, если интегралы по поверхности S_k вынести в правую часть как источник и на поверхности S_k задать граничные условия. Данный случай отображает то, что решение на поле и на функцию Грина можно искать для каждой из областей гетерогенной среды. Постановка задачи для функций Грина фазы ν , ($\nu = 1, 2$) в каждой из областей представляется в виде $\lambda^\nu \partial \partial \mathbf{G}^\nu = \mathbf{I} \delta(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)})$, $\mathbf{K} \mathbf{G}^\nu = \mathbf{0}$. Общее решение на поле и на функцию Грина представляют собой сшивку полученных решений. То есть формализмом обобщенных производных определяется поле для каждой из областей гетерогенной среды, и

физическая суть анализируемого дифференциального уравнения с постановкой задачи не нарушаются. Данное рассмотрение сталкивается с проблемой определения граничных условий на внутренних границах системы. При построении решения на всей области гетерогенной среды граничные условия достаточно задать на внешней границе, а также следует учесть соотношения на поле на внутренних границах. С учетом этого далее приведем другой вариант построения решения для всей области гетерогенной среды.

За источниковое слагаемое в анализируемом дифференциальном уравнении возьмем член, отвечающий за внешнюю границу, на которой заданы граничные условия (если присутствуют другие источники, то они аддитивно складываются). Остальные слагаемые, являющиеся сингулярными и отображающие внутренние границы, при этом совместно с регулярной составляющей эллиптического оператора формируют действующий оператор. Функция Грина, определяемая действующим оператором и граничными условиями, при этом отображает внутренние границы. Т.е. описанной функцией Грина определяется поле во всей области гетерогенной среды, включая внутренние границы. Получаемое общее решение при этом структурно схоже с формулой Грина (2.6), корректно определяющей поле в некоторой области с границей S_k . Границей S_k в описанном решении выступает внешняя поверхность гетерогенной среды с заданным на ней граничным условием, а функция Грина определяется представленным оператором. Рассмотренный случай доказывает то, что формализмом обобщенных производных, учитывающим в анализируемом дифференциальном уравнении поведение поля на всей конфигурации внутренних границ гетерогенной среды, определяется поле в каждой точке гетерогенной среды. При этом физическая суть полученного дифференциального уравнения и постановка задачи на всей области гетерогенной среды являются корректными.

Данный вариант построения решения на поле и на функцию Грина предлагается использовать в следующем разделе. Т.е. на основе использования формализма обобщенных производных предлагается нахождение функции Грина на

всей области гетерогенной среды, при котором действующий оператор отображает внутренние границы системы.

Опишем еще один вариант построения решения на поле и на функцию Грина в гетерогенной среде. Здесь члены, отображающие поведение поля на внутренних границах, предлагается рассматривать как источник в модифицированном дифференциальном уравнении. Граничное условие задается на внешней границе. Функция Грина при этом строится регулярной составляющей эллиптического оператора, не содержащего информации о внутренних границах в системе. Выше было показано, что решение (2.6) получается при интегрировании по объему сингулярных составляющих (считаемых источником членом) от действия обобщенных производных, которое по итогу сводится к интегрированию по поверхности. Базируясь на свойстве аддитивности интеграла по объему, получаемое решение для всей области (записанное через функцию Грина) учитывает всю конфигурацию внутренних границ и является неявным. Неявность связана с присутствием искомого поля в интегралах по внутренним поверхностям, т.е. в обеих частях описанного решения.

Вывод эффективных коэффициентов методом условных моментов

Целью является получение из исходных уравнений (2.5) осредненные, представимые в виде

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

где $\lambda_{ij\alpha\beta}^*$ – входящий в осредненный закон Гука эффективный изотропный тензор, содержащий искомые эффективные коэффициенты линейной теории упругости K^* и μ^* . Тензоры $\langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle$ и $\langle \sigma_{ij} \rangle$ являются осредненными тензорами деформаций и напряжений соответственно. Необходимая информация о гетерогенной структуре располагается в эффективных коэффициентах K^*, μ^* , которые следует получить.

Применим формализм МУМ [41] для нахождения эффективных коэффициентов упругости. При этом учтем использование в исходных уравнениях (2.5) концепции обобщенных производных. Исходное уравнение (2.5) на смещение преобразовывается путем прибавления и отнимания искомого тензора λ_{ijmn}^* к виду

$$\lambda_{ij\alpha\beta}^* \nabla_j \nabla_\beta u_\alpha = -\nabla_j (\lambda_{ij\alpha\beta} - \lambda_{ij\alpha\beta}^*) \nabla_\beta u_\alpha. \quad (2.8)$$

Применим аппарат функций Грина для оператора $\lambda_{ij\alpha\beta}^* \nabla_j \nabla_\beta$, считая правую часть уравнения (2.8) источником, а среду бесконечной. Имеем выражения

$$\lambda_{ijml}^* \nabla_j^{(1)} \nabla_l^{(1)} G_{mp}^{(1,2)} = \delta_{ip} \delta(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}), \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} \nabla_j^{(1)} \nabla_l^{(1)} G_{mp}^{(1,2)} &= \partial_j^{(1)} \partial_l^{(1)} G_{mp}^{(1,2)} + \int_S \left[\partial_l^{(y)} G_{mp}^{(y,2)} \right]_{y=x} \delta(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{x}) ds_j + \\ &+ \int_S \left[G_{mp}^{(y,2)} \right]_{y=x} \partial_j^{(1)} \delta(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{x}) ds_l, \end{aligned}$$

которые следует проанализировать. Функция Грина $G_{mp}^{(1,2)}$ в записанном уравнении характеризует отклик поля в точке $\mathbf{r}^{(1)}$ на приложенное воздействие в точке $\mathbf{r}^{(2)}$ с учетом информации о микроструктуре системы. Геометрия структуры при этом выражена в интегралах по поверхности, характеризующих внутренние границы. Действующий оператор уравнения (2.9) не включает внешнюю бесконечно удаленную границу. Исходя из этого уравнение (2.9) следует дополнить граничным условием на внешней границе, например, $G_{mp}^{(1,2)} = 0$.

Построение решения уравнения (2.9) на функцию Грина для гетерогенной среды в целом представляет собой нетривиальную задачу. Это является следствием наличия интегралов по внутренним поверхностям с входящими в них сингулярными членами, скачками тензора Грина $[\mathbf{G}]_x$ и его производной $[\partial \mathbf{G}]_x$. Соответствующие скачки описывают различие отклика поля в каждой из фаз на приложенное воздействие исходя из различных модулей упругости фаз K_1, μ_1 и K_2, μ_2 .

Значение тензора Грина $G_{mp}^{(1,2)}$ содержит в себе поведение функций Грина для каждой из фаз и определяет ее скачки на внутренних границах. Как отмечалось выше, искать общую функцию Грина системы можно с учетом сшивки решений на внутренних границах системы для функций Грина в каждой из областей, занимаемых определенной фазой. При этом возникает сложность с определением поля на внутренних границах системы, т.е. с заданием граничных условий на поверхностях раздела фаз. Отметим, что функции Грина различны для каждой из фаз в силу разных коэффициентов переноса и геометрических особенностей фаз; решения функции G^V для одной фазы, но для разных областей в общем случае различны. Решение уравнений (2.9) можно рассматривать с позиции помещения в области среды конфигурации зарядов (дельта-функций $\delta(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{x})$) и диполей (производных от дельта-функций $\partial_j^{(1)}\delta(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{x})$). Соответствующей конфигурацией дельта-функций и производных от дельта-функций при этом должно организоваться поле, удовлетворяющее внутренним граничным условиям. Т.е. создаваемое поле должно быть эквивалентно полю, организованному конфигурацией зарядов и диполей, содержащихся в поверхностных интегралах уравнений (2.9). В простейших вариантах, в которых фазы обладают разными физическими свойствами, хорошо работает метод изображений. Например, в случае пространства, разделенного на две части или в случае шара, помещенного в пространство с другими физическими свойствами.

Вследствие положения границ и соотношений на разрывах $[\partial G]_x$ и $[G]_x$ значения функций Грина $G_{mp}^{(1,2)}$ реальной среды зависят от положения точек $\mathbf{r}^{(1)}$ и $\mathbf{r}^{(2)}$, т.е. $G_{mp}^{(1,2)} \neq G_{mp}^{(2,1)}$, а также от направлений m и p . Действительно, точки $\mathbf{r}^{(1)}$ и $\mathbf{r}^{(2)}$ имеют определенные расстояния относительно внутренних границ и в них находятся произвольные фазы. Т.е. рассматриваемая функция $G_{mp}^{(1,2)}$ в общем случае является неоднородной и анизотропной. По мере отдаления точки $\mathbf{r}^{(2)}$ от точки $\mathbf{r}^{(1)}$ вклады границ компенсируют друг друга. Это является следствием того, что в зависимости от пересекаемой границы (т.е. в зависимости от смены

фаз) значения разностей $[\partial \mathbf{G}]|_{\mathbf{x}}$ и $[\mathbf{G}]|_{\mathbf{x}}$ могут иметь разные знаки, что влияет на знаки членов по типу зарядов $\delta(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{x})$ и направления диполей $\partial_l^{(1)} \delta(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{x})$ в интегралах по внутренним поверхностям. Вследствие имеющегося экранирования для неоднородной структуры существует некоторый характерный масштаб, за пределами которого анализируемая среда обладает эффективными свойствами λ^* и асимптотикой для функции Грина $G_{mp}^{(1,2)} \sim 1/r$. С этой точки зрения уравнение на функцию Грина (2.9) учитывает переходный масштаб (масштаб мезоточки), что приводит к нелокальному отклику на приложенное воздействие (т.е. отклик определяется не только рассматриваемой микроточкой, но и некоторой окрестностью). Этот факт обобщает работу [41], где рассматриваемый оператор $\lambda_{ijml}^* \partial_j \partial_l$ с обычными производными и соответствующая ему функция Грина не содержат информации о микроструктуре среды, представленной в формуле (2.9) в интегралах по поверхности. Система в [41] сразу полагается эффективной без переходного слоя. Рассмотрение оператора $\lambda_{ijml}^* \nabla_j \nabla_l$ с позиции обобщенных производных приводит к функции Грина учитывающей микроструктурные особенности системы.

Базируясь на формализме функции Грина, выпишем решение уравнений (2.5) на смещения и деформации

$$u_i^{(1)} = \langle u_i^{(1)} \rangle - \int_V G_{ip}^{(1,2)} \nabla_q^{(2)} (\lambda_{pqmn}^{(2)} - \lambda_{pqmn}^*) \nabla_n^{(2)} u_m^{(2)} d\mathbf{r}^{(2)}, \quad (2.10)$$

$$\varepsilon_{ij}^{(1)} = \langle \varepsilon_{ij}^{(1)} \rangle - \int_V \nabla_j^{(1)} G_{ip}^{(1,2)} \nabla_q^{(2)} (\lambda_{pqmn}^{(2)} - \lambda_{pqmn}^*) \varepsilon_{mn}^{(2)} d\mathbf{r}^{(2)}, \quad (2.11)$$

в которых запись $2\nabla_j^{(1)} G_{ip}^{(1,2)} = \nabla_j^{(1)} G_{ip}^{(1,2)} + \nabla_i^{(1)} G_{jp}^{(1,2)}$ характеризует симметризацию по индексам i и j . Члены $\langle u_i^{(1)} \rangle$ и $\langle \varepsilon_{ij}^{(1)} \rangle$ характеризуют поведение поля (граничное условие) на внешней бесконечно удаленной границе; этими же слагаемыми определяются среднее смещение и средний тензор деформаций в системе. При получении уравнения (2.11) учтено, что действие обобщенной производной

на осредненную функцию эквивалентно действию обычной производной $\nabla_j \langle u_i \rangle = \partial_j \langle u_i \rangle$, т.к. осредненная величина определена на масштабах макроточки (в каждой микроточке среды осредненное поле принимает полученное среднее значение, т.е. не чувствует микроточки и границы вследствие их учета при осреднении).

Будем интересоваться только уравнением (2.11), т.к. для получения эффективных коэффициентов упругости нужно только оно. Уравнение (2.10) в результате осреднения в рамках МУМ приводит к различному смещению фаз, рассмотрение которого опускается в настоящей работе. Для выполнения последующих выкладок произведем перенос обобщенной производной $\nabla_q^{(2)}$ на функцию Грина. Отметим, что для обобщенной производной обычное интегрирование по частям не работает, т.к. не выполняется правило дифференцирования произведения $\nabla \mathbf{G} \boldsymbol{\varepsilon} \neq (\nabla \mathbf{G}) \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{G} (\nabla \boldsymbol{\varepsilon})$ вследствие наличия у обобщенной производной сингулярной составляющей. При этом заметим, что результат действия сингулярной составляющей от обобщенной производной $\nabla_q^{(2)}$ в выражении (2.11)

$$\int_S \left[\nabla_{(j}^{(1)} G_{i)p}^{(1,y)} \left(\lambda_{pqmn}^{(y)} - \lambda_{pqmn}^* \right) \varepsilon_{mn}^{(y)} \right]_{y=x} ds_q$$

не изменится при ее переносе на функцию Грина. В последнем выражении произведено интегрирование по объему. При выполнении интегрирования по частям для обычной составляющей $\partial_q^{(2)}$ обобщенной производной $\nabla_q^{(2)}$ интеграл по бесконечно удаленной поверхности среды зануляется. Это является следствием того, что совокупность принимаемых значений подынтегрального выражения $\left(\lambda_{pqmn}^{(2)} - \lambda_{pqmn}^* \right) \varepsilon_{mn}^{(2)}$ на бесконечно удаленной поверхности среды можно считать осреднением по поверхности, эквивалентным осреднению по объему (2.3). Применение формул (2.3) приводит к занулению этого слагаемого в силу равенств

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = c_1 \lambda_{ij\alpha\beta}^1 \langle \varepsilon_{\alpha\beta}^1 \rangle + c_2 \lambda_{ij\alpha\beta}^2 \langle \varepsilon_{\alpha\beta}^2 \rangle = \lambda_{ij\alpha\beta}^* \langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle. \quad (2.12)$$

При этом функция Грина на бесконечности (вне переходного масштаба) не отражает скоррелированности фаз. С учетом интегрирования по частям и переноса

сингулярной составляющей обобщенной производной на функцию Грина имеем выражение

$$\varepsilon_{ij}^{(1)} = \langle \varepsilon_{ij}^{(1)} \rangle + \int_V \tilde{\nabla}_q^{(2)} \nabla_{(j}^{(1)} G_{i)p}^{(1,2)} (\lambda_{pqmn}^{(2)} - \lambda_{pqmn}^*) \varepsilon_{mn}^{(2)} d\mathbf{r}^{(2)}, \quad (2.13)$$

в котором знак перед интегралом поменялся относительно выражения (2.11) и введен оператор $\tilde{\nabla}_q^{(2)}$, отличающийся от обобщенной производной $\nabla_q^{(2)}$ знаком перед сингулярной составляющей.

Решение (2.13) описывает истинную среду. С целью получения эффективных коэффициентов упругости предлагается провести осреднение уравнений (2.13). Выполнение осреднения должно отражать тот факт, что уравнения (2.13) являются двухточечными. В своем подходе [41] Хорошун Л.П. проводит статистическое осреднение полученных уравнений методом условных моментов, т.е. реальная структура рассматривается как стохастическая, обладающая статистически однородными и изотропными свойствами. Функцию Грина $G_{ip}^{(1,2)}$, определяемую уравнением (2.9), при этом в отличие от подхода [41] следует считать случайной функцией, зависящей от положения точек $\mathbf{r}^{(1)}$ и $\mathbf{r}^{(2)}$ и фаз в них. Как и в модели [41] подействуем на стохастические уравнения (2.13) статистическим осреднением – методом условных моментов. Интегрируя уравнение (2.13) по функции условной плотности распределения полей и материальных коэффициентов $f(\tilde{\nabla}_q^{(2)} \nabla_{(j}^{(1)} G_{i)p}^{(1,2)}, \varepsilon_{ij}^{(1)}, \varepsilon_{ij}^{(2)}, \lambda_{ij\alpha\beta}^{(2)} |_{\nu}^{(1)})$, получим его осредненный вид

$$\langle \varepsilon_{ij}^{(1)\nu} \rangle = \langle \varepsilon_{ij}^{(1)} \rangle + \sum_{k=1}^2 \int_V \langle \tilde{\nabla}_q^{(2)} \nabla_{(j}^{(1)} G_{i)p}^{(1,2)} |_{k}^{(2)} |_{\nu}^{(1)} \rangle (\lambda_{pqmn}^k - \lambda_{pqmn}^*) \langle \varepsilon_{mn}^{(2)k} |_{\nu}^{(1)} \rangle w_k^{(2)} |_{\nu}^{(1)} d\mathbf{r}^{(2)}. \quad (2.14)$$

Слагаемое $w_k^{(2)} |_{\nu}^{(1)} = c_k + (\delta_{\nu k} - c_k) \varphi^{(1,2)}$ характеризует вероятностную функцию геометрии структуры, которая определяет вероятность нахождения фазы k в

точке $\mathbf{r}^{(2)}$ при условии, что фаза ν расположена в точке $\mathbf{r}^{(1)}$; $\varphi^{(1,2)}$ – корреляционная функция геометрии структуры. Запись $\langle \varepsilon_{mn}^{(2)k} \left| \begin{smallmatrix} (1) \\ \nu \end{smallmatrix} \right. \rangle$ обозначает условно осредненный тензор деформаций в точке $\mathbf{r}^{(2)}$ для фазы k при условии, что в точке $\mathbf{r}^{(1)}$ находится компонента ν . Для этих членов не выполняется равенство $\langle \varepsilon_{mn}^{(2)k} \left| \begin{smallmatrix} (1) \\ \nu \end{smallmatrix} \right. \rangle \neq \langle \varepsilon_{mn}^{(2)k} \rangle$, что является следствием наличия флуктуаций поля в структуре, возникающих из-за конфигурации внутренних границ. Характеризующая микроструктурные особенности системы функция Грина и ее условно осредненное значение $\langle \tilde{\nabla}_q^{(2)} \nabla_{(j}^{(1)} G_{i)p}^{(1,2)} \left| \begin{smallmatrix} (2) & (1) \\ k & \nu \end{smallmatrix} \right. \rangle$ определяют отклонение поля деформаций $\langle \varepsilon_{mn}^{(2)k} \left| \begin{smallmatrix} (1) \\ \nu \end{smallmatrix} \right. \rangle$ от $\langle \varepsilon_{mn}^{(2)k} \rangle$. Получение вида на условно осредненные члены $\langle \varepsilon_{mn}^{(2)k} \left| \begin{smallmatrix} (1) \\ \nu \end{smallmatrix} \right. \rangle$ и $\langle \tilde{\nabla}_q^{(2)} \nabla_{(j}^{(1)} G_{i)p}^{(1,2)} \left| \begin{smallmatrix} (2) & (1) \\ k & \nu \end{smallmatrix} \right. \rangle$ представляет собой нетривиальный вопрос. Далее предполагается рассмотреть приближение

$$\langle \tilde{\nabla}_q^{(2)} \nabla_{(j}^{(1)} G_{i)p}^{(1,2)} \left| \begin{smallmatrix} (2) & (1) \\ k & \nu \end{smallmatrix} \right. \rangle \langle \varepsilon_{mn}^{(2)k} \left| \begin{smallmatrix} (1) \\ \nu \end{smallmatrix} \right. \rangle = \langle \tilde{\nabla}_q^{(2)} \nabla_{(j}^{(1)} G_{i)p}^{(1,2)} \rangle \langle \varepsilon_{mn}^{(2)k} \rangle,$$

которое предполагает, что информация о флуктуациях полей деформаций в фазах сосредоточена в осредненном члене $\langle \tilde{\nabla}_q^{(2)} \nabla_{(j}^{(1)} G_{i)p}^{(1,2)} \rangle$, связанном с осредненной функцией Грина. Также предполагается, что осредненное слагаемое $\langle \tilde{\nabla}_q^{(2)} \nabla_{(j}^{(1)} G_{i)p}^{(1,2)} \rangle$ осредненно учитывает то, какие фазы расположены в точках $\mathbf{r}^{(1)}$, $\mathbf{r}^{(2)}$. Далее рассмотрим ситуацию, для которой имеет место равенство

$$\langle \tilde{\nabla}_q^{(2)} \nabla_{(j}^{(1)} G_{i)p}^{(1,2)} \rangle = -\partial_q^{(1)} \partial_{(j}^{(1)} \langle G_{i)p}^{(1,2)} \rangle,$$

что следует из постановки условия на скачки функции Грина $[\mathbf{G}]_x = 0$ на внутренних границах, при котором сингулярные составляющие от действия оператора $\tilde{\nabla}_q^{(2)} \nabla_j^{(1)}$ зануляются. С позиции действия на функционал (функцию Грина) оператор $\tilde{\nabla}_q^{(2)} \nabla_j^{(1)}$ отличается от оператора $\nabla_q^{(1)} \nabla_j^{(1)}$ вследствие действия на разные точки и отличия $\tilde{\nabla}_q^{(2)}$ от $\nabla_q^{(2)}$. Сингулярные составляющие оператора $\nabla_q^{(1)} \nabla_j^{(1)}$ не зануляются при условии $[\mathbf{G}]_x = 0$ вследствие существования разрывов $[\partial \mathbf{G}]|_x \neq$

0. Относительно тензора Грина $G_{mp}^{(1,2)}$, являющегося анизотропным и неоднородным на переходном масштабе, осредненный тензор Грина $\langle G_{mp}^{(1,2)} \rangle$ является однородным и изотропным, что привело к изменению знака при смене $\partial_q^{(2)} \rightarrow \partial_q^{(1)}$ в последнем выражении.

Перепишем уравнение (2.14) с учетом проведенных выкладок:

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_{ij}^{(1)\nu} \rangle &= \langle \varepsilon_{ij}^{(1)} \rangle - \\ &- \sum_{k=1}^2 \int_V \partial_q^{(1)} \partial_{(j}^{(1)} \langle G_{i)p}^{(1,2)} \rangle (\lambda_{pqmn}^k - \lambda_{pqmn}^*) \langle \varepsilon_{mn}^{(2)k} \rangle w_{(k}^{(2)} |_{\nu}^{(1)} \rangle d\mathbf{r}^{(2)}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Полученное решение отличается от [41] функцией Грина, полученной с учетом формализма обобщенных производных, направленного отобразить микроструктуру гетерогенной среды. Если умножить полученное решение (2.15) на $c_\nu \lambda_{pqmn}^*$ и просуммировать по фазам ν ($\nu = 1, 2$), то получившийся интеграл будет равен нулю. Это возможно, если подынтегральное выражение в каждой точке $\mathbf{r}^{(2)}$ зануляется, что следует из выполнения уравнения (2.12). Аналогично, если умножить решение (2.15) на c_ν и просуммировать по ν , то получившийся интеграл также будет равен нулю, что является корректным с учетом уравнения (2.12). Имея осредненные уравнения на деформации в фазах (2.15), запишем уравнение на разницу осредненных деформаций $\langle \varepsilon_{ij}'^{(1)} \rangle = \langle \varepsilon_{ij}^1 \rangle - \langle \varepsilon_{ij}^2 \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_{ij}'^{(1)} \rangle &= - \int_V \partial_q^{(1)} \partial_{(j}^{(1)} \langle G_{i)p}^{(1,2)} \rangle \varphi^{(1,2)} \left\{ \lambda_{pqmn}' \langle \varepsilon_{mn}^{(2)} \rangle \right. \\ &\quad \left. + (\lambda_{pqmn}'' - \lambda_{pqmn}^*) \langle \varepsilon_{mn}'^{(2)} \rangle \right\} d\mathbf{r}^{(2)}, \end{aligned} \quad (2.16)$$

где в подынтегральном выражении использованы равенства

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_{\alpha\beta}^1 \rangle &= \langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle + c_2 \langle \varepsilon'_{\alpha\beta} \rangle, & \langle \varepsilon_{\alpha\beta}^2 \rangle &= \langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle - c_1 \langle \varepsilon'_{\alpha\beta} \rangle, \\ \lambda'_{ij\alpha\beta} &= \lambda_{ij\alpha\beta}^1 - \lambda_{ij\alpha\beta}^2, & \lambda''_{ij\alpha\beta} &= c_2 \lambda_{ij\alpha\beta}^1 + c_1 \lambda_{ij\alpha\beta}^2. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Выделение зависимости $\langle \varepsilon'_{ij} \rangle = Q_{ij\alpha\beta} \langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle$ из уравнения (2.16) приведет к искомому нахождению эффективных коэффициентов, входящих в осредненный закон Гука $\langle \sigma_{ij} \rangle = \lambda_{ij\alpha\beta}^* \langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle$. Данный аргумент следует исходя из соотношений

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \lambda_{ij\alpha\beta}^* \langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle = \langle \lambda_{ij\alpha\beta} \rangle \langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle + c_1 c_2 \lambda'_{ij\alpha\beta} \langle \varepsilon'_{\alpha\beta} \rangle, \quad (2.18)$$

полученных с учетом выражений (2.12) и (2.17). Отметим, что если уравнение (2.15) умножить на $c_\nu \lambda_{pqmn}^\nu$ и провести суммирование по ν , то с учетом уравнения на разность осредненных деформаций (2.16) будет следовать уравнение (2.18). Из работы [41] данный результат не получается, т.к. присутствует некорректность, связанная с отсутствием члена $\langle \varepsilon_{ij}^{(1)} \rangle$ в осредненных уравнениях, начиная с (2.11).

Уравнение (2.16) в силу изотропии и однородности осредненной функции Грина и корреляционной функции геометрии структуры представляет собой свертку. Исходя из этого в МУМ для выделения зависимости $\langle \varepsilon'_{ij} \rangle = Q_{ij\alpha\beta} \langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle$ к уравнению (2.16) применяется преобразование Фурье. Следствиями выполненной операции являются разделенными: выражение в фигурной скобке { }, связанное с полями, и интегралы

$$R_{ijpq}(\mathbf{k}) = - \int \partial_q \partial_{(j} \langle G_{i)p} \rangle(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (2.19)$$

отображающие информацию об отклике поля в среде на распространяющееся поле и о геометрии структуры. Представлять уравнения (2.16) в Фурье-пространстве здесь не будем, т.к. их вид остался аналогичным формализму подхода [41]. Зная вид уравнений (2.16) в Фурье-пространстве, известен Фурье-образ соотношения $\langle \varepsilon'_{\alpha\beta} \rangle = Q_{ij\alpha\beta} \langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle$. Подставив это соотношение в Фурье-образ уравнения (2.18), получим итоговое выражение по вычислению эффективных коэффициентов упругости:

$$\lambda_{jka\beta}^* = \langle \lambda_{jka\beta} \rangle + c_1 c_2 \lambda'_{jkmn} (I_\gamma \delta_{mn} + R_{\gamma\delta pq} (\lambda_{pqmn}^* - \lambda''_{pqmn}))^{-1} R_{\gamma\delta r\nu} \lambda'_{r\nu\alpha\beta}. \quad (2.20)$$

В полученном равенстве считается, что интегралы $R_{jkpq}(\mathbf{k})$ не зависят от вектора \mathbf{k} , т.е. $R_{jkpq}(\mathbf{k}) = R_{jkpq}(\mathbf{0})$. Это связано с тем, что масштабы неоднородности в структуре полагаются малыми относительно характерного масштаба макроточки, отображающей осредненное значение поля и характерный масштаб его изменения. Разложение $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ по степеням $\mathbf{k}\mathbf{r}$ приведет к зависимости от \mathbf{k} эффективного тензора упругости $\lambda_{jka\beta}^*(\mathbf{k})$, что при выполнении обратного преобразования Фурье модифицирует закон Гука с операторной точки зрения [41].

Для нахождения тензора $\lambda_{jka\beta}^*$ следует вычислить интегралы $R_{jkpq}(0)$, значения которых зависят от осредненной функции Грина $\langle G_{mp}^{(1,2)} \rangle$. Считаем, что выполняется гипотеза эргодичности (об эквивалентности пространственного и статистического осреднений). Приведем уравнение на осредненную функцию Грина $\langle G_{mp}^{(1,2)} \rangle$, которое получим путем осреднения уравнений (2.9) по координатам $\mathbf{r}^{(1)}$ и $\mathbf{r}^{(2)}$ согласно формулам (2.3):

$$\begin{aligned} \lambda_{ijml}^* \partial_j^{(1)} \partial_l^{(1)} \langle \langle G_{mp}^{(1,2)} \rangle \rangle + \lambda_{ijml}^* \int_S \left[\partial_l^{(y)} \langle G_{mp}^{(y,2)} \rangle \right]_{\mathbf{y}=\mathbf{R}^{(1)}+\mathbf{x}} ds_j + \\ + \lambda_{ijml}^* \partial_j^{(1)} \int_S \left[\langle G_{mp}^{(y,2)} \rangle \right]_{\mathbf{y}=\mathbf{R}^{(1)}+\mathbf{x}} ds_l = \delta_{ip} \delta(\mathbf{R}^{(1)} - \mathbf{R}^{(2)}). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Запись $\langle \langle G_{mp}^{(1,2)} \rangle \rangle$ означает осреднение по координатам $\mathbf{r}^{(1)}$ и $\mathbf{r}^{(2)}$, запись $\langle G_{mp}^{(y,2)} \rangle$ означает осреднение только по координате $\mathbf{r}^{(2)}$. Полученное уравнение отображает информацию о том, что интегралы по поверхности, возникшие вследствие концепции обобщенной производной, дополняют источник $\delta(\mathbf{R}^{(1)} - \mathbf{R}^{(2)})$. Соответствующее дополнение обобщает работу [41], где используется оператор $\lambda_{ijml}^* \partial_j^{(1)} \partial_l^{(1)}$ и тривиальный источник. Анализ уравнения (2.21) представляет существенные трудности. Предположим, что решение на функцию осредненного тензора Грина реальной среды $\langle G_{mp}^{(1,2)} \rangle$ найдено, исходя из чего запишем уравнение

$$\lambda_{ijml}^* \partial_j \partial_l \langle G_{mp}^{(1,2)} \rangle = T_{ip}^{(1,2)}, \quad (2.22)$$

где источниковый член $T_{ip}^{(1,2)}$ осредненно учитывает микроструктурные особенности системы, выраженные поверхностными интегралами в уравнении (2.9) и в его осредненной версии (2.21). Представленное уравнение через источник направлено выразить переходный слой через конфигурацию зарядов и диполей, осредненно удовлетворяющих внутренним граничным условиям. С учетом этого представим выражение для источника в виде

$$T_{ip}^{(1,2)} = \delta_{ip} \sum_k \rho_k \delta(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{x}_k), \quad (2.23)$$

где точки \mathbf{x}_k и функции ρ_k отражают геометрические свойства структуры и физические свойства фаз K_1, μ_1, K_2, μ_2 . Пропорциональность источника символу Кронекера δ_{ip} подразумевает осредненную изотропность в структуре. Зависимости источника по типу $\delta(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{x}_k)$ подразумевает осредненную однородность в структуре. В случае непрерывного распределения точек \mathbf{x}_k и функций ρ_k ряд в (2.23) в пределе переходит в интеграл.

Воспользуемся выражением для источника $T_{ip}(\mathbf{r})$ в виде (2.23). Члены $R_{jkpq}(0)$ при этом включают интеграл

$$\gamma = \int \sum_l \rho_l \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_l) \varphi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (2.24)$$

что является следствием учета только сингулярной составляющей от действия вторых производных на функцию Грина $\partial_q \partial_j \langle G_{ip} \rangle(\mathbf{r}) \propto \sum_k \rho_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_k)$. То есть интегралы $R_{jkpq}(0)$ при этом отображают информацию о микроструктуре среды $\gamma = \sum_l \rho_l \varphi(\mathbf{x}_l)$. Если производные рассматриваются не в обобщенном смысле, то источник имеет вид как в работе [41]: $T_{ip}(\mathbf{r}) = \delta_{ip} \delta(\mathbf{r})$ и учет сингулярной составляющей от действия вторых производных на функцию Грина $\partial_q \partial_j \langle G_{ip} \rangle(\mathbf{r}) \propto \delta(\mathbf{r})$ приведет при этом к потере информации о микроструктуре системы

$\varphi(\mathbf{0}) = 1$ (если соответствующая информация имеется). При данных рассуждениях учитывается, что находить функцию Грина не нужно, т.к. имеет значение только сингулярная составляющая от действия на нее вторых производных. С позиции уравнения на функцию Грина (2.9) равенство источника $T_{ip}(\mathbf{r}) = \delta_{ip}\delta(\mathbf{r})$ эквивалентно отсутствию у системы поверхностных интегралов с конфигурацией дельта-функций, что отображает отсутствие нетривиального переходного слоя, за которым среда обладает эффективными свойствами. Равенство источника $T_{ip}(\mathbf{r}) = \delta_{ip}\delta(\mathbf{r})$ с топологической точки зрения означает то, что относительно каждого рассматриваемого узла с определенной фазой в нем остальные узлы (микроточки) анализируемой евклидовой решетки являются нескоррелированными; понятие границ при этом теряет смысл (“размывается”) и за пределом рассматриваемого узла среда обладает эффективными свойствами. Вычисление интегралов (2.19) при $e^{-ikr} = 1$ с учетом формулы (2.24) приводит к выражению

$$R_{jkpq} = \frac{\gamma}{3} \frac{1}{\mu^*} I_{jkpq} - \frac{\gamma}{15} \frac{K^* + \frac{1}{3}\mu^*}{\mu^* \left(K^* + \frac{4}{3}\mu^*\right)} (\delta_{jk}\delta_{pq} + 2I_{jkpq}), \quad (2.25)$$

отличающемся от работы [41] наличием параметра $\gamma \neq 1$. Случаю $\gamma = 1$ соответствует $T_{ip}(\mathbf{r}) = \delta_{ip}\delta(\mathbf{r})$. Подставив вычисленные R_{jkpq} в формулу (2.20), получим модифицированные эффективные коэффициенты упругости

$$K^* = c_1 K_1 + c_2 K_2 - \frac{c_1 c_2 (K_1 - K_2)^2}{c_1 K_2 + c_2 K_1 + K^* \frac{1-\gamma}{\gamma} + \frac{4}{3\gamma} \mu^*},$$

$$\mu^* = c_1 \mu_1 + c_2 \mu_2 - \frac{c_1 c_2 (\mu_1 - \mu_2)^2}{c_1 \mu_2 + c_2 \mu_1 + \frac{\mu^* \left(\left(\frac{5}{2} - \gamma \right) K^* + 2 \left(\frac{5}{3} - \gamma \right) \mu^* \right)}{K^* + 2\mu^*}}. \quad (2.26)$$

При $\gamma = 1$ полученные эффективные коэффициенты согласуются с работами [11, 12, 13, 41, 43].

Исследование структурного вида параметра γ . Определяемая выражением (2.24) функция γ содержит характерные масштабы структуры, что является следствием формулы (2.19), в которой производится интегрирование корреляционной функции геометрии среды $\varphi(\mathbf{r})$ и функции Грина с действующими на нее производными $\partial_q \partial_{(j)(G_i)p}(\mathbf{r})$.

Нахождение функции Грина для гетерогенной среды с реальной микроструктурой является нетривиальной задачей. Для отображения механизма получения размеров в выражении на функцию Грина (соответственно и в параметре γ), рассмотрим модельную ситуацию, в которой два шара радиуса R , находятся на расстоянии l . Данное рассмотрение упрощенно отображает ситуацию, в которой одна из фаз является шарами радиуса R , а вторая заполняет оставшееся пространство. Для нахождения параметра γ как и в [55] представим корреляционную функцию $\varphi(\mathbf{r})$ в виде $\varphi(\mathbf{r}) = e^{-r/(\beta c_1 R)}$, где β – некоторый структурный коэффициент, c_1 – концентрация шаров. Для указания того, как рассматриваемая микроструктура дополняет главный заряд $\delta(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)})$ в уравнении на функцию Грина (2.9), применим метод изображений для оценивания структурного вида источника $T_{ip}(\mathbf{r})$, определяемого выражениями (2.22), (2.23). Для определенности будем считать, что точка с координатой $\mathbf{r}^{(2)}$ находится в центре шара один и в ней помещен главный заряд $\rho_0 \delta(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)})$, $\rho_0 = 1$. Для удовлетворения граничных условий на функцию Грина $\mathbf{K}\mathbf{G}^v = \mathbf{0}$ на расстоянии $x_1 = R^2/l$ от центра второго шара на линии, соединяющей центры шаров, следует поместить изображение главного заряда. Мощность ρ_1 этого заряда уже будет отлична от мощности главного заряда ρ_0 и будет пропорциональна отношению R/l и содержать зависимость, связанную с различными модулями упругости фаз K_1, μ_1 и K_2, μ_2 . Помещенный заряд $\rho_1 \delta(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{x}_1)$ в свою очередь создаст изображение в шаре один. При этом $\rho_2 \propto (R/l)^2 / (1 - (R/l)^2)$, $x_2 = R^2 / (l - R^2/l)$. Соответствующим образом строится конфигурация зарядов ρ_l в точках \mathbf{x}_l , описывающая взаимовлияние областей, разделенных областью с другими физическими свойствами, на распространение

поля по структуре. Здесь игнорировалось возможное (зависящее от граничных условий) размещение зарядов-изображений в центры каждого из шаров. Запишем функцию γ в виде

$$\gamma = \sum_l \rho_l \varphi(\mathbf{x}_l) = 1 + \frac{R}{l} Q \left(\frac{R}{l}, \frac{K_1}{K_2}, \frac{\mu_1}{\mu_2}, \frac{\mu_1}{K_2}, \frac{K_1}{\mu_2} \right), \quad (2.27)$$

где масштаб l можно интерпретировать как осредненное расстояние между шарами в структуре. Свяжем характерные масштабы R и l с объемными концентрациями фазы сфер c_1 и второй фазы c_2 соответственно. Имеем $c_1 = R^3/V_0$, $c_2 = \alpha^3 l^3/V_0$, где α – некоторый масштабный коэффициент.

Представим выражение для γ в следующем виде

$$\gamma = 1 + \tilde{Q} \left(c_1, \frac{K_1}{K_2}, \frac{\mu_1}{\mu_2}, \frac{\mu_1}{K_2}, \frac{K_1}{\mu_2} \right). \quad (2.28)$$

В случае $\gamma = 1$ информация о масштабах в структуре отсутствует, т.е. выделение масштабов R и l теряет при этом смысл. Согласно приведенным выше выкладкам значение $\gamma = 1$ есть следствие отсутствия поверхностных интегралов в уравнении на функцию Грина (2.9). Определяемая при этом оператором $\lambda_{ijml}^* \partial_j \partial_l$ и источником, содержащим один заряд $\delta(\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)})$, функция Грина не отображает микроструктуру гетерогенной среды. Согласно указанной топологической точки зрения в этом случае в каждом из узлов в среде присутствует одна из фаз и фазы в соседних и более удаленных узлах при этом не являются скоррелированными, т.е. понятие границ и масштабов теряет смысл (согласно действию оператора $\lambda_{ijml}^* \partial_j \partial_l$ каждый шар является микроточкой), а переходный слой при этом ограничивается рассматриваемым узлом (микроточкой). Отметим, что при малой концентрации сфер $c_1 \ll 1$, $\frac{R}{l} \ll 1$ также имеет место равенство $\gamma = 1$, отклонение от которого (по типу $\gamma = 1 + c_1$) приведет в превышению порядка точности при разложении коэффициентов (2.26). Причем в случае $c_1 \ll 1$ не важно как распределена среда: случайно или упорядоченно (это утверждение следует из аналогии для

моделей Релея [15] и Максвелла [14], описывающих электропроводность гетерогенных сред). Случай $\gamma = 1$ при этом отображает отсутствие взаимовлияния полей между составляющими одной фазы.

Представим модельные выражения (2.27), (2.28) на функцию γ в случае существенного различия между упругими параметрами фаз. Для этого возьмем выражение для источника в виде

$$T_{ip}(\mathbf{r}) = \delta_{ip} \delta(\mathbf{r}) + \delta_{ip} \frac{R}{l} \delta\left(\mathbf{r} - \frac{R^2}{l} \mathbf{n}_l\right), \quad (2.29)$$

приблизительно отображающем рассмотренное выше взаимовлияние двух шаров. Единичный вектор \mathbf{n}_l в силу изотропии зададим в виде $\mathbf{n}_l = \mathbf{r}/r$. С учетом выражения $\varphi(\mathbf{r}) = e^{-r/(\beta c_1 R)}$ найдем функцию γ :

$$\gamma = 1 + \frac{R}{l} \exp\left(-\frac{1}{\beta c_1} \frac{R}{l}\right).$$

Учитывая формулы $c_1 = R^3/V_0$, $c_2 = \alpha^3 l^3/V_0$, перепишем полученное выражение через объемные концентрации фаз

$$\gamma = 1 + \alpha \left(\frac{c_1}{c_2}\right)^{1/3} \exp\left(-\frac{\alpha}{\beta c_1} \left(\frac{c_1}{c_2}\right)^{1/3}\right). \quad (2.30)$$

Полученное модельное выражение на γ является функцией двух структурных параметров α и β . Как функция объемной концентрации сфер c_1 формула (2.30) испытывает экстремум, являющийся максимумом. Свяжем этот экстремум с критической объемной концентрацией сфер c_{1crit} , при которой они становятся макроскопически связными. Выражение на критическую концентрацию c_{1crit} следует из анализа коэффициентов (2.26). Экстремум в точке $c_1 = c_{1crit}$ позволяет получить выражение $\left(\frac{c_{1crit}}{c_{2crit}}\right)^{1/3} \frac{\alpha}{\beta c_{1crit}} = 1$, связывающее параметры α и β в результате чего модель (2.30) определяется только одним параметром. Соответствующий параметр можно найти из эксперимента, направленного на поиск модуля Юнга системы при определенной объемной концентрации фаз.

Таким образом, для анализа упругих свойств гетерогенной среды в работе введена концепция обобщенной производной, которая наличием сингулярной составляющей отображает поведение полей на внутренних границах неоднородной среды, разделяющих фазы с разными физическими свойствами. Во введенном формализме обобщенной производной поверхностная дельта-функция выражена альтернативным образом относительно подхода Шварца, но не противоречит ему. В результате применения пространственного осреднения к формуле для обобщенной производной получена пространственная теорема осреднения в рамках теории смесей. Замена в исходной модели линейной теории упругости обычных производных на обобщенные сохраняет физическую суть исследуемых уравнений и корректность постановки задачи. Модифицированный обобщенными производными оператор в исходной модели линейной теории упругости приводит к функции Грина, характеризующей микроструктурные особенности гетерогенной среды. В результате использования МУМ, базирующегося на функции Грина, в итоговых эффективных коэффициентах упругости интегрально учтена микроструктура системы.

2.2. Учет обобщенной производной и коллективного влияния фаз на процесс гомогенизации

Введение раздела

Проводится получение эффективных коэффициентов переноса гетерогенной среды на основе формализма обобщенной производной, отображающей внутренние границы гетерогенной среды. Формула для обобщенной производной является следствием применения вариационного аппарата к функционалу энергии для гетерогенной среды с учетом индикаторной функции, характеризующей фазу в точке. То есть в результате варьирования функционала находится уравнение переноса с модифицированным оператором, где модификация связана с наличием производных, действующих на индикаторную функцию, и ею определяется обоб-

щенная производная. Обобщенная производная наличием сингулярной составляющей учитывает конфигурацию внутренних границ гетерогенной среды. Представленный формализм получения обобщенной производной является новым. Впервые обобщенная производная введена в рамках функционального анализа в работе [54], а для анализа гетерогенных сред она впервые введена в работе [2] в другом виде. В работе [2] на основе данной концепции показана возможность учета внутренних границ раздела фаз. На основе полученного модифицированного оператора и проведенного осреднения ищется решение на осредненную функцию Грина. Исходя из анализа интегро-дифференциального уравнения с разрывами и введенных гипотез решение имеет вид потенциала Юкавы, характеризующего с физической точки зрения переходный слой, вызванный экранированием зарядов. Данный потенциал направлен выразить решение задачи многих тел в гетерогенной среде и отобразить коллективное влияние фаз на распространяющееся поле по системе. На основе найденного решения эффективные коэффициенты переноса интегрально учитывают микроструктуру системы (физические свойства фаз и характерные масштабы) в явном виде. Основу данного раздела формирует статья [3].

Постановка задачи

Получим уравнение переноса с модифицированным оператором для микро-неоднородной двухфазной среды в трехмерном пространстве, используя функционал энергии

$$E = \frac{1}{2} \int_V \sum_{\nu} \sigma_{\nu} f_{\nu} \partial_j (\varphi_{\nu} f_{\nu}) \partial_j (\varphi_{\nu} f_{\nu}) dr, \quad (2.31)$$

где $f_{\nu}(\mathbf{r})$ – индикаторная функция, характеризующая фазу ν в точке, $\nu = 1, 2$. Если в точке находится фаза ν , то $f_{\nu}(\mathbf{r}) = 1$, иначе имеем $f_{\nu}(\mathbf{r}) = 0$. Индикаторная функция неотделима от анализируемого поля $\varphi_{\nu} f_{\nu}$ и коэффициента переноса $\sigma_{\nu} f_{\nu}$. Анализируемым полем в силу аналогии может являться электрическое, тепловое,

диффузионное поле. Акцент на рассмотрении конкретного поля не делаем, но используем обозначения, соответствующие электрическому полю. Исходная модель является стационарной изотропной линейной моделью. Применим к функционалу (2.31) вариационный формализм, в результате чего имеем цепочку равенств

$$\begin{aligned}\delta E &= \int_V \sum_{\nu} \sigma_{\nu} f_{\nu} \partial_j (\delta \varphi_{\nu} f_{\nu}) \partial_j (\varphi_{\nu} f_{\nu}) d\mathbf{r} = \\ &= \int_S \sum_{\nu} f_{\nu} \sigma_{\nu} \delta \varphi_{\nu} \partial_j \varphi_{\nu} ds_j - \int_V \sum_{\nu} \delta \varphi_{\nu} f_{\nu} \partial_j (\sigma_{\nu} f_{\nu} \partial_j (\varphi_{\nu} f_{\nu})) d\mathbf{r} = \\ &= - \int_V \sum_{\nu} \delta \varphi_{\nu} f_{\nu} [\sigma_{\nu} f_{\nu} \partial_j \partial_j \varphi_{\nu} + \sigma_{\nu} (\partial_j f_{\nu}) \partial_j \varphi_{\nu} + \sigma_{\nu} (\partial_j \partial_j f_{\nu}) \varphi_{\nu}] d\mathbf{r} = 0,\end{aligned}$$

где S – внешняя поверхность системы, вариации на которой равны нулю. В используемых выкладках использованы равенства: $f_{\nu} f_{\nu} = f_{\nu}$, $f_{\nu} \partial_j f_{\nu} = \partial_j f_{\nu}$, $f_{\nu} \partial_j \partial_j f_{\nu} = \partial_j \partial_j f_{\nu}$ (обоснование последних двух дано ниже). Учитывая, что $\frac{\delta \varphi_{\nu}(\mathbf{r}')}{\delta \varphi_{\mu}(\mathbf{r})} = \delta_{\nu\mu} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, получим уравнение переноса для фазы ν

$$\sigma_{\nu} f_{\nu} \partial_j \partial_j \varphi_{\nu} + \sigma_{\nu} \partial_j \varphi_{\nu} \partial_j f_{\nu} + \sigma_{\nu} \varphi_{\nu} \partial_j \partial_j f_{\nu} = 0. \quad (2.32)$$

В одномерном случае индикаторная функция f_{ν} с разрывом в одной точке является функцией Хевисайда, а ее производная является одномерной дельта-функцией. Для пространства заданной размерности индикаторная функция является функцией Хевисайда нескольких переменных. Для производной от индикаторной функции при этом имеет место формула

$$\partial_j f_{\nu} = \int_{S_k} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j, \quad (2.33)$$

где S_k – внутренняя граница с номером k , \mathbf{x} – координата поверхности. Согласно формуле (2.33) каждой точке \mathbf{x} поверхности разрыва соответствует своя дельта-функция $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{x})$. Доказательство формулы (2.33) сводится к рассмотрению каждого участка поверхности. Исходя из чего интегрирование $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{x})$ на поверхно-

сти приводит к одномерной дельта-функции $\delta(x - x_k)$, где координата x относится к оси, направленной по нормали к поверхности. То есть приходим к известному выражению для производной от одномерной функции Хевисайда, которое, действуя обратным образом, приводится к выражению (2.33).

Учитывая формулу (2.33) уравнение (2.32) примет вид

$$\begin{aligned} \sigma_\nu f_\nu \partial_j \partial_j \varphi_\nu + \sum_k \int_{S_k} \sigma_\nu \partial_j \varphi_\nu \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j + \\ + \sum_k \int_{S_k} \sigma_\nu \varphi_\nu \partial_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j = 0. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Найденное выражение проверяется подстановкой формулы (2.33) в функционал (2.31) при воздействии на него вариационного формализма.

Используя формулу (2.33) с учетом найденного уравнения (2.34) получим равенства

$$\varphi_\nu (\partial_j f_\nu) = \int_{S_k} \varphi_\nu \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j, \quad \varphi_\nu (\partial_j \partial_j f_\nu) = \int_{S_k} \varphi_\nu \partial_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j,$$

Если положить $\varphi_\nu = f_\nu$, то с учетом скачкообразного изменения индикаторной функции на границе следуют формулы $f_\nu \partial_j f_\nu = \partial_j f_\nu$, $f_\nu \partial_j \partial_j f_\nu = \partial_j \partial_j f_\nu$.

Уравнение (2.34) записано для областей, занимаемых фазой ν . При сложении уравнений (2.34) для каждой из фаз гетерогенной среды уравнение для всей гетерогенной среды принимает вид

$$\sigma f \partial_j \partial_j \varphi + \sum_k \int_{S_k} [\sigma \partial_j \varphi]_x \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j + \sum_k \int_{S_k} [\sigma \varphi]_x \partial_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j = 0,$$

в котором фазовый индекс убран и где запись $[\varphi]_x$ характеризует скачек поля на границе раздела фаз $[\varphi]_x = \varphi(\mathbf{x} + \mathbf{0}) - \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{0})$. Координатами в используемой модели выступают микроточки, в каждой из которых находится одна из фаз со своими физическими свойствами. Если в микроточке находится фаза 1, то материальный коэффициент принимает значение $\sigma = \sigma_1$, аналогично и исследуемые

поля φ , $\partial_i \varphi$, $j_i = \sigma \partial_i \varphi$ (j_i характеризует поток) при этом принимают значения, соответствующие фазе 1.

Перепишем последнее полученное уравнение с модифицированным оператором к следующему виду

$$\begin{aligned} \nabla_j(\sigma \nabla_j \varphi) &= 0, \\ \nabla_j \varphi(\mathbf{r}) &= \partial_j \varphi(\mathbf{r}) + \sum_k \int_{S_k} [\varphi]_x \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j, \end{aligned} \tag{2.35}$$

где обычная производная ∂_j заменена на обобщенную производную ∇_j . Формула для обобщенной производной (2.35) следует из формулы $\partial_j(\varphi f) = \nabla_j \varphi$. Сингулярная составляющая для обобщенной производной ∇ в (2.35) является следствием выражения $\varphi(\mathbf{r}) \partial_j f(\mathbf{r})$. Индикаторную функцию при обычной составляющей для обобщенной производной можно опустить по аналогии с Римановой производной, при написании которой опускается базисный вектор.

Уравнение (2.35) следует дополнить заданием граничных условий на внутренних границах: $[j_i] = 0$, $[\varphi] = 0$ и внешней границе [2]. Отметим, что если не считать вариации на границе равными нулю, то в полученном уравнении переноса будут учтены соотношения на внешней границе.

Полученный модифицированный оператор в (2.35) учитывает конфигурацию областей и границ, разделяющих фазы и определяет обобщенную производную, что является следствием введенного функционала энергии с индикаторной функцией. Функционал (2.31) корректно выражает всю энергию гетерогенной системы, т.к. индикаторная функция не дает непосредственный вклад в значение энергии, но при этом индикаторная функция влияет на распределение поля по системе (смотрим фиксированные объемные концентрации фаз). Исходя из чего варьирование функционала (2.31) приводит к корректному уравнению переноса (2.35). В работе [2] корректность уравнений с модифицированным оператором устанавливается через формализм функций Грина и подход теории смесей [28].

Представленный формулой (2.35) вид обобщенной производной не противоречит формализму источника [54], в котором сингулярная составляющая записывается через так называемую поверхностную дельта-функцию. На основе формализма обобщенной производной и пространственного осреднения в [2] получена пространственная теорема осреднения [28], являющаяся фундаментом теории смесей.

Покажем, что формализм обобщенной производной приводит к формулам Гаусса-Остроградского, Стокса, Ньютона-Лейбница. Запишем формулу для обобщенной производной, действующей на вектор

$$\nabla_j u_i(\mathbf{r}) = \partial_j u_i(\mathbf{r}) + \int_S [u_i]_x \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_j. \quad (2.36)$$

Для получения формулы Гаусса-Остроградского формулу (2.36) следует умножить на символ Кронекера δ_{ij} , проинтегрировать по объему в области с объемом V и границей S и приравнять полученное выражение к нулю с учетом задания соответствующего граничного условия вне анализируемой области $u_i(\mathbf{x} + \mathbf{0}) = 0$. Формула Стокса получается если на формулу (2.36) подействовать тензором Леви-Чивиты e_{ijk} , проинтегрировать это выражение по площади S , приравнять полученное выражение к нулю и задать граничное условие $u_i(\mathbf{x} + \mathbf{0}) = 0$ вне анализируемой области. Формула Ньютона-Лейбница получается в одномерном случае, в котором поверхностный интеграл переходит в сумму из двух точек разрыва, между которыми находится анализируемый отрезок. Полученное выражение также интегрируется и зануляется. При этом также зануляется поле $u(x + 0) = 0$ вне анализируемой области.

Построение решения на осредненную функцию Грина

Определяемая действующим оператором функция Грина отображает отклик поля в среде на приложенное воздействие. Этот отклик в гетерогенной среде должен отображать коллективное влияние фаз на распространяющееся по неоднородной системе поле. Оператор уравнения (2.35) построен с учетом формализма обоб-

щенной производной, направленного учесть данные микроструктурные особенности системы. Для нахождения эффективного коэффициента переноса σ^* согласно работе [2] следует знать вид осредненной функции Грина $\langle G \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$, где $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$ – координаты, возникшие в результате осреднения по координатам \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 .

Для нахождения осредненной функции Грина согласно работам [41], [2] преобразуем уравнение переноса (2.35) к виду

$$\sigma^* \nabla_j \nabla_j \varphi = -\nabla_j (\sigma - \sigma^*) \nabla_j \varphi, \quad (2.37)$$

где мы добавили и отняли коэффициент σ^* . Правую часть уравнения (2.37) считаем источником. Далее проведем осреднение по объему уравнения (2.37) по формулам

$$\hat{A}\varphi = \langle \varphi \rangle(\mathbf{R}) = \frac{1}{V} \int_V \varphi(\mathbf{R} + \mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad (2.38)$$

$$c_1 \langle \varphi^1 \rangle(\mathbf{R}) = \frac{V_1}{V} \frac{1}{V_1} \int_{V_1} \varphi^1(\mathbf{R} + \mathbf{y}) d\mathbf{y},$$

где оператор \hat{A} характеризует соответствующее осреднение, V – масштаб осреднения, $V = \frac{4}{3}\pi R^3$, c_1, c_2 – объёмные концентрации фаз, $c_1 = \frac{V_1}{V}$, $c_1 + c_2 = 1$, $\langle \varphi \rangle$ – осредненный потенциал, $\langle \varphi \rangle = c_1 \langle \varphi^1 \rangle + c_2 \langle \varphi^2 \rangle$, $\langle \varphi^1 \rangle, \langle \varphi^2 \rangle$ – осредненные потенциалы фаз.

Оператором $\sigma^* \hat{A} \nabla_j \nabla_j$ определяется искомая осредненная функция Грина $\langle G \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$, определяемая уравнением

$$\begin{aligned} & \partial_i^{(1)} \partial_i^{(1)} \langle G \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) + \\ & + \sum_k \frac{1}{V} \int_{S_k} [\partial_i^{(y)} G](\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2) ds_i = \frac{1}{\sigma^*} \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2), \end{aligned} \quad (2.39)$$

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

Для полной постановки задачи на осредненную функцию Грина дополним уравнение (2.39) условиями на внутренних границах: $\left[\sigma \partial_i^{(y)} G^{(y,2)}\right]_{y=x} = 0$, $\left[G^{(y,2)}\right]_{y=x} = 0$ и условием на бесконечности $\langle G \rangle|_{\infty} = 0$.

Для построения решения интегро-дифференциального уравнения с разрывами (2.39) произведем преобразование суммы интегралов по поверхности $\sum_k \frac{1}{V} \int_{S_k} \left[\partial_i^{(y)} G\right] (\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2) ds_i$. Идея заключается в переходе от суммы последовательности границ в интеграл. Полученный результат при этом должен являться следствием сходящегося бесконечного в пределе ряда и выражать осредненные статистически однородные и изотропные свойства гетерогенной структуры. Заметим, что в силу последовательных переходов между фазами (фаза 1 переходит в фазу 2, затем фаза 2 переходит в фазу 1 и так далее) сумма является знакопеременной.

Рассмотрим область, ограниченную поверхностями радиуса y и $y + \Delta y$. В объеме $4\pi y^2 \Delta y$ имеются переходы от фазы 1 к фазе 2 через поверхность S_{12} и переходы через поверхность S_{21} . Масштаб Δy выражает характерный масштаб $\Delta = a + b$, где b и a – характерные масштабы фаз 1 и 2 соответственно.

Пусть элементарным структурным элементом фазы 2 является шар с радиусом a . При пересечении вектором $\partial_i^{(y)} G^{1(y,2)}$ (запись $G^{1(y,2)}$ характеризует функцию Грина для фазы 1) шара возникают поверхности S_{12} и S_{21} . Нормаль к поверхности S_{12} направлена внутрь, а для поверхности S_{12} находится снаружи.

Разобьем всю совокупность переходов $S_{12} \rightarrow S_{21} \rightarrow S_{12} \rightarrow S_{21} \rightarrow S_{12} \rightarrow \dots$ на пары последовательно идущих поверхностей разрыва S_{12} и S_{21} . Рассмотрим две

последовательно идущие поверхности разрыва S_{12} и S_{21} . Используя условия на границе $\sigma_1 \partial_i^{(y)} G^1 = \sigma_2 \partial_i^{(y)} G^2$, преобразуем разность $\left[\partial_i^{(y)} G \right]_{y=x} (\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2)$ для фазы 2 в интегралах по поверхности к виду

$$\begin{aligned} & \int_{S_{12}} \frac{(\sigma_1 - \sigma_2)}{\sigma_1} \partial_i^{(y)} G^2(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y} + \mathbf{a}, \mathbf{R}_2) ds_i, \\ & - \int_{S_{21}} \frac{(\sigma_1 - \sigma_2)}{\sigma_1} \partial_i^{(y)} G^2(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y} + \mathbf{a}, \mathbf{R}_2) ds_i. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Для перехода от суммы (поверхностных интегралов) к интегралу выражения (2.40) следует дополнить тем, что число переходов на расстоянии y равно $\frac{y^2}{\Delta^2}$ и учесть интегрирование по телесному углу. В результате чего имеем выражение

$$\begin{aligned} & \frac{(\sigma_1 - \sigma_2)}{\sigma_1} \int_{\Omega} \frac{1}{V} \int_0^R \left[\int_{S_{12}} \partial_i^{(y)} G^2(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y} + \mathbf{a}, \mathbf{R}_2) ds_i \frac{(y - a)^2}{\Delta^2} \right. \\ & \left. - \int_{S_{21}} \partial_i^{(y)} G^2(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y} + \mathbf{a}, \mathbf{R}_2) ds_i \frac{(y + a)^2}{\Delta^2} \right] \frac{dy d\Omega}{\Delta 4\pi} \end{aligned} \quad (2.41)$$

Вектор $\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}$ направлен к центру шара. Вектор $\mathbf{R}_1 + \mathbf{y} + \mathbf{a}$ покрывает границу области, в которой находится фаза 2.

Интеграл (2.41) учитывает всю совокупность описанных переходов между фазами с позиции фазы 2. Для фазы 1 в полученном выражении нужно провести замены: a на b , σ_1 на σ_2 , индекс 2 на 1 у функции Грина, в результате дальнейших выкладок еще нужно будет заменить c_2 на c_1 . Образовавшийся для фазы 1 знак минус в выражении типа (2.41) характеризует другую последовательность переходов между границами раздела фаз.

Вычисление интеграла (2.40) по поверхности S_{12} дает результат

$$\int_{S_{12}} \partial_i^{(y)} G^2(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y} + \mathbf{a}, \mathbf{R}_2) ds_i = \quad (2.42)$$

$$= \beta a^2 \partial_n^{(y)} G^2(R_1 + y, \mathbf{R}_2) - \frac{\beta}{3} a^3 \partial_i^{(y)} \partial_i^{(y)} G^2(\mathbf{R}_1 + y, \mathbf{R}_2),$$

где произведено разложение до первого члена по параметру a , учитывая малость $\frac{a}{R} \ll 1$. β – коэффициент формы (для половины поверхности S_{12} сферы $\beta = 2\pi$). Скалярное произведение в интеграле в силу симметрии приводит к производной в направлении вектора \mathbf{y} , которым определяются площадки раздела фаз. Это и характеризует нормальная составляющая производной. Коэффициент $\frac{1}{3}$ является следствием интегрирования по углам. Для поверхности S_{21} знак минус перед вторым членом (2.42) уйдет, что связано с сонаправленностью векторов \mathbf{a} и нормали к поверхности.

Подставляя результат (2.42) в подынтегральное выражение (2.41), получим преобразованный вид подынтегрального выражения

$$-2 \frac{\beta a^2}{\Delta^2} \left(\frac{a y^2}{3} \partial_i^{(y)} \partial_i^{(y)} G^2(\mathbf{R}_1 + y, \mathbf{R}_2) + 2 y a \partial_n^{(y)} G^2(R_1 + y, \mathbf{R}_2) \right), \quad (2.43)$$

где в силу $a^2 \ll y^2 \sim R^2$ пренебрегли членами a^2 . Исходя из выражения (2.43) имеем два интеграла, вычисление которых произведем без коэффициентов. Первый интеграл дает результат

$$\frac{1}{V} \int_{\Omega} \int_0^R \partial_i^{(y)} \partial_i^{(y)} G^2(R_1 + y, \mathbf{R}_2) y^2 dy \frac{d\Omega}{4\pi} = \frac{1}{4\pi} \partial_i^{(1)} \partial_i^{(1)} \langle G^2 \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2),$$

где учтена формула пространственного осреднения (2.38). Второй интеграл приводится к виду

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4\pi R^3} \int_0^R y \partial_n^{(y)} G^2(R_1 + y, \mathbf{R}_2) dy = \\ & = \frac{1}{4\pi R^2} G^2(R_1 + R, \mathbf{R}_2) - \frac{1}{4\pi R^3} \int_0^R G^2(R_1 + y, \mathbf{R}_2) dy. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Результат вычисления интеграла (2.44) не должен зависеть от масштаба осреднения R , который может существенно превышать масштаб Δ и при этом быть малым относительно масштаба изменения осредненного поля. Полноценное вычисление интеграла (2.44) требует дополнительных исследований и в настоящей работе опускается. Сложность заключается в корректном учете изменений функции Грина $G^2(R_1 + R, \mathbf{R}_2)$ на масштабе осреднения R , носящих флуктуационный характер (при этом искомая осредненная функция Грина меняется плавно). Используемой далее гипотезой является то, что основной вклад в интеграл определяется на масштабе $\sim \Delta$, характеризующем статистически средние масштабы в системе a и b , где находится вся необходимая информация о ней. На масштабах, больших $R \gtrsim \Delta$ члены в (2.44) заносятся из-за знаменателей. При этом интеграл сводится к виду

$$\frac{1}{4\pi R^3} \int_0^R y \partial_n^{(y)} G^2(R_1 + y, \mathbf{R}_2) dy = -\varepsilon \frac{1}{\Delta^2} \langle G^2 \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$$

Параметр ε направлен выразить связь масштабов радиуса осреднения R и масштаба Δ , $\varepsilon < 1$.

Для избавления от флуктуационного изменения $G^2(R_1 + R, \mathbf{R}_2)$ выражение (2.44), вероятно, следует проинтегрировать по масштабу осреднения R от $\sim \Delta$ до бесконечности (бесконечность здесь используется в условном смысле $\frac{R}{\Delta} \gg 1$). При этом отрицательность результата (2.44) является следствием статистически убывающей (по модулю) функции Грина. Отрицательность результата (2.44) также проявляется вследствие равенства

$$\frac{1}{R} \int_0^R G^2(R_1 + y, \mathbf{R}_2) dy = \langle G^2 \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$$

и того, что интегрирование по R члена $\frac{1}{4\pi R^2} G^2(R_1 + R, \mathbf{R}_2)$ производится с весом

$$\frac{1}{4\pi R^2}.$$

Для фазы 2 выкладки по вычислению суммы поверхностных интегралов приводят к формуле

$$\begin{aligned} & \sum_k \frac{1}{V} \int_{S_k} [\partial_i^{(y)} G](\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2) ds_i = \\ & = -\frac{(\sigma_1 - \sigma_2) \beta c_2 a^3}{\sigma_1 6\pi \Delta^3} \partial_i^{(1)} \partial_i^{(1)} \langle G^2 \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) + \frac{(\sigma_1 - \sigma_2) \beta c_2 a^3}{\sigma_1 2\pi \Delta^5} \varepsilon \langle G^2 \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2). \end{aligned}$$

Учитывая результат проведенных выкладок для фазы 2, запишем результат для фазы 1, произведя соответствующие замены:

$$\begin{aligned} & \sum_k \frac{1}{V} \int_{S_k} [\partial_i^{(y)} G](\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2) ds_i = \\ & = \frac{(\sigma_1 - \sigma_2) \beta c_1 a^2 b}{\sigma_2 6\pi \Delta^3} \partial_i^{(1)} \partial_i^{(1)} \langle G^1 \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) - \frac{(\sigma_1 - \sigma_2) \beta c_1 a^2 b}{\sigma_2 2\pi \Delta^5} \varepsilon \langle G^1 \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2). \end{aligned}$$

Складывая найденные результаты, деленные пополам (т.к. общая сумма учтена два раза), и считая осредненные функции Грина для фаз одинаковыми $\langle G^1 \rangle = \langle G^2 \rangle$, запишем итоговое уравнение

$$\begin{aligned} \partial_i^{(1)} \partial_i^{(1)} \langle G \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) - A^2 \langle G \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) &= \frac{1}{B \sigma^*} \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2), \\ A^2 &= \beta \varepsilon \frac{(\sigma_1 - \sigma_2)(c_1 b \sigma_1 - c_2 a \sigma_2) a^2}{4\pi B \sigma_1 \sigma_2 \Delta^5}, \\ B &= 1 + \frac{\beta a^2 (\sigma_1 - \sigma_2)(c_1 b \sigma_1 - c_2 a \sigma_2)}{12\pi \Delta^3 \sigma_1 \sigma_2}. \end{aligned} \tag{2.45}$$

При построении решения уравнения (2.45) полагается статистическая изотропность и однородность функции Грина $\langle G \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \langle G \rangle(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)$ и выполнение неравенства $(\sigma_1 - \sigma_2)(b\sigma_1 - a\sigma_2) \geq 0$. Решение уравнения (2.45) ищется с помощью преобразования Фурье и вычисления вычетов. Ответ имеет вид потенциала Юкавы

$$\langle G \rangle(r) = -\frac{1}{4\pi B \sigma^*} \frac{1}{r} e^{-Ar}, \quad (2.46)$$

известного из квантовой электродинамики и физики плазмы тем, что этим потенциалом с физической точки зрения характеризуется переходный слой A^{-1} , вызванный экранированием зарядов. Зарядами в анализируемом случае гетерогенной среды являются дельта-функции в определении обобщенной производной, а их разные знаки вызваны чередующейся сменой фаз. Совокупность этих дельта-функций как раз и характеризует совокупность точек границ раздела фаз в гетерогенной среде. Безразмерный параметр B в решении (2.46) также является следствием конфигурации границ раздела фаз в гетерогенной среде и с точки зрения уравнения на функцию Грина (2.45) определяет эффективный заряд.

Полученный результат является следствием нового подхода к конфигурации интегралов по поверхности в уравнении на функцию Грина (2.39). Анализ этих интегралов представляет основную проблему теории смесей [28].

Результат (2.46) выражает решение задачи многих тел в гетерогенной среде и отображает коллективное влияние фаз на распространяющееся поле по системе. Это определит новый вид искомого эффективного коэффициента переноса σ^* .

Нахождение эффективного коэффициента переноса

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

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

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

Для получения модуля σ^* используем МУМ [41]. Функционал данного подхода базируется на построении решения через формализм функций Грина, на условном осреднении и на преобразовании Фурье. В работе [2] в рамках данного подхода получены эффективные коэффициенты линейной теории упругости, учитывающие формализм обобщенной производной и интегрально отображающие

микроструктуру гетерогенной системы. Для получения эффективного модуля σ^* используем основные выкладки работы [2].

Итоговое выражение по вычислению эффективного модуля дается формулой

$$\sigma^* = \langle \sigma \rangle + c_1 c_2 (\sigma')^2 (1 + R(\mathbf{0})(\sigma^* - \sigma''))^{-1} R(\mathbf{0}), \quad (2.47)$$

где $\sigma' = \sigma_1 - \sigma_2$, $\sigma'' = c_1 \sigma_2 + c_2 \sigma_1$. Интегралы $R(\mathbf{0})$ получаются в результате применения условного осреднения и преобразования Фурье к построенному через функцию Грина решению

$$R_{ij}(\mathbf{k}) = - \int \partial_i \partial_j \langle G \rangle(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad R_{ij}(\mathbf{k}) = R(\mathbf{k}) \delta_{ij}, \quad (2.48)$$

содержащие осредненную функцию Грина $\langle G \rangle(\mathbf{r})$, имеющую ключевое значение и корреляционную функцию геометрии структуры $\varphi(\mathbf{r})$. Функцию $\varphi(\mathbf{r})$ возьмем в виде [55]: $\varphi(\mathbf{r}) = e^{-r/(\alpha c_1 a)}$, где α – некоторый структурный коэффициент, который для шара приближенно определим как $\alpha = \pi/2$.

С учетом найденной осредненной функции Грина (2.46) вычисление интегралов (2.48) при $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ приводит к выражению

$$R_{ij} = -\frac{\gamma}{3} \frac{1}{\sigma^*} \delta_{ij}, \quad \gamma = \frac{1}{B} \left(1 - \frac{A^2}{\left(A + \frac{1}{\alpha c_1 a} \right)^2} \right). \quad (2.49)$$

Отметим, что если вследствие большого масштаба осреднения $\varepsilon = 0$, то имеем $A = 0$ и $\gamma = \frac{1}{B}$. Подставив результат (2.49) в формулу (2.47), получим эффективный коэффициент переноса

$$\sigma^* = c_1 \sigma_1 + c_2 \sigma_2 - \frac{c_1 c_2 (\sigma_1 - \sigma_2)^2}{c_1 \sigma_2 + c_2 \sigma_1 + \frac{3 - \gamma}{\gamma} \sigma^*}. \quad (2.50)$$

Найденный эффективный коэффициент σ^* является следствием рассмотрения производных в обобщенном смысле, в результате которого имеем параметр $\gamma \neq$

1, определяемый выражением (2.49) и явно учитывающий характерные размеры фаз неоднородной системы. В частном случае $A = 0, B = 1$ параметр $\gamma = 1$ и полученные эффективные коэффициенты согласуются с работами [11, 12, 13, 41, 43]. Случай $\gamma = 1$ характеризует пренебрежение границами раздела фаз (либо интегральным занулением их влияния на поле).

Из рассмотрения производных в обобщенном смысле следует оператор (уравнения (2.37), (2.39)), обобщающий оператор $\sigma^* \partial_i^{(1)} \partial_i^{(1)}$ работы [41]. Возникшие вследствие концепции обобщенной производной интегралы по поверхности дополняют источник $\delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)$ в уравнении на осредненную функцию Грина (2.39) и учитывают микроструктурные особенности системы. Результатом выкладок в общем случае является параметр $\gamma \neq 1$. Явный вид γ является следствием найденного решения уравнения для осредненной функции Грина (2.39), имеющего вид потенциала Юкавы. Этот потенциал описывает влияние конфигурации границ раздела фаз в гетерогенной среде на поведение поля в системе. Таким образом, проведенная гомогенизация (методом условных моментов) на основе концепции обобщенной производной отображает коллективное взаимодействие фаз при распространении поля по гетерогенной среде.

Следует отметить, что характерные масштабы неоднородностей в системе a и b в общем случае являются функциями объемных концентраций. Коэффициент 3 в знаменателе (2.50) отражает рассматриваемую размерность пространства. Анализ эффективного коэффициента $\sigma^* = \sigma^*(\sigma_1, \sigma_2, c_2, \frac{a}{b})$ планируется в последующих работах.

Таким образом, вследствие варьирования функционала энергии, включающего индикаторную функцию (отображающую фазу в точке), введена обобщенная производная. На основе полученного модифицированного интегро-дифференциального оператора с разрывами и последующего его преобразования решение на осредненную функцию Грина имеет вид потенциала Юкавы, выражающего переходный слой, вызванный экранированием конфигурации зарядов. Полученное

в рамках описанных гипотез решение является следствием сформулированной (на основе анализируемого модифицированного оператора) задачи многих тел для гетерогенной среды. С учетом найденного решения для осредненной функции Грина в рамках метода условных моментов получены эффективные коэффициенты переноса, интегрально учитывающие микроструктуру системы (физические свойства и характерные размеры фаз) в явном виде.

2.3. Учет обобщенной производной и коллективного влияния фаз на процесс гомогенизации в упругих гетерогенных средах

Введение раздела

В разделе 2.1. (работе [2]) показано, что модифицированный обобщенными производными оператор приводит к функции Грина, характеризующей микроструктурные особенности гетерогенной среды. В результате использования метода условных моментов, базирующегося на функции Грина, в итоговых эффективных коэффициентах упругости интегрально учитывается микроструктура системы. В данном разделе проводится получение эффективных коэффициентов вязкоупругости гетерогенной среды на основе формализма обобщенной производной, отображающей внутренние границы гетерогенной среды. Для найденного модифицированного оператора (формирующего интегро-дифференциальное уравнение с разрывами) линейного вязкоупругого уравнения с учетом проведенного осреднения и его последующего анализа ищется решение на осредненную функцию Грина по аналогии с разделом 2.2. (работа [3]). На основе полученного решения, выражающего решение задачи многих тел в гетерогенной среде, эффективные коэффициенты упругости интегрально учитывают микроструктуру системы (физические свойства фаз и характерные масштабы) в явном виде. Основу данного раздела формирует статья [4].

Постановка задачи

Рассмотрим стационарное распределение упругого поля в микронеоднородной двухфазной среде в трехмерном пространстве. Структуру среды считаем обладающей статистически однородными и изотропными свойствами и заполняющей все пространство. В качестве исходной модели используем стационарную изотропную модель линейной теории упругости (2.5), в которой обычная производная заменена на обобщенную производную.

Уравнения (2.5) следует дополнить заданием граничных условий на внутренних границах: $[\sigma_{ij}] = 0$, $[u_i] = 0$ и внешней границе [2].

Полученный модифицированный оператор в (2.5) учитывает конфигурацию областей и границ, разделяющих фазы и определяет обобщенную производную. В работе [3] показано, что формула для обобщенной производной является следствием применения вариационного аппарата к функционалу энергии для гетерогенной среды с учетом индикаторной функции, характеризующей фазу в точке. Корректность уравнений (2.5) с модифицированным обобщенной производной оператором также обсуждается и доказывается в работах [2] и [3]. В работе [2] на основе формализма обобщенной производной получена пространственная теорема осреднения [28].

Построение решения на осредненную функцию Грина

Для нахождения эффективных коэффициентов упругости согласно работам [2], [3] следует знать вид осредненной функции Грина $\langle G_{mp} \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$, где $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$ – координаты, возникшие в результате пространственного осреднения по координатам \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 .

Поиск осредненной функции Грина согласно работам [41], [2] осуществляется на основе преобразования уравнений (2.5) к виду

$$\lambda_{ij\alpha\beta}^* \nabla_j \nabla_\beta u_\alpha = -\nabla_j (\lambda_{ij\alpha\beta} - \lambda_{ij\alpha\beta}^*) \nabla_\beta u_\alpha, \quad (2.51)$$

где добавляется и отнимается искомый эффективный тензор $\lambda_{ij\alpha\beta}^*$, входящий в осредненный закон Гука и содержащий искомые эффективные сдвиговый μ^* и

объемный K^* коэффициенты линейной теории упругости. Правая часть уравнения (2.51) считается источником. Далее уравнения (2.51) осредняются по объему. В результате чего оператором $\lambda_{ij\alpha\beta}^* \hat{A} \nabla_j \nabla_\beta$, где \hat{A} – оператор осреднения, определяется искомая осредненная функция Грина $\langle G_{mp} \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$ в уравнении, имеющем вид

$$\begin{aligned} & \lambda_{ijml}^* \partial_j^{(1)} \partial_l^{(1)} \langle G_{mp} \rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) + \\ & + \lambda_{ijml}^* \sum_k \frac{1}{V} \int_{S_k} \left[\partial_l^{(y)} G_{mp}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2) \right] ds_j = \delta_{ip} \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) \end{aligned} \quad (2.52)$$

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

Для полной постановки задачи на осредненную функцию Грина дополним уравнение (2.52) условиями на внутренних границах: $\left[\lambda_{ij\alpha\beta}^* \partial_\beta^{(y)} G_{\alpha p}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2) \right] = 0$, $\left[G_{mp}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2) \right] = 0$ и условием на бесконечности $\langle G_{mp} \rangle|_\infty = 0$. Условие $\left[G_{mp}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2) \right] = 0$ учтено при выводе уравнения (2.52).

Для построения решения интегро-дифференциального уравнения с разрывами (2.52) следует провести преобразование члена $\lambda_{ijml}^* \sum_k \frac{1}{V} \int_{S_k} \left[\partial_l^{(y)} G_{mp}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2) \right] ds_j$. В работе [3] применительно к исследованию электрических свойств гетерогенной среды представлен соответствующий алгоритм действий, основная идея в рамках которого заключается в переходе от суммы последовательности внутренних границ в интеграл.

Основываясь на работе [3] приведем итоговое дифференциальное уравнение на осредненную функцию Грина

$$(\lambda_{ijml}^* + D_{ijml})\partial_j^{(1)}\partial_l^{(1)}\langle G_{mp}\rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) - \\ -\omega D_{ilm}l\langle G_{mp}\rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \delta_{ip}\delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2),$$

$$D_{ij\alpha\beta} = D_1\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta} + 2D_2I_{ij\alpha\beta},$$

(2.53)

$$D_1 = \frac{\beta}{6\pi} \frac{a^2}{\Delta^3} \left(K^* - \frac{2}{3}\mu^* \right) \frac{(K_1 - K_2)(c_1 b K_1 - c_2 a K_2)}{K_1 K_2},$$

$$D_2 = \frac{\beta}{6\pi} \frac{a^2}{\Delta^3} \mu^* \frac{(\mu_1 - \mu_2)(c_1 b \mu_1 - c_2 a \mu_2)}{\mu_1 \mu_2}.$$

где β – коэффициент формы (для половины поверхности сферы $\beta = 2\pi$), $\Delta = a + b$, b и a – характерные масштабы фаз 1 и 2 соответственно, $\omega = \frac{3\varepsilon}{\Delta^2}$, ε – коэффициент [3], связанный с отношением масштаба Δ к масштабу пространственного осреднения R . Элементарным структурным элементом фазы 2 также является шар с радиусом a .

Проведенные операции по получению уравнения (2.53) концептуально идентичны работе [3]. Отличие технического плана связано с тензорным видом уравнения (2.52), что отражается при преобразовании члена $\lambda_{ijml}^* \left[\partial_l^{(y)} G_{mp}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2) \right]$ на основе граничного условия $\left[\lambda_{ij\alpha\beta} \partial_\beta^{(y)} G_{\alpha p}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{y}, \mathbf{R}_2) \right] = 0$.

Для нахождения решения уравнения (2.53) полагаем статистическую изотропность и однородность функции Грина $\langle G_{ip}\rangle(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \langle G_{ip}\rangle(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)$ и выполнение неравенств $(\mu_1 - \mu_2)(b\mu_1 - a\mu_2) \geq 0$, $(K_1 - K_2)(bK_1 - aK_2) \geq 0$. Решение уравнения (2.53) ищется с помощью преобразования Фурье и вычисления вычетов (первого порядка). Ответ имеет следующий вид

$$\langle G_{ip}\rangle(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{\delta_{ip}}{\mu^* + D_2} \frac{e^{-\delta_1 r}}{r} + \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\omega(D_1 + 4D_2)} \partial_i \partial_p \frac{e^{-\delta_1 r} - e^{-\delta_2 r}}{r}, \quad (2.54)$$

$$\delta_1^2 = \frac{\omega(D_1 + 4D_2)}{\mu^* + D_2}, \quad \delta_2^2 = \frac{\omega(D_1 + 4D_2)}{K^* + \frac{4}{3}\mu^* + D_1 + 2D_2}.$$

Решение (2.54) с входящими масштабами δ_1^{-1} и δ_2^{-1} является следствием модифицированного обобщенной производной оператора, характеризующего конфигурацию границ раздела фаз в гетерогенной среде (и обобщающего оператор работы [41]). Совокупность точек границ раздела фаз в гетерогенной среде в определении обобщенной производной выражена конфигурацией дельта-функций, которые, фактически, являются конфигурацией зарядов (при этом разные знаки зарядов вызваны чередующейся сменой фаз). С учетом указанного представления члены $\frac{e^{-\delta_1 r}}{r}$ и $\frac{e^{-\delta_2 r}}{r}$ имеют отношение к потенциалу Юкавы, выражающего переходный слой, вызванный экранированием конфигурации зарядов (внутренних границ). Наличие двух переходных масштабов δ_1^{-1} и δ_2^{-1} связано с продольными и поперечными деформациями. Присутствие данных масштабов в осредненной функции Грина отображает разный вклад в отклик поля в среде на приложенное воздействие от продольных и поперечных воздействий. Коэффициенты D_1 и D_2 в знаменателях (2.54) также являются следствием конфигурации границ раздела фаз и с точки зрения зарядов ими выражается эффективный заряд. Таким образом, найденное на основе концепции обобщенной производной осредненное решение описывает влияние конфигурации границ раздела фаз в гетерогенной среде на поведение поля в системе (то есть отображает коллективное взаимодействие фаз при распространении поля по гетерогенной среде), что является следствием рассмотрения производных в обобщенном смысле.

Полученный результат на осредненную функцию Грина является следствием нового подхода к конфигурации интегралов по поверхности. Анализ этих интегралов представляет основную проблему теории смесей [28].

Нахождение эффективных коэффициентов вязкоупругости

В работе [2] в рамках МУМ [41] получены эффективные коэффициенты линейной теории упругости, учитывающие формализм обобщенной производной и

интегрально отображающие микроструктуру гетерогенной системы. Для получения эффективных коэффициентов упругости используем основные выкладки работы [2].

Целью является получение из исходных уравнений (2.5) осредненные, представимые в виде

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

Тензоры $\langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle$ и $\langle \sigma_{ij} \rangle$ являются осредненными тензорами деформаций и напряжений соответственно, $\langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle = c_1 \langle \varepsilon_{\alpha\beta}^1 \rangle + c_2 \langle \varepsilon_{\alpha\beta}^2 \rangle$. c_1, c_2 – объёмные концентрации фаз, $c_1 = \frac{V_1}{V}$, $c_1 + c_2 = 1$. Необходимая информация о гетерогенной структуре располагается в эффективных коэффициентах K^*, μ^* , вид которых следует получить.

Итоговое выражение по вычислению эффективных коэффициентов упругости имеет вид (2.20), в котором интегралы R_{ijpq} вычисляются по формуле (2.19). Интегралы $R_{ijpq}(\mathbf{k})$ при $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ имеют итоговый вид

$$R_{jkpq} = -\frac{1}{3\gamma_2} \frac{1}{\mu^*} I_{jkpq} + \frac{1}{15\gamma_2} \frac{\gamma_1 K^* + \left(\gamma_2 - \frac{2}{3}\gamma_1\right) \mu^*}{\mu^* \left(\gamma_1 K^* + \left(2\gamma_2 - \frac{2}{3}\gamma_1\right) \mu^*\right)} (\delta_{jk} \delta_{pq} + 2I_{jkpq}),$$

$$\gamma_1 = 1 + \frac{\beta}{6\pi} \frac{a^2 (K_1 - K_2)(c_1 b K_1 - c_2 a K_2)}{\Delta^3 K_1 K_2},$$

$$\gamma_2 = 1 + \frac{\beta}{6\pi} \frac{a^2 (\mu_1 - \mu_2)(c_1 b \mu_1 - c_2 a \mu_2)}{\Delta^3 \mu_1 \mu_2}.$$

Функция $\varphi(\mathbf{r})$ при этом взята в виде [55]: $\varphi(\mathbf{r}) = e^{-r/(ac_1a)}$, где α – некоторый структурный коэффициент, который для шара приближенно определим как $\alpha = \pi/2$. Вычисление результата действия вторых производных на осредненную функцию Грина произведено с учетом приближения

$$\partial_i \partial_p \frac{e^{-\delta_1 r} - e^{-\delta_2 r}}{r} \cong \frac{1}{2} (\delta_1^2 - \delta_2^2) \partial_i \partial_p r,$$

характеризующего малость масштаба Δ относительно масштаба осреднения R .

Подставив вычисленные R_{jkpq} в формулу (2.20), получим модифицированные эффективные коэффициенты упругости

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

$$\mu^* = c_1 \mu_1 + c_2 \mu_2 - \frac{c_1 c_2 (\mu_1 - \mu_2)^2}{c_1 \mu_2 + c_2 \mu_1 + \gamma_2 \frac{\mu^* \left(\frac{3}{2} \gamma_1 K^* + \left(\frac{7}{3} \gamma_2 - \gamma_1 \right) \mu^* \right)}{\gamma_1 K^* + \left(\frac{8}{3} \gamma_2 - \frac{2}{3} \gamma_1 \right) \mu^*}}. \quad (2.55)$$

В полученных коэффициентах (2.55) параметры γ_1 и γ_2 являются явно определенными и интегрально учитывают микроструктуру среды: характерные размеры фаз неоднородной системы и их физические свойства. Эти коэффициенты характеризуют объемные и сдвиговые свойства гетерогенной среды. В частном случае $\Delta \gg a, b$ или $\beta = 0$ параметры $\gamma_1 = \gamma_2 = 1$ и полученные эффективные коэффициенты согласуются с работами [11, 12, 13, 41, 43]. Этот частный случай характеризует пренебрежение границами раздела фаз (либо их влияние на поле интегрально зануляется). Отметим, что в работе [2] в эффективных коэффициентах упругости присутствует один параметр $\gamma \neq 1$, который интегрально учитывает микроструктуру среды.

Выводы по главе 2.

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

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

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

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

Глава 3. Анализ поведения гетерогенных сред с существенно различающимися физическими свойствами с учетом эффективной размерности пространства и формализма обобщенной производной

Введение раздела

Учет в полной мере геометрических и физических особенностей фаз при аналитическом моделировании распространения поля по гетерогенной среде остается нерешенной проблемой. Одной из подзадач в рамках данной проблемы является определение условий на несущую фазу и на существенное изменение свойств анализируемой неоднородной системы (структурный фазовый переход) при существенно различных физических свойствах фаз на всем интервале объемных концентраций. Это имеет отношение, например, к переходу в коллоидах, суспензиях и гранулированных средах к макроскопически связному распространению поля упругости (вязкоупругости) по дисперсной фазе, при котором происходит существенное изменение поведения системы [32].

С целью аналитического описания гетерогенной среды в работе производится получение и анализ эффективных коэффициентов линейной теории упругости при произвольной размерности рассматриваемого пространства с учетом формализма обобщенной производной. Данный механизм подразумевает эффективное число внутренних степеней свободы, определяющих распространение поля упругости по гетерогенной среде (определенной геометрической структуры, сформированной из фаз с разными физическими свойствами). Эффективные коэффициенты и их производные исследуются на наличие несущей фазы и структурного фазового перехода (перколяционных свойств) на всем интервале объемной концентрации (при существенно различающихся упругих свойствах фаз). На основе проведенного анализа приводится сопоставление с результатами в рамках существующих подходов и с имеющимися данными по коллоидам, гранулированным средам и суспензиям. Основу данного раздела формирует статья [5].

3.1. Обобщение эффективных коэффициентов на пространство заданной размерности

Постановка задачи

Исследуем стационарное распределение упругого поля в микронеоднородной двухфазной среде. Структуру среды считаем обладающей статистически однородными и изотропными свойствами и заполняющей все пространство. В качестве исходной модели используем стационарную изотропную модель линейной теории упругости в форме

$$\begin{aligned} \nabla_j \sigma_{ij} &= 0, & \sigma_{ij} &= \lambda_{ij\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta}, & \varepsilon_{\alpha\beta} &= \frac{1}{2} (\nabla_\beta u_\alpha + \nabla_\alpha u_\beta), \\ \nabla_j (\lambda_{ij\alpha\beta} \nabla_\beta u_\alpha) &= 0, & & & & (3.1) \\ \lambda_{ij\alpha\beta} &= \left(K - \frac{(n-1)}{n} \mu \right) \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} (n-1) \mu (\delta_{i\alpha} \delta_{j\beta} + \delta_{i\beta} \delta_{j\alpha}), \end{aligned}$$

где параметр n характеризует размерность исследуемого пространства. Исследуемые поля напряжений σ_{ij} , деформаций $\varepsilon_{\alpha\beta}$ и смещений u_α , а также тензор упругости $\lambda_{ij\alpha\beta}$, содержащий объемный K и сдвиговый μ упругие модули системы, рассматриваются в пространстве размерности n . Тензор $\lambda_{ij\alpha\beta}$ имеет такой вид, чтобы девиаторная составляющая, характеризующаяся сдвиговым модулем μ , имела нулевой след, и объемный модуль K определялся шаровой составляющей. При этом учитываем соотношения для символов Кронекера δ_{ij} , $\delta_{ij} \delta_{ij} = n$.

Координатами в модели (3.1) выступают микроточки, в каждой из которых находится одна из фаз со своими физическими свойствами. Значения модулей K и μ при этом зависят от фазы, находящейся в точке. Аналогично и значения исследуемых полей u_α , $\varepsilon_{\alpha\beta}$ и σ_{ij} зависят от фазы, находящейся в микроточке.

Для учета микроструктурных особенностей фаз (физических и геометрических) по аналогии с работой [2] используем формализм обобщенной производной. В системе уравнений (3.1) обычные производные заменяются на обобщенные (2.1).

При этой модификации в исходных дифференциальных уравнениях появляется составляющая, отображающая поведение поля на внутренних границах, и физическая суть анализируемых уравнений (закон сохранения и закон Гука) не нарушается [2].

Систему (3.1) следует дополнить граничными условиями на бесконечно удаленной границе и на конфигурации внутренних границ [2].

Получение эффективных коэффициентов в пространстве заданной размерности методом условных моментов

На основе МУМ [41] получим из исходной модели (3.1) осредненный закон Гука $\langle \sigma_{ij} \rangle = \lambda_{ij\alpha\beta}^* \langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle$, содержащий в эффективном тензоре упругости $\lambda_{ij\alpha\beta}^*$ искомые эффективные коэффициенты K^* , μ^* . Тензор $\lambda_{ij\alpha\beta}^*$ структурно аналогичен тензору $\lambda_{ij\alpha\beta}$ с точностью до замен $K \rightarrow K^*$, $\mu \rightarrow \mu^*$. Посредством символов Кронекера δ_{ij} , ($\delta_{ij}\delta_{ij} = n$), и тензоров $\lambda_{ij\alpha\beta}$ и $\lambda_{ij\alpha\beta}^*$ информация о размерности пространства n отображена в исходной модели (3.1) и возникает в ходе ее преобразований.

Итоговое выражение по вычислению эффективных коэффициентов упругости в методе условных моментов [41] имеет вид

$$\lambda_{jka\beta}^* = \langle \lambda_{jka\beta} \rangle + c_1 c_2 \lambda'_{jkmn} (I_{\gamma\delta mn} + R_{\gamma\delta pq} (\lambda_{pqmn}^* - \lambda''_{pqmn}))^{-1} R_{\gamma\delta rv} \lambda'_{rv\alpha\beta}, \quad (3.2)$$

где

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

$$R_{ijpq}(\mathbf{0}) = - \int \partial_q \partial_j \langle G_{ip} \rangle(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

В полученных формулах $\varphi(\mathbf{r})$ – корреляционная функция геометрии структуры, c_1, c_2 – объемные концентрации фаз, $\langle G_{ip} \rangle$ – осредненная тензорная функция Грина, $2\partial_j \langle G_{ip} \rangle = \partial_j \langle G_{ip} \rangle + \partial_i \langle G_{jp} \rangle$. Для нахождения $\lambda_{jka\beta}^*$ следует вычислить интегралы

R_{ijpq} , содержащие вторые производные от тензорной функции Грина. Исходя из этого, саму тензорную функцию Грина находить не нужно, имеют смысл лишь сингулярные составляющие от действия на нее вторых производных. Выражение на осредненный тензор Грина [2] имеет вид

$$\lambda_{ijml}^* \partial_j \partial_l \langle G_{mp} \rangle(\mathbf{r}) = T_{ip}(\mathbf{r}) = \delta_{ip} \sum_k \rho_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_k), \quad (3.3)$$

где член $T_{ip}(\mathbf{r})$ характеризует источник, осредненно учитывающий микроструктурные особенности системы. Точки \mathbf{x}_k и функции ρ_k отражают геометрические свойства структуры и физические свойства фаз K_1, μ_1, K_2, μ_2 .

Представленное уравнение для источника направлено выразить переходный слой. Если производные рассматриваются не в обобщенном смысле, то источник имеет вид как в работе [41]: $T_{ip}(\mathbf{r}) = \delta_{ip} \delta(\mathbf{r})$ и учет сингулярной составляющей от действия вторых производных на функцию Грина $\partial_q \partial_j \langle G_{ip} \rangle(\mathbf{r}) \propto \delta(\mathbf{r})$ приведет при этом к потере информации о микроструктуре системы $\varphi(\mathbf{0}) = 1$ при вычислении интегралов $R_{ijpq}(\mathbf{0})$.

Преобразуем функцию Грина (3.3) к Фурье-пространству, используя источник в виде $T_{ip}(\mathbf{r}) = \delta_{ip} \delta(\mathbf{r})$, а затем обобщим его на случай источника в общем виде (3.3). Имеем выражение для образа функции Грина

$$\langle G_{ip} \rangle(\mathbf{k}) = -\frac{2}{n-1} \frac{\delta_{ip}}{\mu^*} \frac{1}{k^2} + \frac{\frac{2}{n-1} K^* + \frac{n-2}{n} \mu^*}{\mu^* \left(K^* + \frac{(n-1)^2}{n} \mu^* \right)} \frac{a_i a_p}{k^2}, \quad (3.4)$$

где $a_i = k_i/k$, k_i – координаты в фурье-образе. Выполнение обратного преобразования Фурье от (3.4) приводит к выражению

$$\langle G_{ip} \rangle(\mathbf{r}) = \frac{2}{n-1} \frac{\delta_{ip}}{\mu^*} J(\mathbf{r}) + \frac{\frac{2}{n-1} K^* + \frac{n-2}{n} \mu^*}{\mu^* \left(K^* + \frac{(n-1)^2}{n} \mu^* \right)} \partial_i \partial_p H(\mathbf{r}), \quad (3.5)$$

где $J(\mathbf{r})$ и $H(\mathbf{r})$ фундаментальные функции для изотропного случая, содержащие информацию о размерности пространства (для случая размерности $n = 3$ с точностью до констант это функции $1/r$ и r соответственно). Продифференцируем дважды полученное выражение (3.5):

$$\begin{aligned} \partial_k \partial_q \langle G_{ip} \rangle(\mathbf{r}) &= \frac{2}{n-1} \frac{\delta_{ip}}{\mu^*} \partial_k \partial_q J(\mathbf{r}) + \\ &+ \frac{\frac{2}{n-1} K^* + \frac{n-2}{n} \mu^*}{\mu^* \left(K^* + \frac{(n-1)^2}{n} \mu^* \right)} \partial_i \partial_p \partial_k \partial_q H(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Для нахождения эффективных коэффициентов нужно знать действие вторых производных на функцию $\langle G_{ip} \rangle(\mathbf{r})$, что эквивалентно знанию функций $\partial_k \partial_q J(\mathbf{r})$ и $\partial_i \partial_p \partial_k \partial_q H(\mathbf{r})$. В силу изотропии сингулярные составляющие слагаемых $\partial_k \partial_q J$, $\partial_i \partial_p \partial_k \partial_q H$ принимают вид

$$\partial_k \partial_q J = A \delta(\mathbf{r}) \delta_{kq}, \quad \partial_i \partial_p \partial_k \partial_q H = B \delta(\mathbf{r}) (\delta_{ip} \delta_{kq} + \delta_{ik} \delta_{pq} + \delta_{iq} \delta_{pk}), \quad (3.7)$$

где A и B неизвестные параметры, не зависящие от упругих параметров в силу сопоставления выражений (3.5) и (3.6). Оба параметра находятся подстановкой (3.6)-(3.7) в (3.3) при $T_{ip}(\mathbf{r}) = \delta_{ip} \delta(\mathbf{r})$ и с использованием соотношения $\delta_{ip} \delta_{ip} = n$, что приводит к равенству

$$An + \frac{\frac{2}{n-1} K^* + \frac{n-2}{n} \mu^*}{\mu^*} (A + B(n+2)) = 1.$$

С учетом независимости A и B от упругих параметров, выделяются два уравнения, решение которых принимает вид $A = \frac{1}{n}$, $B = -\frac{1}{n^2+2n}$.

При источнике из уравнения (3.3) выражение (3.4) для $G_{ip}(\mathbf{k})$ будет пропорционально члену $M = \int \sum_l \rho_l \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_l) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r}$ (вместо $\int \delta(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = 1$). При обратном преобразовании Фурье функции $\langle G_{ip} \rangle(\mathbf{k})$ вместо функций $J(\mathbf{r})$ и $H(\mathbf{r})$ будут присутствовать суммы функций $\sum_k \rho_k J(\mathbf{r} - \mathbf{x}_k)$ и $\sum_k \rho_k H(\mathbf{r} - \mathbf{x}_k)$. Действие

вторых производных на функцию $\langle G_{ip} \rangle(\mathbf{r})$ при этом приведет к пропорциональности $\sum_l \rho_l \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_l)$, не меняющей коэффициенты в (3.6), что с учетом вида уравнения (3.3) не изменит результат для параметров A и B .

Зная значение тензорной функции $\partial_k \partial_q \langle G_{ip} \rangle(\mathbf{r})$, вычислим интегралы $R_{jkpq}(0)$. Имеем равенство

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

$I_{jkpq} = \frac{1}{2} (\delta_{jp} \delta_{kq} + \delta_{jq} \delta_{kp})$, где, как и в работе [2], использовано обозначение

$$\gamma = \int \sum_l \rho_l \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_l) \varphi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (3.8)$$

Случай $T_{ip}(\mathbf{r}) = \delta_{ip} \delta(\mathbf{r})$ приводит к $\gamma = 1$ и не отображает внутренние границы фаз. Отметим, что если внутренние границы фаз приводят суммарно к нулевому вкладу, то тогда также следует результат $\gamma = 1$.

Подставляя найденное выражение для R_{jkpq} в формулу по вычислению эффективных коэффициентов (3.2), приведем итоговый результат в виде

$$\begin{aligned} K^* &= c_1 K_1 + c_2 K_2 - \frac{c_1 c_2 (K_1 - K_2)^2}{c_1 K_2 + c_2 K_1 + K^* \frac{1-\gamma}{\gamma} + \mu^* (n-1) \frac{n-1}{\gamma n}}, \\ \mu^* &= c_1 \mu_1 + c_2 \mu_2 - \frac{c_1 c_2 (\mu_1 - \mu_2)^2}{c_1 \mu_2 + c_2 \mu_1 + \frac{\mu^* \left(\left(\frac{n}{2\gamma} + \frac{1-\gamma}{\gamma} \right) K^* + \frac{(n-1)}{2\gamma} \left(n+1 - 2\gamma - \frac{2}{n} \right) \mu^* \right)}{K^* + (n-1) \mu^*}}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

При $\gamma = 1$ и $n = 3$ полученные эффективные коэффициенты эквивалентны результату в рамках метода самосогласованного поля [11, 19–21] и подходу Эшелби [11, 25]. В рамках данной модели не учитывается переходный слой между включением и матрицей, обладающей искомыми эффективными свойствами (эффективными свойствами учитывается коллективное взаимодействие), что имеет от-

ношение к пренебрежению границами раздела фаз. В случае $\gamma = 1$ внутренние границы раздела фаз не учитываются (либо их вклад интегрально зануляется), т.е. отсутствует введение формализма обобщенной производной [2]. Если в (3.9) положить $\gamma = 1$ и $n = 3$, то следует результат, полученный на основе гипотезы сильной изотропии [11, 47]. В данном методе поле упругости в пределах каждого компонента сразу полагается однородным, что также не учитывает внутренние границы раздела фаз. МУМ [12, 41], вариационный метод [11, 42–44], ряд статистических методов, базирующихся на функции Грина [12, 45, 46], обобщенное сингулярное приближение [11] содержат разный математический аппарат, но объединены гипотезой о теле сравнения. Если параметры тела сравнения K_c, μ_c положить равными искомым эффективным параметрам $K_c = K^*, \mu_c = \mu^*$, то полученный результат также будет эквивалентен формулам (3.9) при $\gamma = 1$ и $n = 3$. В вариационном методе при равенстве $K_c = K^*, \mu_c = \mu^*$ получаются эффективные коэффициенты, а не вилка Хашина-Штрикмана.

3.2. Анализ эффективных коэффициентов

Проведем анализ эффективных коэффициентов в частном случае при $\gamma = 1$, $n = 3$. Исследуемые параметры μ^*, K^* в формулах (3.9) являются неявными и взаимозависимыми, но сводятся к уравнению четвертой степени на функцию μ^*

$$(\mu^*)^2 [a_1 (\mu^*)^2 + a_2 \mu^* + a_3] + a_4 \mu^* + a_5 = 0. \quad (3.10)$$

$$a_1 = \frac{32}{3}, \quad a_5 = -6\mu_1\mu_2K_1K_2,$$

$$a_2 = (12c_1 + 8c_2)K_1 + (8c_1 + 12c_2)K_2 + \left(16c_2 - \frac{32}{3}c_1\right)\mu_1 + \left(16c_1 - \frac{32}{3}c_2\right)\mu_2,$$

$$a_3 = 9K_1K_2 - 16\mu_1\mu_2 + 12(K_2\mu_2 - K_1\mu_1)(c_1 - c_2) + 8(K_1\mu_2 - K_2\mu_1)(c_1 - c_2),$$

$$a_4 = -K_1K_2((9c_1 - 6c_2)\mu_1 + (9c_2 - 6c_1)\mu_2) - \mu_1\mu_2((8c_1 + 12c_2)K_1 + (12c_1 + 8c_2)K_2).$$

Проанализируем случай с фазой, обладающей нулевыми упругими параметрами фазы $\mu_1, K_1 = 0$, т.е. “пустое” пространство. При этом имеем $a_4 = 0$ и $a_5 = 0$. Последующее деление уравнения (3.10) на $(\mu^*)^2 \neq 0$ приводит к решению квадратного уравнения

$$\mu^* = \frac{3}{64} \sqrt{\left((12c_2 + 8c_1)K_2 + \left(16c_1 - \frac{32}{3}c_2\right)\mu_2 \right)^2 - 4 \frac{32}{3} 12\mu_2 K_2 (c_1 - c_2) - \frac{3}{64} \left((12c_2 + 8c_1)K_2 + \left(16c_1 - \frac{32}{3}c_2\right)\mu_2 \right)}. \quad (3.11)$$

Выражение (3.11) описывает поведение системы при концентрации твердой фазы $c_2 > 0.5$. Решением уравнения (3.10) при концентрации $c_2 < 0.5$ является $\mu^* = 0$. Эффективный объемный модуль K^* также обращается в нуль при $c_2 < 0.5$. Точка $c_2 = 0.5$ является предельной (переходной) объемной концентрацией. В силу уравнения (3.10) при концентрации $c_2 > 0.5$ твердая фаза является связной $\mu^* \sim \mu_2, K^* \sim K_2$, а при концентрации $c_1 > 0.5$ связной является фаза “пустого” пространства $\mu^* = K^* = 0$, т.е. при концентрации $c_2 < 0.5$ связная проводимость поля упругости отсутствует. Используемое понятие связности определяет несущую фазу, т.е. характеризует возможность макроскопической передачи поля упругости по структуре определенной фазой. На интервале $c_2 > 0.5$ твердая фаза является несущей и определяет передачу поля упругости по структуре, а на интервале $c_2 < 0.5$ несущей фазой является “пустое” пространство. Описанную ситуацию иллюстрирует рис.3.1.

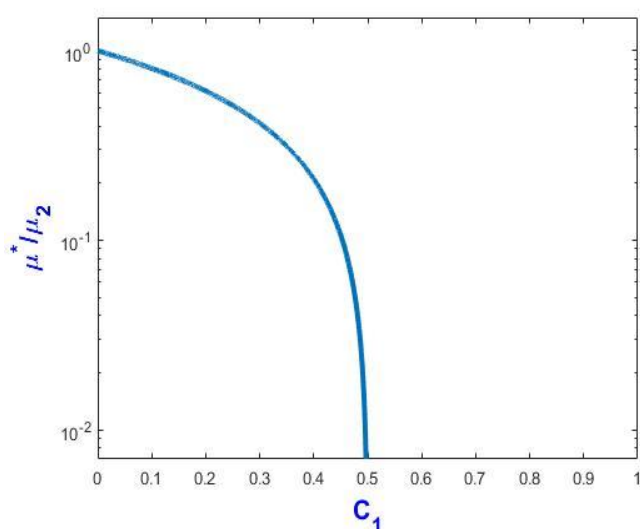


Рис 3.1. График зависимости эффективного модуля сдвига, нормированного на модуль сдвига твердой фазы 2 от объемной концентрации фазы “пустого” пространства 1.

Физической интерпретацией системы с $K_1, \mu_1 = 0$ может выступать пористый каркас. При концентрации $c_2 < 0.5$ формирующая каркас твердая фаза “неустойчива” к макроскопически связанному распространению упругого поля $K^* = \mu^* = 0$, исходя из чего каркас не существует (рис. 3.1). Тогда при концентрации $c_2 = 0,5$ согласно проведенному анализу при $\gamma = 1$ и $n = 3$ происходит перколяция поля упругости по твердой фазе в структуре.

Характерное поведение эффективного модуля сдвига при ненулевых, но достаточно малых упругих коэффициентах фазы “пустого” пространства $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$ представлено на рис 3.2. Фазой 1 в данном случае может являться газ, жидкость, твердая фаза с существенно меньшими параметрами.

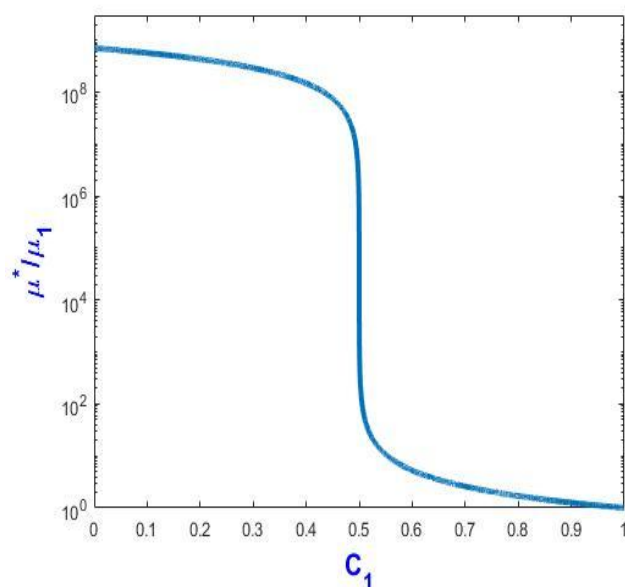


Рис 3.2. График зависимости эффективного модуля сдвига, нормированного на модуль сдвига фазы 1 от объемной концентрации фазы 1.

При наличии у фазы 1 ненулевых, но относительно малых коэффициентов упругости $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$ на интервале $c_2 > 0.5$ с точностью до отношения упругих характеристик фаз $\mu_1/\mu_2, K_1/K_2, \mu_1/K_2, K_1/\mu_2 \ll 1$ эффективный модуль сдвига определяется выражением (3.11). При концентрации $c_1 > 0.5$ эффективный модуль сдвига определяется выражением

$$\mu^* \approx \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{(9c_2 - 6c_1)K_1 + (8c_2 + 12c_1)\mu_1}{12(c_1 - c_2)} \right)^2 + \frac{2\mu_1 K_1}{c_1 - c_2} + \frac{(9c_2 - 6c_1)K_1 + (8c_2 + 12c_1)\mu_1}{24(c_1 - c_2)}} \quad (1) \quad (3.12)$$

которое является следствием квадратного уравнения, полученного из уравнения (3.10) делением последнего на $\mu_2 K_2$ и отбрасыванием малых слагаемых $\mu_1/\mu_2, K_1/K_2, \mu_1/K_2, K_1/\mu_2$ с учетом свойственной интервалу $c_1 > 0.5$ пропорциональности $\mu^* \sim \mu_1, K^* \sim K_1$. При увеличении относительной разности упругих коэффициентов фаз $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$ эффективные коэффициенты μ^*, K^* по обе стороны от критической концентрации $c_2 = c_{2crit} = 0,5$ стремятся к асимптотическим формулам (3.11), (3.12). Устремляя ненулевые K_1, μ_1 к нулю при $c_2 < 0,5$ исходя из выражения (3.12) следует значение $\mu^* = 0$. Аналогично для K^* . Согласно выражениям (3.11) и (3.12) на интервале $c_2 > 0.5$ несущей фазой является твердая $\mu^*, K^* \sim \mu_2, K_2$, а на интервале $c_1 > 0.5$ несущей фазой является фаза “пустого” пространства $\mu^*, K^* \sim \mu_1, K_1$. В окрестности точки $c_{2crit} = 0,5$ происходит резкое увеличение эффективных упругих свойств от $\mu^*, K^* \sim \mu_1, K_1$ до $\mu^*, K^* \sim \mu_2, K_2$ (проанализируем это детальнее ниже). Т.е. при концентрации $c_2 = c_{2crit} = 0,5$ начинает происходить макроскопически связанное распространение исследуемого поля упругости по твердой фазе в структуре (эффект перколяции). Переход между несущими фазами в точке $c_2 = c_{2crit} = 0,5$ интерпретируем как структурный фазовый переход. Соответствующее переходное поведение иллюстрирует Рис.3.2.

Исследовав поведение эффективного сдвигового модуля μ^* по обе стороны от критической точки, проанализируем его поведение непосредственно в области перехода $c_2 \sim c_{2crit}$. Значение μ^* в области перехода оценим как $\mu_1 \ll \mu^* \ll \mu_2$. При этом считаем, что $K_1 \sim \mu_1 \ll K_2 \sim \mu_2$. Базируясь на исходном выражении (3.10), проведем оценки слагаемых:

$$a_5 \sim (\mu_1 \mu_2)^2, \quad a_4 \mu^* \sim (\mu_2)^2 \mu_1 \mu^*, \quad a_3 (\mu^*)^2 \sim \mu_1 \mu_2 (\mu^*)^2 + (c_1 - c_2) (\mu_2 \mu^*)^2, \\ a_2 (\mu^*)^3 \sim \mu_2 (\mu^*)^3, \quad a_1 (\mu^*)^4 \sim (\mu^*)^4.$$

Основываясь на представленных оценках выделим выражения одного порядка: $(\mu_2)^2 \mu_1 \mu^* \sim (c_1 - c_2) (\mu_2 \mu^*)^2 \sim \mu_2 (\mu^*)^3$. Малость остальных отброшенных слагаемых подтвердится далее. С учетом проведенных оценок выражение (3.10) сводится к виду

$$b_1\mu_2(\mu^*)^3 + b_2(c_1 - c_2)(\mu_2)^2(\mu^*)^2 - b_3(\mu_2)^2\mu_1\mu^* \approx 0, \quad (3.13)$$

где с учетом рассмотрения переходной области $c_2 \sim c_{2crit}$ коэффициенты $b_i \sim 1$ (точный вид этих коэффициентов можно выписать, но это не представляет концептуальной необходимости). Выпишем решение данного уравнения

$$\mu^* \approx -\frac{b_2\mu_2(c_1 - c_2)}{2b_1} + \sqrt{\left(\frac{b_2\mu_2(c_1 - c_2)}{2b_1}\right)^2 + \frac{b_3\mu_1\mu_2}{b_1}}. \quad (3.14)$$

Второе решение (со знаком минус) не является физическим. Проведем исследование выражения (3.14) путем разложения подкоренного выражения при различных соотношениях параметров:

$$\mu^* \sim \begin{cases} \mu_1(c_1 - c_2)^{-1}, & (c_1 - c_2) \gg \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}, \\ \sqrt{\mu_1\mu_2} - \mu_2(c_1 - c_2) + \mu_2(c_1 - c_2)^2 \sqrt{\frac{\mu_2}{\mu_1}}, & (c_1 - c_2) \ll \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}, \\ \mu_2(c_2 - c_1), & (c_2 - c_1) \gg \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}. \end{cases} \quad (3.15)$$

При соотношении $(c_1 - c_2) \ll \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}$ учтены первые три основные слагаемые (при необходимости ряд можно продолжить). Для соотношений $|c_1 - c_2| \gg \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}$ учтены только соответствующие основные слагаемые. Величина $\sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}$ выражает характерный масштаб переходной области. В связи с этим введем параметр $\varepsilon \sim \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}$, выражающий ε -окрестность критической точки и возникающий как следствие конечного отношения упругих параметров фаз μ_1/μ_2 (а также отношений $K_1/K_2, \mu_1/K_2, K_1/\mu_2$). Исходя из проведенной оценки (3.15) видно, что в критической точке $\mu^* \sim \sqrt{\mu_1\mu_2}$. И при переходе через критическую точку эффективный модуль μ^* совершает существенный рост от значения $\mu^* \ll \sqrt{\mu_1\mu_2}$, до значения $\mu^* \gg \sqrt{\mu_1\mu_2}$. В приведенных соотношениях (3.13)-(3.15) с учетом равенства $c_1 + c_2 = 1$ разность $(c_1 - c_2)$ можно заменить на $(c_{2crit} - c_2)$ с точностью до коэффициента

$(c_{2crit})^{-1} = 2$. Следует отметить, что согласно (3.15) по разные стороны от критической точки имеют место разные асимптотики, меняющиеся от $\mu^* \sim \mu_1 (c_{2crit} - c_2)^{-1}$ до $\mu^* \sim \mu_2 (c_2 - c_{2crit})^1$. Эти же асимптотики предсказываются асимптотическими выражениями (3.12) и (3.11) соответственно. Это достигается с учетом сопоставления членов в выражении (3.12) и разложением по малому параметру $(c_2 - c_{2crit})$ в выражении (3.11). Исходя из сравнения асимптотических выражений (3.11) и (3.12) в предельных точках $c_2 = c_{2crit} + \varepsilon$ и $c_2 = c_{2crit} - \varepsilon$ также следует полученный результат для $\varepsilon \sim \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}$ и $\mu^* \sim \sqrt{\mu_1 \mu_2}$. Что касается правильности оценки слагаемых в исходном выражении (3.10) при анализе переходной области, то выделенные слагаемые в уравнении (3.13) при $(c_1 - c_2) \sim \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}$ и $\mu^* \sim \sqrt{\mu_1 \mu_2}$ имеют порядок $\sim \mu_2 (\mu_1 \mu_2)^{3/2}$, что существенно больше отброшенных слагаемых. При соотношениях $1 \gg (c_1 - c_2) \gg \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}$ и $\mu_1 \ll \mu^* \ll \sqrt{\mu_1 \mu_2}$ используемое выражение (3.13) также имеет место, но в силу малости в нем можно сразу отбросить слагаемое $\sim \mu_2 (\mu^*)^3$, что приведет к полученному для данных соотношений результату в (3.15). При соотношениях $1 \gg (c_2 - c_1) \gg \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}$ и $\mu_2 \gg \mu^* \gg \sqrt{\mu_1 \mu_2}$ в выражении (3.13) в силу малости следует отбросить слагаемое $\sim (\mu_2)^2 \mu_1 \mu^*$, что также приводит к соответствующему результату в (3.15).

Анализируемые эффективные коэффициенты (3.9) являются непрерывными функциями объемной концентрации c_2 . Полученная ε -окрестность критической точки c_{2crit} характеризует резкое изменение эффективных коэффициентов, но данное поведение не является скачком по определению. ε -окрестность критической точки, которую определяет асимптотическое решение (3.14), можно рассматривать как сшивку различных асимптотических решений (3.11) и (3.12) по обе стороны от нее. При этом асимптотические решения (3.11), (3.12) и (3.14) являются следствиями одного уравнения (3.10).

Проведем исследование структурного фазового перехода с учетом полученных результатов. Начнем со случая, в котором фаза “пустого” пространства имеет ненулевые параметры упругости $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$. Анализируемые эффективные коэффициенты упругости определяют обусловленную полем упругости внутреннюю энергию $\frac{1}{2} \int \lambda_{ij\alpha\beta}^* \langle \varepsilon_{ij} \rangle \langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle d\mathbf{r}$ в системе. Из приведенного исследования эффективных коэффициентов K^*, μ^* следует наличие критической точки c_{2crit} и соответствующей ей переходной области, характеризующейся масштабом $\varepsilon \sim \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}} \ll 1$. При переходе через ε -окрестность критической точки происходит резкое (скачкообразное) изменение эффективных модулей, что эквивалентно существенному изменению внутренней энергии. Выше, с позиции асимптотических выражений (3.11) и (3.12) говорилось про изменение эффективных модулей от $K^*, \mu^* \sim K_1, \mu_1$ к $K^*, \mu^* \sim K_2, \mu_2 \gg K_1, \mu_1$. Но с учетом проведенного анализа переходной области корректнее сказать, что с одной стороны от ε -окрестности критической точки при $c_2 < c_{2crit}$ имеет место $K_1, \mu_1 \ll K^*, \mu^* \ll \sqrt{\mu_1 \mu_2}$, а с другой стороны при $c_2 > c_{2crit}$ имеет место $\sqrt{\mu_1 \mu_2} \ll K^*, \mu^* \ll K_2, \mu_2$. При этом следует отметить, что в пределе $\frac{\mu_2}{\mu_1} \rightarrow \infty$ масштаб ε -окрестности устремляется к нулю $\varepsilon \sim \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}} \rightarrow 0$ и в точке c_{2crit} следует говорить о разрыве эффективных коэффициентов K^*, μ^* . Здесь сразу следует отметить, что случай $\frac{\mu_2}{\mu_1} \rightarrow \infty$ отличается от случая $\mu_1 = 0$ тем, что в последнем разрыва эффективных коэффициентов не происходит (см. Рис. 3.1). С этой точки зрения изменение отклика в структуре на распространяющееся поле упругости следует интерпретировать как фазовый переход первого рода, имеющий отношение к смене агрегатного состояния. Параметром, определяющим скачкообразное поведение, является объемная концентрация c_2 , в линейном упругом рассмотрении представляющая собой вероятность нахождения определенной фазы в макроточке.

Исследуем структурный фазовый переход системы при наличии у фазы (“пустого” пространства) нулевых коэффициентов упругости $K_1, \mu_1 = 0$. В точке $c_2 =$

$c_{2crit} = 0,5$ эффективные упругие параметры K^*, μ^* либо равны нулю, либо находятся в окрестности нуля, стремясь у нулю при $c_2 \rightarrow c_{2crit}$. Рассмотрим поведение производной $\frac{d\mu^*}{dc_2}$ при подходе к критической точке с двух сторон. В точке $c_2 = c_{2crit} - \varepsilon$, где $\varepsilon \rightarrow +0$ поведение эффективных коэффициентов определяется значением $K^* = \mu^* = 0$, т.е. производная $\frac{d\mu^*}{dc_2} = 0$. При этом в точке $c_2 = c_{2crit} + \varepsilon$ производная $\frac{d\mu^*}{dc_2} \neq 0$ и подходит к критической точке оси абсцисс под некоторым углом $\pi/2 < \beta < \pi$, что следует из выражения (3.11). Анализ системы с параметрами $K_1 = \mu_1 = 0$ отображает предельный случай, при котором параметр ε можно устремить к нулю (что согласуется с полученной при рассмотрении случая $K_1, \mu_1 \neq 0$ оценкой $\varepsilon \sim \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}} = 0$). Таким образом, в точке $c_2 = c_{2crit}$ производная $\frac{d\mu^*}{dc_2}$ терпит разрыв, связанный со сменой функциональной зависимости эффективных коэффициентов по обе стороны перехода. Поведение эффективных коэффициентов в критической точке при $K_1, \mu_1 = 0$ соответствует фазовому переходу второго рода. Рис.3.1 иллюстрирует это поведение. Говоря о фазовых переходах второго рода, следует иметь ввиду параметр порядка. В рассматриваемом случае параметром порядка является объемная концентрация сфер c_2 ($c_1 + c_2 = 1$), она же является вероятностью нахождения твердой фазы в структуре. При параметре порядка $c_2 = 1$ система полностью упорядочена. Фазовые переходы второго рода также связывают с изменением симметрии в среде (см. теорию Ландау). Вероятной интерпретацией структурного изменения в точке $c_2 = c_{2crit}$ является переход твердой фазы к упорядоченному состоянию, при котором твердая фаза начинает занимать узлы симметричной “кристаллической” решетки.

Рассмотрим поведение производной $\frac{d\mu^*}{dc_2}$ при ненулевых параметрах $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$. Исследуем вначале поведение производной $\frac{d\mu^*}{dc_2}$ по обе стороны вдали от критической концентрации. Соответствующее поведение следует из дифференцирования полученных асимптотических выражений (3.11) и (3.12), имеющих разную

функциональную зависимость. Рассмотрим вспомогательный член $\frac{1}{\mu_1} \frac{d\mu^*}{dc_2}$. При концентрации $c_2 > c_{2crit}$ поведение этого члена исходя из выражения (3.11) оценивается как $\frac{1}{\mu_1} \frac{d\mu^*}{dc_2} \sim \frac{\mu_2}{\mu_1}$ (также полагаем $K_1 \sim \mu_1 \ll K_2 \sim \mu_2$). А при концентрации $c_2 < c_{2crit}$ исходя из выражения (3.12) поведение этого члена оценивается как $\frac{1}{\mu_1} \frac{d\mu^*}{dc_2} \sim 1$. Проанализируем теперь поведение производной $\frac{d\mu^*}{dc_2}$ при подходе к критической точке. Используя выражение (3.15), найдем соответствующие асимптотики

$$\frac{1}{\mu_1} \frac{d\mu^*}{dc_2} \sim \begin{cases} (c_1 - c_2)^{-2}, & (c_1 - c_2) \gg \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}, \\ \frac{\mu_2}{\mu_1}, & (c_1 - c_2) \ll \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}, \\ \frac{\mu_2}{\mu_1}, & (c_2 - c_1) \gg \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}. \end{cases} \quad (3.16)$$

Таким образом, в области критической точки значение производной $\frac{d\mu^*}{dc_2}$, нормированной на μ_1 , существенно меняется от $\sim (c_1 - c_2)^{-2} \ll \frac{\mu_2}{\mu_1}$ до $\sim \frac{\mu_2}{\mu_1}$. В рамках асимптотической формулы (3.11) поведение вспомогательного члена при подходе к критической точке $c_2 = c_{2crit} + \varepsilon$ не поменялось $\frac{1}{\mu_1} \frac{d\mu^*}{dc_2} \sim \frac{\mu_2}{\mu_1}$. В то время как поведение асимптотической формулы (3.12) при подходе к критической точке $c_2 = c_{2crit} - \varepsilon$ существенно изменилось: $\frac{1}{\mu_1} \frac{d\mu^*}{dc_2} \sim \frac{\mu_2}{\mu_1} \gg 1$. При увеличении концентрации c_2 относительно значения $c_2 = c_{2crit}$ значение производной $\frac{d\mu^*}{dc_2}$ не испытывает существенного изменения, в то время как на интервале $c_{2crit} - \varepsilon < c_2 < c_{2crit}$ происходит ее скачкообразное изменение (вдали от критической точки $c_2 < c_{2crit}$ поведение члена $\frac{1}{\mu_1} \frac{d\mu^*}{dc_2} \sim 1$ согласно выражению (3.12)). Данное поведение также можно описать оценочной записью

$$\frac{1}{\mu_1} \frac{d\mu^*}{dc_2} (c_{2crit} - \varepsilon < c_2 < c_{2crit}) \sim \frac{1}{\mu_1} \frac{\sqrt{\mu_1 \mu_2} - \alpha \mu_1}{\varepsilon} \sim \frac{\mu_2}{\mu_1} \sim \varepsilon^{-2},$$

в которой значение эффективного модуля μ^* изменилось от $\mu^* \sim \alpha \mu_1$, где $1 < \alpha \ll (\mu_2/\mu_1)^{1/2}$ до значения $\mu^* \sim \sqrt{\mu_1 \mu_2}$ на интервале масштаба $\varepsilon \sim (\mu_1/\mu_2)^{1/2}$. На Рис. 3.3 отражено поведение модуля производной эффективного сдвигового коэффициента $\left| \frac{d\mu^*}{dc_1} \right|$, нормированного на модуль μ_1 в зависимости от концентрации фазы c_1 при $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$.

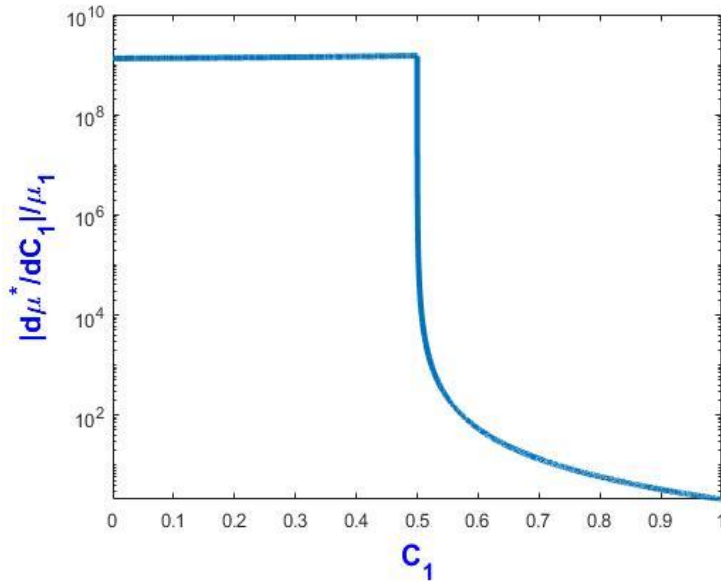


Рис. 3.3 Поведение модуля производной эффективного сдвигового коэффициента $\left| \frac{d\mu^*}{dc_1} \right|$, нормированного на модуль μ_1 в зависимости от объемной концентрации фазы 1.

Исходя из проведенного анализа выражения (3.14), являющегося следствием функциональной зависимости (3.10), производная $\frac{d\mu^*}{dc_2}$ в случае $\mu_1, K_1 \ll K_2, \mu_2$ испытывает скачкообразное изменение в переходной области критической точки c_{2crit} . Отличие от разрыва производной, имеющего место в предельном случае $K_1 = \mu_1 = 0$, заключается в наличии у переходной области малой, но конечной окрестности критической точки $\varepsilon \sim \left(\frac{\mu_1}{\mu_2} \right)^{1/2}$, обусловленной ненулевыми параметрами K_1, μ_1 в выражении (3.10). При устремлении отношений $\mu_1/\mu_2, K_1/K_2, \mu_1/K_2, K_1/\mu_2$ к нулю масштаб ε -окрестности критической точки устремляется к нулю и в пределе имеет место разрыв производной как и в предельном случае $K_1 = \mu_1 = 0$. Анализ поведения эффективных модулей μ^*, K^* при $K_1 = \mu_1 = 0$ указывает на фазовый переход второго рода. Поведение эффективных модулей в случае $\mu_1, K_1 \ll$

K_2, μ_2 с точностью до ε -окрестности критической точки также указывает на фазовый переход второго рода.

Покажем, что поведение производных $\frac{d^l \mu^*}{dc_2^l}$ при $l > 1$ в окрестности критической точки отличается от случаев $l = 0$ и $l = 1$. Начнем со случая $l = 2$. Взяв вторую производную в выражении (3.14), получим выражения

$$\frac{1}{\mu_1} \frac{d^2 \mu^*}{dc_2^2} \sim \begin{cases} (c_1 - c_2)^{-3}, & (c_1 - c_2) \gg \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}, \\ \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^{3/2}, & (c_1 - c_2) \ll \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}, \\ (c_2 - c_1)^{-3}, & (c_2 - c_1) \gg \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}, \end{cases} \quad (3.17)$$

которые предсказывают δ -образный всплеск в ε -окрестности критической точки.

Действительно, по обе стороны от критической точки $|c_2 - c_1| \gg \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^{1/2}$ имеет место оценка $\sim |c_2 - c_1|^{-3} \ll \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^{3/2}$, которая существенно меньше оценки $\sim \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^{3/2}$

при $(c_1 - c_2) \ll \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_2}}$. Рис.3.4. отражает предсказанное поведение производной $\frac{d^2 \mu^*}{dc_2^2}$.

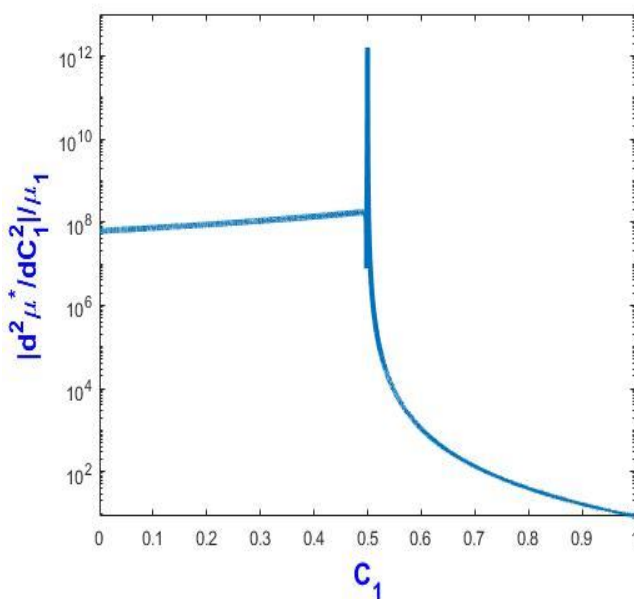


Рис. 3.4 Поведение модуля производной второго порядка от эффективного сдвигового коэффициента $\left| \frac{d^2 \mu^*}{dc_1^2} \right|$, нормированного на модуль μ_1 в зависимости от объемной концентрации фазы 1.

Отметим также, что асимптотическим выражением (3.12) в окрестности точки $c_2 < c_{2crit} - \varepsilon$ для вспомогательного члена предсказывается оценка $\frac{1}{\mu_1} \frac{d^2 \mu^*}{dc_2^2} \sim \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^{3/2}$. В свою очередь из асимптотического выражения (3.11) на интервале $c_2 > c_{2crit} + \varepsilon$ следует оценка $\sim \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^1$. На Рис. 3.4 видно падение значения члена $\frac{1}{\mu_1} \frac{d^2 \mu^*}{dc_2^2}$ вблизи критической точки $c_2 \approx c_{2crit}$, $c_2 > c_{2crit}$. Соответствующее падение является следствием того, что при увеличении c_2 асимптотика $\sim (c_2 - c_1)^{-3}$ меняется на асимптотику $\sim \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^1$, причем на рассматриваемом интервале “падения” оказывается справедливым неравенство $(c_2 - c_1)^{-3} < \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^1$.

Наличие δ -образного поведения в ε -окрестности критической точки имеет место и для производных более высших порядков. Данные всплески имеют отношение к δ -функции и ее производным. В предельном случае $K_1 = \mu_1 = 0$ производная $\frac{d^l \mu^*}{dc_2^l}$ содержит δ -функции и производные от них вплоть до порядка $l - 2$, $l \geq 2$, которые сосредоточены в критической точке (масштаб ε -окрестности при $K_1 = \mu_1 = 0$ равен нулю). Для доказательства этого утверждения заметим, что эффективный сдвиговой модуль при $K_1 = \mu_1 = 0$ представим в виде $\mu^* = \tilde{\mu}^* \theta(c_2 - c_{2crit})$, где $\tilde{\mu}^*$ определяется выражением (3.11), а функция $\theta(c_2 - c_{2crit})$ является функцией Хевисайда ($\theta(c_2 - c_{2crit}) = 1$ при $c_2 > c_{2crit}$ и $\theta(c_2 - c_{2crit}) = 0$ при $c_2 < c_{2crit}$). Дифференцирование такого эффективного сдвигового модуля по c_2 приводит к выражению $\frac{d\mu^*}{dc_2} = \frac{d\tilde{\mu}^*}{dc_2} \theta(c_2 - c_{2crit})$. Член с δ -функцией, появляющийся при дифференцировании $\theta(c_2 - c_{2crit})$, исчезает вследствие $\tilde{\mu}^*(c_2 = c_{2crit}) = 0$. Такое поведение производной $\frac{d\mu^*}{dc_2}$ свойственно фазовым переходам второго рода. Для производной $\frac{d^2 \mu^*}{dc_2^2}$ имеет место выражение

$$\frac{d^2 \mu^*}{dc_2^2} = \frac{d^2 \tilde{\mu}^*}{dc_2^2} \theta(c_2 - c_{2crit}) + \frac{d\tilde{\mu}^*}{dc_2} \delta(c_2 - c_{2crit}),$$

которое предсказывает δ -образное поведение в критической точке ($\frac{d\tilde{\mu}^*}{dc_2}(c_2 = c_{2crit}) \neq 0$). Из представленного выражения видно, что производные более высших порядков содержат δ -функцию и ее производные (коэффициенты перед ними не обращаются в нуль). В случае малых, но конечных K_1, μ_1 , появляющийся в окрестности критической точки δ -образный всплеск при рассмотрении производных $\frac{d^l \mu^*}{dc_2^l}$, $l \geq 2$ имеет приближенное отношение к δ -функции и ее производным порядка $l - 2$, $l \geq 2$. Соответствующее приближенное отношение является следствием того, что точное представление через θ -функцию эффективного модуля μ^* при $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$ отсутствует. Первая производная $l = 1$ эффективного модуля μ^* в рассмотренном предельном случае $K_1 = \mu_1 = 0$ не содержит δ -функции, что имеет отношение к отсутствию δ -образного скачка первой производной эффективного модуля μ^* в случае $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$. Т.е. выражение (3.10) для эффективного модуля μ^* устроено таким образом, что в случае $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$ его скачкообразное поведение в переходной области не приводит к δ -образному всплеску его первой производной в этой ε -окрестности критической точки, такому, которое проявляется для производных более высшего порядка. В отличие от производных порядка $l > 1$ эффективный модуль $\mu^*(c_2)$ и его первая производная $\frac{d\mu^*}{dc_2}(c_2)$ демонстрируют непрерывный рост при увеличении c_2 , что согласуется с полученными асимптотическими выражениями (3.11), (3.12) и (3.14). Отличие поведения производной эффективного модуля $\frac{d\mu^*}{dc_2}$ от самого модуля μ^* в переходной области заключается в изменении скачкообразного поведения: наклон производной $\frac{d\mu^*}{dc_2}$ становится более сингулярным относительно модуля μ^* , исходя из выражений (3.16) и (3.17) отношение соответствующих наклонов

$$\left(\frac{d\mu^*}{dc_2}\right)^{-1} \frac{d^2\mu^*}{dc_2^2} \sim \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^{1/2} \gg 1.$$

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

Найденная информация является признаком фазового перехода как первого рода, так и второго и отражает нетривиальное поведение эффективных коэффициентов в случае $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$. Наличие малой, но ненулевой ε -окрестности при анализе эффективных коэффициентов возникает как следствие конечного отношения упругих параметров фаз и отображает переходное состояние в поведении структуры.

Для описания структурного фазового перехода следует также дать качественное пояснение механизма контакта между разными элементарными структурными элементами (частицами) одной фазы. Используем при этом позицию обобщенной производной (2.1). Применение формулы (2.1) к уравнениям (3.1), приводит к дифференциальным уравнениям на смещение

$$\lambda_{ij\alpha\beta}(\mathbf{r})\partial_j\partial_\beta u_\alpha(\mathbf{r}) + \sum_k \int_{S_k} [\lambda_{ij\alpha\beta} u_\alpha]_x \partial_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}) ds_\beta = 0,$$

отображающим распространение поля в гетерогенной среде в целом с учетом внутренних границ. Одно из появившихся сингулярных слагаемых, содержащее в поверхностном интеграле член $[\lambda_{ij\alpha\beta} \partial_\beta u_\alpha]_x$, занулилось вследствие равенства напряжений на границах раздела фаз. При рассмотрении контактов одной фазы слагаемое $[\lambda_{ij\alpha\beta} u_\alpha]_x$ отлично от нуля если тангенциальные смещения разных элементов одной фазы различаются на границе раздела. Равенство соответствующих тангенциальных смещений может интерпретироваться как образование жесткой связи (кластеризация, слипание). В рассматриваемом случае $\gamma = 1$ данные члены равны нулю и описанный механизм выполняется.

Проведем анализ эффективных коэффициентов (3.9) при заданном n и $\gamma = 1$. В данном случае также получается уравнение четвертой степени на μ^* , но с другими коэффициентами $a_i(c_2, n)$. Отличие при этом заключается в значении критической объемной концентрации c_{2crit} . Исходя из представленных выкладок следует, что значение c_{2crit} одинаково как для фазы “пустого” пространства с $K_1, \mu_1 = 0$, так и для случая $K_1, \mu_1 \neq 0, K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$. Однако удобнее находить c_{2crit} для случая $K_1, \mu_1 = 0$ приравниванием к нулю коэффициента $a_3(c_2, n, n_0) = 0$ в полученном уравнении четвертой степени на μ^* . Для произвольной эффективной размерности n условие на критическую концентрацию имеет вид

$$(n + 1)c_{2crit} = 2. \quad (3.18)$$

При $n = 3$ имеем полученное значение $c_{2crit} = 0.5$. При $n = 2$ следует $c_{2crit} = 2/3$, $n = 1$ дает $c_{2crit} = 1$.

При произвольном n и $\gamma = 1$ изложенные аспекты, связанные с несущей фазой и структурным фазовым переходом, сохранятся с точностью до значения c_{2crit} .

Эффективные коэффициенты (3.9) отображают необходимость увеличения концентрации проводящей фазы для связного распространения поля по ней в гетерогенной среде при уменьшении размерности рассматриваемого пространства, в котором распространяется поле. Т.е. при меньшем числе внутренних связей нужна большая концентрация проводящей фазы.

Обобщение эффективных коэффициентов на случай некоторой размерности пространства делается также с целью отображения эффективного числа внутренних степеней свободы при распространении поля по гетерогенной среде с существенно различающимися физическими свойствами фаз на всем интервале концентраций.

На основе проделанного анализа приведем качественное сопоставление с экспериментальными данными.

Согласно проведенному в работе [56] молекулярно-динамическому моделированию значение концентрации $c_2 = 0.5$ входит в диапазон концентраций, описывающих фазовый переход первого рода между жидкостью и твердой фазой. В основе моделирования использована модель жестких твердых сфер. Автор статьи [32] интерпретирует значение 0.494 как «наибольшую случайную плотность» среди монодисперсных сфер, как точку затвердевания “freezing point”. Соответствующая структурная особенность проявляется в экспериментах с коллоидами [57]. Обратим здесь внимание на то, что автор статьи [32] связывает точку затвердевания с наибольшей плотностью случайно распределенных сфер. Продолжая эту мысль, укажем, что приближение концентрации фазы сфер к критической, вероятно, дает вклад одновременно как в изменение сопротивления нагрузке (вызванное процессом “затвердевания”), так и в упорядоченность структуры. Под вкладом в упорядоченность понимается структурное изменение в среде, которая изначально представляла собой стохастически распределенную структуру. Выше было показано, что случаю $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$ соответствует структурный фазовый переход, имеющий признаки фазовых переходов первого и второго рода. Фактически, данный структурный фазовый переход отображает изменение сопротивления нагрузке и вклад в упорядоченность структуры (структурное изменение). Полученные в данной главе результаты имеют согласование с представленными данными по коллоидам, гранулированным средам и суспензиям.

В работе [32] исследуется случайная плотная упаковка сфер [58–60], которая представляется как состояние гранулированной среды, соответствующее структурному фазовому переходу, проявляющему признаки фазовых переходов первого и второго рода. При этом значение объемной концентрации монодисперсных сфер $c_{2crit} = 0.6366 \pm 0.0005$, что реализуется по протоколу “вертикального встряхивания”. В работе [32] также приводятся другие предельные значения объемной концентрации сфер, например, $c_{2crit} \approx 0.6$. Такое же значение присутствует в работе [61] при исследовании суспензий. Данные значения следуют из выражения (3.18)

при $n < 3$, что интерпретируем уменьшением эффективного числа внутренних степеней свободы при распространении поля по гетерогенной среде.

Выводы по главе 3.

Произведено обобщение эффективных коэффициентов на случай заданной размерности пространства с учетом формализма обобщенной производной.

Из анализа найденных эффективных коэффициентов, примененного для гетерогенных сред с существенно различающимися свойствами фаз, найдена критическая точка с соответствующей ей окрестностью и разное асимптотическое поведение по обе стороны от окрестности критической точки. Предсказано наличие несущей фазы и структурного фазового перехода (перколяции). Структурный фазовый переход отображает переход фазы от несвязного распространения поля по системе к макроскопически связному.

Глава 4. Применение полученной теории для создания гетерогенного материала с заданными физико-механическими свойствами.

4.1. Исследование упругих свойств материала, полученного методом холодного газодинамического напыления с лазерной обработкой.

Введение раздела.

При использовании метода холодного газодинамического напыления (ХГН) частицы с характерным размером $10 \div 100$ мкм ускоряются в сверхзвуковом потоке газа до скоростей $100 \div 1000$ м/с и сталкиваются с преградой, в результате чего формируются покрытия при отсутствии плавления [62]. Процесс ХГН впервые исследован в Институте теоретической и прикладной механики СО РАН. На его основе разработан метод нанесения покрытий и изготовления прототипов трехмерных объектов из металлов, сплавов, композитных порошков и механических порошковых смесей [63]. ХГН является перспективным методом восстановления областей эрозии или износа, создания структурированных и композитных материалов, нанесения антифрикционных, защитных, проводящих и других покрытий [62, 64].

Для улучшения свойств материала, полученного методом ХГН, используются методы постобработки, одним из которых является метод обработки лазерным излучением [65–68]. При воздействии лазерного излучения на исходную гетерогенную пористую среду, состоящую из порошков (в основном B_4C , Ni, B), напыленных на подложку из титана (Ti), в системе с несколькими временными и пространственными масштабами происходят различные физические и химические процессы, что затрудняет экспериментальное и теоретическое исследование получаемого материала. Среди процессов, происходящих при газодинамическом напылении, выделим взаимную диффузию компонент с их растворением и различные химические реакции.

В разделе исследуется гетерогенный материал, полученный методом холодного газодинамического напыления с последующей лазерной обработкой. Изуча-

ются причины уменьшения размера частиц карбида бора B_4C под действием лазерного луча и химический состав материала, в котором содержится “потерянный” материал частиц B_4C . Разобрана математическая модель, в которой учитываются процесс растворения частиц B_4C и наличие химической реакции. Проведен анализ упругих свойств напыленного гетерогенного материала с использованием континуальных подходов, описывающих гетерогенные среды. Эти методы основаны на осреднении исходных стохастических уравнений и приводят к эффективным коэффициентам, характеризующим физические и геометрические свойства гетерогенной структуры.

Эволюция микроструктуры материала. Об изменении микроструктуры исследуемого материала свидетельствует уменьшение в 2–3 раза размера частиц B_4C вследствие фрагментации под действием лазерного луча [65]. Причины уменьшения размера частиц B_4C и химический состав материала, в котором содержится “потерянный” материал B_4C , в настоящее время не установлены.

Одной из причин [65, 66] уменьшения размера частиц B_4C является наличие химических реакций с Ti из подложки, что приводит к изменению состава керамики. По-видимому, основной реакцией является экзотермическая реакция $3Ti + B_4C = TiC + 2TiB_2$, протекающая при температуре, равной $900^\circ C$, что меньше температуры плавления Ti ($1700^\circ C$) и B_4C ($2350^\circ C$). При воздействии лазерного излучения с плотностью мощности, равной $5 \cdot 10^7$ Вт/см², создаются условия, необходимые для протекания химической реакции подобного типа. Согласно данным работы [69] температура материала в области лазерного воздействия при плотности мощности лазера порядка 10^6 Вт/см² составляет не менее $3000^\circ C$. При указанном значении мощности начинается процесс конвективного перемешивания, в результате чего увеличивается скорость плавления. При температуре, равной $2500^\circ C$, происходит разложение B_4C , при этом высвободившийся бор вступает в реакцию с титаном, более интенсивную по сравнению с реакцией B_4C и титана. Заметим, что в исходном порошке присутствует небольшая доля бора, который может вступить в экзотермическую реакцию с Ti при более мягких условиях. Соединения бора с

никелем (NiB , Ni_2B , Ni_4B_3 или Ni_5B_4) также возможны, но соответствующие реакции протекают медленнее, поскольку энергетически более затратны.

Еще одной причиной уменьшения размеров частиц карбида бора является их растворение в расплавленных металлах Ni и Ti. Механизм растворения B_4C в Ti описан в работе [70], в которой показано, что не все растворенные атомы B и C успевают вступить в реакцию $3\text{Ti} + \text{B}_4\text{C} = \text{TiC} + 2\text{TiB}_2$. Согласно [71] химическая реакция B_4C с Ni происходит менее интенсивно, чем реакция B_4C с Ti, существенная часть карбида бора, растворенного в Ni, остается непрореагировавшей к моменту достаточного охлаждения материала.

Наличие взаимной диффузии в реагирующей системе обусловлено силами взаимодействия типа сил Ван-дер-Ваальса. Для частиц B_4C характерна достаточно большая ван-дер-ваальсова сила притяжения [70], что способствует их кластеризации и агломерации. Наличие никеля препятствует неоднородному распределению частиц B_4C , что позволяет получить композит с армирующими элементами относительно равномерно распределенными в конечной микроструктуре. Взаимная диффузия B_4C и Ti с одновременным их растворением и относительно быстрое затвердевание материала, при котором наиболее вероятные химические реакции не могут реализоваться в полной мере, способствуют возникновению в полученном материале специфических структур Ti–B–C, Ni–B–C, определяющих его свойства.

Модель, учитывающая процесс растворения и наличие химической реакции. Рассмотрим модель, учитывающую процесс растворения и наличие химической реакции $3\text{Ti} + \text{B}_4\text{C} = \text{TiC} + 2\text{TiB}_2$. Предположим, что при характерном времени действия лазера скорость процесса растворения и химической реакции превышает скорость диффузии $\nabla D \nabla n$.

Уравнения в нуль-мерном приближении, описывающие химическую реакцию, имеют вид:

$$\frac{dn_{\text{B}_4\text{C}}}{dt} = -\gamma n_{\text{B}_4\text{C}} - kn_{\text{Ti}}^3 n_{\text{B}_4\text{C}}, \quad \frac{1}{3} \frac{dn_{\text{Ti}}}{dt} = -kn_{\text{Ti}}^3 n_{\text{B}_4\text{C}}, \quad (4.1)$$

где $n_{\text{B}_4\text{C}}$ – концентрация частиц B_4C в твердом состоянии, n_{Ti} – концентрация в подложке непрореагировавшего Ti; k – константа химической реакции; параметр γ

определяет скорость растворения. В математической модели (4.1) предполагается, что расплавленная часть V_4C прореагировала с Ti либо растворилась. Параметры γ , k считаем постоянными (в общем случае они зависят от площади контакта компонент, насыщения приграничных слоев и от температуры). Для замыкания уравнений (4.1) задаются следующие начальные условия: n_0 – начальная концентрация твердых частиц V_4C , n_{Ti0} – начальная концентрация Ti . В нуль-мерной модели (4.1) предполагается отсутствие пространственно-неоднородных слоев, так как согласно данным [69] число Грасгофа равно $Gr = g\beta l\Delta T\nu^{-3} \gg 1$.

Система уравнений (4.1) имеет аналитическое решение, но для оценки поведения компонентов воспользуемся приближением, когда концентрация Ti много больше концентрации V_4C . С учетом этого предположения, в нулевом приближении концентрацию n_{Ti} в правой части системы (4.1) считаем постоянной. Отклонение концентрации Ti от начального значения представим в виде $n_{Ti} = n_{Ti0} - \Delta n_{Ti}$. При этом решение первого и второго уравнений (4.1) имеет вид

$$n_{V_4C} = n_0 \exp(-\Gamma t), \quad \Delta n_{Ti} = \frac{3n_0}{1 + \frac{\gamma}{kn_{Ti0}^3}} \exp(-\Gamma t), \quad (4.2)$$

где $\Gamma = \gamma + kn_{Ti0}^3$. При $\gamma \gg kn_{Ti0}^3$ уменьшение размера твердых частиц V_4C происходит в основном в результате процесса растворения, при $\gamma \ll kn_{Ti0}^3$ – вследствие химической реакции.

Используя выражение для концентрации частиц в единице объема n_{V_4C} в (4.2), а также считая $c_1(t) = V_0 n_{V_4C}(t)$, $c_{10} = n_0 V_0$, где V_0 – объем частицы V_4C , получаем формулу

$$c_1(t) = c_{10} \exp(-\Gamma t), \quad (4.3)$$

определяющую объемную концентрацию V_4C . Параметр Γ содержит неизвестные коэффициенты γ и k , которые определяются с использованием эксперимента по значениям концентраций и размеров частиц V_4C в начальной и конечной структурах. Выражение для объемной концентрации V_4C при характерном времени процесса Δt можно представить в виде $c_1(\Delta t) = \frac{4}{3}\pi R^3 M_1$, где M_1 – концентрация частиц V_4C , вычисленная в предположении, что они имеют форму шаров радиусов R .

Формула для начальной объемной концентрации V_4C имеет вид $c_{10} = \frac{4}{3}\pi R_0^3 M_0$. С учетом сказанного выше и соотношения (4.3) получаем равенство $\frac{4}{3}\pi R_0^3 M_0 \exp(-\Gamma \Delta t) = \frac{4}{3}\pi R^3 M_1$, из которого выражается параметр Γ .

Согласно экспериментальным данным размер частиц V_4C R/R_0 в ходе процесса уменьшился в $2 \div 3$ раза. При этом концентрация макроскопических частиц при этом осталась сравнимой с начальной концентрацией: $M_0 \sim M_1$. Следовательно, $\Gamma \approx 10 \text{ мс}^{-1}$ при $\Delta t \approx 0,3 \text{ мс}$. Значение конечной объемной концентрации частиц V_4C составляет $c_1(\Delta t) \approx 0,1 c_{10}$.

В общем случае параметры γ и k определяются аналогично с использованием общего решения системы (4.1). При этом нужно знать концентрация частиц Ti , вступивших в реакцию, которое можно определить на основе экспериментов, оценивая концентрацию и размеры макроскопических частиц TiC и TiB_2 в полученной структуре.

Оценка упругих свойств гетерогенного материала. В начальном приближении при определении упругих свойств материала, полученного методом ХГН с последующей лазерной обработкой, считаем его двухфазной гетерогенной средой, содержащей частицы никеля в качестве связующей фазы и карбида бора в качестве включений. С использованием приведенных выше результатов оценим упругие свойства материала, в котором исходный V_4C перешел в соединение с титаном $TiC+2TiB_2$, и проведем оценки растворимости исходного V_4C в Ni .

Предполагается, что размеры неоднородностей, а именно размеры зерен карбида бора и соединения с титаном $TiC+2TiB_2$ существенно превышают молекулярные размеры. В то же время характерные размеры неоднородностей пренебрежимо малы по сравнению с изменением макрополей – статистически средних полей в системе. Распределение фаз в структуре полагается статистически однородным и изотропным.

В качестве исходной модели, позволяющей определить упругие свойства гетерогенного материала, используем стационарную изотропную модель линейной теории упругости главы 3. При этом эффективные коэффициенты (3.9) рассмотрим

при $n = 3$, $\gamma = 1$. Будем считать, что индексу 1 соответствует фаза включений (карбид бора), индексу 2 – связующая фаза (никель).

В нулевом приближении будем пренебрегать влиянием растворившегося B_4C на Ni и не учитывать химические реакции B_4C , B с титаном, т.е. гетерогенная среда состоит из карбида бора и никеля. В качестве параметров карбида бора выберем $K_1 = 80$ ГПа, $\mu_1 = 45$ ГПа, для никеля соответственно $K_2 = 160$ ГПа, $\mu_2 = 3,8$ ГПа. На рисунке 4.1 представлен график зависимости эффективного модуля сдвига, нормированного на модуль сдвига никеля μ_2 , от объемной концентрации карбида бора c_1 , полученная с использованием формул (3.9).

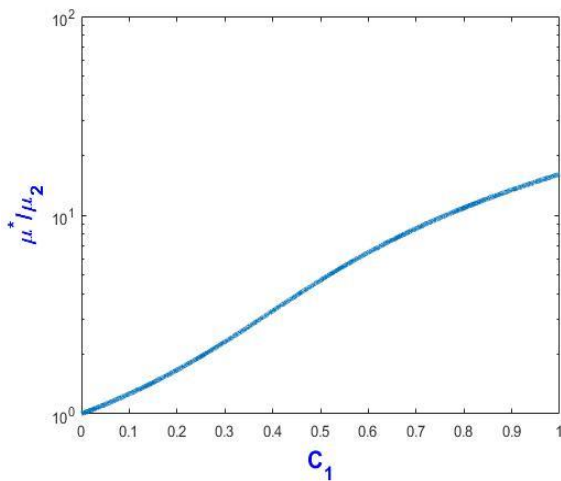


Рис. 4.1. Зависимость эффективного модуля сдвига, нормированного на модуль сдвига никеля, от объемной концентрации карбида бора.

В изучаемом материале удастся получить объемную концентрацию карбида бора $c_1 \approx 0,1 \div 0,2$. При $c_1 \approx 0,1 \div 0,2$ происходит увеличение модуля сдвига практически в два раза.

Эффективные сдвиговой и объемный модули упругости из (3.9) при малых и умеренных концентрациях фазы включений B_4C в анализируемом случае можно упростить. Для матричной никелевой фазы имеют место приближения $\mu^* \sim \mu_2 \ll \mu_1$ ($\mu_2/\mu_1 \sim 0.1$), $K^* \sim K_1, K_2 \gg \mu^* \sim \mu_2$. С учетом этого эффективные модули упругости сводятся к приближенным выражениям

$$\mu^* = \frac{\mu_2}{1 - \frac{5}{2}c_1}, \quad K^* = \frac{K_1 K_2}{c_1 K_2 + c_2 K_1}. \quad (4.4)$$

Эффективный сдвиговой модуль при малых концентрациях карбида бора c_1 имеет вид, аналогичный формуле Эйнштейна для вязкости суспензий. При $c_1 = 0.2$ имеем

$\mu^* = 2\mu_2$. Объемный модуль упругости соответствует нижней границе вилки Хилла или, что эквивалентно, K^* соответствует формуле обратной теории смесей. Учет эволюцию структуры в оценочных значениях эффективных коэффициентов (4.4), что подразумевает изменение концентрации карбида бора $c_1(t) = \frac{4}{3}\pi R^3(t)M_1(t)$ в результате растворения и протекания химической реакции. Воспользуемся выражением (4.3), где $c_{10} = \frac{4}{3}\pi R_0^3 M_0$ и подставим значение объемной концентрации карбида бора $c_1(t)$ в выражения (4.4), получим

$$\mu^*(t) = \frac{\mu_2}{1 - \frac{10}{3}\pi R_0^3 M_0 \exp(-\Gamma t)},$$

$$K^*(t) = \frac{K_1 K_2}{K_1 + \frac{4}{3}\pi R_0^3 M_0 \exp(-\Gamma t) (K_2 - K_1)}.$$
(4.5)

Замечание 1. Приведем оценку изменения упругих свойств Ni с растворенным в нем В₄С с позиции теории смесей

$$\begin{aligned}\tilde{\mu}_2(t) &= (1 - c_{10} + c_1(t))\mu_2 + (c_{10} - c_1(t))\mu_1, \\ \tilde{K}_2(t) &= (1 - c_{10} + c_1(t))K_2 + (c_{10} - c_1(t))K_1,\end{aligned}$$
(4.6)

где коэффициенты $\tilde{\mu}_2, \tilde{K}_2$ характеризуют модифицированные упругие свойства Ni ($\mu_2 \rightarrow \tilde{\mu}_2, K_2 \rightarrow \tilde{K}_2$) с растворенным в нем В₄С. Эффективный объемный модуль K^* в (4.4) при замене $K_2 \rightarrow \tilde{K}_2$ не изменится существенно относительно исходного выражения (4.4) без замены $K_2 \rightarrow \tilde{K}_2$ в силу $K_1 \sim K_2$. Что касается эффективного сдвигового модуля μ^* в (4.6), то при замене $\mu_2 \rightarrow \tilde{\mu}_2$ он претерпит изменения в силу $\mu_1/\mu_2 \sim 10$, причем эти изменения будут тем больше, чем больше карбида бора растворится $(c_{10} - c_1(t))$ в никеле. Полное растворение В₄С в Ni эквивалентно условию $c_1(t) = 0$. При этом считаем упругие свойства параметров μ_1, K_1 растворенной части В₄С соответствующими упругим свойствам В₄С.

Замечание 2. Если оценить изменение модулей модифицированного никеля по формулам обратной теории смесей, то полученные эффективные коэффициенты не содержат информации о существенном изменении упругих свойств исходного никеля. С позиции аналогии, например, при растворении углерода в железе линейные

модули упругости стали испытывают несущественное изменение относительно исходного железа.

Замечание 3. В случае полного химического перехода исходного карбида бора в соединения TiB_2 и TiC исследуемый гетерогенный материал имеет три фазы. Связующей фазой является никель, включениями: TiB_2 и TiC ; имеет место равенство $c_2 + c_3 + c_4 = 1$. Соединение TiB_2 имеет упругие параметры $K_3 = 300$ ГПа, $\mu_3 = 200$ ГПа, соединение TiC имеет упругие параметры $K_4 = 250$ ГПа, $\mu_4 = 190$ ГПа. Эффективные коэффициенты упругости в рамках используемых подходов обобщаются на случай произвольного числа фаз [11]. Однако следует заметить, что соответствующие упругие параметры фаз TiB_2 и TiC мало отличаются $K_3 \cong K_4$, $\mu_3 \cong \mu_4$, что в качестве оценки позволяет рассматривать их как единую фазу. Таким образом, по-прежнему имеем двухфазную среду $c_1 + c_2 = 1$, где $c_1 = c_3 + c_4$. Эффективный сдвиговой модуль упругости μ^* для матричной никелевой фазы также сводится к формуле (4.4) для μ^* , только в силу еще большего различия между сдвиговыми параметрами фаз $\mu_2 \ll \mu_3 \cong \mu_4$ формулы (4.4) являются более точными для малых и умеренных объемных концентраций включений.

Представляет интерес понять сколько следует сообщить тепла в систему, чтобы получить желаемую концентрацию частиц B_4C и продуктов реакции, т.е. фактически получить структуру с необходимыми свойствами. Для отражения распределения по системе поступающей энергии от лазера рассмотрим оценочную формулу

$$E = \frac{P}{vh},$$

в которой E [Дж/мм³] выражает количество энергии, которое поступило в единицу объема системы, P [Дж/с] – мощность лазера, v [мм²/с] – скорость сканирования, связанная с перемещением лазерного пятна определенной площади, h [мм] – толщина слоя. В работе [70] поступающая энергия на единицу объема составляет $E = 50 \div 75$ Дж/мм³ и является достаточной для растворения исходных частиц B_4C в Ni и Ti . При меньших значениях энергии следует ожидать частичного растворения исходных частиц B_4C .

Таким образом, показана возможность управления упругими свойствами гетерогенного материала, что является следствием протекания химических реакций и процесса растворения. Предложен полный переход исходного карбида бора в соединения с титаном: $TiC + 2TiB_2$, а также растворение исходного B_4C в никеле. Промежуточные состояния являются следствием подаваемой на исходную систему энергии, что дает возможность контролировать состав и свойства конечной структуры.

4.2. Предсказание упругих свойств гетерогенного материала на основе титанового сплава и борида титана, полученного методом управляемого лазерного воздействия.

В этом разделе диссертации проведено теоретическое исследование физико-механических свойств гетерогенного материала на основе керамики TiB и металлического сплава $Ti64$, полученного путем управляемого лазерного воздействия. Впервые произведено аналитическое описание упругих свойств анализируемой гетерогенной структуры. Анализ проведен в рамках метода условных моментов. Эффективные коэффициенты (3.9) при $n = 3$, $\gamma = 1$ сопоставлены с результатами, полученными в ходе проведения индентирования для исследуемого гетерогенного материала и с результатами других работ.

Коэффициенты упругости исследуемых фаз титанового сплава и борида титана отличаются менее чем на порядок. Исходя из этого определяемые по формуле (3.9) эффективные коэффициенты можно оценить более простыми выражениями. Первая оценка связана с вилкой Хашина-Штрикмана. При этом в знаменателях выражений (3.9) следует эффективные коэффициенты заменить на коэффициенты упругости соответствующей фазы $K^* \rightarrow K_\nu$, $\mu^* \rightarrow \mu_\nu$, ($\nu = 1, 2$) с учетом $n = 3$, $\gamma = 1$. Получившиеся два выражения ($\nu = 1, 2$) образуют узкую вилку в силу сравнимости по величине коэффициентов упругости фаз. Более грубая оценка, но имеющая место в анализируемой ситуации, связана с вилкой Хилла, при которой эффективные коэффициенты оцениваются выражениями

$$\frac{K_1 K_2}{c_1 K_2 + c_2 K_1} \leq K^* \leq c_1 K_1 + c_2 K_2,$$

$$\frac{\mu_1 \mu_2}{c_1 \mu_2 + c_2 \mu_1} \leq \mu^* \leq c_1 \mu_1 + c_2 \mu_2.$$

Данные неравенства следуют из формул (3.9) при заменах эффективных коэффициентов в знаменателях на нуль и бесконечность соответственно. Вилка Хилла является менее узкой относительно вилки Хашина-Штрикмана.

На рисунке 4.2 показана зависимость модуля сдвига для эффективной среды, нормированного на модуль сдвига Ti64 $E_1 = 110$ ГПа в зависимости от объемной концентрации TiB. При этом модуль Юнга TiB считаем равным $E_2 = 482$ ГПа [72], а модуль Юнга Ti64 равен $E_1 = 110$ ГПа, коэффициенты Пуассона для фаз: $\nu_1 = 0.32$, $\nu_2 = 0.2$.

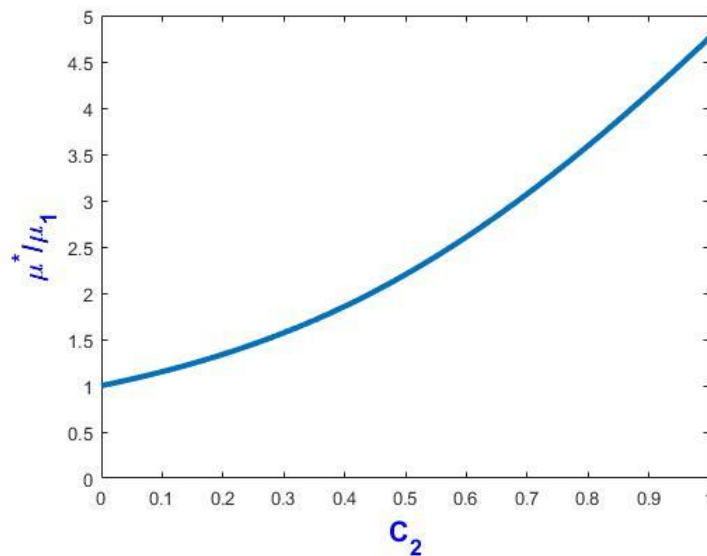


Рисунок 4.2 – Зависимость эффективного модуля сдвига, нормированного на модуль сдвига Ti64 от объемной концентрации TiB.

На рисунке 4.3 показана зависимость модуля Юнга для эффективной среды E^* , нормированного на модуль Юнга Ti64 в зависимости от объемной концентрации TiB.

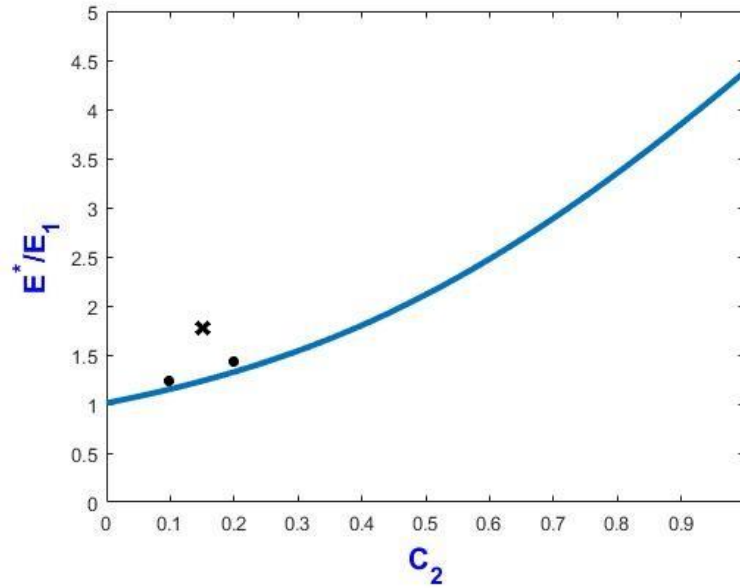


Рисунок 4.3 – Зависимость эффективного модуля Юнга, нормированного на модуль Юнга Ti64 от объемной концентрации TiB. Точками обозначены данные работы [72], крестом обозначен модуль Юнга, полученный в настоящей работе с помощью индентирования.

Согласно данным источника [72] при концентрации TiB $c_2 = 0.1$ эффективный модуль Юнга для получаемого материала возрос примерно на 20%, а при $c_2 = 0.2$ эффективный модуль Юнга возрос примерно на 45%. Используемые формулы для соответствующих концентраций предсказывают возрастание на 15% и 33% процентов соответственно. Отклонение интерпретируется тем, что в формулах (3.9) при $\gamma = 1$ не учитывается микроструктурная особенность фазы TiB, которая представляет собой вискерсы. Но согласно приведенным в настоящей работе экспериментальным данным в анализируемой структуре вискерсы не образуются. В приведенной модели не учитывается протекание химических реакций и процесса растворения как это сделано в работе [6], т.к. исходя из экспериментальных данных протекание химических реакций и растворение керамических частиц TiB в металлической матрице в анализируемой структуре является малым.

Если в формулы (3.9) при $\gamma = 1$ подставить коэффициенты упругости, полученные в результате проведения индентирования, то при концентрации $c_2 = 0.15$ модуль Юнга E^* возрастет примерно на 12% относительно значения модуля Юнга

для матрицы Ti64 и получится результат $E^* = 197$ ГПа. Соответствующий результат близок к значению 200 ГПа, следующему из проведенного индентирования.

Экспериментальные значения удовлетворительно согласуются с полученными данными теоретического предсказания упругих свойств гетерогенной среды в рамках метода условных моментов.

4.3. Сравнение полученных результатов с экспериментальными данными для вязкоупругих свойств гетерогенной среды

В приведенных выше разделах диссертации исследуются преимущественно упругие свойства гетерогенной среды. В данном разделе найденные результаты обобщаются на вязкоупругие свойства гетерогенной среды и проводится сопоставление с экспериментальными данными для упругих и вязкоупругих характеристик.

В разделе также отражена актуальная проблема, возникающая при моделировании гетерогенной среды и связанная с наличием в итоговых уравнениях с входящими коэффициентами информации о поведении гетерогенной среды в целом и каждой фазы отдельно. Существующие на данный момент подходы (см. главу 1 диссертации) в основном ориентированы на получение осредненных уравнений для среды в целом с входящими в них эффективными коэффициентами переноса. Для исследования поставленных вопросов предлагается использовать МУМ, т.к. в рамках данного подхода получаются осредненные уравнения, содержащие информацию о поведении как среды в целом, так и каждой фазы отдельно. Исследование фильтрационного поведения включает описанную проблему. К этой проблеме дополняется также аналитическая сложность по анализу системы с существенно различающимися физическими свойствами (эта проблема анализируется в главе 3 диссертации), т.к. исследование фильтрационного поведения сводится к рассмотрению гетерогенных сред: жидкость/газ – твердая фаза, фаза пор – твердая фаза. При определенных параметрах, например, при малой объемной концентрации твердой фазы, каркас заведомо не существует. В других ситуациях твердая фаза может быть

связна, а поры – не связны. Особенности данных систем, не приводящие к фильтрационному поведению, должны быть отражены в процессе нахождения искомым уравнений. В качестве исходной модели предлагается взять линейную теорию вязкоупругости, ориентированную на моделирование фильтрационных свойств.

Постановка задачи

Рассмотрим распространение вязкоупругого поля в микронеоднородной статистически однородной и изотропной двухфазной среде в трехмерном пространстве. В качестве исходной модели используем стационарную изотропную модель линейной теории вязкоупругости [13]:

$$\left((\lambda_{ij\alpha\beta} - i\omega\eta_{ij\alpha\beta})u_{\alpha,\beta} \right)_{,j} = f_i, \quad (4.7)$$

где $\lambda_{ij\alpha\beta}$ – тензор упругости (2.5), $\eta_{ij\alpha\beta}$ – тензор, характеризующий вязкие свойства и структурно идентичный тензору упругости. f_i – объемные источники. Запись $u_{\alpha,\beta}$ характеризует дифференцирование компоненты поля смещения u_α по направлению x_β .

Если рассматривается однофазная жидкая среда, то уравнение (4.7) с учетом связи сдвига с объемными модулями упругости $\mu \ll K$, выражения для давления $p = -Ku_{r,r}$ и обратного преобразования Фурье сводится к уравнению стационарному уравнению движения в приближении Стокса

$$\left(\eta_{ij\alpha\beta}v_{\alpha,\beta} \right)_{,j} = p_{,i} + f_i.$$

В случае пренебрежимо малых скоростей $v_i = \dot{u}_i = 0$ система (4.7) сводится к уравнениям стационарной линейной теории упругости (2.5). Далее представляется исследование исходной стохастической системы (4.7) методом условных моментов, в результате чего, как частный случай, следует описание фильтрационного поведения.

Осреднение модели (4.7) аналогично проделанным выкладкам по осреднению линейной модели теории упругости (2.5) в силу структурной идентичности уравнений линейной теории упругости и вязкоупругости [13]. Основываясь на работе [41], приведем преобразованные МУМ уравнения (4.7):

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}^* \langle u_j \rangle_{,rr} + \left(\tilde{K}^* + \frac{1}{3} \tilde{\mu}^* \right) \langle u_r \rangle_{,rj} &= \langle f_j \rangle, \\ \langle u'_j \rangle &= -P_1 \langle u_r \rangle_{,rj} - P_2 \langle u_j \rangle_{,rr} + P_3 \langle f'_j \rangle, \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$\langle \varepsilon'_{jk} \rangle = -L_1 \langle \varepsilon_{rr} \rangle \delta_{jk} - L_2 \langle \varepsilon_{jk} \rangle,$$

$$\langle u'_j \rangle = \langle u_j^1 \rangle - \langle u_j^2 \rangle, \quad \langle \varepsilon'_{jk} \rangle = \langle \varepsilon_{jk}^1 \rangle - \langle \varepsilon_{jk}^2 \rangle, \quad \langle f'_j \rangle = \langle f_j^1 \rangle - \langle f_j^2 \rangle$$

с эффективными коэффициентами

$$\begin{aligned} \tilde{K}^* &= c_1 \tilde{K}_1 + c_2 \tilde{K}_2 - \frac{c_1 c_2 (\tilde{K}_1 - \tilde{K}_2)^2}{c_1 \tilde{K}_2 + c_2 \tilde{K}_1 + \frac{4}{3} \tilde{\mu}^*}, \\ \tilde{\mu}^* &= c_1 \tilde{\mu}_1 + c_2 \tilde{\mu}_2 - \frac{c_1 c_2 (\tilde{\mu}_1 - \tilde{\mu}_2)^2}{c_1 \tilde{\mu}_2 + c_2 \tilde{\mu}_1 + \frac{\tilde{\mu}^* (9\tilde{K}^* + 8\tilde{\mu}^*)}{6(\tilde{K}^* + 2\tilde{\mu}^*)}}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

и другими коэффициентами, входящими в уравнения (4.8)

$$\begin{aligned} P_1 &= \frac{2\tilde{\mu}'(2\tilde{b} - \tilde{a})}{3\alpha^2(1 - 2\tilde{b}(\tilde{\mu}^* - c_1\tilde{\mu}_2 - c_2\tilde{\mu}_1))} - \frac{\tilde{K}'\tilde{a}}{\alpha^2(1 - 3\tilde{a}(\tilde{K}^* - c_1\tilde{K}_2 - c_2\tilde{K}_1))}, \\ P_2 &= \frac{2\tilde{\mu}'(\tilde{a} - 4\tilde{b})}{3\alpha^2(1 - 2\tilde{b}(\tilde{\mu}^* - c_1\tilde{\mu}_2 - c_2\tilde{\mu}_1))}, \quad P_3 = -\frac{10\tilde{b} - \tilde{a}}{3\alpha^2}, \\ L_1 &= \frac{\tilde{K}'\tilde{a}}{1 - 3\tilde{a}(\tilde{K}^* - c_1\tilde{K}_2 - c_2\tilde{K}_1)} - \frac{2\tilde{\mu}'\tilde{b}}{3(1 - 2\tilde{b}(\tilde{\mu}^* - c_1\tilde{\mu}_2 - c_2\tilde{\mu}_1))}, \\ L_2 &= \frac{2\tilde{\mu}'\tilde{b}}{1 - 2\tilde{b}(\tilde{\mu}^* - c_1\tilde{\mu}_2 - c_2\tilde{\mu}_1)}, \quad \tilde{a} = \frac{1}{3(\tilde{K}^* + \frac{4}{3}\tilde{\mu}^*)}, \quad \tilde{b} = \frac{\tilde{K}^* + 2\tilde{\mu}^*}{5\tilde{\mu}^*(\tilde{K}^* + \frac{4}{3}\tilde{\mu}^*)}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

где $\tilde{K}^* = K^* - i\omega\zeta^*$, $\tilde{\mu}^* = \mu^* - i\omega\eta^*$ – объемный и сдвиговый эффективные коэффициенты тензора $\tilde{\lambda}_{ij\alpha\beta}^* = \lambda_{ij\alpha\beta}^* - i\omega\eta_{ij\alpha\beta}^*$. Введены также обозначения $\tilde{K}_i = K_i - i\omega\zeta_i$, $\tilde{\mu}_i = \mu_i - i\omega\eta_i$, $i = 1, 2$, штрихом обозначена разность соответствующих осредненных параметров фаз ($\langle \varepsilon'_{jk} \rangle$ – разность осредненных деформаций). Параметр α^{-1} характеризует масштаб неоднородности. Число $(\alpha L)^{-1}$, где L – характерный макро масштаб, считается малым $(\alpha L)^{-1} \ll 1$, что дает возможность говорить о статистически средних величинах (макроточках). В первом и третьем уравнениях (4.8) ограничились членами $\sim \alpha^0$, во втором α^{-2} .

Первое уравнение представленной системы (4.8) характеризует поведение среды в целом. Второе и третье уравнения (4.8) содержат информацию о разном

поведении фаз – осредненных тензоров деформации и осредненных смещениях фаз соответственно. Уравнение на разность осредненных смещений является достижением МУМ и представляет особый интерес. Помимо эффективных коэффициентов вязкоупругости система (4.8) содержит коэффициенты (4.10), которые также отражают микроструктуру среды и непосредственно влияют на различное поведение фаз: $\langle u'_j \rangle, \langle \varepsilon'_{jk} \rangle$.

Если в системе (4.8) положить $\omega = 0$ – предел нулевых частот в вязкоупругом подходе, то придем к рассмотрению только упругих свойств гетерогенной среды. При анализе вязких свойств гетерогенной среды без учета упругих (предел больших частот), в системе (4.8) следует положить следующие замены: $\tilde{K} \rightarrow \zeta, \tilde{\mu} \rightarrow \eta, u_i \rightarrow v_i, f_i \rightarrow f_i + p_{,i}, \varepsilon_{jk} \rightarrow \dot{\varepsilon}_{jk}$.

Анализ эффективных коэффициентов.

1. *Исследование среды жидкость — твердая фаза в пределе больших частот* $K_i, \mu_i \ll \omega \zeta_i, \omega \eta_i$. В этом случае эффективные коэффициенты вязкости

$$\zeta^* = c_1 \zeta_1 + c_2 \zeta_2 - \frac{c_1 c_2 (\zeta_1 - \zeta_2)^2}{c_1 \zeta_2 + c_2 \zeta_1 + \frac{4}{3} \eta^*},$$

$$\eta^* = c_1 \eta_1 + c_2 \eta_2 - \frac{c_1 c_2 (\eta_1 - \eta_2)^2}{c_1 \eta_2 + c_2 \eta_1 + \frac{\eta^* (9\zeta^* + 8\eta^*)}{6(\zeta^* + 2\eta^*)}}$$
(4.11)

не зависят от коэффициентов упругости и идентичны коэффициентам (3.9) при заменах $K \rightarrow \zeta, \mu \rightarrow \eta$ с учетом $n = 3, \gamma = 1$. Соответственно и основные выкладки, представленные в главе 3 диссертации, переносятся на случай анализа вязких свойств гетерогенной среды. То есть, отождествляя фазу 1 с жидкой, а фазу 2 с твердой $\zeta_2, \eta_2 \gg \zeta_1, \eta_1$, в нулевом приближении $\zeta_1 = \eta_1 = 0$ уравнения (4.11) сводятся к уравнению (3.11) описывают несущую твердую фазу $\zeta^* \sim \zeta_2, \eta^* \sim \eta_2$ при $c_2 > 0,5$. Результирующая среда на этом интервале согласно главе 3 является каркасом. Уравнение на эффективную сдвиговую вязкость на интервале $c_2 \in [0; 0,5)$ при условии больших частот принимает вид (3.12) с точностью до замен $K \rightarrow \zeta, \mu \rightarrow \eta$. Результирующая среда при этом определяется как суспензия $\zeta^* \sim \zeta_1, \eta^* \sim \eta_1$. Переход

между несущими фазами описан в главе 3 и трактуется как структурный фазовый переход (перколяционный эффект). Точку $c_1 = 0.5$ следует трактовать как точку смены несущей фазы. Характерное поведение для случая $\zeta_2, \eta_2 \gg \zeta_1, \eta_1$, вычисленное по формулам (4.11) в пределе больших частот, показано на рис. 4.4.

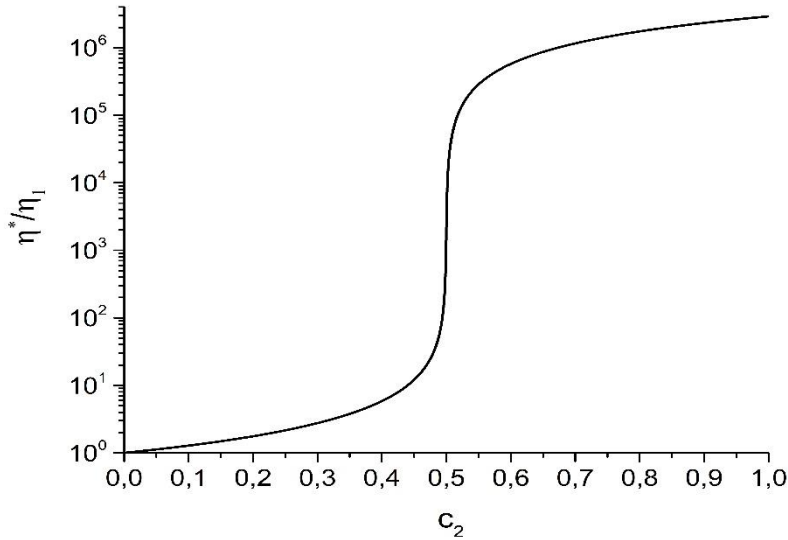


Рис. 4.4. Зависимость эффективного модуля сдвиговой вязкости η^* , нормированного на коэффициент вязкости жидкой фазы η_1 , от объемной концентрации твердой фазы c_2 .

Затронем вопрос о поведении эффективных вязких модулей при малой концентрации твердой фазы $c_2 \ll 1$, $\zeta_1, \eta_1 \ll \zeta_2, \eta_2$, анализируя только вязкие свойства (формулы (4.9)). Эффективные модули вязкости имеют вид

$$\zeta^* = \zeta_1 + \zeta_1 \left(1 + \frac{4\eta_1}{3\zeta_1} \right) c_2, \quad \eta^* = \eta_1 + \frac{5\zeta_1 + \frac{4}{3}\eta_1}{2\zeta_1 + 2\eta_1} \eta_1 c_2,$$

где эффективный модуль сдвига η^* согласуется, но не идентичен формуле Эйнштейна для вязкости суспензий.

2. *Исследование эффективных коэффициентов упругости в пределе нулевых частот.* Приведем здесь анализ эффективных коэффициентов (3.9) при $n = 3$, $\gamma =$

1 (это уравнения (4.9) в пределе нулевых частот), дополняющий главу 3. Эффективный коэффициент Пуассона σ^* может испытывать экстремум. Соответствующее условие эквивалентно уравнению

$$\frac{\partial}{\partial c_2} \left(\frac{\mu^*}{K^*} \right) = 0,$$

($K^* \neq 0$) и связано с различным поведением $K^*(c_2)$ и $\mu^*(c_2)$. Значение σ^* может выходить из интервала (σ_1, σ_2) . Пример такого поведения показан на рис. 4.5, где представлена зависимость отношения эффективного коэффициента Пуассона, нормированного на коэффициент Пуассона эпоксидной смолы от концентрации кварца. Параметры эпоксидной смолы: $E_1 = 1,75 \cdot 10^8$ Па, $\sigma_1 = 0,27$; параметры кварца: $E_2 = 8,3 \cdot 10^9$ Па, $\sigma_2 = 0,23$.

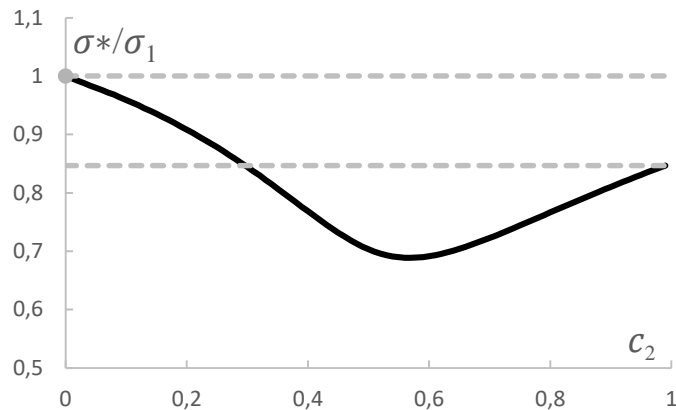


Рис. 4.5. Зависимость отношения эффективного коэффициента Пуассона, нормированного на коэффициент Пуассона эпоксидной смолы от концентрации кварца.

Рассмотрим среду, для которой выполняется условие $\mu_1 \ll K_1, K_2, \mu_2$, что свойственно системе жидкость – твердая фаза. Найдем, при какой объемной концентрации фаз среда теряет способность к сдвиговой деформации: $\mu^* \sim \mu_1$. В нулевом приближении точка структурного фазового перехода находится из условия $\mu_1 = 0$. В пределе нулевых частот уравнения (4.9) сводятся к третьей степени. Достаточно приравнять к нулю коэффициент при нулевой степени: $M_3 = K_1 K_2 (9c_2 \mu_2 - 6c_1 \mu_2)$, откуда найдем предельное значение $c_1 = 0,6$. Выражение для несущей фазы 1 на интервале $c_1 \in (0,6; 1]$ имеет вид

$$\mu^* = \frac{\mu_1}{1 - \frac{5}{2} c_2}$$

и получается путем деления уравнения (3.10) (в пределе нулевых частот) на $K_1 K_2 \mu_2$. При концентрации твердой фазы $c_2 < 0,4$, несущей фазой является жидкая, т.е. твердые включения распределены в жидкости. При концентрации $c_2 > 0,4$ несущей фазой является твердая ($\mu^* \sim \mu_2 \gg \mu_1$). Факт несущей твердой фазы подразумевает каркас. Согласно вышесказанному, каркас возникает при концентрации твердой фазы $c_2 > 0,5$. Тогда интервал $c_2 \in (0,4; 0,5)$ следует считать переходным.

В ситуации $c_1 \ll 1$ и $K_2, \mu_2 \gg K_1, \mu_1$, что имеет отношение к пористости, дефектам, жидкости (газу) в твердой фазе, эффективные коэффициенты согласуются с современными представлениями [12].

Приведем эффективный модуль Юнга E^* при условиях $c_2 \ll 1$ и $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2, K_1 \gg \mu_1$. Условие $K_1 \gg \mu_1$ характерно для ряда материалов по типу резин и для жидкостей. Исходя из этого можно записать

$$E^* = E_1 + \frac{5}{2} E_1 c_2. \quad (4.12)$$

3. Рассмотрим формулы (4.9) для системы жидкость – твердая фаза, применяя вязкоупругий подход. Проведем асимптотическое разложение (4.9) при малой концентрации твердой фазы $c_2 \ll 1$, считая справедливыми следующие неравенства: для вязких модулей $\zeta_1, \eta_1 \ll \zeta_2, \eta_2$, для упругих модулей фаз $K_2, \mu_2, K_1 \gg \mu_1 \sim 0$. Выделяя Re и Im части, представим вид эффективных коэффициентов:

$$K^* = K_1 + K_1 c_2, \quad \zeta^* = \zeta_1 + \left(\zeta_1 + \frac{4}{3} \eta_1 \right) c_2,$$

$$\mu^* = \frac{5}{3} \frac{\omega^2 \eta_1^2 K_1}{K_1^2 + \omega^2 (\zeta_1 + 2\eta_1)^2} c_2,$$

$$\eta^* = \eta_1 + \frac{5}{2} \frac{K_1^2 + \omega^2 (\zeta_1 + \frac{4}{3} \eta_1) (\zeta_1 + 2\eta_1)}{K_1^2 + \omega^2 (\zeta_1 + 2\eta_1)^2} \eta_1 c_2.$$

При внешнем воздействии частотой ω в несущей жидкой фазе появляется модуль сдвига (для наглядности собственный модуль сдвига жидкости μ_1 изначально положили равным нулю), который становится существенным при больших ω . В широком спектре ситуаций $K_1 \gg \omega (\zeta_1 + 2\eta_1)$ (например, для воды $\eta_1/K_1 \sim 10^{-13}$ с), тогда сдвиговые модули принимают вид

$$\mu^* = 0, \quad \eta^* = \eta_1 + \frac{5}{2}\eta_1 c_2.$$

Выражение для эффективного коэффициента вязкости идентично формуле Эйнштейна. Выясним поведение эффективного коэффициента сдвиговой вязкости для несущей жидкой фазы $\eta^* \sim \eta_1$. Сделаем это путем преобразования уравнения (4.9) с учетом $K_1 \gg \omega\zeta_1, \omega\eta_1, \mu_1$. Тогда эффективный коэффициент сдвиговой вязкости принимает вид

$$\eta^* = \frac{\eta_1}{1 - \frac{5}{2}c_2}. \quad (4.13)$$

Область применимости данной формулы не ограничена малыми концентрациями твердой фазы, но при приближении к $c_2 = 0,4$ формула неприменима и нужно решать исходное уравнение (4.9). При выводе формулы (4.13) положено также условие $\omega\eta^* \gg \mu^*$ (или $\omega\zeta_1, \omega\eta_1 \gg \mu_1$), что выражает пренебрежимо малый вклад сдвиговой деформаций для жидкой фазы. Раскладывая уравнение (4.13) по c_2 , получим выражение

$$\eta^* = \eta_1 + \frac{5}{2}\eta_1 c_2 + \left(\frac{5}{2}\right)^2 \eta_1 c_2^2 + \left(\frac{5}{2}\right)^3 \eta_1 c_2^3 + \dots,$$

которое согласуется с современными представлениями [13, 73]. Уравнение (4.13) получено с учетом заложенных упругих свойств фаз в исходную постановку задачи. Без учета объемных упругих свойств, связанных с давлением, формулу Эйнштейна получить не удастся.

4. Исследование пористой среды и фильтрационного поведения. Выражения (4.9) при описании пористой среды $\zeta_1, \eta_1 = 0, K_1, \mu_1 = 0$ сводятся к формуле (3.11). Исходя из этого можно утверждать, что на интервале $c_1 \in [0,5; 1]$ вязкость и упругие свойства микронеоднородной среды отсутствуют. Это позволяет считать, что пористый каркас с позиции как линейных вязких свойств (большие частоты), так и в пределе нулевых частот, не существует. На интервале $c_2 > 0.5$ поровая фаза не связана. Это следует из того, что эффективные коэффициенты системы пропорциональны коэффициентам твердой фазы $\zeta^*, \eta^* \sim \zeta_2, \eta_2$, т.е. свойства системы определяются твердой фазой, что означает запертость жидкой фазы в каркасе.

При отклонении от однородной изотропной стохастичной структуры приведенное условие критической пористости $c_1 = c_2 = 0.5$ нарушается. Добавим на интервале $c_2 \in [0; 0.5]$ локальную структурную анизотропность твердой фазы (общую структуру каркаса считаем все также однородной и изотропной), которая приводит к связности твердой фазы. При этом считаем, что однородность и изотропность фазы пор (пустого пространства) не изменилась. Действительно, пренебрежимо малой объемной концентрацией твердой фазы можно добиться связного каркаса, что практически не скажется на структуре пор. Выразим это изменение в исходной стохастической системе (4.7) в члене f_i . (твердая фаза как будто удерживается объемными источниками). Параметр f_i выражает в себе упругие свойства пористого каркаса.

Связность порового пространства означает факт несущей жидкой фазы. При рассмотрении фильтрационного поведения жидкая фаза должна быть несущей (макроскопически связной). С позиции эффективной сдвиговой вязкости это означает, что $\eta^* \sim \eta_1$. Поэтому нас интересует интервал $c_2 < 0.5$, на котором эффективный сдвиговой коэффициент вязкости системы определяется формулами (4.11) – в рамках рассмотрения только вязких свойств (см. рис. 4.6); и интервал $c_2 > 0.4$ в рамках вязкоупругого подхода, где η^* определяется выражением (4.13). Несмотря на то, что для суспензии и жидкости в каркасе присвоены одинаковые эффективные коэффициенты, типы течений данных систем различны, что следует из введенного слагаемого f_i и показано далее при анализе осредненных уравнений.

Анализ осредненных уравнений.

Помимо эффективных коэффициентов (4.9), МУМ получены и другие коэффициенты. Данный раздел включает в себя анализ этих коэффициентов, что, совместно с эффективными коэффициентами, имеет непосредственное влияние на итоговый вид осредненных уравнений.

Начнем с анализа второго уравнения (4.8). Исходя из свойств эффективных коэффициентов вязкоупругости, рассмотрим интервал несущей жидкой фазы для

вязкоупругих свойств $c_1 \in (0.6 ; 1]$. Коэффициенты \tilde{a} и \tilde{b} упрощаются с учетом соотношений между коэффициентами фаз и соотношениями объемных и сдвиговых упругих свойств для жидкой фазы. Вместе с коэффициентом P_3 имеем вид

$$P_3 = -\frac{2}{3(-i\omega\eta^*)\alpha^2}, \quad \tilde{a} = \frac{1}{3K^*}, \quad \tilde{b} = \frac{1}{5(-i\omega\eta^*)}, \quad (4.14)$$

Видно, что при обратном преобразовании Фурье второго уравнения системы (4.8) возникает разность скоростей как следствие зависимости $1/(-i\omega)$ в (4.14) (разности смещений не возникает); в результате чего получается выражение

$$\langle v_j^1 \rangle = \frac{2}{3\alpha^2\eta^*} \langle f_j^2 \rangle, \quad (4.15)$$

где учтено равенство $\langle f_j' \rangle = -\langle f_j^2 \rangle$ и $\langle v_j^2 \rangle = 0$ – находимся в системе отсчета твердой фазы. Без члена $\langle f_i^2 \rangle$, выражающего упругие свойства связной твердой фазы, осредненная скорость жидкой фазы: $\langle v_j^1 \rangle = 0$, то есть среда ведет себя как суспензия (с точностью до слагаемого $-P_1 \langle u_r \rangle_{,rj} - P_2 \langle u_j \rangle_{,rr}$) и говорить о фильтрации не имеет смысла. Результат, аналогичный (4.15) с точностью до коэффициента пропорциональности, получается при рассмотрении вязких свойств при несущей жидкой фазе $c_1 \in (0.5 ; 1]$. Если член $\langle f_j' \rangle$ выполняет роль не каркасообразующую, а, например, роль силы тяжести, то получится выражение на баланс сил: силы тяжести и силы Стокса в гетерогенной среде.

Преобразуем первое уравнение в (4.8). В общем случае эффективные коэффициенты зависят от частоты и преобразование Фурье выполнить не удастся. Поступим следующим образом: в члене $\tilde{\mu}^* \langle u_j \rangle_{,rr}$ отбросим слагаемое $\tilde{\mu}^* \langle u_j \rangle_{,rr}$, которое является малым для несущей жидкой фазы; также для несущей жидкой фазы слагаемое $\frac{1}{3} \mu^* \langle u_r \rangle_{,rj}$ мало относительно $K^* \langle u_r \rangle_{,rj}$. Градиент давления получается как $K^* \langle u_r \rangle_{,rj} = -\langle p \rangle_{,j}$. Учтем условие несжимаемой жидкости $\langle v_r \rangle_{,r} = 0$, из которого пренебрежем слагаемым $-i\omega \left(\zeta^* + \frac{1}{3} \eta^* \right) \langle u_r \rangle_{,rj}$. Далее, при преобразовании Фурье, первое уравнение (4.8) сведется к виду

$$\eta^* \langle v_j \rangle_{,rr} - \langle p \rangle_{,j} = c_2 \langle f_j^2 \rangle, \quad (4.16)$$

($\langle f_i \rangle = c_2 \langle f_i^2 \rangle$) который является осредненным аналогом уравнения Стокса.

Анализ уравнений (4.15) и (4.16). Члены $\langle v_j^1 \rangle$ и $P_3 \langle f_i^2 \rangle$ в (4.15) одного порядка. Если в уравнении (4.16) члены $\eta^* \langle v_j \rangle_{,rr}$, $\langle p \rangle_{,j}$, $\langle f_i^2 \rangle$ одного порядка, то появляется противоречие, заключающееся в следующей цепочке $\eta^* \langle v_j \rangle_{,rr} \sim \langle f_i^2 \rangle \sim \langle v_j^1 \rangle / P_3$. Действительно, пропорциональность $P_3 \propto \alpha^{-2} (\eta^*)^{-1}$ ведет к тому, что членом $\eta^* \langle v_j \rangle_{,rr}$ следует пренебречь. Уравнение

$$\langle p \rangle_{,i} - c_2 \langle f_i^2 \rangle = 0 \quad (4.17)$$

представляет собой стационарное деформирование каркаса при наличии источника деформации в виде градиента осредненного давления, обусловленного напором жидкой фазы. Если $\langle p \rangle_{,i} = 0$, то $\langle f_i^2 \rangle = 0$.

Замыкая уравнения (4.15), (4.17) посредством $\langle f_i^2 \rangle$, получим закон фильтрации Дарси:

$$\langle v_i^1 \rangle = -\frac{k}{\eta_1} p_{,i}, \quad k = \frac{2}{3} \frac{1}{\alpha^2 c_2} \frac{\eta_1}{\eta^*}, \quad \eta^* = \frac{\eta_1}{1 - \frac{5}{2} c_2}. \quad (4.18)$$

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

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

$$k = \frac{2}{3} \frac{\zeta^* + \frac{11}{6} \eta^*}{\alpha^2 c_2 \left(\zeta^* + \frac{4}{3} \eta^* \right)} \frac{\eta_1}{\eta^*}, \quad \zeta^* = \frac{\frac{4}{3} \eta^* c_2 + \zeta_1}{c_1}, \quad (4.19)$$

Коэффициент проницаемости получился зависимым от соотношения вязкостей ζ_1/η_1 . При концентрации твердой фазы $c_2 > 0.5$ фильтрация для данной модели становится невозможной, т.к. эффективные свойства системы становятся пропорциональными вязкости твердой фазы.

Таким образом, проанализированы осредненные уравнения линейной теории вязкоупругости с входящими эффективными коэффициентами, полученные методом условных моментов. Проведенное исследование эффективных коэффициентов и их производных демонстрирует наличие несущей фазы и структурного фазового перехода. На основе анализа осредненных уравнений МУМ, с учетом анализа эффективных коэффициентов (и остальных коэффициентов, определенных МУМ), предложено нахождение структурного вида коэффициента пропорциональности в законе Дарси (для высокопористых сред), отражающего микроструктуру среды. Исходя из анализа эффективных коэффициентов выделены условия на существование каркаса и связности пор.

Сравнение с экспериментальными данными.

Проведем сравнение с экспериментом из статьи [61], где исследуется гетерогенная двухфазная среда, представляющая собой суспензию, состоящую из стекла и полиизобутилена. Стекло – включение, полиизобутилен – матричный жидкий элемент. Суспензия представляет собой монодисперсную среду. Вязкие и упругие параметры стекла намного превышают соответствующие параметры полиизобутилена $K_2, \mu_2 \gg K_1, \mu_1, \zeta_2, \eta_2 \gg \zeta_1, \eta_1$, причем $K_1 \gg \mu_1$. Согласно [61], эксперимент ставился на определение эффективного модуля сдвиговой вязкости η^* , нормированного на вязкость полиизобутилена в зависимости от объемной концентрации включений c_2 . На рис. 4.6 символами приведены экспериментальные данные [61], линия *1* отображает теоретический расчет.

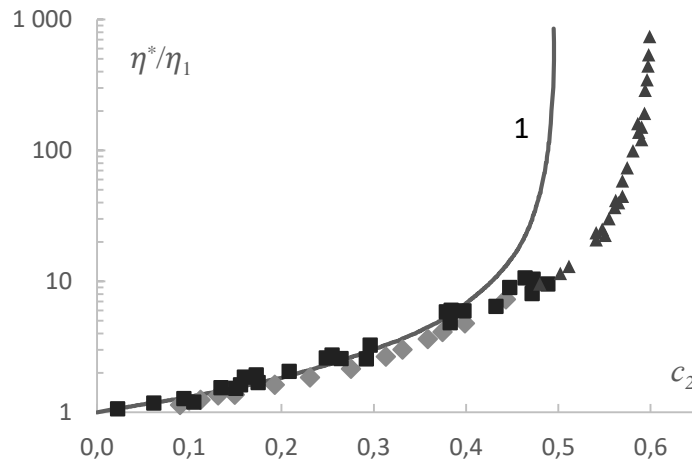


Рис. 4.6. Зависимость эффективного модуля сдвиговой вязкости η^* , нормированного на коэффициент вязкости полиизобутилена в зависимости от объемной концентрации стекла c_2 : 1 — расчет по формулам (4.11), символы — данные экспериментов.

График построен по формулам (4.11), которые следуют из формул (4.9) в пределе больших частот (теоретический расчет по формулам (4.11) на всем интервале c_2 представлен на рис. 4.6.). В эксперименте существенный рост η^* наблюдается на интервале $c_2 \in (0,5; 0,6)$. Хорошее согласование с экспериментом имеется до концентрации включений $c_2 \cong 0,4$. В модели вязкоупругости структурный фазовый переход происходит при концентрации $c_2 = 0,4$, в модели вязкости при концентрации $c_2 = 0,5$, в эксперименте при $c_2 \cong 0,6$.

В главе 3 обсуждалась случайная плотная упаковка сфер [58–60], являющаяся состоянием гранулированной среды. Получены теоретические указания на то, что найденные эффективные коэффициенты претендуют на описание фазовых переходов первого и второго рода. Однако, обоснование критического значения концентрации [32]: $c_{2crit} \approx 0.6$ не дано. Соответствующее обоснование должно базироваться на детальном анализе конфигурации контактов твердых шаров между собой.

В работе [74], с. 216 приведены данные по исследованию модуля Юнга композита эпоксидная смола — частицы кремнезема со средним диаметром частиц около 70 мкм. На рис. 4.7. представлена зависимость эффективного модуля Юнга,

нормированного на модуль Юнга эпоксидной смолы от концентрации наполнителя. Модули Юнга и коэффициент Пуассона матрицы и наполнителя соответственно $E_1 = 3,16 \cdot 10^8$ Па, $\sigma_1 = 0,35$; $E_2 = 7,3 \cdot 10^9$ Па, $\sigma_2 = 0,2$. Символы характеризуют экспериментальные данные [74], кривые 1 и 2 рассчитаны (с учетом нормировки) по формулам теории смесей $E^* = E_1 c_1 + E_2 c_2$ и $E^* = E_1 E_2 / (c_1 E_2 + c_2 E_1)$ соответственно, линия 3 — расчет по формулам (4.9) в пределе нулевых частот.

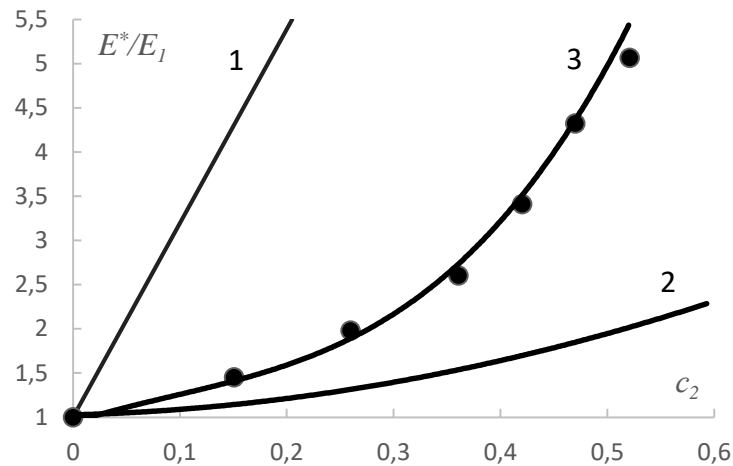


Рис. 4.7. Зависимость эффективного модуля Юнга, нормированного на модуль Юнга эпоксидной смолы от концентрации наполнителя: символы — экспериментальные данные [74], 1, 2 — расчет согласно формулам теории смесей, 3 — расчет по формулам (4.9) в пределе нулевых частот.

Для гетерогенной среды, образованной микровключениями с несильно отличающимися упругими параметрами, получается хорошее совпадение теории и эксперимента. В работе [75] исследуется нанокомпозит с включением SiC в матрицу Mg_6Zn . При концентрации включения $c_2 = 0,14$ результирующий модуль Юнга возрос приблизительно в два раза. Согласно формулам (4.9) в пределе нулевых частот $E^*/E_1 \cong 1,4$. Ошибка связана с не учетом поверхности раздела двух фаз. Учет поверхности раздела для наногетерогенных структур принципиален.

Далее проведем сравнение с экспериментом из статьи [76], где исследуется гетерогенный двухфазный материал, состоящий из резины и эпоксидной смолы. Эпоксидная смола — микровключение, резина формирует матрицу. Упругие модули резины $\mu_1 = 0,1$ МПа, $K_1 = 5$ МПа достаточно сильно отличаются и много меньше соответствующих модулей смолы K_2, μ_2 .

Эксперимент и расчет ставился на определение эффективного модуля Юнга E^* , нормированного на модуль Юнга резины E_1 в зависимости от объемной концентрации включений c_2 . Теоретический расчет по формулам (4.9) в пределе нулевых частот, экспериментальное поведение и расчет авторами [76] представлены на рис. 4.8.

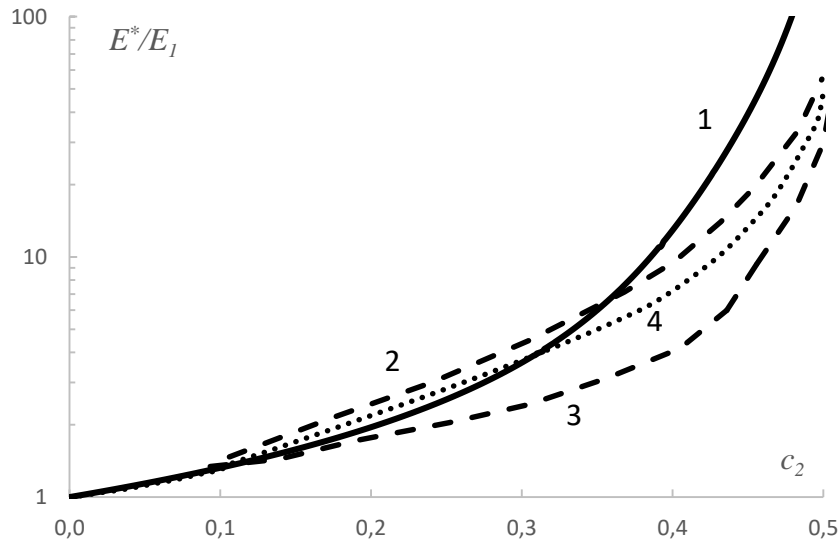


Рис. 4.8. Зависимость отношения эффективного модуля Юнга, нормированного на модуль Юнга резины от концентрации эпоксидной смолы: 1 — расчет по формулам (4.9) в пределе нулевых частот, 2, 3 — линии, ограничивающие экспериментальные данные; 4 — результат, полученный клеточным методом авторами статьи [76].

Во-первых, следует отметить, что предельная концентрация в эксперименте не превышает отметки 0,5. Согласно изложенной теории в случае $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$ концентрация 0,5 является пределом стохастического распределения — точкой структурного фазового перехода в механических смесях. В работе [76] в связи со спецификой расчета, периодическая система состоит из цилиндрических клеток со сферическим включением, предел установлен также точкой $c_2 = 0,5$. Во-вторых, обратим внимание на начальное поведение кривой. Согласно [76], начальный угол наклона составляет 2,5. В теории получается такой же результат (4.12) ($\frac{K_1}{\mu_1} = 50$, $K_1, \mu_1 \ll K_2, \mu_2$).

На рис. 4.9 показана та же зависимость, только на всем интервале c_2 . Для данной системы выполняются условия $\mu_1, K_1 \ll K_2, \mu_2$, и (в меньшей степени) $\mu_1 \ll$

K_1, K_2, μ_2 , в связи с чем интервал $c_2 \in (0,4; 0,5)$ проявляет свойства переходной области.

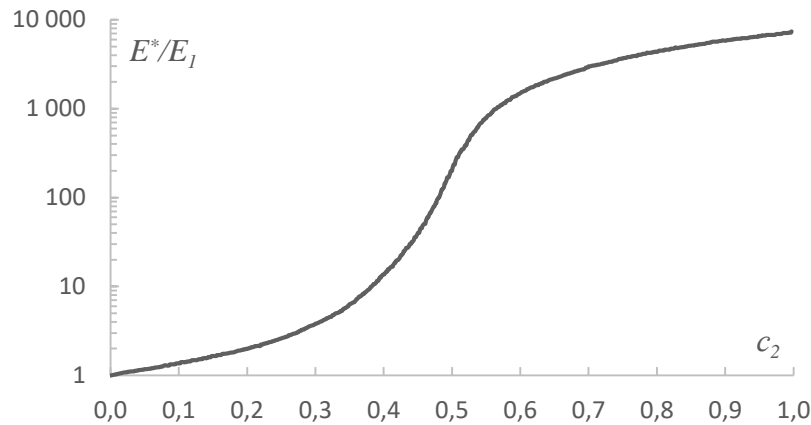


Рис. 4.9. Зависимость отношения эффективного модуля Юнга, нормированного на модуль Юнга резины от концентрации эпоксидной смолы.

Таким образом, хорошее согласование с экспериментом достигается до больших концентраций дисперсной фазы. Предел заполнения дисперсной фазой матричную в теории и эксперименте совпадает.

В источнике [74], стр. 88 приводится эксперимент по определению зависимости коэффициента проницаемости от концентрации пор. Исследуемая гетерогенная среда представляет собой медный полый каркас, составленный из волокон одного диаметра. Рассматриваются три случая относительно диаметра волокон: $d = 20, 40, 70$ мкм.

Проводить сравнение с экспериментом будем посредством формул (4.19) и (4.11), полученных для однородной и изотропной стохастической структуры пор, применительно к вязким свойствам. Масштаб неоднородности (корреляции структуры) принимается равным среднему размеру хорды для окружности радиуса $d/2$, т.е. $\alpha^{-1} = \pi d/4$. На рис. 4.10 представлено сравнение с экспериментальными данными применительно к зависимости коэффициента проницаемости от пористости $k = k(c_1)$.

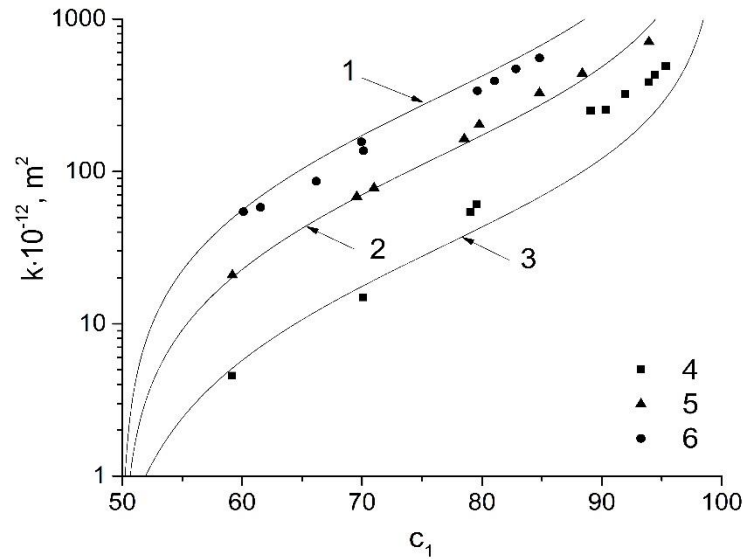


Рис. 4.10. Проницаемость k медных волокнистых материалов для жидкости в зависимости от концентрации пористости c_1 . Расчет: $d = 70$ (1), 40 (2), 20 (3) мкм; эксперимент: $d = 70$ (4), 40 (5), 20 (6) мкм [74].

Приведенное сопоставление теории с экспериментом показывает неплохое согласование, что оправдывает используемую однородную и изотропную стохастичность структуры. Полученные формулы упрощенно описывают масштаб неоднородности, который должен учитывать характерные масштабы как поровой фазы, так и твердой. При $c_1 \sim 0.9$ отклонение расчета от эксперимента для случая $d = 20$ мкм, вероятно, связано именно с некорректным представлением $\alpha^{-1} = \pi d/4$.

Выводы по главе 4.

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

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

Проведенное сравнение полученных формул с экспериментальными данными показывает удовлетворительное согласование.

Заключение

На основании проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

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

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

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

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

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

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

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

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

Список литературы

1. Большая советская энциклопедия: в 30 т. Гл. ред. А. М. Прохоров. — 3-е изд. — М. : Сов. энцикл., 1969 - 1978.
2. Mishin A. V. Generalized derivative and its use for analysis of the microstructure of a heterogeneous medium // *Sib. zhurnal Ind. Mat.* 2021. Vol. 24, № 4.
3. Mishin A. V. Accounting for the generalized derivative and the collective influence of phases on the homogenization process // *Sib. zhurnal Ind. Mat.* 2022, V. 25, № 4. P. 86–98.
4. Mishin A. V. Carrying out homogenization in viscoelastic heterogeneous media, taking into account the collective influence of boundaries // *Sib. zhurnal Ind. Mat.* 2023. V. 26, № 1, P. 1–7.
5. Мишин А.В., Фомин В. М. Анализ поведения гетерогенных сред с существенно различающимися физическими свойствами с учетом эффективной размерности пространства и формализма обобщенной производной // *ПММ.* 2022. Т. 86, № 4, С. 551-570.
6. Mishin A.V., Fomin V.M. Investigation of the elastic properties of the material obtained by the method of cold gas-dynamic spraying with laser treatment // *Appl. Mech. Tech. Phys.* 2021. Т. 62, № 6, С. 89-96.
7. Fomin V.M. et al. Creation of a Heterogeneous Material Based on the Titanium

- Alloy and Titanium Boride by the Method of Controlled Laser Processing // Прикладная механика и техническая физика. 2021. Vol. 62, № 5.
8. Mishin A. V. Effective coefficients viscosity of the liquid with solid particles // AIP Conference Proceedings. 2018. Vol. 2027.
 9. Mishin A. V. Justification of the asymptotic behavior of the filtration theory regimes by the method of conditional moment // Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1404, № 1.
 10. Мишин А.В. Различные методы осреднения гетерогенных сред. НГУ, 2022.
 11. Shermergor T.D. Theory of elasticity of micro-inhomogeneous media. 1977. 400 p.
 12. Khoroshun L.P. Mathematical models and methods of the mechanics of stochastic composites // Int. Appl. Mech. 2000. Vol. 36, № 10.
 13. Christensen R.M. Theory of Viscoelasticity. 1982. 378 p.
 14. Maxwell J.C. A Treatise on Electricity and Magnetism // Oxford: Oxford Univ. Press. 1904. 435 p.
 15. Rayleigh L. On the Influence of Obstacles Arranged in Rectangular Order upon the Properties of a Medium. 1892. 481 p.
 16. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. Издание 6-е, исправленное. изд. М.: Физматлит, 2015. 728 с.
 17. Кривоглаз М.А., Черевко А.С. Об упругих модулях твердой смеси // ФММ 8, вып. 2, 161. 1959.
 18. Волков-Богородский Д.Б., Лурье С.А. Интегральные формулы Эшелби в градиентной теории упругости // Изв. РАН. МТТ. 2010. № 4. С. 182-192.
 19. Hill R. A self-consistent mechanics of composite materials // J. Mech. Phys. Solids. 1965. Vol. 13, № 4.
 20. Bruggeman D.A.G. Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von

- heterogenen Substanzen. II. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten von Vielkristallen der nichtregularen Systeme // *Ann. Phys.* 1936. Vol. 417, № 12. P. 645–672.
21. Kroner E. Berechnung der elastischen Konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls // *Z. Phys.* 1958. Vol. 151, № 4. P. 504 – 518.
 22. Снарский А.А., Женировский М.И. Перколяционные эффекты в термоэлектрических неупорядоченных двух-фазных средах // *Термоэлектричество*. 2007. № 3. С. 65–81.
 23. Снарский А.А., Безсуднов И.В., Севрюков В.А. Процессы переноса в макроскопически неупорядоченных средах. М.: УРСС, 2007. 303 стр.
 24. Kroner E. Further applications of the sistematic theory of materials with disordered constitution // *Mech. Compos. Mater. Adv. Proc. IUTAM Symp.*, Blacksburg, 16-19 Aug., 1982-New York.-1983. P. 31–46.
 25. Eshelby J. Continuum theory of dislocations. 1963. 248 p.
 26. Бахвалов Н.С. П.Г.П. Осреднение процессов в периодических средах. 1984. 352 стр.
 27. Балагуров Б.Я., Кашин В.А. Исследование аналитических свойств эффективной диэлектрической про-ницаемости двумерной модели Релея // *ЖЭТФ*. 2005. Т. 127, № 4. С. 827–837.
 28. Нигматуллин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. 1978.
 29. Рахматулин Х.А. Основы гидродинамики взаимопроникающих движений сжимаемых сред // *Прикл. математика и механика*. 1956. Т. 20, № 2. С. 184–195.
 30. Верещагин А.С. Математическое моделирование процессов обогащения газов с использованием ценосфер: на примере смеси газов аргона и гелия. 2008. 109 стр.

31. Bernal J.D. A geometrical approach to the structure Of liquids // Nature. 1959. Vol. 183, № 4655.
32. Radin C. Random close packing of granular matter // J. Stat. Phys. 2008. Vol. 131, № 4.
33. Naimark O.B., Bayandin Y. V., Zocher M.A. Collective properties of defects, multiscale plasticity, and shock induced phenomena in solids // Phys. Mesomech. 2017. Vol. 20, № 1.
34. Куропатенко В.Ф. Модель многокомпонентной среды // Докл. РАН. 2005. Т. 403, № 6. С. 761–763.
35. Пугачев В.С. Теория случайных функций. М.: Физматгиз, 1962. 883 стр.
36. Лифшиц И.М., Розенцвейг Л.Н. К теории упругих свойств поликристаллов // ЖЭТФ. 1946. Т. 16, № 11. С. 967–980.
37. Лифшиц И.М., Розенцвейг Л.Н. Поправка к статье «К теории упругих свойств поликристаллов» // ЖЭТФ. Т. 21, № 10. С. 1184–1951.
38. Voigt W. Lehrbuh der Kristallphysik. Berlin: Teubner, 1928. 962 p.
39. Reuss A. Berechnung der Fliessgreze von Mishchkristallen auf Grund der Plastizitats-bedingung fur Einkristalle // Z. Angew. Math. Mech. 1929. Vol. 9, № 1. P. 49–58.
40. Фокин А.Г., Шермергор Т.Д. Вычисление эффективных упругих модулей композиционных материалов с учетом многочастичных взаимодействий // ПМТФ. 1969. Т. 1, № 51.
41. Khoroshun L. P. A new mathematical model of the nonuniform deformation of composites // Mekh. Kompos. Mater. 1995. Vol. 31, № 3. P. 310–318.
42. Hashin Z., Shtrikman S. On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity // J. Mech. Phys. Solids. 1962. Vol. 10, № 4.
43. Hashin Z. S.S. A variational approach to the theory of the elastic behavior of

- multiphase materials // *J. Mech. Phys. Solids*. 1963. Vol. 11, № 2. P. 127 – 140.
44. Hashin Z., Shtrikman S. Conductivity of polycrystals // *Phys. Rev.* 1963. Vol. 130, № 1.
 45. Khoroshun L.P. Random functions theory in problems on the macroscopic characteristics of microinhomogeneous media // *Appl. Mech.* 1978. Vol. 14. P. 3 – 17.
 46. Khoroshun L.P. Conditional-moment method in problems of the mechanics of composite materials // *Sov. Appl. Mech.* 1987. Vol. 23, № 10.
 47. Bolotin, V. V. and Moskalenko V.N. Determination of the elastic constants of a micro inhomogeneous medium // *Zh. Prikl. Mekh. Tekhn. Fiz.* 1968. Vol. 34, № 1. P. 66–72.
 48. Mori T T.K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions // *Acta Met.* 1978. Vol. 21. P. 571–574.
 49. Ponte Castaneda P W.J. The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media // *J Mech Phys Solids*. 1995. Vol. 43. P. 1919–1951.
 50. Fedotov A. The hybrid homogenization model of elastic anisotropic porous materials // *J Mater Sci*. 2018. Vol. 53. P. 5092–5102.
 51. Gao J. et al. Networks formed from interdependent networks // *Nat. Phys.* 2012. Vol. 8, № 1.
 52. Huang X. et al. Robustness of interdependent networks under targeted attack // *Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.* 2011. Vol. 83, № 6.
 53. Gao J. et al. Robustness of a network of networks // *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 107, № 19.
 54. Schwartz L. *Mathematics for the Physical Sciences*. 1966. 357 p.
 55. Khoroshun L.P. Elastic properties of materials reinforced with unidirectional short

- fibers // *Appl. Mech.* 1972. Vol. 8, № 10. P. 1 – 7.
56. Alder B.J., Wright T.E.W.A. Studies in molecular dynamics. II. Behavior of a small number of elastic spheres // *J. Chem. Phys.* 1960. Vol. 33, № 5.
57. Rutgers M., Dunsmuir J. Measurement of the hard-sphere equation of state using screened charged polystyrene colloids // *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* 1996. Vol. 53, № 9.
58. Scott G.. Packing of spheres // *Nature.* 1960. Vol. 188. P. 908–909.
59. Scott G.D., Charlesworth A.M., Mak M.K. On the random packing of spheres // *J. Chem. Phys.* 1964. Vol. 40. P. 611–612.
60. Scott G.D., Kilgour D.M. The density of random dense packing of spheres // *Br. J. Appl. Phys. (J. Phys. D).* 1969. Vol. 2. P. 863–866.
61. Chong J.S., Christiansen E.B., Baer A.D. Rheology of concentrated suspensions // *J. Appl. Polym. Sci.* 1971. Vol. 15, № 8.
62. Алхимов А.П. et al. Холодное газодинамическое напыление. Теория и практика. М.: Физматлит, 2010. 536 с.
63. Бузник В.М., Фомин В.М., Алхимов А.П. Металлополимерные нанокompозиты (получение, свойства, применение). Новосибирск: СО РАН, 2005, 259 с.
64. Maev R.G., Leshchynsky V. Introduction to Low Pressure Gas Dynamic Spray: Physics & Technology // *Introduction to Low Pressure Gas Dynamic Spray: Physics & Technology.* 2008.
65. Фомин В.М. et al. Создание металлокерамических структур на основе Ti, Ni, WC и B₄C с применением технологии лазерной наплавки и холодного газодинамического напыления // *Физическая мезомеханика.* 2019. Т. 22, № 4. С. 5–15.
66. Фомин В.М. et al. Создание функционально-градиентного материала методом

- аддитивного лазерного сплавления // Прикладная механика и техническая физика. 2020. Т. 5.
67. Косарев В.Ф., Полухин А.А., Ряшин Н.С. Влияние состава порошковой смеси на коэффициент напыления и свойства Ni + B₄C покрытий ХГН // Механика твердого тела. 2017. № 4. С. 127–134.
 68. Фомин В.М., Голышев А.А., Косарев В.Ф. Создание гетерогенных материалов на основе порошков B₄C и Ni с помощью холодного газодинамического напыления (ХГН) с последующим послойным лазерным воздействием // Прикладная механика и техническая физика. 2017. Т. 58, № 5. С. 218–227.
 69. Яковлев Е.Б., Вейко В.П. Особенности плавления металлов при лазерном нагревании // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2005. Т. 5, № 5.
 70. Fereiduni E., Ghasemi A., Elbestawi M. Selective laser melting of hybrid ex-situ/in-situ reinforced titanium matrix composites: Laser/powder interaction, reinforcement formation mechanism, and non-equilibrium microstructural evolutions // Mater. Des. 2019. Т. 184.
 71. Самсонов Г.В., Марковский Л.Я., Жигач А.Ф. Бор, его соединения и сплавы. Киев, Изд—во АН УССР, 1960. 590 с.
 72. Morsi K., Patel V. V. Processing and properties of titanium-titanium boride (TiBw) matrix composites - A review // Journal of Materials Science. 2007. Т. 42, № 6.
 73. Ходаков Г.С. Реология суспензий. Теория фазового течения и ее экспериментальное обоснование // Российский химический журнал. 2003. № 2. С. 33–44.
 74. Дульнев Г.Н., Новиков В.В. Процессы переноса в неоднородных средах. Л.: Энергоатомиздат, 1991. 248 с.
 75. Chen L.Y. et al. Processing and properties of magnesium containing a dense uniform dispersion of nanoparticles // Nature. 2015. Vol. 528, № 7583.

76. Moshev V. V., Kozhevnikova L.L. Predictive potentialities of a cylindrical structural cell for particulate elastomeric composites // Int. J. Solids Struct. 2000. Vol. 37, № 7.