

УДК 539.3

К ЗАДАЧЕ СИМВОЛЬНОГО ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЕЙ ТЕЛ КОССЕРА¹

Васильев А.А.

Кафедра математического моделирования

Поступила в редакцию 10.10.2015, после переработки 20.10.2015.

Представлены дискретные и однополевые микрополярные модели, в том числе хирального типа. Даны примеры тел с микроструктурой, для описания которых необходима разработка таких моделей. Формулируется реализованная в пакете символьной математики Maple методика аналитического компьютерного построения моделей прямоугольных решеток с частицами эллиптической формы. Обсуждается методика построения многополевых моделей для уточнения описания плоских волн и деформаций в различных направлениях.

Ключевые слова: решетка Коссера, микрополярная модель, многополевая модель, пакет символьной математики.

Вестник ТвГУ. Серия: Прикладная математика. 2015. № 4. С. 17–25.

Введение

Обычно в теории решеток, в структурных и феноменологических моделях механики сплошных сред деформации решеток и сред описывают, используя поля, описывающие смещение частиц.

Однако для описания деформаций тел с частицами конечного размера, тел с балочной микроструктурой часто необходим учет вращательных степеней свободы частиц, поворотов узлов. Примерами тел, при моделировании которых может быть необходим учет микровращения, являются гранулированные среды, сложные молекулярные решетки, наноматериалы, биоматериалы, каменные кладки, балочные решетчатые конструкции, тканые материалы, жидкие кристаллы и др. Идея моделирования молекулярной цепочки как цепочки жестких недеформируемых частиц с вращательными степенями свободы является базовой в упруго-шарнирной молекулярной модели. В этой модели рассматриваются поперечные смещения и повороты молекул. Относительно мягкие соединения на стыке, оказывающие сопротивление взаимным поворотам молекул, моделируются упругими шарнирами. Сопротивление окружающей среды поперечным смещениям моделируется нелинейно-деформируемыми пружинками, расположенными в местах соединения молекул. Модель использовалась для моделирования и анализа как длинноволновых, так и коротковолновых нелинейных явлений в кристаллах [1-3].

¹Работа выполнялась в рамках базовой части государственного задания № 2014/220 Минобрнауки РФ в сфере научной деятельности (НИР № 1153).

Существование жестких кластеров, которые могут двигаться без деформаций при низкочастотных колебаниях, отмечается и является ключевой идеей модели жестких элементов мод (the rigid-unit-mode (RUM)), разрабатываемой в работах М. Дове и его коллег для моделирования и анализа мод колебаний кристаллов [4]. Соответственно при континуальном описании и анализе таких колебаний в модели также может быть полезно введение вращательных степеней свободы.

Разработка вопросов теории, структурных и феноменологических моделей для моделирования тел с учетом микровращений представляет интерес и является одним из направлений обобщенной механики [5-15]. Поскольку модели обобщенной механики, как правило, сложнее классических, особую актуальность приобретает разработка компьютерных средств моделирования и анализа.

1. Дискретная модель решетки Коссера

Было отмечено, что при моделировании ряда тел необходим учет не только смещений u_n, v_n , но и поворотов ϕ_n составляющих элементов. Будем рассматривать в качестве структурной модели прямоугольную решетку квадратных (круглых) частиц (Рис. 1).

В отличие от кинетической энергии точечных частиц в выражении кинетической энергии решетки Коссера учитывается инерция вращений частиц

$$E_{kin}^k = \frac{1}{2}M\dot{u}_k^2 + \frac{1}{2}M\dot{v}_k^2 + \frac{1}{2}J\dot{\phi}_k^2.$$

Для построения потенциальной энергии сначала строятся потенциалы сложных соединений. Упругие соединения узлов описываем потенциалом линеаризующим потенциал вида $E_{(1,i)(2,j)} = C(L_1 - L_0)^2/2$, где $C = c/L_0^2$, c – жесткость соединения, L_0 и L_1 – его длина до и после деформации. В случае малых деформаций, линеаризуя $\Delta L = L_1 - L_0$ относительно смещений и вращений, получаем выражение потенциальной энергии соединения i -го узла частицы, обозначенной номером 1, с j -м узлом частицы, обозначенной номером 2 (Рис. 1а)

$$E = \frac{1}{2}C[(u_2 - u_1) \cos \gamma + (v_2 - v_1) \sin \gamma + r_i \phi_1 \sin(\gamma_i - \gamma) - r_j \phi_2 \sin(\gamma_j - \gamma)]^2, \quad (1)$$

где r_i, r_j – длины, а γ_i, γ_j – углы наклона радиус-векторов от центров масс частиц до соединяемых узлов, γ – угол наклона соединения до деформации.

Суммированием потенциалов (1) элементарных соединений может быть построен потенциал соединения частиц

$$E_{k,m} = \left[\frac{1}{2}C_0 + C_1 + \left(\frac{r}{d}\right)^2 \bar{C}_2 \right] \Delta u^2 + 4 \left(\frac{a}{d}\right)^2 \bar{C}_2 \gamma^2 + a^2 C_1 \Delta \phi^2 - 4 \frac{ar}{d^2} \Delta C_2 \Delta u \gamma, \quad (2)$$

где $r = h - 2a$ – расстояние между частицами, $d = \sqrt{h^2 + (2a)^2}$ – длина диагонального элемента и введены обозначения $C_0 = c_0/h^2$, $C_1 = c_1/r^2$, $\bar{C}_2 = (c_3 + c_2)/2d^2$, $\Delta C_2 = (c_3 - c_2)/2d^2$, $\Delta u = u_m - u_k$, $\Delta v = v_m - v_k$, $\Delta \phi = \phi_m - \phi_k$, $\gamma = \Delta v - h(\phi_m + \phi_k)/2$.

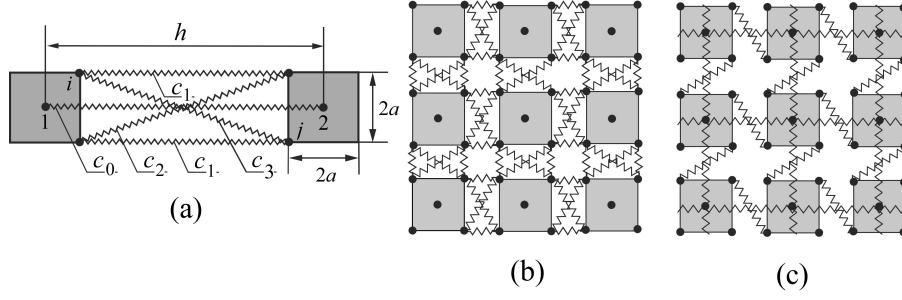


Рис. 1: (a) Сложное соединение частиц конечного размера. Ячейка квадратной решетки с симметричными (b) и несимметричными (c) соединениями

Выражение потенциальной энергии (2) является обобщением выражения потенциальной энергии [7]

$$2E_{pot}^{k,m} = K_n^{n,m} (u_m - u_k)^2 + K_s^{k,m} \left[v_m - v_k - r_{k,m} \frac{\phi_m + \phi_k}{2} \right]^2 + G_r^{k,m} (\phi_m - \phi_k)^2, \quad (3)$$

часто используемой при построении моделей материалов с балочной микроструктурой, а также решеток частиц конечного размера с аналогичным сложным, но симметричным ($c_2 = c_3$) соединением [10-12], для которого $\Delta \bar{C}_2 = \Delta C_2 / \bar{C}_2 = 0$. Потенциал (3) соединения частиц в виде трех слагаемых аналогичен потенциалу микрополярной теории упругости. Потенциал (2) включает дополнительную составляющую, которая дает возможность учесть хиральность. Учет этой составляющей вносит изменения в уравнения микрополярной теории.

2. Однополевые модели решетки Коссера

На основе Лагранжиана с использованием представленных выше кинетической и потенциальной энергий элементарной ячейки (Рис. 1b, 1c) строятся уравнения движения центральной частицы. Разложения компонент перемещений и вращений в дискретных уравнениях в ряд Тейлора до второго порядка включительно приводят к континуальным уравнениям.

Потенциал (3), который моделирует симметричные сложные соединения (Рис. 1b), соединения балочного типа, приводит к длинноволновым континуальным уравнениям квадратной решетки

$$\begin{aligned} \rho u_{tt} &= (K_n + K_n^d) u_{xx} + (K_s + K_n^d) u_{yy} + 2K_n^d v_{xy} + K_s \phi_y, \\ \rho v_{tt} &= (K_s + K_n^d) v_{xx} + (K_n + K_n^d) v_{yy} + 2K_n^d u_{xy} - K_s \phi_x, \\ j \phi_{tt} &= \left(G_r - \frac{1}{4} K_s h^2 \right) (\phi_{xx} + \phi_{yy}) + K_s (v_x - u_y - 2\phi), \end{aligned} \quad (4)$$

где ρ – плотность материала, j – плотность момента инерции. Уравнения (4) аналогичны уравнениям микрополярной теории упругости. Сравнение позволяет выявить соотношение между параметрами микроструктуры и макропараметрами аппроксимирующей микрополярной среды.

Для квадратной решетки квадратных (круглых) частиц с несимметричными соединениями (Рис. 1с) уравнения, построенные с использованием потенциала (2), имеют вид

$$\begin{aligned}\rho u_{tt} &= 8\bar{C}_2 a^2 u_{xx} + [C_0 h^2 + 2r^2 (C_1 + \bar{C}_2)] u_{yy} + 8a^2 \bar{C}_2 \phi_x + \\ &\quad + 4ar \Delta C_2 (v_{xx} - v_{yy} + \phi_y) + f_x, \\ \rho v_{tt} &= 8\bar{C}_2 a^2 v_{yy} + [C_0 h^2 + 2r^2 (C_1 + \bar{C}_2)] v_{xx} - 8a^2 \bar{C}_2 \phi_y + \\ &\quad + 4ar \Delta C_2 (u_{xx} - u_{yy} + \phi_x) + f_y, \\ j\phi_{tt} &= 2a^2 (r^2 C_1 - h^2 \bar{C}_2) \Delta \phi - 8a^2 \bar{C}_2 (u_x - v_y + 2\phi) - 4ar \Delta C_2 (u_y + v_x) + f_\phi,\end{aligned}\tag{5}$$

где $\Delta w = w_{xx} + w_{yy}$, введены обозначения $\rho = M/h^2$, $j = J/h^2$ для плотностей и обозначения $f_x = F_x^{(m,k)}/h^2$, $f_y = F_y^{(m,k)}/h^2$, $f_\phi = F_\phi^{(m,k)}/h^2$ для компонент вектора распределенных сил и моментов. В случае $\Delta C_2 = 0$, то есть для симметричных соединений с $c_2 = c_3$, уравнения (5) по структуре аналогичны уравнениям микрополярной теории упругости (4). Уравнения микрополярной теории упругости хиральной среды (5) дополнительно содержат составляющие, обусловленные хиральностью, $\Delta C_2 \neq 0$. Некоторые отличия и особенности деформирования решеток рассмотрены, например, в [15].

3. Символьное построение моделей прямоугольной решетки Коссера с частицами эллиптической формы

Аналитические построения моделей реализуемы для простейших систем. В более сложных случаях необходима разработка алгоритмов и программ, чтобы строить уравнения моделей, проводить аналитические построения и анализ с использованием компьютеров, используя пакеты символьных преобразований, например, пакет Maple.

Для построения моделей полезно использовать идеи метода конечных элементов, учитывая возможности проведения символьных преобразований, которые в классических алгоритмах МКЭ обычно не используются.

На первом этапе построения модели дается формализация информации о системе. Задаются координаты центров и узлов частиц. Формируется матрица, описывающая соединения узлов частиц. С использованием этой информации строится потенциальная энергия суммированием потенциалов соединений (1) частицы, для которой строятся уравнения, с соседними частицами. Используя операцию символьного дифференцирования, строятся дискретные уравнения. В уравнениях выделяются конечные разности. Заменой конечных разностей на их дифференциальные аналоги, строятся континуальные уравнения.

Представленный алгоритм реализован в виде программы [16], которая позволяет строить уравнения дискретной и континуальной моделей прямоугольной решетки Коссера с частицами эллиптической (прямоугольной) формы, для наглядности дает визуализацию ячейки решетки с заданными параметрами. Возможен выбор типа соединения - моделируются симметричные и хиральные решетки. Представленные выше уравнения квадратной решетки из квадратных (круглых) частиц являются частным случаем и могут использоваться для тестирования. Отметим, что другим интересным частным случаем систем частиц эллиптической формы

является вырожденный случай, когда толщина частиц равна нулю. Более подробно такой случай планируется обсудить в дальнейшем.

4. Многополевые микрополярные модели

Существенным недостатком однополевых микрополярных моделей является то, что они не описывают коротковолновые деформации решетки. Учет таких деформаций может быть важен в задачах разрушения, анализе фильтра частот.

При построении микрополярной модели, в отличие от модели классической теории упругости, были учтены вращательные степени свободы частиц. Однако микрополярные модели (4), (5) строилась с использованием минимального количества полей, соответствующих степеням свободы, описывающих кинематику частицы, а именно полей перемещений и вращений. Такой подход представляет собой некоторую гипотезу, отбрасывание которой приводит к моделям многополевой теории. В основе построения многополевых моделей лежит рассмотрение в качестве базовых не элементарных ячеек, а макроячеек, составленных из нескольких элементарных ячеек, и использование для описаний деформаций системы соответственно большего, чем в классических моделях, числа полей. Такой подход дает возможность последовательно строить уточнения моделей, обеспечивает, в частности, описание коротковолновых полей для заданных направлений.

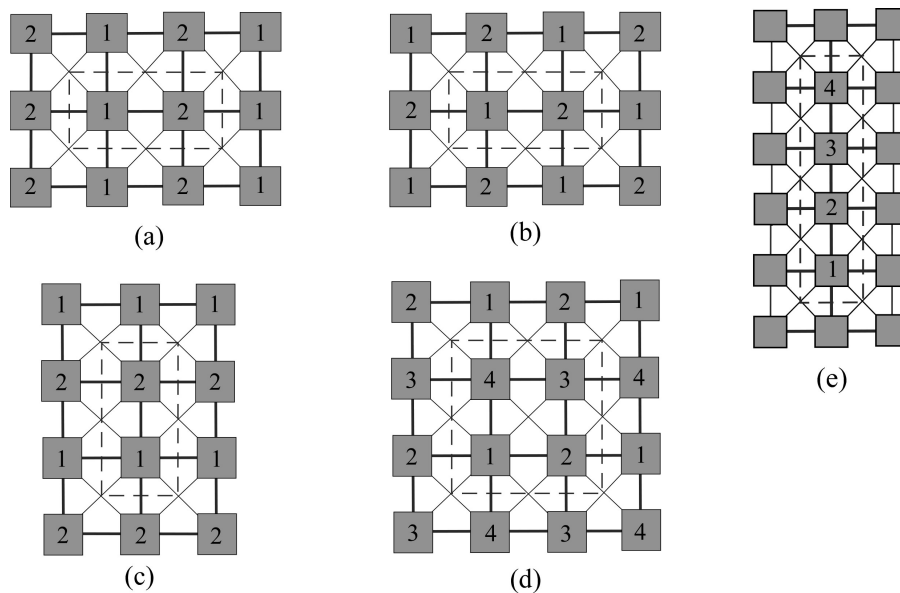


Рис. 2: Варианты макроячеек для построения двухполевых (a-c) и четырехполевых (d, e) моделей

Комбинация подходов микрополярной и многополевой механики обеспечивает учет в моделях комбинации эффектов, описываемых каждой из теорий, то есть как вращательных степеней свободы, так коротковолновых деформаций.

Используя макроячейки (Рис. 2а-е), многополевой подход позволяет строить системы моделей, описывающих динамические свойства решетки с нарастающей точностью. Однополевые модели (4), (5) строятся на основе элементарной ячейки (Рис. 1b, 1c). Они верны только для длинных волн с волновыми числами в окрестности значений $(0, 0)$. Двухполевые модели, построенные на основе макроячеек, составленных из двух частиц (Рис. 2а-с), с использованием двух векторных полей содержат как составную часть уравнения однополевой модели, обладая ее точностью при моделировании длинных волн $(0, 0)$, и уточняют ее при моделировании коротких волн с волновыми числами в окрестности точек $(\pi, 0)$, (π, π) , $(0, \pi)$, соответственно. Четырехполевая модель, соответствующая макроячейке Рис. 2d, объединяет однополевую микрополярную модель и дополнительные уравнения двухполевых моделей (Рис. 2а-с) в одну и верна не только для длинных $(0, 0)$, но и коротких волн $(\pi, 0)$, (π, π) , $(0, \pi)$. Четырехполевая модель для макроячейки, приведенной на Рис. 2е, уточняет двухполевую модель Рис. 2с для средних волн с волновыми числами в окрестности точки $(0, \pi/2)$, что может представлять интерес при моделировании динамики и статических деформаций тонких пленок, моделировании фильтрации частот в них.

Представленные методы уточнения достаточно алгоритмичны, но получаемые модели, как правило сложны. Развитие компьютерных алгоритмов и средств построения моделей и исследований направленных фильтров [17], нелинейных явлений [1, 3, 18, 19] на их основе представляется актуальным.

Заключение

Континуализация и континуальные модели широко и эффективно используются для моделирования структурных систем. В связи с развитием компьютерной математики и соответствующих пакетов прикладных программ все более актуальной становится разработка идей, методик, алгоритмов и программ для использования компьютеров для аналитических построений. В статье обсуждается методика и алгоритм для разработки программ символьного построения моделей тел Коссера, что представляет интерес особенно в случае сложных систем. Дополнительно отметим, что такие программы представляются интересными не только для построения моделей. Очевидно, что в дальнейшем решение задач на основе таких моделей тем более будут сложны и будут требовать использования компьютеров. Таким образом, программы построения моделей могут быть использованы как базовые при разработке пакета прикладных программ численного и аналитического решения задач, исследования сред Коссера. Такой пакет может включать программы построения моделей гексагональных решеток, многополевых моделей, построения на их основе дисперсионных соотношений, исследования направленных фильтров, моделирования нелинейных явлений.

Список литературы

- [1] Shigenari T., Dmitriev S.V., Abe K., Vasiliev A.A. Domain walls in one-dimensional 3-periodic structure // *Ferroelectrics*. 1997. Vol. 203. Pp. 335–347.

- [2] Dmitriev S.V., Shigenari T., Abe K., Volkova S.M., Vasiliev A.A. Dynamics of autowaves in a one-dimensional crystal model // *Computational Materials Science*. 1999. Vol. 13, no. 4. Pp. 227–231.
- [3] Shigenari T., Dmitriev S.V., Abe K., Vasiliev A.A. Domain wall solutions for EHM model of crystal // *Journal of the Physical Society of Japan*. 1999. Vol. 68, no. 1. Pp. 117–125.
- [4] Dove M.T., Harris M.J., Hannon A.C., Parker J.M., Swainson I.P., Gambhir M. Floppy modes in crystalline and amorphous silicates // *Physical Review Letters*. 1997. Vol. 78. Pp. 1070–1073.
- [5] Cosserat E., Cosserat F. *Théorie des corps déformables*. Herman, Paris, 1909.
- [6] Eringen A.C. Theory of micropolar elasticity // *In Fracture* / Ed. by H. Liebowitz. Academic Press, New York, 1968. Pp. 621–729.
- [7] Suiker A.S.J., Metrikine A.V., de Borst R. Comparison of wave propagation characteristics of the Cosserat continuum model and corresponding discrete lattice models // *International Journal of Solids and Structures*. 2001. Vol. 38. Pp. 1563–1583.
- [8] Бровко Г.Л. Об одной конструкционной модели среды Коссе́ра // *Известия Российской академии наук. Механика твердого тела*. 2002. № 1. С. 75–91.
- [9] Бровко Г.Л. Моделирование неоднородных сред сложной структуры и континуум Коссе́ра // *Вестник Московского университета. Серия 1: Математика. Механика*. 1996. № 5. С. 55–63.
- [10] Милосердова И.В., Павлов И.С., Потапов А.И. Двумерная динамическая модель нанокристаллической среды с гексагональной симметрией // *Механика композиционных материалов и конструкций*. 2006. Т. 12, № 4. С. 555–565.
- [11] Павлов И.С., Потапов А.И. Двумерная модель зернистой среды // *Известия Российской академии наук. Механика твердого тела*. 2007. № 2. С. 98–109.
- [12] Vasiliev A.A., Miroshnichenko A.E., Ruzzene M. Multi-field model for Cosserat media // *Journal of Mechanics of Materials and Structures*. 2008. Vol. 3, no. 7. Pp. 1365–1382.
- [13] Грекова Е.Ф. Об одном классе единой отрицательных акустических метаматериалов // *Доклады академии наук*. 2015. Т. 462, № 3. С. 295–298.
- [14] Grekova E.F., Maugin G.A. Modelling of complex elastic crystals by means of multi-spin micromorphic media // *International Journal of Engineering Science*. 2005. Vol. 43, no. 5-6. Pp. 494–519.
- [15] Васильев А.А., Дмитриев С.В., Павлов И.С. Структурное и континуальное моделирование материалов с учетом конечности размера частиц // *Перспективные материалы*. 2011. № 12. С. 87–91.

- [16] Васильев А.А., Павлов И.С. Символьное построение уравнений дискретной и континуальной моделей прямоугольной решетки Коссера с частицами эллиптической формы. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2015662678.
- [17] Ruzzene M., Scarpa F. Directional and band-gap behavior of periodic auxetic lattices // *Physica Status Solidi (B): Basic Solid State Physics*. 2005. Vol. 242, no. 3. Pp. 665–680.
- [18] Porubov A.V., Berinskii I.E. Nonlinear plane waves in materials having hexagonal internal structure // *International Journal of Non-Linear Mechanics*. 2014. Vol. 67. Pp. 27–33.
- [19] Porubov A.V., Berinskii I.E. Two-dimensional nonlinear shear waves in materials having hexagonal lattice structure // *Mathematics and Mechanics of Solids*. 2016. Vol. 21. Pp. 94–103.

Библиографическая ссылка

Васильев А.А. К задаче символьного построения моделей тел Коссера // *Вестник ТвГУ. Серия: Прикладная математика*. 2015. № 4. С. 17–25.

Сведения об авторах

1. **Васильев Алексей Анатольевич**

доцент кафедры математического моделирования Тверского государственного университета.

Россия, 170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33, ТвГУ, факультет ПММК.

ON THE PROBLEM OF SYMBOLIC CONSTRUCTION OF COSSERAT BODIES MODELS

Vasiliev Alexey Anatolyevich

Associate Professor at Computational Mathematics department,
Tver State University.

Russia, 170100, Tver, 33 Zhelyabova str., TSU.

Received 10.10.2015, revised 20.10.2015.

Discrete and single-field micropolar models, in particular chiral type models, to describe microstructured bodies are presented. Examples of such bodies are given. We formulate a method for constructing discrete and continuum models. This method is realized as a program for the deriving of the models of rectangular lattices with elliptic particles in symbolic mathematics package Maple. The technique of construction of multifield models for accurate description of plane waves and deformations in different directions is discussed.

Keywords: Cosserat lattice, micropolar model, multi-field model, computer algebra system.

Bibliographic citation

Vasiliev A.A. On the problem of symbolic construction of Cosserat bodies models. *Vestnik TverGU. Seriya: Prikladnaya matematika* [Herald of Tver State University. Series: Applied Mathematics], 2015, no. 4, pp. 17–25. (in Russian)