

УДК 539.3

## ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ОДНОЙ МОДЕЛИ УПРУГОГО ТВЕРДОГО ТЕЛА, ОБУСЛОВЛЕННЫХ ДАЛЬНОДЕЙСТВИЕМ НА МОЛЕКУЛЯРНОМ УРОВНЕ

Л. М. Минкевич

Новосибирский государственный технический университет, 630092 Новосибирск

Рассмотрена модель упругого твердого тела в виде системы упругосвязанных недеформируемых элементов. Показана необходимость моделирования дальнего действия. Рассматриваемая математическая модель фактически является физической моделью твердого тела, что значительно расширяет область ее применения.

**Введение.** В [1] описывается математическая модель тонкой пластины в виде системы упругосвязанных недеформируемых элементов. В настоящей работе выясняется физическая основа дальнего действия при взаимодействии элементов модели; утверждается возможность построения модели для любого твердого тела (не только для тонкой пластины); приводится пример использования модели, построенной применительно к задачам линейной упругости, для исследования задач нелинейной упругости.

**1. Некоторые замечания о взаимодействии на микроскопическом уровне.** Механическое взаимодействие между молекулами кристаллов подробно рассмотрено в работе [2]. Отметим некоторые положения, представляющие интерес для данного исследования.

Характер взаимодействия двух атомов в кристаллической решетке иллюстрируется рис. 1, где приведена зависимость потенциальной энергии  $\varphi$  от расстояния  $x$  между атомами ( $a$  — постоянная решетки;  $M$  — точка перегиба). Согласно [2] при расчете макроскопических параметров (частот собственных колебаний, упругих постоянных) необходимо учитывать взаимодействие данного атома не только с его ближайшими “соседями”, но и с отдаленными. Отметим, что большая дальность взаимодействия характерна для многих металлов и диэлектриков. При малом отклонении от положения равновесия силы можно считать пропорциональными смещениям атомов. Это означает, что взаимодействие на

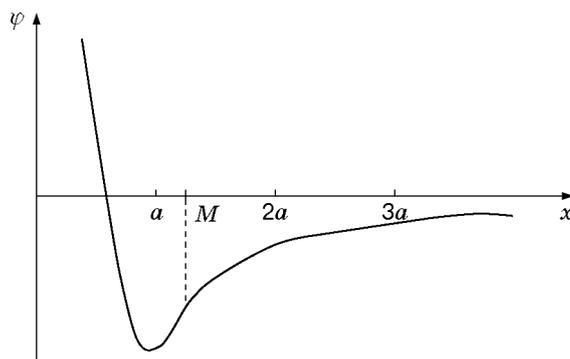


Рис. 1

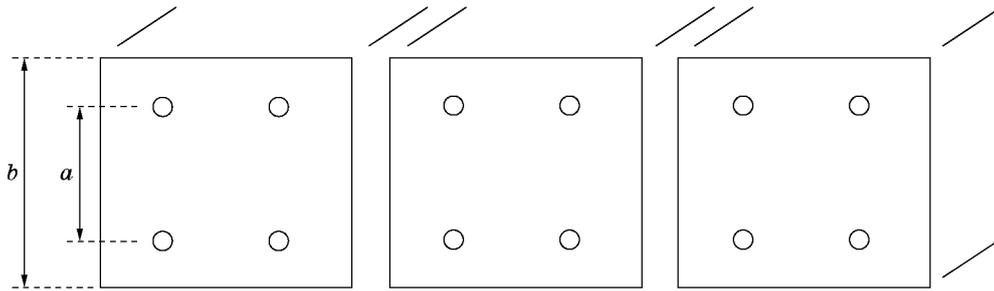


Рис. 2

молекулярном уровне можно моделировать при помощи упругих пружин. Жесткость пружин в этом случае определяется как  $C = dF/dx$ , где  $F$  — модуль силы ( $F_x = -d\varphi/dx$ ). За точкой перегиба  $M$  жесткость становится отрицательной и быстро уменьшается с увеличением  $x$ . Согласно [2, с. 131] для некоторых металлов с простой решеткой жесткость пружины, соединяющей атом со вторым “соседом”, в 10 раз меньше жесткости, соединяющей его с первым “соседом”; отношение жесткостей третьего и первого “соседей” равно 0,08.

Далее рассматривается модель твердого тела в виде системы упругосвязанных недеформируемых элементов. Покажем, что в соответствии с характером взаимодействия на молекулярном уровне упругие связи (пружины) должны соединять каждый элемент не только с его ближайшими “соседями”, но и с отдаленными. В этом заключается принципиальная особенность модели.

Исследуем небольшое твердое тело  $T1$  определенной формы, например параллелепипед. Размеры тела таковы, что его можно рассматривать как набор взаимодействующих молекул. В данном случае применим как классический подход (для расчета ультразвуковых колебаний), так и квантово-механический (для расчета тепловых процессов). Предположим, что тело представляет собой монокристалл кубической системы с простой элементарной ячейкой (это ограничение не должно повлиять на окончательные результаты).

Построим физическую модель  $M1$  тела  $T1$ . Построение включает три этапа.

1. Для каждой группы из восьми атомов (элементарная ячейка) построим куб (рис. 2). Каждый атом куба соединим со всеми атомами соседних кубов и всеми атомами кубов, прилегающих к соседним, при помощи пружин, моделирующих взаимодействие атомов. Атомы в каждом кубе жестко закрепим. Количество кубов равно  $N$ .

2. Распределим массы атомов равномерно внутри куба. При этом концы пружин остаются на прежних местах, вещество куба не препятствует деформациям пружин. Размеры куба подбираются так, чтобы его центральные моменты инерции равнялись сумме моментов инерции молекул. Отсюда следует, что ребро куба  $b = a\sqrt{3}$  ( $a$  — расстояние между молекулами (постоянная решетки)).

3. Поскольку вещество внутри куба считается неподвижным по отношению к кубу, точки крепления пружин переносим вдоль линии пружин на поверхность куба, сохраняя при этом жесткости пружин. Если линия пружины, идущей к “соседу соседа”, пересекает его пространство, считаем, что это пространство не влияет на пружину. В случае относительно больших смещений кубов (статическая задача) точки крепления пружин меняют свое положение.

Построенная модель  $M1$  имеет приближенный характер, поскольку движение восьми молекул заменяется движением куба, т. е. уменьшается число степеней свободы. Покажем, что низшие частоты модели  $M1$  с достаточной точностью близки к низшим частотам тела  $T1$ . (Под достаточной точностью понимается реальная точность расчетов теории упругости, не превышающая точности экспериментального определения упругих постоянных.)

В общем случае доказательство трудоемко, поэтому обратимся к примерам и рассуждениям качественного характера. Как известно, низшие частоты системы упругосвязанных твердых тел определяются в основном жесткостью пружин с наибольшей податливостью. В данном случае жесткости пружин различаются в десятки раз, но пружины большой жесткости не вносят заметного вклада в низшие частоты, поэтому их можно заменить жесткими связями. Приведем пример. Рассмотрим линейную цепочку из 12 точечных масс по 0,1 кг, соединенных с неподвижным основанием и друг с другом при помощи 12 пружин с чередующимися жесткостями 100 Н/м и 1000 Н/м (начиная с жесткости пружины 100 Н/м). Частоты собственных колебаний системы следующие: 0,824; 2,435; 3,925; 5,227; 6,242; 6,893; 22,53; 22,66; 22,89; 23,15; 23,39; 23,55 Гц. Заменяв пружины с жесткостью 1000 Н/м жесткими связями, получим систему с шестью степенями свободы, собственные частоты которой равны 0,858; 2,524; 4,043; 5,328; 6,303; 6,911 Гц. Значения первых частот обеих систем различаются примерно на 4%. Очевидно, что с ростом числа степеней свободы исходной системы Т1 (а значит, и с увеличением  $N$ ) расширяется участок начальной области спектра модели М1, который можно считать совпадающим с начальным участком области спектра тела Т1, улучшается точность расчета.

Рассмотрим твердое тело Т2, геометрически подобное телу Т1, но значительно бóльших размеров (в  $\lambda$  раз). Его материал можно считать сплошным (микроструктура не учитывается). При этом полагаем, что Т2, как и Т1, является монокристаллом без дефектов и посторонних включений.

Построим физическую модель М2 тела Т2. Тело Т2 представляется в виде системы  $N$  недеформируемых кубов, соединенных друг с другом при помощи пружин, так же как М1. Набор пружин такой же, как в М1, но жесткость пока неизвестна. Плотность материала моделей М1 и М2 одинакова, линейные размеры различаются в  $\lambda$  раз.

Покажем, что модель М2 может быть использована для расчетов механических характеристик тела Т2.

1. Спектры собственных частот тел Т1 и Т2 подобны (по крайней мере, их нижняя часть, т. е. область низших частот). Действительно, собственные частоты определяются количеством длин волн или определенных их долей, укладываемых на том или другом характерном размере. Например, при свободных колебаниях параллелепипеда три низшие частоты равны отношению скорости звука к длинам волн (к удвоенным длинам ребер параллелепипеда). Поскольку скорость звука в телах Т1 и Т2 одинакова, а соответствующие длины волн пропорциональны размерам тел, отношение  $\tau$  соответствующих периодов колебаний тел Т2 и Т1 пропорционально отношению линейных размеров:  $\tau = \lambda$ .

2. Как уже отмечалось, нижние части спектров частот тела Т1 и модели М1 одинаковы.

3. Как следует из построения, модели М1 и М2 геометрически подобны, отношение линейных размеров М2 к размерам М1 равно  $\lambda$ . Потребуем их полного физического подобия, т. е. дополнительно потребуем определенного отношения соответствующих масс и времен. Пока неизвестны жесткости пружин модели М2 (при этом сетка пружин М2 подобна сетке пружин М1). При подобии отношение жесткостей выражается формулой размерности жесткости  $[C] = [M]/[T^2]$ . Следовательно,  $C2/C1 = (m2/m1)/(t2/t1)^2 = \lambda^3/(\tau')^2$ . Подобрать жесткости так, чтобы их отношение равнялось  $\lambda$ , получим  $\tau' = \lambda$ .

4. Из сказанного выше следует, что  $\omega_i(T2)/\omega_i(T1) = \omega_i(M2)/\omega_i(T1)$ ,  $i = 1, 2, \dots, i \ll N$ , откуда  $\omega_i(T2) = \omega_i(M2)$ . Значит, низкочастотные части спектра частот тела Т2 и модели М2 совпадают. Таким образом, М2 может служить математической моделью Т2.

Говоря о равенстве  $\omega_i(T2) = \omega_i(M2)$ , мы, конечно, рассматриваем его как приближенное. Погрешность обусловлена заменой наиболее жестких пружин в Т1 абсолютно жесткими связями в М1, поэтому  $\omega(M1) > \omega(T1)$ . С ростом температуры (начиная с абсолютного

нуля) неравенство ослабевает, поскольку роль жестких пружин в механических процессах уменьшается.

Отметим, что поскольку модели М1 и М2 подобны, то в модели М2, как и в М1, моделируется дальное действие, т. е. упругие связи соединяют каждый элемент не только с его непосредственными “соседями”, но и с “соседями соседей”. Этот вывод является принципиальным: неучет дального действия, по-видимому, являлся главной причиной недостаточно успешного развития данного типа моделей.

**2. Модель тонкой пластины (малые прогибы).** В [1] описывается модель тонкой пластины в виде системы  $N$  упругосвязанных недеформируемых квадратных элементов. Перечислим основные параметры и характеристики модели.

1. Плоскость пластины горизонтальна. К каждой грани элемента крепятся четыре пружины горизонтального действия с жесткостью  $S1$  (две — к верхней части, две — к нижней, пружины моделируют изгибающий момент) и две пружины вертикального действия с жесткостью  $C1$ , те и другие соединяют прилегающие стороны соседних элементов. К углам каждого элемента крепится по одной пружине вертикального действия с жесткостью  $C2$  и по четыре пружины горизонтального действия с жесткостью  $S2$  (две из них действуют в направлении одной стороны элемента, а две — в направлении другой (прилегающей) стороны); эти пружины соединяют углы данного элемента и прилегающего к нему элемента. И наконец, к каждой стороне элемента прикреплены пружины с жесткостями  $S3, S4, S5$ , расположенные в два слоя по пять пружин. Они соединяют сторону данного элемента с параллельными ей сторонами пяти отдаленных элементов. Схема пружин приведена в работе [1].

2. Каждый элемент имеет три степени свободы: перемещение по вертикали и повороты вокруг двух горизонтальных осей. Уравнения для частот системы элементов имеют вид

$$\sum_{k=1}^{3N} B_{ik} q_k = \omega^2 \sum_{k=1}^{3n} A_{ik} q_k, \quad i = 1, 2, \dots, 3N, \quad (1)$$

где  $B$  — матрица потенциальной энергии;  $A$  — матрица кинетической энергии;  $q$  — обобщенные координаты. Сплошная пластина описывается уравнением для смещения  $W$

$$\Delta \Delta W = \rho \omega^2 h W / D, \quad (2)$$

где  $\rho$  — плотность;  $h$  — толщина;  $D = Eh^3/[12(1 - \nu^2)]$ ;  $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$ .

Жесткости пружин неизвестны. Их можно найти, потребовав, чтобы уравнения (1) в пределе (при  $N \rightarrow \infty$ ) переходили в уравнения (2) (подробнее см. [1]).

3. Значения жесткостей пружин для квадратного элемента следующие:  $S1 = 1,283\ 33KD$ ,  $S2 = -0,083\ 33KD$ ,  $S3 = 0,108\ 33KD$ ,  $S4 = -0,166\ 66KD$ ,  $S5 = 0,093\ 75KD$ ,  $C1 = (4/d^2)D$ ,  $C2 = (2/d^2)D$ , где  $K = 2/h^2$ ;  $d$  — сторона элемента. Эти значения используются при построении матрицы потенциальной энергии  $B$ . Из решения системы уравнений (1) определяются собственные частоты и формы колебаний. Следует отметить, что жесткости двух пружин дальнего действия имеют отрицательные значения (так же как при взаимодействии атомов).

Исследование модели показало достаточную ее точность, по крайней мере на низких частотах она выше, чем в пакете COSMOS M (жесткое защемление, разбиение  $12 \times 12$  в обоих случаях). Погрешность расчета десятой частоты — около 10%, первой — менее 0,1%.

**3. Модель тонкой пластины (большие прогибы).** По построению модель М2 может считаться физической моделью. Однако физическая модель тонкой пластины должна быть применима и для больших, и для малых прогибов. Малые прогибы описаны в п. 2,

где уравнения (2) использовались исключительно для определения жесткости пружин модели (путем сравнения с уравнениями (1)). Покажем применимость модели при больших прогибах в статической задаче. Сделаем некоторые предварительные замечания.

1. При малых прогибах каждый элемент имеет три степени свободы. При больших прогибах каждый элемент должен иметь шесть степеней свободы (добавляются два горизонтальных перемещения и повороты в горизонтальной плоскости).

2. В случае малых прогибов пружины модели можно разделить на два класса: горизонтального и вертикального действия. Однако при поворотах элементов пружины также поворачиваются, поэтому при моделировании больших прогибов необходимо поворачивающиеся пружины заменять эквивалентной системой вертикальных и горизонтальных пружин, так что жесткость пружин будет зависеть от поворотов элементов.

3. При больших прогибах расстояния между элементами меняются таким образом, что горизонтальные пружины (верхняя и нижняя) получают удлинения одинакового знака.

Таким образом, при больших прогибах модель будет описываться уравнением, отличным от уравнения для малых прогибов. Получим это уравнение. Предварительно напомним уравнение статической задачи при малых прогибах:

$$\sum_{i=1}^{3N} B_{ik} q_i = Q_k, \quad k = 1, 2, \dots, 3N, \quad (3)$$

где  $Q$  — внешние обобщенные силы.

По-прежнему можно считать, что выражение для потенциальной энергии системы элементов имеет вид однородной квадратичной формы

$$\Pi = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{6N} \sum_{k=1}^{6N} B_{ik} q_i q_k,$$

но теперь компоненты матрицы  $B$  зависят от координат.

Используем принцип виртуальных перемещений

$$-\delta\Pi + \sum_{m=1}^{6N} Q_m \delta q_m = 0. \quad (4)$$

Подставляя в (4) вариацию потенциальной энергии

$$\delta\Pi = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{6N} \sum_{k=1}^{6N} \delta(B_{ik} q_i q_k) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{6N} \sum_{k=1}^{6N} (\delta B_{ik}) q_i q_k + \sum_{i=1}^{6N} \sum_{k=1}^{6N} B_{ik} q_i \delta q_k,$$

находим

$$\sum_{i=1}^{6N} \sum_{k=1}^{6N} B_{ik} q_i \delta q_k + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{6N} \sum_{m=1}^{6N} [(\delta B_{im}) q_i q_m] = \sum_{k=1}^{6N} Q_k \delta q_k. \quad (5)$$

Подставляя в (5)  $\delta B_{im} = \sum_{k=1}^{6N} \frac{\partial B_{im}}{\partial q_k} \delta q_k$ , получаем

$$\sum_{k=1}^{6N} \left[ \sum_{i=1}^{6N} B_{ik} q_i - Q_k + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{6N} \sum_{m=1}^{6N} \frac{\partial B_{im}}{\partial q_k} q_i q_m \right] \delta q_k = 0.$$

Отсюда следует

$$\sum_{i=1}^{6N} B_{ik} q_i = Q_k + \Phi_k, \quad \Phi_k = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{6N} \sum_{m=1}^{6N} \frac{\partial B_{im}}{\partial q_k} q_i q_m, \quad k = 1, 2, \dots, 6N. \quad (6)$$

$h$ , мм	$\sigma/\sigma_0$	$W_0$ , мм	$W$ , мм	$W_T$	$\Delta W/W_T$ , %	$W_0/W$	$(W_0/W)_T$	$\Delta$ , %
6	64	0,690	0,686	0,702	2,28	1,006	1,008	0,20
	320	3,450	3,071	3,138	2,13	1,123	1,128	0,44
	640	6,901	5,127	5,196	1,33	1,346	1,362	1,38
	960	10,350	6,542	6,642	1,50	1,582	1,599	1,06
	1408	15,180	8,092	8,166	0,91	1,875	1,907	1,70
3	8	0,690	0,666	0,693	3,90	1,036	1,022	-1,37
	40	3,450	2,580	2,600	0,77	1,337	1,362	1,83
	64	5,520	3,423	3,447	0,70	1,623	1,643	1,22
	80	6,901	3,890	3,888	-0,05	1,774	1,821	2,58
	96	8,280	4,283	4,269	-0,33	1,930	1,990	3,01
1,5	1	0,690	0,616	0,651	5,37	1,120	1,087	-3,03
	5	3,450	1,950	1,940	-0,50	1,789	1,840	1,76
	6	4,140	2,150	2,135	-0,75	1,926	1,990	3,20
15	$2 \cdot 10^4$	13,80	10,617	11,175	5,00	1,302	1,267	2,68

Проведена серия численных экспериментов. Решалась задача для тонкой стеклотекстолитовой квадратной пластины  $120 \times 120$  мм, заземленной по контуру, изгибаемой равномерно распределенной нагрузкой (толщина пластины  $h$ ,  $E = 3 \cdot 10^{10}$  Па,  $\nu = 0,28$ ). Уравнения (6) решались методом итераций. Разбиение пластины  $12 \times 12$ . В таблице приведены результаты расчетов смещения центра пластины ( $\sigma_0 = 2,5 \cdot 10^4$  Па,  $W_0$  — расчет по формулам (3) (для малых прогибов,  $B_{ik} = \text{const}$ ),  $W$  — расчет по формулам (6) (для больших прогибов),  $W_T$  — теоретическое значение [3],  $\Delta W = W_T - W$ ,  $\Delta = [(W_0/W)_T - W_0/W]/(W_0/W)_T$ ). При  $h = 1,5$  мм и нагрузке  $\sigma_0$  ( $W_0)_T = 0,702$  мм. Результаты расчета сопоставляются с известным решением [3] этой задачи  $W_T$ , для данного случая это решение уравнения  $5,583(W_T/h)^3 + 71,840(W_T/h) = (\sigma/E)(d/h)^4$ . Для сравнения приводятся также значения прогибов  $W_0$ , полученные согласно линейной теории. Отметим, что при  $W/W_0 > 1,9$  итерационный процесс (решение уравнения (6)) становится расходящимся. По-видимому, это вызвано тем, что физическая модель становится неустойчивой; применительно к прототипу это может означать начало пластической деформации.

**Заключение.** В настоящей работе рассматривается модель упругого твердого тела в виде системы недеформируемых упругосвязанных элементов. Основная особенность модели в том, что она является, по существу, физической моделью и может применяться при решении широкого круга задач. Например, модель тонкой пластины в виде набора упругосвязанных прямоугольных элементов применима при изучении динамических и статических задач: при малых прогибах пластины, при больших прогибах, в задачах плоского напряженного состояния. Физической модели соответствует система алгебраических уравнений (математическая модель). Использование данной модели может иметь преимущества при решении ряда сложных задач (например, толстые пластины, оболочки).

Значения упругих связей в рассматриваемой модели можно найти, зная силы межатомного взаимодействия, но такая задача прикладной физики в приемлемом для практики виде еще не решена. Однако можно определить эти связи, применяя модель к наиболее простым ситуациям и сопоставляя уравнения типа (1) и (2), как это сделано в случае тонкой пластины.

При построении модели существенным является моделирование дальнего действия, имеющее как физические основания (см. п. 1), так и формальные: без учета дальнего действия

невозможно получить достаточно точное решение — совпадение уравнений (1) и (2). Отметим, что в вырожденных случаях (гибкая нить, мембрана) дальное действие исчезает.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **Минкевич Л. М.** Расчет колебаний тонких пластин путем разбиения на упругосвязанные недеформируемые элементы // ПМТФ. 1998. Т. 39, № 5. С. 159–168.
2. **Лейбфрид Г.** Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. М.: Физматгиз, 1963.
3. **Прочность, устойчивость, колебания:** Справ. / Под ред. И. А. Биргера, Я. Г. Пановко. М.: Машиностроение, 1968. Т. 1.

*Поступила в редакцию 3/II 2000 г.*

---