

УДК 539.3

КП

№ госрегистрации 0109U001389

Инв. №

Министерство образования и науки, молодежи и спорта Украины
Сумский государственный университет
(СумГУ)

40007, г. Сумы, ул. Р.Корсакова, 2;
тел. 33 41 08, факс (542) 33 40 49

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе,
д.ф.-м.н., профессор

_____ А. М. Чёрноус

2011.12.26

ОТЧЕТ

О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ В
НАНОРАЗМЕРНЫХ И ФРАКТАЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ**
(заключительный)

Начальник НИЧ

канд. физ.-мат. наук

_____ Д.И. Курбатов
2011.12.26

Руководитель НИР зав. кафедрой

прикладной и вычислительной математики

д-р физ.-мат. наук, профессор

_____ Л.А. Фильштинский
2011.12.26

2011

Рукопись закончена 21 декабря 2011 года

Результаты этой работы рассмотрены на заседании научного совета СумГУ,
протокол от 2011.12.08 № 04

СПИСОК АВТОРОВ

Руководитель НИР
главный научный сотрудник,
д-р физ.-мат. наук, профессор

Л.А. Фильштинский
(реферат, введение,
выводы, разделы 1-5)

Научный сотрудник

Т. Л. Мизина
(раздел 1 (п.1.1-1.2),
раздел 5 (п.5.1))

Инженер 1-й категории

Л. Л. Фильштинская
(раздел 5 (п.5.1-5.3))

Ассистент

Т. А. Киричек
(разделы 1-4)

Аспирант

Т. В. Мукомел
(раздел 3)

РЕФЕРАТ

Отчет о НИР: 89 с., 46 рис., 4 табл., 123 ист.

Рассмотрен новый класс задач о тепло и массопереносе во фрактальных средах, чрезвычайно актуальный для полимерных структур, перколяционных кластеров, аморфных полупроводников, пористых материалов и т.п. Идеология рассмотрения указанных проблем вытекает из глубоких статистических, термодинамических соображений и в математическом отношении сводится к решению дифференциальных уравнений с производными дробного порядка по времени и пространственным переменным.

Рассмотрены проблемы, связанные с определением механических свойств нанообъектов. Выделены три основных подхода к проблеме.

1. Аналитические, на основе стержневых, ферменных оболочечных конструкций;
2. Методы МД моделирования на основе экспериментальных потенциалов взаимодействия;
3. Методы, основанные на теории регулярных структур.

Проведен обзор исследований по проблеме определения механических свойств наноразмерных объектов. Построена модель композитного материала с наноразмерной ячейкой. Проведено математическое моделирование эксперимента по определению модуля упругости наностержня.

ФРАКТАЛЬНАЯ СРЕДА, УРАВНЕНИЯ С ДРОБНОЙ ПРОИЗВОДНОЙ, АНОМАЛЬНАЯ ДИФФУЗИЯ (ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ), ТЕРМОУПРУГОСТЬ, ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЛАПЛАСА, ФУНКЦИЯ МИТТАГ - ЛЕФЛЕРА, КАЧЕСТВЕННЫЕ И КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ. РЕГУЛЯРНАЯ СРЕДА С НАНОРАЗМЕРНЫМИ КОМПОНЕНТАМИ. ИНТЕГРАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ С ЭЛЛИПТИЧЕСКИМИ ЯДРАМИ, ЭФФЕКТИВНЫЕ ПАРАМЕТРЫ НАНОКОМПОЗИТА.

СОДЕРЖАНИЕ

РЕФЕРАТ.....	3
ВВЕДЕНИЕ.....	5
1 ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ ДРОБНОГО ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ	11
1.1 Дробные производные и интегралы Римана-Лиувилля	11
1.2 Дробные производные в смысле Капуто и их связь с производными Римана-Лиувилля	13
1.3 Операторы дробного интегрирования и дифференцирования Рисса.....	14
2 ГРАНИЧНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ТЕРМОУПРУГОСТИ, СОДЕРЖАЩИЕ ДРОБНУЮ ПРОИЗВОДНУЮ ПО ВРЕМЕНИ.....	15
2.1 РЕШЕНИЕ ТРЕХМЕРНОЙ ГРАНИЧНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ С ДРОБНОЙ ПРОИЗВОДНОЙ ПО ВРЕМЕНИ	15
2.2 ОБОБЩЕНИЕ ЗАДАЧИ ДАНИЛОВСКОЙ	22
3 ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕЛОКАЛЬНЫЕ ГРАНИЧНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ	25
3.1 ОДНОМЕРНАЯ НАЧАЛЬНО-КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ	25
3.2 ДВУМЕРНЫЕ ГРАНИЧНЫЕ ЗАДАЧИ ФРАКТАЛЬНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ	31
3.2.1 Фундаментальное решение дробно-дифференциального оператора Лапласа	31
3.2.2 Первая основная граничная задача для дробно-дифференциального уравнения Лапласа.....	33
3.2.3 Фундаментальные решения фрактального уравнения теплопроводности (диффузии) в R^2	38
3.2.4 Фрактальная теплопроводность в тонкой пластинке, нагреваемой по краю.....	41
4 ОДНОМЕРНЫЕ МОДЕЛИ ФРАКТАЛЬНОЙ ТЕРМОУПРУГОСТИ.....	44
4.1 КВАЗИСТАТИЧЕСКАЯ ЗАДАЧА ТЕРМОУПРУГОСТИ ДЛЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ С ПРОИЗВОДНЫМИ РИССА И КАПУТО.	44
4.2 ТЕМПЕРАТУРНЫЕ НАПРЯЖЕНИЯ, ВОЗНИКАЮЩИЕ В БЕСКОНЕЧНОМ СТЕРЖНЕ В РАМКАХ ПРОСТРАНСТВЕННО НЕЛОКАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ТЕРМОУПРУГОСТИ	52
5 МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНООБЪЕКТОВ	59
5.1 ОБЗОР НЕКОТОРЫХ РАБОТ ПО ПРОБЛЕМЕ	59
5.2 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ МОДУЛЯ УПРУГОСТИ НАНОСТЕРЖНЯ	65
5.3 МЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК	71
ВЫВОДЫ.....	78
ПЕРЕЧЕНЬ ССЫЛОК	81

ВВЕДЕНИЕ

В механике сплошной среды рассматриваются тела, обладающие пространственно однородными свойствами. Если материалы неоднородны и нерегулярны, то процессы переноса, протекающие в них, не подчиняются законам классической механики. Процессы переноса частиц и энергии (диффузия и теплопроводность соответственно), возникающие в пористых материалах, аморфных полупроводниках, перколяционных кластерах, полимерных структурах, называют аномальными, а иногда и фрактальными из-за их связи с дробно-дифференциальным исчислением [1-5]. Наиболее естественным и удобным математическим аппаратом описания процессов аномальной диффузии (теплопроводности) на некотором множестве являются уравнения в частных дробных производных как по пространственным координатам, так и по времени [6, 7].

Производная дробного порядка — это нелокальная характеристика функции: она зависит не только от поведения функции в окрестности рассматриваемой точки x , но и от принимаемых ею значений на всем интервале (a, x) (или (x, b)). Эта нелокальность означает, что изменение плотности потока частиц зависит не только от её значений в окрестности рассматриваемой точки (как это имеет место в случае нормальной диффузии либо классической теплопроводности), но и от её значений в удаленных точках пространства. Случайный процесс, скорость изменения плотности которого зависит от значений плотности в предшествующие моменты времени, называется эредитарным. Такие процессы удобно описывать уравнениями, содержащими дробную производную по времени.

Порядок производной по времени определяется величиной α , характеризующей топологию данного множества [8]. В работе [9] на основании экспериментального изучения фрактальных характеристик осадочных пород приводятся значения показателя α : $0,66 < \alpha < 0,909$. Различают два вида аномального переноса: субдиффузия и супердиффузия. Медленная диффузия (субдиффузия) характеризуется значениями показателя $0 < \alpha < 1$ и возникает на

фрактальных средах, так как частицы диффундирующего вещества вынуждены двигаться по узким каналам сложной конфигурации с тупиками, резкими поворотами и сужениями. Для быстрой диффузии (супердиффузии) показатель α принадлежит интервалу $(1;2)$. При $\alpha = 1$ имеет место нормальный диффузионный процесс, описываемый законом Фика [10]. В работе [11] устанавливается связь между аномальной теплопроводностью и диффузией в одномерных системах. Авторы показывают, что случай $\alpha = 1$ соответствует классической теплопроводности, основанной на законе Фурье, супердиффузия соответствует аномальному процессу теплопроводности с расходящимся коэффициентом проводимости, а при $0 < \alpha < 1$ система ведет себя как термоизолятор в термодинамическом пределе.

В последние годы возник значительный интерес исследователей к дробному по времени уравнению диффузии (теплопроводности). Фундаментальное решение фрактального диффузионно-волнового уравнения в одномерном случае получил Ф. Маинарди [12], который также с помощью интегрального преобразования Лапласа решил задачу о распространении начального импульса [13]. В работах [14, 15] решена задача Коши для дробного диффузионного уравнения путем сведения её к интегро-дифференциальному уравнению. Многомерные дробные диффузионно-волновые уравнения рассмотрены в работах [16-19]. Авторы [20] используют дробное по времени диффузионное уравнение для изучения распространения волн напряжения в вязкоупругой среде применительно к акустике и сейсмологии. В статьях [21-23] приводятся решения диффузионных уравнений с дробной производной по времени и соответствующих, возникающих в процессе диффузии (теплопроводности) механических напряжений. В [24] рассматривается двумерное диффузионно-волновое уравнение с дробной производной по времени в смысле Капуто [25-27]. С помощью метода интегральных преобразований аналитически исследованы задачи Дирихле и Неймана, приведены численные расчеты. Условия существования решений граничных задач первого типа для дробного по времени диффузионного уравнения доказаны в работах [28, 29]. Ю. Лучко [30] рассматривает обобщенное диффузионное уравнение с дробной по времени производной Капуто и

применяет метод разделения переменных для решения соответствующей начально-краевой задачи. Этот же метод используется в [31] при решении однородных задач Дирихле и Неймана для диффузионного уравнения с дробными производными по времени и пространственной координате. Происхождение дробных производных Римана-Лиувилля и Капуто, их применение в построении различных моделей вязкоупругости, дается в обзорных статьях [25, 32]. В работе [32] также получено общее решение линейного дифференциального уравнения с дробной производной Капуто.

Что касается пространственной дробной производной, то она входит в состав дифференциального уравнения переноса, если распределение Гаусса классического броуновского движения заменить более общим устойчивым вероятностным распределением Леви [33-35]. Экспериментально доказано, что в некоторых неоднородных средах процессы переноса не могут быть описаны законом Фика и уравнением теплопроводности, экспериментальные данные свидетельствуют о наличии больших «хвостов», связанных с полетами Леви [36, 37]. Последние относятся к случайным блужданиям со смещениями частиц, распределенных в соответствии с устойчивыми законами Леви. Пространственно-дробное уравнение аномальной теплопроводности (диффузии) можно получить, исходя из универсального уравнения (Паули) [38], либо на основании модели случайных блужданий, переходя к макромасштабному пределу. Если имеет место масштабное соотношение $l^\alpha/\tau = K$ (l, τ – масштабы длины и времени соответственно), то вероятность обнаружения частицы в заданном интервале стремится к пределу, имеющему плотность распределения, удовлетворяющую дробно-дифференциальному уравнению

$$\partial_t P(x, t) = K \nabla_{x, \alpha}^\theta P(x, t).$$

Это означает, что поток частиц удовлетворяет дробному обобщению закона Фика (Фурье) [39, 40].

Пусть X_i , T_i – случайные величины, обозначающие смещение и время ожидания между последовательными прыжками (столкновениями). Тогда величина

X_i/l распределена по α -устойчивому закону $L_{\alpha,\theta}$ с показателем $1 < \alpha < 2$ и параметром асимметрии θ . Поток частиц, пересекающих ось x за промежуток времени $[t, t + dt)$ определяется разностью двух выражений

$$Q_l^{\alpha,\theta} P(\cdot, t)(x) = Kl^{-\alpha} \left[\int_0^{+\infty} P(x-y, t) F_{\alpha,\theta}^d\left(\frac{y}{l}\right) dy - \int_0^{+\infty} P(x+y, t) F_{\alpha,\theta}^g\left(\frac{-y}{l}\right) dy \right],$$

где $F_{\alpha,\theta}^d(y/l)$ – вероятность того, что смещение частицы $y > l$.

Первое слагаемое определяет вероятность пересечения оси справа от x , второе — слева.

В термодинамическом пределе ($l, \tau \rightarrow 0$ при $l^\alpha/\tau = K$) оператор потока частиц, представляющих полеты Леви, будет иметь вид [41]

$$Q^* f = \frac{K}{\Gamma(2-\alpha)} \frac{d}{dx} \left[\frac{\sin \frac{\pi}{2}(\alpha - \theta)}{\sin \pi\alpha} \int_{-\infty}^x (x-y)^{1-\alpha} f(y) dy + \frac{\sin \frac{\pi}{2}(\alpha + \theta)}{\sin \pi\alpha} \int_x^{+\infty} (y-x)^{1-\alpha} f(y) dy \right],$$

где f – концентрация (температура) частиц в момент времени t .

Подставляя выражение для $Q^* P(x, t)$ в закон сохранения $\partial_t P = -\partial_x Q^* P$, получаем дробно-дифференциальное уравнение

$$\partial_t P(x, t) = K \nabla_{x,\alpha}^\theta P(x, t).$$

Здесь $\nabla_{x,\alpha}^\theta$ – дробная производная Рисса-Феллера [38].

Решению начально-краевых задач для уравнений, содержащих производную Рисса-Феллера, посвящены работы [42-46]. Наиболее популярными и хорошо изученными методами исследования таких задач являются метод интегральных преобразований [46] и численные аппроксимации оператора дробного дифференцирования [33, 42]. Аналитическое решение однородных задач Дирихле и Неймана для дробно-дифференциального уравнения с пространственно-симметричной производной Рисса ($\theta = 0$) представлено в работе [31]. В статье [47] применяется метод декомпозиции Адомиана при решении начально-краевой задачи

для дробно-дифференциального уравнения с пространственной производной Капуто.

В работе [48] исследованы вычислительные аспекты конечно-элементной аппроксимации фрактального уравнения переноса в ограниченной двумерной области. В статье [49] рассматривается метод конечных разностей в качестве метода решения пространственно-дробного уравнения диффузии для отрезка с изолированными концами. Несколько численных схем аппроксимации оператора дифференцирования Рисса предложено авторами [50].

Аналитические и численно-аналитические методы практически отсутствуют в литературе, и поэтому их разработка является важной исследовательской задачей. Наиболее популярным аналитическим методом решения граничных задач для уравнений аномальной диффузии и теплопроводности является метод интегральных преобразований. Так, в работе [51] рассмотрено уравнение реакции-диффузии, содержащее дробные операторы дифференцирования Капуто и Рисса-Феллера. Для решения краевой задачи применяются интегральные преобразования Лапласа и Фурье.

На протяжении последнего десятилетия все большее внимание исследователей стали привлекать задачи теории упругости на фрактальных средах. Они возникают, например, при рассмотрении моделей микрополярной упругости, градиентных теорий, различных микромеханических моделей. Аэрогели, коллоидные агрегаты, полимеры, некоторые типы композитных материалов, пористые среды и др. имеют мультифрактальную структуру в некоторой области специальных масштабов $R_0 < R < R_s$, где R_0 – минимальный размер частиц, кластеров, пор (микроскопический предел компонентов, образующих фрактальную структуру), R_s – корреляционная длина самоподобия — размер фракталов, похожих друг на друга. Прочность, упругость фрактальных структур являются весьма интересными как с фундаментальной, так и с практической точек зрения, поскольку определяют дебаевскую температуру теплопроводности, прохождение упругих волн и их затухание [52].

Феноменологическое рассмотрение упругих свойств мультифрактальной структуры изложено в [53] в предположении, что приложение внешней силы F к упругому изотропному фрактальному объекту приводит к деформации, осуществляемой на длине определенного масштаба. Таким образом, присутствие внешних напряжений приводит к возникновению необычной характеристической масштабной длины L_F , физически обозначающей размер молекулярных клубков в полимерах, характерный размер ячеек, среднее расстояние между включениями в композитных материалах и может служить характеристикой радиуса корреляции в случайной сетке или аэрогеле. Модуль упругости E и коэффициент Пуассона ν выражаются в виде [53]

$$E = \frac{GD}{d-1}, \nu = \frac{D}{d-1} - 1,$$

где G – модуль сдвига, D – фрактальная размерность, d – размерность пространства. В настоящее время отсутствуют экспериментальные данные для проверки правильности приведенных выражений для мультифрактальных структур. Однако установлено, что аэрогель SiO_2 имеет монофрактальную структуру с размерностью $D = 2,3 \pm 0,1$ и коэффициентом Пуассона $\nu = 0,15 \pm 0,05$, рассчитанным в [53]. Это значение довольно близко к экспериментальным данным, приведенным в [54] для аэрогеля SiO_2 .

В работе [55] получены основные уравнения упругости для фрактальных сред. В [56] рассмотрено одномерное уравнение движения нелокального типа с дробными производными Капуто, получено его решение с помощью интегральных преобразований Лапласа и Фурье.

Наряду с вышеописанными моделями теории упругости, учитывающей фрактальную размерность рассматриваемых тел, существуют модели, которые описывают упругие взаимодействия в однородных телах, однако эти взаимодействия имеют фрактальную природу, т. е. обладают пространственной нелокальностью [57, 58, 59, 60].

Уравнения фрактальной термоупругости получены в работах [61, 62, 63]. Ю. Повстенко записал уравнения квазистатической термоупругости, основанные на

дробно-диффузионном уравнении теплопроводности [21, 40, 64], а также рассмотрел несколько задач об определении напряжений во фрактальных средах [22, 23, 65, 66].

В настоящее время особый интерес представляют граничные задачи фрактальной теплопроводности, термоупругости, диффузии. В литературе представлены, в основном, только численные методы их решения, основанные на аппроксимациях дробной производной Рисса-Феллера. Поэтому важной задачей является разработка аналитических либо численно-аналитических методов решения дробно-дифференциальных уравнений и соответствующих граничных задач.

1 ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ ДРОБНОГО ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ

1.1 Дробные производные и интегралы Римана-Лиувилля

Пусть $\Omega = [a, b]$ – конечный интервал на действительной оси R^1 . Дробные интегралы $I_{a+}^\alpha f$ и $I_{b-}^\alpha f$ Римана-Лиувилля порядка α ($\operatorname{Re} \alpha > 0$) определяются следующим образом

$$(I_{a+}^\alpha f)(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x \frac{f(t) dt}{(x-t)^{1-\alpha}} \quad (x > a) \quad (1.1)$$

и

$$(I_{b-}^\alpha f)(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^b \frac{f(t) dt}{(t-x)^{1-\alpha}} \quad (x < b), \quad (1.2)$$

соответственно. Здесь $\Gamma(\alpha)$ – Гамма-функция [69]. Эти интегралы называются левосторонним и правосторонним дробными интегралами.

С учетом (1.1), (1.2) дробные производные Римана-Лиувилля $D_{a+}^\alpha y$ и $D_{b-}^\alpha y$ порядка α ($\operatorname{Re} \alpha \geq 0$) определяются так

$$\begin{aligned}
(D_{a+}^{\alpha}y)(x) &= \left(\frac{d}{dx}\right)^n (I_{a+}^{n-\alpha}y)(x) = \\
&= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \left(\frac{d}{dx}\right)^n \int_a^x \frac{y(t)dt}{(x-t)^{\alpha-n+1}} \quad (n = [\operatorname{Re}(\alpha)] + 1; x > a), \quad (1.3)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(D_{b-}^{\alpha}y)(x) &= \left(-\frac{d}{dx}\right)^n (I_{b-}^{n-\alpha}y)(x) = \\
&= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \left(-\frac{d}{dx}\right)^n \int_x^b \frac{y(t)dt}{(t-x)^{\alpha-n+1}} \quad (n = [\operatorname{Re}(\alpha)] + 1; x < b), \quad (1.4)
\end{aligned}$$

где $[\operatorname{Re}(\alpha)]$ – целая часть $\operatorname{Re}(\alpha)$.

При действительных $0 < \alpha < 1$ формулы (1.3) и (1.4) существенно упрощаются:

$$(D_{a+}^{\alpha}y)(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dx} \int_a^x \frac{y(t)dt}{(x-t)^{\alpha}}, \quad (0 < \alpha < 1; x > a)$$

$$(D_{b-}^{\alpha}y)(x) = -\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dx} \int_x^b \frac{y(t)dt}{(t-x)^{\alpha}} \quad (0 < \alpha < 1; x < b).$$

На всей действительной оси (т. е. для $-\infty < x < +\infty$) имеют место следующие формулы при $0 < \alpha < 1$

$$(I_{+}^{\alpha}f)(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_{-\infty}^x \frac{f(t)dt}{(x-t)^{1-\alpha}}, \quad (I_{-}^{\alpha}f)(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^{\infty} \frac{f(t)dt}{(t-x)^{1-\alpha}},$$

$$(D_{+}^{\alpha}y)(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^x \frac{y(t)dt}{(x-t)^{\alpha}}, \quad (D_{-}^{\alpha}y)(x) = -\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dx} \int_x^{\infty} \frac{y(t)dt}{(t-x)^{\alpha}}.$$

В частном случае, при $\alpha = n \in \mathbb{N}$ имеем

$$(D_{+}^0y)(x) = (D_{-}^0y)(x) = y(x),$$

$$(D_{+}^ny)(x) = y^{(n)}(x), \quad (D_{-}^ny)(x) = (-1)^n y^{(n)}(x).$$

Интегральное преобразование Фурье дробных производных Римана-Лиувилля вычисляется с помощью следующих соотношений

$$F[D_{\pm}^{\alpha}f(x)](\xi) = (\mp i\xi)^{\alpha} F[f(x)](\xi), \quad (\mp i\xi)^{\alpha} = |\xi|^{\alpha} e^{\mp \alpha \pi i \operatorname{sgn}(\xi)/2}, \quad (1.5)$$

где $\operatorname{Re}(\alpha) > 0$, $F[f(x)](\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{i\xi x} dx$.

1.2 Дробные производные в смысле Капуто и их связь с производными Римана-Лиувилля

Дробные производные Капуто $({}^C D_{a+}^\alpha f)(x)$ и $({}^C D_{b-}^\alpha f)(x)$ выражаются через соответствующие производные Римана-Лиувилля следующим образом:

$$\begin{aligned} ({}^C D_{a+}^\alpha f)(x) &= \left(D_{a+}^\alpha \left[f(t) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(a)}{k!} (t-a)^k \right] \right)(x), \\ ({}^C D_{b-}^\alpha f)(x) &= \left(D_{b-}^\alpha \left[f(t) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(b)}{k!} (b-t)^k \right] \right)(x), \end{aligned}$$

где $n = [\operatorname{Re} \alpha] + 1$ для $\alpha \notin N$, $n = \alpha$ для $\alpha \in N$.

Важное прикладное значение в теории дифференциальных уравнений имеет дробная производная Капуто, определенная на положительной полуоси:

$$\begin{aligned} ({}^C D_{0+}^\alpha f)(x) &= D_C^\alpha f(x) = \\ &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_0^x (x-t)^{n-\alpha-1} \frac{d^n}{dt^n} f(t) dt, \quad n-1 < \alpha < n. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Для вычисления преобразования Лапласа от производной (1.6) достаточно знать начальные значения функции $f(x)$ и её производных целого порядка k ($k = 1, 2, \dots, n-1$)

$$L[D_C^\alpha f(x)](p) = p^\alpha L[f(x)](p) - \sum_{k=0}^{n-1} f^{(k)}(0^+) p^{\alpha-1-k}, \quad n-1 < \alpha < n. \quad (1.7)$$

Функция Миттаг-Леффлера $E_\alpha[\lambda(x-a)^\alpha]$ [72] является инвариантом для оператора ${}^C D_{a+}^\alpha$, то есть при $\alpha > 0$, $a \in R^1$ и $\lambda \in C$ имеет место равенство

$$({}^C D_{a+}^\alpha E_\alpha[\lambda(t-a)^\alpha])(x) = \lambda E_\alpha[\lambda(x-a)^\alpha].$$

1.3 Операторы дробного интегрирования и дифференцирования Рисса

Для $\alpha \in C \setminus \{0\}$ и "достаточно хороших" функций $f(x) = f(x_1, \dots, x_n)$ дробная степень оператора Лапласа $\Delta = \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}$ определяется с помощью преобразования Фурье [26]

$$(-\Delta)^{-\alpha/2} f(x) = F^{-1}[|\xi|^{-\alpha}]F[f] = \begin{cases} I^\alpha f, \\ \mathbf{D}^{-\alpha} f, \operatorname{Re}(\alpha) > 0. \end{cases} \quad (1.8)$$

Операторы I^α и \mathbf{D}^α в правой части (1.8) называются операторами дробного интегрирования и дифференцирования Рисса.

При действительных $\alpha > 0$ дробная производная Рисса представима в виде гиперсингулярного интеграла

$$D^{(\alpha)}y(x) = \frac{1}{d_n(l, \alpha)} \int_{R^n} \frac{\Delta_t^l y(x)}{|t|^{n+\alpha}} dt \quad (l > \alpha).$$

Здесь $(\Delta_t^l y)(x)$ – конечные разности порядка l для функции $f(x)$ с шагом $t \in R^n$ и центром в точке $x \in R^n$

$$(\Delta_t^l y)(x) = \sum_{k=0}^l (-1)^k \binom{l}{k} y(x - kt),$$

$d_n(l, \alpha)$ – постоянные, определенные выражением

$$d_n(l, \alpha) = \frac{2^{-\alpha} \pi^{1+n/2}}{\Gamma\left(1 + \frac{\alpha}{2}\right) \Gamma\left(\frac{n+\alpha}{2}\right) \sin\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right)} A_l(\alpha),$$

где

$$A_l(\alpha) = \sum_{k=0}^l (-1)^{k-1} \binom{l}{k} k^\alpha.$$

Из (1.8) следует, что $F[\mathbf{D}^\alpha y(x)](\xi) = |\xi|^\alpha F[y(x)](\xi)$.

Если $x \in R^1$, то иногда производную Рисса представляют в виде [40]

$$\frac{d^\alpha f(x)}{d|x|^\alpha} = -\frac{\sin(\alpha\pi/2)}{\sin(\alpha\pi)} [D_+^\alpha f(x) + D_-^\alpha f(x)],$$

и

$$F\left[\frac{d^\alpha f(x)}{d|x|^\alpha}\right](\xi) = -|\xi|^\alpha F[f(x)](\xi). \quad (1.9)$$

2 ГРАНИЧНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ТЕРМОУПРУГОСТИ, СОДЕРЖАЩИЕ ДРОБНУЮ ПРОИЗВОДНУЮ ПО ВРЕМЕНИ

2.1 Решение трехмерной граничной задачи для уравнения теплопроводности с дробной производной по времени

В данном разделе предлагаются аналитические и численные процедуры решения новой трехмерной граничной задачи фрактальной теплопроводности для слоя со сквозной цилиндрической полостью. Приведены численные результаты, характеризующие эволюцию температуры во времени для различных значений порядка производной при действии на поверхности тела импульсной нагрузки.

В прямолинейной декартовой системе координат $Ox_1x_2x_3$ рассмотрим слой $-\infty < x_1, x_2 < \infty$, $|x_3| \leq h$, содержащий сквозную цилиндрическую полость $-h \leq x_3 \leq h, 0 < \rho \leq R$. Будем предполагать, что на поверхности полости задан тепловой поток, а на основаниях слоя поддерживается нулевая температура.

Система уравнений, описывающая решение поставленной задачи, имеет вид уравнение теплопроводности [21, 24]

$$\frac{\partial^\alpha T}{\partial t^\alpha} = a\Delta T, \quad 0 < \alpha \leq 2; \quad (2.1)$$

начальные условия

$$T|_{t=0} = 0, \quad 0 < \alpha \leq 2, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}\Big|_{t=0} = 0, \quad 1 < \alpha \leq 2; \quad (2.3)$$

граничные условия на основаниях слоя

$$T|_{x_3=\pm h} = 0; \quad (2.4)$$

граничные условия на поверхности полости [20, 21, 26]

$$\begin{aligned} -kI^{\alpha-1} \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{\sigma} &= P(t), \quad 1 \leq \alpha \leq 2, \\ -kD_{\text{RL}}^{1-\alpha} \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{\sigma} &= P(t), \quad 0 < \alpha \leq 1. \end{aligned} \quad (2.5)$$

В соотношениях (1) – (5) $T = T(x_1, x_2, x_3, t)$ – распределение температуры; a – коэффициент температуропроводности, k – коэффициент теплопроводности; $P(t)$ – заданная поверхностная плотность теплового потока, действующего на поверхности σ (поверхность кругового цилиндра); Δ – оператор Лапласа в R^3 ; $\partial^\alpha / \partial t^\alpha$ – дробная производная Капуто, $I^{\alpha-1}$ и $D_{\text{RL}}^{1-\alpha}$ – операторы дробного интегрирования и дифференцирования Римана-Лиувилля соответственно [13, 25, 27].

Решение граничной задачи проведено с применением интегрального преобразования Лапласа по времени и процедуры метода однородных решений [64]. Асимптотическое решение (при малых временах) определено в замкнутом виде. Решение для произвольного момента времени строилось путем численного обращения преобразования Лапласа [68].

Применим к соотношениям (2.1), (2.4), (2.5) преобразование Лапласа по времени при однородных начальных условиях (2.2), (2.3). Приходим к следующей граничной задаче

$$a\Delta\Theta - s^\alpha\Theta = 0, \quad \Theta = L[T](s); \quad (2.6)$$

$$\Theta|_{x_3=\pm h} = 0; \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial n} \Big|_{\sigma} = -\frac{s^{\alpha-1}}{k} Q(s), \quad Q(s) = L[P(t)]. \quad (2.8)$$

Симметричные однородные решения задачи (2.6), (2.7) будут иметь вид [64]

$$\Theta = \sum_{j=0}^{\infty} \varphi_j(x_1, x_2) \cos(\mu_j x_3), \quad (2.9)$$

где $\mu_j = \frac{\pi}{2h}(2j+1)$, $\varphi_j(x_1, x_2)$ – метагармонические функции,

удовлетворяющие уравнению

$$(\nabla^2 - \nu_j^2)\varphi_j = 0, \nu_j^2 = \mu_j^2 + \frac{s^\alpha}{a}, \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}. \quad (2.10)$$

Раскладывая в (2.8) функцию $Q(s)$ в ряд Фурье по собственным функциям однородного решения (2.9), получим

$$\left. \frac{\partial \varphi_j}{\partial \rho} \right|_{\rho=R} = -\frac{s^{\alpha-1}}{k} Q_j, Q = \sum_{j=0}^{\infty} Q_j(x_1, x_2) \cos(\mu_j x_3). \quad (2.11)$$

Таким образом, задача состоит в определении функций $\varphi_j(\rho)$ из уравнения (2.10) и граничных условий (2.11).

С учетом осевой симметрии рассматриваемой задачи уравнение (2.10) можно записать следующим образом

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \nu_j^2 \right) \varphi_j = 0, \rho \geq R.$$

Его решение представимо в виде

$$\varphi_j(\rho, s) = C_1(s) I_0(\nu_j \rho) + C_2(s) K_0(\nu_j \rho),$$

где $\operatorname{Re} \nu_j > 0$, I_0 и K_0 – модифицированные функции Бесселя 1-го и 2-го рода соответственно [69].

Так как температурное поле должно на бесконечности обращаться в ноль, то $C_1(s) = 0$, а коэффициенты $C_2(s)$ определим из условия (2.11).

Окончательно получаем

$$\Theta = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{s^{\alpha-1}}{k \nu_j} Q_j \frac{K_0(\nu_j \rho)}{K_1(\nu_j R)} \cos(\mu_j x_3).$$

Для определения температурной функции T по образу Θ необходимо выполнить обратное преобразование Лапласа.

Асимптотика решения при малых значениях времени ($t \rightarrow 0$). Известно, что при преобразовании Лапласа малым значениям временного параметра t

соответствуют большие значения параметра преобразования s (т.е. $s \rightarrow \infty$). Воспользовавшись этим замечанием, представим числа ν_j приближенно

$$\nu_j^2 = \mu_j^2 + \frac{s^\alpha}{a} \approx \frac{s^\alpha}{a} \Rightarrow \nu_j \approx \frac{s^{\alpha/2}}{\sqrt{a}}, \quad a > 0, 1 \leq \alpha \leq 2.$$

Используя данное представление и асимптотические разложения функций Макдональда при больших значениях аргумента, получим следующее выражение для функции $\Theta(s)$

$$\Theta = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\sqrt{a}}{k} Q_j \sqrt{\frac{\rho}{R}} s^{\alpha/2-1} \exp(-s^{\alpha/2} \tau) \cos(\mu_j x_3), \quad \tau = \frac{\rho - R}{\sqrt{a}} \quad (2.12)$$

Пусть на поверхности полости действует прямоугольный по времени и распределенный по параболе вдоль "толщинной" координаты импульс

$$P(t, x_3) = \left(1 - \frac{x_3^2}{h^2}\right) (H(t) - H(t - L)),$$

где $H(t)$ – единичная функция Хевисайда [69], L – длина импульса.

Тогда

$$Q_j(s) = \frac{4 \cdot (-1)^{j+1}}{\mu_j^3} \cdot \frac{(1 - \exp(-sL))}{s},$$

а представление (2.12) приобретает вид

$$\Theta = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\sqrt{a}}{k} \cdot \sqrt{\frac{\rho}{R}} \frac{4 \cdot (-1)^{j+1}}{\mu_j^3} \cdot \frac{(1 - \exp(-sL))}{s} \times \\ \times s^{\alpha/2-1} \exp(-s^{\alpha/2} \tau) \cos(\mu_j x_3). \quad (2.13)$$

Рассмотрим несколько частных случаев.

3. Классическое (параболическое) уравнение теплопроводности ($\alpha = 1$).

Функцию (2.13) запишем теперь в виде

$$\Theta = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\sqrt{a}}{k} \cdot \sqrt{\frac{\rho}{R}} \frac{4 \cdot (-1)^{j+1}}{\mu_j^3} \cdot \frac{(1 - \exp(-sL))}{s\sqrt{s}} \cdot \exp(-\tau\sqrt{s}) \cos(\mu_j x_3).$$

Обращение преобразования Лапласа последнего выражения можно выполнить в замкнутом виде. Получим

$$T(t, x_3, \rho) = \sum_{j=0}^{\infty} T_j (f(t) - f(t-L)H(t-L)) \cos(\mu_j x_3) \quad (2.14)$$

где

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{t} \exp\left(\frac{-\tau^2}{4t}\right) - \tau \operatorname{Erfc}\left(\frac{\tau}{2\sqrt{t}}\right), \quad \tau = \frac{\rho - R}{\sqrt{a}},$$

$$T_j = \frac{\sqrt{a}}{k} \cdot \frac{4 \cdot (-1)^{j+1}}{\mu_j^3} \cdot \sqrt{\frac{\rho}{R}}.$$

2. Волновое уравнение ($\alpha = 2$).

В этом случае решение получаем в виде

$$T(t, x_3, \rho) = \sum_{j=0}^{\infty} T_j (H(t-\tau) - H(t-L-\tau)H(t-L-\tau)) \cos(\mu_j x_3) \quad (2.15)$$

На рис. 2.1, 2.2 представлены расчеты температурной функции в зависимости от времени, выполненные по асимптотическим (при малых значениях времени) формулам (2.14), (2.15) соответственно. На рис. 2.3, 2.4 приведены кривые эволюции температуры для различных дробных значений α . Решение для произвольного момента времени строилось путем численного обращения преобразования Лапласа. Алгоритм основан на разложении изображения в ряд Фурье и аппроксимации с помощью цепных дробей [68].

При расчетах задавались следующие параметры:
 $x_3 = 0, h = 1, R = 1, \rho = 1, L = 1$.

Анализируя графики, изображенные на рис. 2.3, можно сделать вывод, что распространение тепла (нагрев) в слое с полостью для сред с показателем $\alpha < 1$ осуществляется медленнее в отличие от сред, для которых $\alpha = 1$. При $1 < \alpha \leq 2$ (рис. 2.4) процесс, происходящий во фрактальной среде, можно охарактеризовать как процесс перехода от классической теплопроводности к волновому поведению.

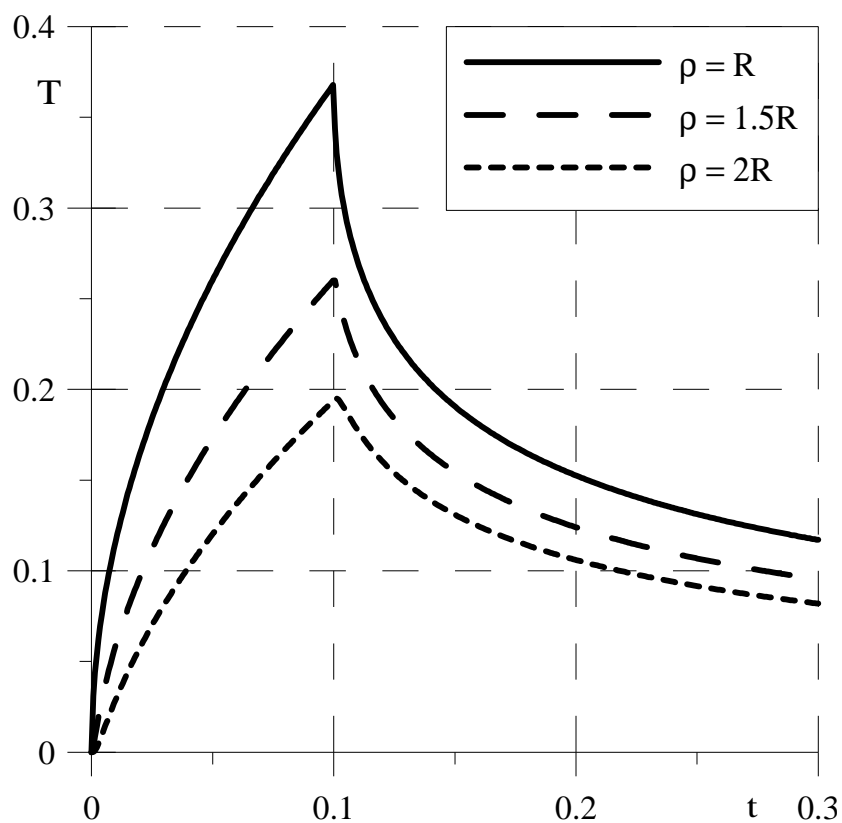


Рисунок 2.1 – Изменение температуры во времени при $\alpha = 1$ (асимптотическое решение)

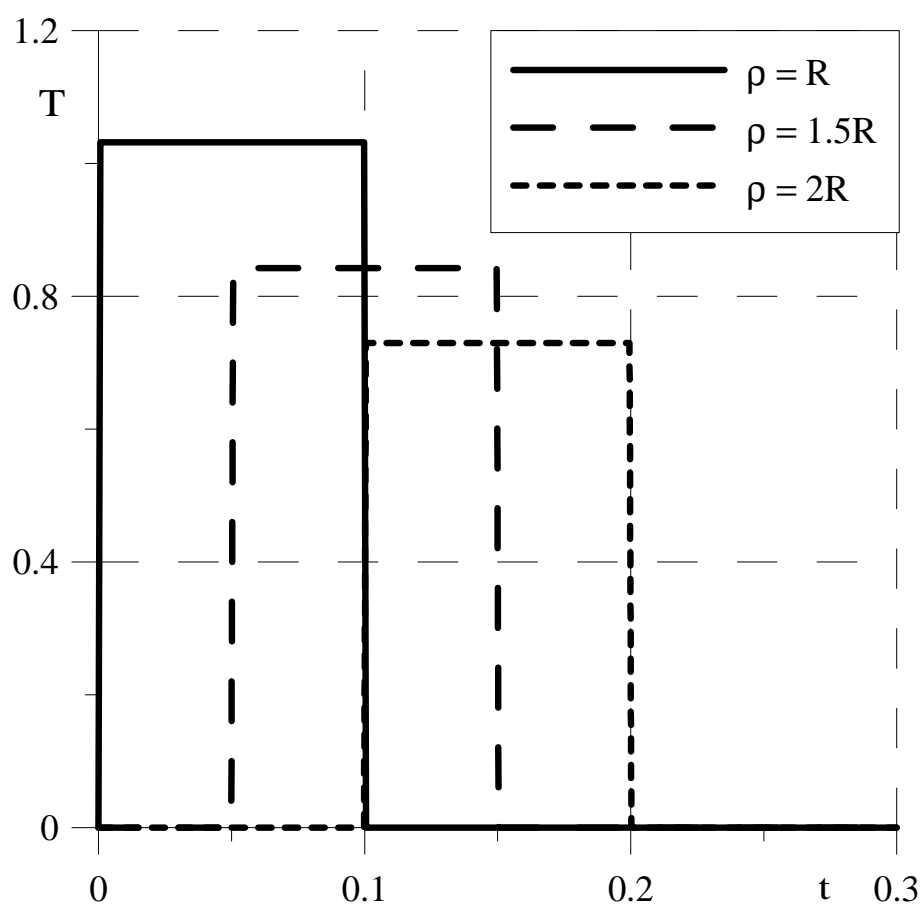


Рисунок 2.2 – Изменение температуры во времени при $\alpha = 2$ (асимптотическое решение)

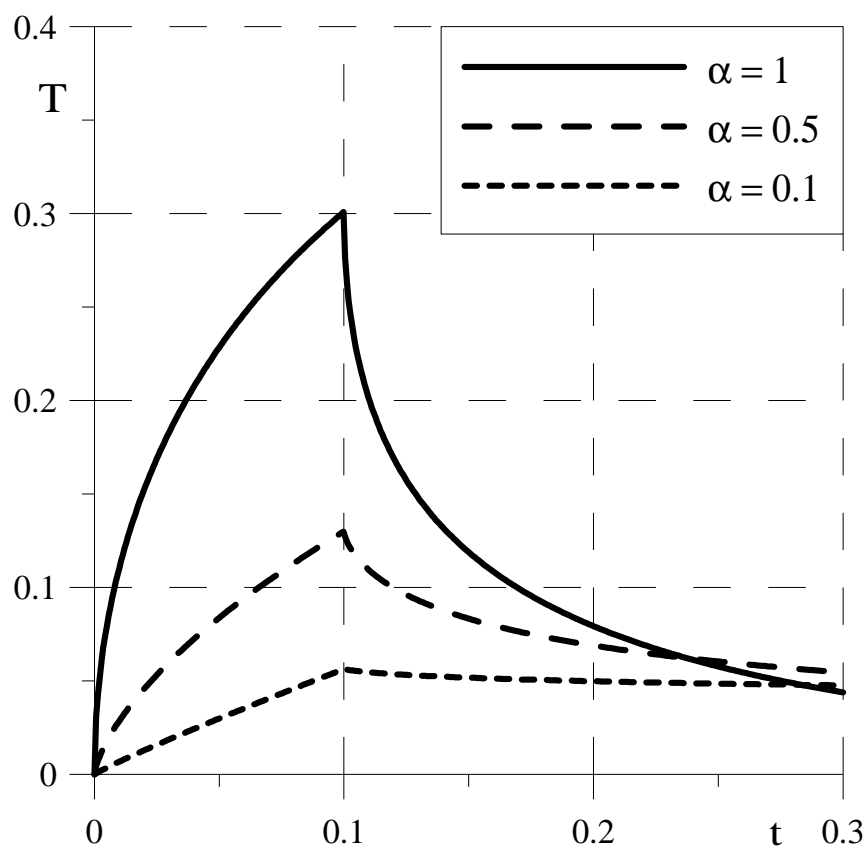


Рисунок 2.3 – Зависимость температуры от времени при различных значениях $0 < \alpha \leq 1$

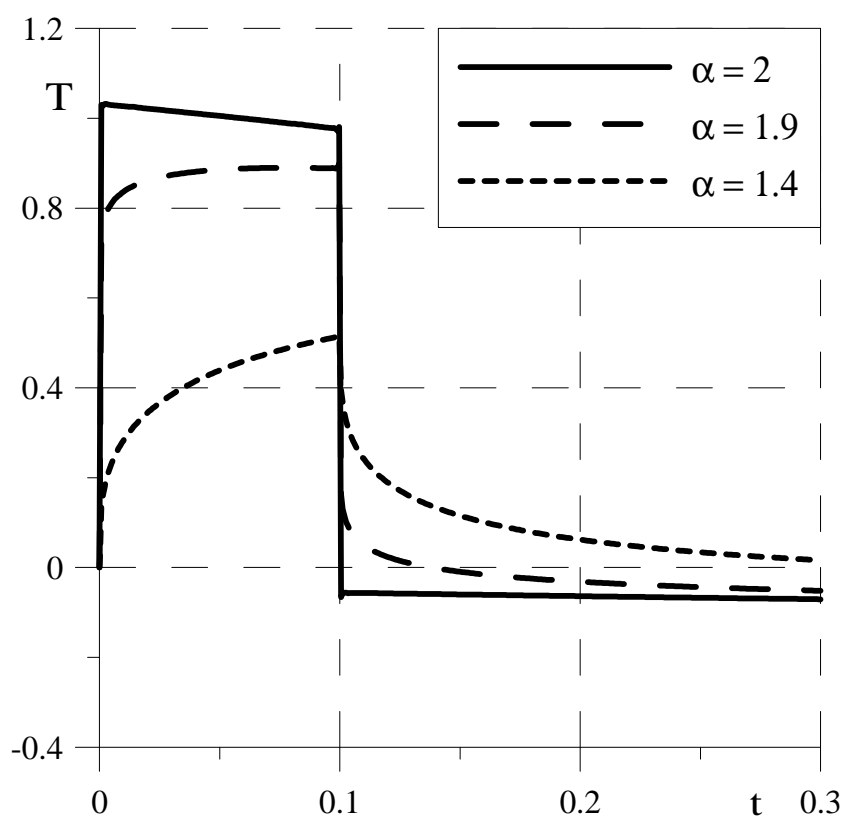


Рисунок 2.4 – Зависимость температуры от времени при различных значениях $1 < \alpha \leq 2$

2.2 Обобщение задачи Даниловской

Первой публикацией по динамическим задачам термоупругости была задача Даниловской [74]. В ней рассматривается внезапное нагревание границы упругого полупространства. В момент $t = 0$ плоскость $x_1 = 0$, ограничивающая упругое полупространство $x_1 \geq 0$, внезапно нагревается до температуры T_0 , которая затем остается постоянной. Этот процесс обычно называется тепловым ударом [71]. При этом предполагается, что плоскость $x_1 = 0$ свободна от напряжений и что начальные условия для температуры и перемещений однородны. Под влиянием внезапного нагревания плоскости $x_1 = 0$ в упругом полупространстве распространяется одномерная термоупругая волна. Задача состоит в определении напряжений и температуры из системы дифференциальных уравнений нелокальное уравнение теплопроводности [21]

$$\frac{\partial^\alpha T}{\partial t^\alpha} - a \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2} = 0, \quad T = T(x_1, t), \quad 0 < \alpha \leq 1, \quad (2.16)$$

нелокальное волновое уравнение для потенциала термоупругого перемещения [3]

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{1}{c_1^2} \frac{\partial^{\alpha+1}}{\partial t^{\alpha+1}} \right) \Phi(x_1, t) = mT, \quad u_i = \frac{\partial \Phi}{\partial x_i}, \quad m = \frac{\gamma}{\lambda + 2\mu}, \quad (2.17)$$

начальных условий

$$T(x_1, 0) = 0, \quad u_i(x_1, 0) = 0, \quad (2.18)$$

граничных условий

$$\sigma_{11}(0, t) = 0, \quad T(0, t) = T_0 H(t), \quad (2.19)$$

где $\partial^\alpha / \partial t^\alpha$ – оператор дробного дифференцирования Капуто [27], a – коэффициент температуропроводности, T – температура, σ_{ij} – тензор напряжений, u_i – компоненты вектора перемещений ($i, j = 1, 2, 3$), λ, μ – постоянные Ламе, γ – коэффициент теплового расширения, c_1 – скорость распространения упругой волны расширения (сжатия), $H(t)$ – функция Хевисайда.

В рамках поставленной задачи напряжения выражаются через потенциал $\Phi(x_1, t)$ следующим образом

$$\sigma_{11} = \rho \frac{\partial^{\alpha+1}\Phi}{\partial t^{\alpha+1}}, \quad \sigma_{22} = \sigma_{33} = -2\mu m T + \frac{\lambda}{c_1^2} \frac{\partial^{\alpha+1}\Phi}{\partial t^{\alpha+1}}, \quad (2.20)$$

а граничное условие для σ_{11} в (2.19) будет иметь вид

$$\left. \frac{\partial^{\alpha+1}\Phi(x_1, t)}{\partial t^{\alpha+1}} \right|_{x_1=0} = 0. \quad (2.21)$$

Применим к уравнениям (2.16), (2.17) и граничным условиям (2.19), (2.21) преобразование Лапласа при выполнении начальных условий (2.18). Получим

$$\bar{T}_{x_1}'' - \frac{s^\alpha}{a} \bar{T} = 0, \quad \bar{T}(0, s) = T_0, \quad (2.22)$$

$$\bar{\Phi}_{x_1}'' - \frac{s^{\alpha+1}}{c_1^2} \bar{\Phi} = m \bar{T}, \quad (2.23)$$

$$s^{\alpha+1} \bar{\Phi}(0, s) = 0, \quad (2.24)$$

где $\bar{f} = L[f(x_1, t)](s) = \int_0^\infty f(x_1, t) e^{-st} dt$.

Решением граничной задачи (2.22) является функция

$$\bar{T}(x_1, s) = T_0 \exp\left(-\frac{s^{\alpha/2}}{\sqrt{a}} x_1\right). \quad (2.25)$$

После подстановки (2.25) в неоднородное уравнение (2.23) получаем

$$\bar{\Phi}_{x_1}'' - \frac{s^{\alpha+1}}{c_1^2} \bar{\Phi} = m T_0 \exp\left(-\frac{s^{\alpha/2}}{\sqrt{a}} x_1\right). \quad (2.26)$$

Запишем общее решение соответствующего однородного уравнения

$$\bar{\Phi}^0(x_1, s) = A \exp(k_1 x_1) + B \exp(-k_1 x_1), \quad k_1 = \frac{s^{(\alpha+1)/2}}{c_1}.$$

Константы A и B определим из граничного условия (2.24) и условия затухания на бесконечности. Получим

$$\bar{\Phi}^0(x_1, s) = \exp(-k_1 x_1).$$

Частное решение неоднородного уравнения (2.26) будем искать в виде

$$\bar{\Phi}^*(x_1, s) = C \exp(-k_2 x), \quad k_2 = \frac{s^{\alpha/2}}{\sqrt{a}}.$$

Подставляя последнее выражение в уравнение (2.26), находим константу C . Тогда решение (2.26) примет вид

$$\bar{\Phi}(x_1, s) = \frac{m T_0 c_1^2}{(s^\alpha \cdot c_1^2 / a - s^{\alpha+1})} (e^{-k_1 x_1} - e^{-k_2 x_1}). \quad (2.27)$$

С помощью представлений (2.20) и найденной функции (2.27) получаем выражения для напряжений в плоскости преобразования Лапласа

$$\bar{\sigma}_{11} = \rho s^{\alpha+1} \bar{\Phi}, \quad \bar{\sigma}_{22} = \bar{\sigma}_{33} = -2\mu m \bar{T} + \frac{\lambda}{c_1^2} s^{\alpha+1} \bar{\Phi}.$$

Теперь, выполняя обращение преобразования Лапласа, получаем значения напряжений.

На рис. 2.5 представлено изменение напряжения σ_{11} в зависимости от расстояния x_1 при $t = a/c_1^2$, $T_0 = 1 K$.

При $\alpha = 1$ получаем частный случай задачи В.И. Даниловской. В момент времени $t = x_1/c_1$ напряжение σ_{11} получает разрыв и изменяет знак. После прохождения фронта волны напряжение приближается к квазистатическому значению. При $\alpha = 0.95$ величина скачка уменьшается, а примерно при $\alpha < 0,75$ разрыв напряжения исчезает.

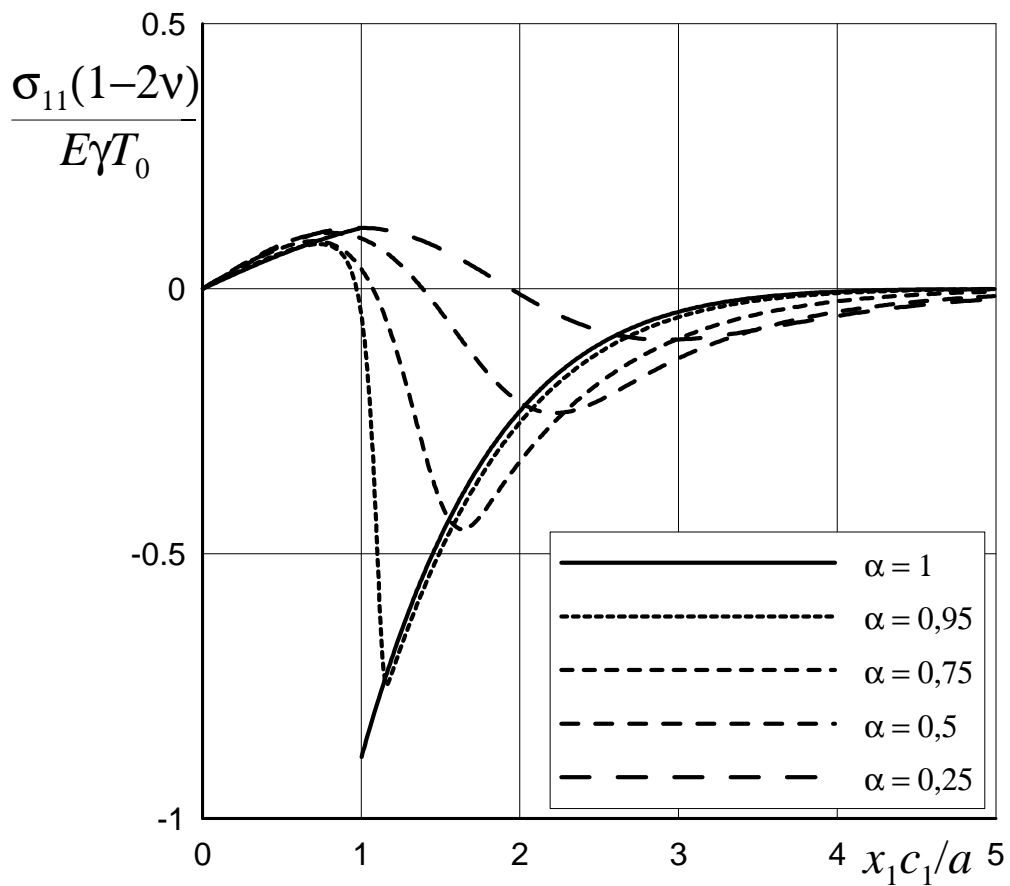


Рисунок 2.5 – Зависимость напряжения σ_{11} от пространственной координаты x_1

3 ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕЛОКАЛЬНЫЕ ГРАНИЧНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

3.1 Одномерная начально-краевая задача для дробно-дифференциального уравнения теплопроводности

Рассмотрим дробно-дифференциальное уравнение теплопроводности [47]

$$\frac{\partial^\alpha T}{\partial t^\alpha} = \frac{\partial^\beta T}{\partial x^\beta}, \quad 0 < \alpha \leq 2, \quad 1 < \beta \leq 2, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t > 0, \quad (3.1)$$

с однородными начальными

$$T|_{t=0} = 0, \quad 0 < \alpha \leq 1,$$

$$T|_{t=0} = \frac{\partial T}{\partial t} \Big|_{t=0} = 0, \quad 1 < \alpha \leq 2, \quad (3.2)$$

и граничными условиями

$$T(0, t) = H(t), \quad \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=1} = 0. \quad (3.3)$$

Здесь $T(x, t)$ – температура, $\partial^\alpha / \partial t^\alpha$, $\partial^\beta / \partial x^\beta$ – операторы дробного дифференцирования Капуто [27], $H(t)$ – функция Хевисайда.

Применим к уравнению (3.1) и граничным условиям (3.3) преобразование Лапласа с учетом условий (3.2). Формула для преобразования Лапласа дробной производной в смысле Капуто имеет вид [12, 13]

$$L\left[\frac{\partial^\alpha f(t)}{\partial t^\alpha}\right](s) = s^\alpha L[f(t)] - \sum_{k=0}^{n-1} f^{(k)}(0^+) s^{\alpha-1-k}, \quad n-1 < \alpha < n.$$

Приходим к следующей граничной задаче

$$\frac{\partial^\beta \bar{T}}{\partial x^\beta} - s^\alpha \bar{T} = 0, \quad \bar{T}(x, s) = L[T(x, t)](s), \quad (3.4)$$

$$\bar{T}(x, s)\big|_{x=0} = \frac{1}{s}, \quad \left. \frac{\partial \bar{T}(x, s)}{\partial x} \right|_{x=1} = 0, \quad (3.5)$$

где L — оператор преобразования Лапласа, задаваемый интегралом

$$L[f(t)](s) = \int_0^\infty f(t) e^{-st} dt.$$

Общее решение однородного уравнения (3.4) имеет вид [32]

$$\bar{T}(x, s) = C_1 u_1(\gamma x) + C_2 u_2(\gamma x),$$

где

$$u_1(x) = \int_0^\infty e^{-rx} K_{\beta,0}(r) dr + \frac{2}{\beta} e^{x \cos \frac{\pi}{\beta}} \cos\left[x \sin \frac{\pi}{\beta}\right],$$

$$u_2(x) = \int_0^\infty e^{-rx} K_{\beta,1}(r) dr + \frac{2}{\beta} e^{x \cos \frac{\pi}{\beta}} \cos\left[x \sin\left(\frac{\pi}{\beta}\right) - \frac{\pi}{\beta}\right],$$

$$K_{\beta,l}(r) = \frac{(-1)^l}{\pi} \frac{r^{\beta-1-l} \sin(\beta\pi)}{r^{2\beta} + 2r^\beta \cos(\beta\pi) + 1}, \quad \gamma = (-s^\alpha)^{1/\beta}.$$

Постоянные C_1 и C_2 определим из граничных условий (3.5).

$$\bar{T}(x, s)|_{x=0} = C_1 u_1(0) + C_2 u_2(0) = \frac{1}{s},$$

$$\left. \frac{\partial \bar{T}}{\partial x} \right|_{x=1} = C_1 u_1'(\gamma) + C_2 u_2'(\gamma) = 0$$

Отсюда находим

$$C_1 = \frac{1}{s}, C_2 = -\frac{u_1'(\gamma)}{s \cdot u_2'(\gamma)} = -\frac{u_1'(\gamma)}{s \cdot u_1(\gamma)}, \quad (3.6)$$

где $u_1'(x) = \int_0^\infty e^{-rx} K_{\beta,-1}(r) dr + \frac{2}{\beta} e^{x \cos \frac{\pi}{\beta}} \cos \left[x \sin \left(\frac{\pi}{\beta} \right) + \frac{\pi}{\beta} \right]$.

Окончательно получаем

$$\bar{T}(x, s) = \frac{1}{s} u_1(\gamma x) - \frac{u_1'(\gamma)}{s \cdot u_1(\gamma)} u_2(\gamma x). \quad (3.7)$$

Применяя процедуру обращения преобразования Лапласа [67] к функции (3.7), определяем значения температуры $T(x, t)$.

На рис. 3.1 – 3.5 представлены результаты расчета функции $T(x, t)$ для различных значений параметров α и β . Графики на рис. 3.1, 3.2 демонстрируют зависимость температуры от времени в точке $x = 0,5$ м (середина рассматриваемого отрезка). При $\alpha = 0,5$, $\beta = 1.9$ (рис. 3.1) наблюдается медленный процесс теплопроводности — температура достигает равновесного значения при $t \approx 12c$, в то время как согласно классическому закону теплопроводности ($\alpha = 1$) — при $t \approx 2c$. При $\alpha = 1.9$ процесс теплопроводности приобретает волновой характер, в момент времени $t = 1,5c$ происходит отражение от границы.

Дробный показатель β учитывает пространственные корреляции, поэтому температура изменяется по-разному при различных значениях β (рис. 3.2), однако термодинамическое равновесие наступает в один и тот же момент времени $t \approx 2c$.

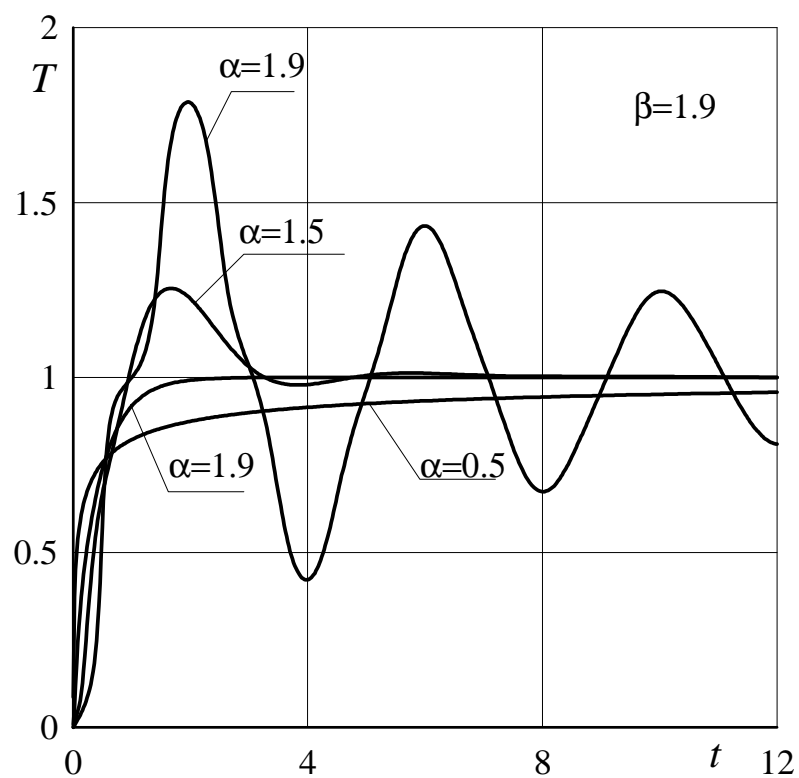


Рисунок 3.1 – Зависимость температуры от времени в точке $x = 0,5$ м при различных значениях α

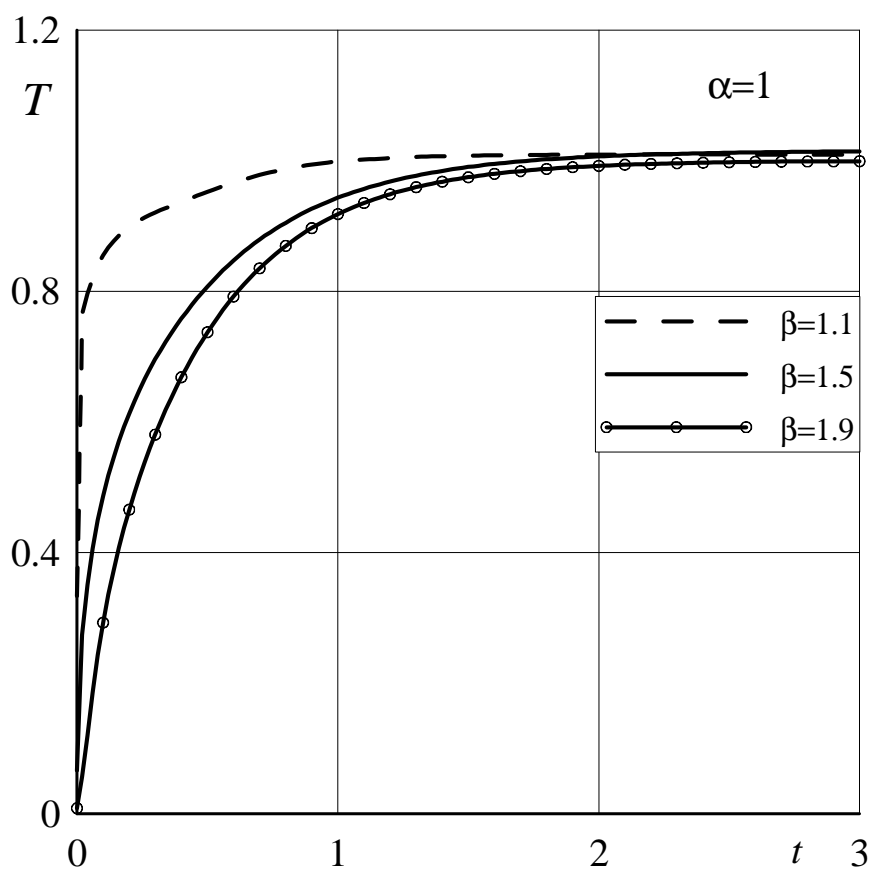


Рисунок 3.2 – Зависимость температуры от времени в точке $x = 0,5$ м при различных значениях β

На рис. 3.3-3.5 приведены графики распределения температуры вдоль отрезка $[0;1]$. При $\alpha = 0,5, \beta = 1,9$ процесс близок к «диффузионному», поэтому в моменты времени $t = 0,5 c$ (рис. 3.3) и $t = 1,5 c$ (рис. 3.4) происходит уменьшение температуры при движении вдоль рассматриваемого отрезка. При $x = 1$ м выполняется граничное условие: $T = 1 K$.

При $\alpha = 1,5, \alpha = 1,9$ процесс теплопроводности близок к «волновому». В момент времени $t = 0,5 c$ температурный нагрев достигает середины отрезка, а в момент $t = 1,5 c$ в эту точку ($x = 0,5$ м) приходит отраженная от границы $x = 1$ м волна. Поэтому на графиках рис. 3.4 при $\alpha = 1,5, \alpha = 1,9$ происходит увеличение температуры.

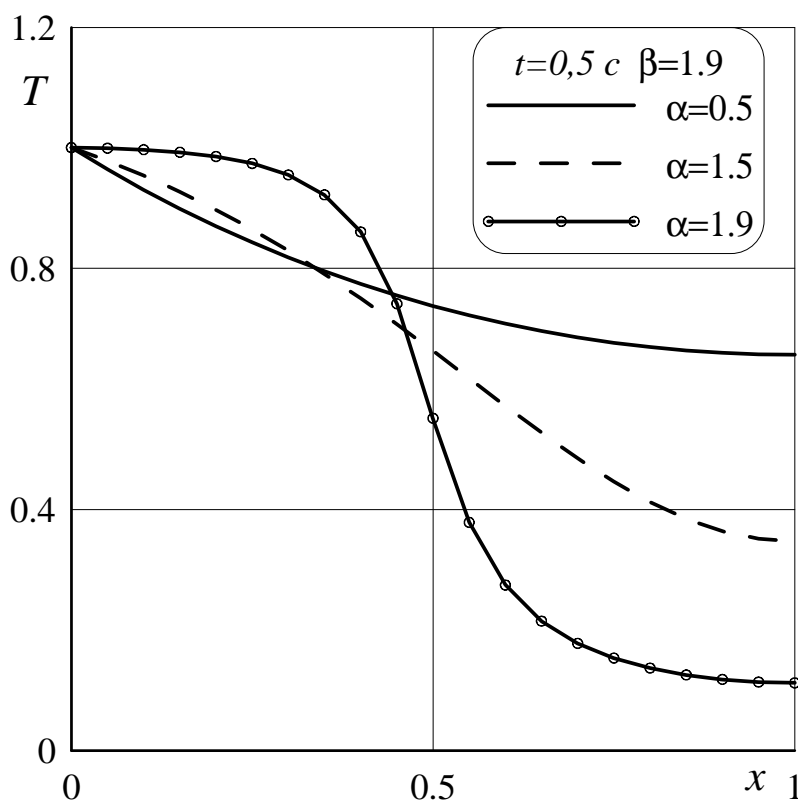


Рисунок 3.3 – Распределение температуры вдоль координаты x в момент времени $t = 0,5 c$ при различных значениях α

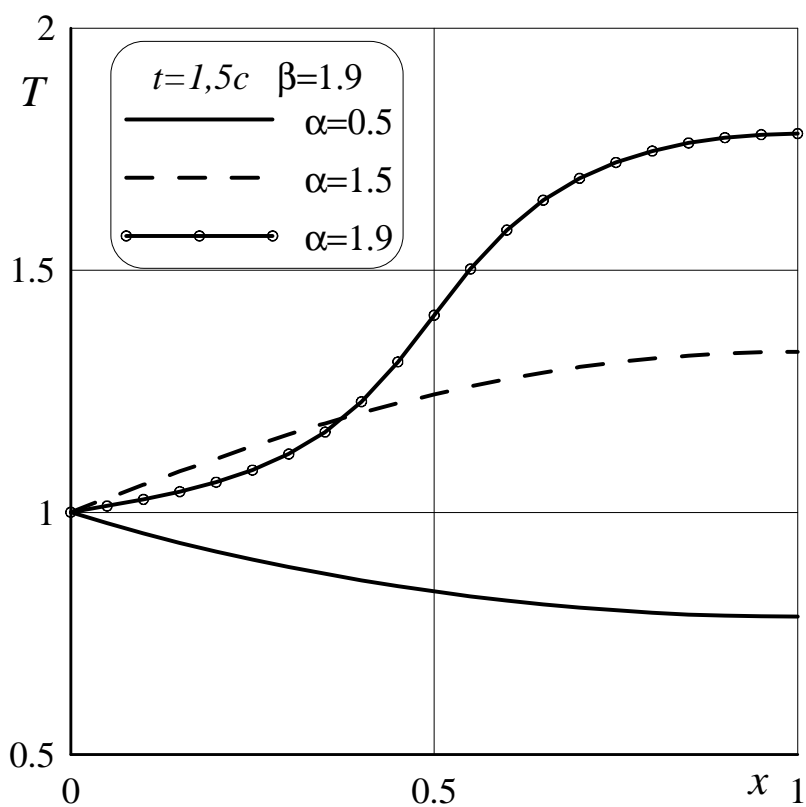


Рисунок 3.4 – Распределение температуры вдоль координаты x в момент времени $t = 1,5\text{c}$ при различных значениях α

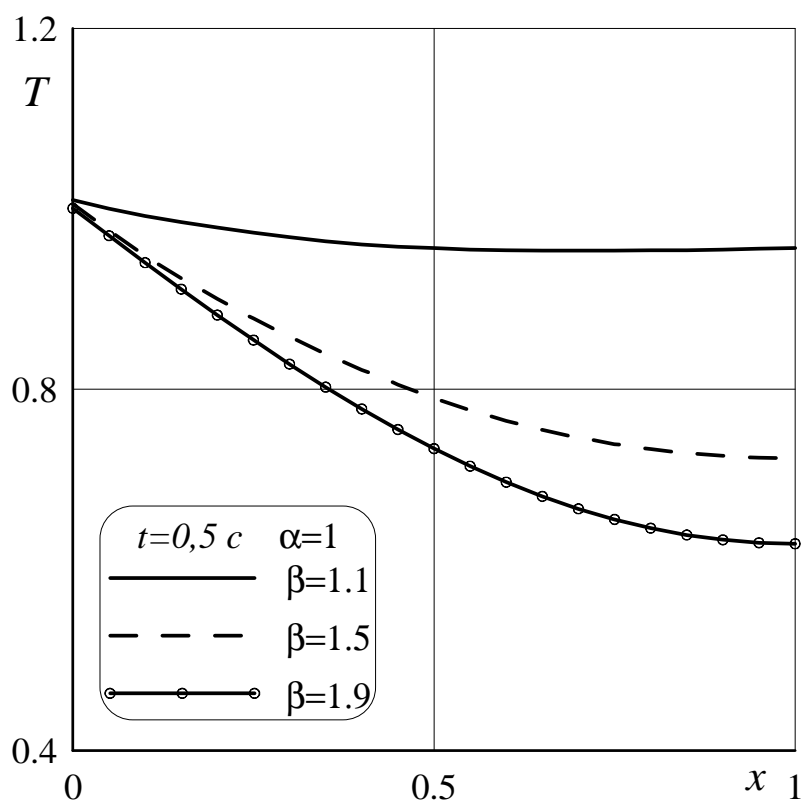


Рисунок 3.5 – Распределение температуры вдоль координаты x в момент времени $t = 0,5\text{c}$ при различных значениях β

3.2 Двумерные граничные задачи фрактальной теплопроводности

В данном разделе рассмотрена первая основная граничная задача для двумерного фрактального уравнения теплопроводности, содержащего производные Капуто и Рисса. В качестве вспомогательных задач найдены фундаментальные решения дробного оператора Лапласа и уравнения аномальной теплопроводности. При решении задач применялся метод интегральных преобразований и интегральных уравнений.

3.2.1 Фундаментальное решение дробно-дифференциального оператора Лапласа

Фундаментальное решение дробно-дифференциального оператора Лапласа будем искать из уравнения [75]

$$(-\Delta)^{\beta/2} T(x) = \delta(x), \quad 1 < \beta < 2, \quad x = (x_1, x_2) \in R^2. \quad (3.8)$$

Используя определение дробной степени Лапласиана и применяя преобразование Фурье к уравнению (3.1), получим

$$|\xi|^\beta F[T(x)] = 1, \quad F[T] = 1/|\xi|^\beta, \quad (3.9)$$

$$\text{где } F[T(x)] = \int_{R^2} T(x) e^{-i\xi x} dx.$$

Обращение преобразования Фурье в последнем уравнении (3.9) приводит к следующему выражению

$$T(r, \alpha) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \left\{ \frac{1}{\rho^\beta} \int_0^{2\pi} e^{i\rho r \cos(\varphi - \alpha)} d\varphi \right\} \rho d\rho, \quad \xi = \rho e^{i\varphi}, \quad x = r e^{i\alpha}. \quad (3.10)$$

Справедливы следующие формулы [69]

$$e^{i\rho r \cos(\varphi - \alpha)} = \cos[\rho r \cos(\varphi - \alpha)] + i \sin[\rho r \cos(\varphi - \alpha)] = J_0(\rho r) + \\ + 2 \sum_{k=1}^{\infty} J_{2k}(\rho r) \cos(2k(\varphi - \alpha)) + 2i \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k J_{2k+1}(\rho r) \cos((2k+1)(\varphi - \alpha)) \quad (3.11).$$

Подставляя (3.11) в (3.10) и интегрируя, получим искомую функцию в виде [76]

$$T(r, \alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{J_0(\rho r)}{\rho^{\beta-1}} d\rho = \frac{\Gamma(1 - \beta/2)}{2^\beta \cdot \pi \cdot \Gamma(\beta/2)} \cdot \frac{1}{r^{2-\beta}}, \quad (3.12)$$

где $\Gamma(\beta)$ – Гамма-функция Эйлера.

Фундаментальное решение (3.12) было недавно получено в работе [77] при помощи метода интегральных преобразований и контурного интегрирования.

При $\beta = 2$ уравнение (3.1) принимает вид

$$\Delta T = -\delta(x). \quad (3.13)$$

Фундаментальное решение (3.13) запишется в виде [78]

$$T_2 = -\frac{1}{2\pi} \ln r.$$

На рис. 3.6 изображена функция (3.12) в зависимости от r при различных значениях параметра β . При $\beta \rightarrow 2$ решение (3.12) совпадает с функцией T_2 с точностью до некоторой постоянной (рис. 3.7).

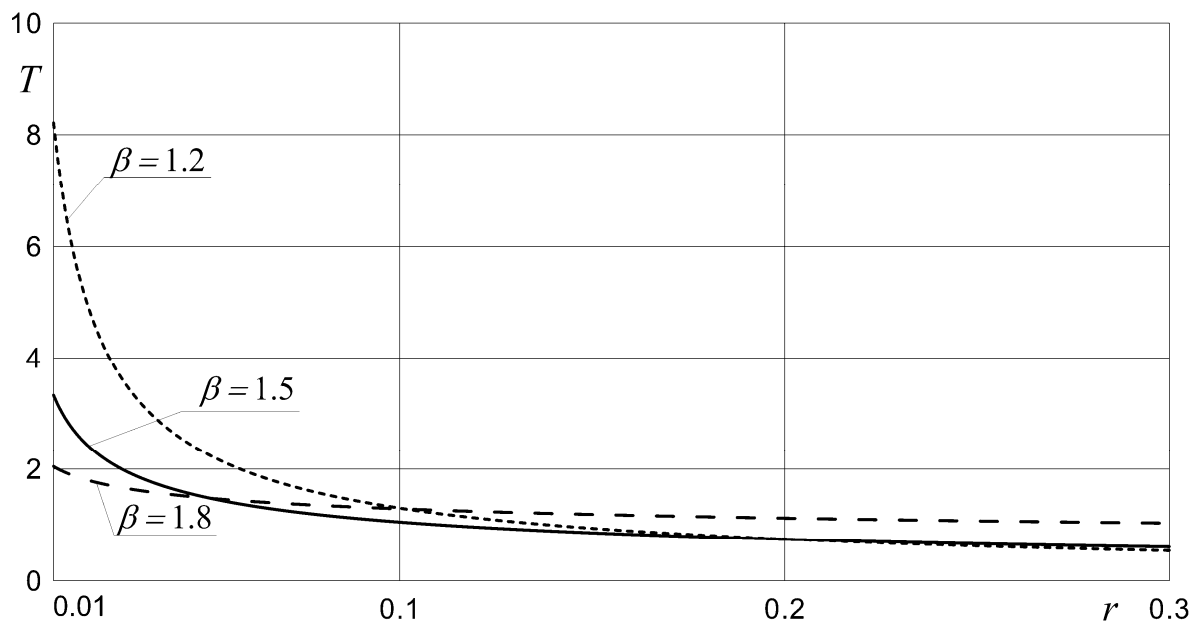


Рисунок 3.6 – Графики зависимости фундаментального решения (3.12) от координаты r при различных $1 < \beta < 2$

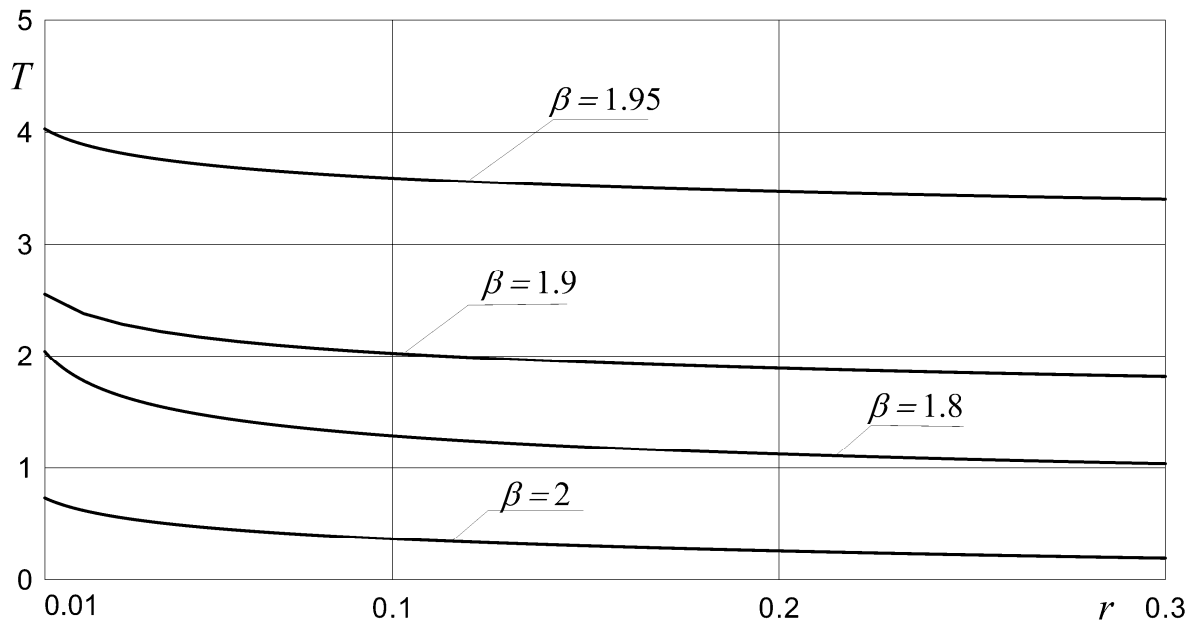


Рисунок 3.7 – Графики зависимости фундаментального решения (3.12) от координаты r при $\beta \rightarrow 2$

3.2.2 Первая основная граничная задача для дробно-дифференциального уравнения Лапласа

Рассмотрим следующую граничную задачу

$$(-\Delta)^{\beta/2} T(x) = 0, \quad 1 < \beta < 2, \quad x = (x_1, x_2) \in D \subset R^2, \quad (3.14)$$

$$T(x)|_{\Gamma} = f(x), \quad \Gamma = \bar{D} \setminus D \text{ – граница области } D. \quad (3.15)$$

На основании полученного фундаментального решения (3.12) представим функцию $T(x)$ в виде свертки

$$T(x) = A \int_{\Gamma} \frac{p(\zeta)}{|\zeta - x|^{2-\beta}} dg, \quad A = \frac{\Gamma(1 - \beta/2)}{2^{\beta} \cdot \pi \cdot \Gamma(\beta/2)}. \quad (3.16)$$

Здесь $\zeta \in \Gamma$, $p(\zeta)$ – неизвестные функции, подлежащие определению на Γ , dg – элемент дуги кривой Γ .

Подставляя представление (3.16) в граничное условие (3.15), получим функциональное равенство для определения $p(\zeta)$

$$\int_{\Gamma} \frac{p(\zeta)}{|\zeta - \zeta_0|^{2-\beta}} dg = \frac{1}{A} f(\zeta_0), \quad \zeta_0 \in \Gamma.$$

После параметризации контура Γ : $\zeta = \zeta(t) = \zeta_1(t) + i\zeta_2(t)$, $\zeta_0 = \zeta_0(t_0)$, получаем следующее уравнение

$$\int_0^{2\pi} \frac{p(t) \sqrt{\zeta_1'^2(t) + \zeta_2'^2(t)}}{|\zeta(t) - \zeta_0(t_0)|^{2-\beta}} dt = \frac{1}{A} f(t_0). \quad (3.17)$$

Уравнение (3.17) представляет собой интегральное уравнение I рода со слабой особенностью. При $1.5 < \beta < 2$ ядро данного интегрального уравнения является Фредгольмовым. Справедлива следующая

Теорема

Пусть $K(t, t_0)$ – симметричное, положительно определенное ядро и пусть уравнение

$$\int_a^b K(t, t_0) y(t) dt = f(t_0), \quad f(t_0) \in L^2[a, b] \quad (3.18)$$

имеет единственное решение. Тогда последовательность функций $\{y_n(x)\}$, определяемая рекуррентным соотношением

$$y_n(t_0) = y_{n-1}(t_0) + \lambda \left[f(t_0) - \int_a^b K(t_0, t) y_{n-1}(t) dt \right], \quad n = 1, 2, \dots, \quad (3.19)$$

где

$$y_0(t_0) \in L^2[a, b], \quad 0 < \lambda < 2\lambda_1,$$

λ_1 – наименьшее характеристическое число ядра $K(t_0, t)$, сходится (по норме $L^2[a, b]$) к решению уравнения (3.18).

В качестве примера рассмотрим граничную задачу (3.14)-(3.15) при $f(t_0) = \sin t_0$. Численное решение уравнения (3.17) проводилось при помощи метода последовательных приближений, причем в качестве нулевого приближения была выбрана функция $y_0(t_0) = 0$. Выбор параметра λ контролировался сходимостью процесса (3.19).

На рис. 3.8-3.13 изображены линии уровня функции $T(x)$ (температуры) в эллиптической и круговой области при различных значениях β .

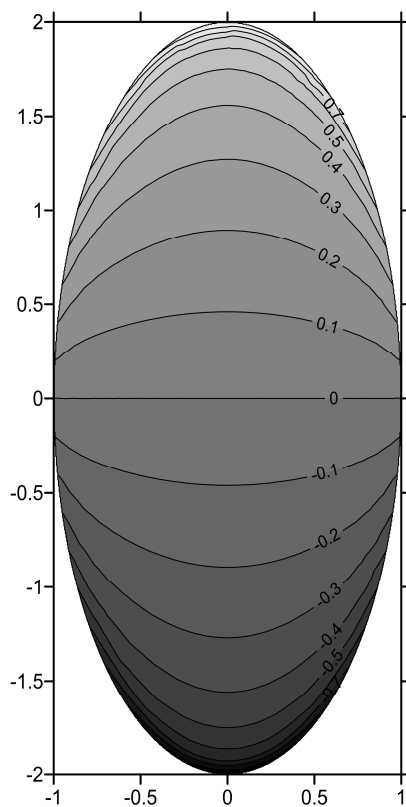


Рисунок 3.8 – Распределение $T(x)$ в эллиптической области при $\beta = 1.1$

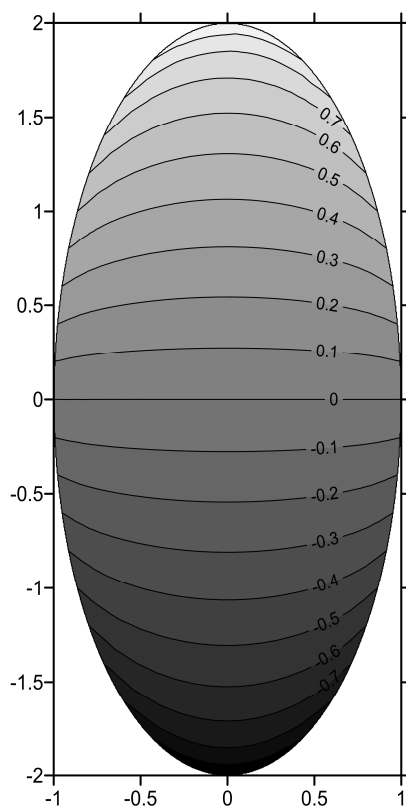


Рисунок 3.9 – Распределение $T(x)$ в эллиптической области при $\beta = 1.5$

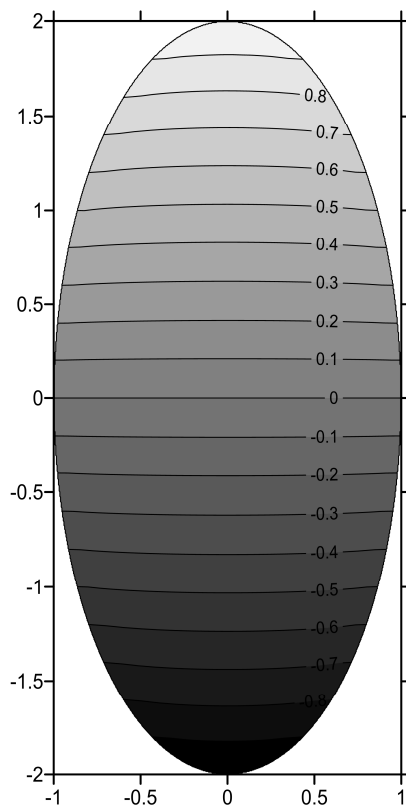


Рисунок 3.10 – Распределение $T(x)$ в эллиптической области при $\beta = 1.9$

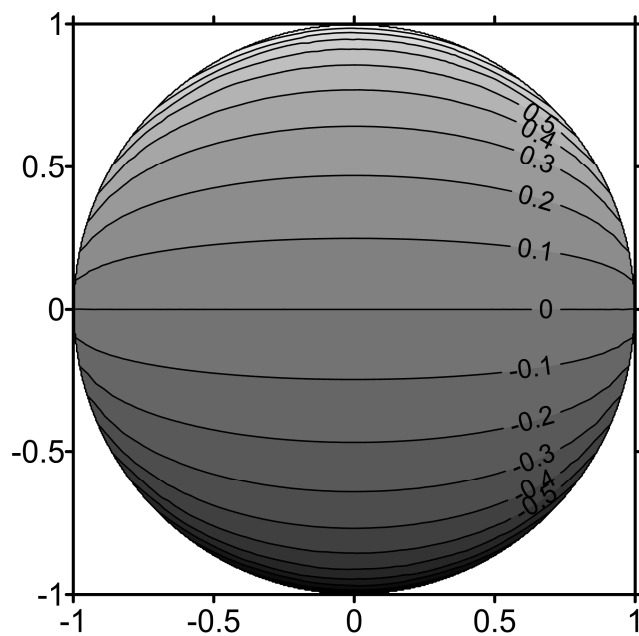


Рисунок 3.11 – Распределение $T(x)$ в круговой области при $\beta = 1.1$

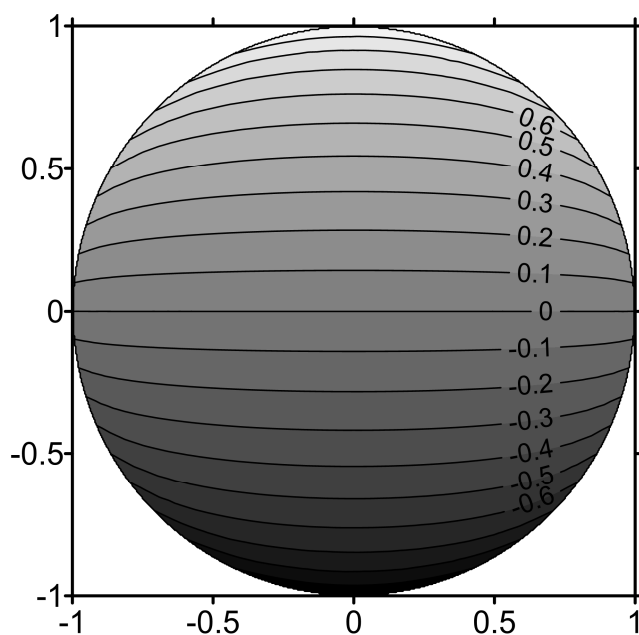


Рисунок 3.12 – Распределение $T(x)$ в круговой области при $\beta = 1.5$

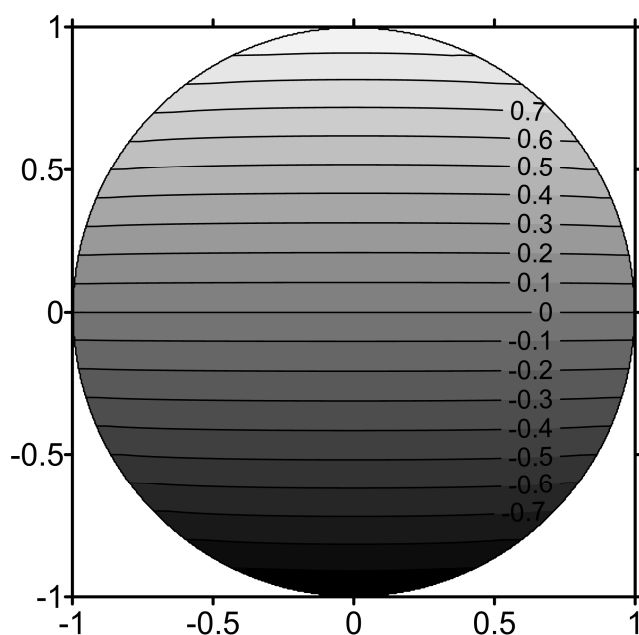


Рисунок 3.13 – Распределение $T(x)$ в круговой области при $\beta = 1.9$

На основании полученных численных результатов видим, что изменение функции в области более «равномерное» при $\beta \rightarrow 2$ (рис. 3.10, 3.13). Если рассматривать дробный Лапласиан в связи со стационарным процессом аномальной теплопроводности (диффузии), то более «плавное» распределение температуры связано с тем, что температура в некоторой точке определяется её эволюцией во

всей рассматриваемой области (эффект больших пробегов, называемых полетами Леви) — наиболее четко это видно на рис. 3.8, 3.11.

3.2.3 Фундаментальные решения фрактального уравнения теплопроводности (диффузии) в R^2

Дробное исчисление получило широкое распространение ещё в IX веке, однако только в последние годы у исследователей возник значительный интерес к дробному дифференцированию благодаря его приложениям в моделях хаотической динамики, аномальной диффузии, аномальной теплопроводности, распространения волн в пористых средах.

Явление аномальной диффузии связано с устойчивым распределением Леви (в отличие от обычной диффузии, связанной с гауссовым распределением). В работе [11] устанавливается соответствие между аномальной диффузией и аномальной теплопроводностью. Эти процессы описываются уравнениями в частных производных с дробными операторами дифференцирования Рисса и Капуто [64, 65].

В данном разделе определим фундаментальное решение следующего дробно-дифференциального уравнения теплопроводности

$$a^2 (-\Delta)^{\beta/2} T + \frac{\partial^\alpha T}{\partial t^\alpha} = \delta(x, t), \quad 0 < \alpha \leq 2, \quad 1 < \beta \leq 2, \quad (3.20)$$

где T — температура, a^2 — коэффициент температуропроводности, $t > 0$, $x = (x_1, x_2)$, $\partial^\alpha / \partial t^\alpha$ — дробная производная Капуто [32], $(-\Delta)^{\beta/2}$ — дробная производная Рисса [40], $\delta(x, t)$ — дельта-функция Дирака.

Применяя преобразование Фурье по пространственной координате $x = (x_1, x_2)$ и преобразование Лапласа по времени, получим следующее уравнение

$$\left(|\xi|^\beta + \frac{s^\alpha}{a^2} \right) \bar{T} = \frac{1}{a^2}, \quad \bar{T}(\xi, s) = \int_0^\infty e^{-st} \int_{-\infty}^{+\infty} T(x, t) e^{-i\xi x} dx dt. \quad (3.21)$$

Введем в рассмотрение полярные координаты $\xi = (\xi_1, \xi_2)$, $\xi_1 = \rho \cos \varphi$, $\xi_2 = \rho \sin \varphi$. Принимая во внимание уравнение (3.21) и формулы (3.11), представим решение уравнения (3.20) в виде

$$T(x, t) = \frac{1}{2a^2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{\rho J_0(\rho|x|)}{\rho^\beta + \frac{s^\alpha}{a^2}} d\rho \right\} ds, \quad (3.22)$$

где $J_0(x)$ – функция Бесселя.

Рассмотрим несколько частных случаев.

Пусть $\alpha = \beta = 2$. Уравнение (3.20) является волновым уравнением

$$\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} - a^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) T = \delta(x, t). \quad (3.23)$$

Решение уравнения (3.23) хорошо известно и определяется следующим выражением [78]

$$T(x, t) = \frac{H(at - |x|)}{2\pi a \sqrt{a^2 t^2 - |x|^2}}, \quad (3.24)$$

где $H(x)$ – функция Хевисайда.

Интеграл в правой части (3.22) преобразуется следующим образом

$$T(x, t) = -\frac{i}{4a^2\pi^2} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} K_0\left(\frac{|x|s}{a}\right) ds. \quad (3.25)$$

При $\alpha = 1$, $\beta = 2$ в левой части уравнения (3.20) получаем оператор теплопроводности, фундаментальное решение которого имеет вид [78]

$$T(x, t) = \frac{H(t)}{4a^2\pi t} e^{-\frac{|x|^2}{4a^2 t}}. \quad (3.26)$$

Представление (3.22) в этом случае запишется так

$$T(x, t) = -\frac{i}{4\pi^2 a^2} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} K_0\left(\frac{|x|\sqrt{s}}{a}\right) ds. \quad (3.27)$$

На рис. 3.14, 3.15 представлены графики зависимости температуры от времени при различных α и β для следующих значений параметров: $|x| = 1$ м, $a = 1$ м²/с. Результаты расчетов проводились согласно полученным соотношениям (3.22), (3.24)

-(3.27). Обращение преобразования Лапласа выполнялось численно при помощи метода, описанного в работе [79].

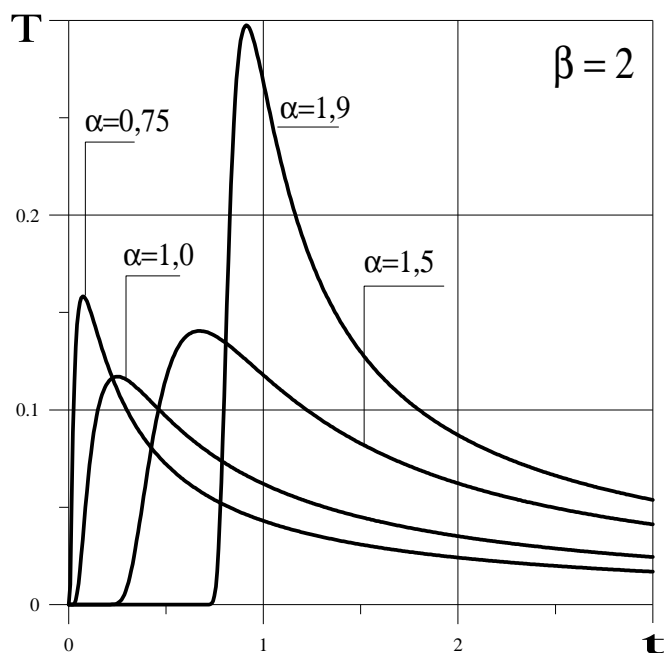


Рисунок 3.14 – Зависимость температуры от времени при различных значениях α

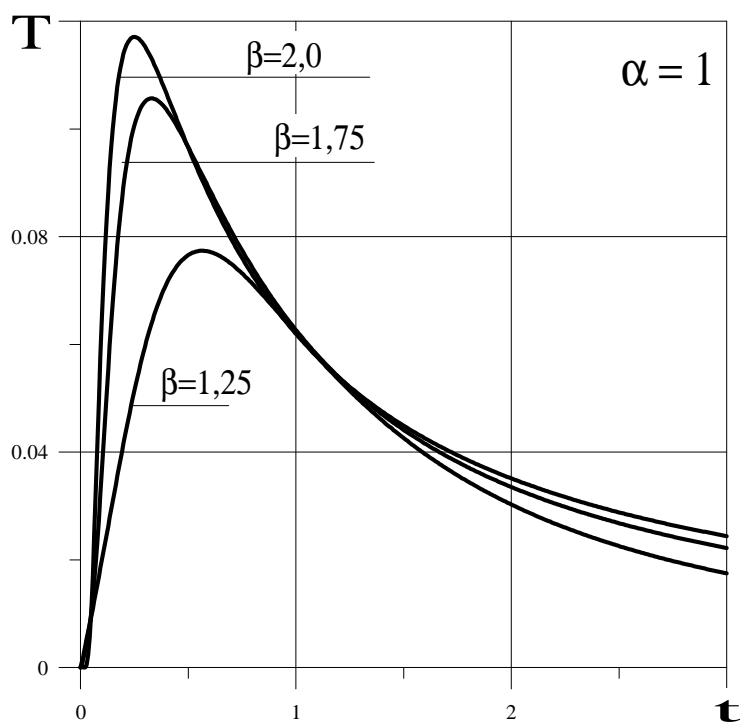


Рисунок 3.15 – Зависимость температуры от времени при различных значениях β

Достоверность полученных результатов подтверждается совпадением фундаментального решения (3.22) с известными частными решениями (3.24) и (3.26) (рис. 3.14-3.15).

3.2.4 Фрактальная теплопроводность в тонкой пластинке, нагреваемой по краю

Рассмотрим тонкую пластинку, на границе которой задан температурный нагрев. Пластинка занимает область $D \in R^2$ с достаточно гладкой границей Γ . Предположим, что процесс теплопроводности описывается обобщенным законом Фика [39].

Математическую формулировку задачи запишем следующим образом

$$a^2 (-\Delta)^{\beta/2} T(x, t) + \frac{\partial^\alpha T(x, t)}{\partial t^\alpha} = 0, \quad t > 0, \quad x = (x_1, x_2) \in D, \quad (3.28)$$

$$T(\zeta_0, t) = f(\zeta_0, t), \quad \zeta_0 \in \Gamma, \quad 0 < \alpha \leq 2, \quad 1 < \beta < 2. \quad (3.29)$$

Предположим, что температура $T(x, t)$ и заданная функция $f(\zeta_0, t)$ гармонически изменяются во времени. Тогда граничная задача (3.28)-(3.29) будет иметь вид

$$a^2 (-\Delta)^{\beta/2} \bar{T} = (-i\omega)^\alpha \bar{T}, \quad (3.30)$$

$$\bar{T}(\zeta_0, \omega) = \bar{f}(\zeta_0, \omega), \quad (3.31)$$

где $T(x, t) = \text{Re}(e^{-i\omega t} \bar{T}(x, \omega))$, $f(\zeta_0, t) = \text{Re}(e^{-i\omega t} \bar{f}(\zeta_0, \omega))$.

Согласно п. 3.2.1, фундаментальное решение уравнения (3.30) будет иметь вид

$$G(r, \omega) = \frac{1}{2\pi a^2} \int_0^\infty \frac{\rho J_0(\rho r)}{\rho^\beta + \frac{(-i\omega)^\alpha}{a^2}} d\rho, \quad r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}. \quad (3.32)$$

На основании (3.32) построим интегральное представление температурной функции в виде свертки

$$\bar{T}(x, \omega) = \int_\Gamma p(\zeta) G(r_1, \omega) dg, \quad r_1 = \sqrt{(\zeta_1 - x_1)^2 + (\zeta_2 - x_2)^2}, \quad \zeta = (\zeta_1, \zeta_2), \quad (3.33)$$

где $p(\zeta)$ – функция, подлежащая определению на Γ , dg – элемент контура Γ .

Подставим представление (3.33) в граничное условие (3.31), будем иметь

$$\int_\Gamma p(\zeta) G(r_{10}, \omega) dg = \bar{f}(\zeta_0, \omega), \quad r_{10} = \sqrt{(\zeta_1 - \zeta_{01})^2 + (\zeta_2 - \zeta_{02})^2}.$$

После параметризации контура Γ : $\zeta = \zeta(t) = \zeta_1(t) + i\zeta_2(t)$, $\zeta_0 = \zeta_0(t_0)$, получаем следующее уравнение

$$\int_0^{2\pi} p(t)G(r_{10}, \omega) \sqrt{\zeta_1'^2(t) + \zeta_2'^2(t)} dt = \bar{f}(t_0, \omega). \quad (3.34)$$

Поскольку порядок особенности фундаментального решения уравнения (3.30) определяется оператором Лапласа, уравнение (3.34) является интегральным уравнением I рода со слабой особенностью (п. 3.2.2). Оно может быть решено методом последовательных приближений для любого значения параметра ω .

На рис. 3.16-3.18 представлены результаты расчетов функции $|\bar{T}|$ в круговой области радиуса $R = 1$ мм при $\bar{f}(t_0, \omega) = \sin t_0$, $\omega = 10 \text{ с}^{-1}$, $a = 1 \text{ м/с}^2$ для различных значений α и β .

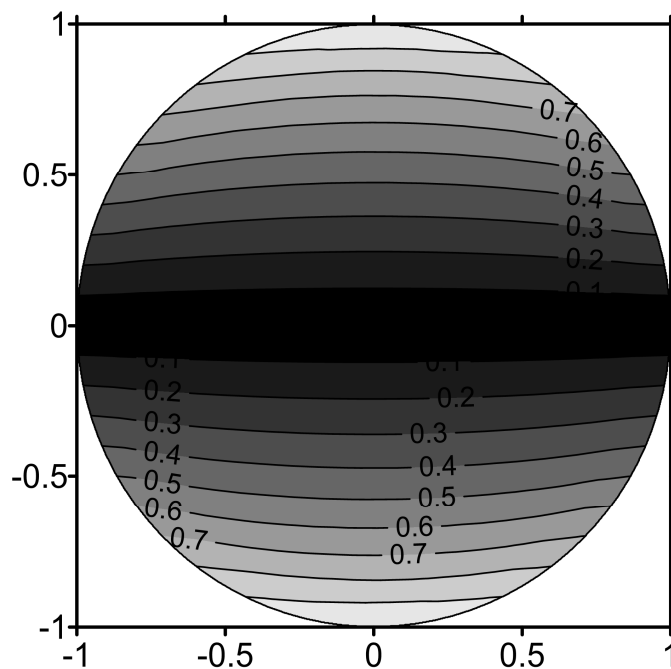


Рисунок 3.16 – Распределение амплитуды колебаний температуры в круговой области при $\alpha = 0.1$, $\beta = 1.9$

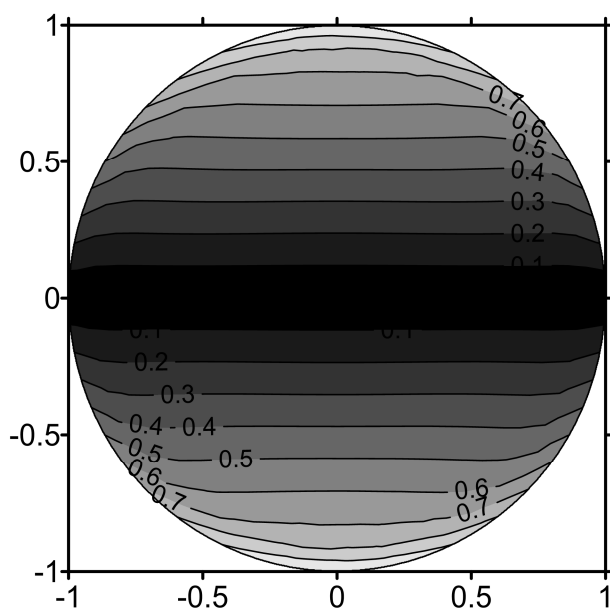


Рисунок 3.17 – Распределение амплитуды колебаний температуры в круговой области при $\alpha = 1, \beta = 1.5$

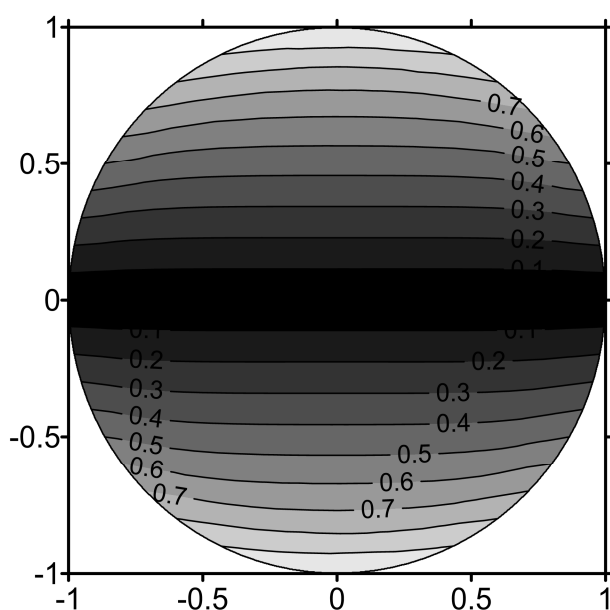


Рисунок 3.18 – Распределение амплитуды колебаний температуры в круговой области при $\alpha = 1, \beta = 1.9$

На рис. 3.18 представлен случай, наиболее близкий к классической теплопроводности. На рис. 3.16-3.17 приведены примеры аномальной теплопроводности – здесь процесс более медленный.

4 ОДНОМЕРНЫЕ МОДЕЛИ ФРАКТАЛЬНОЙ ТЕРМОУПРУГОСТИ

4.1 Квазистатическая задача термоупругости для дифференциального уравнения теплопроводности с производными Рисса и Капуто.

Рассмотрим полупространство, граница которого нагревается скачкообразно. При этом предполагается, что начальные условия для температуры однородны. Тогда уравнения соответствующей начально-краевой задачи квазистатической термоупругости имеют вид [21, 40]

уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial^\alpha T}{\partial t^\alpha} - a R_{x_1}^\beta (T(x_1, t)) = 0, \quad 0 < \alpha < 2, \quad 1 < \beta < 2, \quad x_1 > 0, \quad t > 0, \quad (4.1)$$

уравнения движения

$$\mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + (\lambda + \mu) \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_j \partial x_i} = \gamma \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (4.2)$$

закон Гука

$$\sigma_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \lambda \operatorname{div} \vec{u} - \gamma T, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (4.3)$$

начальные условия

$$T(x_1, 0) = 0, \quad 0 < \alpha \leq 1$$

$$T(x_1, 0) = \frac{\partial T(x_1, t)}{\partial t} \Big|_{t=0} = 0, \quad 1 < \alpha \leq 2, \quad (4.4)$$

граничные условия

$$T(0, t) = P(t). \quad (4.5)$$

Здесь $T(x_1, t)$ – температурная функция, u_i – компоненты вектора перемещений, λ, μ – постоянные Ламе, δ_{ij} – символ Кронекера, a – коэффициент теплопроводности, γ – коэффициент теплового расширения, σ_{ij} – компоненты тензора напряжений, $\partial^\alpha / \partial t^\alpha$ – оператор дробной производной в

смысле Капуто [13, 27], $R_{x_1}^\beta$ – оператор дробной конечной производной Рисса [26, 70], $P(t)$ – заданная функция, скачкообразно изменяющаяся в нуле.

Вводя потенциал термоупругого перемещения $\Phi(x_1, t)$ [71], из уравнений (4.2), (4.3) получим

$$u_i = \frac{\partial \Phi}{\partial x_i}, \quad \Delta \Phi = \frac{\gamma}{\lambda + 2\mu} T, \quad \sigma_{ij} = 2\mu \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} - \delta_{ij} \Delta \right) \Phi.$$

Тогда для данной задачи имеем

$$\begin{aligned} \sigma_{11} = \sigma_{12} = \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0, \\ \sigma_{22} = \sigma_{33} = -2\mu \frac{d^2 \Phi}{dx_1^2} = -2\mu m T, \quad m = \frac{\gamma}{\lambda + 2\mu}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Таким образом, для получения напряжений в рассматриваемой области необходимо определить температуру из уравнения (4.1), начальных условий (4.4) и граничных условий (4.5).

Уравнение теплопроводности.

Применим преобразование Лапласа по t к уравнению (4.1) и условию (4.5) при выполнении начальных условий (4.4).

Приходим к следующей граничной задаче

$$a R_{x_1}^\beta T - s^\alpha \bar{T} = 0, \quad (4.7)$$

$$\bar{T}(0, s) = \bar{P}(s), \quad (4.8)$$

где $\bar{f}(x_1, s) = L[f(x_1, t)](s)$.

Далее обратимся к разложению конечной производной Рисса, которое дается в работе [70]

$$R_x^\beta \varphi(x) = \frac{I_{0+}^{2-\beta} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + I_{-}^{2-\beta} \frac{d^2 \varphi}{dx^2}}{2 \cos \frac{(2-\beta)\pi}{2}}, \quad 1 < \beta < 2, \quad (4.9)$$

где

$$I_{0+}^\alpha \varphi(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^x (x - \zeta)^{\alpha-1} \varphi(\zeta) d\zeta,$$

$$I_{-}^{\alpha} \varphi(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^{\infty} (\zeta - x)^{\alpha-1} \varphi(\zeta) d\zeta.$$

— операторы дробного интегрирования Римана-Лиувилля, $\alpha > 0$.

Для того, чтобы получить формулу sin-преобразования Фурье производной Рисса, запишем следующие соотношения [27]

$$\begin{aligned} F_s(I_{0+}^{\alpha} \varphi) &= \xi^{-\alpha} \left(-\sin \frac{\alpha\pi}{2} F_c \varphi + \cos \frac{\alpha\pi}{2} F_s \varphi \right), \\ F_s(I_{-}^{\alpha} \varphi) &= \xi^{-\alpha} \left(\sin \frac{\alpha\pi}{2} F_c \varphi + \cos \frac{\alpha\pi}{2} F_s \varphi \right), \quad 0 < \alpha < 1, \\ F_s(\varphi) &= \int_0^{\infty} \varphi(x) \sin \xi x dx, \quad F_c(\varphi) = \int_0^{\infty} \varphi(x) \cos \xi x dx. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Применим к обеим частям (4.9) sin-преобразование Фурье, с учетом формул (4.10) получим

$$F_s[R_{x_1}^{\beta} \varphi(x)] = -\xi^{\beta} F_s[\varphi] + \xi^{\beta-1} \varphi(0), \quad 1 < \beta < 2. \quad (4.11)$$

Теперь преобразуем уравнение (4.7) с помощью синус-преобразования Фурье. Применяя полученное соотношение (4.11) и граничное условие (4.8), приходим к следующему алгебраическому уравнению

$$\xi^{\beta} F_s[\bar{T}(x_1, s)] + \frac{s^{\alpha}}{a} F_s[\bar{T}(x_1, s)] = \xi^{\beta-1} \bar{P}(s).$$

Решение последнего уравнения дает

$$F_s[\bar{T}(x_1, s)] = \frac{\xi^{\beta-1} a \bar{P}(s)}{a \xi^{\beta} + s^{\alpha}}. \quad (4.12)$$

Для того, чтобы получить искомую температурную функцию, необходимо к правой части (4.12) применить обратные операторы F_s^{-1} , L^{-1} .

Обозначим

$$f(t) = L^{-1} \left[\frac{1}{a \xi^{\beta} + s^{\alpha}} \right].$$

Тогда

$$L^{-1} \left[\frac{\bar{P}(s)}{a \xi^{\beta} + s^{\alpha}} \right] = \int_0^t f(\tau) P(t - \tau) d\tau \quad (4.13)$$

Имеет место соотношение [24, 31]

$$L^{-1}\left[\frac{1}{s^\alpha + b}\right] = t^{\alpha-1}E_{\alpha,\alpha}(-bt^\alpha), \quad b > 0, \quad \alpha > 0, \quad (4.14)$$

где $E_{\alpha,\beta}(x)$ – обобщенная функция Миттаг-Леффлера [72].

Выполняя в (4.12) обращение преобразования Лапласа и синус-преобразования Фурье, с учетом (4.13) (4.14) получаем

$$T(x_1, t) = \frac{2a}{\pi} \int_0^\infty \xi^{\beta-1} \left(\int_0^t \tau^{\alpha-1} E_{\alpha,\alpha}(-a\xi^\beta \tau^\alpha) P(t-\tau) d\tau \right) \sin \xi x_1 d\xi. \quad (4.15)$$

Данное выражение и дает решение поставленной задачи. Несобственный интеграл в правой части (4.15) является сходящимся, однако его вычисление вызывает некоторые трудности, так как ряд, представляющий функцию $E_{\alpha,\alpha}(-a\xi^\beta \tau^\alpha)$, плохо суммируется при больших значениях ее аргумента. Дело в том, что каждый член данного знакопеременного ряда имеет большое абсолютное значение, в то время как значение обобщенной функции Миттаг-Леффлера (суммы данного ряда) — величина малая. Подобная проблема возникает при вычислении функции Райта [73]. В данной работе при вычислении функции (4.15) используется асимптотическое представление функции Миттаг-Леффлера.

Численная реализация.

В качестве примера рассмотрим следующую задачу. Пусть граница полупространства нагревается скачкообразно в начальный момент времени, т.е.

$$P(t) = \begin{cases} 1, & t \geq 0, \\ 0, & t < 0. \end{cases} \quad (4.16)$$

Функция Миттаг-Леффлера, входящая в состав (4.15), представима рядом

$$E_{\alpha,\alpha}(-z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-z)^n}{\Gamma(\alpha n + \alpha)}, \quad z > 0. \quad (4.17)$$

При больших абсолютных значениях аргумента имеет место асимптотическое представление [72]

$$E_{\alpha,\alpha}(-z) = -\sum_{n=2}^N \frac{(-z)^{-n}}{\Gamma(\alpha - \alpha n)} + O(z^{-N}), \quad z > 0, \quad z \rightarrow \infty. \quad (4.18)$$

С учетом (4.17), (4.18) получаем

$$E_{\alpha,\alpha}(-z) \approx \begin{cases} \sum_{n=0}^M \frac{(-z)^n}{\Gamma(\alpha n + \alpha)}, & z < z_0, \\ -\sum_{n=2}^N \frac{(-z)^{-n}}{\Gamma(\alpha - \alpha n)}, & z \geq z_0. \end{cases} \quad (4.19)$$

Значение z_0 определяется экспериментально и зависит от значения параметра α . Далее, подставляя представление (4.19) и функцию (4.16) в (4.15), получаем следующие формулы для приближенного вычисления температуры

$$T(x_1, t) \approx \frac{2a}{\pi} \int_0^{\infty} K(t, \xi) \xi^{\beta-1} \sin \xi x_1 d\xi, \quad x_1 > 0, \quad t > 0,$$

$$K(t, \xi) = \begin{cases} t^\alpha \sum_{n=0}^{M_1} \frac{(-a\xi^\beta t^\alpha)^n}{(\alpha + \alpha n) \Gamma(\alpha + \alpha n)}, & -a\xi^\beta t^\alpha < z_0, \\ \frac{1}{-a\xi^\beta} \left[\sum_{n=0}^{M_2} \frac{z_0^{n+1}}{(\alpha + \alpha n) \Gamma(\alpha + \alpha n)} + \sum_{n=0}^{M_3} \frac{z_0^{-n+1}}{(\alpha - \alpha n) \Gamma(\alpha - \alpha n)} \right] - \\ - t^\alpha \sum_{n=2}^{M_4} \frac{(-a\xi^\beta t^\alpha)^{-n}}{(\alpha - \alpha n) \Gamma(\alpha - \alpha n)}, & -a\xi^\beta t^\alpha \geq z_0. \end{cases} \quad (4.20)$$

Константы M_1, M_2, M_3, M_4 определяются необходимой точностью вычислений и скоростью сходимости соответствующих рядов.

Ниже представлены графики зависимости температуры T и напряжения σ_{22} от времени и пространственной координаты при разных значениях α и β .

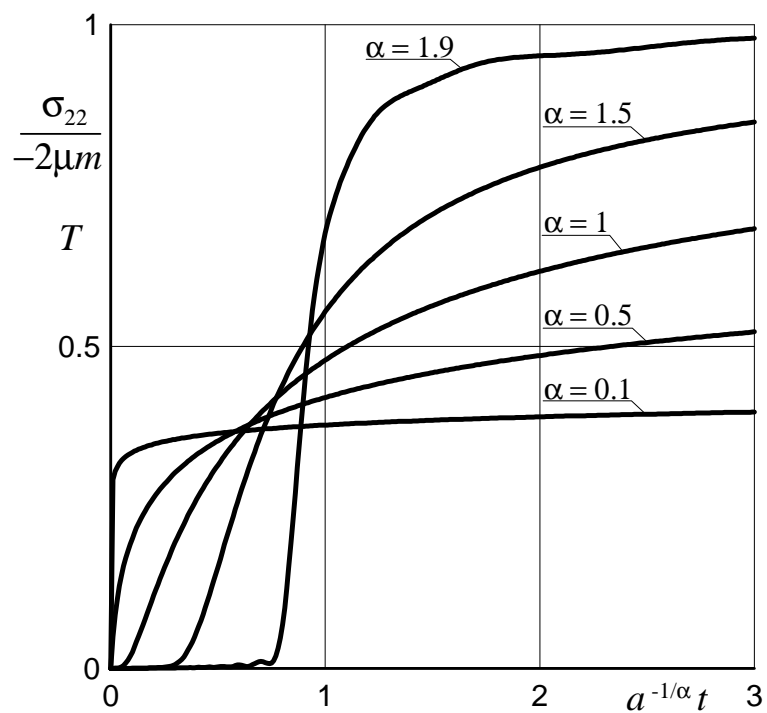


Рисунок 4.1 – Зависимость температуры и напряжения от времени при различных значениях α

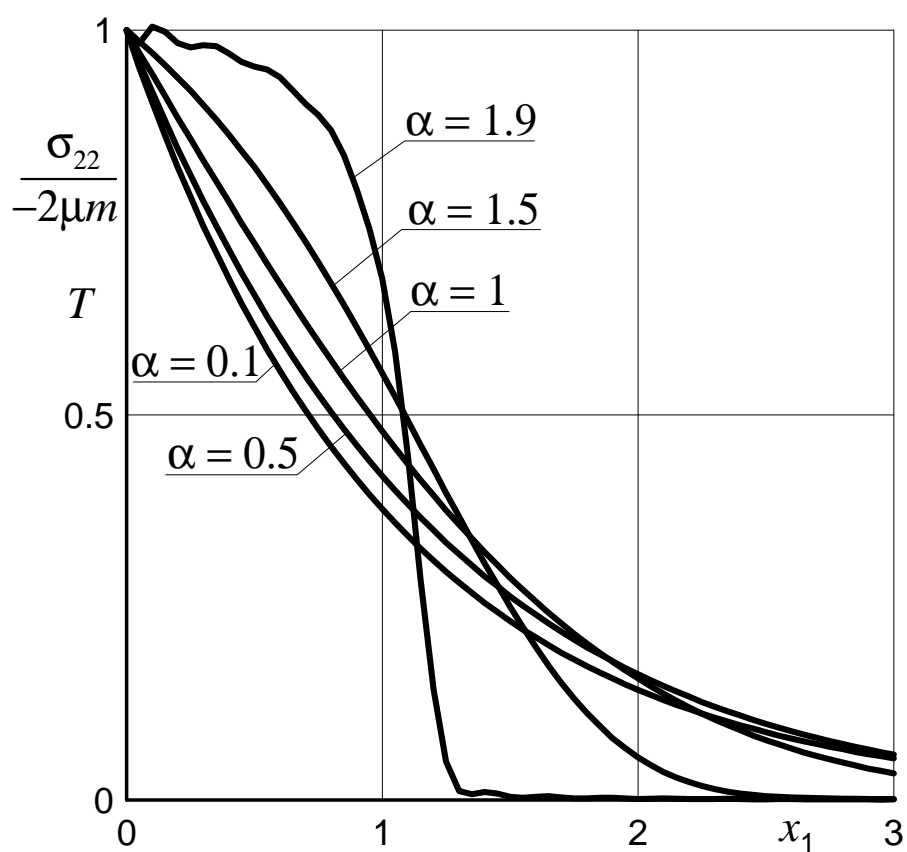


Рисунок 4.2 – Распределение температуры и напряжения вдоль пространственной координаты при различных значениях α

На рис. 3.10 показано изменение температуры по времени на расстоянии 1 м от границы полупространства при $\beta = 0.99$. Эти условия соответствуют такому процессу теплопереноса, при котором учитывается влияние памяти: температура определяется её эволюцией в течение всего предшествующего периода теплопроводности. Поэтому при малых α происходит мгновенное нагревание и установление граничной температуры (равной единице), а при $\alpha \rightarrow 2$ нагревание в рассматриваемой точке происходит только через некоторое время. То же наблюдается и на графиках рис. 3.11, только речь идет об уменьшении температуры при удалении от границы в данный момент времени наблюдения $t = 1$ с. В работе [11] указано, что при $0 < \alpha < 1$ система ведет себя как термоизолятор, а при $1 < \alpha < 2$ мы имеем аномальную теплопроводность с коэффициентом проводимости, стремящемся к бесконечности в термодинамическом пределе. Случай $\alpha = 1$ соответствует нормальной (классической) теплопроводности, описанной законом Фурье.

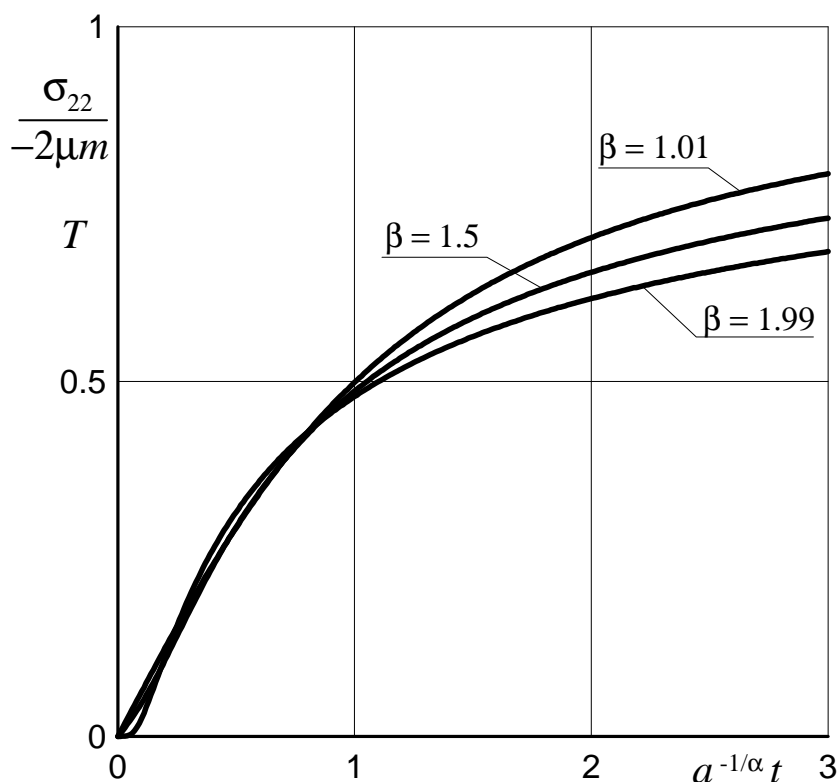


Рисунок 4.3 – Зависимость температуры и напряжения от времени при различных значениях β

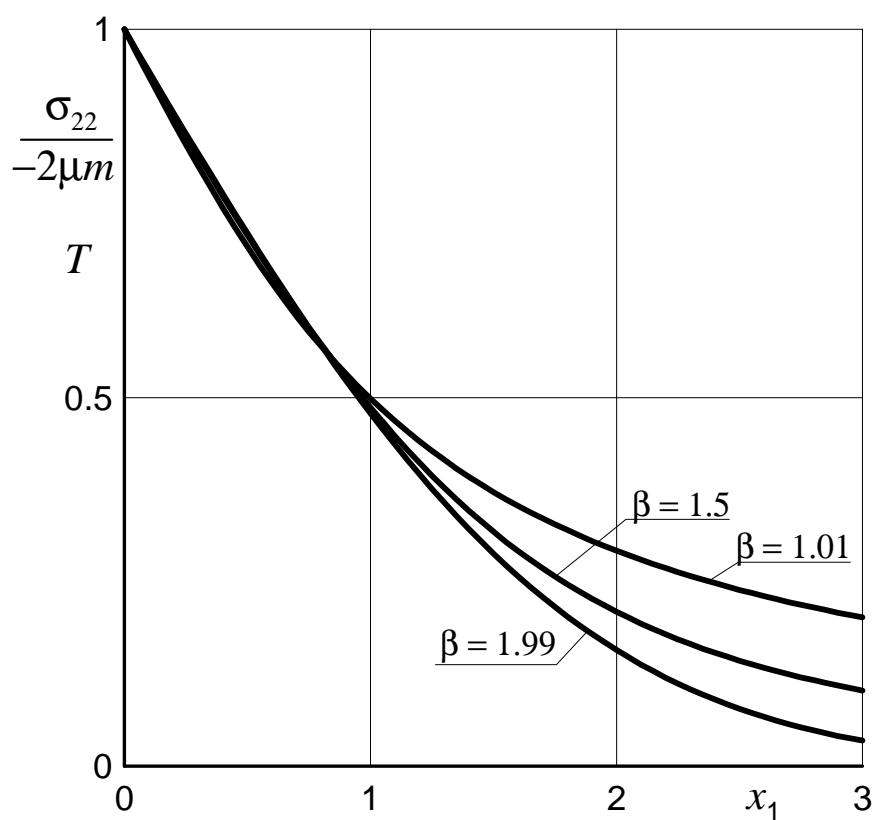


Рисунок 4.4 – Распределение температуры и напряжения вдоль пространственной координаты при различных значениях β

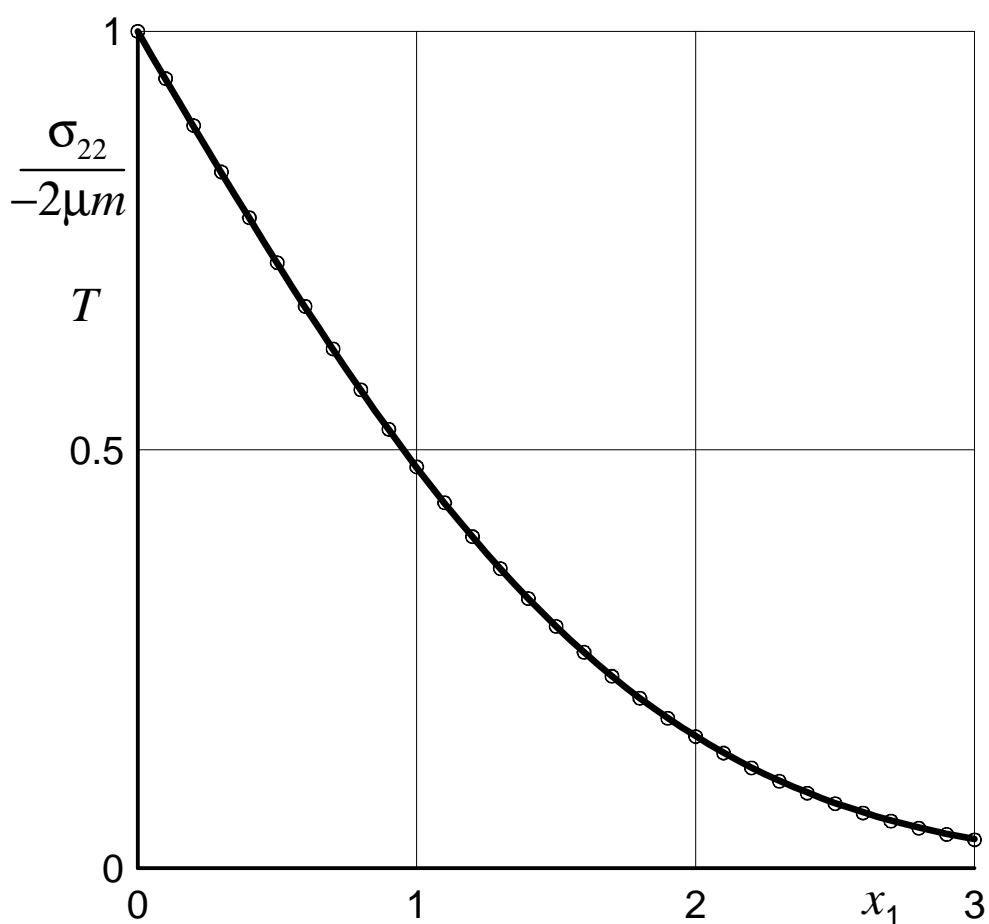


Рисунок 4.5 – Сравнение решений классической и фрактальной задач термоупругости

На рис. 4.3, 4.4 представлены графики зависимости температуры от времени и координаты при различных β и $\alpha = 1$. Здесь рассматривается процесс теплопроводности, учитывающий пространственную нелокальность, т.е. изменение температуры зависит не только от ее значений в окрестности рассматриваемой точки, но и от значений в удаленных точках пространства. Поэтому на приведенных графиках различия, в основном, сказываются при установлении процесса (по времени), либо на удалении от границы полупространства (при $x_1 > 1$).

При $\alpha = 1$, $\beta = 2$ уравнение (4.1) переходит в классическое уравнение теплопроводности, основанное на законе теплопроводности Фурье. Его решение при выполнении начальных условий (4.4) и граничного условия (4.5), (4.16), имеет вид [71]

$$T(x_1, t) = \operatorname{erfc}\left(\frac{x_1}{2\sqrt{at}}\right), t > 0. \quad (4.21)$$

На рис. 4.5 показано сравнение решения (4.20) при $\alpha = 1$, $\beta \rightarrow 2$ с известным решением (4.21), которое нанесено точками.

4.2 Температурные напряжения, возникающие в бесконечном стержне в рамках пространственно нелокальной модели термоупругости

В классической теории термоупругости связь между напряжениями, перемещениями и температурой определяется соотношениями Дюгамеля-Неймана

$$\sigma_{ij} = \mu(\partial_j u_i + \partial_i u_j) + [\lambda e - \beta T] \delta_{ij}, \quad (4.22)$$

где λ , μ – постоянные Ламе, β – коэффициент температурных напряжений, σ_{ij} – компоненты тензора напряжений, u_i – компоненты вектора перемещений, $e = \partial_1 u_1 + \partial_2 u_2 + \partial_3 u_3$, $\partial_i u_j = \partial u_j / \partial x_i$, T – температура.

В одномерном случае (4.22) запишется в виде

$$\sigma(x, t) = (2\mu + \lambda)e - \beta T(x, t), e = \partial u / \partial x. \quad (4.23)$$

Следуя работе [56], обобщим (4.23) следующим образом

$$\sigma(x, t) = (2\mu + \lambda)e_\gamma - \beta T, \\ e_\gamma = \frac{1}{2} [{}^C D_{a+}^\gamma u(x, t) - {}^C D_{b-}^\gamma u(x, t)], \quad 0 < \gamma < 1. \quad (4.24)$$

Подставляя (4.24) в уравнение движения $\rho \partial^2 u(x, t) / \partial t^2 = \partial \sigma / \partial x$, будем иметь

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - E_0 \frac{\partial}{\partial x} [{}^C D_{a+}^\gamma u(x, t) - {}^C D_{b-}^\gamma u(x, t)] = -B \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (4.25)$$

где $E_0 = (2\mu + \lambda) / (2\rho)$, $B = \beta / \rho$.

Температура T определяется из дробно-дифференциального уравнения теплопроводности [40] (при отсутствии тепловых источников)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^\beta T}{\partial |x|^\beta}, \quad 1 < \beta < 2. \quad (4.26)$$

Соотношения (4.24)-(4.26) описывают одномерную модель динамической несвязанной термоупругости, учитывающую нелокальные упругие взаимодействия между частицами среды, а также аномальный характер теплопроводности.

В качестве примера реализации данной модели рассмотрим задачу Коши для фрактального уравнения теплопроводности и вычислим соответствующие температурные напряжения.

Математическую формулировку задачи запишем следующим образом

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - E_0 \frac{\partial}{\partial x} [{}^C D_+^\gamma u(x, t) - {}^C D_-^\gamma u(x, t)] = -B \frac{\partial T}{\partial x}, \quad 0 < \gamma < 1, \quad (4.27)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^\beta T}{\partial |x|^\beta}, \quad 1 < \beta < 2, \quad -\infty < x < +\infty, \quad t > 0, \quad (4.28)$$

начальные условия

$$T(x, 0) = \delta(x), \quad u(x, 0) = 0, \quad (4.29)$$

где $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака [78].

Применим к уравнениям (4.27), (4.28) интегральные преобразования Фурье и Лапласа с учетом начальных условий (4.29). Принимая во внимание формулы (1.5), (1.7) и (1.9), получим

$$\{p^2 - E_0(-i\omega)((-i\omega)^\gamma - (i\omega)^\gamma)\}U(\omega, p) = (i\omega B)Q(\omega, p), \quad (4.30)$$

$$(|\omega|^\beta + p)Q = 1, U = LF[u], Q = LF[T]. \quad (4.31)$$

Выполним обращение интегральных преобразований в уравнениях (4.30), (4.31), после чего будем иметь

$$T(x, t) = \frac{H(t)}{\pi} \int_0^\infty e^{-\omega^\beta t} \cos \omega x d\omega,$$

$$u(x, t) = \frac{B}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega}{A^2 \omega^{\gamma+1} + \omega^{2\beta}} \left\{ e^{-\omega^\beta t} - \cos A \omega^{\frac{\gamma+1}{2}} t + \frac{\omega^\beta}{A \omega^{\gamma+1}} \sin A \omega^{\frac{\gamma+1}{2}} t \right\} \sin \omega x d\omega,$$

где $H(t)$ – функция Хевисайда, $A = \sqrt{2E_0 \sin \frac{\gamma\pi}{2}}$.

На рис. 4.6-4.11 представлены результаты расчетов перемещения u и температуры T для различных значений показателей β и γ ($B = E_0 = 1$, $t_1 = 1c$, $t_2 = 3c$, $t_3 = 5c$, $t_4 = 7c$).

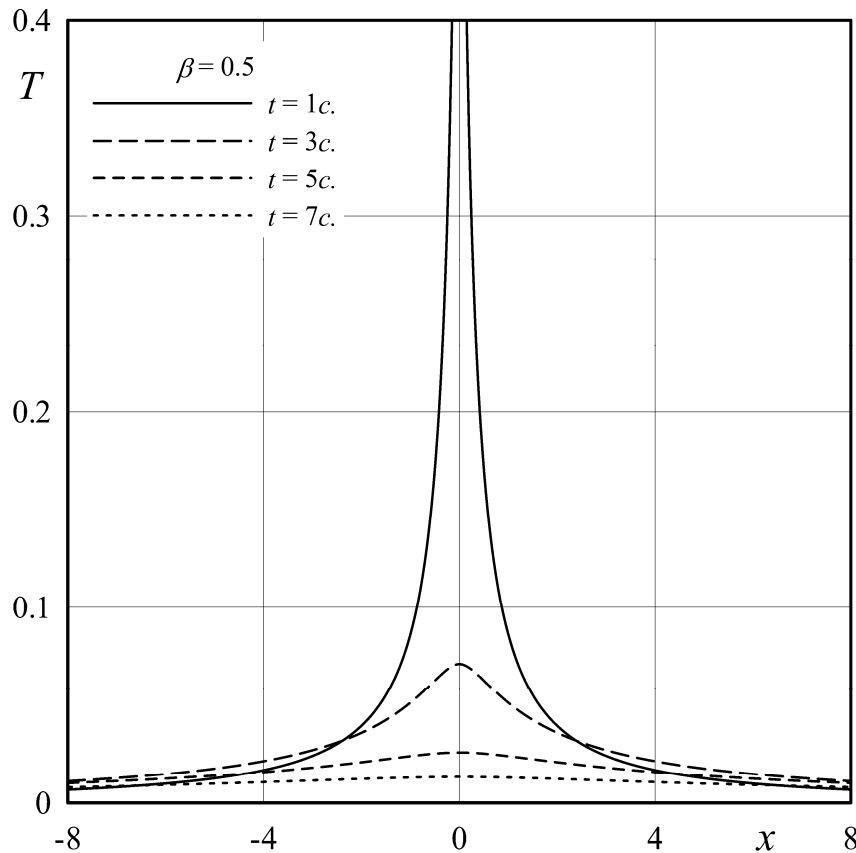


Рисунок 4.6 – Распределение температуры в стержне для различных моментов времени при $\beta = 0.5$

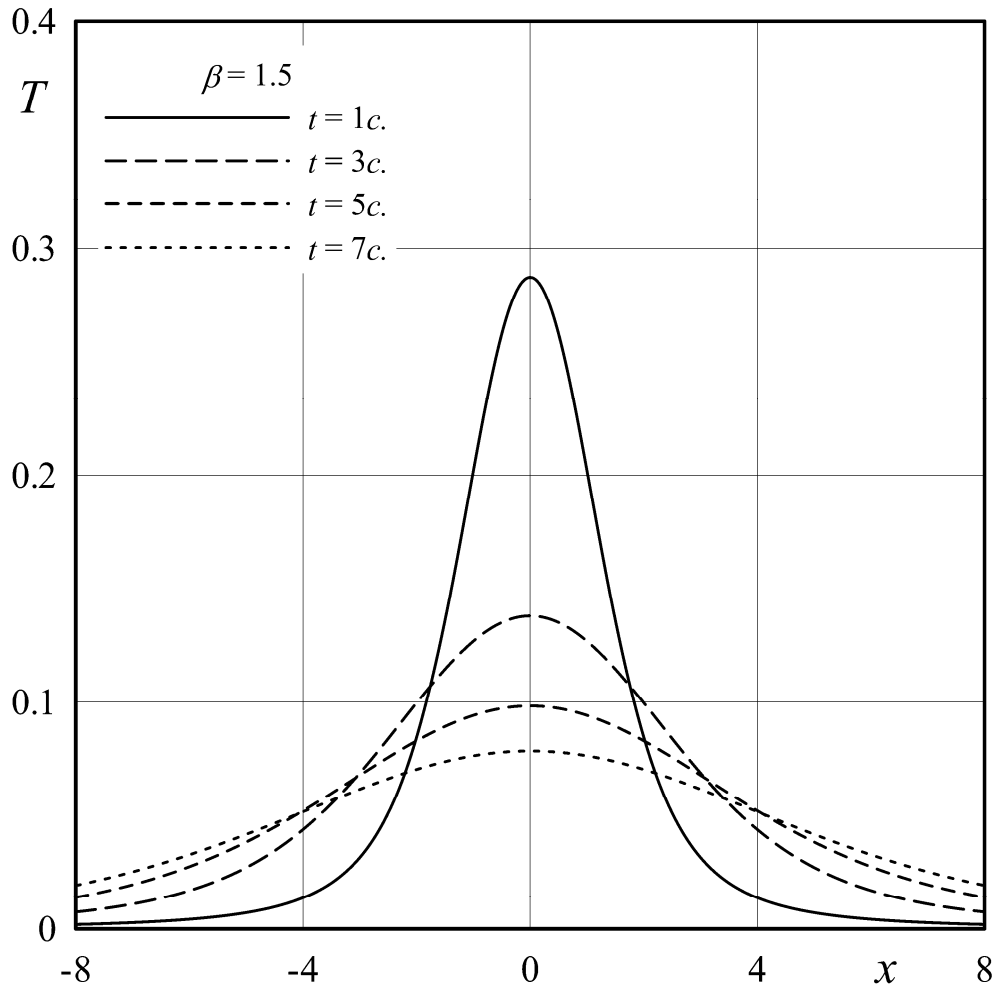


Рисунок 4.7 – Распределение температуры в стержне для различных моментов времени при $\beta = 1.5$

Графики на рис. 4.6-4.7 характеризуют аномальный процесс теплопроводности, соответствующий явлению супердиффузии ($1/\beta > 1/2$), причем при $\beta = 0.5$ тепло переносится "быстрее", чем при $\beta = 1.5$.

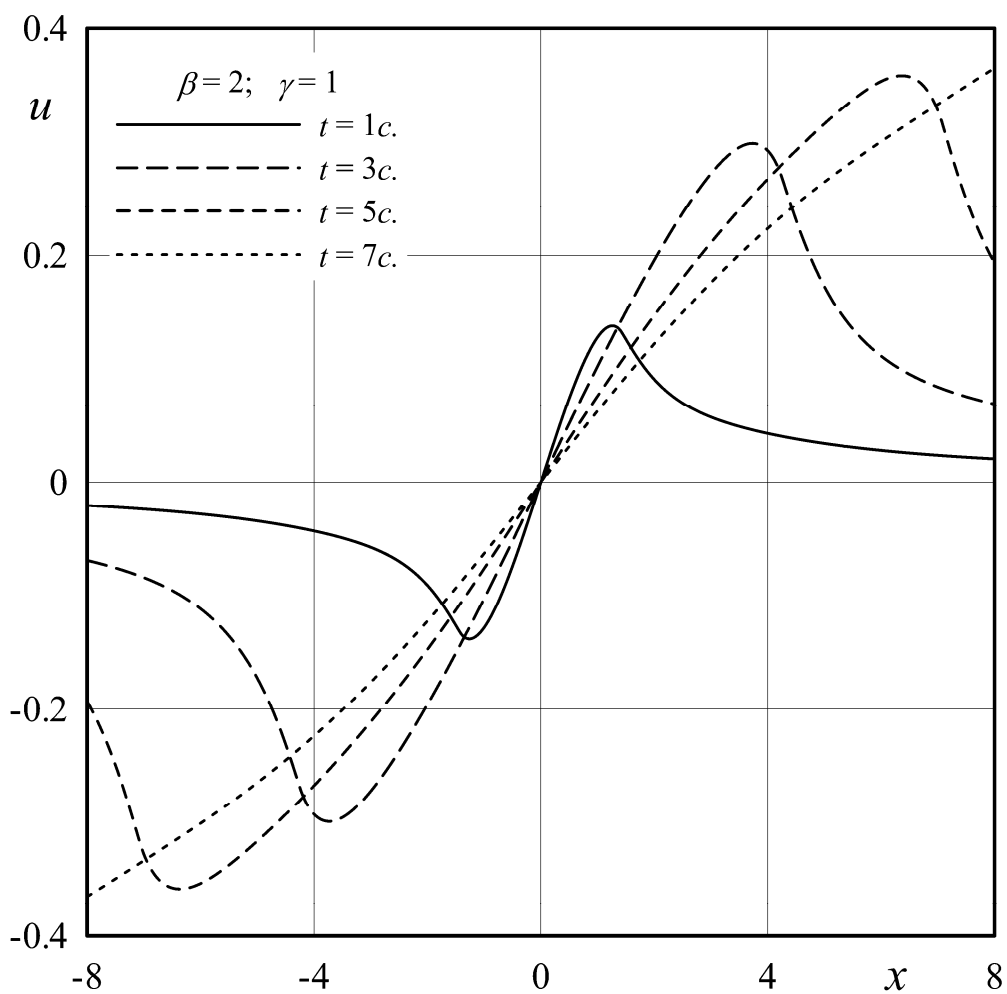


Рисунок 4.8 – Смещения в точках стержня для разных моментов времени при $\beta = 2, \gamma = 1$
 (классическая термоупругость)

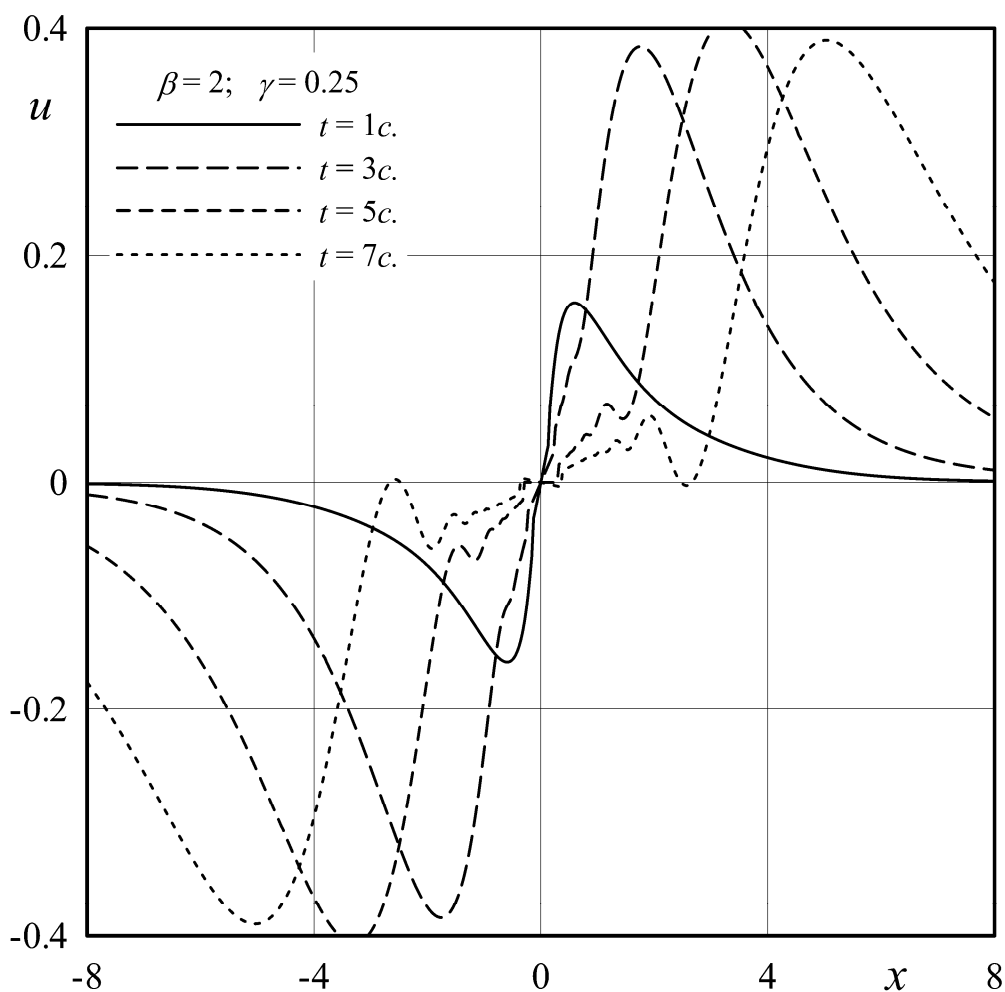


Рисунок 4.9 – Смещения в точках стержня для разных моментов времени при $\beta = 2$, $\gamma = 0.25$

Сравнивая графики на рис. 4.8-4.9, видим, что нелокальность упругих взаимодействий приводит к колебаниям функции смещений вблизи нуля. Следует заметить, что в данном примере напряжения появляются только вследствие теплового расширения, однако дробный показатель γ оказывает влияние на решение задачи даже при рассмотрении классической теплопроводности ($\beta = 2$).

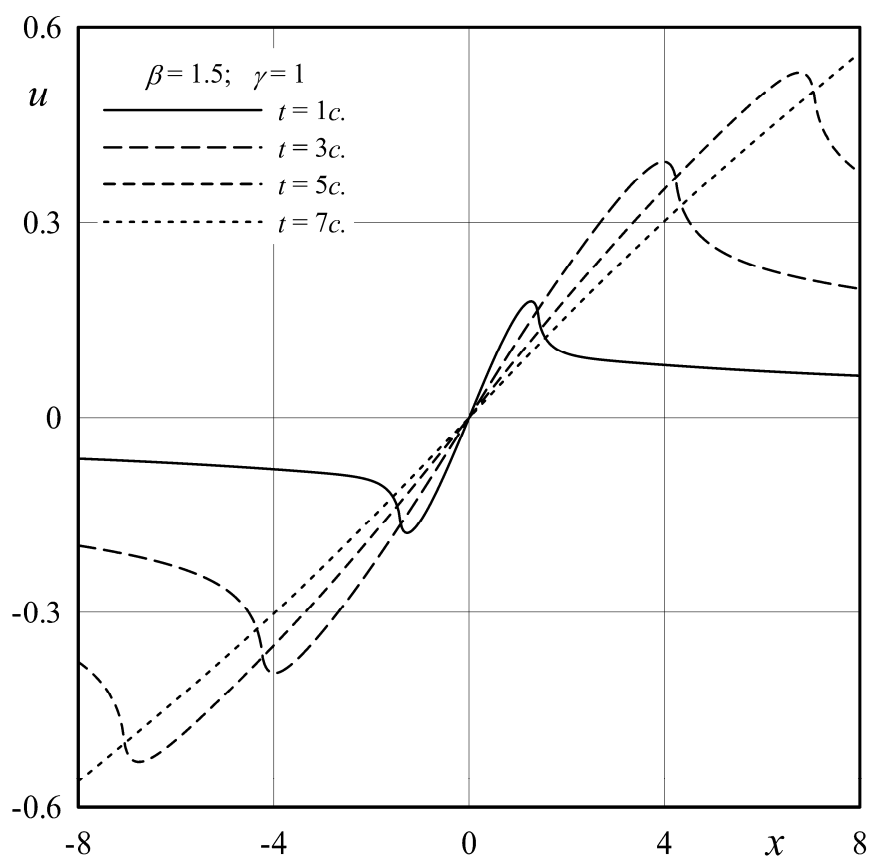


Рисунок 4.10 – Смещения в точках стержня для разных моментов времени при $\beta = 1.5$, $\gamma = 1$

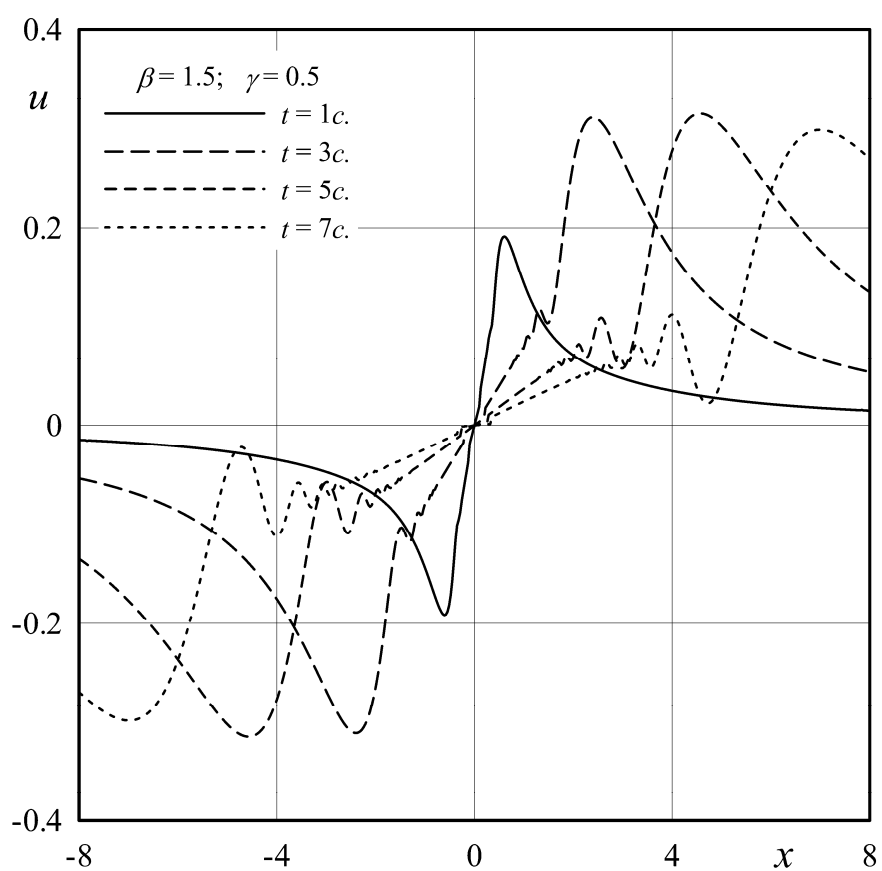


Рисунок 4.11 – Смещения в точках стержня для разных моментов времени при $\beta = 1.5$,
 $\gamma = 0.5$

Учет пространственной нелокальности тепловых и упругих взаимодействий одновременно (рис. 4.11) приводит к существенным изменениям результирующего поля перемещений.

5 МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНООБЪЕКТОВ

5.1 Обзор некоторых работ по проблеме

Нарушение континуальности материалов при сильном деформировании и разрушении создает серьезные сложности в описании подобных процессов в рамках классической механики сплошной среды. С другой стороны, развитие технологий, позволяющих изучать микроструктуру деформируемых тел, привело к накоплению фактов, свидетельствующих о чрезвычайно высокой роли внутренней структуры материала в процессах, сопровождающих его деформирование. Возросший в последнее десятилетие интерес к механическим свойствам нанобъектов потребовал еще более серьезного внимания к влиянию внутренней структуры материала на его механическое поведение. Особый интерес в этой области связан с появлением технологической возможности не только наблюдать и измерять элементы внутренней структуры твердых тел, но и оказывать влияние на эту структуру, а в случае нанотехнологий и создавать необходимые структурные элементы на микроуровне. В этой ситуации особую актуальность приобретает развитие аналитических и компьютерных моделей, которые бы могли адекватно описать механические свойства подобных сред и структур.

Бурное развитие вычислительной техники позволило на новом уровне вернуться к проблеме описания сред с микроструктурой, дополняя компьютерным моделированием решение проблем, недоступных для аналитического решения. Компьютерное моделирование становится важным звеном, занимающим промежуточное положение между теорией и реальным экспериментом. Основываясь на теоретических моделях, компьютерный эксперимент

осуществляется в результате численного расчета, где сложность модели может сколь угодно увеличиваться по мере развития вычислительных средств, добиваясь все более точного соответствия условиям экспериментальных исследований. Таким образом, с одной стороны, повышаются возможности теоретических исследований, а, с другой стороны, появляется возможность многократно дублировать дорогостоящие экспериментальные исследования. Не имея возможности существовать независимо от аналитической теории, создающей расчетную модель, и эксперимента, обеспечивающего соответствие между моделью и реальностью, компьютерное моделирование оказывается важным звеном объединяющим теорию и эксперимент.

В данной ситуации большие перспективы могут быть связаны с использованием метода частиц, который в последние десятилетия широко применялся в различных областях химии и физики, однако относительно мало использовался для моделирования механического поведения твердых тел. Являясь типичным методом компьютерного моделирования, по мере наращивания количественных возможностей вычислительной техники, метод частиц позволяет получать качественно новые результаты, за счет количественной сложности компьютерной модели. Как принципиально дискретный метод, он не имеет недостатков континуальных моделей, проявляющихся при нарушении сплошности вещества или в результате дискретности его внутренней структуры.

Однако оказались полезными и некоторые простейшие аналитические процедуры. Так, в работах [80 - 86] рассматривалась двумерная монокристаллическая полоса, содержащая N атомных слоев. Учитывалось только центральное взаимодействие каждого атома с атомами 1-й координационной сферы (рис. 5.1).

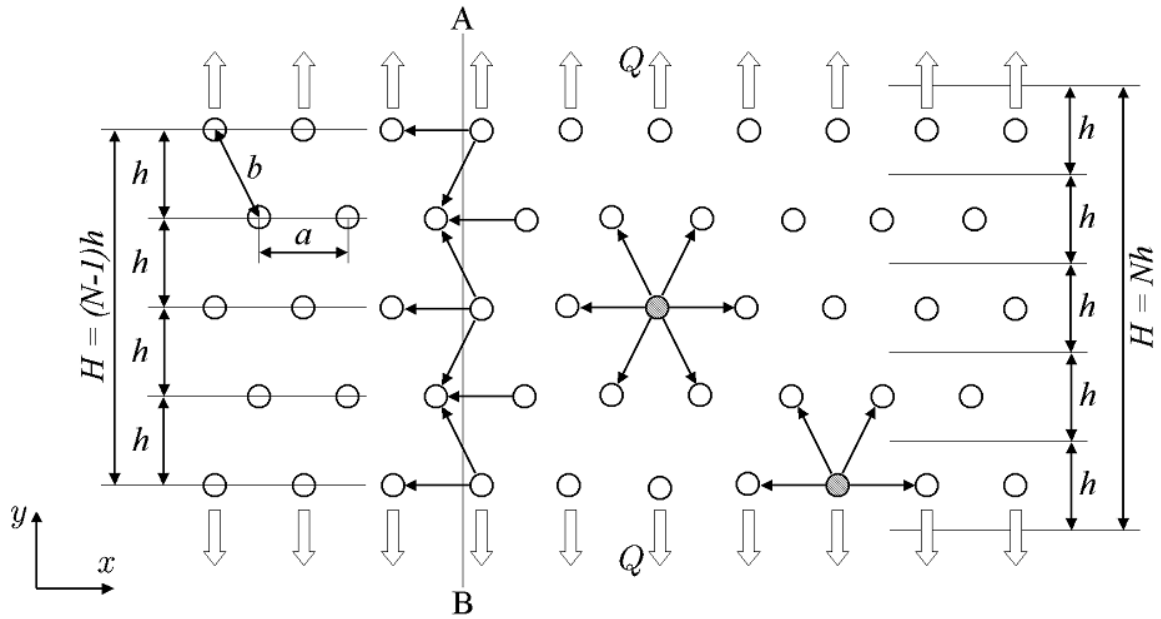


Рисунок 5.1 - Рассматриваемая модель: двумерная монокристаллическая полоса

Результаты сведены в таблицу 5.1.

Таблица 5.1 - Зависимость модулей упругости от числа слоев,

$$E_1^{\max} = E_1|_{N^*=N-1}$$

N	E_1^{\max} / E_{∞}	ν_2	ν_2 / ν_{∞}	E_2 / E_{∞}
2	2.00	0.18	0.53	1.06
3	1.50	0.23	0.69	1.04
5	1.25	0.27	0.82	1.02
10	1.11	0.30	0.91	1.01
20	1.05	0.32	0.96	1.01
100	1.01	0.33	0.99	1.00

В работе показано, что в определении размера нанобъекта существует принципиальный произвол, приводящий к неоднозначности многих макроскопических характеристик, таких как напряжение, модуль Юнга, удельная объемная энергия деформирования. Выбрать универсальное определение для размера нанобъекта не удастся: если добиваться того, чтобы модули упругости были максимально близки к своим макроскопическим значениям, то видоизменяются соотношения Коши-Грина и нарушается симметрия тензора

упругости кристалла. Если, напротив, выполнить соотношения Коши-Грина, то значительно усиливается масштабный эффект.

Согласно полученным в [80, 81] результатам, погрешность, вызванная заменой континуальной среды ее атомарным аналогом, приближенно равна $1/N$, где N - отношение характерного линейного размера модели к среднему межатомному расстоянию. Из данной оценки следует, что для достижения погрешности в 1% при одномерном моделировании требуется 100 частиц, в двумерном случае - 10^4 частиц, в трехмерном - 10^6 . Расчет подобных систем вполне доступен для современных компьютеров, что свидетельствует о принципиальной возможности применения метода частиц в макроскопической области.

В [83, 84] в качестве модели для исследования влияния масштабного фактора на механические характеристики материала рассматривалась двумерная полоса из монокристаллического материала, обладающего гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решеткой (треугольной решеткой). В двумерном случае это единственная плотно-упакованная решетка. Для обобщения исследований на трехмерное пространство был выбран монокристалл, обладающий гранецентрированной кубической решеткой. Эта решетка не единственная плотноупакованная, однако она была выбрана по нескольким причинам. Решетка весьма простая и широко распространена, такой решеткой обладают многие металлы. Кроме того, если рассмотреть сечение, перпендикулярное главной диагонали куба (направление 111), то можно получить двумерную ГПУ решетку, что позволяет сравнить результаты, полученные для трехмерного случая с двумерным [83, 84]. В работе также рассматривается направление вдоль ребра кубической решетки (направление 100), а результаты сравниваются с [86]. Взаимодействие между атомами считается парным. Для определения модулей упругости рассматривается задача трехостного растяжения монокристалла (без учета сдвига), в кристалле учитывается взаимодействие только ближайших атомов.

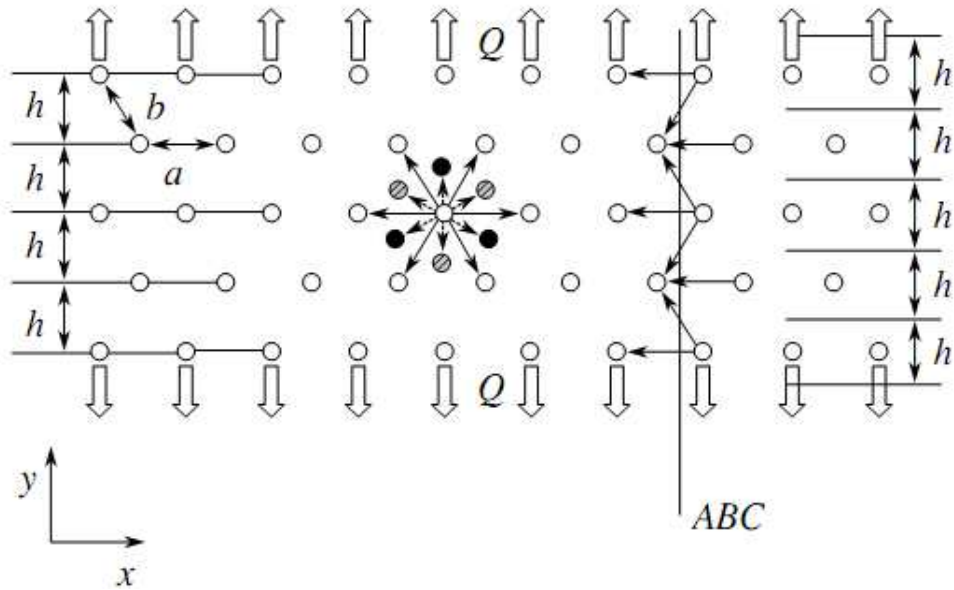


Рисунок 5.2 - Полоса с N атомными слоями

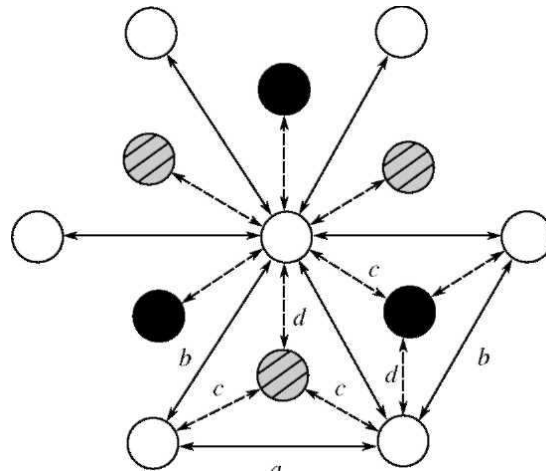


Рисунок 5.3 - Схема учета второй координационной сферы

Результаты расчетов представлены в таблицах 5.2, 5.3. Значения коэффициентов Пуассона для различного количества атомарных слоев N сведены в табл. 5.2. Для двух атомарных слоев приведены два варианта коэффициентов Пуассона при различных значениях поправок k_1, k_2, p . В строке $N = 2^*$ приведены результаты, полученные при подстановке в исходные уравнения поправок $k_1 = 4, k_2 = 1, p = 0$, которые точно соответствуют нанобрусу, имеющему $N_y = N_z = 2$ и бесконечное число слоев по направлению N_x .

Таблица 5.2 - Значения коэффициентов Пуассона для различного числа атомарных слоев

N	ν_1 / ν_1^∞	ν_2 / ν_2^∞	ν_3 / ν_3^∞
2*	1.123	0.676	0.569
2	1.163	0.676	0.568
4	1.072	0.847	0.799
6	1.046	0.900	0.869
10	1.027	0.941	0.923
20	1.013	0.971	0.962
50	1.005	0.988	0.985
100	1.003	0.994	0.993

Таблица 5.3 - Значения модулей упругости в различных направлениях

N	E_1^{\min} / E_1^∞	E_2^{\min} / E_2^∞	E_3^{\min} / E_3^∞	E_1^{\max} / E_1^∞	E_2^{\max} / E_2^∞	E_3^{\max} / E_3^∞
2*	0.958	1.047	0.872	3.833	2.095	1.744
2	0.954	1.015	0.872	3.818	2.030	1.744
4	0.975	1.005	0.937	1.734	1.340	1.249
6	0.983	1.003	0.958	1.416	1.204	1.150
10	0.990	1.002	0.975	1.222	1.113	1.083
20	0.995	1.000	0.988	1.103	1.053	1.039
50	0.998	1.000	0.995	1.039	1.021	1.015
100	0.999	1.000	0.998	1.019	1.010	1.008

Из результатов работы следует, что форма и размеры нанокристалла вносят дополнительную анизотропию в его упругие свойства. На анизотропию, связанную с видом кристаллической решетки накладывается анизотропия, вызванная его размером и формой. Все упругие характеристики трехмерного нанокристалла существенно зависят от числа атомарных слоев N . При увеличении числа слоев все они стремятся к своим макроскопическим значениям, соответствующим бесконечному кристаллу.

В определении размера нанобъекта существует принципиальный произвол, приводящий к неоднозначности таких макроскопических характеристик, как модуль Юнга. Особенно сильно эта неоднозначность проявилась для нанобруса в направлении кристалла 111. Из сравнения результатов, полученных здесь следует, что нельзя однозначно рекомендовать выбор величины N^* . Для направления 111 предпочтительнее выбор $N^* = N$, тогда как для 100 более выгодно выбрать $N^* = N - 1$.

В [83, 84] в двухмерной задаче было получено, что для особо тонких пленок модуль может в 2 раза отличаться от своего макроскопического значения. Для трехмерного случая было получено увеличение модуля Юнга в 3.83 раза. Однако значения модуля Юнга не всегда возрастают при уменьшении размеров кристалла. Если выбрать другое определение размеров, то значения модуля Юнга будут уменьшаться с уменьшением количества атомарных слоев.

5.2 Математическое моделирование эксперимента по определению модуля упругости наностержня

Методика определения жесткостных характеристик наностержня. Пусть на подложке в виде тонкой металлической пластинки-полоски или пленки, выращена система наностержней (нанотрубок). Растянув полоску в направлении оси стержня и замерив ее удлинение, можно определить среднюю деформацию системы в этом направлении. С другой стороны, теория регулярных структур [87 - 89] дает возможность вычислить средние деформации системы подложка - наностержни в зависимости от микроструктуры фундаментальной ячейки. Сравнив экспериментальные и теоретические значения средних деформаций, получим функциональное уравнение для определения жесткостных характеристик наностержня. Возникает обратная задача, решение которой может оказаться не единственным и неустойчивым. В качестве примера рассмотрим задачу о растяжении подложки, скрепленной с двоякопериодической системой стержней.

Пусть на подложке, которая представляет собой тонкую пластинку или достаточно жесткую пленку, выращена регулярная (двоякопериодическая) система наностержней (нанотрубок), ориентированных вдоль оси x , непрерывно скрепленных с подложкой (рис. 5.4). Обозначим через ω_1 и ω_2 ($\text{Im } \omega_1 = 0, \text{Im}(\omega_2 / \omega_1) > 0$) основные периоды структуры. Стержень представляет собой отрезок L длиной $2l$ с концевыми точками a, b ($\text{Im } a = \text{Im } b$). Центры стержней образуют двоякопериодическую систему точек $P = m\omega_1 + n\omega_2$.

В области, занимаемой указанной системой, имеют место средние напряжения $\langle \sigma_{ik} \rangle$ ($i, k = 1, 2$). В рамках принимаемой модели передача нагрузки от подложки к стержню осуществляется с помощью касательных напряжений $q_0(t)$. Составляя уравнение равновесия элемента стержня единичной длины в направлении оси x , выражаем погонное нормальное усилие в стержне через контактное усилие $q_0(t)$

$$P(t_0) = -\int_{t_0}^b q_0(t) dt, \quad P(b) = 0, \quad P(a) = -\int_a^b q_0(t) dt = 0.$$

На основе модели плоского напряженного состояния можно выразить смещения и напряжения в подложке через две аналитические в рассматриваемой области функции по формулам

$$\begin{aligned} h(z) &= 2\mu\delta(u_1 + iu_2) = \kappa\varphi(z) - z\overline{\Phi(z)} - \overline{\psi(z)}, \\ \delta(\sigma_{11} + \sigma_{22}) &= 4\text{Re}\Phi(z), \\ \delta(\sigma_{22} - \sigma_{11} + 2i\sigma_{12}) &= 2[\overline{z}\Phi'(z) + \Psi(z)], \\ \Phi(z) &= \varphi'(z), \quad \Psi(z) = \psi'(z), \end{aligned} \tag{5.1}$$

Главный вектор сил, действующих вдоль произвольной дуги AB , определяется формулой

$$(X + iY) = \delta \int_{AB} (X_n + iY_n) ds = -i\delta g(z) \Big|_A^B. \tag{5.2}$$

Здесь

$$g(z) = \varphi(z) + z\overline{\Phi(z)} + \overline{\psi(z)}.$$

Интегральные представления аналитических функций, обеспечивающие двоякопериодическое распределение тензора напряжений в пластине, возьмем в виде [87]

$$\begin{aligned}\Phi(z) &= \frac{1}{2\pi(\kappa+1)} \int_L q_0(t) \zeta(t-z) dt + A_1, \\ \Psi(z) &= \frac{\kappa}{2\pi(\kappa+1)} \int_L q_0(t) \zeta(z-t) dt - \\ &- \frac{1}{2\pi(\kappa+1)} \int_L q_0(t) \{ \wp_1(z-t) + \bar{t} \wp(z-t) \} dt + A_2,\end{aligned}\quad (5.3)$$

в котором $\kappa = (3 - \nu)/(1 + \nu)$; ν – коэффициент Пуассона материала подложки; A_1, A_2 – постоянные, определяемые из условия существования в структуре заданных средних напряжений $\langle \sigma_{ik} \rangle$; $\wp(z)$ и $\zeta(z)$ – двоякопериодическая и квазипериодическая функции Веерштрасса [89]; $\wp_1(z)$ – специальная меморфная функция [87].

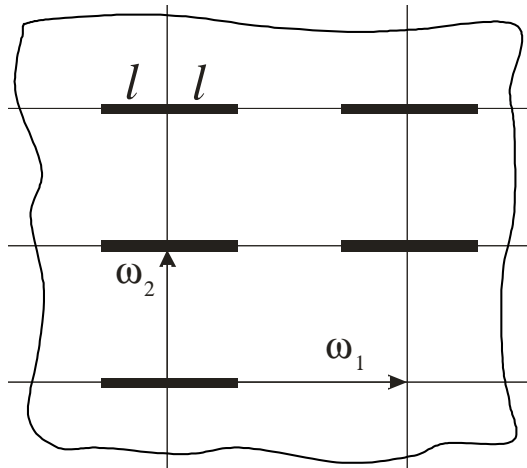


Рисунок 5.4 - Схема регулярной структуры

Квазипериодичность вектора перемещения и главного вектора сил на дуге. Интегрируя функции (5.3), находим

$$\begin{aligned}\varphi(z) &= -\frac{1}{2\pi(\kappa+1)} \int_L q_0(t) \nu(t-z) dt + A_1 z, \quad \varphi'(z) = \Phi(z), \\ \psi(z) &= \frac{\kappa}{2\pi(\kappa+1)} \int_L q_0(t) \nu(z-t) dt - \frac{1}{2\pi(\kappa+1)} \int_L q_0(t) \{ \wp_1^{(-1)}(z-t) +\end{aligned}$$

$$+ \bar{t} \wp^{(-1)}(z-t) \} dt + A_2 z, \quad \psi'(z) = \Psi(z), \quad (5.4)$$

где [88, 89]

$$\begin{aligned} \nu'(z) &= \zeta(z), \quad \wp^{(-1)} = -\zeta(z), \quad \wp_1^{(-1)}(z) = \int \wp_1(z) dz, \\ \nu(z + \omega_\nu) - \nu(z) &= \pi i + \delta_\nu \left(z + \frac{1}{2} \omega_\nu \right), \quad \delta_\nu = 2\zeta\left(\frac{\omega_\nu}{2}\right) \quad (\nu = 1, 2), \\ \wp_1^{(-1)}(z + \omega_\nu) - \wp_1^{(-1)}(z) &= -\bar{\omega}_\nu \zeta(z) + \gamma_\nu z + \gamma_\nu^*, \\ \gamma_2 \omega_1 - \gamma_1 \omega_2 &= \delta_1 \bar{\omega}_2 - \delta_2 \bar{\omega}_1. \end{aligned}$$

Условия существования в структуре средних напряжений $\langle \sigma_{ik} \rangle$ приводят к системе уравнений относительно постоянных A_1 и A_2 , решение которой имеет вид

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} A_1 &= \frac{\langle \sigma_{11} \rangle + \langle \sigma_{22} \rangle}{4} \delta + \left(\frac{\pi(1+\kappa)}{2F} - \frac{\operatorname{Re} \delta_1}{\omega_1} \right) B, \\ A_2 &= \frac{\delta}{2} (\langle \sigma_{22} \rangle - \langle \sigma_{11} \rangle + 2i \langle \sigma_{12} \rangle) + \left(\frac{\kappa \delta_1 - \gamma_1}{\omega_1} - \frac{\pi(1+\kappa)}{F} \right) B, \\ B &= \frac{1}{2\pi(1+\kappa)} \int_L t q_0(t) dt, \quad F = \omega_1 \operatorname{Im} \omega_2. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Таким образом, интегральные представления (5.3) при наличии равенств (5.5) корректны в том смысле, что они обеспечивают: двоякую периодичность поля напряжений в структуре; квазипериодичность вектора перемещений и главного вектора усилий на дуге, соединяющей конгруэнтные точки; существование заданных средних напряжений $\langle \sigma_{11} \rangle$, $\langle \sigma_{12} \rangle$, $\langle \sigma_{22} \rangle$ при любой плотности $q_0(t) \in H(L)$, удовлетворяющей условию

$$\int_L q_0(t) dt = 0.$$

Интегральные уравнения структуры подложка – наностержни. Приравнивая деформацию e_{11} подложки деформации стержня на L , получаем сингулярное интегродифференциальное уравнение

$$\int_L q_0(t) K(t-t_0) dt + \beta(t_0) \int_{t_0}^b q_0(t) dt + M \{ q_0(t) \} = N, \quad t_0 \in L,$$

$$\begin{aligned}
K(t - t_0) &= \operatorname{Re} \left\{ \zeta(t - t_0) + \frac{(t - t_0) \overline{\wp(t - t_0)} - \overline{\wp_1(t - t_0)}}{2\kappa - 1} \right\}, \\
M \{ q_0(t) \} &= \left[\frac{\pi(1 + \kappa)^2}{2(2\kappa - 1)F} - \frac{(2\kappa - 1)\operatorname{Re} \delta_1 - \operatorname{Re} \gamma_1}{(2\kappa - 1)\omega_1} \right] \int_L t q_0(t) dt, \\
\beta \{ t_0 \} &= \frac{8\pi E \delta}{(1 + \nu)(5 - 3\nu) E_0 F_0(t_0)}, \\
N &= \frac{\pi(\kappa + 1)\delta}{2(2\kappa - 1)} [(3 - \kappa)\langle \sigma_{22} \rangle - (1 + \kappa)\langle \sigma_{11} \rangle]. \tag{5.6}
\end{aligned}$$

Здесь E , E_0 – модули упругости материалов подложки и наностержня; δ и ν – толщина и коэффициент Пуассона подложки; $F_0(t)$ – площадь поперечного сечения наностержня. Уравнение (5.6) в совокупности с дополнительным условием

$$\int_L q_0(t) dt = 0$$

однозначно определяет решение $q_0(t)$ на L .

Вводя безразмерные координаты $\xi = t/l$, $\lambda = 2l/\omega_1$, уравнение (5.6) приведем к виду

$$\int_{-1}^1 \frac{q(\xi)}{\xi - \xi_0} d\xi + \int_{-1}^1 K(\xi_0 - \xi) q(\xi) d\xi + \beta(\xi_0) \int_{\xi_0}^1 q(\xi) d\xi = \pi f_1, \tag{5.7}$$

где

$$K(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{2} \right)^{2j+2} \Lambda_j \xi^{2j+1},$$

$$\Lambda_0 = \frac{\omega_1}{2\kappa} \left\{ (2\kappa - 1)\operatorname{Re} \delta_1 - \operatorname{Re} \gamma_1 - \frac{\pi}{2H} (1 + \kappa)^2 \right\}, \quad H = |\omega_2| \sin \alpha,$$

$$\Lambda_j = \frac{1}{\kappa} \left\{ (j + 1)\operatorname{Re} g_{2j+3}^{(1)} - (j + 1 - \kappa)\operatorname{Re} g_{2j+2}^0 \right\} \left(\frac{\omega_1}{2} \right)^{2j+2} \quad (j = 1, 2, \dots),$$

$$\beta(\xi) = \frac{4\pi E \delta l}{(3 - \nu)(1 + \nu) E_0 F_0}, \quad q(\xi) = q_0(l\xi),$$

$$g_{2j+2} = \sum_{m,n} \left(\frac{1}{T} \right)^{2j+2}, \quad g_{2j+3}^{(1)} = \sum_{m,n} \frac{\bar{T}}{(T)^{2j+3}},$$

$$T = \frac{1}{2}(m\omega_1 + n\omega_2),$$

$$f_1 = \frac{(1 + \kappa)\delta}{4\kappa} \left\{ (3 - \kappa)\langle\sigma_{22}\rangle - (1 + \kappa)\langle\sigma_{11}\rangle \right\}.$$

Уравнение (5.7) необходимо рассматривать совместно с дополнительным условием

$$\int_{-1}^1 q(\xi) d\xi = 0. \quad (5.8)$$

Макромодель нанокompозита. Пусть $q^c(\xi)$ – стандартное решение уравнений (5.7), (5.8), определяемое формулой (при $\langle\sigma_{11}\rangle \neq 0$, $\langle\sigma_{22}\rangle \neq 0$, $\langle\sigma_{12}\rangle = 0$)

$$q_0(t) = q(\xi) = \left[\langle\sigma_{11}\rangle + \frac{\kappa - 3}{\kappa + 1} \langle\sigma_{22}\rangle \right] \delta q^c(\xi). \quad (5.9)$$

Соответственно (5.9) функционал B из (5.5) примет вид

$$B = \frac{l^2 b_{11}^c \delta}{2\pi(\kappa + 1)} \left[\langle\sigma_{11}\rangle + \frac{\kappa - 3}{\kappa + 1} \langle\sigma_{22}\rangle \right].$$

Здесь

$$b_{11}^c = \int_{-1}^1 \xi q^c(\xi) d\xi.$$

Средние деформации в структуре можно найти по формулам [87]

$$\begin{aligned} \langle e_{11} \rangle &= \frac{1}{\omega_1} u_1(z)|_z^{z+\omega_1}, \quad \langle e_{22} \rangle = \frac{1}{\text{Im } \omega_2} u_2(z)|_z^{z+\omega_2} - \frac{\text{ctg } \alpha}{\omega_1} u_2(z)|_z^{z+\omega_1}, \\ 2\langle e_{12} \rangle &= \frac{1}{\omega_1} \left[u_2(z) - u_1(z) \text{ctg } \alpha \right]_z^{z+\omega_1} + \frac{1}{\text{Im } \omega_2} u_1(z)|_z^{z+\omega_2}. \end{aligned}$$

Выполняя предписанные операции взятия приращении от перемещений в конгруэнтных точках и, учитывая, что в рассматриваемом здесь случае $\text{Re } \omega_2 = 0$, приходим к уравнениям макромодели структуры

$$\begin{aligned} \langle e_{11} \rangle &= \langle a_{11} \rangle \langle \sigma_{11} \rangle + \langle a_{12} \rangle \langle \sigma_{22} \rangle, \\ \langle e_{22} \rangle &= \langle a_{12} \rangle \langle \sigma_{11} \rangle + \langle a_{22} \rangle \langle \sigma_{22} \rangle, \end{aligned} \quad (5.10)$$

где

$$\langle a_{11} \rangle = \frac{1}{\langle E_1 \rangle} = \frac{1}{E} \left(1 + \frac{l^2 b_{11}^c}{\delta F} \right), \quad \langle a_{22} \rangle = \frac{1}{\langle E_2 \rangle} = \frac{1}{E} \left(1 + \nu^2 \frac{l^2 b_{11}^c}{\delta F} \right),$$

$$\langle a_{12} \rangle = -\frac{\nu}{E} \left(1 + \frac{l^2 b_{11}^c}{\delta F} \right).$$

При этом следует учитывать, что при достаточно плотной упаковке решетки площадь ячейки F должна иметь порядок l^2 . Только в этом случае можно рассчитывать на устойчивость решения обратной задачи.

Из (5.10) видно, что наиболее существенно изменяется макромодуль $\langle a_{11} \rangle$, величина $\langle a_{12} \rangle$ по абсолютной величине равна $\nu \langle a_{11} \rangle$, величина $\langle a_{22} \rangle \cdot E$ изменяется как $1 + 0(\nu^2)$. Это объясняется тем, что стержни ориентированы вдоль оси Ox и их присутствие не влияет на сдвиговые деформации системы. Функционал b_{11}^c содержит в себе информацию о структуре фундаментальной ячейки (в данном случае о жесткости и геометрических параметрах наностержня). Поэтому, определив $\langle E_1 \rangle$ из эксперимента, получаем уравнение для определения модуля упругости наностержня

$$b_{11}^c = \frac{\delta F}{l^2} \left(\frac{E}{\langle E_1 \rangle} - 1 \right).$$

Из анализа результатов следует, что симбиоз аналитического алгоритма и эксперимента может иметь успех, т.е. привести к определению модуля упругости наностержня в зависимости от его геометрических параметров, только при достаточно плотной упаковке их в системе подложка–наностержни.

5.3 Механические характеристики углеродных нанотрубок

Углеродные нанотрубки (УНТ) привлекают все больший интерес в связи с их исключительными механическими, термическими и электрическими свойствами [90 - 95]. Один из возможных способов применения УНТ – это развитие композитов на основе УНТ с включением нанотрубок в различных матрицах и, это приводит к улучшению их физических свойств. Qian и др. [96] получили, что добавление всего 1% мас. УНТ в полистирол приводит к увеличению модуля упругости и прочности примерно на 35% - 42% и 25% соответственно. В общем, точная оценка свойств

отдельных нанотрубок имеет важное значение для развития на основе УНТ армированных композитов. Таким образом, механические свойства УНТ были предметом ряда экспериментальных [97 - 101] и теоретических исследований [102 - 120, 122 - 124], со времени их открытия в 1991 году. Экспериментальные методы измерения механических свойств нанотрубок в основном базируются на технологиях трансмиссионной электронной микроскопии (ТЭМ) и атомно – силовой микроскопии (АСМ).

Однако экспериментальные уровни ошибок слишком велики, чтобы предоставить характеристики УНТ в зависимости от различных размеров и конструкции. Математическое моделирование для прогнозирования механических свойств нанотрубок рассматривалось в качестве мощного инструмента по сравнению с экспериментальными методами, где есть свои трудности. Классическая молекулярная динамика (МД) и не эмпирические методы [102 - 110] использовались широко. Yakobson и его сотрудники [102 - 105] использовали МД метод моделирования упругости и пластичности свойств нанотрубок. Они использовали модели многоатомных потенциалов в совокупности с моделью оболочки сплошной среды и оценили модуль упругости около 5,5 ТПа [100]. Hernandez и др. [106, 107] оценили модуль упругости и коэффициент Пуассона ОУН с различными хиральными векторами. Используя метод сильной механической связи, они получили оценку поверхностного модуля 0,42–нм. В целом, не эмпирические методы дают более точные результаты, чем МД –моделирование. Lieg и др. [108] получили модуль упругости выше, чем 1 ТПа с использованием не эмпирического метода. Lu [109, 110] исследовал упругие свойства нанотрубок и наностержней с использованием эмпирической модели с постоянными силами. Он получил, что модуль Юнга и модуль сдвига не превышает 1,0 и 0,45 ТПа, соответственно. Odegard и др. [111] предложили моделирование УНТ как континуум приравнивая потенциальную энергию к той, что представляет единицу объема (ПЕО). Они применяют методы ПЕО к базовой модели УНТ композитных систем [114]. Ruoff и Lorents [113] предложили использовать модуль упругости графита без учета изменения атомной структуры, когда часть листа графена

скатывается в нанотрубку. Однако, теоретических работ посвященных механическим свойствам многослойных нанотрубок сравнительно мало [115, 116] Ту и др. [116], показали, что эффективность определения упругости многослойных нанотрубок будет зависеть от их номера (порядка) слоя и иметь большую область варьирования. Молекулярная и механика деформируемого твердого тела стали достаточно развиты для описания свойств материалов с микро- и макроструктурами, соответственно. Тем не менее, МД –метод требователен к доступным вычислительным мощностям. Хорошо утвердившая себя модель механики сплошных сред в наномасштабах является сложной задачей для компьютерного моделирования. Т. Natsuki и др. определяют в замкнутой форме выражения для моделирования упругих модулей и однослойных углеродных нанотрубок, и многослойных углеродных нанотрубок на основе ферменных моделей конструкций.

Сравнение теоретических результатов с данными по МД моделированию приведены на рис. 5.5-5.8.

Механические характеристики углеродных нанотрубок.

Углеродные нанотрубки - протяжённые структуры, состоящие из свёрнутых гексагональных сеток диаметром от одного до нескольких десятков нанометров и длиной до нескольких сантиметров с атомами углерода в узлах.

Для получения нанотрубки (n, m), графитовую плоскость надо разрезать по направлениям пунктирных линий и свернуть вдоль направления вектора R (рис. 5.5).

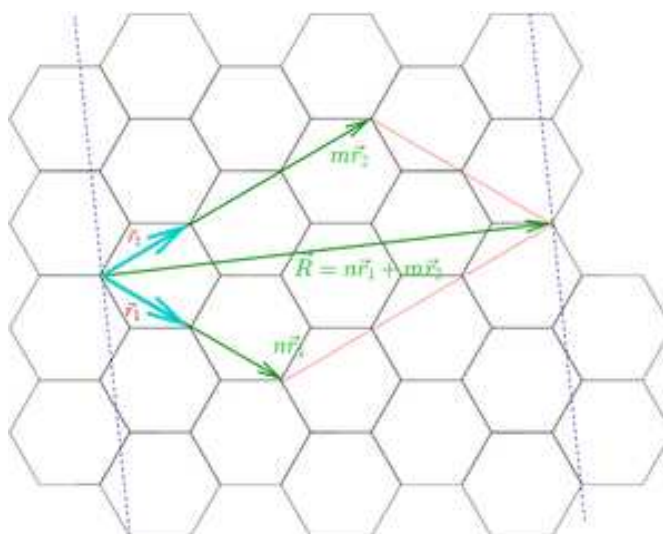


Рисунок 5.5 - Плоская графитовая сетка

Идеальная нанотрубка - это цилиндр, полученный при сворачивании плоской гексагональной сетки графита без швов (рис. 5.6).

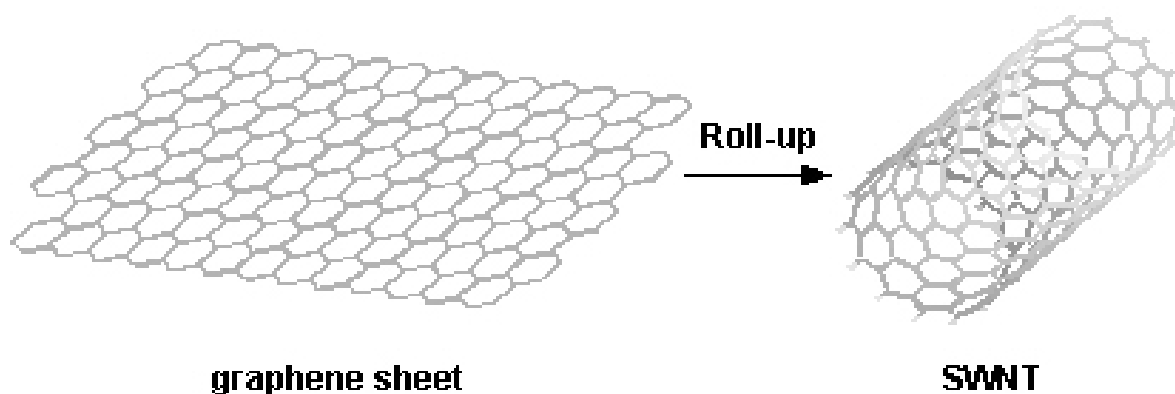


Рисунок 5.6 - Схема сворачивания графитового листа в нанотрубку

По значению параметров (n, m) различают (рис. 5.7)

прямые (ахиральные) нанотрубки

«кресло» или «зубчатые» (armchair) $n=m$

зигзагообразные (zigzag) $m=0$ или $n=0$

спиральные (хиральные) нанотрубки

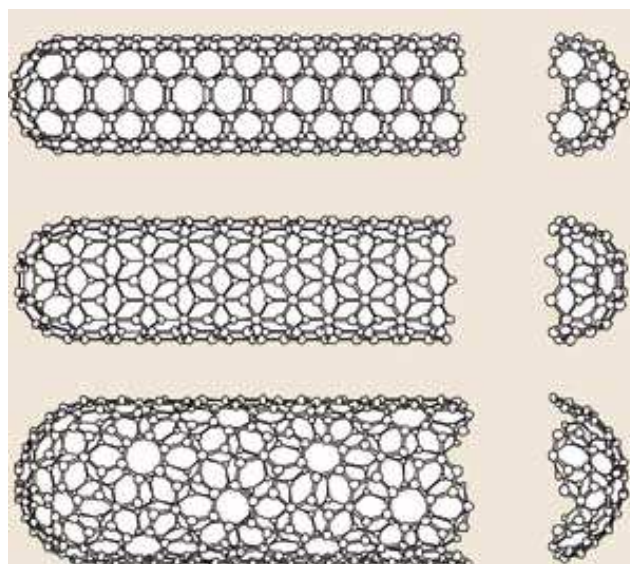


Рисунок 5.7 - Типы нанотрубок

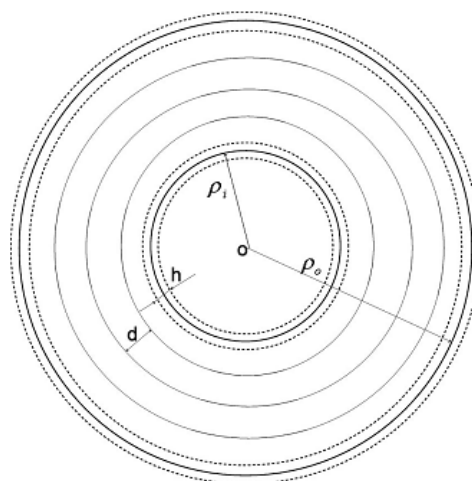


Рисунок 5.8 - Конструкция MWNT с поперечным сечением перпендикулярно оси трубки

$$Y_m = \frac{N}{N - 1 + h/d} \frac{h}{d} Y.$$

Результаты расчетов представлены в таблице.

Таблица 5.4 - Зависимость модуля Юнга от числа слоев трубки

N	1	2	3	4	5	8	10	20	100
Y_m	4.70	1.70	1.41	1.29	1.23	1.15	1.13	1.08	1.05

В [123] описывается структурный подход к моделированию механических свойств углеродных нанотрубок (УНТ). На основе модели ферменных конструкций, связанных межатомными потенциалами, получено замкнутое упругое решение для определения механических свойств однослойных углеродных нанотрубок (ОУН). Кроме того, модуль упругости многослойных углеродных нанотрубок (МУН) также определен и для группы из вышеупомянутых ОУН с равномерным интервалом расстояния. Используя структурный подход механики, модуль упругости, коэффициент Пуассона и коэффициент деформации ОУН были исследованы в зависимости от размера и структуры нанотрубок. Коэффициент Пуассона ОУН показывает зависимость от хиральности, а модуль упругости нечувствителен к хиральности. Расположение энергии деформации связей показывает, достаточно ли разница между конфигурациями «зигзаг» и «кресло» трубы подвергнутой осевой

нагрузке. «Зигзаг» трубки, по прогнозам, имеют более низкое собственное удлинение, чем «кресло» трубки.

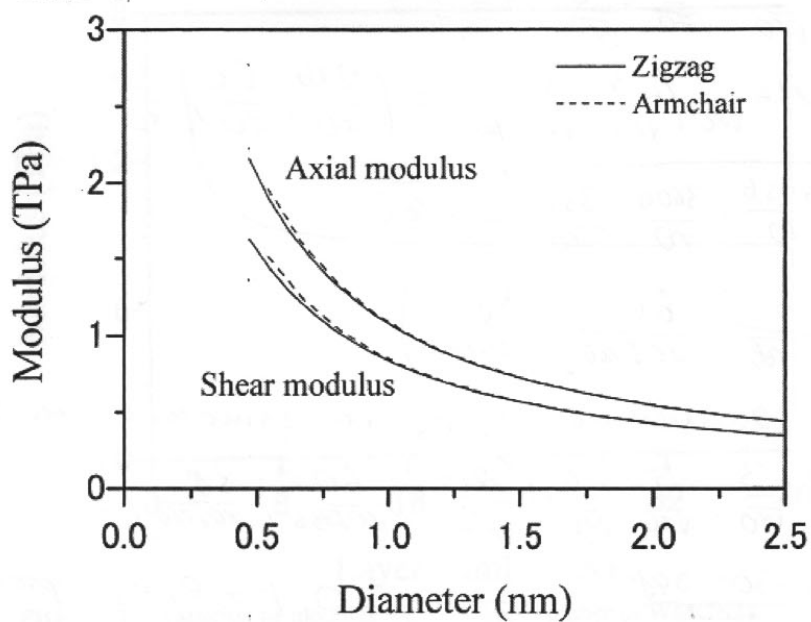


Рисунок 5.9 - Изменение модуля упругости в зависимости от диаметра для «armchair» и зигзагообразной трубок

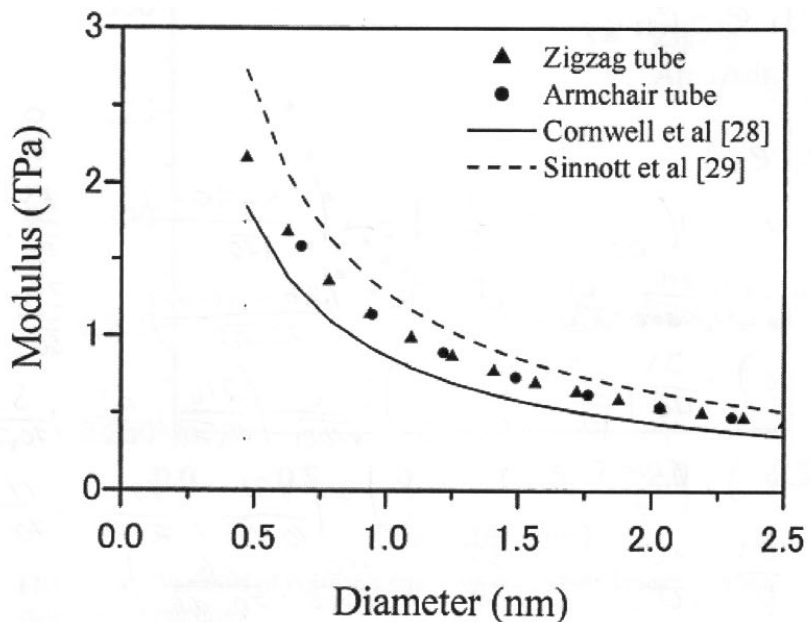


Рисунок 5.10 - Сравнение данной теории с проведенными MD моделированиями

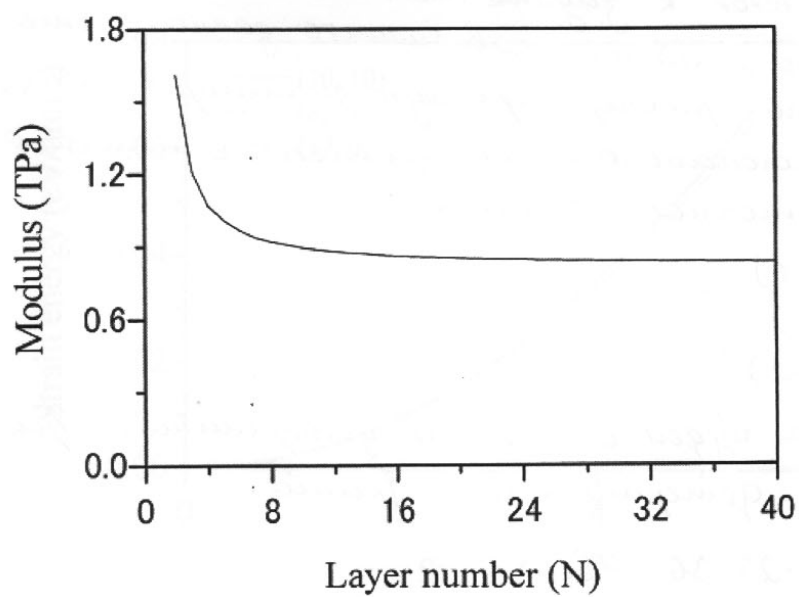


Рисунок 5.11 - Изменение модуля упругости в зависимости от количества слоев многослойных углеродных нанотрубок

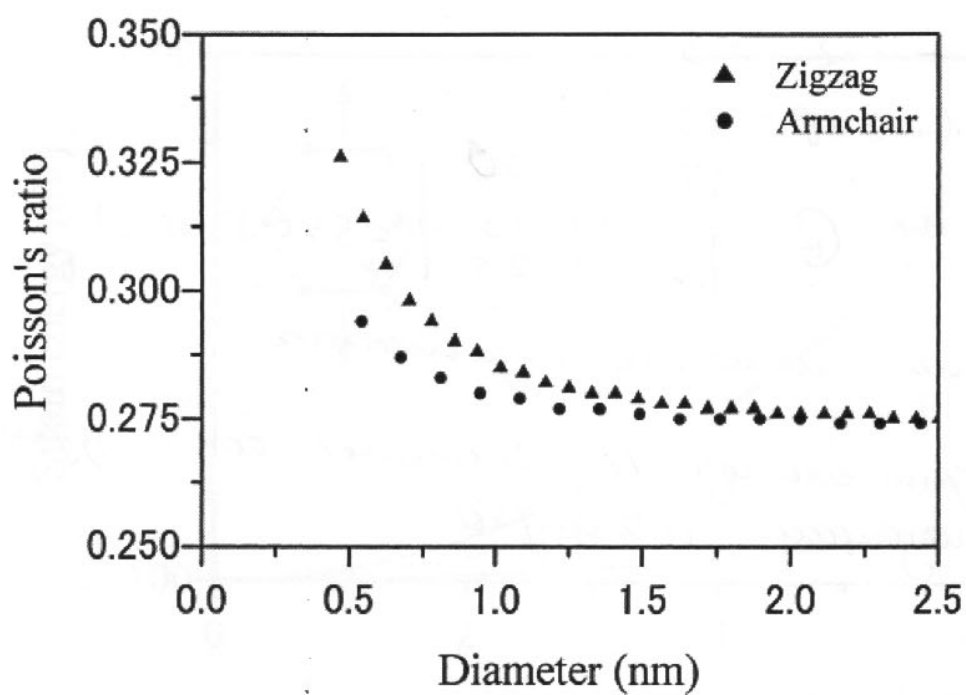


Рисунок 5.12 - Изменение коэффициента Пуассона в зависимости от диаметра для "armchair" и зигзагообразной трубок

ВЫВОДЫ

Рассмотрен новый класс задач о тепло и массопереносе во фрактальных средах, чрезвычайно актуальный для полимерных структур, перколяционных кластеров, аморфных полупроводников, пористых материалов и т.п. Идеология рассмотрения указанных проблем вытекает из глубоких статистических, термодинамических соображений и в математическом отношении сводится к решению дифференциальных уравнений с производными дробного порядка по времени и пространственным переменным.

В данном отчете исследованы процессы аномального переноса типа субдиффузии и супердиффузии в одномерных, двухмерных и трехмерных телах для тех случаев, когда на поверхности тела действует импульсный тепловой поток.

Рассмотрены квазистатическая задача термоупругости с дробными производными Рисса и Капуто, а также обобщение задачи Даниловской для нелокального уравнения теплопроводности.

Получены новые фундаментальные закономерности в распределении тепловых и силовых полей во фрактальных средах в зависимости от порядка производной по времени α , характеризующей нелокальность процесса и порядка производной по пространственной переменной β , связанной с заменой нормального распределения Гаусса классического броуновского движения более общим вероятностным распределением Леви.

При рассмотрении процесса теплопроводности с дробной производной по времени результаты расчетов приводят к выводу, что для сред с показателем $\alpha < 1$ распространение тепла осуществляется медленнее в отличие от сред при $\alpha > 1$. При $1 < \alpha \leq 2$ процесс, происходящий во фрактальной среде можно характеризовать как процесс перехода от классической теплопроводности к волновому поведению.

При рассмотрении обобщенной задачи В. И. Даниловской напряжение σ_{11} , так как же в исходной задаче ($\alpha = 1$) имеет разрыв, но постепенно уменьшающийся с

уменьшением α . Так, при $\alpha = 0,95$ величина скачка уменьшается, а при $\alpha < 0,75$ разрыв напряжения исчезает.

При рассмотрении одномерной пространственно – нелокальной начально – краевой задачи теплопроводности показано, что термодинамическое равновесие наступает для различных значений параметра пространственной корреляции β , но в один и тот же момент времени $t \approx 2c$. При $\alpha = 0,5$ и $\beta = 1,9$ наблюдается медленный процесс теплопроводности – температура достигает равновесного значения при $t \approx 12c$, в то время как согласно классическому закону теплопроводности ($\alpha = 1$) - при $t \approx 2c$. При $\alpha = 1,9$ процесс теплопроводности приобретает волновой характер, в момент времени $t = 1,5c$ происходит отражение от границы.

При решении первой граничной задачи для дробно - дифференциального уравнения Лапласа, полученные результаты распределения температуры в круговых и эллиптических областях, показывают более равномерное распределение при $\beta \rightarrow 2$. Более плавное распределение связано с тем, что температура в некоторой точке определяется ее эволюцией во всей рассматриваемой области (эффект больших пробегов – полетов Леви).

При исследовании температурных напряжений в стержне в рамках пространственно- нелокальной модели термоупругости обнаружено, что нелокальность упругих взаимодействий приводит к колебаниям функции смещений вблизи нуля. Дробный показатель γ оказывает влияние на решение даже в случае классической теплопроводности ($\beta = 2$). Отметим, что учет пространственной нелокальности тепловых и упругих взаимодействий одновременно приводит к существенным изменениям результирующего поля перемещений.

Рассмотрены проблемы, связанные с определением механических свойств нанообъектов. Выделены три основных подхода к проблеме.

1. Аналитические, на основе стержневых, ферменных оболочечных конструкций;
2. Методы МД моделирования на основе экспериментальных потенциалов взаимодействия;

3. Методы, основанные на теории регулярных структур.

Проведен обзор исследований по проблеме определения механических свойств наноразмерных объектов. Построена модель композитного материала с наноразмерной ячейкой. Проведено математическое моделирование эксперимента по определению модуля упругости наностержня.

ПЕРЕЧЕНЬ ССЫЛОК

1. R. Metzler, J. Klafter. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach // *Phys. Rep.* – 2000. – 339, p. 1-77.
2. S. Lepri, R. Livi, A. Politi. Anomalous heat conduction, in book: *Anomalous transport: foundations and applications* edited by R. Klages, G. Radons, I.M. Sokolov, — Wiley, VCH (Berlin), 2008, – 584 p.
3. А.М. Нахушев. Дробное исчисление и его применение. — М.: Физматлит, 2003. — 272 с.
4. Учайкин В.В. Автомодельная аномальная диффузия и устойчивые законы. // *УФН*, – 2003. – т. 173, №8, – С. 847-876.
5. Смирнов Б.М. Энергетические процессы в макроскопических фрактальных структурах. // *УФН*. – 1993. – т. 161, №6. – С. 171-200.
6. Бейбалаев В.Д. Математическая модель теплопереноса в средах с фрактальной структурой. // *Математическое моделирование*. — 2009. – 21: 5. – С. 55-62.
7. Boyadjiev L., Scherer R. Fractional extensions of the temperature field problem in oil strata. // *Kuwait. J. Sci. Eng.* — 2004. – 31 (2). – p. 15-32.
8. Л.М. Зеленый, А.В. Милованов. Фрактальная топология и странная кинетика: от теории к проблемам космической электродинамики // *УФН*. — 2004. – т. 74, №8. – С. 810-853.
9. В.В. Филатов. О некоторых обратных задачах во фрактальных средах. // *Международная конференция «Обратные и некорректные задачи математической физики»*. — 2007. – www.math.nsc.ru/conference/ipmp07.
10. Старк Д.П. Диффузия в твердых телах. — Мир, 1980. – 240с.
11. Li B., Wang J. Anomalous heat conduction and anomalous diffusion in one dimensional systems. // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. – 91(4). – p. 044303.
12. Mainardi F. The fundamental solutions for the fractional diffusion-wave equation. // *Appl. Math. Lett.* — 1996. – 9. – p. 23-28.
13. Mainardi F. Fractional relaxation-oscillation and fractional diffusion-wave phenomena. // *Chaos, Solitons and Fractals*. — 1996. – 7. – p. 1461-1477.

14. Schneider W.R., Wyss W. Fractional diffusion and wave equations. // *J. Math. Phys.* — 1989. — 30. — p. 134-144.
15. Fujita Y. Integrodifferential equation which interpolates the heat equation and the equation. // *Osaka J. Math.* — 1990. — 27. — p. 309-321, 797-804.
16. Hanyga A. Multidimensional solutions of time-fractional diffusion-wave equations. // *Proc. R. Soc. Lond.* — 2002. — A 458. — p. 933-957.
17. Agrawal O.P. A general solution for the fourth-order fractional diffusion-wave equation. // *Fract. Calculus Appl. Anal.* — 2000. — 3. — p. 1-12.
18. Agrawal O.P. A general solution for the fourth-order fractional diffusion-wave equation defined in a bounded domain. // *Comp. Struct.* — 2003. — 79. — p. 1497-1503.
19. Beghin L. Pseudoprocesses governed by higher-order fractional differential equations. // *Electronic journal of probability.* — 2008. — vol. 13, n. 16. — p. 467-485.
20. Mainardi F., Paradisi P. Fractional diffusive waves. // *J. Comput. Acoustics.* — 2003. — 9. — p. 1417-1436.
21. Povstenko Y.Z. Fractional heat conduction equation and associated thermal stresses. // *J. Thermal Stresses.* — 2005. — 28. — p. 83-102.
22. Povstenko Y.Z. Stresses exerted by a source of diffusion in a case of a non-parabolic diffusion equation. // *Int. J. Eng. Sci.* — 2005. — 43. — p. 977-993.
23. Povstenko Y.Z. Two-dimensional axisymmetric stresses exerted by instantaneous pulses and sources of diffusion in an infinite space in a case of time-fractional diffusion equation. // *Int. J. Solids Struct.* — 2007. — 44. — p. 2324-2348.
24. Povstenko Y. Signalling problem for time-fractional diffusion-wave equation in a half-plane. // *Fractional calculus and applied analysis.* — 2008. — vol. 11, 3. — p. 329-352.
25. Mainardi F., Gorenflo R. Time-fractional derivatives in relaxation processes: a tutorial survey. // *Fractional calculus and applied analysis.* — 2007. — vol. 10, 3. — p. 269-308.
26. Kilbas A., Srivastava H.M., Trujillo J.J. Theory and applications of fractional differential equations. — North-Holland, Mathematics studies 204, 2006, — 524 p.

27. Вірченко Н.О., Рибак В.Я. Основи дробового інтегродиференціювання. Навч. посібник. — К., 2007. — 364 с.
28. Benchohra M., Hamani S., Ntouyas S.K. Boundary value problems for differential equations with fractional order. // *Surveys in mathematics and its applications*. — 2008. — vol. 3. — p. 1-12.
29. Rabha W.I. Existence results for fractional boundary value problem. // *Int. J. Contemp. Math. Sciences*. — 2008. — vol. 3, n. 36. — p. 1767-1774.
30. Luchko Y. Initial-boundary-value problems for the generalized time-fractional diffusion equation, to appear.
31. Yang Q., Turner I., Liu F. Analytical and numerical solutions for the time and space-symmetric fractional diffusion equation. // *ANZIAM J.* — 2009. — 50. — p. C800-C814.
32. Gorenflo R., Mainardi F. Fractional calculus: integral and differential equations of fractional order in A. Carpinteri, F. Mainardi (Editors): *Fractals and fractional calculus in continuum mechanics*, Springer Verlag, Wien and New York. — 1997. — p. 223-276.
33. M. Ciesielski, J. Leszczynski. Numerical solutions to boundary value problem for anomalous diffusion equation with Riesz-Feller fractional operator. // *Journal of theoretical and applied mechanics*. — 2006. — 44, 2. — p. 393-403.
34. W. Chen, S. Holm. Fractional Laplacian time-space models for linear and nonlinear lossy media exhibiting arbitrary frequency dependency. // *J. Acoustic Society of America*. — 2004. — 115(4). — p. 1424-1430.
35. Trefan G., Floriani E., West B.J., Grigolini P. Dynamical approach to anomalous diffusion: response of Levy processes to a perturbation. // *Phys. Rev. E*. — 1994. — p. 2564-2579.
36. Benson D.A., Wheatcraft S.W., Meerschaert M.M. The fractional-order equation of Levy motion, *Water Resour. Res.* — 2000. — 36. — p. 1413-1424.
37. Benson D.A., Schumer R., Meerschaert M.M., Wheatcraft S.W. Fractional dispersion, Levy motion, and the MADE tracer tests // *Transp. Por. Med.* — 2003. — 42. — p. 211-240.

38. Scalas E., Gorenflo R., Mainardi F. Uncoupled continuous-time random walks: solutions and limiting behaviour of the master equation, *Phys. Rev. E.* — 2004. — 692. — 011107.
39. Paradisi P., Cesari R., Mainardi F., Tampieri F. The fractional Fick's law for non-local transport processes // *Physica A.* — 2003. — 293 (1-2). — p. 130.
40. Povstenko Y.Z. Thermoelasticity which uses fractional heat conduction equation. // *Мат. методи та фіз.-мех. поля.* — 2008. — 51, №2. — С. 239-246.
41. Abdennadher A., Neel M. Fractional flux and non-normal diffusion. // *Electronic Journal of differential equation.* — 2007. — Conference, 16. — С. 1-13.
42. Zhang H., Liu F., Anh Vo.V. Numerical approximation of Levy-Feller diffusion equation and its probability interpretation. // *Journal of Computational and Applied Mathematics.* — 2006. — 206 (2). — p. 1098-1115.
43. Zhang H., Liu F. The fundamental solutions of the space, space-time Riesz fractional partial differential equations with periodic conditions. // *Numer. Math. J. Chinese Univ. (English Ser.).* — 2007. — issue 2, vol. 16. — p. 181-192.
44. Huang F., Liu F. The fundamental solution of the space-time fractional advection-dispersion equation. // *J. Appl. Math. & Computing.* — 2005. — vol. 18, No. 1-2, — p. 339-350.
45. Weitzner H., Zaslavsky G.M. Some applications of fractional equations. // *Communications in nonlinear science and numerical simulation.* — 2003. — vol. 8, num. 3. — p. 273-283.
46. Mainardi F. Applications of integral transforms in fractional diffusion processes. // *Integral transforms and special functions.* — 2004. — vol. 15, no. 6. — p. 477-484.
47. Momani Sh. General solutions for the space and time-fractional diffusion-wave equation. // *Journal of physical sciences.* — 2006. — vol. 10. — p. 30-43.
48. Roop J.P. Computational aspects of FEM approximation of fractional advection dispersion equations on bounded domains in R^2 . *J. Comput. Appl. Math.* 193, pp. 243-268, 2006.
49. Shen S., Liu F. Error analysis of an explicit finite difference approximation for the space fractional diffusion with insulated ends. *ANZIAM J.* 46 (E), pp. 871-887, 2005.

50. Yang Q., Liu F., Turner I. Numerical methods for fractional partial differential equations with Riesz space fractional derivatives. *Appl. Math. Model*, 34, pp. 200-218, 2010.
51. Haubold H.J., Mathai A.M., Saxena R.K. Further solutions of fractional reaction-diffusion equations in terms of the H-functions. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 235, pp. 1311-1316, 2013.
52. Золотухин И.В., Каинин Ю.Е., Логинова В.И. Твёрдотельные фрактальные структуры. // *Альтернативная энергетика и экология*. — 2005. — №9, 29. — С. 56-66.
53. Balankin A.S. Elastic behavior of materials with multifractal structures // *Phys.Rev. B*. — 1996. — vol. 53, no. 9. — p. 5438-5443.
54. Смирнов Б.М. Аэрогели. // *УФН*. — 1987. — т. 152, вып. 3. — С. 133-157.
55. Carpinteri A., Chiaia B., Cornetti P. A fractal theory for the mechanics of elastic materials. // *Materials science and engineering A*. — 2004. — 365. — С. 235-240.
56. Atanackovic T.M., Stankovic B. Generalized wave equation in nonlocal elasticity. // *Acta Mechanica*. — 2009. — 208. — p. 1-10.
57. Eringen A.C., Edelen D.G.B. On non local elasticity // *Int. J. Eng. Sci.*, 10, 233-248 (1972).
58. Aifantis E.C., Gradient effects at macro micro and nano scales // *J. Mech. Behav. Mat.*, 5, 355-375 (1994).
59. Di Paola, M., Zingales M. Long-range cohesive interactions of non-local continuum mechanics faced by fractional calculus // *Int. J. Sol. Struct.*, 45, 5642-5659.
60. Carpinteri A., Cornetti P., Puzzi S. Scaling laws and multiscale approach in the mechanics of heterogeneous and disordered materials // *Appl. Mech. Rev.*, 59, 283-304 (2006).
61. Ostoja-Starzewski M. Towards thermoelasticity of fractal media. // *Journal of thermal stresses*. — 2007. — 30. — p. 889-896.
62. Sherief H.H., El-Sayed A.M.A., Abd El-Latief A.M. Fractional order theory of thermoelasticity // *International Journal of Solids and Structures*, 47 (2010), pp. 269-275.

63. Youssef H. M. Theory fractional order generalized thermoelasticity // *J. Heat Transfer (ASME)*, 132(6), 2010, doi: 10.1115/3.4000705.
64. Povstenko Y.Z. Theory of thermoelasticity based on the space-time-fractional heat conduction equation. // *Phys. Scr.* — 2009. — Т 136. — p. 014017-014023.
65. Povstenko Y.Z. Fundamental solutions to central symmetric problems for fractional heat conduction equation and associated thermal stresses. // *Journal of thermal stresses.* — 2008. — vol. 31, issue 2. — p. 127-148.
66. Povstenko Y. Time-fractional radial heat conduction in a cylinder and associated thermal stresses // *Arch. Appl. Mech.*, doi: 10.1007/s00419-011-0560-x.
67. Jaemin Ahn, Sungkwon Kang, YongHoon Kwon. A flexible inverse Laplace transform algorithm and its application // *Computing.* — 2003. — 71, № 2. — P. 115–133.
68. Фильштинский Л. А. Периодические по времени однородные решения уравнения теплопроводности для анизотропного слоя в \mathbb{R}^3 // *Мат. методы та фіз.-мех. поля.* — 2003. — 46, № 2. — С. 147–154.
69. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. — Москва: Наука, 1979. — 832 с.
70. El-Sayed A.M., Gaber M. On the finite Caputo and finite Riesz derivatives. // *EJTR.* — 2006. — 3 No. 12. — p. 81-95.
71. Новацкий В. Теория упругости. — М.: Мир, 1975. — 872 с.
72. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Эллиптические и автоморфные функции. Функции Ламе и Матье. (Серия: «Справочная математическая библиотека»). — М.: Наука, 1967. — 300 с.
73. Luchko Y. Algorithms for evaluation of the Wright function for the real arguments' values. // *Fractional calculus and applied analysis.* — 2008. — vol. 11, no. 3. — p. 57-75.
74. Даниловская В.И. Температурные напряжения в упругом полупространстве, возникающие вследствие внезапного нагревания границы // *ПММ.* — 1950. — 14. — С. 316-318.

75. Miller L. On the controllability of anomalous diffusions generated by the fractional Laplacian, *Math. Control Signals Systems*, 18: 260-271, 2006.
76. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. Специальные функции. — М.: Наука, 1983. — 752 с.
77. Sami I. Muslih, Om P. Agrawal. Riesz Fractional Derivatives and Fractional Dimensional Space, *Int J. Theor Phys*, 49: 270-275, 2010.
78. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. — М.: Наука, 1971. — 512 с.
79. Jaemin Ahn, Sungkwon Kang, Yong Hoon Kwon. A flexible inverse laplace transform algorithm and its application// *Computing- 2003.- Volume 71, Issue 2. - pp. 115-131*
80. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. О механических характеристиках наноразмерных объектов // *Физика твердого тела*. 2002. Т. 44. № 12. С. 2158-2163.
81. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. Аномалии механических характеристик наноразмерных объектов // *Докл. АН*. 2001. Т. 381. № 3. С. 825-827.
82. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н. Ф. Особенности расчета изгибной жесткости нанокристаллов // *Докл. АН*. 2002. Т. 385. № 4. С. 494-496.
83. Кривцов А.М. К теории сред с микроструктурой // *Труды СПбГТУ*. 1992. №443. С. 9-17.
84. Кривцов А. М. Растяжение системы из четырех взаимодействующих атомов // *Труды СПбГТУ*. 1994. № 448. С. 176-178.
85. Krivtsov A.M. Constitutive Equations of the Nonlinear Crystal Lattice // *ZAMM · Z. angew. Math. Mech*. 1999. V. 79. №S2. P. 419–420.
86. Кривцов А. М. Компьютерное исследование взаимосвязи между откольной прочностью и дисперсией скоростей мезочастиц. // *Труды XXV – XXVI летних школ. Анализ и синтез нелинейных механических колебательных систем*. С. — Пб. 1998. Т.2. С. 258-267.
87. Григолук Э. И., Фильштинский Л. А. Перфорированные пластины и оболочки. — М.: Наука, 1970. — 556 с.

88. Григолюк Э. И., Фильштинский Л. А. Периодические кусочно-однородные структуры. – М.: Наука, 1992. – 288 с.
89. Григолюк Э. И., Фильштинский Л. А. Регулярные кусочно-однородные структуры с дефектами. – М.: Физматгиз, 1994. – 335 с.
90. K.T. Lau, D. Hui: *Composites: Part B* 33, 263 (2002)
91. B.I. Yakobson, P.H. Avouris, in: *Carbon nanotubes*, Chapt. 9, ed. by M.S. Dresselhaus, P.H. Avouris, (Springer Verlag, Berlin-Heidelberg 2001) p. 287
92. E.T. Thostenson, Z. Ren, T.W. Chou: *Comp. Sci. Tech.* 61, 1899 (2001)
93. L. Vaccarini, C. Goze, L. Henrard, E. Hernandez, P. Bernier, A. Rubio: *Carbon* 38, 1681 (2000)
94. J.P. Salvetat, J.M. Bonard, N.H. Thomson, A.J. Kulik, L. Forro, W. Benoit, L. Zuppiroli: *Appl. Phys. A* 69, 255 (1999)
95. L.S. Schadler, S.C. Giannaris, P.M. Ajayan: *Appl. Phys. Lett.* 73, 3842 (1998)
96. D. Qian, E.C. Dickey, R. Andrews, T. Rantell: *Appl. Phys. Lett.* 76, 2868 (2000)
97. M.M.J. Treacy, T.W. Ebbesen, J.M. Gibson: *Nature* 381, 678 (1996)
98. E.W. Wong, P.E. Sheehan, C.M. Lieber: *Sci.* 277, 1971 (1997)
99. M.F. Yu, O. Lourie, M.J. Dyer, K. Moloni, T.F. Kelly, R.S. Ruoff: *Sci.* 287, 637 (2000)
100. A. Krishnan, E. Dujardin, T.W. Ebbesen, P.N. Yianilos, M.M.J. Treacy: *Phys. Rev. B* 58, 14 013 (1998)
101. M.F. Yu, B.S. Files, S. Arepalli, R.S. Ruoff: *Phys. Rev. Lett.* 84, 5552 (2000)
102. B.I. Yakobson, C.J. Brabec, J. Bernholc: *Phys. Rev. Lett.* 76, 2511 (1996)
103. B.I. Yakobson: *Appl. Phys. Lett.* 72, 918 (1998)
104. M.B. Nardelli, B.I. Yakobson, J. Bernholc: *Phys. Rev. B* 57, R4277 (1998)
105. K.N. Kudin, G.E. Scuseria, B.I. Yakobson: *Phys. Rev. B* 64, 235 406 (2001)
106. E. Hernandez, C. Goze, P. Bernier, A. Rubio: *Phys. Rev. Lett.* 80, 4502 (1998)
107. E. Hernandez, C. Goze, P. Bernier, A. Rubio: *Appl. Phys. A.* 68, 287 (1999)
108. G.V. Lier, C.V. Alsenoy, V.V. Doren, P. Geerlings: *Chem. Phys. Lett.* 326, 181 (2000)
109. J.P. Lu: *J. Phys. Chem. Solids.* 58, 1649 (1997)

110. J.P. Lu: Phys. Rev. Lett. 79, 1297 (1997)
111. G.M. Odegard, T.S. Gates, L.M. Nicholson, K.E. Wise: NASA Langley Res. Center, NASA-2002-TM211454
112. G.M. Odegard, V.M. Harik, K.E. Wise, T.S. Gates: NASA Langley Res. Center, NASA-2001-TM211044
113. R.S. Ruoff, D.C. Lorents: Carbon 33, 925 (1995)
114. S. Govindjee, J.L. Sackman: Solid State Commun. 110, 227 (1999)
115. Z.H. Tu, Z.C. Ou-Yang: Phys. Rev. B 65, 233 407 (2002)
116. M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, R. Saito: Carbon 33, 883 (1995)
117. C.F. Cornwell, L.T. Wille: Solid State Commun. 101, 555 (1997)
118. S.B. Sinnott, O.A. Shenderova, C.T. White, D.W. Brenner: Carbon 36,1 (1998)
119. T. Vodenitcharova, L.C. Zhang: Phys. Rev. B 68, 165 401 (2003)
120. W.D. Cornell, P. Cieplak, C.I. Bayly, I.R. Gould, K.M. Merz, D.M. Ferguson, D.C. Spellmeyer, T. Fox, J.W. Caldwell, P.A. Kollman: J. Am.Chem. Soc. 117, 5179 (1995)
121. V.N. Popov, V.E. Van Doren, M. Balkanski: Phys. Rev. B 61, 3078 (2000)
122. D. Srivastava, M. Menon, K. Cho: Phys. Rev. Lett. 83, 2973 (1999)
123. T. Natsuki, K. Tantzakarn, M. Endo. Effects of carbon nanotube structures on mechanical properties. Appl. Phys. A.79. 117-124 (2004)