Министерство образования и науки Российской Федерации Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого Физико-механический институт

Высшая школа теоретической механики и математической физики

Работа допущена к защите Директор ВШТМиМФ, д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН \_\_\_\_\_ А. М. Кривцов «\_\_\_\_»\_\_\_\_2022 г.

# ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА

# Энергетические процессы в неоднородном одномерном кристалле с периодической структурой

по направлению подготовки

01.03.03 «Механика и математическое моделирование»

профиль

01.03.03\_03 Механика и математическое моделирование процессов

нефтегазодобычи

Выполнил

студент гр. 5030103/80101

Руководитель

д.ф-м.н., доцент

Ф. И. Кондратенко

А. М. Кривцов

Санкт-Петербург 2022

#### САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО

#### Физико – механический институт

#### Высшая школа теоретической механики и математической физики

УТВЕРЖДАЮ

Директор ВШТМиМФ

А. М. Кривцов

«\_\_»\_\_\_\_20\_\_г.

#### ЗАДАНИЕ

#### на выполнение выпускной квалификационной работы

студенту Кондратенко Федору Игоревичу, гр. 5030103/80301

- 1. Тема работы: Энергетические процессы в неоднородном одномерном кристалле с периодической структурой.
- 2. Срок сдачи студентом законченной работы: 06.06.2022
- 3. Исходные данные по работе: актуальные научные публикации, исследования энергетической динамики в средах с микроструктурой.
- 4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов): Постановка задачи квалификационной работы, исследование распространения энергии в различных средах с микроструктурой, сравнение с самой простой моделью цепочкой Гука.
- 5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): не предусмотрено
- 6. Консультанты по работе: отсутствуют
- 7. Дата выдачи задания 13.05.2022

Руководитель ВКР \_\_\_\_\_ А. М. Кривцов

Задание принял к исполнению 13.05.2022

Студент \_\_\_\_\_ Ф. И. Кондратенко

#### РЕФЕРАТ

На 35 с., 7 рисунков

# ЦЕПОЧКА, ЭНЕРГИЯ, ПОТОК, МОМЕНТ ЭНЕРГИИ, ТЕПЛОВОЕ РАВНОВЕСИЕ

Работа посвящена исследованию процесса перехода энергии в гармонических одноатомном и двухатомном кристаллах. Также исследуется процесс перехода к тепловому равновесию кристалла с периодическими включениями.

Также в работе предложен метод взаимных энергий, описан его математический аппарат. Доказано сохранение потока и суперпотока энергии для кристалла Гука. Показано, что в кристалле с чередованием масс сохраняется поток энергии между ячейками периодичности.

Для задачи о переходе к тепловому равновесию кристалла с периодическими включениями исследован вопрос о влиянии включений на теорему о равнораспределении энергии по степеням свободы. Предложено приближенное аналитическое решение задачи о нахождении собственных чисел и собственных векторов динамической матрицы системы.

#### THE ABSTRACT

35 pages, 7 pictures

#### CHAIN, ENERGY, FLOW, ENERGY MOMENT, THERMAL EQUILIBRIUM

The work is devoted to the study of the process of energy transfer in harmonic monatomic and diatomic crystals. The process of transition to thermal equilibrium of a crystal with periodic inclusions is also studied.

The paper also proposes the method of mutual energies and describes its mathematical apparatus. The conservation of flux and superflux of energy for Hooke's crystal is proved. It is shown that in a crystal with mass alternation, the energy flow between periodicity cells is preserved.

For the problem of transition to thermal equilibrium of a crystal with periodic inclusions, the question of the influence of inclusions on the theorem on the

equipartition of energy over degrees of freedom is investigated. An approximate analytical solution of the problem of finding the eigenvalues and eigenvectors of the dynamic matrix of the system is proposed.

# СОДЕРЖАНИЕ

	5
Введение	5
Глава 1 Исследование цепочки Гука методом взаимных энергий	8
1.1 Постановка задачи. Общие уравнения	8
1.2 Понятие взаимной энергии	9
1.3 Оператор разности по индексу	10
1.3 Уравнение баланса взаимной энергии	11
1.4 Связь взаимного потока с потоком энергии	12
1.5 Уравнение баланса потока энергии	13
1.6 Уравнение баланса взаимного потока энергии и взаимный суперпото энергии	эк 14
1.7 Уравнения баланса применимо к бесконечному кристаллу	15
1.8 Заключение к главе 1	17
Глава 2 Исследование цепочки с чередованием масс	18
2.1 Постановка задачи. Общие уравнения	18
2.2 Отличия метода взаимных энергий в кристалле с чередованием масс тривиального случая	; от 19
2.2 Ячейка периодичности кристалла с чередованием масс	20
2.3 Производная потока и взаимного потока по времени	21
2.4 Первый момент энергии	21
2.4 Заключения к главе 2	22
Глава 3 Переход к тепловому равновесию в кристалле с периодическими	
включениями	23
3.1 Постановка задачи. Основные уравнения	23
3.2 Отыскание общего вида матриц	24
3.2 Определение равновесного значения температур	25
3.3 Численный эксперимент. Результаты	26
3.4 Построение приближенного аналитического решения	28
3.5 Выводы к главе 3	31
Заключение	32
Список использованной литературы	33

# Введение

В настоящий момент времени возможно выращивание одномерных карбоновых кристаллов углерода внутри нанотрубок для нужд микроэлектронной промышленности. Экспериментально была доказана эффективность использования полученных материалов качестве В теплопроводников. Стоит отметить, перенос что тепла нарушал общеизвестный закон переноса энергии – закон Фурье. Вместо этого распространение тепловой энергии больше напоминает волновой процесс. баллистическим Данное явление было названо переносом энергии, исследования данного процесса до сих пор продолжаются. Так, например, в основные работе [20] были выведены уравнения, описывающие баллистический перенос энергии.

Для разработки теоретического описания процессов переноса массы и энергии возможно применение двух подходов: континуального и дискретного. Континуальный подход подразумевает рассмотрение материала как сплошной среды. Основным преимуществом данного подхода является возможность использования формул классической механики.

Дискретный подход, в отличие от континуального, позволяет оперировать непосредственно атомами в кристаллической решетке, тем самым задавая микроструктуру материала. Кроме того, использование дискретного подхода упрощает проведение численных экспериментов. Это связано с отсутствием необходимости построения сетки для вычислений.

Для исследования переноса энергии возможно введение простейших моделей. Примером таковой является цепочка Гука – одномерная одноатомная цепочка. Исследование данной модели приводилось в работах [9, 10, 11-13]. Более подробно данная модель и ее модификации исследовались в работах [7]. Даже в такой простой модели можно наблюдать эффекты, присущие динамики энергии.

Но цепочка Гука не отображает реальные свойства объектов, так как все элементы модели имеют одинаковые свойства. Соответственно, данная модель представляет собой пример «чистого» материала, то есть, материала без посторонних примесей. В настоящее время получение таких материалов в промышленных масштабах почти невозможно, следовательно, необходимо ввести модель, описывающую неоднородный материал.

Примером такой модели является цепочка с чередованием масс или жесткостей. Вывод уравнений, описывающих процесс переноса энергии в данной цепочке – нетривиальная задача.

Кроме того, для полного описания энергетических процессов необходимо исследовать процесс перехода изучаемой модели к тепловому равновесию, например, исследовать зависимость равновесных температур от числа включений (количество атомов с другими характеристиками в цепочке).

Объектом исследования данной выпускной квалификационной работы являются различные среды с микроструктурой: бесконечный одноатомный одномерный гармонический кристалл, бесконечный кристалл с чередованием масс и кристалл с периодическими включениями. Предметом исследования являются энергетические процессы и распространение энергии в исследуемых средах.

Целью выпускной квалификационной работы было выбрано исследование энергетических процессов, а также разработка нового метода их описания, отличающегося от методов энергетической динамики.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

- 1. Разработать метода взаимных энергий;
- 2. Доказать законы сохранения энергии в расследуемых средах;
- Рассмотреть первый момент энергии в исследуемых средах и сделать вывод о его зависимости от времени;

 Исследовать процесс перехода к тепловому равновесию кристалла с периодическими включениями и периодическими граничными условиями.

Сформулированные цель и задачи сформировали структуру данной работы. Работа состоит из введения, трех глав и заключения. Первая глава посвящена введению аппарата взаимных энергий и применению его к цепочке Гука. Вторая глава описывает применение метода взаимных энергий к исследованию цепочки с чередованием масс. Третья глава посвящена рассмотрению вопроса о переходе к тепловому равновесию кристалла с чередованием масс и периодическими граничными условиями.

# Глава 1 Исследование цепочки Гука методом взаимных энергий

В данной главе рассматривается простейшая модель среды с микроструктурой – одномерный одноатомный гармонический кристалл или цепочка Гука. Также в данной главе вводится аппарат взаимных энергий.

#### 1.1 Постановка задачи. Общие уравнения



#### Рис. 1. Общий вид цепочки

Дана одномерная кристаллическая цепочка, представленная на рис. 1. Жесткость всех пружин одинакова и равна *с*, масса всех частиц – *m*. Цепочка бесконечна, пружины линейны, то есть, взаимодействуют по закону Гука.

Соответственно, перемещения каждого атома в данной модели удовлетворяет следующем уравнению:

$$\ddot{m}u_n = c(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}), n \in \mathbb{Z},$$
 (1.1)

где *n* – номер частицы, *u<sub>n</sub>* – отклонение *n*-й частицы из положения равновесия. Точкой обозначена производная по времени. Положим индексы пружин полуцелыми.

Учтем следующие соотношения:

$$v_n \stackrel{\text{def}}{=} \dot{u}_n,$$

$$\epsilon_n \stackrel{\text{def}}{=} u_{n+\frac{1}{2}} - u_{n-\frac{1}{2}},$$

$$v_n = \frac{c}{m} \left( \epsilon_{n+\frac{1}{2}} - \epsilon_{n-\frac{1}{2}} \right),$$
(1.2)

$$\epsilon_n = v_{n+\frac{1}{2}} - v_{n-\frac{1}{2}}$$

.

В уравнениях (1.2)  $v_n$  – скорость частицы с индексом n,  $\epsilon_n$  – деформация пружины с индексом n.

Обозначим энергию одной частицы в обычном понимании этого термина как:

$$E_n = \frac{mv_n^2}{2} + \frac{c\epsilon^2_{n+\frac{1}{2}}}{2}$$
(1.3)

Нетрудно заметить, что энергия состоит из кинетической энергии самого атома и потенциальной энергии пружины, находящейся справа. Таким образом, суммируя по всем частицам получаем суммарную энергию цепочки:

$$E \stackrel{\text{\tiny def}}{=} \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n \tag{1.4}$$

## 1.2 Понятие взаимной энергии

Введем понятие взаимной кинетической и потенциальной энергии:

$$\mathcal{E}_{n,k} \stackrel{\text{\tiny def}}{=} m \frac{\nu_n \nu_k}{2}$$

$$\mathcal{P}_{n,k} \stackrel{\text{\tiny def}}{=} c \frac{\varepsilon_n \varepsilon_k}{2}$$
(1.5)

В приведенных выше выражениях скорости и деформации берутся с разными индексами. Соответственно, при подстановке одинаковых индексов взаимные энергии вырождаются в потенциальную и кинетическую энергии соответственно.

Дополнительными условиями потребуем:

$$v_n = \begin{pmatrix} v_n, & n \in \mathbb{Z} \\ 0, & n = k + \frac{1}{2}, & k \in \mathbb{Z} \\ \varepsilon_n, & n \in \mathbb{Z} \\ \varepsilon_n, & n = k + \frac{1}{2}, & k \in \mathbb{Z} \end{pmatrix}$$
(1.6)

За счет дополнительных условий в выражении (1.6) при попытке подстановки «неправильных» (полуцелых для частиц или целых для пружин) индексов во взаимную потенциальную или кинетическую энергию данные величины будут обращаться в нуль.

Введем понятие общей взаимной энергии:

$$\xi_{n,k} \stackrel{\text{\tiny def}}{=} \mathcal{E}_{n,k} + \mathcal{P}_{n,k} \tag{1.7}$$

С учетом соотношений (1.6) получим:

$$\xi_{n,k} = \begin{pmatrix} \mathcal{E}_{n,k}, & n,k \in \mathbb{Z} \\ \mathcal{P}_{n,k}, & n = m + \frac{1}{2}, & k = i + \frac{1}{2}, & m,i \in \mathbb{Z} \end{cases}$$
(1.8)

То есть, общая взаимная энергия в зависимости от индексов вырождается либо в взаимную кинетическую, либо в взаимную потенциальную энергию.

Установим зависимость между энергией одной частицы и общей взаимной энергией:

$$E_n = \xi_{n,n} + \xi_{n+\frac{1}{2},n+\frac{1}{2}}$$
(1.9)

Отметим замечательное свойство взаимной энергии, которое нам пригодится в дальнейшем:

$$\xi_{n,k} = \xi_{k,n} \tag{1.10}$$

Свойство очевидно и не требует доказательства.

#### 1.3 Оператор разности по индексу

Для упрощения решения введем оператор центральной разности по полуцелому индексу:

$$\Delta_n f_n \stackrel{\text{\tiny def}}{=} f_{n+\frac{1}{2}} - f_{n-\frac{1}{2}} \tag{1.11}$$

Перепишем выражения (1.2) с учетом (1.11):

$$\dot{\nu}_n = \frac{c}{m} \Delta_n \varepsilon_n \tag{1.12}$$

$$\dot{\varepsilon}_n = \Delta_n v_n$$

Стоит отметить, что оператор действует только по тому индексу, который указан в его подстрочном индексе.

Отметим несколько важных свойств оператора разности по индексу:

$$(\Delta_{i} + \Delta_{j})A_{i,j} = \Delta_{i}A_{i,j} + \Delta_{j}A_{i,j}$$

$$\Delta_{i}A_{j} = A_{j}$$

$$\Delta_{j}(A_{i}B_{j}) = A_{i}\Delta_{j}B_{j}$$

$$\Delta_{i}A_{i} + \Delta_{i}B_{i} = \Delta_{i}(A_{i} + B_{i})$$
(1.13)

# 1.3 Уравнение баланса взаимной энергии

Продифференцируем общую взаимную энергию по времени:

$$\dot{\xi}_{n,k} = \dot{\mathcal{K}}_{n,k} + \dot{\mathcal{P}}_{n,k} = \frac{c}{2} \left[ \Delta_n \varepsilon_n v_k + \Delta_k \varepsilon_k v_n \right] + \frac{c}{2} \left[ \Delta_n v_n \varepsilon_k + \Delta_k v_k \varepsilon_n \right]$$
(1.14)

Перегруппируем и воспользуемся свойством оператора разности по индексу (1.13):

$$\dot{\xi}_{n,k} = (\Delta_n + \Delta_k) \frac{c}{2} [\nu_k \varepsilon_n + \nu_n \varepsilon_k]$$
(1.15)

Введем понятие взаимного потока энергии:

$$\mathcal{H}_{n,k} \stackrel{\text{\tiny def}}{=} \frac{c}{2} \left[ v_k \varepsilon_n + v_n \varepsilon_k \right] \tag{1.16}$$

С учетом выражения (1.16) получим:

$$\dot{\xi}_{n,k} = (\Delta_n + \Delta_k)\mathcal{H}_{n,k} = \mathcal{H}_{n+\frac{1}{2},k} - \mathcal{H}_{n-\frac{1}{2},k} + \mathcal{H}_{n,k+\frac{1}{2}} - \mathcal{H}_{n,k-\frac{1}{2}}$$
(1.17)

Отметим полезное свойство взаимного потока энергии:

$$\mathcal{H}_{n,k} = \mathcal{H}_{k,n} \tag{1.18}$$

Данное свойство пригодится еще не раз в дальнейшем при определении производной взаимного потока по времени.

Перепишем (1.17) с учетом (1.18):

$$\dot{\xi}_{n,n} = \mathcal{H}_{n+\frac{1}{2},n} - \mathcal{H}_{n-\frac{1}{2},n} + \mathcal{H}_{n,n+\frac{1}{2}} - \mathcal{H}_{n,n-\frac{1}{2}} = 2\mathcal{H}_{n+\frac{1}{2},n} - 2\mathcal{H}_{n-\frac{1}{2},n}$$
(1.19)

Уже на данном этапе можно наблюдать интересный эффект: при дифференцировании энергии индексы «расходятся» от базового индекса.

#### 1.4 Связь взаимного потока с потоком энергии

Продифференцируем энергию частицы по времени:

$$\dot{E}_n = H_{n-\frac{1}{2}} - H_{n+\frac{1}{2}} \tag{1.20}$$

При этом:

$$H_n \stackrel{\text{\tiny def}}{=} -c\varepsilon_n v_{n+\frac{1}{2}} \tag{1.21}$$

Выражение (1.21) есть ни что иное, как определение потока энергии.

Подставим выражение энергии в соответствии с формулой (1.9) и продифференцируем:

$$\begin{split} \dot{E}_{n} &= \dot{\xi}_{n,n} + \dot{\xi}_{n+\frac{1}{2},n+\frac{1}{2}} = \\ &= 2 \left[ \mathcal{H}_{n+\frac{1}{2},n} - \mathcal{H}_{n-\frac{1}{2},n} \right] + 2 \left[ \mathcal{H}_{n+1,n+\frac{1}{2}} - \mathcal{H}_{n,n+\frac{1}{2}} \right] = \qquad (1.22) \\ &= 2 \left[ \mathcal{H}_{n+1,n+\frac{1}{2}} - \mathcal{H}_{n-\frac{1}{2},n} \right] \end{split}$$

Подставим в выражение, полученное выше, формулу (1.20):

$$\dot{E}_n = 2\left[\mathcal{H}_{n+1,n+\frac{1}{2}} - \mathcal{H}_{n-\frac{1}{2},n}\right] = H_{n-\frac{1}{2}} - H_{n+\frac{1}{2}}$$
(1.23)

Нетрудно установить зависимость между взаимным потоком и потоком энергии:

$$H_{n-\frac{1}{2}} = -2\mathcal{H}_{n,n-\frac{1}{2}}$$

$$H_{n+\frac{1}{2}} = -2\mathcal{H}_{n+1,n+\frac{1}{2}}$$
(1.24)

Обобщив данное выражение, получим очевидную взаимосвязь между потоком энергии и взаимным потоком:

$$H_n = -2\mathcal{H}_{n+\frac{1}{2},n}$$
(1.25)

Проверим выражение (1.25), используя определение потока энергии и взаимного потока:

$$H_{n} = -c\varepsilon_{n}v_{n+\frac{1}{2}} = -\frac{c}{2} \left[ \varepsilon_{n}v_{n+\frac{1}{2}} + \varepsilon_{n+\frac{1}{2}}v_{n} + \varepsilon_{n}v_{n+\frac{1}{2}} + \varepsilon_{n+\frac{1}{2}}v_{n} \right]$$
  
=  $-2\mathcal{H}_{n+\frac{1}{2},n}$  (1.26)

Таким образом, установлена взаимосвязь потока энергии с взаимным потоком.

## 1.5 Уравнение баланса потока энергии

Продифференцируем взаимный поток энергии по времени:

$$\dot{\mathcal{H}}_{n,k} = \frac{c}{2} \Big[ \frac{c}{m} \Delta_k \varepsilon_k \varepsilon_n + \Delta_n v_k v_n + \frac{c}{m} \Delta_n \varepsilon_n \varepsilon_k + \Delta_k v_n v_k \Big] =$$
(1.27)  
$$= \frac{c}{m} \Big[ \Delta_k (\frac{c}{2} \varepsilon_n \varepsilon_k + \frac{m}{2} v_n v_k) + \Delta_n (\frac{c}{2} \varepsilon_n \varepsilon_k + \frac{m}{2} v_n v_k) \Big] = \frac{c}{m} (\Delta_n + \Delta_k) \xi_{n,k}$$
)

В формуле (1.27) установлена взаимосвязь производной взаимного потока и взаимной энергии. Используя выражение (1.25), запишем уравнение баланса для потока энергии:

$$\dot{H}_{n} = -2\dot{\mathcal{H}}_{n+\frac{1}{2},n} = -\frac{2c}{m} (\Delta_{n+\frac{1}{2}} + \Delta_{n})\xi_{n+\frac{1}{2},n}$$
(1.28)

Подробно распишем получившееся выражение, воспользовавшись свойствами оператора разности по индексу:

$$\dot{H}_{n} = -\frac{2c}{m} (\Delta_{n+\frac{1}{2}} + \Delta_{n}) \xi_{n+\frac{1}{2},n}$$

$$= -\frac{2c}{m} (\xi_{n+1,n} - \xi_{n,n} + \xi_{n+\frac{1}{2},n+\frac{1}{2}} - \xi_{n+\frac{1}{2},n-\frac{1}{2}})$$
(1.29)

Перегруппировав слагаемые, получим:

$$\dot{H}_{n} = -\frac{2c}{m} \left( \xi_{n+1,n} - \xi_{n,n} + \xi_{n+\frac{1}{2},n+\frac{1}{2}} - \xi_{n+\frac{1}{2},n-\frac{1}{2}} \right) =$$

$$= -\frac{2c}{m} \left[ (\xi_{n+1,n} + \xi_{n+\frac{1}{2},n+\frac{1}{2}}) - (\xi_{n,n} + \xi_{n+\frac{1}{2},n-\frac{1}{2}}) \right]$$
(1.30)

Введем понятия суперпотока энергии:

$$G_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2c}{m} \left[ \xi_{n,n} + \xi_{n+\frac{1}{2},n-\frac{1}{2}} \right]$$
(1.31)

Подставив (1.31) в (1.30), получим:

$$\dot{H}_n = G_n - G_{n+\frac{1}{2}} \tag{1.32}$$

Введение понятия суперпотока энергии позволяет в дальнейшем сильно упростить вывод законов сохранения.

# 1.6 Уравнение баланса взаимного потока энергии и взаимный суперпоток энергии

Запишем уравнение баланса взаимного потока энергии:

$$\dot{\mathcal{H}}_{n,k} = \frac{c}{m} (\Delta_n + \Delta_k) \xi_{n,k} = \frac{c}{m} \left[ \xi_{n+\frac{1}{2},k} - \xi_{n-\frac{1}{2},k} + \xi_{n,k+\frac{1}{2}} - \xi_{n,k-\frac{1}{2}} \right] = \frac{c}{m} \left[ \xi_{n+\frac{1}{2},k} + \xi_{n,k+\frac{1}{2}} \right] - \frac{c}{m} \left[ \xi_{n,k-\frac{1}{2}} + \xi_{n-\frac{1}{2},k} \right]$$
(1.33)

Введем понятия взаимного суперпотока энергии:

$$\mathcal{G}_{n,k} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{c}{m} \left[ \xi_{n,k-\frac{1}{2}} + \xi_{n-\frac{1}{2},k} \right]$$
(1.34)

Перепишем выражение (1.33) с учетом (1.34):

$$\dot{\mathcal{H}}_{n,k} = \mathcal{G}_{n+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} - \mathcal{G}_{n,k}$$
(1.35)

Установим взаимосвязь взаимного суперпотока энергии с суперпотоком энергии. Для этого продиффиренцируем выражение (1.25) по времени:

$$\dot{H}_{n} = -2\dot{\mathcal{H}}_{n+\frac{1}{2},n} \Rightarrow G_{n} - G_{n+\frac{1}{2}} = \mathcal{G}_{n+1,n+\frac{1}{2}} - \mathcal{G}_{n+\frac{1}{2},n}$$
(1.36)

Из (1.36) очевидно следующее соотношение:

$$G_n = -\mathcal{G}_{n+\frac{1}{2},n} \tag{1.37}$$

Связь взаимного суперпотока энергии с суперпотоком энергии установлена.

#### 1.7 Уравнения баланса применимо к бесконечному кристаллу

Введем множество целых и полуцелых индексов для упрощения записи:

$$\mathbf{Z}' \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \dots -1, \quad -\frac{1}{2}, \quad 0, \quad \frac{1}{2}, \quad 1, \quad \frac{3}{2} \dots \right\}$$
 (1.38)

Следовательно, можно записать суммарную энергию цепочки следующим образом:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n = \sum_{n \in \mathbb{Z}'} \xi_{n,n}$$
(1.39)

Введем понятие k-го момента энергии:

$$M_k = \sum_{-\infty}^{\infty} n^k E_n \tag{1.40}$$

Нетрудно заметить, что 1-й момент является некоторым подобием «центра масс» для энергетического возмущения. 2-й момент, по аналогии с моментом инерции системы, характеризует распределение энергии относительно энергетического центра. 3-й момент, по аналогии с моментами случайных величин из теории вероятностей, характеризует отклонение энергетического возмущения от Гауссовского (нормального) распределения.

Закон сохранения энергии и потока энергии тривиален и может быть легко получен методами энергетической динамики. Наиболее интересна зависимость второго момента энергии от времени. Для его исследования запишем 2-й момент энергии в форме взаимных энергий:

$$M_2 = \sum_{n \in \mathbf{Z}'} n^2 \xi_{n,n} \tag{1.41}$$

Продифференцируем получившееся выражение по времени:

$$\dot{M}_{2} = \sum_{n \in \mathbb{Z}'} n^{2} \dot{\xi}_{n,n} = 2 \sum_{n \in \mathbb{Z}'} n^{2} \left[ \mathcal{H}_{n+\frac{1}{2},n} - \mathcal{H}_{n,n-\frac{1}{2}} \right]$$

$$= -2 \sum_{n \in \mathbb{Z}'} (n - \frac{1}{4}) \mathcal{H}_{n,n-\frac{1}{2}}$$
(1.42)

Вычислим вторую производную:

$$\begin{split} \ddot{M}_{2} &= -2\sum_{n\in\mathbf{Z}'} (n-\frac{1}{4})\dot{\mathcal{H}}_{n,n-\frac{1}{2}} = -2\sum_{n\in\mathbf{Z}'} (n-\frac{1}{4}) \left[ \mathcal{G}_{n+\frac{1}{2},n} - \mathcal{G}_{n,n-\frac{1}{2}} \right] \\ &= -2\sum_{n\in\mathbf{Z}'} \frac{1}{2} \mathcal{G}_{n,n-\frac{1}{2}} \end{split}$$
(1.43)

Путем несложных и очевидных математических преобразований упростим выражение (1.43):

$$\ddot{M}_2 = -\sum_{n \in \mathbf{Z}'} \mathcal{G}_{n,n-\frac{1}{2}}$$
(1.44)

Вычислим 3-ю производную 2-го момента энергии:

$$\ddot{M}_{2} = -\sum_{n \in \mathbf{Z}'} \dot{\mathcal{G}}_{n,n-\frac{1}{2}} = -\frac{c}{m} \sum_{n \in \mathbf{Z}'} \left[ \dot{\xi}_{n,n-1} + \dot{\xi}_{n-\frac{1}{2},n-\frac{1}{2}} \right]$$
(1.45)

При этом учтем следующее соотношение:

$$\dot{\xi}_{n,n-1} + \dot{\xi}_{n-\frac{1}{2},n-\frac{1}{2}} =$$

$$= (\mathcal{H}_{n+\frac{1}{2},n-1} - \mathcal{H}_{n,n-\frac{3}{2}}) + (\mathcal{H}_{n,n-\frac{1}{2}} - \mathcal{H}_{n-\frac{1}{2},n-1})$$

$$+ 2(\mathcal{H}_{n,n-\frac{1}{2}} - \mathcal{H}_{n-1,n-\frac{1}{2}})$$
(1.46)

Нетрудно заметить, что при суммировании по всем элементам множества **z**' разности в скобках будут равняться нулю. Следовательно, выполняется закон сохранения суперпотока энергии. Кроме того, второй момент энергии есть квадратичная функция от времени:

$$\ddot{M}_2 = 0 \Rightarrow M_2 = At^2 + Bt + c \tag{1.45}$$

Стоит также отметить, что при суммировании по множеству **Z**', выражение (1.35), (1.32) и (1.20) будут тождественно равны нулю.

#### 1.8 Заключение к главе 1

В данной главе был описан и разработан аппарат взаимных энергий, а также выведены некоторые нетривиальные законы сохранения для цепочки Гука. В частности, доказано:

- 1. Второй момент энергии есть квадратичная функция от времени;
- Суперпоток энергии, равно как и взаимный суперпоток энергии, сохраняется;
- 3. Выполняется закон сохранения энергии (1.20);
- Выполняются законы сохранения взаимного потока энергии (1.35) и, следовательно, потока энергии (1.32).

# Глава 2 Исследование цепочки с чередованием масс

В данной главе рассматривается усложненная модель – цепочка Гука с чередованием масс.

#### 2.1 Постановка задачи. Общие уравнения.



Рис. 2. Общий вид цепочки. Вертикальными черными линиями обозначена граница ячейки периодичности

Рассматриваемая система представляет собой бесконечную цепочку, в которой встречаются частицы разных масс. Жесткости всех пружин одинаковы и равны c, массы равны  $m_1$  и  $m_2$  соответственно.

Запишем уравнение динамики кристалла с чередованием масс:

$$m_n \ddot{u_n} = c(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}), \qquad (2.1)$$

где n — индекс частицы,  $u_n$  — перемещения частицы с индексом n, с — жесткость связей между частицами,  $m_n$  — масса частицы с индексом n.

# 2.2 Отличия метода взаимных энергий в кристалле с чередованием масс

#### от тривиального случая

Так как в кристалле наблюдается чередование масс, возникает необходимость пересмотреть выражения для производной скорости по времени. Для определенности положим, что все частицы с четными индексами имеют массу *m*<sub>2</sub>. Тогда:

$$\dot{v}_{2n} = \frac{c}{m_2} \Delta_n \varepsilon_n$$

$$\dot{v}_{2n+1} = \frac{c}{m_1} \Delta_n \varepsilon_n$$
(2.2)

Введем понятия взаимных кинетической и потенциальной энергии:

$$\begin{split} \xi_{n,k}^{1} &\stackrel{\text{\tiny def}}{=} m_{1} \frac{v_{n} v_{k}}{2} \\ \xi_{n,k}^{2} &\stackrel{\text{\tiny def}}{=} m_{2} \frac{v_{n} v_{k}}{2} \\ P_{n,k} &\stackrel{\text{\tiny def}}{=} c \frac{\varepsilon_{n} \varepsilon_{k}}{2} \end{split}$$
(2.3)

Введем понятие полной взаимной энергии:

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_{n,k}^{1} &\stackrel{\text{def}}{=} \xi_{n,k}^{1} + P_{n,k} \\
\mathcal{E}_{n,k}^{2} &\stackrel{\text{def}}{=} \xi_{n,k}^{2} + P_{n,k}
\end{aligned} (2.4)$$

При дифференцировании полной взаимной энергии по времени положим индексы *n*, *k* либо четными, либо нечетными.

Тогда нетрудно заметить, что:

$$\dot{\mathcal{E}}_{n,k}^{1} = \dot{\mathcal{E}}_{n,k}^{2} = (\Delta_n + \Delta_k) \frac{c}{2} (\varepsilon_n v_k + \varepsilon_k v_n)$$
(2.5)

Введем понятие потока взаимной энергии:

$$\mathcal{H}_{n,k} \stackrel{\text{\tiny def}}{=} \frac{c}{2} (\varepsilon_n v_k + \varepsilon_k v_n) \tag{2.6}$$

Подставим (2.6) в (2.5):

$$\dot{\mathcal{E}}_{n,k}^1 = \dot{\mathcal{E}}_{n,k}^2 = (\Delta_n + \Delta_k)\mathcal{H}_{n,k}$$
(2.7)

#### 2.2 Ячейка периодичности кристалла с чередованием масс

Для задания энергии выберем ячейку периодичности (представлена на Рис. 2). Ячейка периодичности — структура, повторяющаяся в кристалле.

В ячейку входят: частица, соседние с ней пружины, половины частиц слева и справа от центральной частицы.

Очевидно, что сумма энергий всех ячеек периодичности по четным индексам будет равна суммарной энергии всей цепочки.

Энергия ячейки периодичности будет равна:

$$E_{2n} \stackrel{\text{\tiny def}}{=} m_1 \frac{v_{2n-1}^2}{4} + c \frac{\epsilon_{2n-\frac{1}{2}}^2}{2} + m_2 \frac{v_{2n}^2}{2} + c \frac{\epsilon_{2n+\frac{1}{2}}^2}{2} + m_1 \frac{v_{2n+1}^2}{4}$$
(2.8)

Перепишем выражение (2.8) через полную взаимную энергию:

$$E_{2n} = \frac{1}{2} \mathcal{E}_{2n-1,2n-1}^{1} + \mathcal{E}_{2n-\frac{1}{2},2n-\frac{1}{2}}^{12} + \mathcal{E}_{2n,2n}^{2} + \mathcal{E}_{2n+\frac{1}{2},2n+\frac{1}{2}}^{12} + \frac{1}{2} \mathcal{E}_{2n+1,2n+1}^{1}$$
(2.9)

Индекс 12 над некоторыми полными взаимными энергиями означает, что это может быть как  $\mathcal{E}_{n,k}^1$ так и  $\mathcal{E}_{n,k}^2$ . Это связано с тем, что в кристалле нет чередования жесткостей, следовательно, взаимная потенциальная энергия в обоих случаях определяется одинаково.

Продифференцируем энергию ячейки периодичности по времени:

$$\dot{E}_{2n} = \mathcal{H}_{2n+1,2n+\frac{1}{2}} + \mathcal{H}_{2n+\frac{3}{2},2n+1} - \mathcal{H}_{2n-1,2n-\frac{1}{2}} - \mathcal{H}_{2n-\frac{3}{2},2n-1}$$
(2.10)

Сгруппируем слагаемые и введем понятие потока энергии между ячейками периодичности:

$$H_{2n} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{H}_{2n-1,2n-\frac{1}{2}} + \mathcal{H}_{2n-\frac{3}{2},2n-1}$$
(2.11)

Перепишем выражение для производной энергии по времени через потоки:

$$\dot{E}_{2n} = H_{2n+2} - H_{2n} \tag{2.12}$$

#### 2.3 Производная потока и взаимного потока по времени

Нетрудно заметить, что в *H*<sub>2n</sub> все индексы у взаимных потоков нечётны. Продифференцируем взаимный поток с нечетными индексами по времени:

$$\dot{\mathcal{H}}_{n,k} = m_1 c (\Delta_n + \Delta_k) (\xi_{n,k}^1 + P_{n,k}) = m_1 c \mathcal{E}_{n,k}^1$$
(2.13)

Используя выражения для производной взаимного потока по времени, найдем производную от потока энергии по времени:

$$\dot{H}_{2n} = m_1 c \left[ \mathcal{E}^1_{2n - \frac{1}{2}, 2n - \frac{1}{2}} + \mathcal{E}^1_{2n - 1, 2n} - \mathcal{E}^1_{2n - \frac{3}{2}, 2n - \frac{3}{2}} - \mathcal{E}^1_{2n - 2, 2n - 1} \right]$$
(2.14)

Введем понятие суперпотока энергии:

$$G_{2n} \stackrel{\text{\tiny def}}{=} \mathcal{E}^{1}_{2n+\frac{1}{2},2n+\frac{1}{2}} + \mathcal{E}^{1}_{2n,2n+1}$$
(2.15)

Перепишем производную от потока энергии через суперпоток энергии:

$$\dot{H}_{2n} = G_{2n-1} - G_{2n-2} \tag{2.16}$$

#### 2.4 Первый момент энергии

Введем понятие первого момента энергии:

$$M_1 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\substack{n=\infty\\n\in\mathbf{Z}'}}^{\infty} nE_{2n} \tag{2.17}$$

Продифференцируем первый момент энергии по времени:

$$\dot{M}_{1} = \sum_{\substack{n=\infty\\n\in\mathbf{Z}'}}^{\infty} n\dot{E}_{2n} = -2\sum_{\substack{n=\infty\\n\in\mathbf{Z}'}}^{\infty} H_{2n}$$
(2.18)

Воспользуемся выражениями, полученными для производной потока энергии по времени, и продифференцируем первый момент энергии еще раз:

$$\ddot{M}_{1} = -2\sum_{\substack{n=\infty\\n\in\mathbf{Z}'}}^{\infty}\dot{H}_{2n} = -2\sum_{\substack{n=\infty\\n\in\mathbf{Z}'}}^{\infty}G_{2n-1} - G_{2n-2} = 0$$
(2.19)

Следовательно, первый момент энергии — функция, линейно зависящая от времени. Поток энергии сохраняется.

# 2.4 Заключения к главе 2

В данной главе было доказано сохранение потока в кристалле с чередованием масс, а также сохранение энергии: при суммировании по целым и полуцелым индексам выражение (2.12) становится нулем.

# Глава 3 Переход к тепловому равновесию в кристалле с периодическими включениями

В данной главе исследуется переход к тепловому равновесию в кристалле с периодическими включениями и периодическими граничными условиями. В частности, вычисляется значение равновесной температуры.

### 3.1 Постановка задачи. Основные уравнения



#### Рис. 3. Общий вид цепочки

Дана одномерная кристаллическая цепочка вида, представленного на рис. 3. Введены периодические граничные условия. Общее число частиц в ячейке периодичности N, жесткость всех пружин с. Также вводится коэффициент отношения масс  $\alpha = \frac{m_2}{m_1}$ .

Введение периодических ГУ позволяет перейти к рассмотрению движения частиц в ячейке периодичности.

Допустим, индекс частицы с массой  $m_2$  в ячейке периодичности равен 1. Тогда уравнения движения частиц в ячейке с учетом граничных условия примут вид:

$$m_{1}\ddot{u}_{n} = c(u_{n+1} - 2u_{n} + u_{n-1}), \qquad n \neq 1, N$$

$$m_{2}\ddot{u}_{n} = c(u_{n+1} - 2u_{n} + u_{N}), \qquad n = 1$$

$$m_{1}\ddot{u}_{n} = c(u_{1} - 2u_{n} + u_{n-1}), \qquad n = N$$
(3.1)

Обобщая приведенные выше выражения, получим систему:

$$\boldsymbol{M}\ddot{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{C}_{1}\boldsymbol{u} + \boldsymbol{C}_{0}\boldsymbol{u} + \boldsymbol{C}_{-1}\boldsymbol{u}$$
(3.2)

В данной системе **М** — матрица масс, **С**<sub>*a*</sub> — матрица коэффициентов жесткости, и — вектор смещений, представляемый следующим образом:

$$u = [u_1 \ u_2 \ \dots \ u_n]^T \tag{3.3}$$

Потребуем также дополнительное условие:

$$C_{-1} = C_1^T \tag{3.4}$$

Для дальнейших вычислений необходимо определить общий вид матриц в уравнении (3.2).

# 3.2 Отыскание общего вида матриц

Очевидно, что матрица М будет иметь следующий вид:

$$M = diag(m_2, m_1, m_1, \dots, m_1)$$
(3.5)

Для составления общего вида матриц  $C_0$  и  $C_1$  распишем систему уравнений для первых n частиц. Нетрудно заметить, что:

$$C_{0} = [diag(-1, v_{1}), \quad diag(0, v_{2}), \quad diag(1, v_{1})]$$

$$v_{2} = [-2c, -2c, -2c, \dots]^{T}, \quad dim(v_{2}) = N$$

$$v_{1} = [c, 0, c, 0, \dots]^{T}, \quad dim(v_{1}) = N - 1$$
(3.6)

В формуле (3.6) diag означает диагональ матрицы, индекс обозначает соответствующую диагональ: -1 — главная поддиагональ, 1 — главная наддиагональ, 0 — главная диагональ. Таким образом, матрица **С**<sub>0</sub> является трехдиагональной, главная над- и поддиагонали идут с чередованием элементов.

Определим общий вид **С**<sub>1</sub>:

$$C_{1} = [diag(1, v), \qquad C_{1}[1, N] = c],$$
  

$$v = [0, c, 0, c, ...]^{T}, \qquad dim(v) = N - 1$$
(3.7)

Матрица  $C_1$  содержит в себе из ненулевых элементов главную надиагональ и элемент с индексом (1, N). Матрица  $C_{-1} = C_1^T$  имеет ненулевую главную поддиагональ и элемент с индексом (N, 1).

Матрицы имеют следующий вид:

$$C_{0} = \begin{bmatrix} -2c & c & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ c & -2c & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2c & c & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & -2c & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -2c & c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -2c & c \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & c & -2c \end{bmatrix}$$

$$C_{1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & c \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

$$(3.8)$$

#### 3.2 Определение равновесного значения температур

Определим динамическую матрицу системы по следующей формуле:

$$\mathbf{\Omega}(k) \stackrel{\text{\tiny def}}{=} -\sum_{\alpha} \mathbf{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{C}_{\alpha} \mathbf{M}^{\frac{1}{2}} e^{ik \cdot a_{\alpha}}$$
(3.9)

В выражении (3.5) k — волновой вектор, *C*<sub>α</sub> — матрицы коэффициентов жесткости системы, определенные в предыдущем пункте. При этом, динамическая матрица системы является Эрмитовой:

$$\mathbf{\Omega} = \mathbf{P}(k)\mathbf{\Lambda}\mathbf{P}(k)^{*T}$$
(3.10)

В данной формуле **Р** — матрица собственных векторов динамической матицы системы, **Л** — матрица собственных значений.

Введем матрицу  $T_0$ , описывающую начальное значение температуры:

$$\boldsymbol{T_0} \stackrel{\text{def}}{=} diag(T_1, T_2, T_3, \dots T_n) \tag{3.11}$$

*T*<sub>1</sub> ... *T<sub>n</sub>* — значения температур каждой из частиц в начальный момент времени.

Матрица равновесной температуры вычисляется по следующей формуле:

$$\boldsymbol{T}_{\boldsymbol{eq}} = \frac{1}{2N} tr(\boldsymbol{T}_{\boldsymbol{0}}) \boldsymbol{E} + \frac{1}{2} \int_{k} \boldsymbol{P} diag(\boldsymbol{P}^{*T} d\boldsymbol{e} \boldsymbol{v} \boldsymbol{T}_{\boldsymbol{0}} \boldsymbol{P}) \boldsymbol{P}^{*T} dk \qquad (3.12)$$

k изменяется в пределах от 0 до  $2\pi$ .

#### 3.3 Численный эксперимент. Результаты

Так как задача аналитического отыскания собственных чисел матрицы порядка более 4 не имеет решения, вычисления проводились численно. Интегрирование по волновому числу было реализовано с помощью метода Гаусса высокого порядка.

Были получены кривые, описывающие отношение разности равновесных температур к начальным в зависимости от коэффициента отношения масс  $\alpha = \frac{m_2}{m_1}$  для разного числа частиц в ячейке периодичности. Отношение разностей вычислялось по формуле:

$$\frac{\Delta T_{eq}}{\Delta T_0} = \frac{T_{m_2} - T_n}{T_{m_2}^0 - T_n^0}$$
(3.13)

В приведенной выше формуле n — номер частицы. Таким образом, определялось отношение разности температур для каждой частицы массой  $m_1$  по отношению к частице массой  $m_2$ .

Результаты моделирования для 4-х частиц в ячейке периодичности приведены на рис. 4. Как видно из результатов, равновесная температура частицы, находящейся через одну от частицы с массой  $m_2$ , отличается от двух других. При этом, при устремлении массы  $m_2$  к нулю, выполняется теорема о равнораспределении энергии по степеням свободы.



Рис. 4. Результаты моделирования для 4-х частиц в ячейке периодичности

При увеличении числа частиц различия между зависимостями становятся незначительными:



Рис. 5. Результаты моделирования для 10 частиц в ячейке периодичности



Рис. 6. Результаты моделирования для 50 частиц в ячейке периодичности

Отчетливо видна сходимость всех зависимостей. Следовательно, при достаточно большом числе частиц в ячейке периодичности (N > 6) выполняется теорема о равнораспределении энергии по степеням свободы.

#### 3.4 Построение приближенного аналитического решения

Численное решение, как известно, бывает не всегда применимо в ряде случаев. Так, например, при стремлении коэффициента отношения масс к нулю сходимость численных методов по нахождению собственных чисел и собственных значений матрицы ухудшается в связи с увеличением числа обусловленности матрицы. Следовательно, необходимо вывести аналитическое решение, пусть даже и приближенное. В общем случае, динамическая матрица системы после нескольких преобразований принимает вид:

$$\Omega = [diag(-1, v_1), diag(0, v_2), diag(1, v_3)],$$
  

$$\Omega[1, N] = -\sqrt{\alpha}e^{ip}, \qquad \Omega[N, 1] = -\sqrt{\alpha}e^{-ip}$$
  

$$v_1 = [-1, -e^{-ip}, -1, -e^{-ip}, \dots, -\sqrt{\alpha}]^T, \qquad dim(v_1) = N - 1$$
  

$$v_2 = [2, 2, \dots, 2\alpha]^T, \qquad dim(v_2) = N$$
(3.14)

Таким образом, динамическая матрица системы является трехдиагональной матрицей с возмущениями в угловых элементах. Найти выражение для собственных значений аналитическое применимо К размерности матрицы больше 4 не представляется возможным ввиду отсутствия способов аналитического решения уравнений степени больше 4. Основная гипотеза, проверенная на этом этапе, заключается в том, что при стремлении количества частиц к бесконечности собственные числа исходной динамической матрицы системы и матрицы без флуктуаций почти совпадают.

Введем метрику ошибки:

$$\varepsilon = ||\mathbf{\Lambda}_f - \mathbf{\Lambda}||_2 \tag{3.15}$$

В приведенной выше формуле  $\Lambda$  — вектор собственных чисел матрицы без флуктуаций,  $\Lambda_f$  — вектор собственных чисел исходной динамической матрицы системы.

Получим зависимость ошибки от всех возможных значений коэффициента отношения масс для количества частиц N=100:



Рис. 7. Зависимость погрешности от числа частиц

Отчетливо видно уменьшение ошибки с ростом количества частиц. Следовательно, возможно использование аналитического выражения для собственных значений матрицы без флуктуаций. Стоит отметить, что матрица без флуктуации является матрицей Тёплица с чередованием элементов на главной под- и наддиагонали.

Осуществив несколько очевидных замен, сведем общий вид матрицы без флуктуаций к следующему представлению:

$$\boldsymbol{C_0} = \begin{bmatrix} a & c & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{c} & a & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & a & c & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} & a & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a & c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{c} & a & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & a & c \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \frac{1}{c} & a \end{bmatrix}$$
(3.16)

Особенностью такой матрицы является тот факт, что для нечетной ее размерности определитель раскладывается в произведение полиномов, в большинстве случаев их степень не превышает 4, включая те полиномы, в которых необходимо произвести замену переменной. Следовательно, существует аналитическое решение для большинства нечетных размерностей. Общую формулу задать не удалось.

Таким образом, в пределе может быть получено аналитическое выражение для собственных чисел матрицы  $\Omega$  нечетной размерности и для собственных векторов.

### 3.5 Выводы к главе 3

В данной главе было доказано незначительное влияние редких включений на процесс переноса энергии. Также было получено приближенное аналитическое решение для большого числа частиц.

# Заключение

В данной работе, в первую очередь, был предложен новый математический аппарат взаимных энергий, способный составить конкуренцию классическим методам энергетической динамики. С помощью данного метода было доказано сохранение потока энергии в кристалле с чередованием масс и сохранение суперпотока энергии в цепочке Гука.

Кроме того, был рассмотрен процесс перехода к тепловому равновесию в кристалле с чередованием масс и периодическими граничными условиями. Удалось установить, что при небольшом числе включений не нарушается теорема о равнораспределении энергии по степеням свободы системы.

Также было предложено аналитическое решение задачи о поиске собственных чисел и векторов динамической матрицы системы. Решение основывается на исключении неоднородностей из динамической матрицы системы и сведении ее к матрице Тёплица путем ортогональных преобразований.

Несмотря на проведенное исследование остается открытым вопрос об изучении зависимости суперпотока энергии от времени в кристалле с чередованием масс. Данная проблема требует всесторонней проработки и детального изучения.

#### Список использованной литературы

- Бабенков М.Б., Кривцов А.М., Цветков Д.В. Колебания энергий в одномерном гармоническом кристалле на упругом основании // Физ. Мезомех. – 2016. – Т. 19. – № 1. – С. 60–67;
- Васильев Д.М. Кристаллография / Д.М. Васильев. СПб.: Издательство СПбГПУ, 1996. – 474с.;
- Косевич А.М. Основы механики кристаллической решетки. М.: Наука, 1975;
- Косевич А.М. Теория кристаллической решетки /А.М. Косевич. Харьков: Выща шк., 1988;
- Кривцов А. М. Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов: учеб. пособие. – СПб.: Изд-во Политехн. Унта, 2009. – 126 с.;
- Кривцов А.М., Кузькин В. А. Механика дискретных сред. Переходные тепловые процессы в гармонических кристаллах: учебное пособие.// СПб.: Изд-во Политехн. ун-та. – 2018;
- Кривцов А.М. Морозов Н.Ф. О механических характеристиках наноразмерных объектов. – ФТТ. 2002 Т. 44. №12 с. 2158-2163;
- Кривцов А.М. Колебания энергий в одномерном кристалле // ДАН. 2014. – Т. 458. –№ 3 – С 279–281;
- Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой / А.М. Кривцов – М.: Физматлит, 2007. – 304с.;
- 10.А.М. Кривцов. Распространение тепла в бесконечном одномерном гармоническом кристалле // Доклады Академии Наук. 2015, том 464, № 2, С. 162-166;
- 11.Кузькин В.А., Кривцов А.М. Аналитическое описание переходных тепловых процессов в гармонических кристаллах // ФТТ, том 59, вып. 5, 2017, с. 1023-1035;

- 12.Кунин И.А. Теория упругих сред с микроструктурой. М.: Наука, 1975. 416 с.;
- 13. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов: пер. с нем. / Г. Лейбфрид. М.: Физматлит, 1963.;
- 14.Chang C. W., Okawa D., Garcia H., Majumdar A., and A. Zettl «Breakdown of Fourier's law in nanotube thermal conductors» Phys. Rev. Lett., vol. 101, p. 075903, Aug 2008;
- 15.Krivtsov A.M.: Dynamics of matter and energy. Z Angew Math Mech. e202100496 (2022);
- 16.Kuzkin V.A. Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell // Continuum Mechanics and Thermodynamics – 2019 – 31, pp. 1573–1599;
- 17.Kuzkin V.A. Thermal equilibration in infinite harmonic crytals // Continuum Mechanics and Thermodynamics. – 2019. – P. 23;
- 18.Lepri S. Thermal transport in low dimensions: from statistical physics to nanoscale heat transfer [Book]. [s.l.]: Springer, 2016. Vol. 921.;
- 19.Loboda O.S., Podolskaya E.A., Tsvetkov D.V., Krivtsov A.M.. On the fundamental solution of the heat transfer problem in one-dimensional harmonic crystals// Continuum Mechanics and Thermodynamics. – 2021. – Vol. 33(2) – P. 485–496;
- 20.Loboda O.S., Krivtsov A.M., Porubov A.V., Tsvetkov D.V.. Thermal processes in a one-dimensional crystal with regard for the second coordination sphere. // Journal of Applied Mathematics and Mechanics. – 2019. – Vol. 98. – P. 13;
- 21.Podolskaya E.A., Krivtsov A.M., Tsvetkov D.V.. Anomalous heat transfer in one--dimensional diatomic harmonic crystal. // Materials Physics and Mechanics. – 2018. – Vol. 40 – P.172-180;
- 22.Rieder Z., Lebowitz J. L., Lieb E. Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state //Journal of Mathematical Physics. 1967. T. 8. №. 5. C. 1073-1078;

23.Senga R., Komsa H.P., Liu Z., Hirose-Takai K., Krasheninnikov A.V., Suenaga K. Atomic structure and dynamic behaviour of truly one-dimensional ionic chains inside carbon nanotubes // Nature Materials. – 2014 – V. 13. – No. 11. – P. 1050–1054;