



Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
Кафедра “ Теоретическая механика”



# Тепловые колебания в одномерном кристалле

Диссертация на соискание академической степени магистра

Выполнил студент группы 63604/1  
Научный руководитель д.ф.-м.н.

**М. В. Симонов**  
**А. М. Кривцов**



# Введение

- В последние десятилетия, методы механики дискретных сред широко применяются для описания неравновесных процессов в среде [1].
  - Интерес к дискретным подходам особенно возрос в связи с развитием нанотехнологий. [2].
1. Hoover W.G. Smooth Particles Applied Mechanics. The State of the Art. World Scientific // Adv. Ser. Nonlin. Dyn. 2006. V. 25.
  2. Гольдштейн Р.В., Морозов Н.Ф. Механика деформирования и разрушения наноматериалов и нанотехнологии // Физ. Мезомеханика. 2007. Т. 10. № 5. С. 17–30.



# Введение

- Анализ неравновесных тепловых процессов в дискретных средах при их классическом описании, остается серьезной проблемой.
- Описание процесса теплопереноса может расходиться с выводами классической теории теплопроводности.
- Установлено, что при выведении одномерного кристалла из состояния статистического равновесия, возникает колебательный процесс, связанный со стремлением кинетической энергии равномерно распределиться по кристаллу.



# Введение

- Проведено исследование колебаний энергий в одномерном кристалле с линейным взаимодействием частиц [3].
- Получено аналитическое решение для обобщенной функции Лагранжа одномерной цепочки через функцию Бесселя.
- Решение этого уравнения позволяет определять уравнения, описывающие колебания энергий в одномерном кристалле.

3. Кривцов А.М. Колебания энергий в одномерном кристалле ДАН. 2014, том 458, № 3, с. 279–281.



# Введение

- Установлено что для линейного взаимодействия частиц колебания энергий затухают со скоростью  $1/\sqrt{t}$ .
- Для нелинейного взаимодействия частиц – аналитического решения нет.
- Закон затухания для нелинейного взаимодействия частиц также не определен.



## Цель работы

Исследование тепловых колебаний в  
одномерном кристалле с нелинейным  
взаимодействием частиц.



# Задачи исследования

1. Исследование колебаний кинетической энергии в одномерном кристалле при нелинейном взаимодействии частиц.
2. Исследование колебаний кинетической температуры в одномерном кристалле при нелинейном взаимодействии частиц.



# Математическая модель

- Рассматривается одномерный кристалл.
- Уравнение динамики цепочки:

$$m\ddot{u} = C_1(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + C_2[(u_{n+1} - u_n)^3 - (u_n - u_{n-1})^3] \quad (1)$$

где  $u_k$  – перемещения  $k$  частицы и  $k$  – индекс принимающий произвольные целые значения.





# Математическая модель

- Принимаются периодические граничные условия:

$$u_{k+N} = u_k, \quad N \gg 1 \quad (2)$$

где  $N$  – число независимых частиц.

- Оператор осреднения по индексу для произвольной величины  $f_k$ :

$$\langle f_k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f_k.$$



# Математическая модель

- Определен безразмерный параметр, характеризующий отношение влияния линейного и нелинейного взаимодействия между частицами одномерного кристалла.
- Введен параметр  $\theta$ , по которому проведено обезразмеривание .



# Математическая модель

- Полная энергия кристалла с линейным взаимодействием:

$$E = \frac{m}{2} \langle \dot{i}_n^2 \rangle + \frac{C_1}{2} \langle \varepsilon_n^2 \rangle$$

где  $\Pi = \frac{C_1}{2} \langle \varepsilon_n^2 \rangle \Rightarrow \Pi = \frac{C_1}{2} \theta, \quad \theta = \langle \varepsilon_n^2 \rangle, \quad [\theta] = \text{м}^2$

Сопоставляя кинетическую и потенциальную энергию, получаем:

$$kT = m\sigma^2 = C_1\theta \quad \Rightarrow \quad \theta = \frac{m}{C_1} \sigma^2 = \frac{1}{\omega_0^2} \sigma^2$$



# Математическая модель

- Тогда безразмерный параметр  $\alpha$  имеет вид:

$$\alpha = \frac{C_2}{C_1} \theta = \frac{C_2 \sigma^2}{C_1 \omega_0^2}, \quad [\alpha] = 1, \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{C_1}{m}}$$

- При  $\alpha \ll 1$ , нелинейное взаимодействие мало.



Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
Кафедра “ Теоретическая механика”



# Исследование колебаний кинетической энергии в одномерном кристалле при нелинейном взаимодействии частиц



# Математическая модель

- Начальные условия:

$$u_n = 0, \quad \dot{u}_n = \rho_n \quad (3)$$

$\rho_n$  - случайная величина с равномерным законом распределения.

- Данные начальные условия аналогичны заданию равномерной температуры по длине одномерного кристалла.



# Математическая модель

- Для анализа зависимости кинетической энергии от параметра  $\alpha$  проведены численные эксперименты для одномерного кристалла с нелинейным взаимодействием частиц с начальными условиями (3) и граничными условиями (2).



# Математическая модель

- Число частиц в кристалле:  $N = 2 \times 10^6$
- Время расчетов обезразмеривается по периоду колебаний частицы цепочки вблизи положения равновесия

$$T_0 = \frac{2\pi}{\omega_0}$$

- Кинетическая энергия обезразмеривается по начальной энергии кристалла



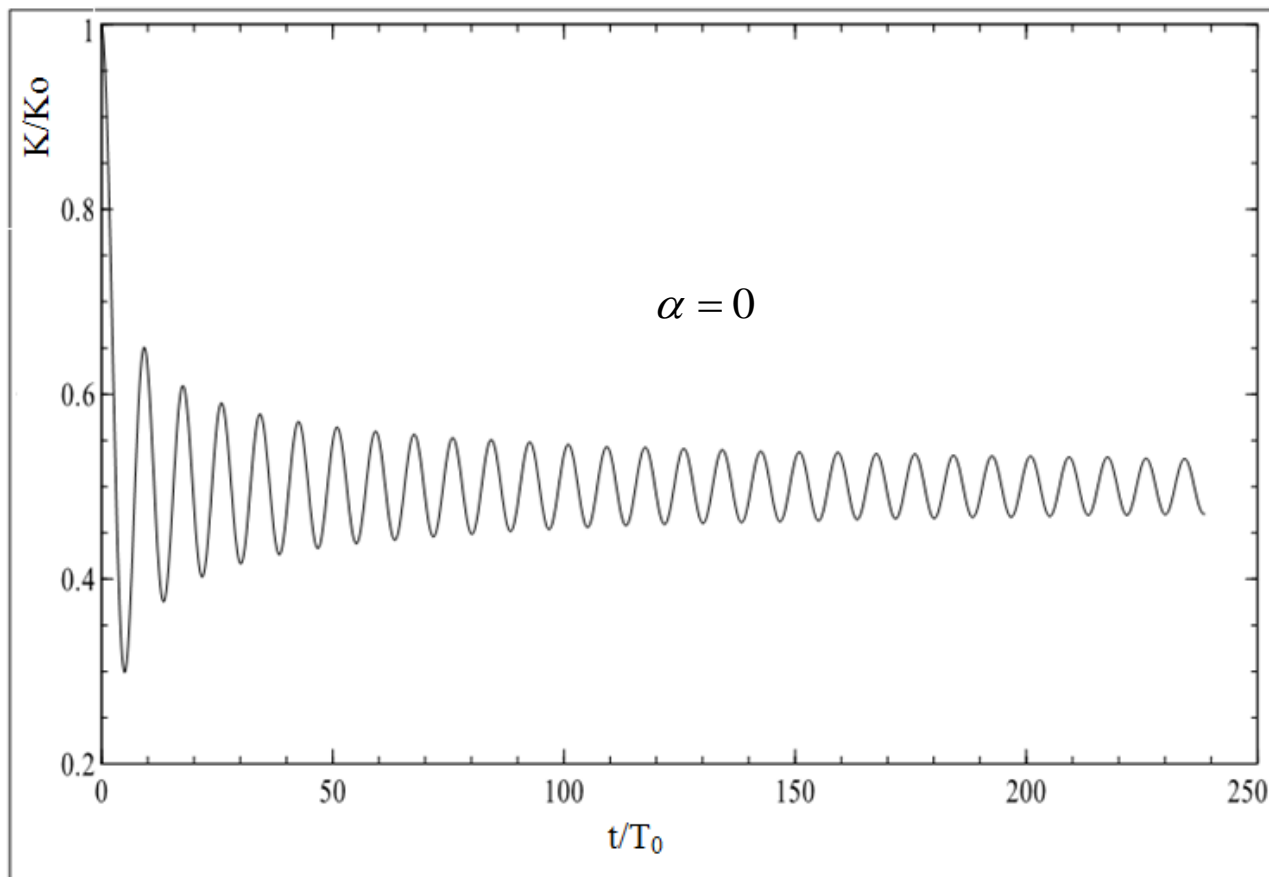


Рис. 1. Колебания кинетической энергии в кристалле.

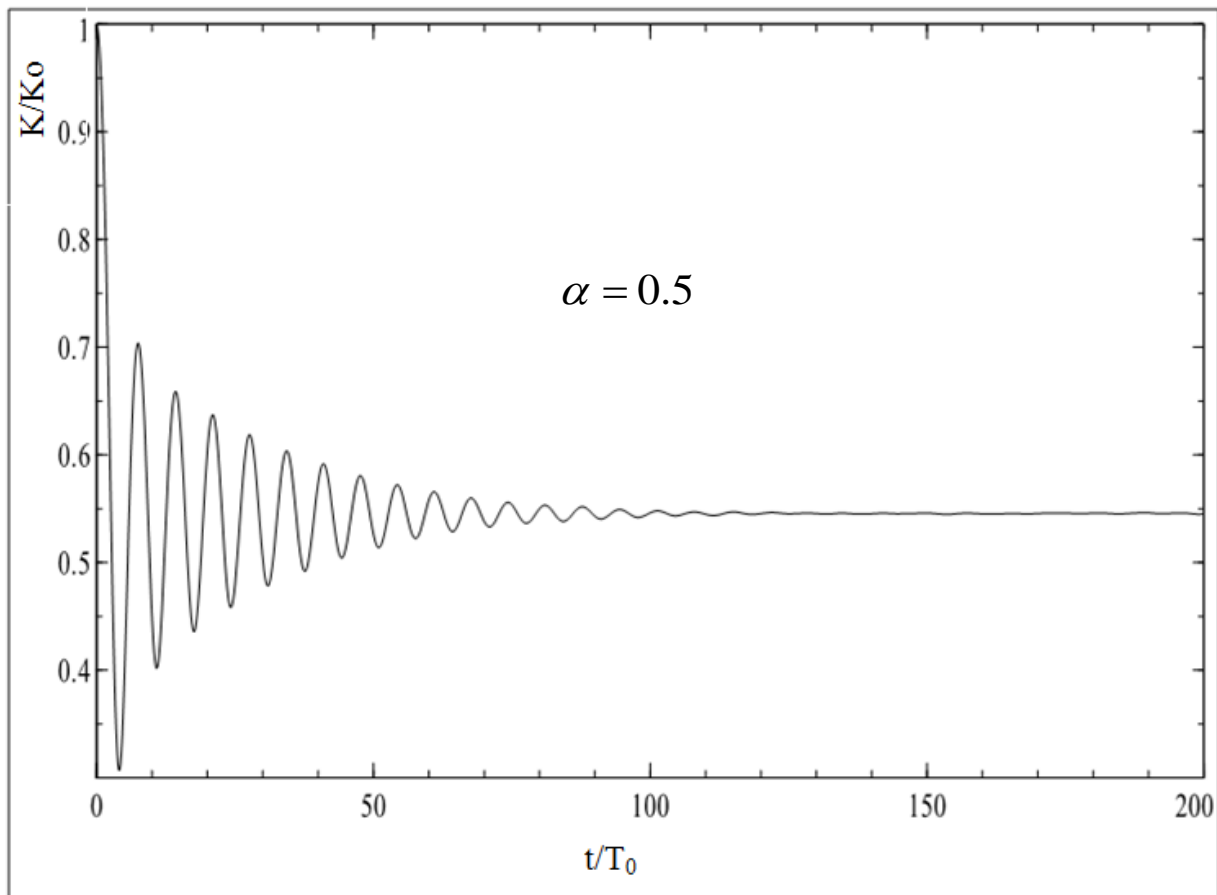


Рис. 2. Колебания кинетической энергии в кристалле.

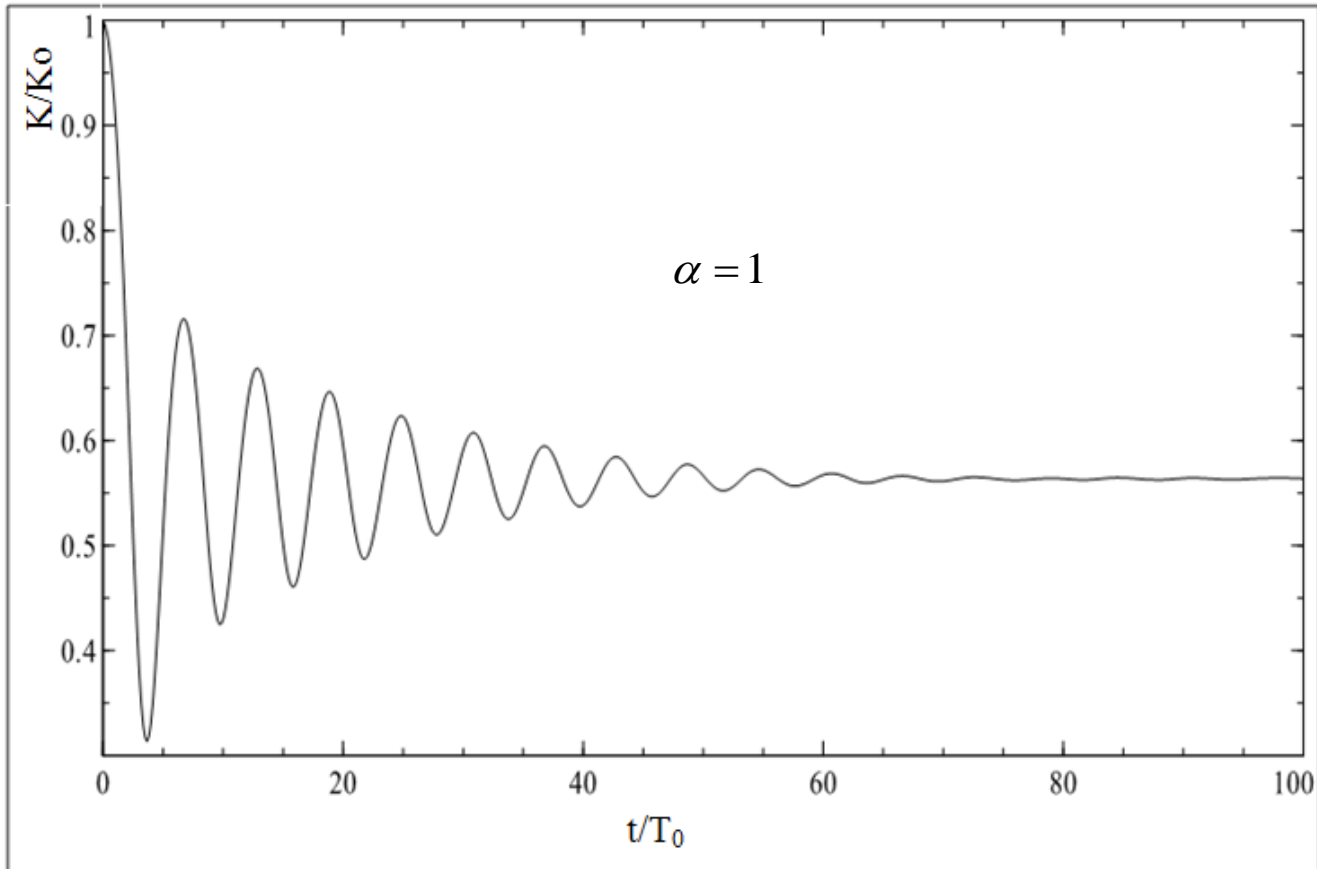


Рис. 3. Колебания кинетической энергии в кристалле.

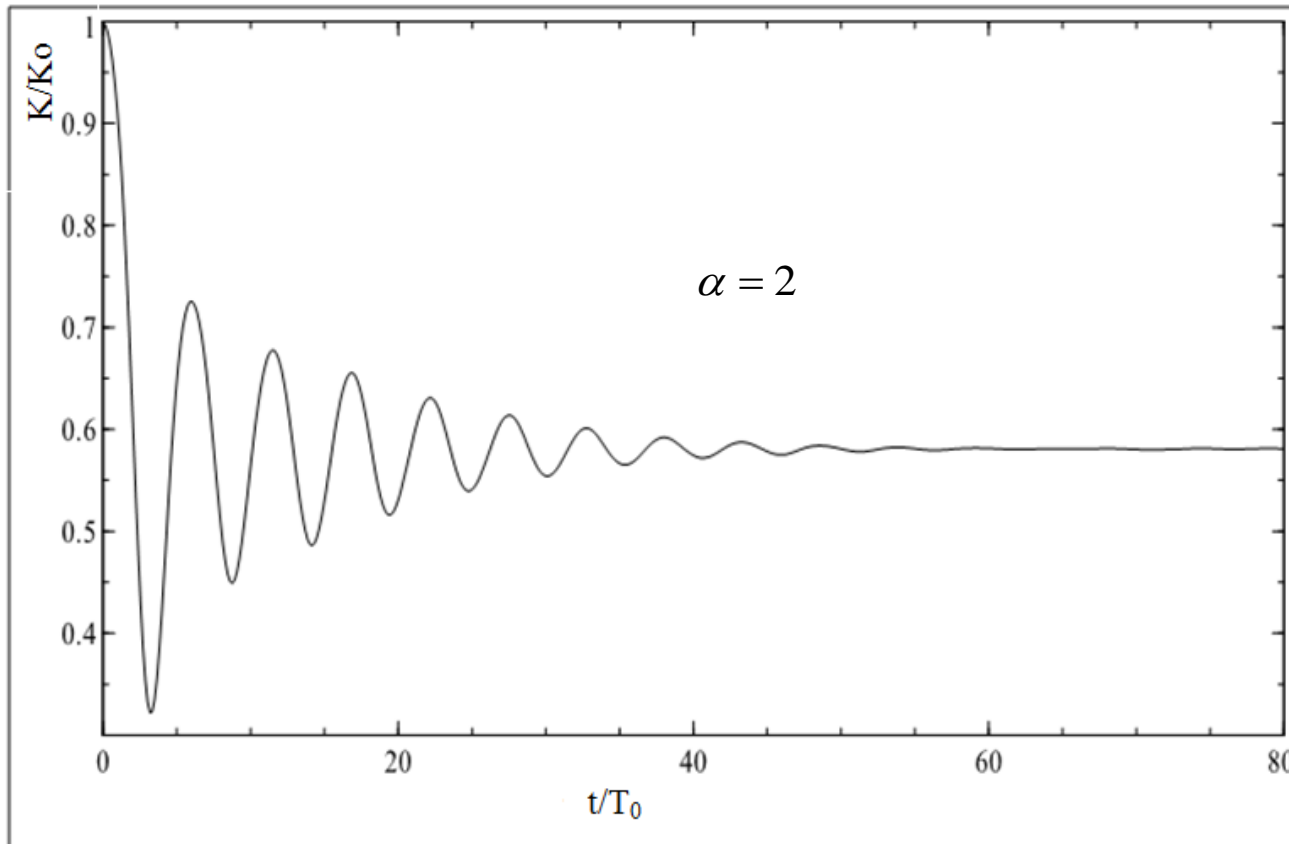


Рис. 4. Колебания кинетической энергии в кристалле.



# Определение температуры

- Определена кинетическая температура кристалла. Кинетическая энергия связана с кинетической температурой следующим соотношением:

$$K = \frac{d}{2} kT \quad \Rightarrow \quad T = \frac{m \langle \dot{u}_k^2 \rangle}{2 dk}$$

- Получена зависимость средней кинетической температуры от нелинейности.

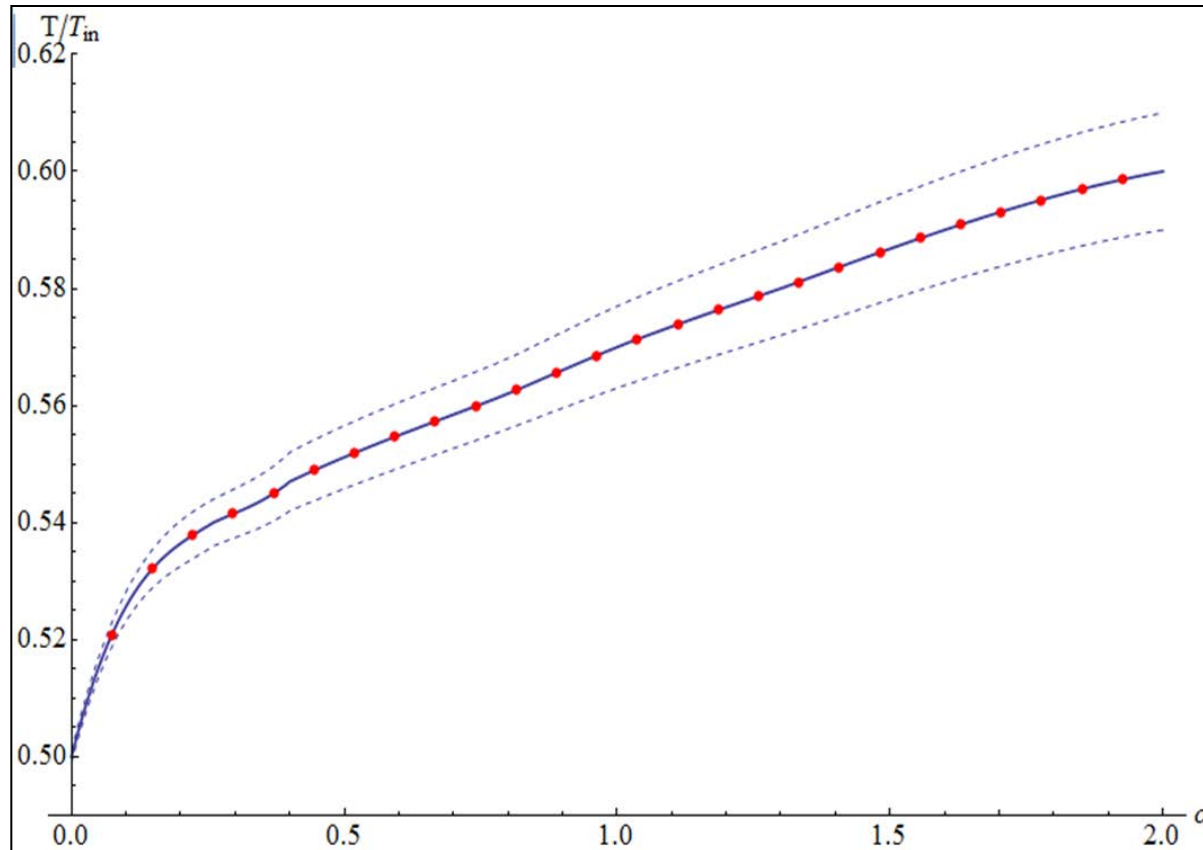


Рис 5. Зависимость средней температуры кристалла от параметра нелинейности, штрихом обозначен доверительный интервал.



## Закон затухания кинетической энергии

- Предложена аппроксимация закона затухания:

$$g(t/T_0) = a(t/T_0)^{-b} \quad (6)$$

где  $a, b$  –коэффициенты, определяемые для каждого значения параметра нелинейности.

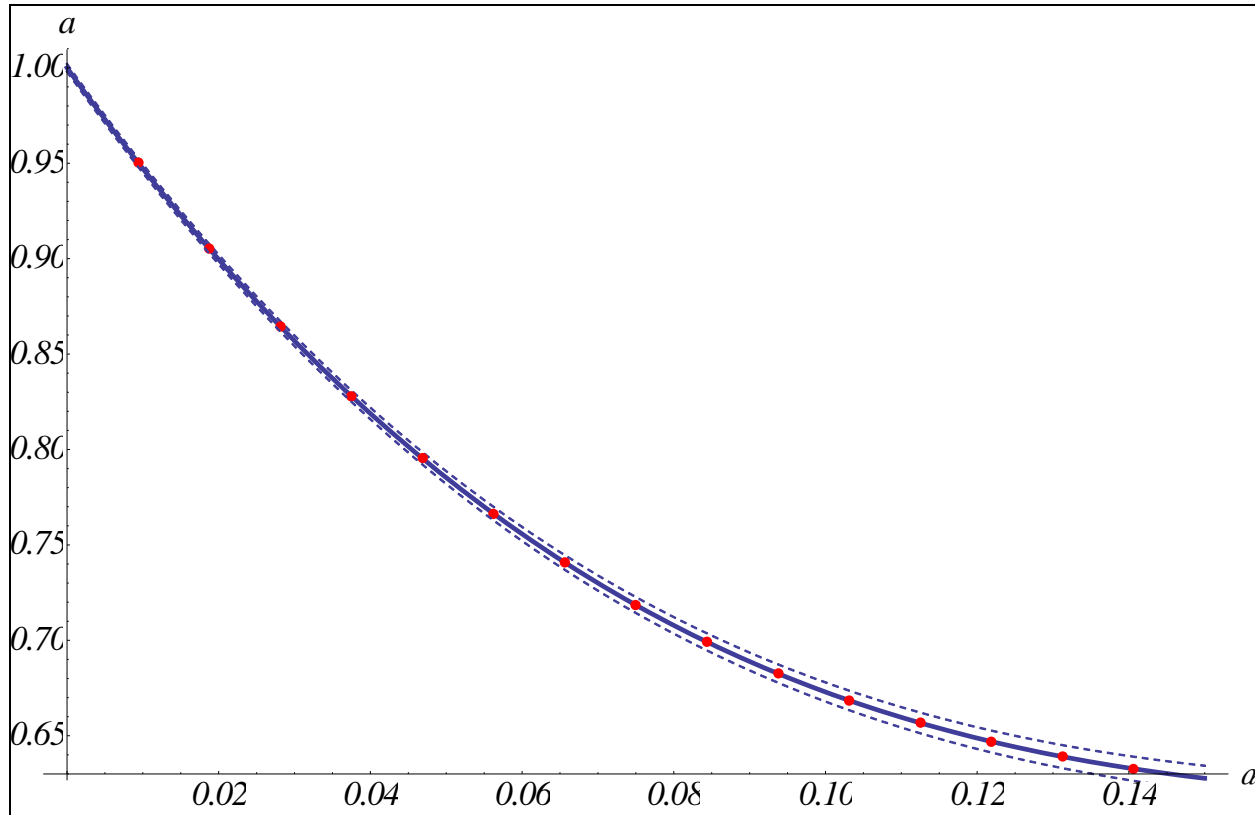


Рис 6. Зависимость коэффициента  $a$  в законе затухания от параметра нелинейности, штрихом обозначен доверительный интервал.



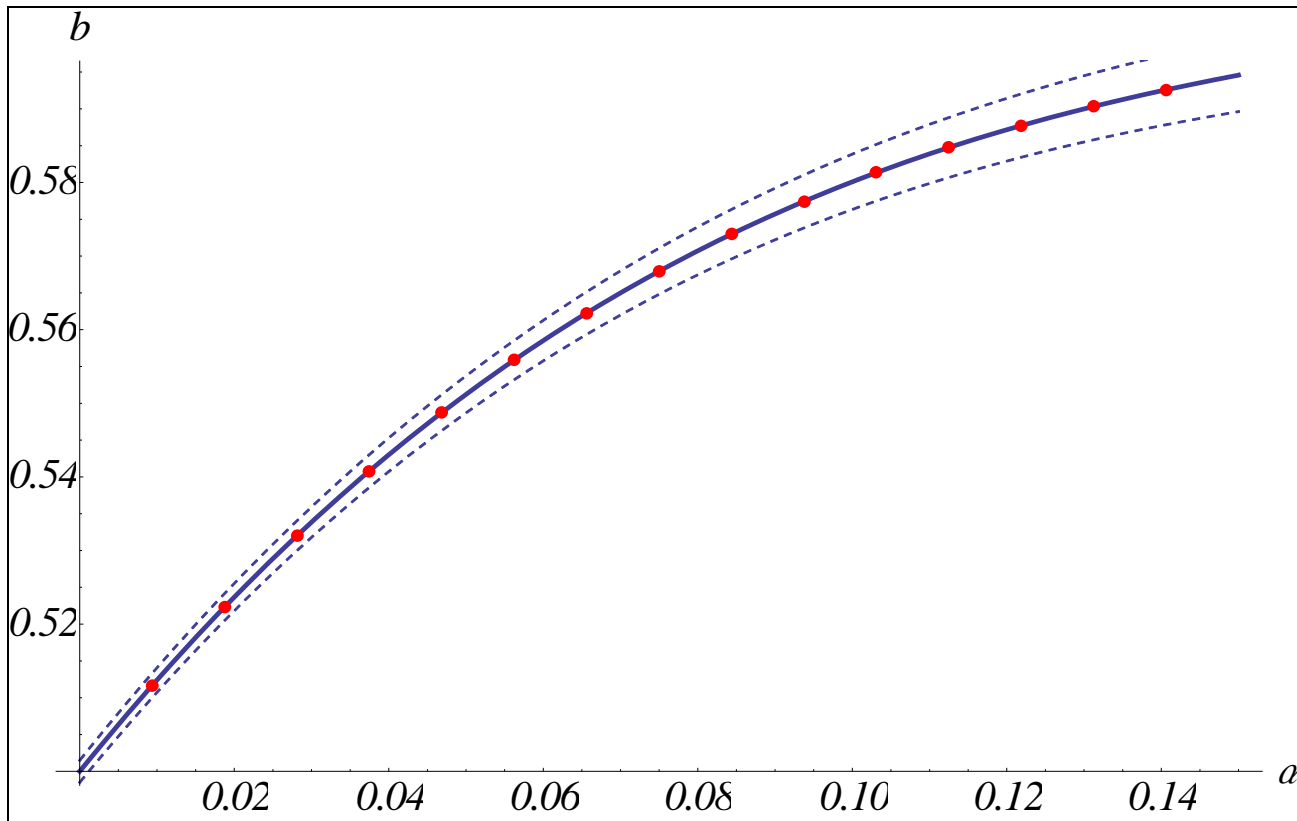


Рис 7. Зависимость коэффициента  $b$  в законе затухания от параметра нелинейности, штрихом обозначен доверительный интервал.



## Закон затухания кинетической энергии

- Для полученных зависимостей коэффициентов закона затухания от нелинейности предложена аппроксимация в виде степенных функций.
- Для коэффициента  $a$  была получена следующая зависимость:

$$a(\alpha) = 0.004\alpha^{-2} + 0.57$$

- Для коэффициента  $b$ :

$$b(\alpha) = 0.5 + 1.2\alpha - 4\alpha^2$$

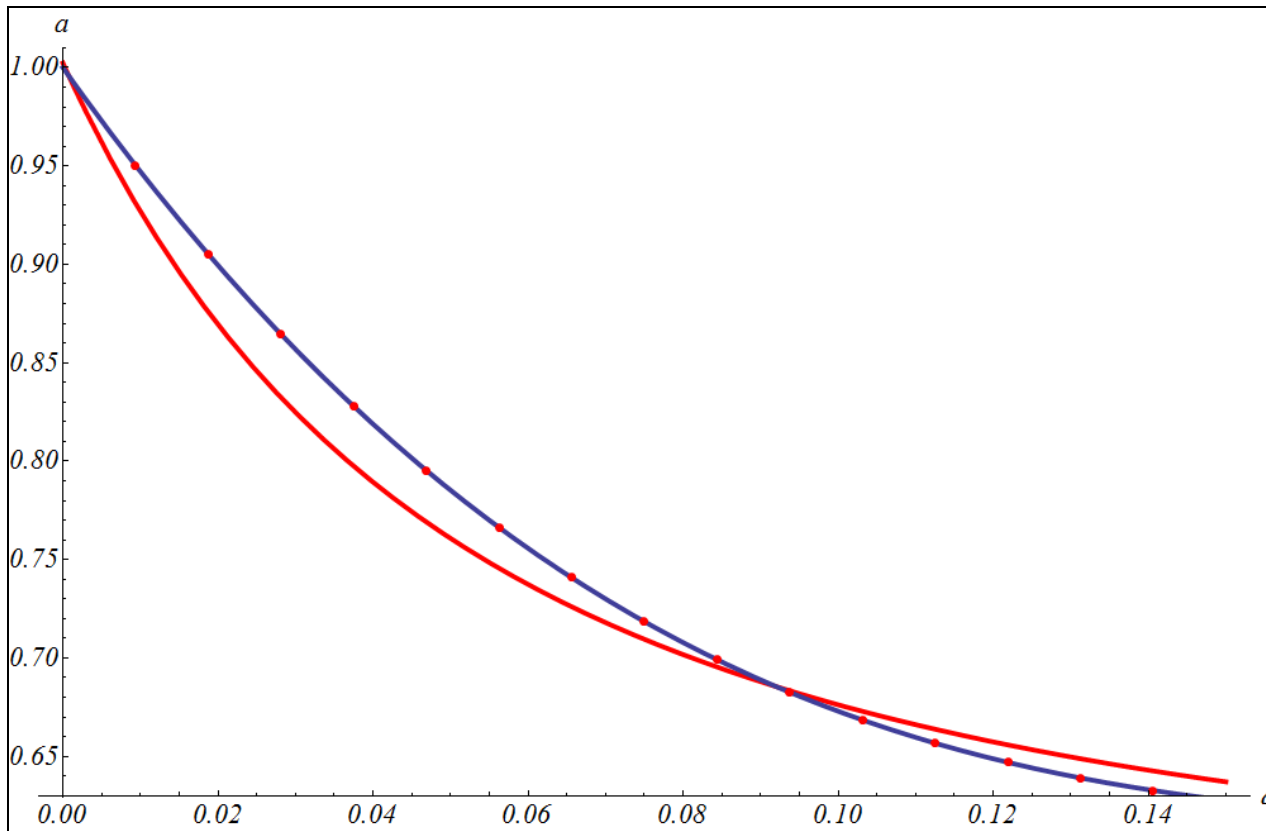


Рис. 8. Зависимость коэффициента  $a$  в законе затухания от параметра нелинейности (синим) и предложенная аппроксимация (красным) .

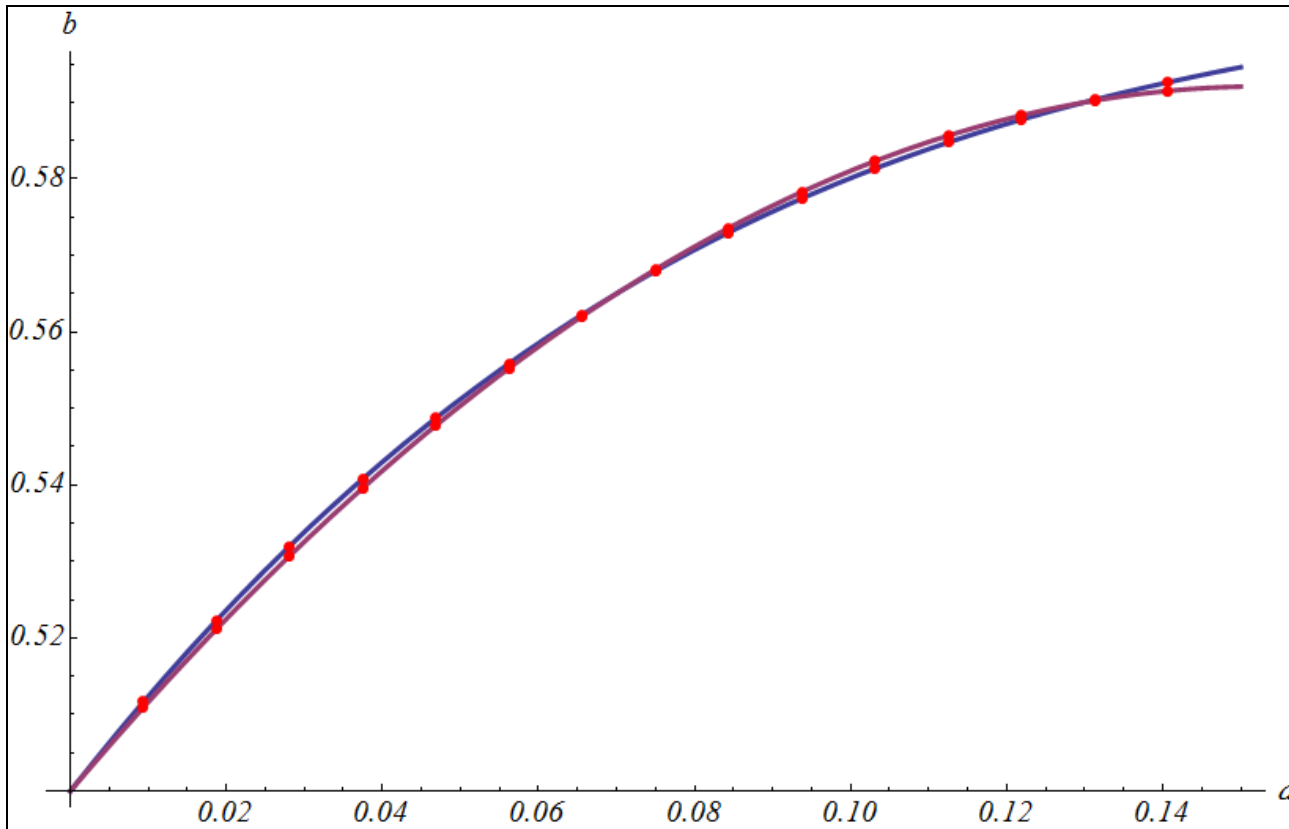


Рис. 9. Зависимость коэффициента  $b$  в законе затухания от параметра нелинейности (синим) и предложенная аппроксимация (красным) .



# Результаты

- Получено, что колебания кинетической энергии с увеличением нелинейности затухают быстрее.
- Средняя температура в кристалле растет с увеличением нелинейности.
- Предложена аппроксимация закона затухания для колебаний кинетической энергии.



# Результаты

- Хорошее соответствие предложенной аппроксимации при малой нелинейности свидетельствует, что аналитическое решение не нарушается при введении малой нелинейности.
- Таким образом, можно сделать вывод об устойчивости полученного ранее аналитического решения.



Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
Кафедра “ Теоретическая механика”



# Исследование колебаний кинетической температуры в одномерном кристалле при нелинейном взаимодействии частиц



# Математическая модель

- Для решения второй задачи исследованы зависимости кинетической температуры от параметра  $\alpha$  для одномерного кристалла с нелинейным взаимодействием частиц с синусоидальным начальным заданием температуры.





# Математическая модель

- При этом колебания амплитуды профиля заданной температуры со временем будет затухать.
- Синусоидальное распределение температуры можно представить как случай неравномерного нагрева материала по его длине.



# Математическая модель

- Начальные условия:
- Синусоидальный профиль кинетической температуры в кристалле

$$u_n = 0, \dot{u}_n = \rho_n \sigma(x), x = na \quad (4)$$

$$\sigma^2(x) = T(x) = A \sin(\kappa x) + \bar{T},$$

где  $\bar{T}$  - средняя температура кристалла.



Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
Кафедра “Теоретическая механика”

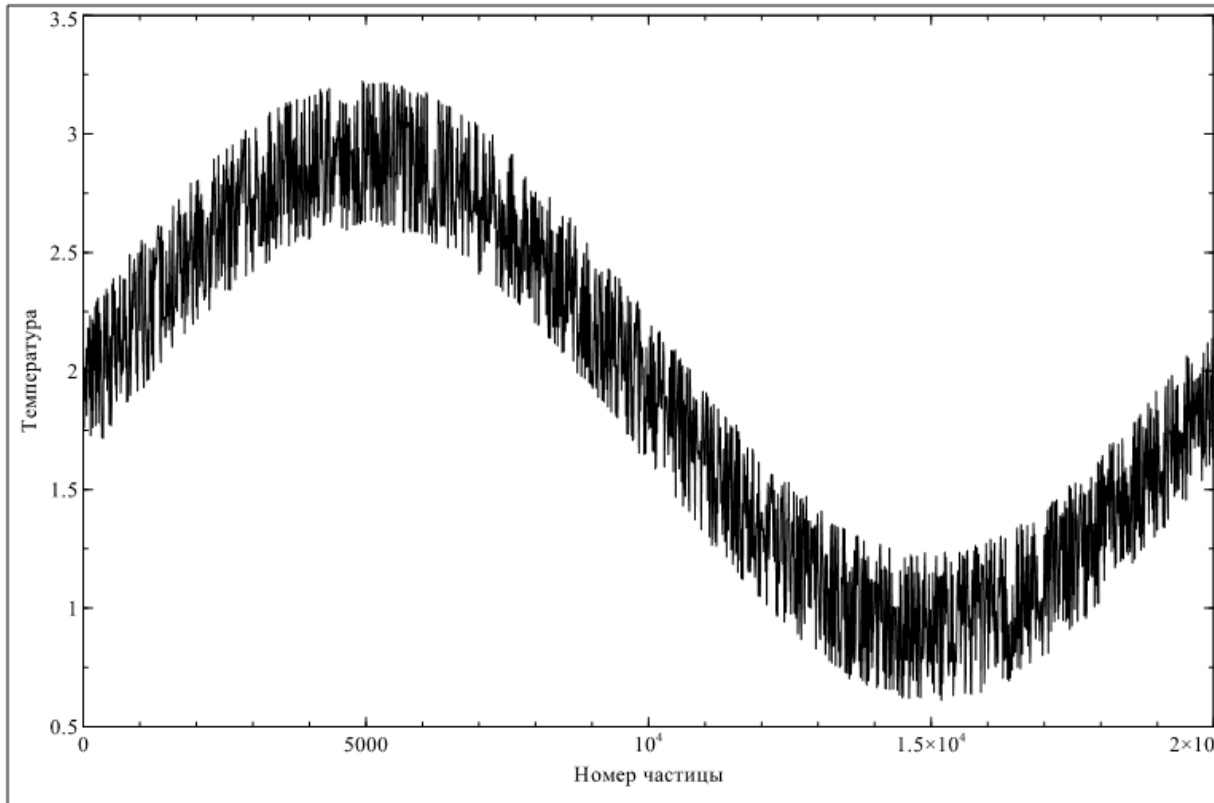


Рис 10. Начальный профиль синусоидальной кинетической температуры в кристалле.



## Математическая модель

- Амплитуда колебаний кинетической температуры определялась по первому коэффициенту в разложении кинетической температуры одномерной цепочки в ряд Фурье:

$$T(t) = \frac{2}{N} \sum_{n=1}^N T_n(t) \sin\left(\frac{2\pi n}{N}\right), \quad n = \overline{1, N} \quad (5)$$



# Результаты

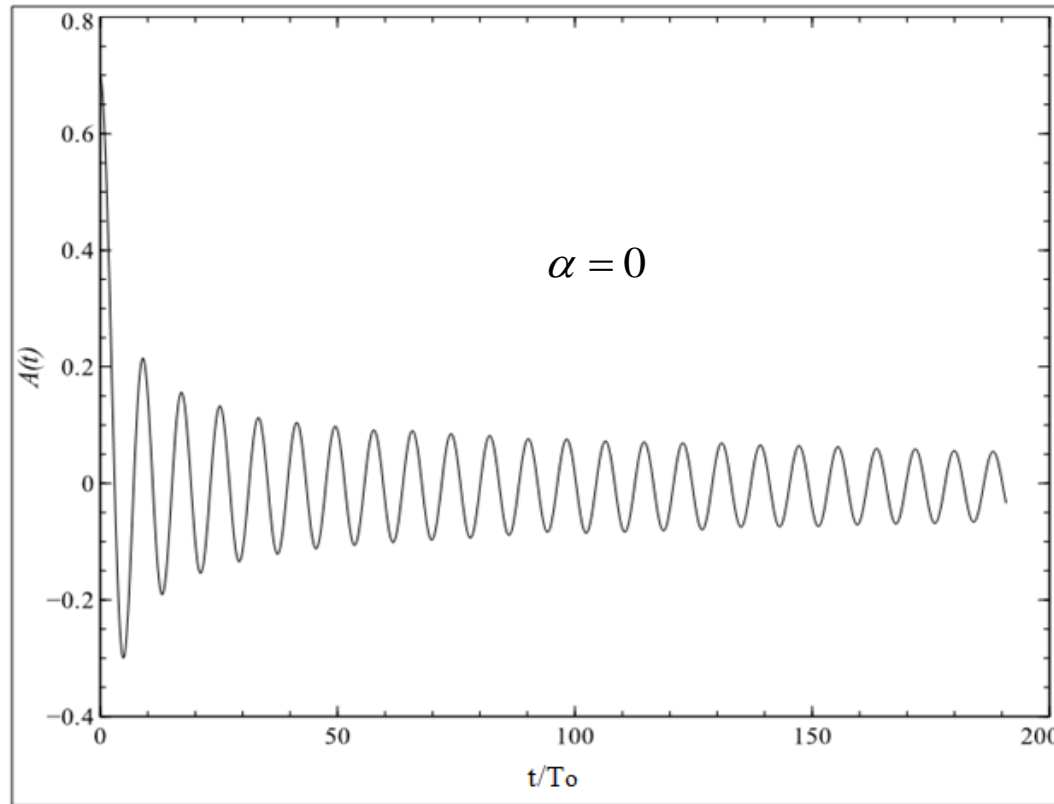


Рис. 11. Колебания амплитуды синусоидального профиля температуры



# Результаты

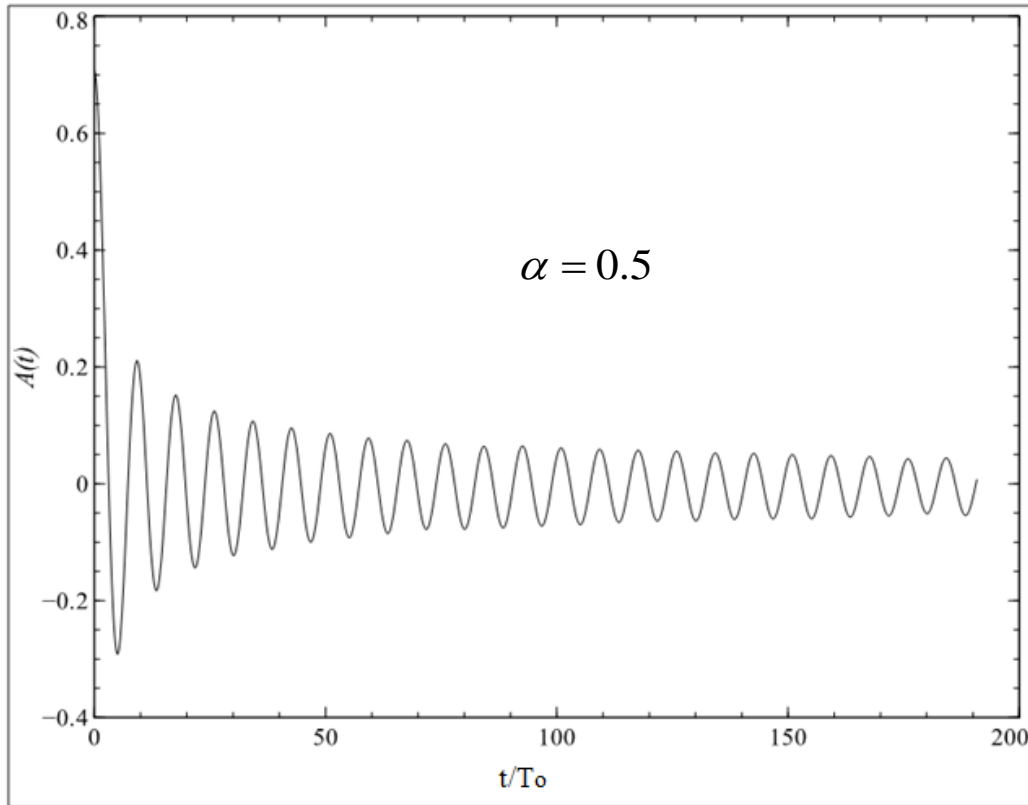


Рис. 12. Колебания амплитуды синусоидального профиля температуры



# Результаты

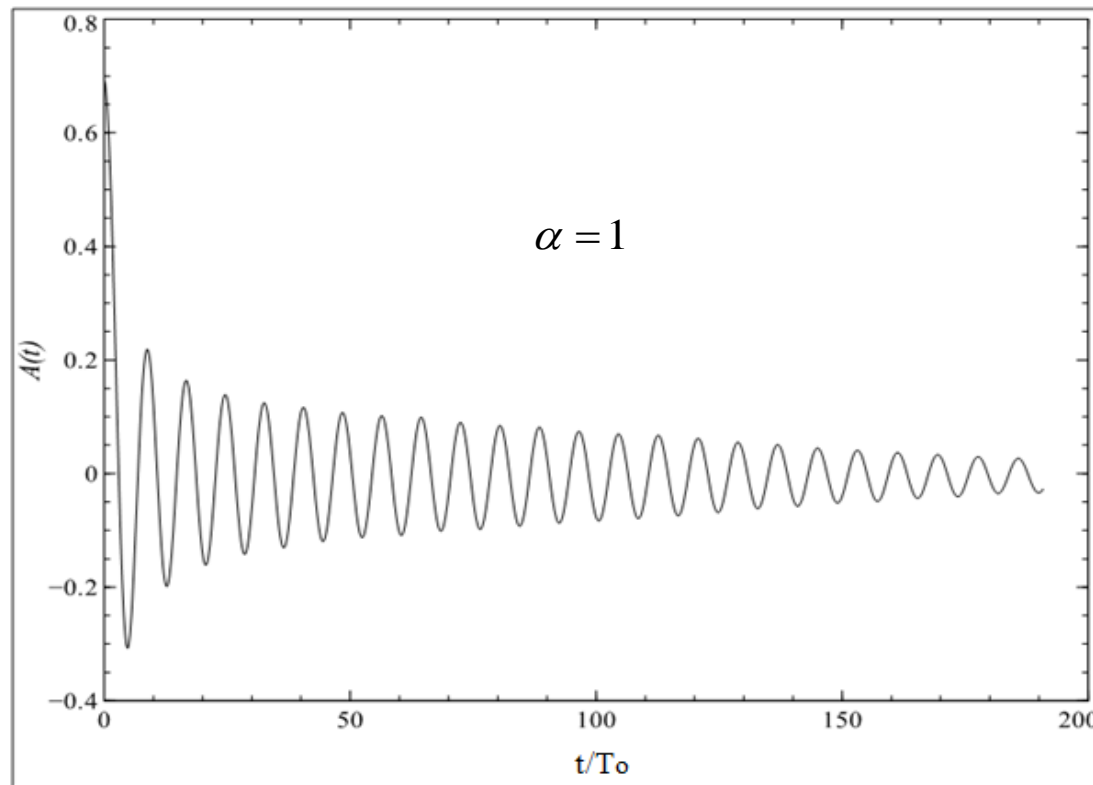


Рис. 13. Колебания амплитуды синусоидального профиля температуры



# Результаты

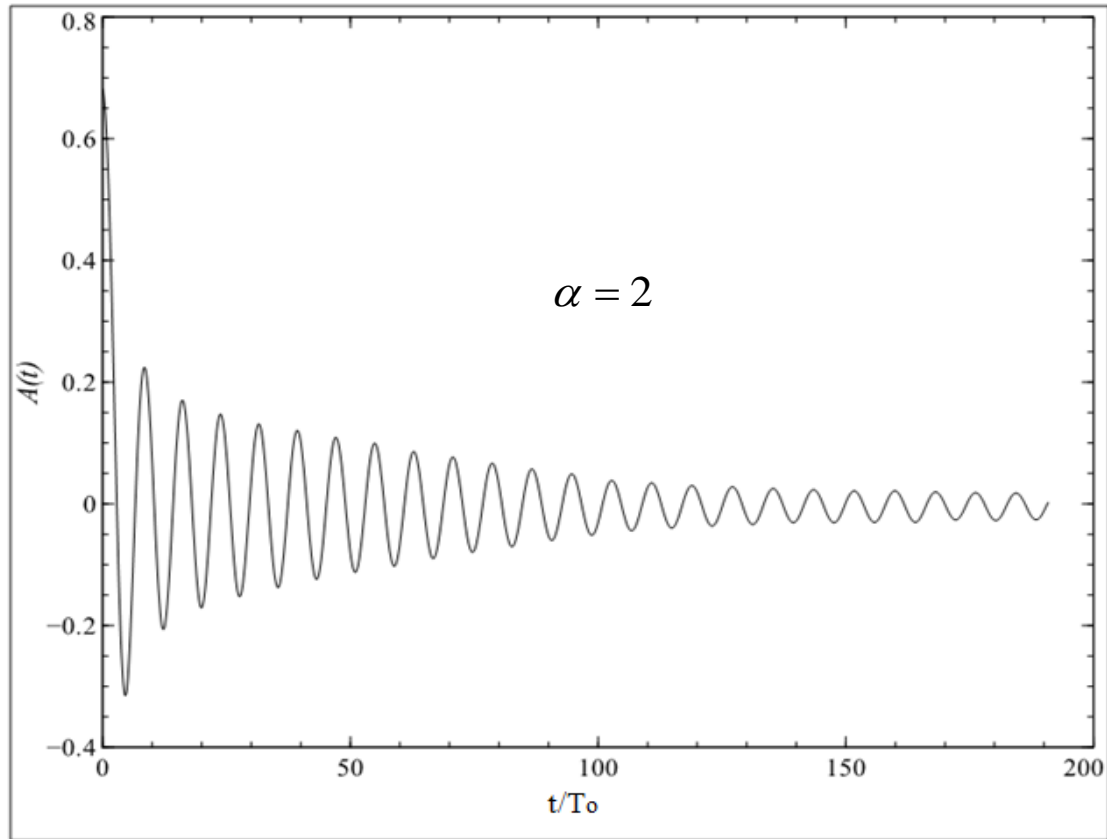


Рис. 14. Колебания амплитуды синусоидального профиля температуры





# Анализ

- Получено, что колебания амплитуды кинетической температуры с увеличением нелинейности затухают быстрее.
- Исследовался закон затухания амплитуды в зависимости от значения нелинейности.
- Для этого принималась аналогичная аппроксимация закона затухания, как и для кинетической энергии

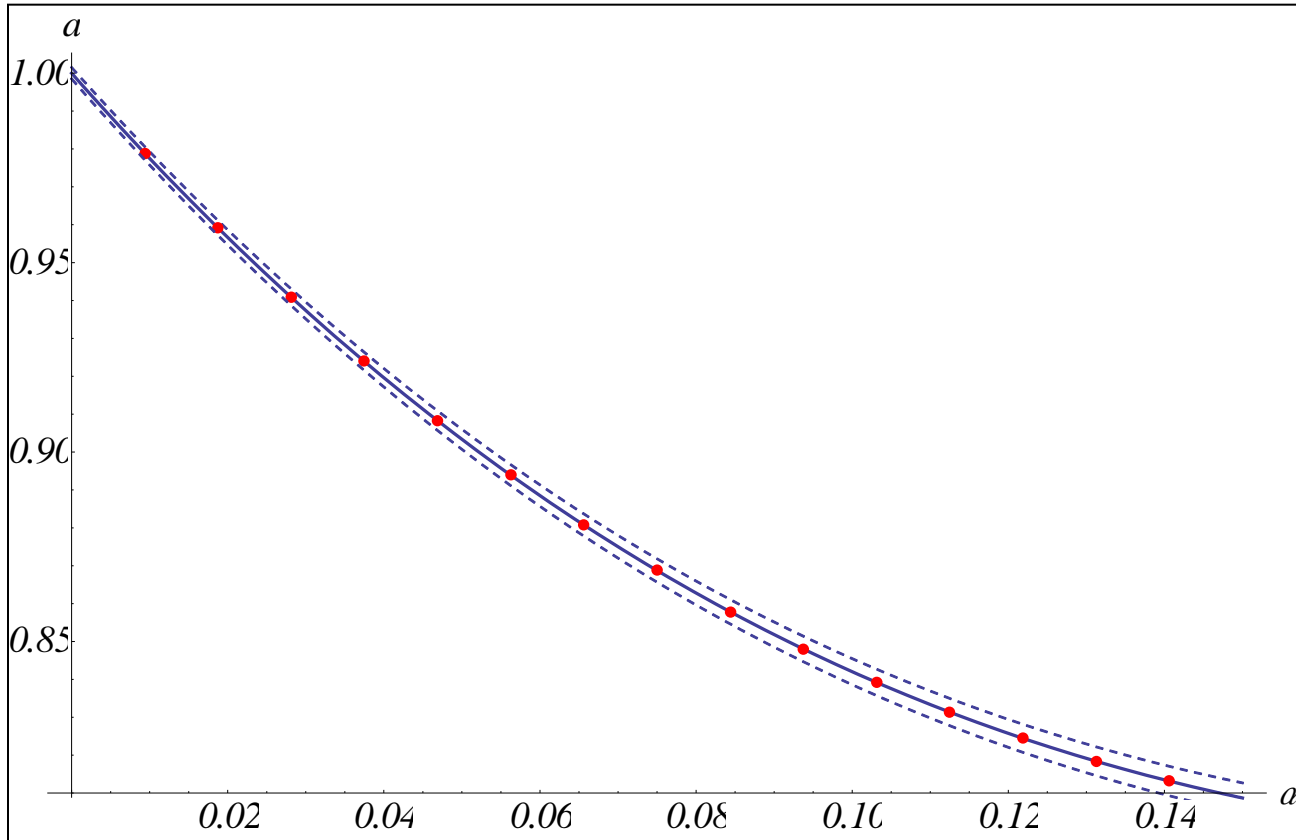


Рис 15. Зависимость коэффициента  $a$  в законе затухания от параметра нелинейности.

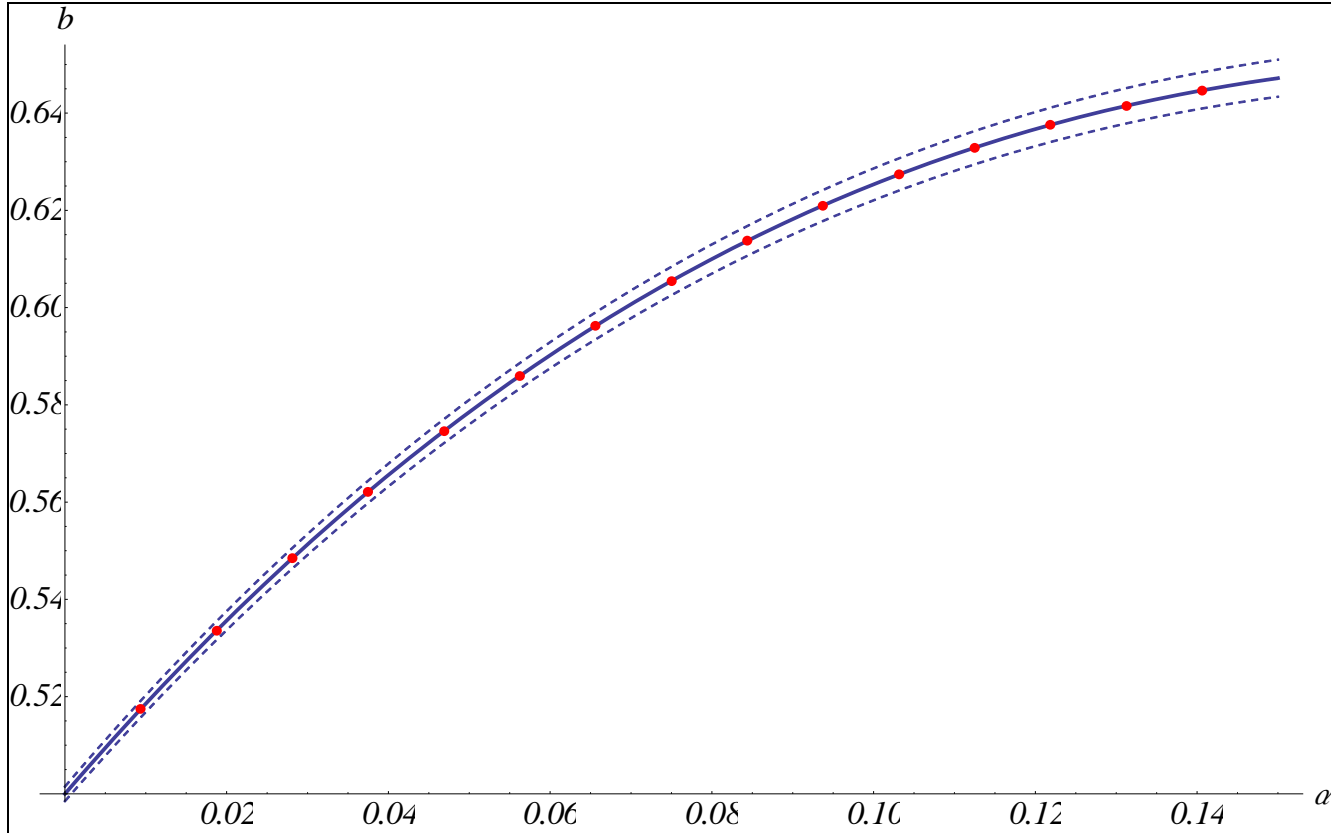


Рис 16. Зависимость коэффициента  $b$  в законе затухания от параметра нелинейности.



## Закон затухания кинетической температуры

- Для полученных зависимостей коэффициентов закона затухания от нелинейности предложена аппроксимация в виде степенных функций.
- Для коэффициента  $a$  была получена следующая зависимость:

$$a(\alpha) = 0.002\alpha^{-2} + 0.8$$

- Для коэффициента  $b$ :

$$b(\alpha) = 0.5 + 1.7\alpha - 4.6\alpha^2$$

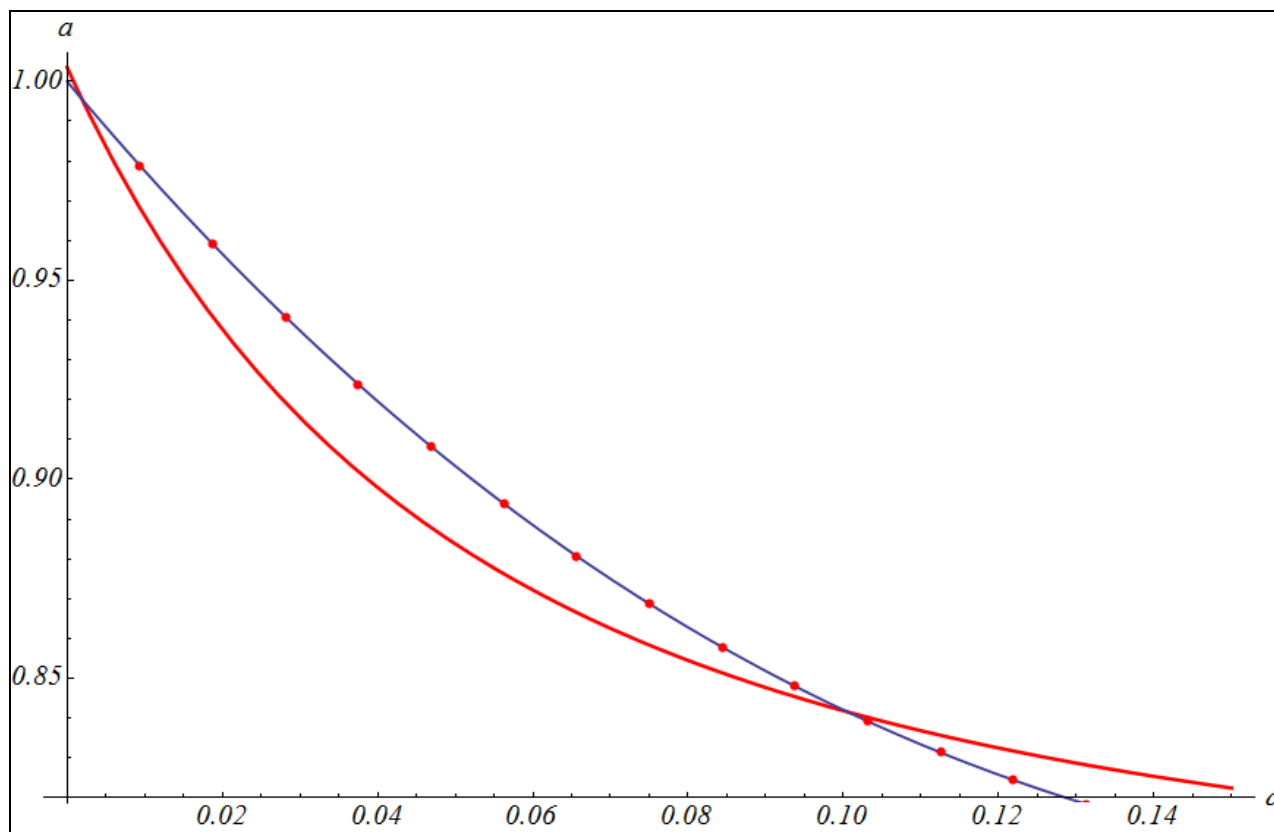


Рис. 17. Зависимость коэффициента  $a$  в законе затухания от параметра нелинейности (синим) и предложенная аппроксимация (красным) .

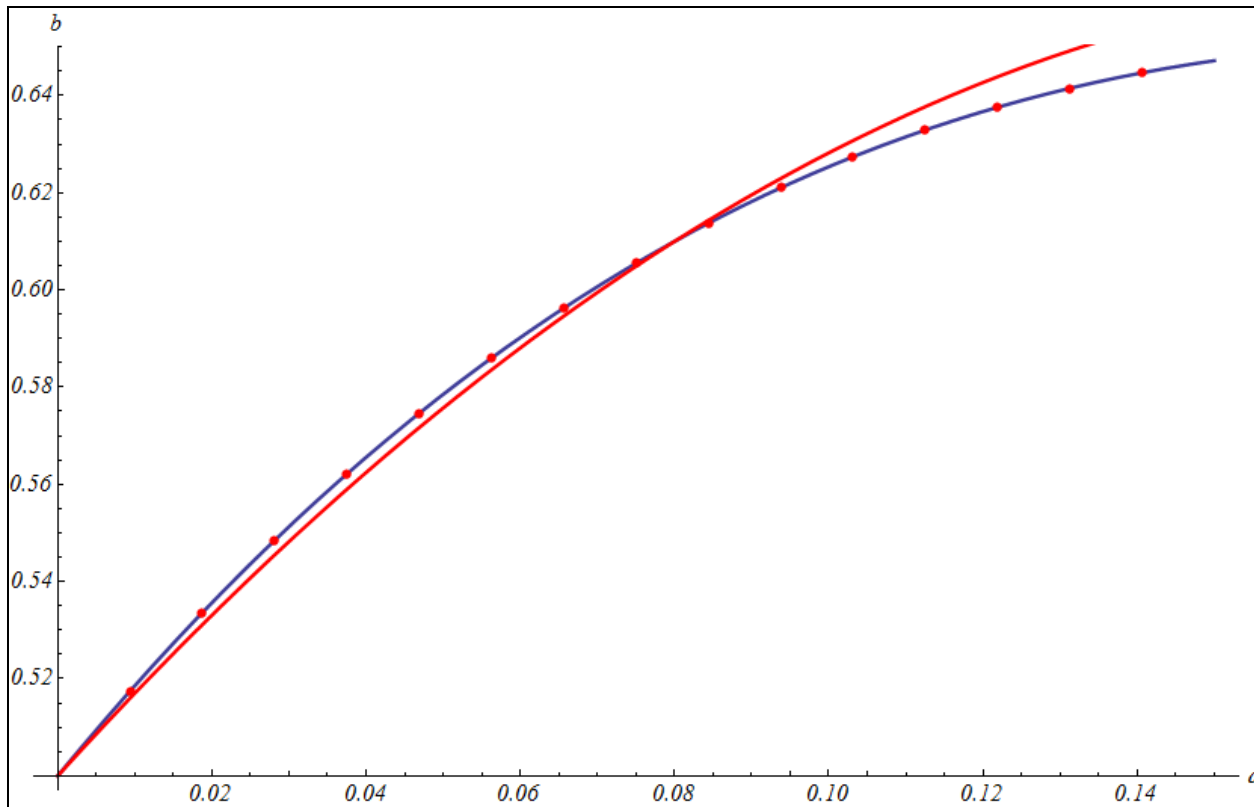


Рис. 18. Зависимость коэффициента  $b$  в законе затухания от параметра нелинейности (синим) и предложенная аппроксимация (красным) .



## Закон затухания кинетической температуры

- Определены параметры закона затухания для амплитуды синусоидального профиля температуры.
- Далее были сопоставлены графики зависимостей коэффициентов в законе затухания для двух задач от величины нелинейности

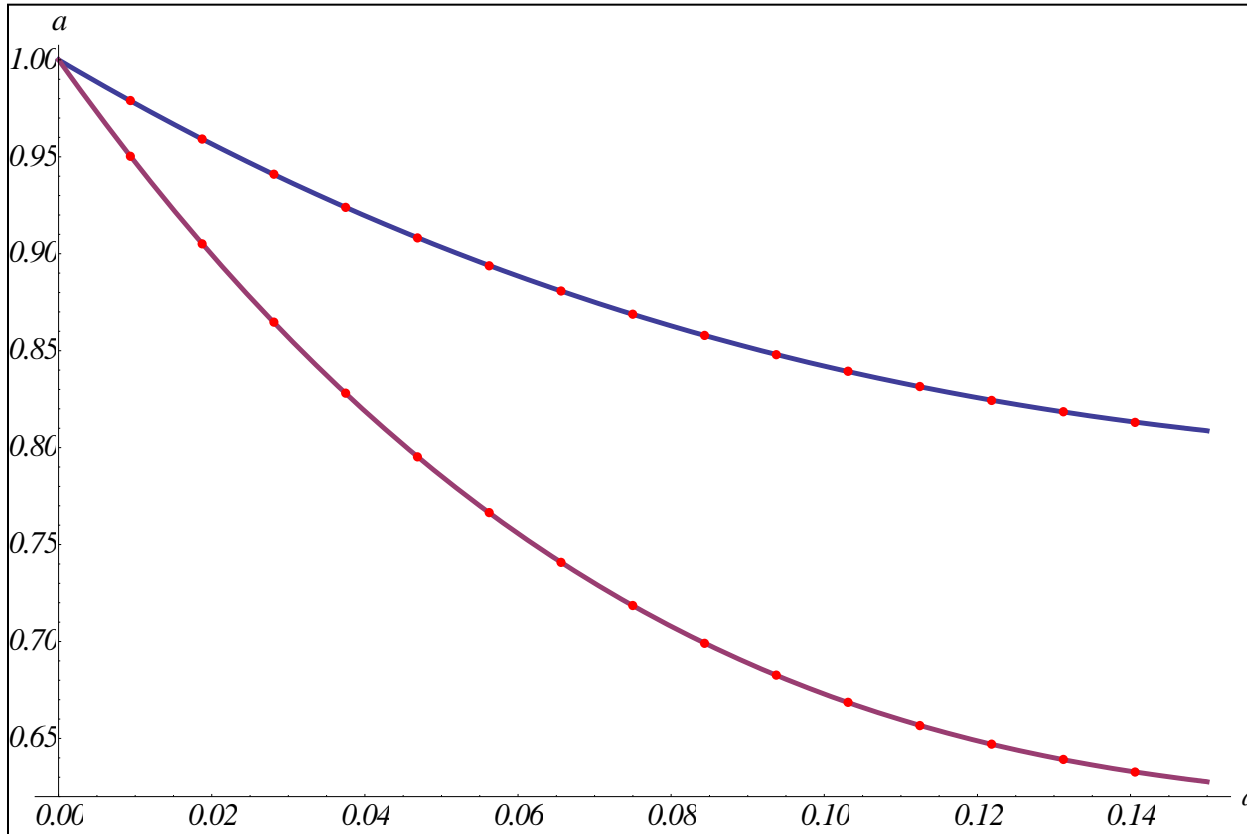


Рис 19. Зависимость коэффициента  $a$  закона затухания амплитуды от параметра нелинейности  $\alpha$ , (синим - кинетическая температура, красным - кинетическая энергия).



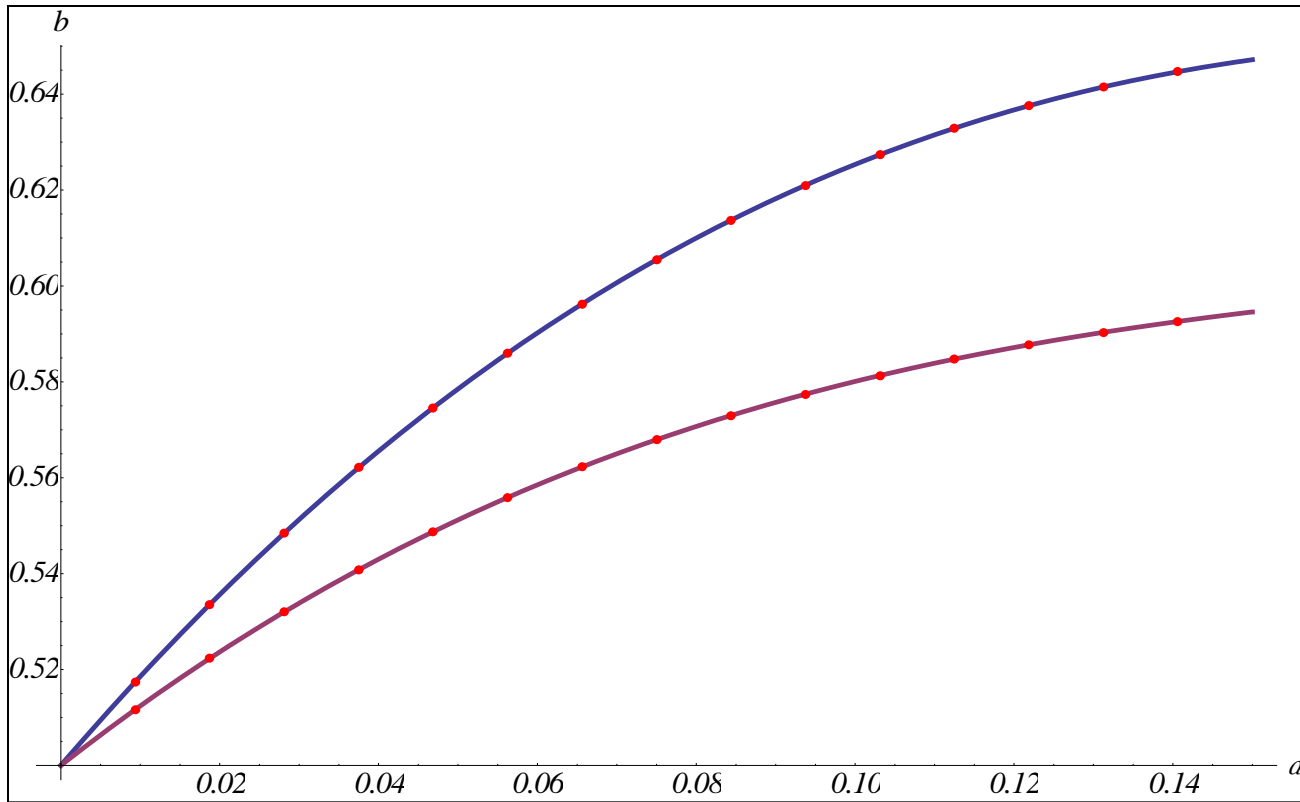


Рис 20. Зависимость коэффициента  $b$  закона затухания амплитуды от параметра нелинейности  $\alpha$ , (синим - кинетическая температура, красным - кинетическая энергия).



# Результаты

- Полученные результаты показывают, что показатели степени для закона затухания ( $b$ ) имеют схожий вид зависимости от параметра нелинейности, но их значения отличаются на 20 %
- Коэффициент  $a$  для рассмотренных двух случаев имеет нелинейную зависимость от параметра  $\alpha$ , при этом значения коэффициента отличаются друг от друга на 30 %.
- Определено различие в законах затухания исследуемых величин в двух рассмотренных задачах.



## Заключение

- Получено, что колебания кинетической энергии и кинетической температуры с увеличением нелинейности затухают быстрее.
- Температура в кристалле увеличивается с увеличением нелинейности при задании начальной равномерной температуры.



## Заключение

- Предложена аппроксимация закона затухания для колебаний кинетической энергии и температуры и зависимость коэффициентов в нем от параметра нелинейности.
- Хорошее соответствие предложенной аппроксимации при малой нелинейности для свидетельствует, что аналитическое решение не нарушается при введении малой нелинейности
- Показано различие в законах затухания для двух рассмотренных задач.



Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
Кафедра “ Теоретическая механика”



Спасибо за внимание!