

Санкт-Петербургский Политехнический университет Петра Великого  
Институт прикладной математики и механики  
Кафедра “Теоретическая механика”

Диссертация допущена к защите  
Зав. кафедрой  
Кривцов А.М  
« \_\_ » \_\_\_\_\_ 2015 г.

ДИССЕРТАЦИЯ  
На соискание академической степени  
МАГИСТРА

Тема: Тепловые колебания в одномерном кристалле

Направление: 010800 - Механика и математическое моделирование

Выполнил студент гр. 63604/1

Руководитель, д. ф.-м.н., проф.

Консультант по вопросам охраны труда, к.т.н., доц.

М. В. Симонов

А. М. Кривцов

В. В. Монашков

Санкт – Петербург  
2015

# Оглавление

<b>Введение .....</b>	<b>2</b>
<b>1. Линейный кристалл.....</b>	<b>3</b>
1.1. Введение .....	3
1.2. Детерминированная задача.....	5
1.3. Стохастическая задача .....	9
1.4. Сравнение двух методов осреднения .....	13
<b>2. Нелинейный кристалл .....</b>	<b>16</b>
2.1. Введение .....	16
2.2. Колебания кинетической энергии.....	18
2.3. Колебания кинетической температуры .....	28
<b>3. Заключение .....</b>	<b>46</b>
<b>4. Приложение. Охрана труда .....</b>	<b>48</b>
<b>Литература.....</b>	<b>55</b>

## Введение

В последние десятилетия методы механики дискретных сред интенсивно применяются для описания неравновесных процессов в веществе [1–3]. Особенно возрос интерес к дискретным подходам в связи с развитием нанотехнологий [4, 5]. Однако даже при описании поведения материалов с идеальной структурой возникает ряд трудностей.

Анализ неравновесных тепловых процессов в дискретных средах остается серьезной проблемой даже на такой простейшей модели, как идеальные кристаллы при их классическом (не квантовом) описании. Так, если для одномерного кристалла (цепочка частиц, связанных линейными пружинами) уравнения термоупругости могут быть выведены в адиабатическом приближении [3, 6], то описание процесса теплопереноса может расходиться с выводами классической теории теплопроводности [7, 8].

На макроскопическом уровне распространение тепла в большинстве материалов описывается законом Фурье, согласно которому тепловой поток пропорционален градиенту температуры. Однако, применение закона Фурье приводит к ряду физических парадоксов, таких, как мгновенное распространение тепла. Заметные отклонения от закона Фурье наблюдаются на малых временных и пространственных масштабах [16, 17]. Кроме того известно, что в простейших дискретных системах, таких как одномерный гармонический кристалл распространение тепла не подчиняется закону Фурье [8, 18, 19]. В настоящее время вопрос о распространения тепла в идеальных кристаллических системах остается открытым.

Один из теоретических вопросов механики дискретных сред связан с высокочастотными колебаниями кинетической и потенциальной энергий, хорошо известными по результатам численного моделирования [9]. В частности, если в начальный момент времени частицы упорядочены в идеальную кристаллическую решетку, а их скорости заданы случайно, то в кристалле инициируется динамический процесс перехода кинетической энергии в потенциальную энергию деформирования связей. Этот переход заканчивается распределением внутренней энергии между кинетическими и деформационными степенями свободы, определяемым теоремой о вириале [10]. Однако переход сопровождается высокочастотным колебательным процессом с затухающей амплитудой, не имеющим на настоящее время теоретического объяснения.

Целью данной работы является исследование колебаний кинетической энергии и кинетической температуры в одномерном кристалле с линейным и нелинейным взаимодействием частиц.

# 1 Линейный кристалл

## 1.1 Введение

Одной из самых простых моделей, позволяющей исследовать и описывать процессы, проходящие в идеальных структурах (кристаллах), является модель одномерного кристалла. Это простейшая модель, позволяющая, с одной стороны, получить переход от дискретной системы к континуальной, а с другой – продемонстрировать принципиальные различия, реализующиеся для таких систем [11–13].

В работе исследуется одномерный кристалл: цепочка одинаковых частиц массы  $m$ , соединенных одинаковыми линейными пружинами жесткости  $C$ . Уравнения динамики цепочки имеют вид:

$$\ddot{u}_k = \omega_0^2(u_{k-1} - 2u_k + u_{k+1}), \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{C}{m}} \quad (1.1)$$

где  $u_k$  – перемещение  $k$ -й частицы;  $k$  – индекс, принимающий произвольные целые значения. При моделировании будем использовать периодические граничные условия.

Введем два оператора осреднения. Первый оператор осреднения по индексу для произвольной величины  $f_k$ :

$$\langle f_k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f_k \quad (1.2)$$

где  $N$  – число независимых частиц.

Второй оператор осреднения по реализациям, введем аналогично:

$$\{f_s\} = \frac{1}{T} \sum_{s=1}^T f_s \quad (1.3)$$

где  $T$  – число независимых реализаций.

Для моделирования бесконечной цепочки атомов принимаются периодические граничные условия:

$$u_{k+N} = u_k, \quad N \gg 1 \quad (1.4)$$

Ранее, в работе [11] было получено дифференциально-разностное уравнение для обобщенной функции Лагранжа для одномерной цепочки:  $\ddot{L}_n = 4\omega_0^2(L_{n-1} - 2L_n + L_{n+1})$ . Решение этого уравнения позволяет определять уравнения, описывающие колебания энергий в одномерном кристалле. В работе было получено точное аналитическое решение, согласно которому функция Лагранжа для цепочки со стохастическими начальными условиями изменяется по тому же закону, по которому происходит движение центральной

частицы цепочки при детерминированных начальных условиях. Решение данного уравнения представляется в виде функции Бесселя первого рода:  $L_n(t) = EJ_{2n}(4\omega_0 t)$ , при  $N \rightarrow \infty$ . Изменение кинетической и потенциальной энергий рассмотренной системы описывается функцией Бесселя, период колебаний равен  $\frac{1}{4}T_0$ , а амплитуда колебаний обратно пропорциональна  $\sqrt{t}$ . Из полученного решения следует, что затухание колебаний энергий определяется возбуждением корреляций, связывающих движение частиц, удаленных друг от друга. Период колебаний энергий чрезвычайно мал, поэтому в ходе этих колебаний температуру правильнее связывать с полной энергией, а не с кинетической, которая постоянно переходит в потенциальную и обратно. Только после затухания переходного процесса, для которого требуются времена порядка десятков периодов  $T_0$ , температура может быть связана с кинетической энергией, как это принято в равновесной статистической механике.

## 1.2 Детерминированная задача

Рассмотрим одномерную цепочку с начальными условиями:

$$U_n = A\delta_n, \quad \dot{U}_n = 0, \quad 0 \leq n \leq N, \quad (1.5)$$

где  $\delta_n$  – символ Кронекера, равный 1 при  $n = N$  и равный 0 во всех остальных случаях,  $A$  – некоторое смещение,  $N$  – число атомов цепочки. Постановка задачи соответствует задаче о смещении одной частицы из положения равновесия в одномерной цепочке частиц. В задаче исследуется зависимость перемещений смещенной частицы от времени и характер зависимости при различном числе частиц в цепочке.

Решим уравнение (1.1) с начальными условиями (1.5) и периодическими граничными условиями (1.4) можно решить с помощью центральной разностной схемы. Вычисление правой части уравнения (1.1) аналогично аппроксимации оператора Лапласа с помощью центральной разностной схемы. Для решения уравнения необходимо сначала вычислить скорости частиц цепочки  $\dot{U}_n$ , затем по методу Эйлера определяется перемещения частиц одномерного кристалла.

Для выбора шага интегрирования рассчитаем микроскопическую единицу измерения времени. В качестве наглядной микроскопической единицы измерения времени удобно взять период колебаний частицы вблизи положения равновесия в одномерной цепочке частиц:

$$T_0 = 2\pi\sqrt{\frac{m}{C}} = \frac{2\pi}{\omega_0} \quad (1.6)$$

Шаг интегрирования выбирался в пределах от  $0.01T_0$  до  $0.03T_0$ , в зависимости от желаемой точности получаемых результатов. Были проведены необходимые проверки на сходимость по шагу интегрирования. Привязка шага интегрирования к микроскопической единице измерения времени нужна, исходя из понимания того, что частица за шаг интегрирования должна смещаться незначительно.

Параметры моделирования можно представить в таблице 1:

Таблица 1

№	Начальные условия	Граничные условия	Число частиц	Шаг интегрирования
1	$U_n = A\delta_n, \quad \dot{U}_n = 0, \quad 0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$
2	$U_n = A\delta_n, \quad \dot{U}_n = 0, \quad 0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$10^2$	$0.01T_0$

Далее и везде перемещение смещенной частицы будет обезразмериваться по начальному смещению частицы  $A$ , а время расчётов по отношению к периоду колебаний частицы вблизи положения равновесия.

В результате моделирования были получены следующие результаты перемещений смещенной частицы:

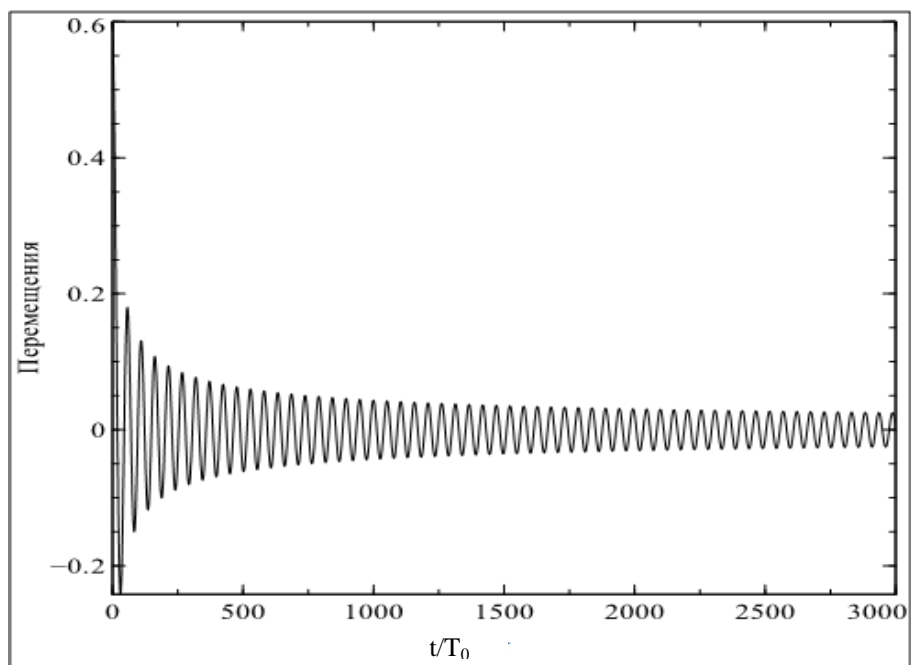


Рис. 1.1. Зависимость перемещений смещенной частицы от времени.  
Число частиц: 1 млн.

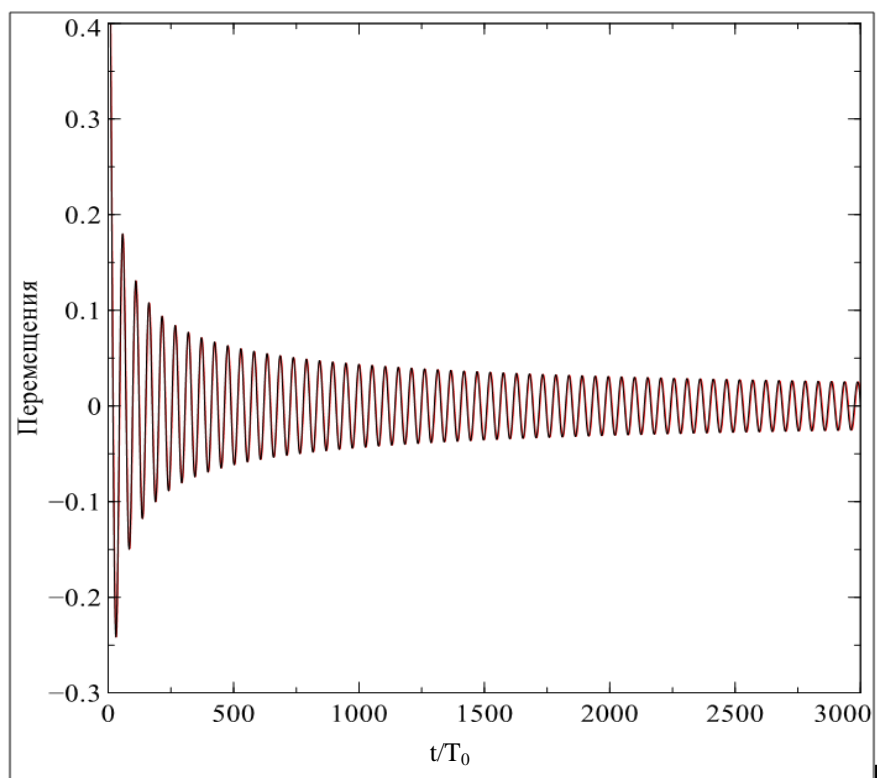


Рис. 1.2. Зависимость перемещений смещенной частицы от времени (черный) и график решения через функцию Бесселя (красный). Число частиц: 1 млн.

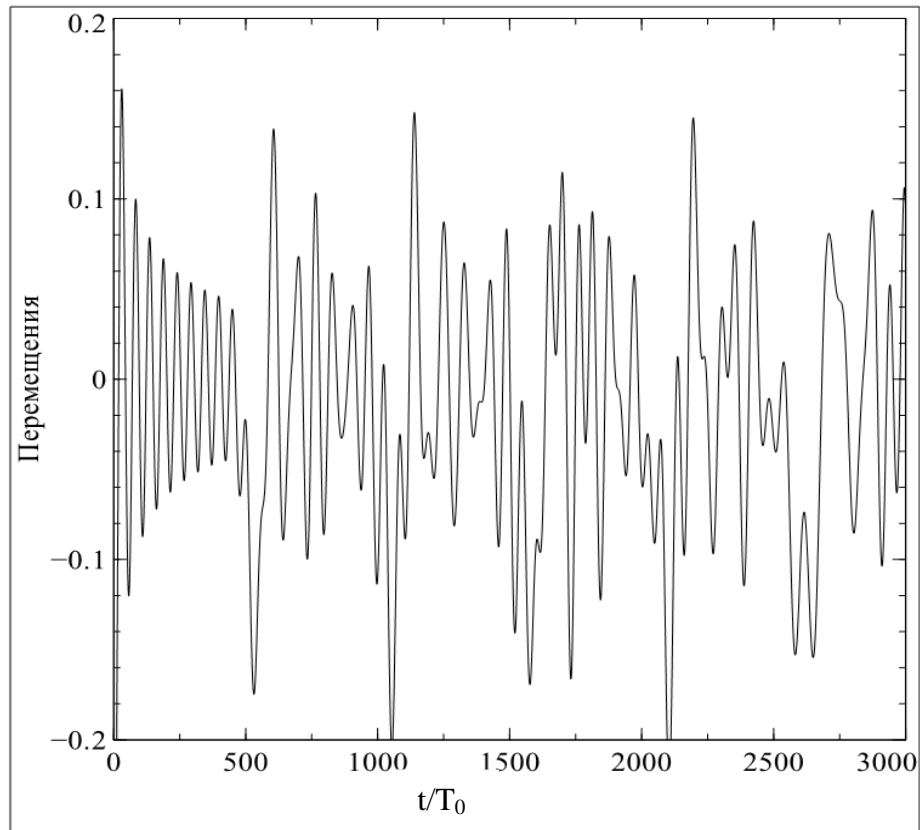


Рис. 1.3. Зависимость перемещений смещенной частицы от времени.

Число частиц: 100.

Получено, что зависимость перемещений смещенной частицы от времени имеет колебательный характер. Решение задачи также представимо через функцию Бесселя первого рода и на рисунке 1.2 показано, что численное и аналитическое решение совпадает. Показано, что с течением времени колебания частицы стремятся к постоянному значению. При числе частиц меньше  $10^3$ , колебания носят хаотический характер и не имеют постоянного периода колебаний. Причина этого лежит в том, что при малом числе частиц и периодических граничных условиях, возмущение от смещения одной частицы приводит к тому, что волна в цепочке, вызванная смещением, не успевает погаситься до возвращения к смещенной частице.



### 1.3 Стохастическая задача

Далее также рассматривалась одномерная цепочка частиц, перемещения которых описывалось уравнением (1.1). В данном случае определим кинетическую энергию цепочки частиц при начальном задании случайных скоростей частицам цепочки.

Кинетическую энергию определим следующим образом:

$$K = \frac{1}{2} m \langle \dot{U}_k^2 \rangle \quad (1.7)$$

где  $\langle \rangle$  – ранее введённый оператор осреднения (1.2), а  $\dot{U}_k$  – скорости частиц,  $m$  – масса частиц.

Определим колебания температуры одномерной цепочки при следующих начальных условиях:

$$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n, \quad (1.8)$$

где  $\rho_n$  – случайная величина заданная с помощью генератора случайных чисел. Для задания граничных условий выбрано условие периодичности.

Параметры моделирования можно представить в таблице 2:

Таблица 2

№	Начальные условия	Граничные условия	Число частиц	Шаг интегрирования
1	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n, 0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$10^6$	$0.01T_0$
2	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n, 0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$10^4$	$0.01T_0$
3	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n, 0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$10^3$	$0.01T_0$

Далее и везде кинетическая энергия будет обезразмериваться по начальной заданной кинетической энергии  $K_0$ , а время расчётов  $t$  по отношению к периоду период колебаний частицы вблизи положения равновесия.

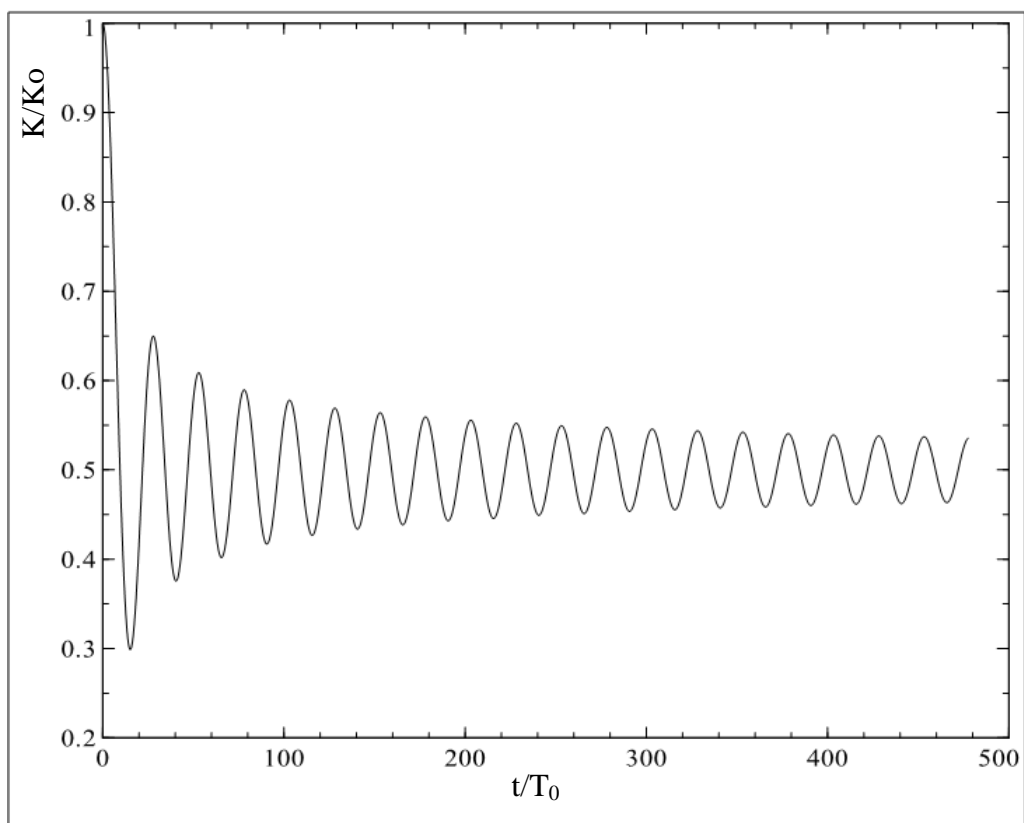


Рис. 1.4. Зависимость кинетической энергии одномерного кристалла от числа периодов колебаний цепочки частиц.

Число частиц: 1 млн.

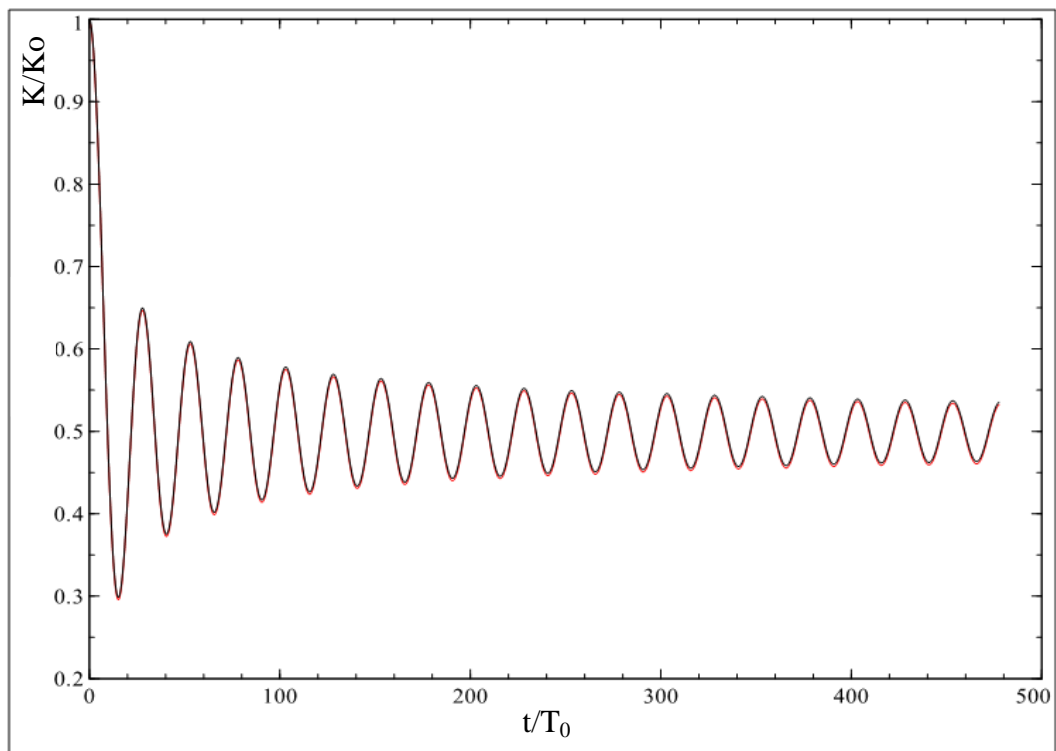


Рис. 1.5. Зависимость кинетической энергии одномерного кристалла от числа периодов колебаний цепочки (черный) и график решения через функцию Бесселя (красный).

Число частиц: 1 млн.

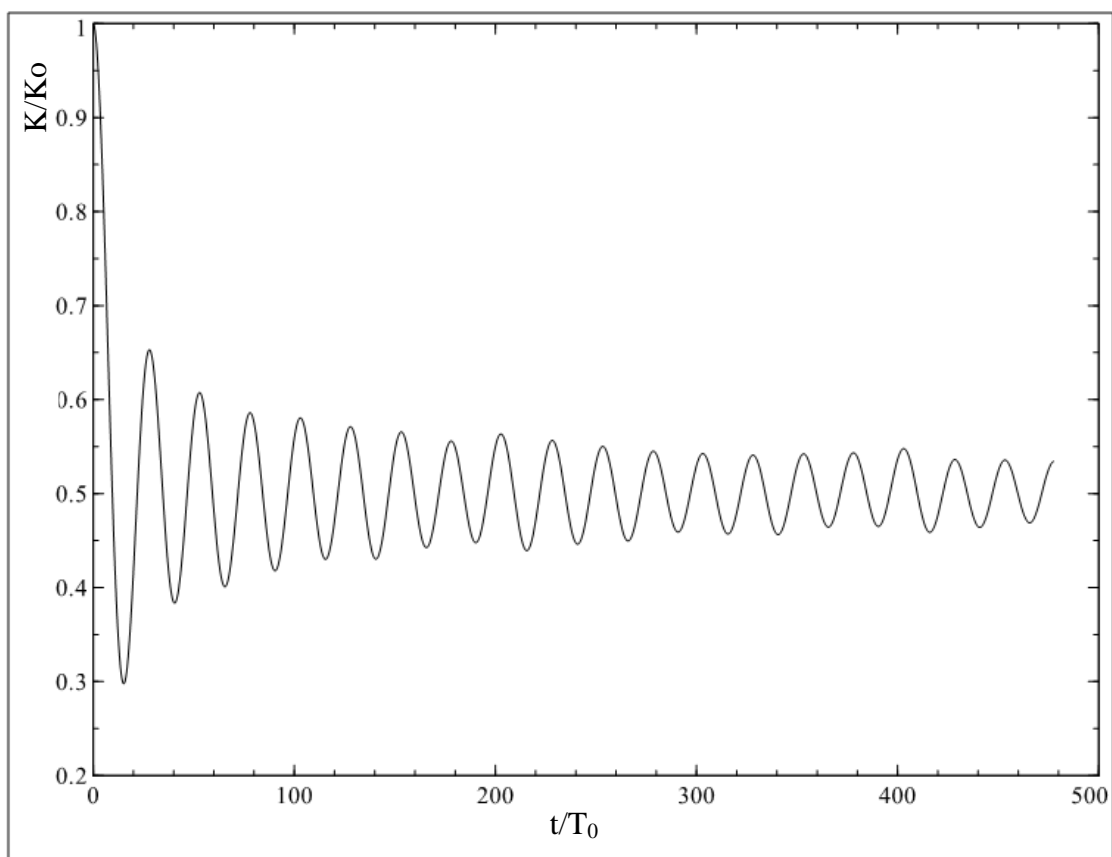


Рис. 1.6. Зависимость кинетической энергии одномерного кристалла от времени.  
Число частиц:  $10^4$ .

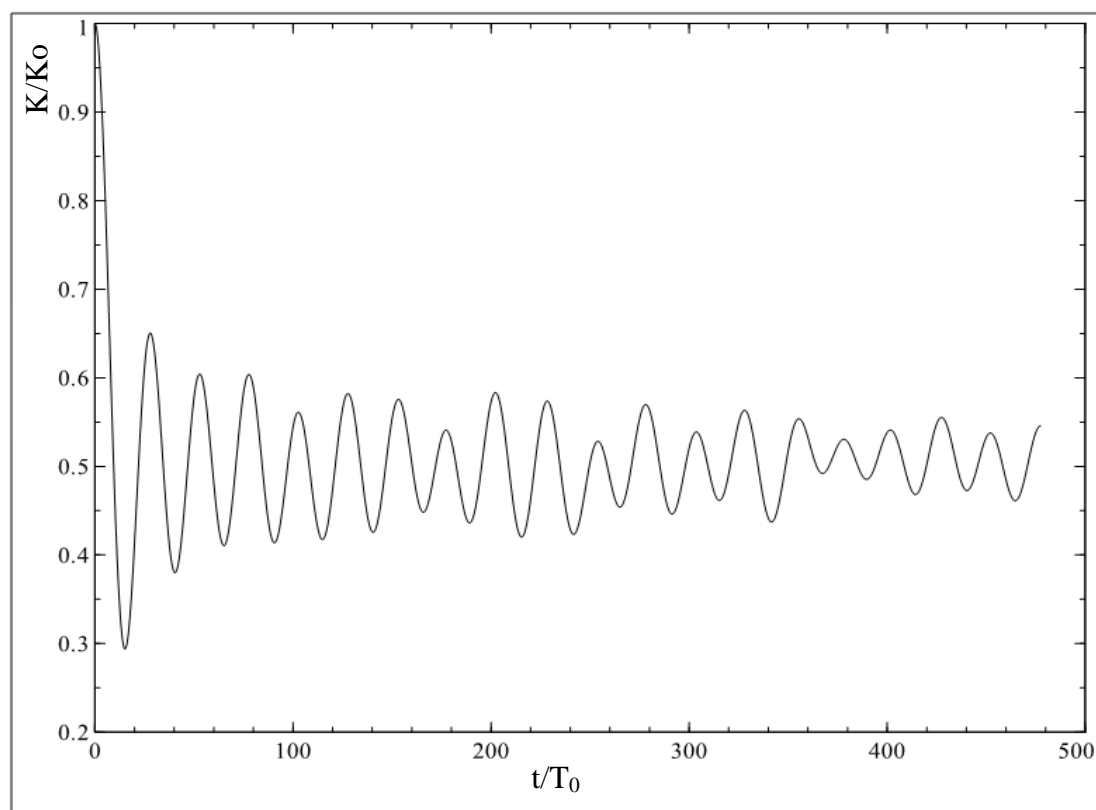


Рис. 1.7. Зависимость кинетической энергии одномерного кристалла от времени.  
Число частиц:  $10^3$ .

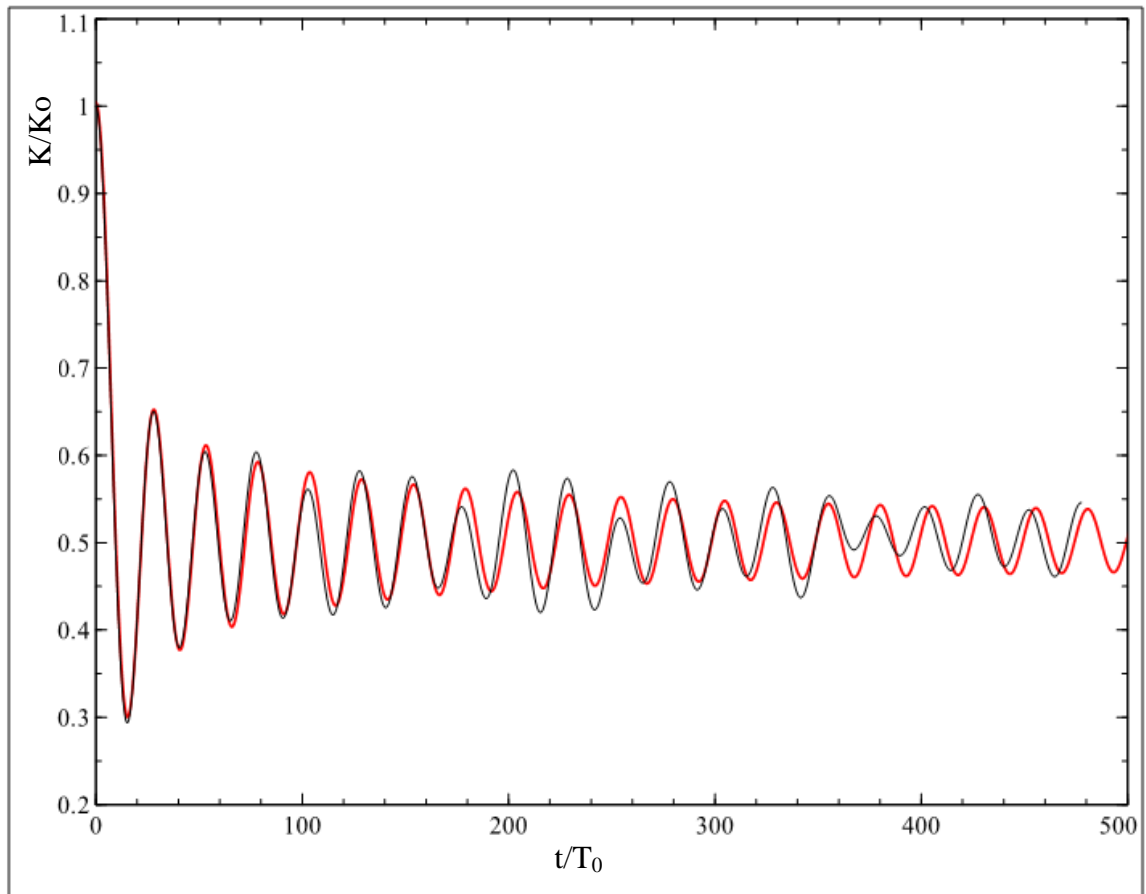


Рис. 1.8. Зависимость кинетической энергии одномерного кристалла от числа периодов колебаний цепочки (черный) и график решения через функцию Бесселя (красный).

Число частиц:  $10^3$ .

Было получено, что зависимость кинетической энергии от времени носит также колебательный характер, соответствующий решению задачи через функцию Бесселя. Ранее было получено, что решение задачи об определении кинетической энергии одномерного кристалла выражается через функцию Бесселя как:  $K(t) = \frac{K_0}{2}(1 + J_0(4\omega_0 t))$ , где  $K_0$  - начальная кинетическая энергия,  $J_0$  - функция Бесселя первого рода. С течением времени значение температуры стремится к постоянному значению. Выявлено, что при числе частиц меньше  $10^3$  колебания кинетической энергии от времени не будут иметь определенного периода. Это вызвано тем, что при малом числе частиц (менее  $10^3$ ) проявляется преобладание случайно заданных скоростей одного знака. Таким образом, колебания не будут иметь установившийся характер и постоянного периода.

На рисунке 1.8 можно заметить, что колебания в одномерной цепочке атомов начинают терять постоянный характер колебаний, после различного числа периодов колебаний цепочки. При 50 частицах, колебания теряют постоянный период после 25 периодам коле-

баний цепочки. Таким образом, время потери устойчивости колебаний можно определить как:  $t / T_{per} = N / \omega_0$ . Это выражение следует из следующего неравенства:  $ct \ll N$ . Это означает, что при большом числе частиц (более  $10^3$ ), наступает нарушение устойчивых колебаний в одномерной кристаллической решетке.

## 1.4 Сравнение двух методов осреднения

В работе в главе 2.1. были введены два оператора осреднения: (1.2) и (1.3). Далее рассмотрен случай, когда одновременно используются два различных оператора осреднения. В данном случае, параметры осреднения выбираются так, чтобы произведение ( $P$ ) числа осреднений по частицам ( $N$ ) и числа осреднений по реализациям ( $T$ ) было постоянным, но изменялись число осреднений по частицам и число осреднений по реализациям. Таким образом, например, можно сделать вывод о том, является ли задача об определении кинетической энергии в одномерной цепочке с 1000 частицами и осреднением по 10 реализациям аналогичной задаче для цепочки с 10 частицами, но для которой будут получены 1000 различных реализаций.

Для проведения численного эксперимента было взято значение  $P = N \cdot T = 10^6$ . Значения  $N$  и  $T$  варьировались. В численном эксперименте определялась кинетическая энергия в зависимости от времени, отнесенному к периоду колебаний цепочки атомов. Параметры численного моделирования представлены в таблице:

Таблица 3

№	Начальные условия	Граничные условия	Число частиц (N)	Число реализаций (T)	Шаг интегрирования
1	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n, 0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^3$	$5 \cdot 10^2$	$0.01T_0$
2	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n, 0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$10^3$	$10^3$	$0.01T_0$
3	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n, 0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$5 \cdot 10^2$	$2 \cdot 10^3$	$0.01T_0$

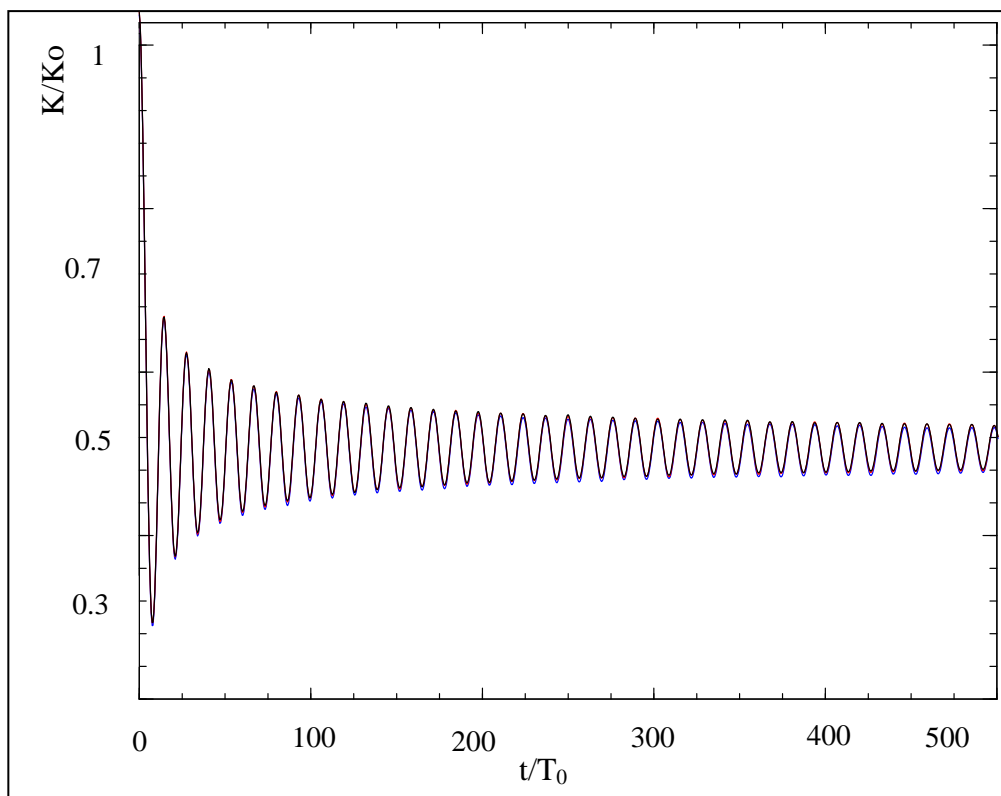


Рис. 1.8. Зависимость кинетической энергии цепочки от времени.

Синим: число реализаций - 1000, число частиц - 1000

Черным: число реализаций - 2000, число частиц - 500;

Красным: число реализаций - 500, число частиц - 2000.

Из графика можно сделать вывод, что при большом значении произведения числа реализаций и числа частиц, не наблюдается разницы в том, какое осреднение использовать. Для более подробного исследования,  $P$  было взято равным  $10^4$ .

Таблица 4

№	Начальные условия	Граничные условия	Число частиц	Число реализаций	Шаг интегрирования
1	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n, 0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$10^3$	10	$0.01T_0$
2	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n, 0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$10^2$	$10^2$	$0.01T_0$
3	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n, 0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	10	$10^3$	$0.01T_0$

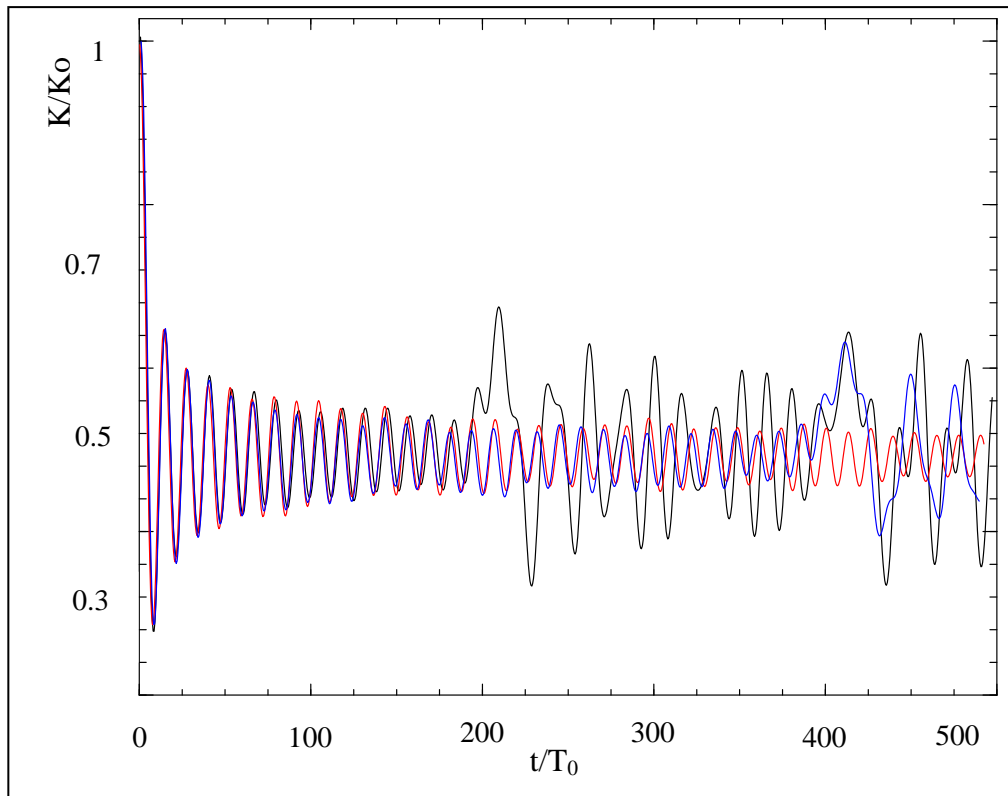


Рис. 1.9. Зависимость кинетической энергии цепочки от времени.

Синим: число реализаций -  $10^2$ , число частиц -  $10^2$ ;

Черным: число реализаций -  $10^3$ , число частиц - 10;

Красным: число реализаций - 10, число частиц -  $10^3$

Получено, что при малом числе частиц в цепочке, даже при большом числе реализаций, колебания не имеют устойчивого характера. Этот эффект вызван тем, что в силу периодических граничных условий, при прохождении волны до конца цепочки волна встречает эту же волну идущую в другой конец цепочки. Данный эффект можно назвать эффектом экранирования. Из данных графиком можно сделать вывод, что большое число осреднений по реализациям, при малом числе частиц, не позволяет избавиться от эффекта экранирования.



## 2 Нелинейный кристалл

### 2.1 Введение

В данной главе рассматривается взаимодействие частиц с кубической нелинейностью. Данное взаимодействие может быть рассмотрено, как частный случай нелинейного взаимодействия. Этот случай можно представить как первый два слагаемые из разложения в ряд нечетной функции.

В главе исследуется одномерный кристалл: цепочка одинаковых частиц массы  $m$ , соединенных линейными пружинами жесткости  $C_1$  и нелинейными (кубическая нелинейность в выражении для взаимодействия силы) пружинами жесткости  $C_2$ . Уравнения динамики цепочки имеют вид:

$$m\ddot{u} = C_1(u_{k-1} - 2u_k + u_{k+1}) + C_2[(u_{k+1} - u_k)^3 - (u_k - u_{k-1})^3] \quad (2.1)$$

где  $u_k$  – перемещение  $k$  – й частицы;  $k$  – индекс, принимающий произвольные целые значения. Для моделирования бесконечной цепочки атомов принимаются периодические граничные условия:

$$u_{k+N} = u_k, \quad N \gg 1 \quad (2.2)$$

где  $N$  – число независимых частиц.

Вводится оператор осреднения по индексу для произвольной величины  $f_k$ :

$$\langle f_k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f_k \quad (2.3)$$

где  $k$  – индекс, принимающий произвольные целые значения.

Для оценки влияния нелинейности необходимо ввести безразмерный параметр, позволяющий определять вклад нелинейного взаимодействия на колебания энергии в цепочке. Безразмерный параметр будет характеризовать отношения вклада линейного и нелинейного взаимодействия. Для его введения рассмотрим полную энергию системы с линейным взаимодействием частиц:

$$E = \frac{m}{2} \langle \dot{U}_n^2 \rangle + \frac{C_1}{2} \langle \varepsilon_n^2 \rangle \quad (2.4)$$

где  $\Pi = \frac{C_1}{2} \langle \varepsilon_n^2 \rangle$  – потенциальная энергия кристалла. Введем величину  $\theta$ , равную:

$\theta = \langle \varepsilon_n^2 \rangle$ . Размерность  $\theta$  равна:  $[\theta] = m^2$ . Тогда мы можем связать жесткости линейной и

нелинейной пружины через параметр  $\theta$ :  $\alpha = \frac{C_2}{C_1} \theta$ , при этом:  $[\alpha] = 1$ . Таким образом, мы

определили безразмерный параметр  $\alpha$ , характеризующий отношения вклада линейного и

нелинейного взаимодействия, для определения влияния нелинейности на колебания энергии в одномерном кристалле. В случае  $\alpha \ll 1$  нелинейность цепочки частиц можно считать малой.

Для вычисления параметра  $\alpha$  в численном эксперименте рассмотрим формулу (2.4). Положим кинетическую и потенциальную энергию равными друг другу, тогда мы получаем:  $\frac{m}{2}\sigma^2 = \frac{C_1}{2}\theta$ , где  $\sigma^2 = \langle \dot{U}_n^2 \rangle$ ,  $\theta = \langle \varepsilon_n^2 \rangle$ . Следовательно имеем:  $\theta = \frac{m}{C_1}\sigma^2 = \frac{1}{\omega_0^2}\sigma^2$ . Тогда безразмерный параметр  $\alpha$  можно вычислить следующим образом:

$$\alpha = \frac{C_2}{C_1}\theta = \frac{C_2\sigma^2}{C_1\omega_0^2} \quad (2.5)$$

Контролируя введенный параметр  $\alpha$ , можно варьировать влияние нелинейного взаимодействия частиц. Таким образом, возможно исследовать вопрос о том, как будет меняться характер колебаний при увеличении параметра нелинейности.

## 2.2 Колебания кинетической энергии

В этой главе исследуется вопрос о характере колебаний кинетической энергии одномерного кристалла с нелинейным взаимодействием между частицами. В качестве начального условия будем рассматривать задание случайных скоростей и нулевых перемещений частицам кристалла. Подобное задание начальных условий аналогично распределению равномерной температуры по кристаллу.

Начальные условия в этом случае примут вид:

$$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n, 0 \leq n \leq N, \quad (2.6)$$

где  $n$  – номер частицы,  $\rho_n$  – случайная величина полученная с помощью генератора случайных чисел.

Ранее для линейного взаимодействия между частицами было получено, что среднее значение кинетической энергии падает ровно в два раза [11].

Для анализа зависимости кинетической энергии от параметра  $\alpha$  были проведены численные эксперименты для одномерного кристалла с нелинейным взаимодействием частиц (2.1) с начальным равномерным распределением скоростей (2.6) и граничными условиями (2.2).

Параметры моделирования представлены в таблице:

Таблица 5

№	Начальные условия	Граничные условия	Число частиц	Шаг интегрирования	Параметр $\alpha$
1	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.0
2	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.5
3	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	1
4	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	2

Далее и везде кинетическая энергия будет обезразмериваться по начальной заданной кинетической энергии  $K_0$ , а время расчётов по отношению к периоду колебаний частицы вблизи положения равновесия  $T_0$ .

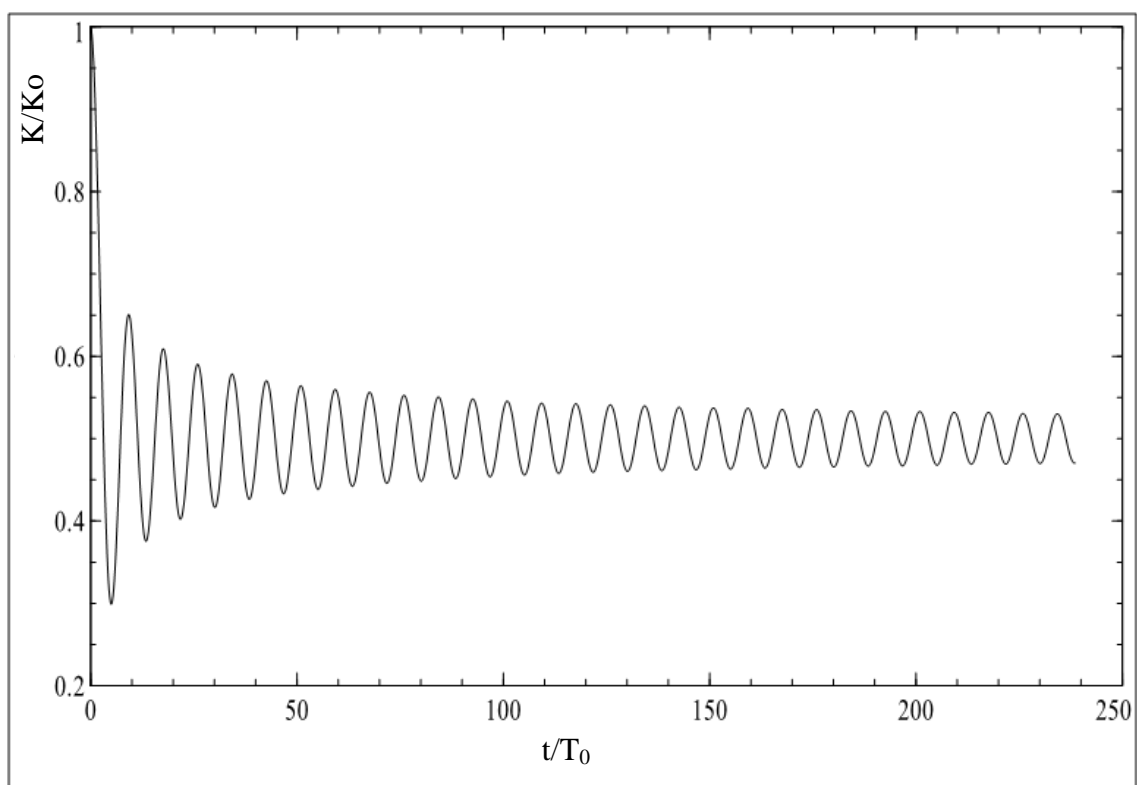


Рис. 2.1. Колебания средней кинетической энергии в кристалле, при  $\alpha = 0$

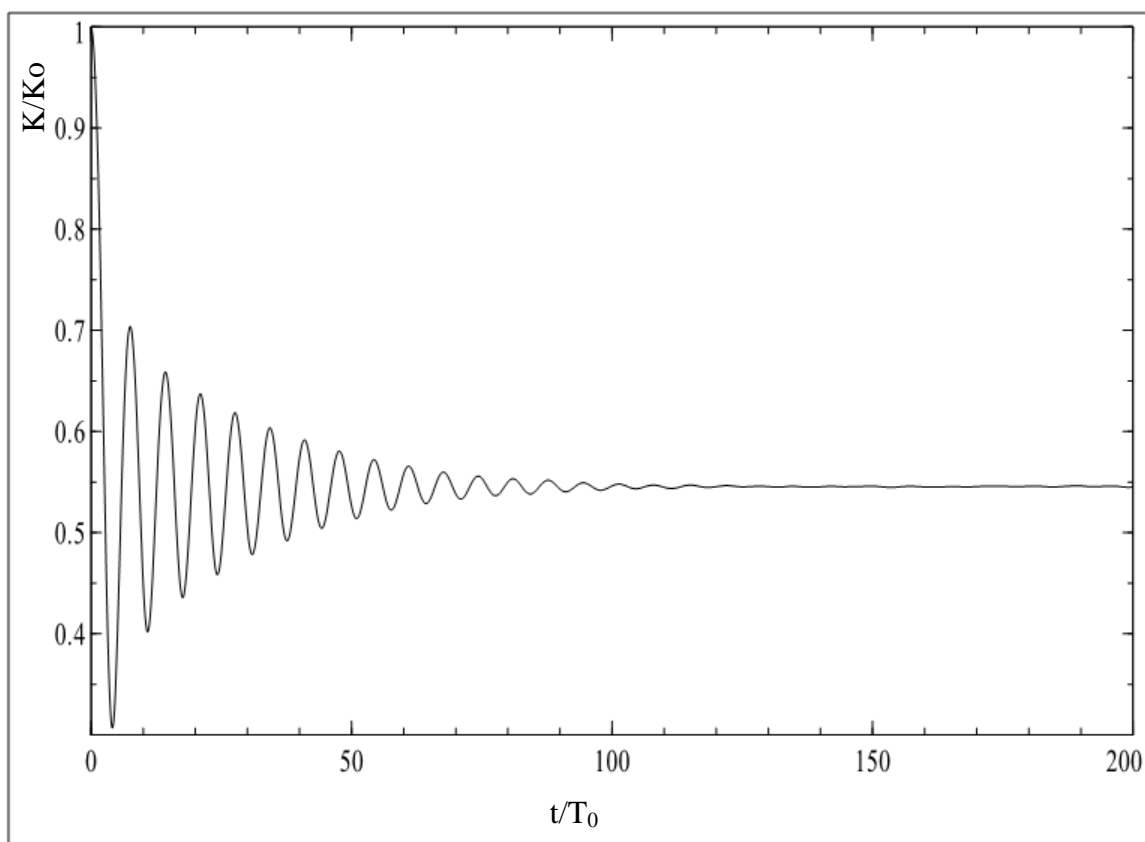


Рис. 2.2. Колебания средней кинетической энергии в кристалле, при  $\alpha = 0.5$ .

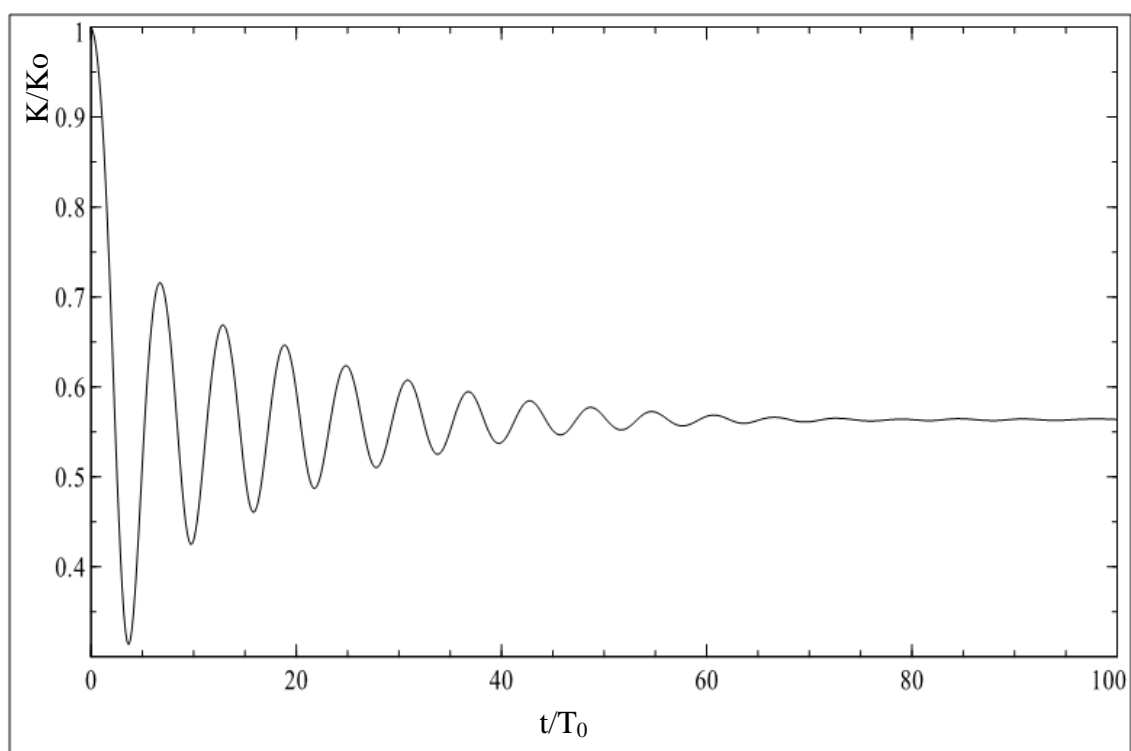


Рис. 2.3. Колебания средней кинетической энергии в кристалле, при  $\alpha = 1$ .

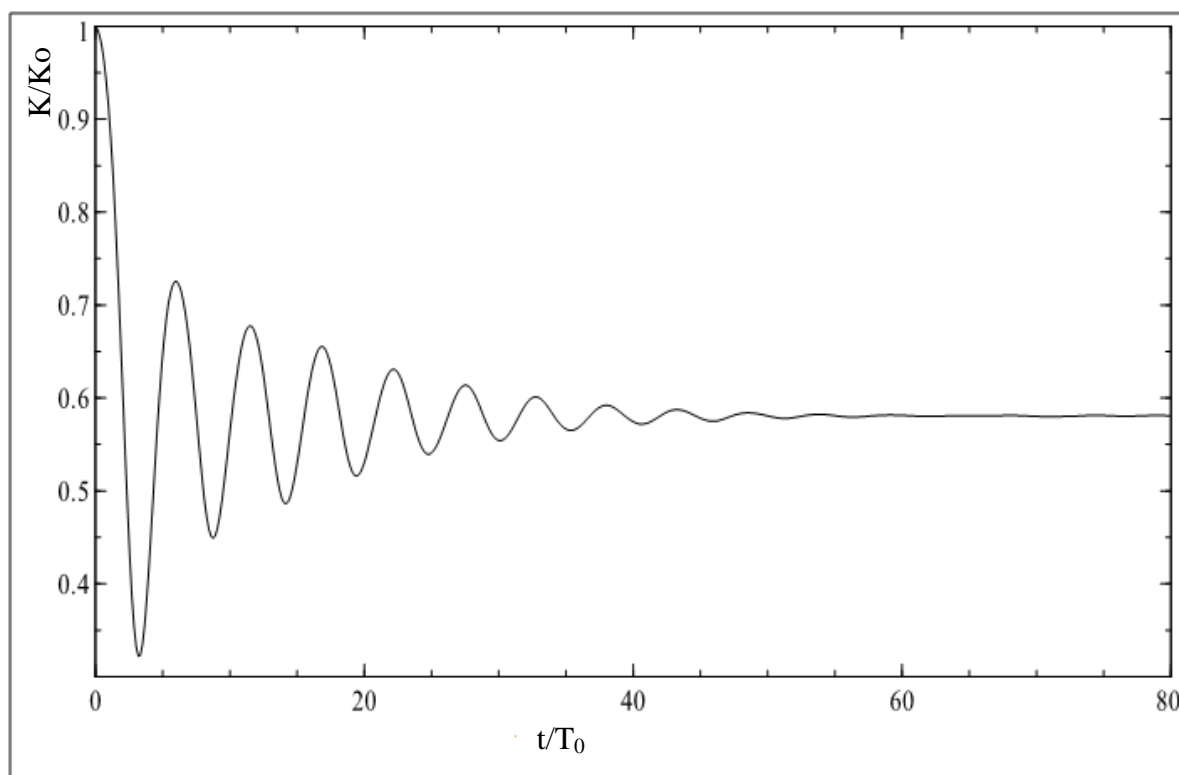


Рис. 2.4. Колебания средней кинетической энергии в кристалле, при  $\alpha = 2$ .

Из полученных графиков можно сделать вывод о том, что скорость затухания колебаний увеличивается при увеличении нелинейности. После проведения серии численных экспериментов был проведен анализ того, как меняется период колебаний в зависимости

от степени нелинейности. Полученные зависимости позволяют сделать вывод, что период колебаний уменьшается с увеличением нелинейности взаимодействия.

Далее была определена кинетическая температура кристалла. Известно, что кинетическая энергия связана с кинетической температурой следующим соотношением:

$$K = \frac{d}{2} kT \quad (2.7)$$

где  $d$  – число степеней свободы, в данном случае равное единице,  $k$  – постоянная Больцмана. Приравнивая два определения кинетической энергии, и принимая константу Больцмана равной единице, получим:

$$T = m \langle \dot{U}_k^2 \rangle \quad (2.8)$$

Был получен график зависимости средней кинетической температуры определенной после 100 периодов колебаний цепочки от параметра нелинейности  $\alpha$ . Температура обезразмеривалась по начальной температуре  $T_{in}$  в кристалле:

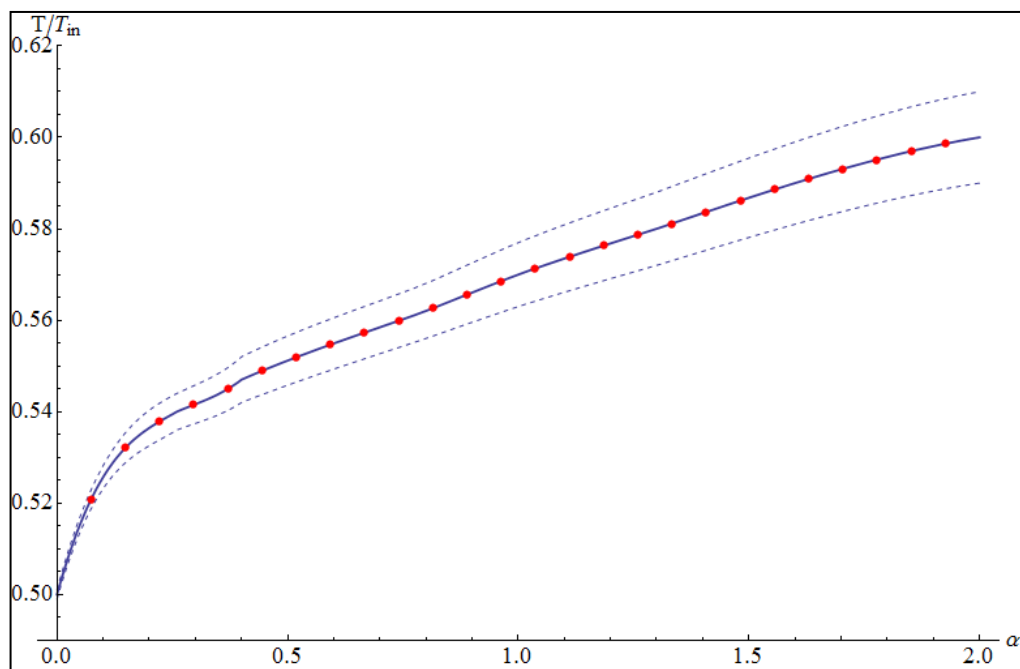


Рис. 2.5. Зависимость среднего значения температуры от степени нелинейности.

Штриховые графики показывают доверительный интервал.

Результат может свидетельствовать о нелинейной зависимости средней температуры в кристалле от значения параметра нелинейности  $\alpha$ . Таким образом, можно заключить, что начальная заданная энергия в кристалле распределяется неравномерно между кинетической и потенциальной энергией.

Так как ранее было отмечено, что колебания кинетической энергии с увеличением нелинейности затухают быстрее, то необходимо исследовать закон затухания кинетической энергии в зависимости от параметра нелинейности. Для этого было принято предпо-

ложение, что колебания кинетической энергии имеют вид:  $K(t) = A(t)\sin(\omega x) + \bar{K}$ , где  $A(t)$  - затухающая функция, а  $\bar{K}$  - средняя кинетической энергии кристалла. Таким образом, необходимо определить вид затухающей функции  $A(t)$ . Для линейного взаимодействия между частицами было получено, что колебания кинетической энергии затухают со скоростью  $1/\sqrt{t}$ .

Закон затухания искался в классе функций:

$$g(t/T_0) = a(t/T_0)^{-b} \quad (2.9)$$

где  $a, b$  – варьируемые коэффициенты. Варьируя эти два коэффициента определялась функция, наиболее точно лежащая на график затухания кинетической энергии. Для этого проводилась процедура двухпараметрической оптимизации. Среднее значение кинетической энергии при определении закона затухания не учитывалось.

Параметры численных экспериментов представлены в таблице 6.

Таблица 6

№	Начальные условия	Граничные условия	Число частиц	Шаг интегрирования	Параметр $\alpha$
1	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.0
2	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.07
3	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.13
4	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.25
5	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.5
6	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.8
7	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	1.0
8	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	1.3
9	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	1.7

10	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01 T_0$	2
----	---	-----------------	----------------	------------	---

Ниже представлены затухающие колебания кинетической энергии и аппроксимация законов затухания для них:

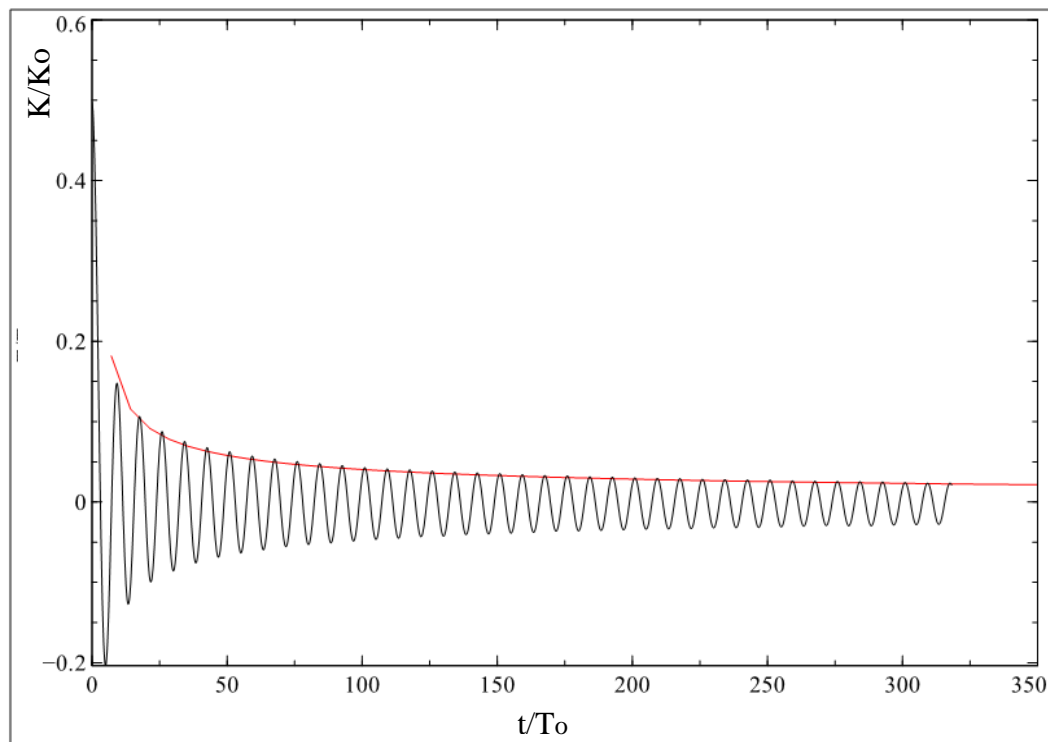


Рис. 2.6. Колебания кинетической энергии в кристалле (черный) и график затухающей функции (красный), при  $\alpha = 0$ .

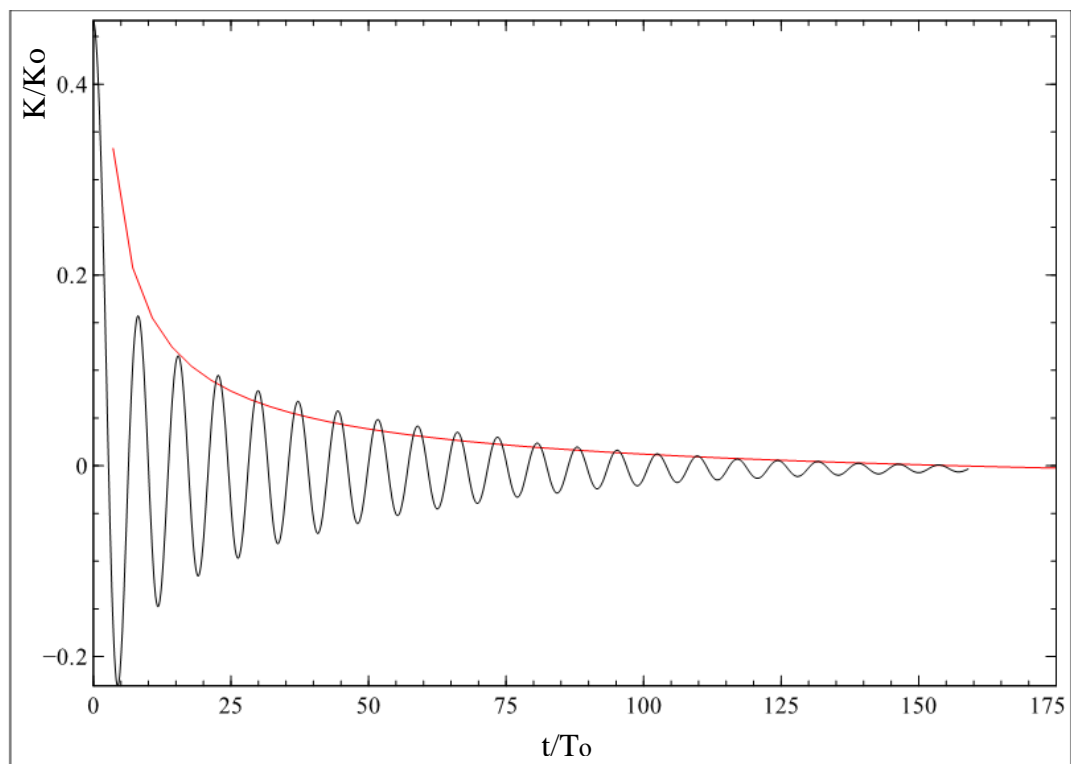


Рис. 2.7. Колебания кинетической энергии в кристалле (черный) и график затухающей функции (красный), при  $\alpha = 0.25$ .



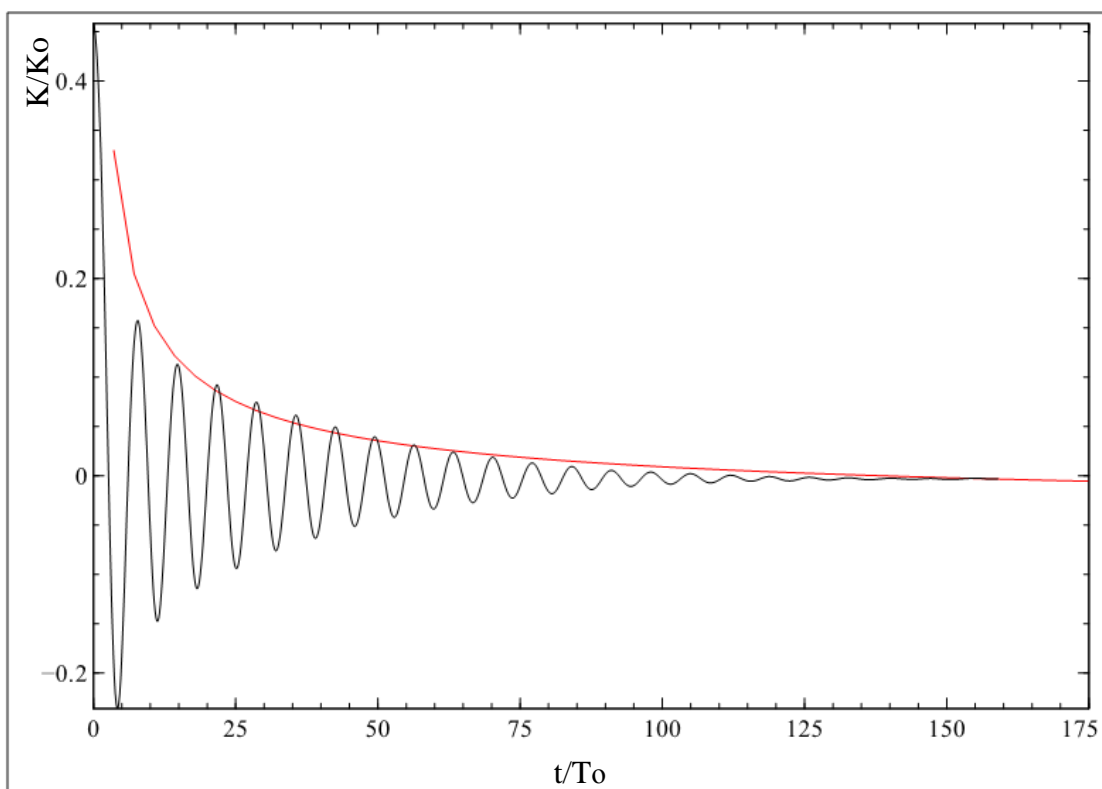


Рис. 2.8. Колебания кинетической энергии в кристалле (черный) и график затухающей функции (красный), при  $\alpha = 0.5$ .

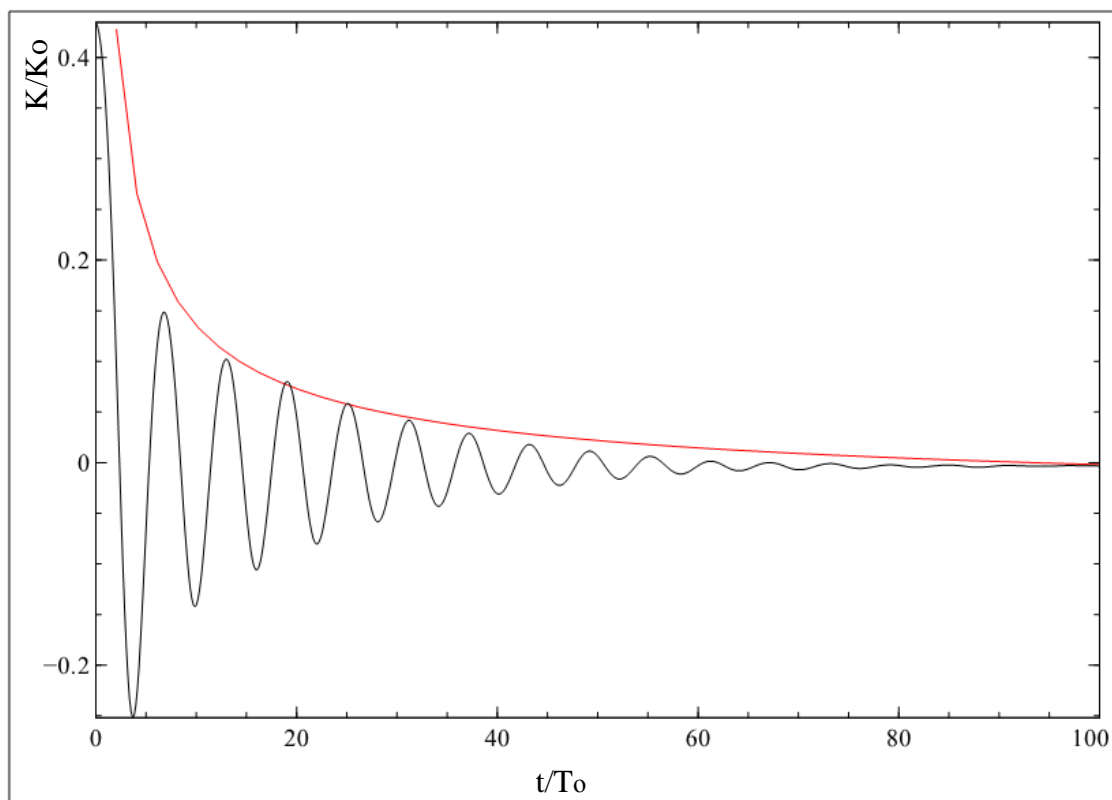


Рис. 2.9. Колебания кинетической энергии в кристалле (черный) и график затухающей функции (красный), при  $\alpha = 1$ .

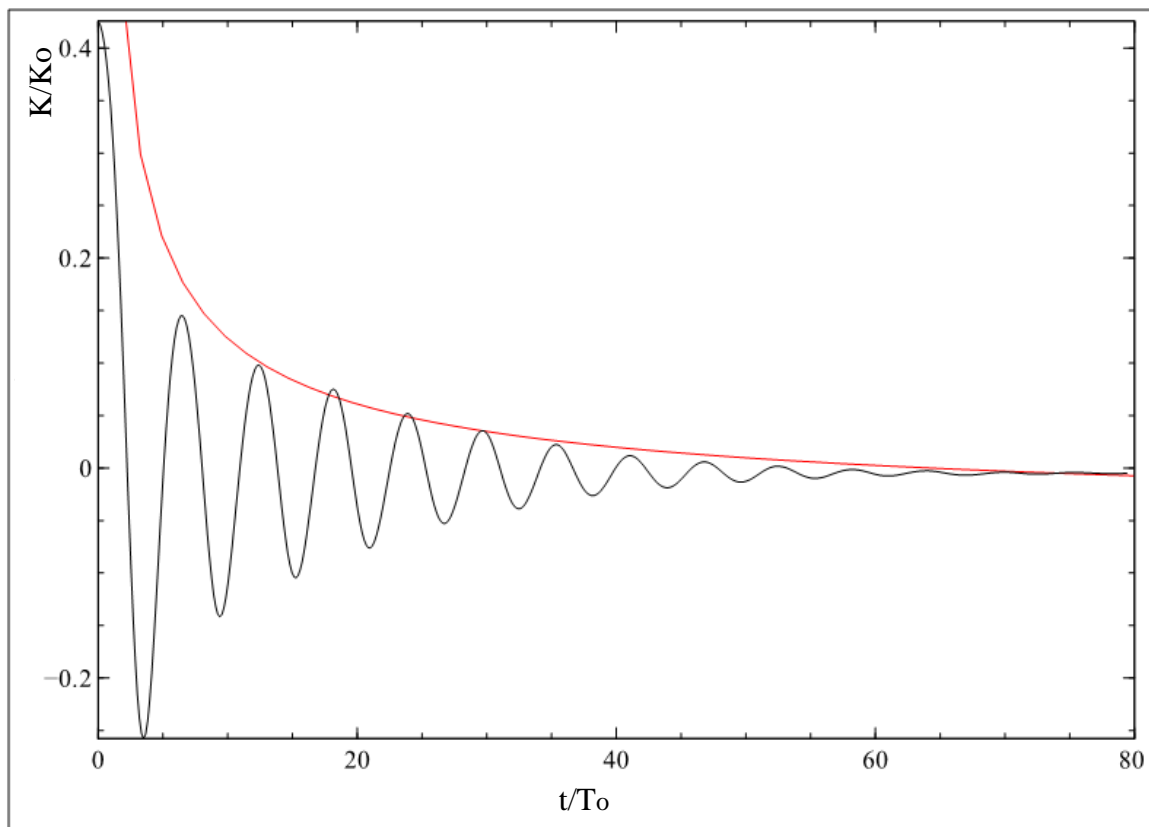


Рис. 2.10. Колебания кинетической энергии в кристалле (черный) и график затухающей функции (красный), при  $\alpha = 1.5$ .

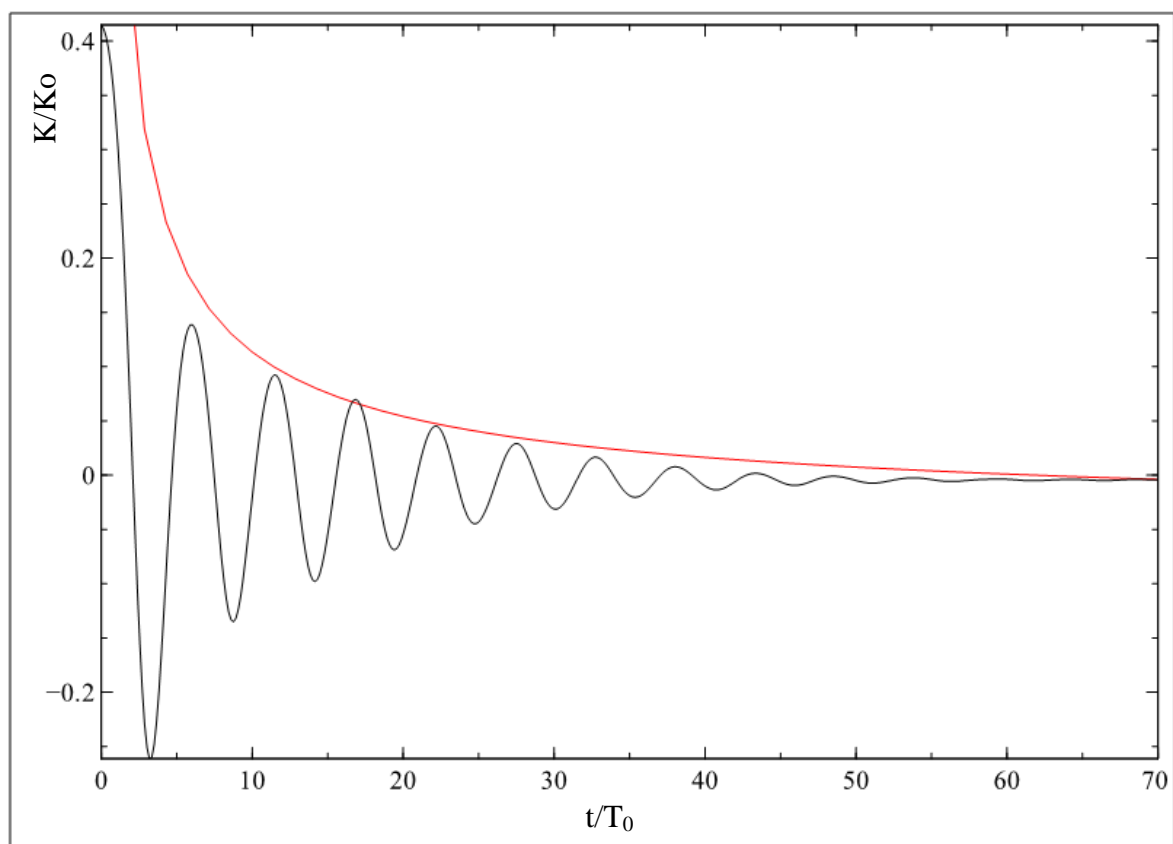


Рис. 2.11. Колебания кинетической энергии в кристалле (черный) и график затухающей функции (красный), при  $\alpha = 2$ .

Из графиков можно сделать вывод, что выбранный вид закона затухания дает хорошее соответствие при малой нелинейности. Однако при большой нелинейности предложенная аппроксимация не дает точного соответствия. Значения коэффициентов  $a$  и  $b$  в законах затухания при различном значении нелинейности  $\alpha$  можно представить в таблице 7:

Таблица 7

$\alpha$	$a$	$b$
0.0	1.0	0.5
0.07	0.73	0.57
0.13	0.64	0.58
0.26	0.59	0.64
0.4	0.56	0.70
0.8	0.52	0.72
1.0	0.50	0.73
1.3	0.48	0.74
1.7	0.46	0.76
2	0.45	0.77

Далее были построены графики по полученным зависимостям коэффициентов в законе затухания от параметра нелинейности. Штриховыми линиями отмечен доверительный интервал для значений коэффициентов.

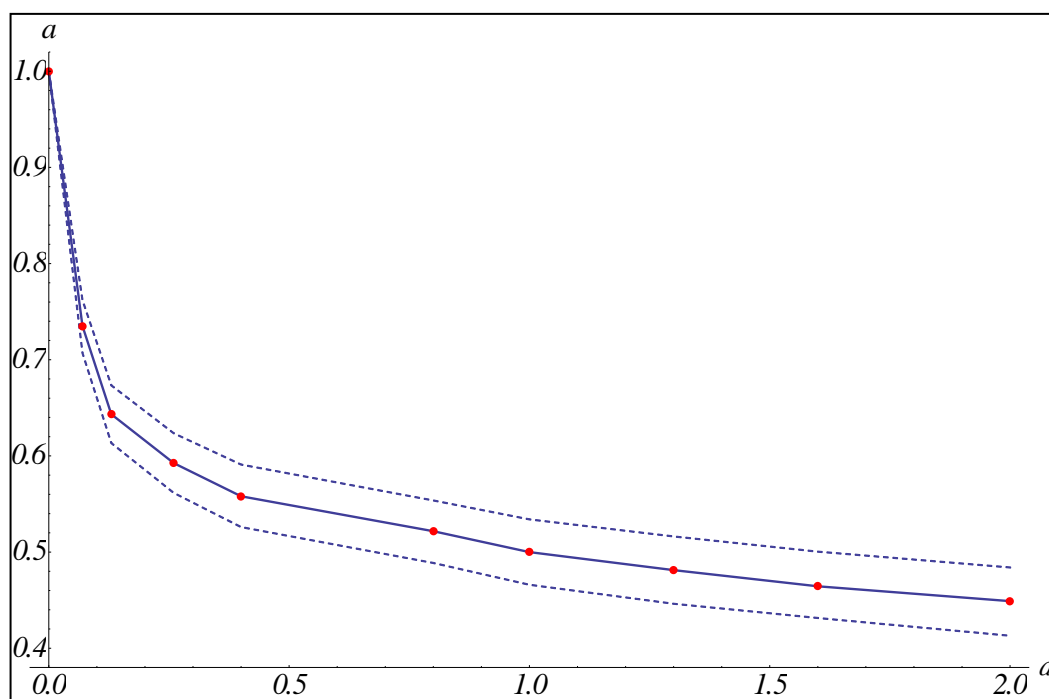


Рис. 2.12. Зависимость коэффициента  $a$  закона затухания от параметра нелинейности  $\alpha$ , при равномерном задании кинетической энергии.

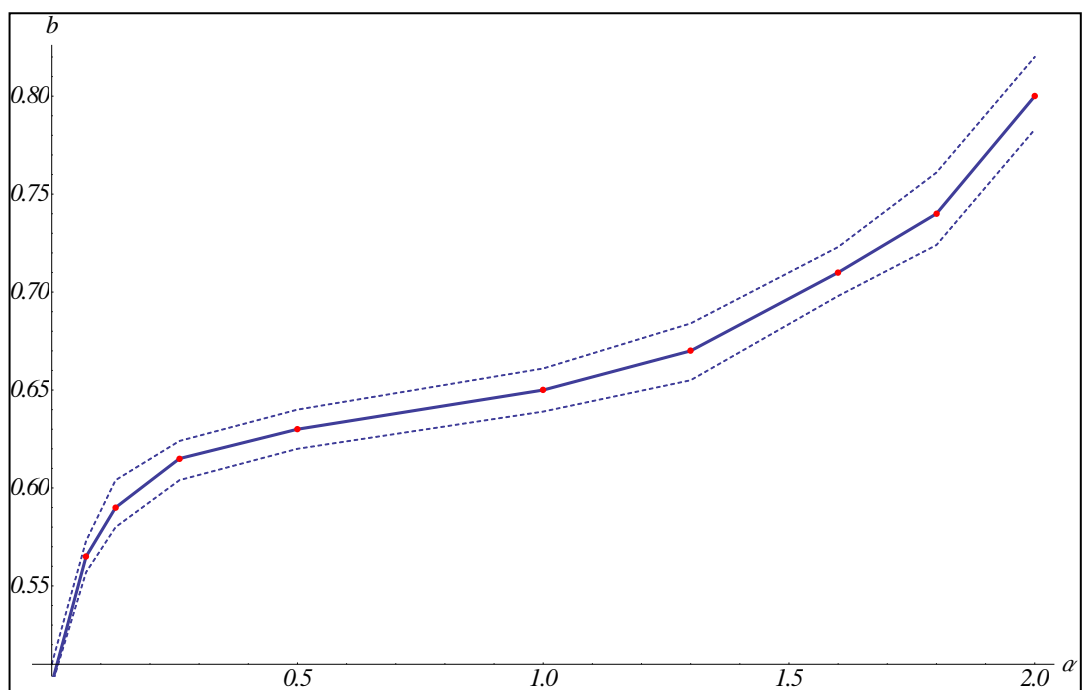


Рис. 2.13. Зависимость коэффициента  $b$  закона затухания от параметра нелинейности  $\alpha$ , при равномерном задании кинетической энергии.

Рассмотрим зависимость параметров в законе затухания кинетической энергии от параметра нелинейности при малой нелинейности:

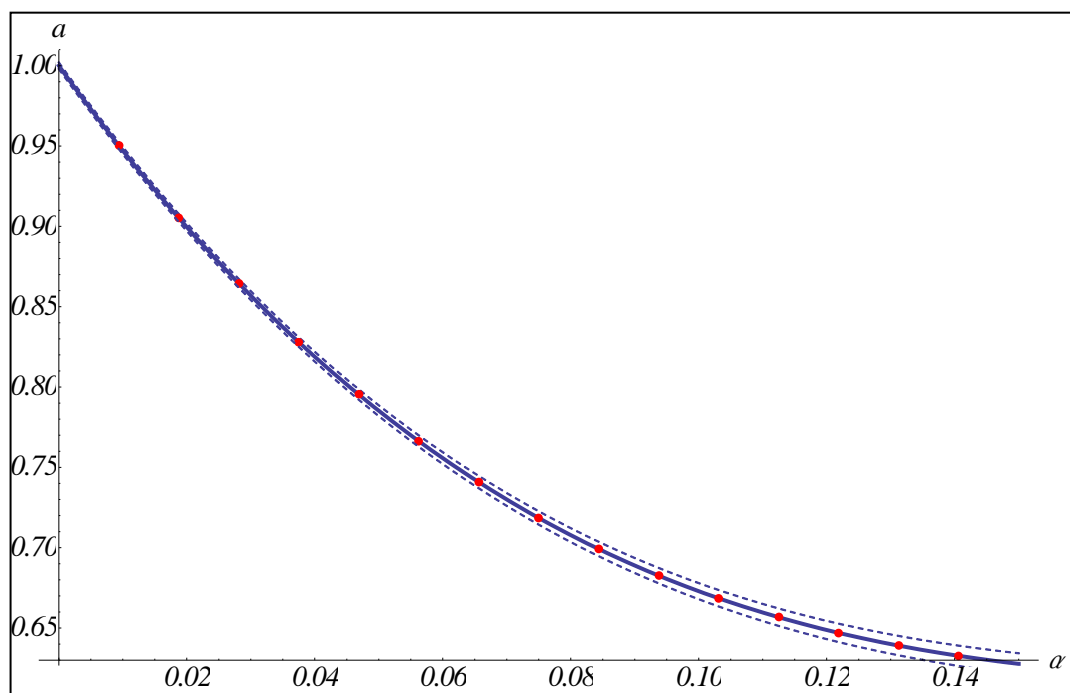


Рис. 2.14. Зависимость коэффициента  $a$  закона затухания от параметра нелинейности  $\alpha$ , при равномерном задании кинетической энергии.

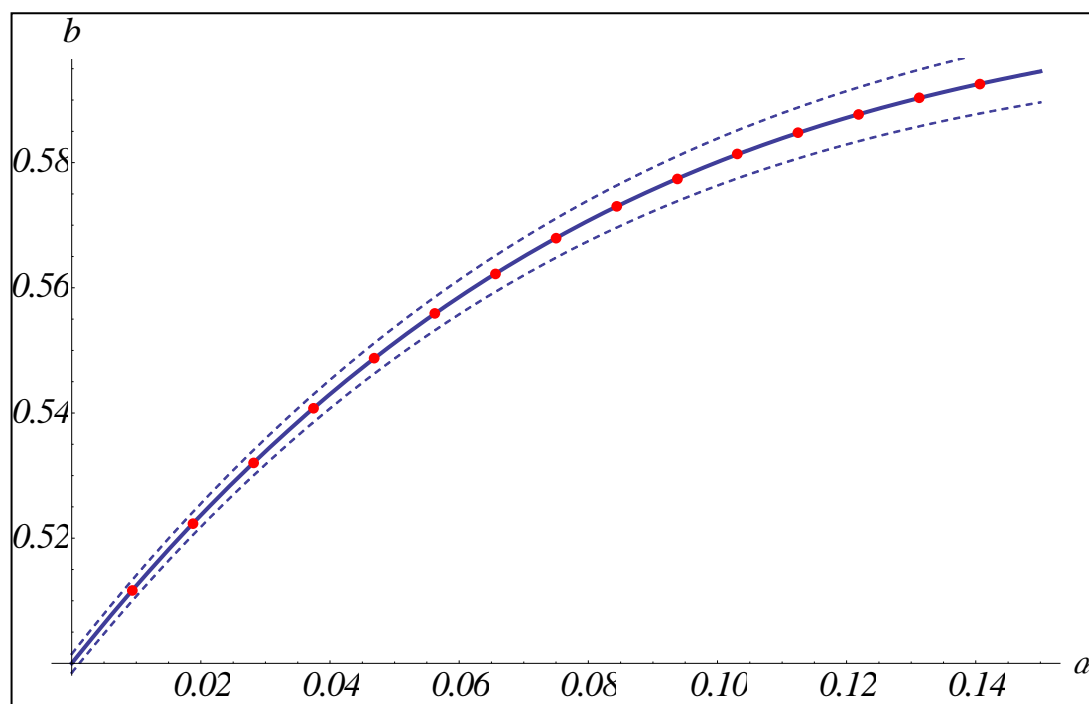


Рис. 2.15. Зависимость коэффициента  $b$  закона затухания от параметра нелинейности  $\alpha$ , при равномерном задании кинетической энергии.

Полученные графики позволяют сделать вывод о том, что зависимости степени  $b$  и коэффициента  $a$  в законе затухания от параметра нелинейности  $\alpha$  является нелинейной. Показано, что закон затухания зависит от параметра нелинейности. Получено, что при увеличении нелинейности скорость затухания колебаний кинетической энергии в кристалле растет.

## 2.3 Колебания кинетической температуры

Как было показано, увеличение нелинейности взаимодействия частиц увеличивает скорость затухания кинетической энергии в одномерном кристалле. Однако, высокочастотные колебания также наблюдается при исследовании кинетической температуры в одномерном кристалле, при задании начального синусоидального распределения температуры по кристаллу. Синусоидально распределение температуры можно представить как случай неравномерного нагрева материала по его длине.

Как уже было отмечено ранее, в этом случае инициализируется колебательный процесс, связанный со стремлением кинетической температуры равномерно распределиться по кристаллу. При этом колебания амплитуды профиля заданной температуры со временем будет затухать.

Данная глава посвящена исследованию того, как будут меняться затухающие колебания амплитуды синусоидального профиля кинетической температуры одномерного кристалла в зависимости от величины введенной нелинейности взаимодействия частиц.

Будем рассматривать следующие начальные условия:

$$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na \quad (2.10)$$

где  $n$  – номер частицы,  $a$  – расстояние между ними,  $\rho_n$  – случайная величина с равномерным распределением, а  $\sigma(x)$  - начальные распределения скоростей частиц в цепочке. Величину  $\sigma(x)$  определим так, чтобы получить начальное распределение температуры по синусоидальному закону:

$$\sigma^2(x) = A \sin(\kappa x) + \bar{T} \quad (2.11)$$

где  $A$  и  $\kappa$  – константы,  $\kappa = \frac{2\pi}{N}$ ,  $N$  – число частиц в цепочке,  $\bar{T}$  – значение средней кинетической температуры в одномерном кристалле.

Далее рассмотрим, как будет меняться распределение температуры по кристаллу при различных значениях параметра нелинейности  $\alpha$ . Исследуем распределение кинетической температуры в одномерном кристалле, движение частиц которого подчиняется (2.1), при начальных условиях (2.10) и (2.11) и периодических граничных условиях (2.2). Параметры моделирования представлены в таблице 8:

Таблица 8

№	Начальные условия	Граничные условия	Число частиц	Шаг интегрирования	Параметр $\alpha$
1	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.0
2	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	10

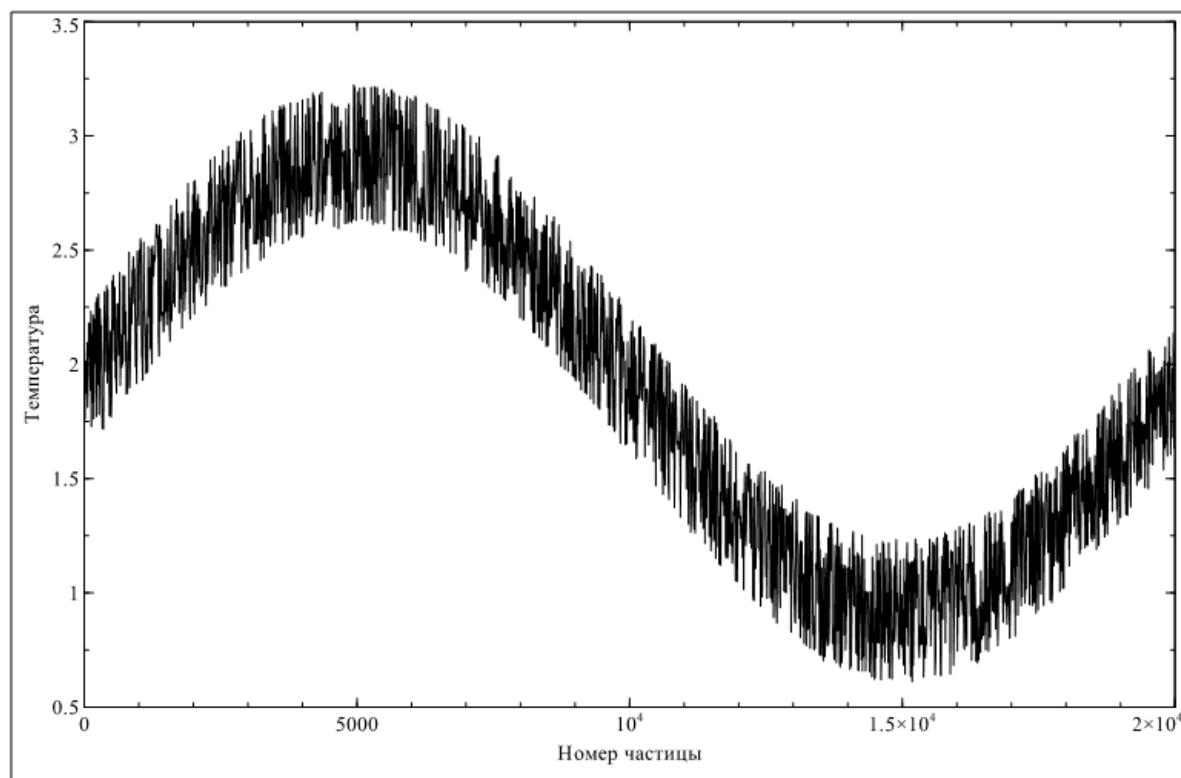


Рис. 2.16. Начальное распределение температуры по кристаллу.

При  $\alpha = 0$ .

Из рисунка 2.16 видно, что распределение начальной температуры по цепочке атомов представляет собой синусоиду с присутствием случайных отклонений. Далее определим распределение температур в кристалле после  $10^2$  периодов колебаний цепочки частиц.

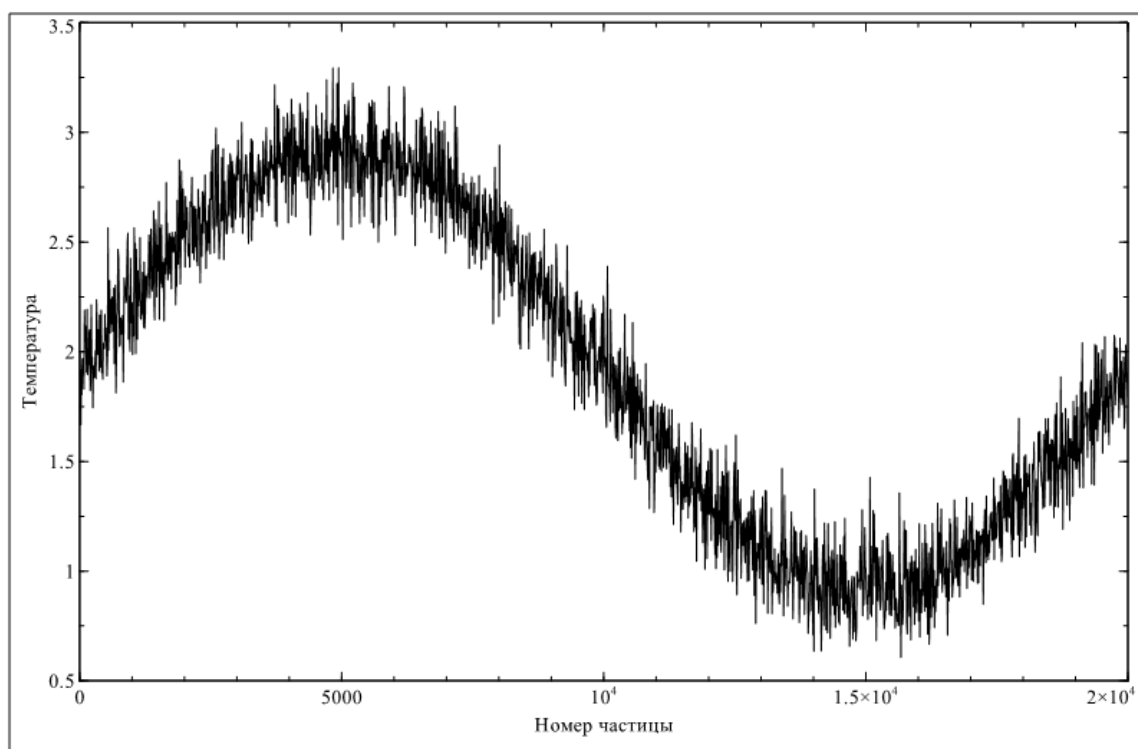


Рис. 2.17. Распределение температуры по кристаллу после  $10^2$  периодов колебаний решетки, при  $\alpha = 0$ .

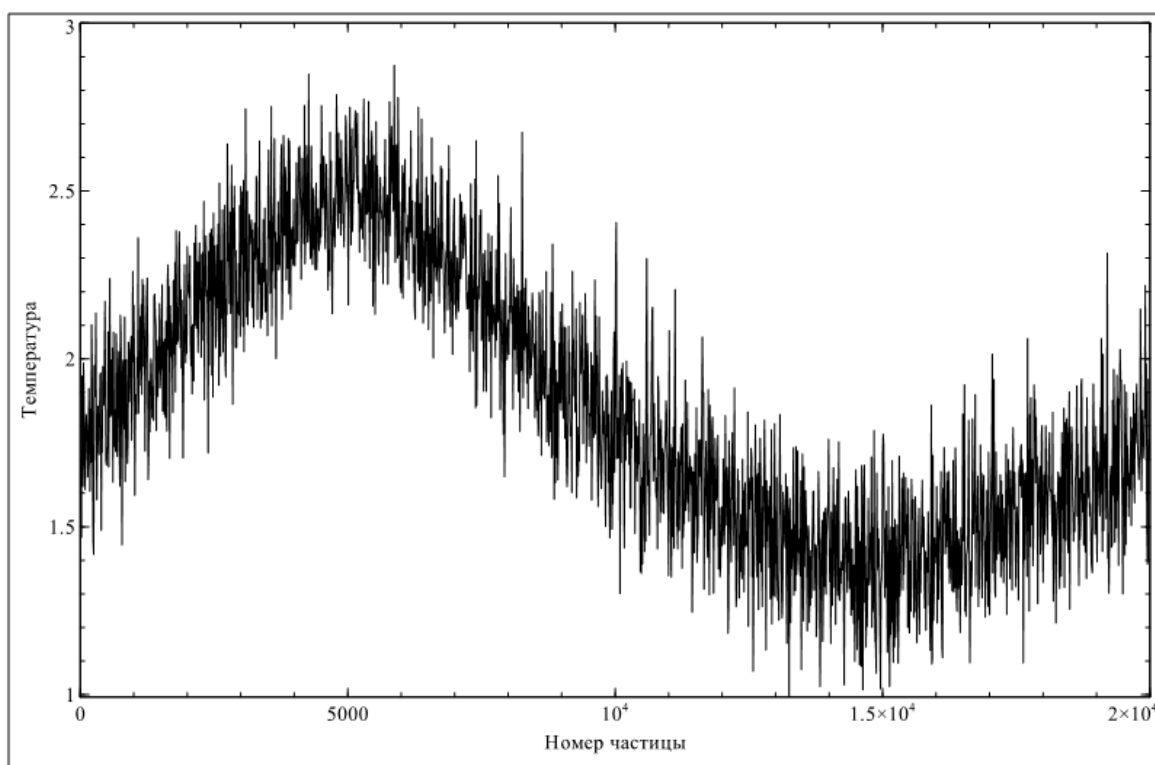


Рис. 2.18. Распределение температуры по кристаллу после  $10^2$  периодов колебаний решетки, при  $\alpha = 10$ .



Анализ полученных результатов позволяет сделать вывод о том, что с течением времени температурный профиль сохраняет синусоидальный характер. Однако нелинейность взаимодействия частиц проявляется в том, что в отдельных областях цепочки возникают заметные перепады температур. Также необходимо заметить, что амплитуда температуры кристалла уменьшается с увеличением параметра нелинейности.

Для определения колебания амплитуды синусоидальной температуры необходимо определить способ ее вычисления. Рассмотрим два способа вычисления амплитуды колебаний температуры. Для первого собою определим среднеквадратичное отклонение температуры от среднего значения. Представим температуру в виде произведения функций, зависящих от координаты и времени:  $T = \theta(t)X(x) + T_0$ . Тогда определив среднеквадратичное отклонение температуры, получим:

$$\int_0^L (T - T_0)^2 dx = \theta^2(t) \int_0^L X^2(x) dx, \quad J = \int_0^L X^2(x) dx, \quad (2.12)$$

где  $L$  - длина цепочки. Следовательно, для  $\theta$  имеем:

$$\theta(t) = \sqrt{\frac{1}{J} \left( \int_0^L (T - T_0)^2 dx \right)} \quad (2.13)$$

Полученный интеграл легко вычисляется численно при реализации модели одномерного кристалла с нелинейным взаимодействием частиц.

Также будем исследовать амплитуду колебаний кинетической температуры через разложение кинетической температуры одномерной цепочки в ряд Фурье:

$$T(t) = \frac{2}{N} \sum_{n=1}^N T_n(t) \sin\left(\frac{2\pi n}{N}\right), \quad n = \overline{1, N} \quad (2.14)$$

где  $N$  – число точек в которых вычислена температура. Вычисление амплитуды колебаний температуры по 1.7 более приемлемо, так как позволяет ускорить вычисление, кроме того позволяет получать более точно значение амплитуды при меньшем числе частиц.

Далее будем исследовать колебания амплитуды кинетической температуры кристалла, которую будем определять по (2.12), в зависимости от значения параметра нелинейности  $\alpha$ . Параметры моделирования представлены в таблице 9.

Таблица 9

№	Начальные условия	Граничные условия	Число частиц	Шаг интегрирования	Параметр $\alpha$
1	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.0

2	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.5
3	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	1
4	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	2

Далее амплитуда будет обезразмериваться по начальной амплитуде  $A$ , а время расчётов по отношению к периоду колебаний частицы вблизи положения равновесия.

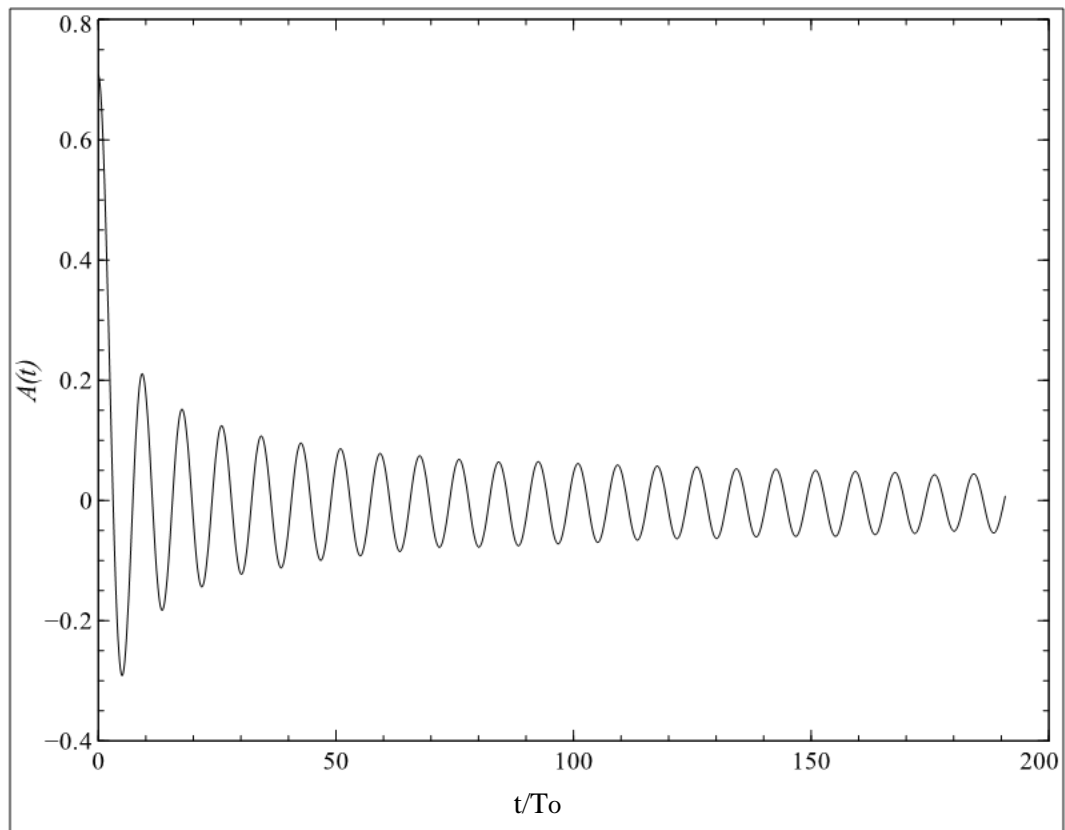


Рис. 2.19. Колебания амплитуды синусоидального профиля температуры в одномерном кристалле, при  $\alpha = 0.0$ .

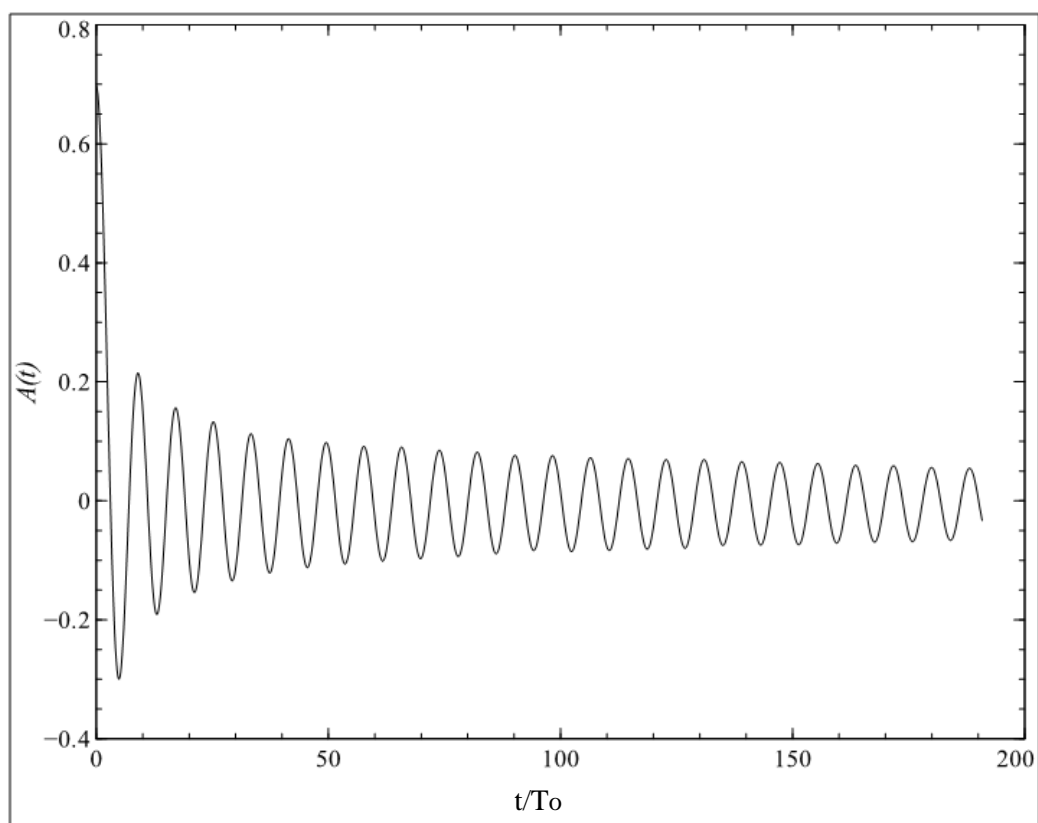


Рис. 2.20. Колебания амплитуды синусоидального профиля температуры в одномерном кристалле, при  $\alpha = 0.5$ .

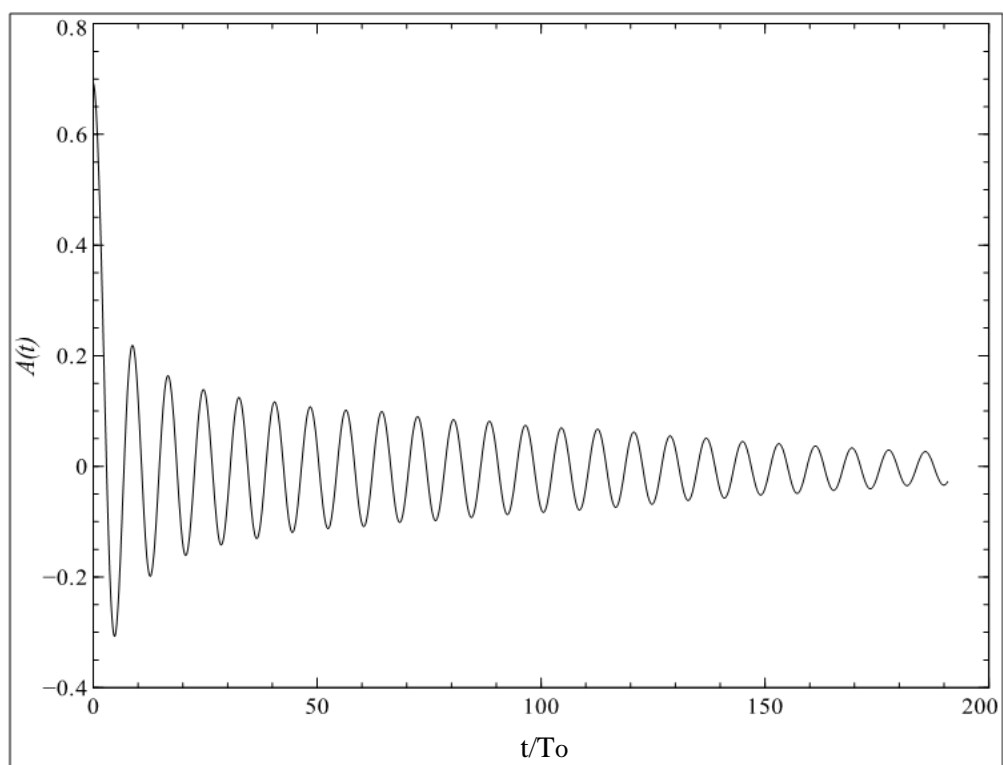


Рис. 2.21. Колебания амплитуды синусоидального профиля температуры в одномерном кристалле, при  $\alpha = 1.0$ .

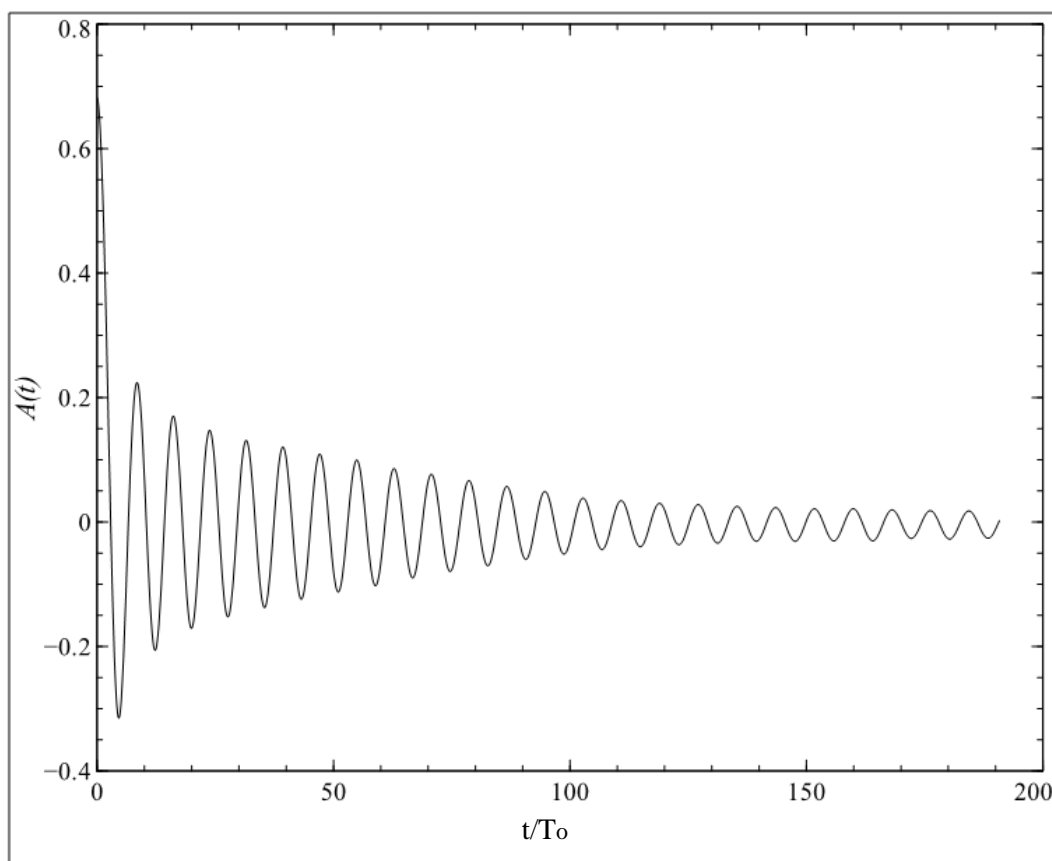


Рис. 2.22. Колебания амплитуды синусоидального профиля температуры  
в одномерном кристалле, при  $\alpha = 2.0$ .

Из полученных графиков можно сделать вывод о том, что скорость затухания колебаний амплитуды температуры увеличивается при увеличении коэффициента нелинейности  $\alpha$ . Но при этом стоит отметить, что скорость затухания колебаний амплитуды меньше, чем скорость затухания колебаний кинетической энергии, в случае задания случайных скоростей в кристалле.

Так как колебания амплитуды с увеличением нелинейности затухают быстрее, то необходимо исследовать закон затухания температуры в зависимости от параметра нелинейности. Для этого было приняты предположения о виде законе затухания (2.7) из раздела 2.2. Также известно, что для линейного взаимодействия между частицами колебания амплитуды удовлетворяют функции Бесселя первого рода и затухают со скоростью  $1/\sqrt{t}$ .

Параметры численных экспериментов для определения законов затухания амплитуды представлены в таблице 10.

Таблица 10

№	Начальные условия	Граничные условия	Число частиц	Шаг интегрирования	Параметр $\alpha$
1	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.0
2	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.07
3	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.25
4	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.5
5	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	0.8
6	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	1.0
7	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	1.3
8	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	1.6
9	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	2
10	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	2.5
11	$U_n = 0, \dot{U}_n = \rho_n + \sigma(x), x = na,$ $0 \leq n \leq N$	$u_{k+N} = u_k$	$2 \cdot 10^6$	$0.01T_0$	3

Ниже представлены затухающие колебания амплитуды синусоидального профиля температуры и законы затухания для них:

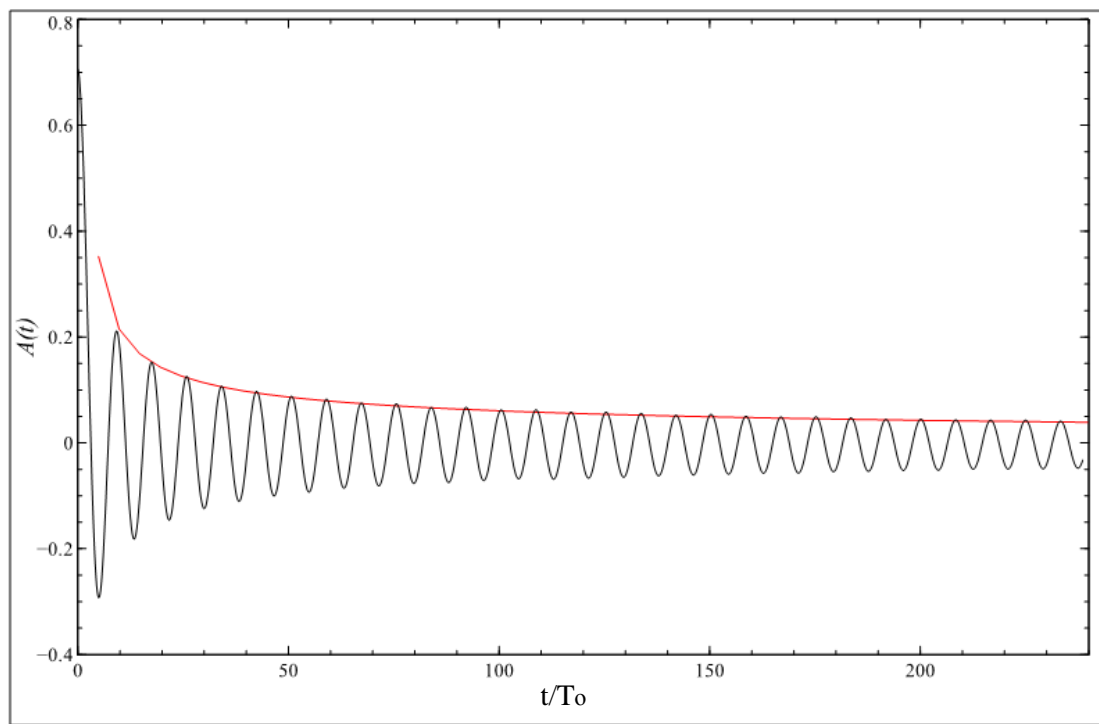


Рис. 2.23. Колебания амплитуды синусоидального профиля температуры (черный) и график затухающей функции (красный), при  $\alpha = 0.0$ .

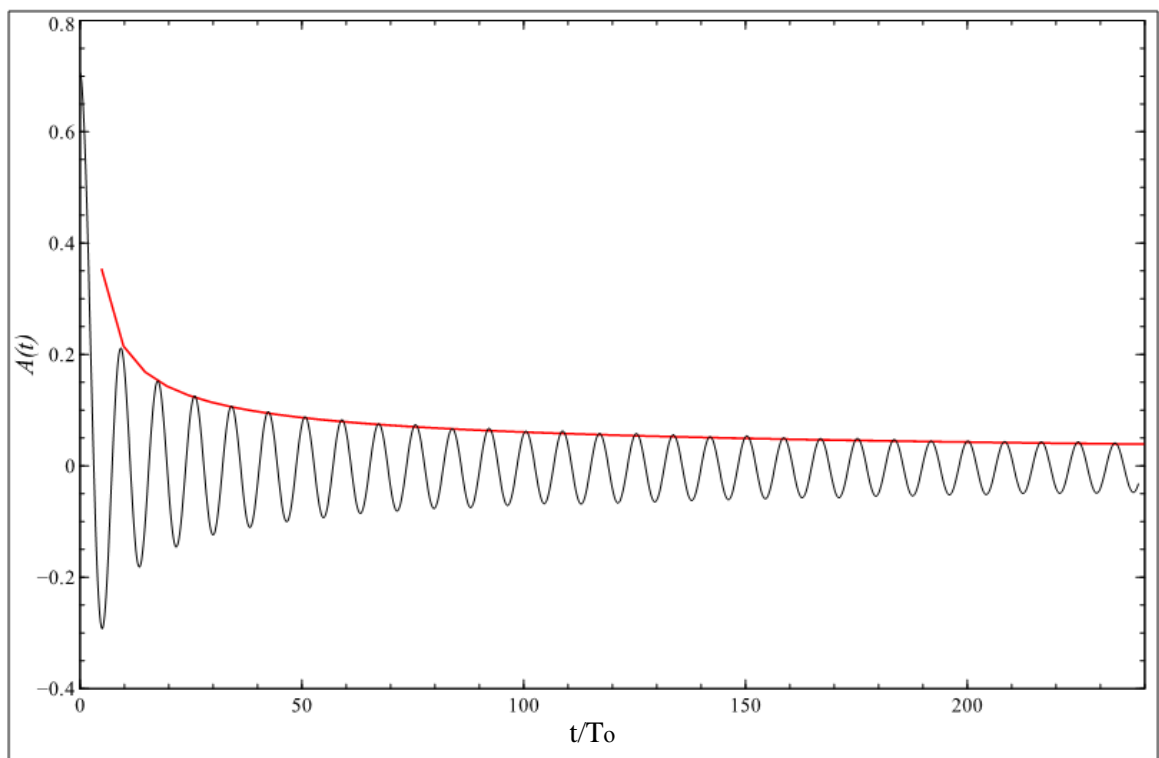


Рис. 2.24. Колебания амплитуды синусоидального профиля температуры (черный) и график затухающей функции (красный), при  $\alpha = 0.07$ .

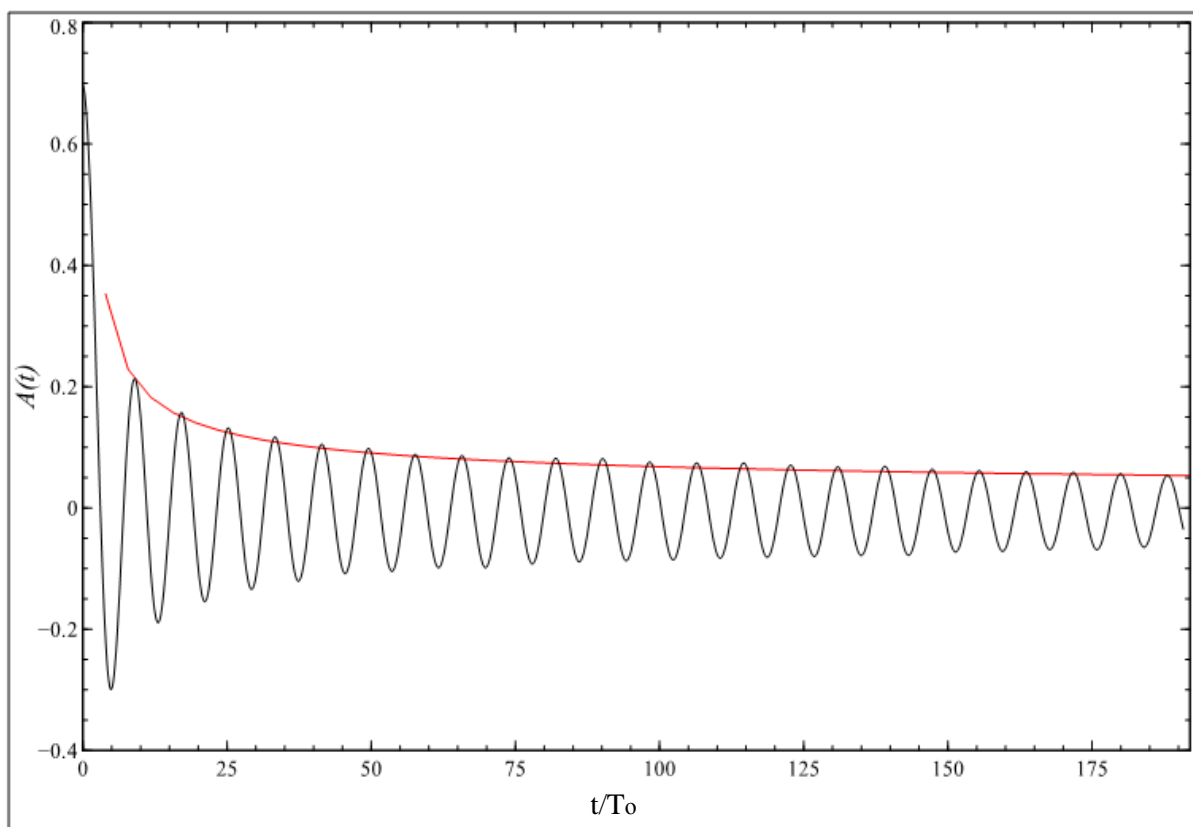


Рис. 2.25. Колебания амплитуды синусоидального профиля температуры (черный) и график затухающей функции (красный), при  $\alpha = 0.5$ .

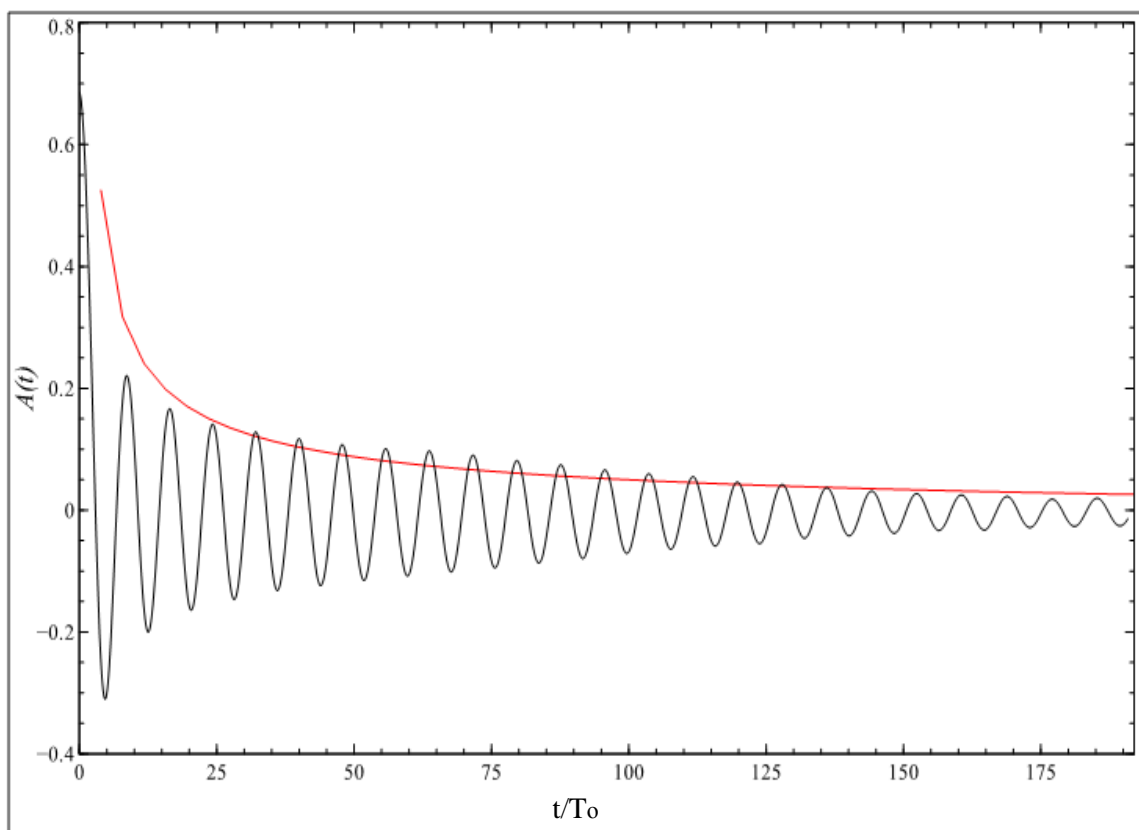


Рис. 2.26. Колебания амплитуды синусоидального профиля температуры (черный) и график затухающей функции (красный), при  $\alpha = 1.0$ .

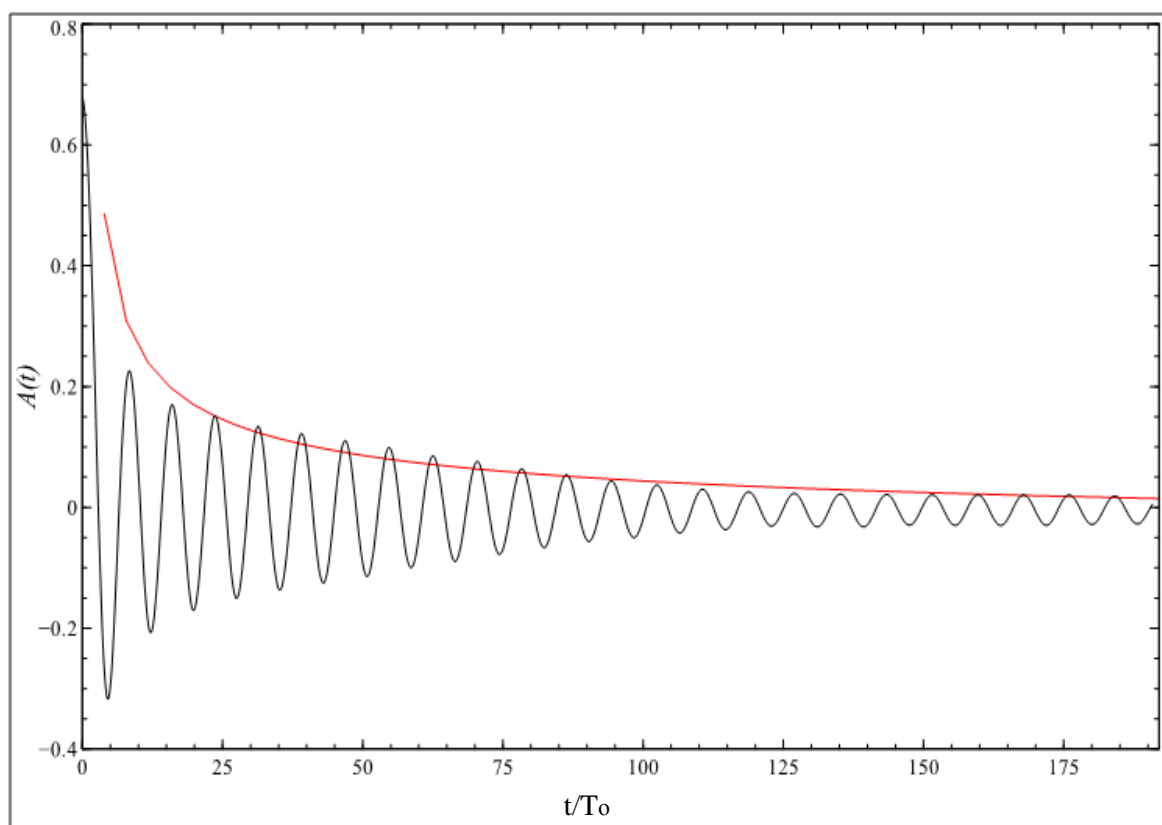


Рис. 2.27. Колебания амплитуды синусоидального профиля температуры (черный) и график затухающей функции (красный), при  $\alpha = 2.0$ .

Таким образом, были получены параметры аппроксимации закона затухания для различного значения параметра нелинейности. Из графиков можно сделать вывод, что выбранный вид закона затухания дает хорошее соответствие при малой нелинейности. Однако при большой нелинейности предложенная аппроксимация не дает точного соответствия. Значения коэффициентов  $a$  и  $b$  для закона затухания для различного значения нелинейности  $\alpha$  можно представить в таблице 11:

Таблица 11

$\alpha$	$a$	$b$
0.0	1.0	0.5
0.07	0.88	0.62
0.25	0.80	0.64
0.5	0.74	0.65
1	0.67	0.66
1.3	0.63	0.68
1.6	0.59	0.70
2.0	0.54	0.71



2.5	0.50	0.73
3.0	0.45	0.75

Далее были построены графики по полученным зависимостям коэффициентов в законе затухания от параметра нелинейности  $\alpha$ . Штриховыми линиями отмечен доверительный интервал для значений коэффициентов.

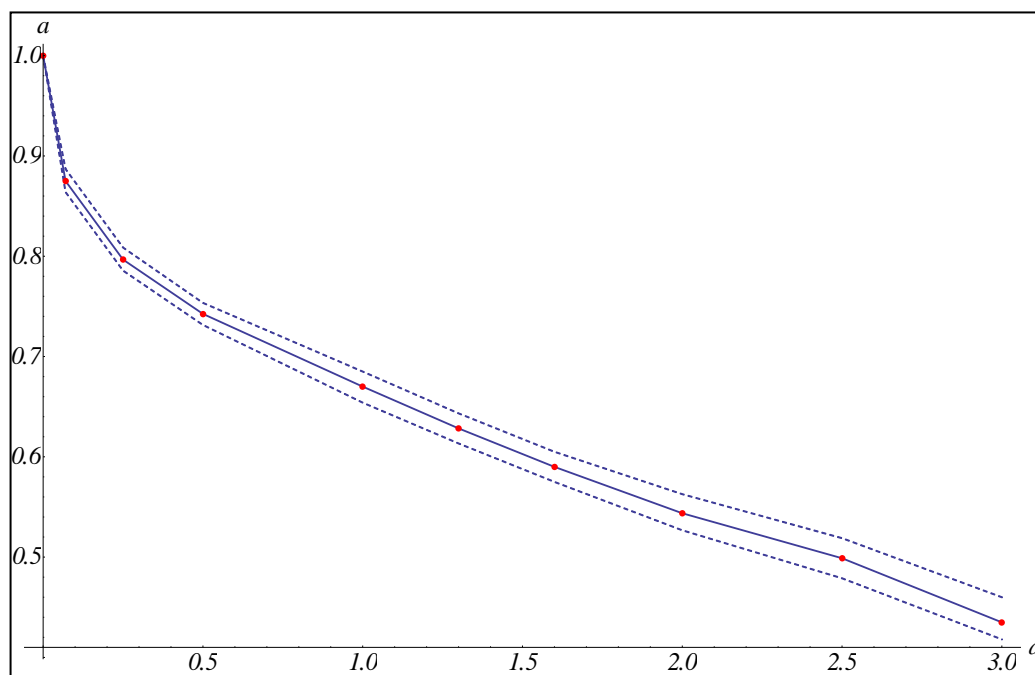


Рис. 2.28. Зависимость коэффициента  $a$  закона затухания амплитуды от параметра нелинейности  $\alpha$ , при синусоидальном задании температуры.

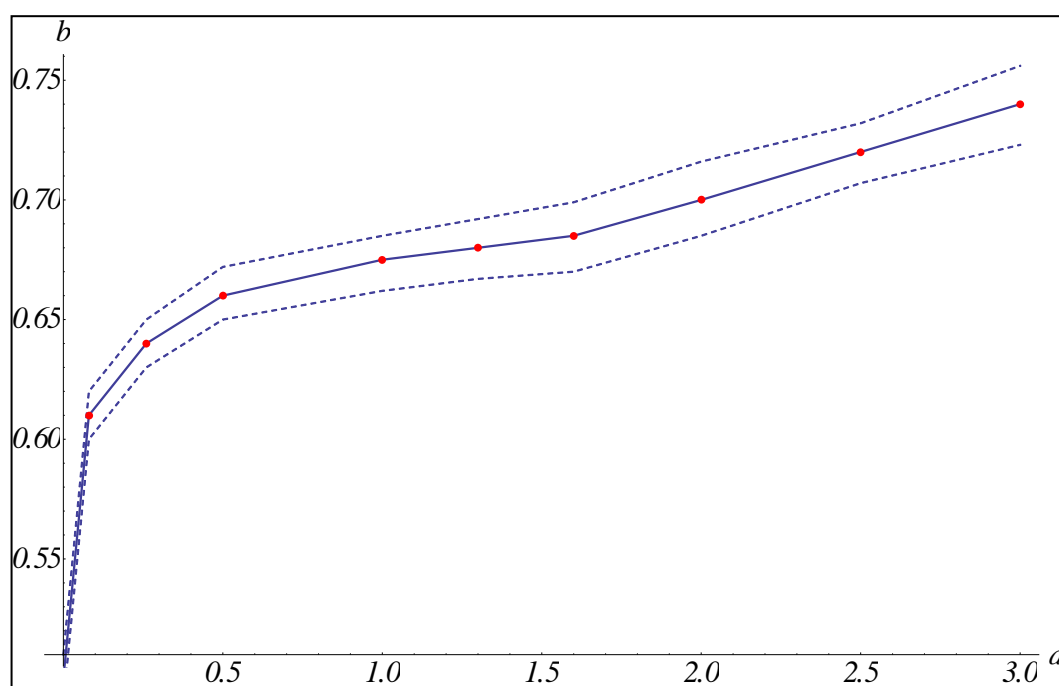


Рис. 2.29. Зависимость коэффициента  $b$  закона затухания амплитуды от параметра нелинейности  $\alpha$ , при синусоидальном задании температуры.

Рассмотрим зависимость параметров в законе затухания амплитуды синусоидального профиля температуры от параметра нелинейности при малой нелинейности:

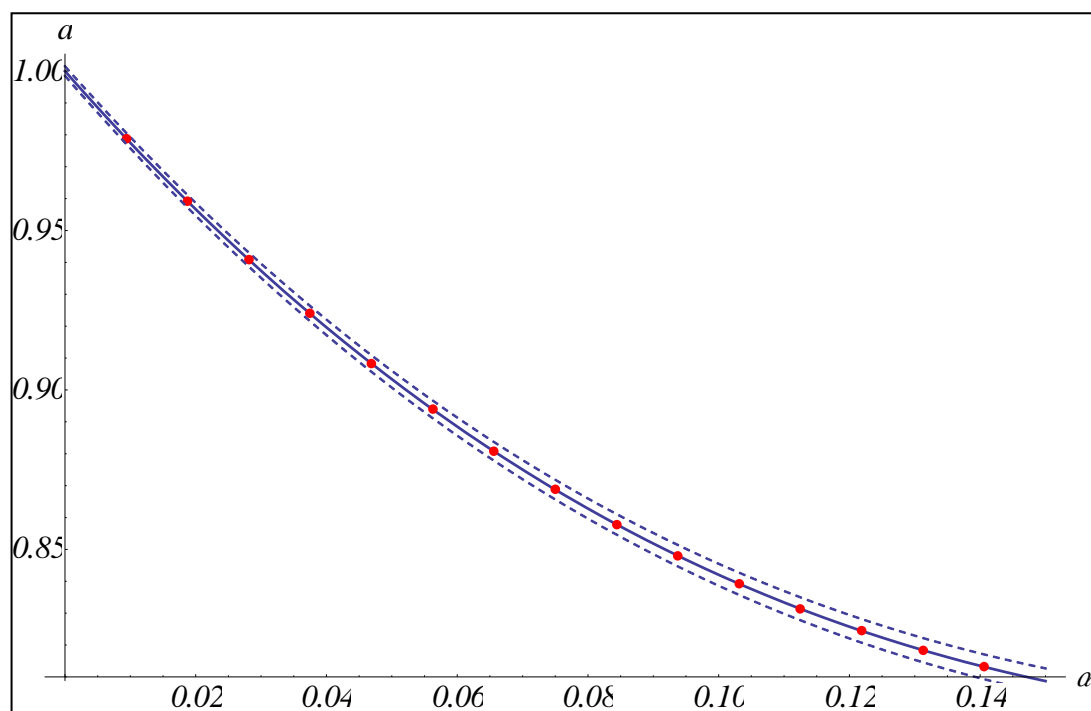


Рис. 2.30. Зависимость коэффициента  $a$  закона затухания амплитуды от параметра нелинейности  $\alpha$ , при синусоидальном задании температуры.

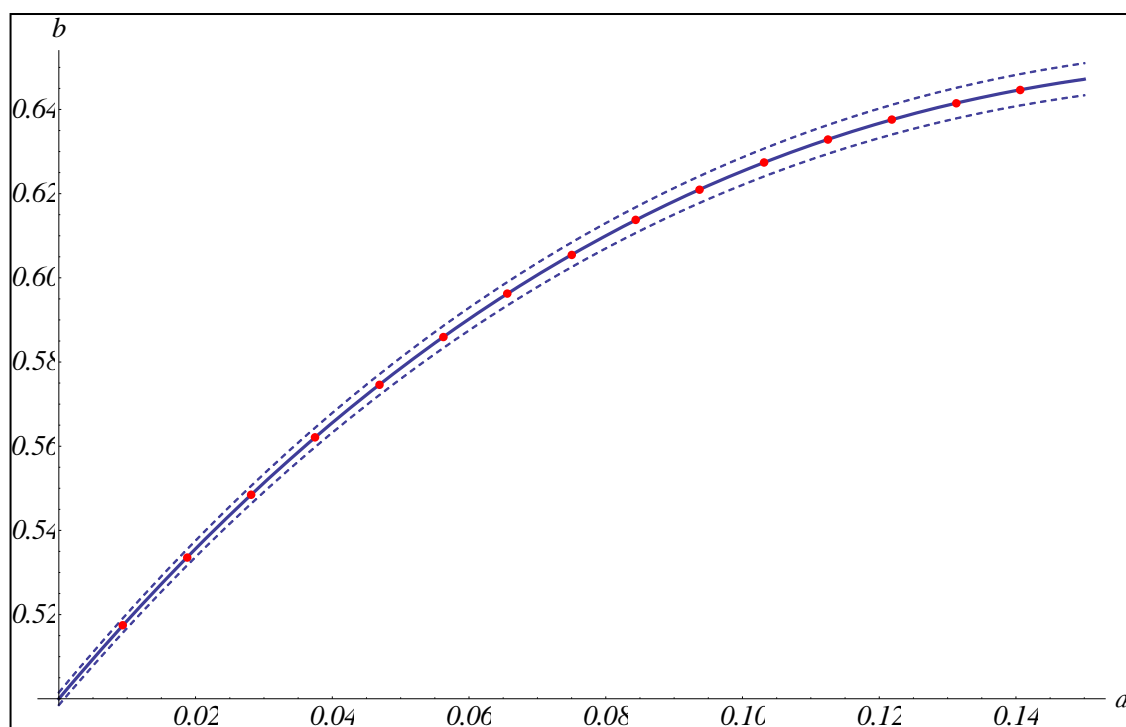


Рис. 2.31. Зависимость коэффициента  $b$  закона затухания амплитуды от параметра нелинейности  $\alpha$ , при синусоидальном задании температуры.

Таким образом, можно сопоставить графики зависимостей коэффициентов в законе затухания для двух начальных условий: равномерного задания температуры в кристалле

(раздел 2.2, графики 2.12 и 2.13) и синусоидальное задание температуры (графики 2.28 и 2.29).

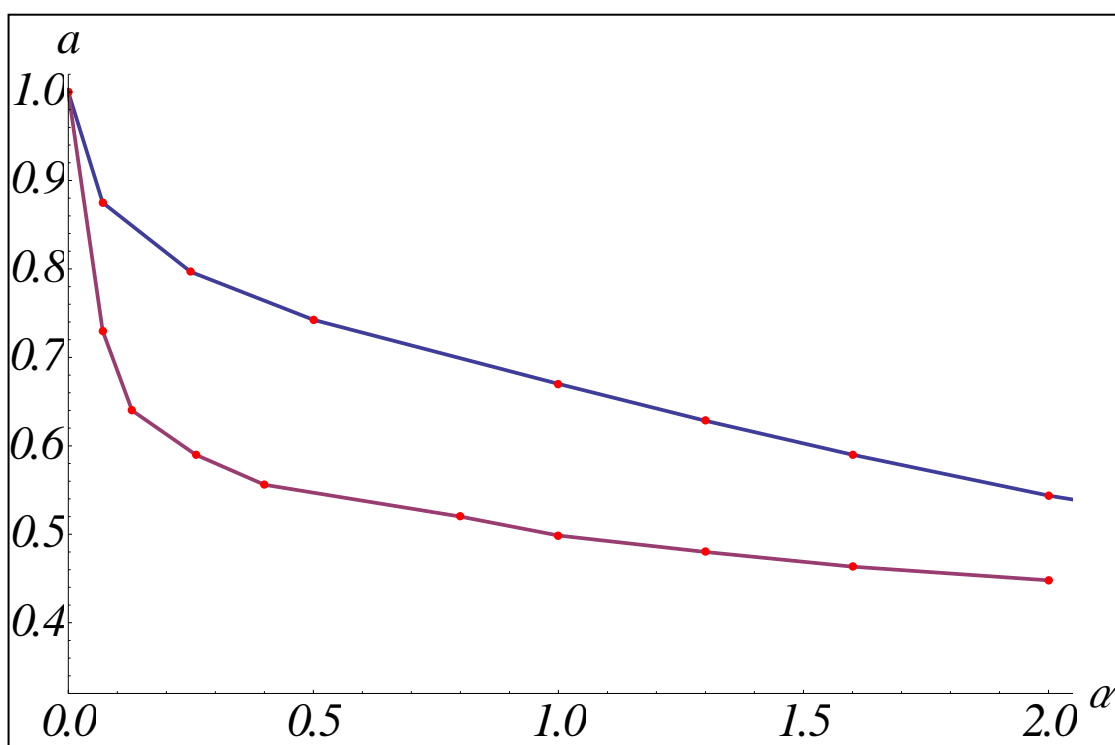


Рис. 2.32. Зависимость коэффициента  $a$  закона затухания амплитуды от параметра нелинейности  $\alpha$ , при равномерном задании температуры (синим - синусоидальная, красным - равномерная температура).

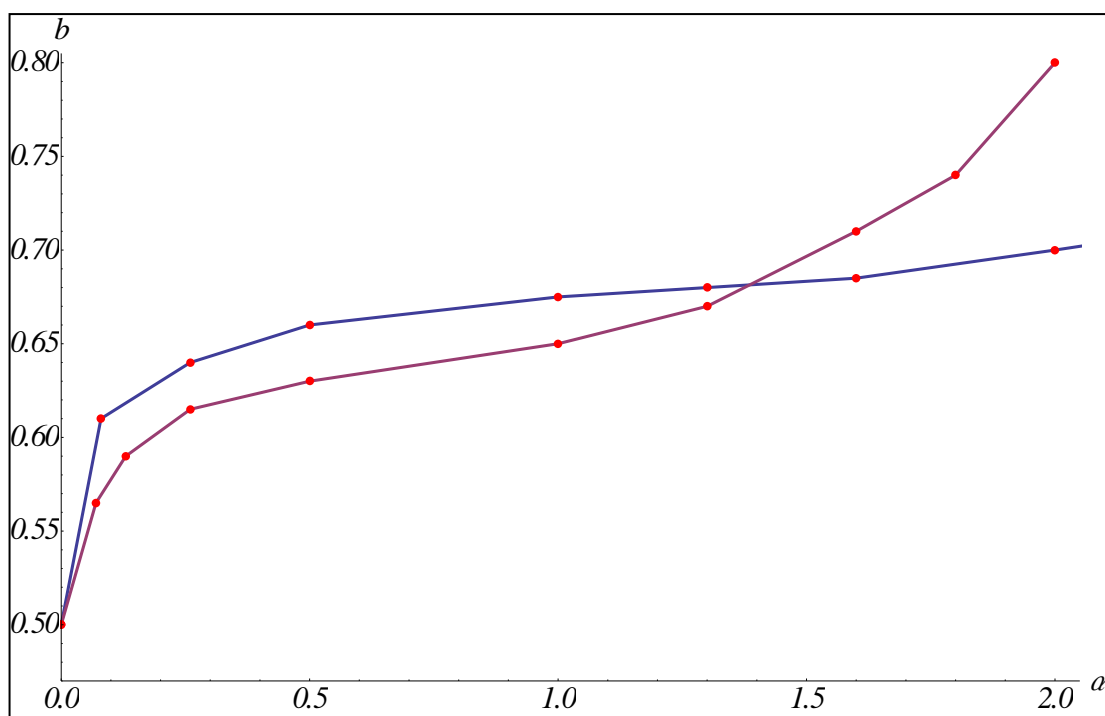


Рис. 2.33. Зависимость коэффициента  $b$  закона затухания амплитуды от параметра нелинейности  $\alpha$ , при равномерном задании температуры (синим - синусоидальная, красным - равномерная температура).

Рассмотрим зависимость параметров в законах затухания от параметра нелинейности при малой нелинейности для двух рассмотренных постановок задач:

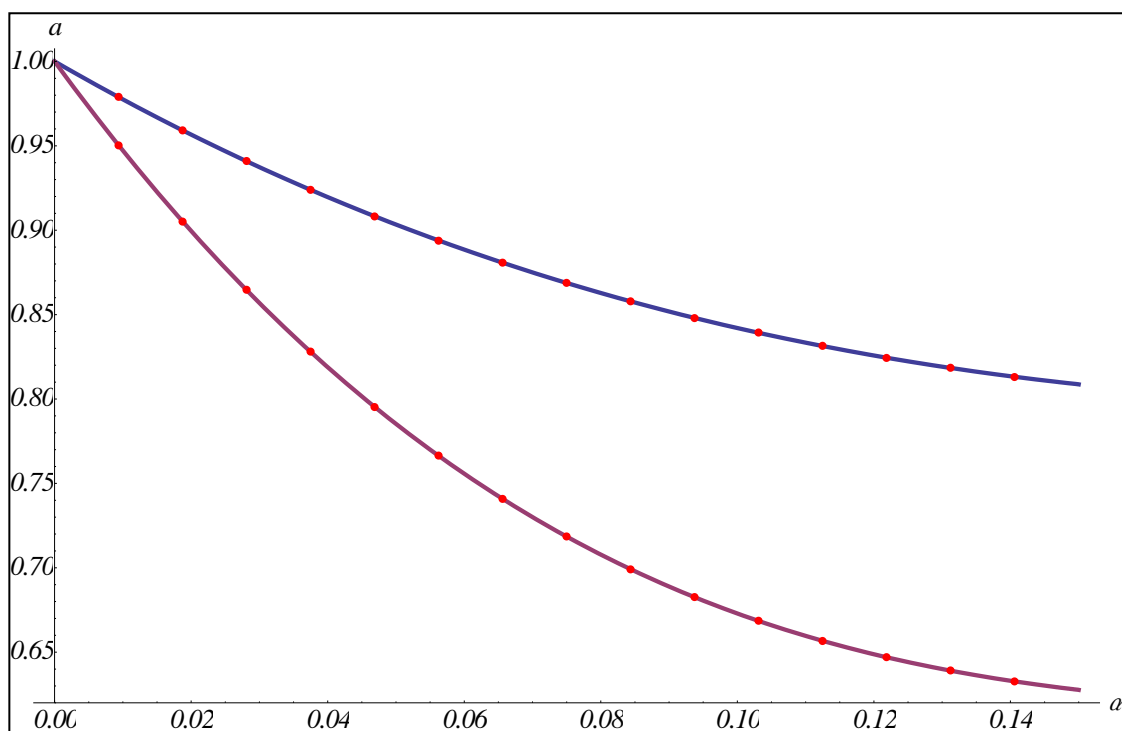


Рис. 2.34. Зависимость коэффициента  $a$  закона затухания амплитуды от параметра нелинейности  $\alpha$ , при равномерном задании температуры (синим - синусоидальная, красным - равномерная температура).

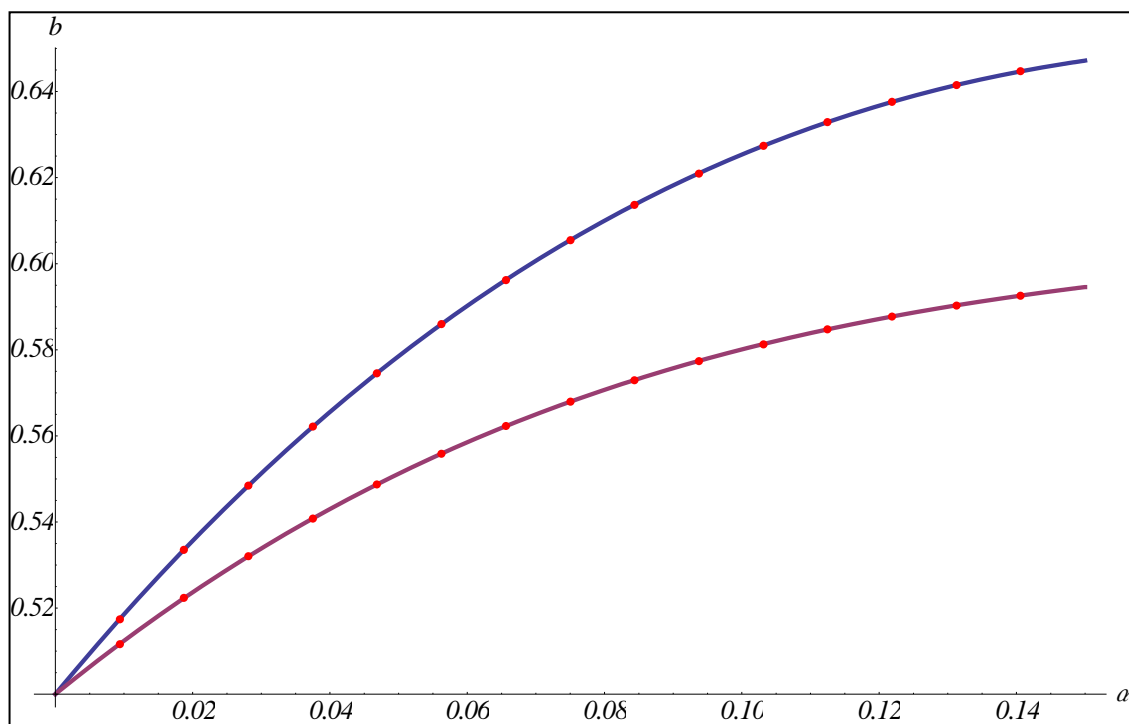


Рис. 2.35. Зависимость коэффициента  $b$  закона затухания амплитуды от параметра нелинейности  $\alpha$ , при равномерном задании температуры (синим - синусоидальная, красным - равномерная температура).

Полученные результаты показывают, что показатели степени для закона затухания (*b*) не только имеют схожий вид зависимости от параметра нелинейности, но близкие значения. Коэффициент *a* для рассмотренных двух случаев имеет линейную зависимость от параметра  $\alpha$ , при этом значения коэффициента отличаются друг от друга на 30%. В случае отсутствия нелинейности закон затухания для колебания кинетической энергии и амплитуды синусоидального профиля температуры идентичен. Таким образом, можно заметить различие в законах затухания для двух рассмотренных начальных условий.

### 3 Заключение

В работе были проведены исследования колебаний кинетической энергии и кинетической температуры в одномерном кристалле. В первой главе, в качестве тестовой задачи были рассмотрены две постановки задач (детерминированная и стохастическая) для одномерного кристалла с линейным взаимодействием частиц. Показано, что в двух постановках изменение исследуемых величин (кинетическая энергия и перемещение смещенной частицы) носит колебательный характер. Установлено, что колебания исследуемых величин совпадает с колебанием функции Бесселя первого рода [10].

Во второй главе работы исследован одномерный кристалл с нелинейным взаимодействием частиц (кубическая нелинейность в выражении для взаимодействия силы). Для проведения исследования введен безразмерный параметр  $\alpha$ , характеризующий отношение влияния линейного и нелинейного взаимодействия между частицами одномерного кристалла. Рассмотрены две постановки начальных условий: равномерное задание температуры и синусоидальный профиль температуры в одномерном кристалле.

Также проведено сравнение двух методов осреднения. Выявлен эффект отражения, проявляющийся в нарушении характера колебаний.

Для первой постановки задачи была исследована кинетическая энергия кристалла и ее зависимость от параметра нелинейности  $\alpha$ . Получено, что зависимость кинетической энергии одномерного кристалла от времени носит колебательный характер и с увеличением нелинейности скорость затухания колебаний увеличивается. Предложена аппроксимация закона затухания кинетической энергии кристалла для различного значения параметра нелинейности  $\alpha$ . Предложенная аппроксимация дает хорошее соответствие для малой нелинейности. При большой нелинейности наблюдается расхождение графика колебаний энергии и закона затухания.

Хорошее соответствие предложенной аппроксимации при малой нелинейности для случая равномерного задания температуры может свидетельствовать, что аналитическое решение не нарушается при введении малой нелинейности. Таким образом, можно сделать вывод об устойчивости аналитического решения, полученного в [10].

Для второй постановки задачи (синусоидальной профиль температуры кристалла) была исследована зависимость кинетической температуры кристалла от параметра нелинейности  $\alpha$ . Получено, что зависимость амплитуды кинетической температуры кристалла от времени также носит колебательный характер и с увеличением нелинейности скорость затухания колебаний увеличивается. Предложена аппроксимация закона затухания амплитуды температурного профиля кристалла для различного значения параметра нелинейно-

сти  $\alpha$ . Предложенная аппроксимация дает хорошее соответствие для малой нелинейности. При большой нелинейности также наблюдается расхождение графика колебаний амплитуды и закона затухания.

Сопоставлены графики зависимостей параметров закона затухания от параметра нелинейности для двух начальных условий (равномерная температура и синусоидальный профиль температуры). Показано различие в законах затухания для двух рассмотренных начальных условий.

## 4 Приложение. Охрана труда

Основные нагрузки при выполнении данной работы: интеллектуальные, эмоциональные, зрительные, и, в меньшей степени, слуховые. Вся работа проводилась за персональным компьютером и за письменным столом, натурные эксперименты отсутствовали. Организация работы должна проводиться в этом случае согласно СНИП 2,2,2/2,41340-03, По природе действия вредные и опасные факторы подразделяются на следующие группы:

- физические факторы: температура, влажность и подвижность воздуха, неионизирующие электромагнитные излучения (ультрафиолетовое, видимое, инфракрасное, лазерное, микроволновое, радиочастотное, низкочастотное), статическое, электрические и магнитные поля, ионизирующие излучения, производственный шум, вибрация (локальная, общая), ультразвук, аэрозоли преимущественно фиброгенного действия (пыли), освещенность (отсутствие естественного освещения, недостаточная освещенность, повышенная ультрафиолетовая радиация);

- химические факторы, в том числе некоторые вещества биологической природы (антибиотики, витамины, гормоны, ферменты);

- биологические факторы: патогенные микроорганизмы, микроорганизмы продуценты, препараты, содержащие живые клетки и споры микроорганизмов, белковые препараты;

- факторы трудового процесса, характеризующие тяжесть физического труда: физическая динамическая нагрузка, масса поднимаемого и перемещаемого груза, стереотипные рабочие движения, статическая нагрузка, рабочая поза, наклоны корпуса, перемещение в пространстве;

- факторы трудового процесса, характеризующие напряженность труда: интеллектуальные, сенсорные, эмоциональные нагрузки, монотонность нагрузок, режим работы,

В помещении лаборатории или кафедры на сотрудника, работающего с вычислительной техникой, могут негативно действовать следующие факторы:

- повышенная и пониженная температура воздуха;
- чрезмерная запыленность и загазованность воздуха;
- повышенная и пониженная влажность воздуха;
- недостаточная освещенность рабочего места;
- превышающий допустимые нормы шум;
- повышенный уровень ионизирующего излучения;
- повышенный уровень электромагнитных полей;



- повышенный уровень статического электричества;
- опасность поражения электрическим током;
- блеклость экрана дисплея;
- длительное пребывание в сидячем положении;
- гиподинамия;
- повышенные интеллектуальные и психо-эмоциональные нагрузки;
- ненормированный рабочий день,

## **4.1 Требования к вентиляции, отоплению и кондиционированию воздуха**

Микроклимат производственных помещений — это климат внутренней среды этих помещений, который определяется действующими на организм человека сочетаниями температуры, влажности и скорости движения воздуха. Допустимые микроклиматические условия — это такие сочетания параметров микроклимата, которые при длительном и систематическом воздействии на человека могут вызвать напряжение реакций терморегуляции и которые не выходят за пределы физиологических приспособительных возможностей. При этом не возникает нарушений в состоянии здоровья, не наблюдаются дискомфортные теплоощущения, ухудшающие самочувствие и понижение работоспособности. Оптимальные параметры микроклимата в производственных помещениях обеспечиваются системами кондиционирования воздуха, а допустимые параметры — обычными системами вентиляции и отопления. Помещение кафедры является помещением категории 1а, то есть выполняются работы с интенсивностью энергозатрат  $58-77 \text{ Вт/м}^3$ . Для создания и автоматического поддержания в лаборатории независимо от наружных условий оптимальных значений температуры, влажности, чистоты и скорости движения воздуха, в холодное время года используется водяное отопление, в теплое время года применяется кондиционирование воздуха. Кондиционер представляет собой вентиляционную установку, которая с помощью приборов автоматического регулирования поддерживает в помещении заданные параметры воздушной среды. Также одежда персонала должна соответствовать температурному режиму в помещении, Отопление, вентиляция и кондиционирование должны осуществляться согласно СНиП 2,04,05-91:

1. В холодные периоды года температура воздуха, скорость его движения и относительная влажность воздуха должны соответственно составлять:  $22-24^{\circ}\text{C}$ ;  $0.1 \text{ м/с}$ ;  $40-60\%$ ; температура воздуха может колебаться в пределах от  $21$  до  $25^{\circ}\text{C}$ ,
2. То же в теплые периоды года:  $23-25^{\circ}\text{C}$ ;  $0.1-0.2 \text{ м/с}$ ;  $40-60\%$ ; температура воздуха может колебаться в пределах от  $22$  до  $26^{\circ}\text{C}$ .

3. Воздух, поступающий в помещения с ЭВМ, должен быть отчищен от загрязнений, в том числе от пыли и микроорганизмов. Запыленность воздуха не должна превышать требований 12.1.005-91.

## **4.2 Требования к уровням шума**

Шум — беспорядочное сочетание различных по силе и частоте звуков. Эквивалентный (по энергии) уровень звука (дБА) непостоянного шума - уровень звука постоянного широкополосного шума, который имеет такое же среднеквадратичное звуковое давление, что и данный непостоянный шум в течение определенного интервала времени. Предельно допустимый уровень (ПДУ) шума — это уровень фактора, который при ежедневной (кроме выходных дней) работе, но не более 40 часов в неделю в течение всего рабочего стажа, не должен вызывать заболеваний или отклонений в состоянии здоровья, обнаруживаемых современными методами исследований в процессе работы или в отдаленные сроки жизни настоящего и последующих поколений. Соблюдение ПДУ шума не исключает нарушения здоровья у сверхчувствительных лиц. В нашем помещении источником шумовых помех могут стать вентиляционные установки, кондиционеры и др. Длительное воздействие этих шумов отрицательно сказывается на эмоциональном состоянии персонала. Шум ухудшает условия труда оказывая вредное действие на организм человека. Работающие в условиях длительного шумового воздействия испытывают раздражительность, головные боли, головокружение, снижение памяти, повышенную утомляемость, понижение аппетита, боли в ушах и т. д. Такие нарушения в работе ряда органов и систем организма человека могут вызвать негативные изменения в эмоциональном состоянии человека вплоть до стрессовых. Под воздействием шума снижается концентрация внимания, нарушаются физиологические функции, появляется усталость в связи с повышенными энергетическими затратами и нервно-психическим напряжением, ухудшается речевая коммутация. Все это снижает работоспособность человека и его производительность, качество и безопасность труда. Длительное воздействие интенсивного шума (выше 80 дБА) на слух человека приводит к его частичной или полной потере. Для того, чтобы добиться допустимого уровня шума рекомендуется применять звукопоглощающее покрытие стен. Защиту от шума следует выполнять в соответствии с СН 2.2.4/2.1.8.562-96.

## **4.3 Требования к естественному и искусственному освещению для помещений вычислительных комнат**

Освещённость — плотность светового потока по поверхности, на которую он падает, Правильно спроектированное и выполненное производственное освещение улучшает условия зрительной работы, снижает утомляемость, способствует повышению производи-

тельности труда, благотворно влияет на производственную среду, оказывая положительное психологическое воздействие на работающего, повышает безопасность труда и снижает травматизм. Недостаточность освещения приводит к напряжению зрения, ослабляет внимание, приводит к наступлению преждевременной утомленности. Чрезмерно яркое освещение вызывает ослепление, раздражение и резь в глазах. Неправильное направление света на рабочем месте может создавать резкие тени, блики, дезориентировать работающего. Существует три вида освещения: естественное, искусственное и совмещенное (естественное и искусственное вместе). Естественное освещение — освещение помещений дневным светом, проникающим через световые проемы в наружных ограждающих конструкциях помещений. Естественное освещение характеризуется тем, что меняется в широких пределах в зависимости от времени дня, времени года, характера области и ряда других факторов. Искусственное освещение применяется при работе в темное время суток и днем, когда не удастся обеспечить нормированные значения коэффициента естественного освещения (пасмурная погода, короткий световой день). Освещение, при котором недостаточное по нормам естественное освещение дополняется искусственным, называется совмещенным освещением. Искусственное освещение подразделяется на рабочее, аварийное, эвакуационное, охранное. Рабочее освещение, в свою очередь, может быть общим или комбинированным, Общее — освещение, при котором светильники размещаются в верхней зоне помещения равномерно или применительно к расположению оборудования. Комбинированное — освещение, при котором к общему добавляется местное освещение, Работа, выполняемая с использованием вычислительной техники, имеют следующие недостатки: вероятность появления прямой блескости, ухудшенная контрастность между изображением и фоном, отражение экрана. Недостаточность освещения приводит к напряжению зрения, ослабляет внимание, приводит к наступлению преждевременной утомленности. Чрезмерно яркое освещение вызывает ослепление, раздражение и резь в глазах. Неправильное направление света на рабочем месте может создавать резкие тени, блики, дезориентировать работающего. Согласно СНиП 23-05-95 освещение в помещениях, где располагается вычислительная техника, должно быть смешанным: естественным и искусственным. При выполнении зрительной работы категории средней точности к, е, о, должен быть не ниже 4%, Искусственное освещение в помещениях следует осуществлять в виде комбинированной системы освещения с использованием люминесцентных источников света в светильниках общего назначения, В качестве источников должны использоваться люминесцентные лампы типа ЛБ и ДРЛ с индексом цветопередачи ( $R > 70$ ), В качестве светильников должны использоваться установки с преимущественно отраженным или рассеянным светораспределением (тип УСП-5-2х40, УСП-35-2х40, ЛВ003-2х40-002),

Величина освещенности при искусственном освещении люминесцентными лампами должна быть в горизонтальной плоскости не ниже 300лк — для системы общего освещения и не ниже 750лк — для системы комбинированного освещения, причем с учетом работы категории высокой зрительной точности может быть увеличена до 1000лк. Для исключения бликов отражения на экранах от светильников общего назначения необходимо применять антиблик-керные сетки, специальные фильтры для экранов, защитные козырьки и т.п.

#### **4.4 Пожарная безопасность при работе с вычислительной техникой**

Пожарная безопасность — это состояние защищенности личности, имущества, общества и государства от пожаров. Пожар — это неконтролируемое горение, причиняющее материальный ущерб, вред жизни и здоровью граждан, интересам общества и государства. Определение категорий помещений осуществляется на стадии проектирования путем последовательной проверки принадлежности к категориям, установленным нормативными документами (НПБ 105-95), Причинами взрывов и пожаров часто являются электрооборудование и электрические сети. Опасность загорания в ЭВМ связана со значительным количеством плотно расположенных на монтажных платах и блоках: электронных узлов и схем, электрических и коммутационных кабелей, резисторов, конденсаторов, полупроводниковых диодов и транзисторов. Высокая плотность элементов в электронных схемах приводит к значительному повышению температуры отдельных узлов (80 — 200 °С), что может служить причиной воспламенения изоляционных материалов. В связи с этим в помещениях вычислительного центра должны быть предусмотрены возможные пути эвакуации персонала. Требования к количеству, размерам и размещению эвакуационных выходов, лестниц и лестничных клеток установлены СНиП 2,01,02-85, а именно:

1. Эвакуационные выходы должны располагаться рассредоточено. Минимальное расстояние  $l$  между наиболее удаленными один от другого эвакуационными выходами из помещения следует определять по формуле:  $l = \sqrt{P}$ , где  $P$  — периметр помещения,
2. Ширина путей эвакуации в свету должна быть не менее 1м, дверей - не менее 0.8м.
3. Высота прохода на путях эвакуации должна быть не менее 2м.
4. Не допускается устройство винтовых лестниц, забежных ступеней, раздвижных и подъемных дверей и ворот, а также вращающихся дверей и турникетов.
5. Двери на путях эвакуации должны открываться по направлению выхода из здания.

6. Наружные эвакуационные двери зданий не должны иметь запоров, которые не могут быть открыты изнутри без ключа.

## **4.5 Требования электробезопасности**

Для питания ЭВМ служит трехфазная электросеть с напряжением 380/220В и частотой 50Гц. Помещение, в котором располагался вычислительный центр, относится к помещениям без повышенной опасности (ГОСТ 12.1.013), поэтому защитное заземление не применялось (ГОСТ 12.1.030). При этом обслуживающий персонал должен допускаться до работы только после инструкции по технике безопасности. Изолирующие корпуса терминалов обеспечивают недоступность токоведущих частей, находящихся под напряжением.

## **4.6 Эргономические требования**

Настоящий стандарт ГОСТ Р ИСО 9241-5-2009 устанавливает руководящие принципы, применяемые при формировании требований пользователей, а также при разработке проекта и установке оборудования рабочих станций, предназначенных для проведения офисных работ с применением видеодисплейных терминалов. Общие принципы и требования, установленные в настоящем стандарте, следует учитывать при разработке стандартов, устанавливающих требования к конструкции офисной мебели и оборудования рабочего места оператора. Под рабочим местом понимается зона, оснащенная необходимыми техническими средствами, в которой совершается трудовая деятельность исполнителя или группы исполнителей, совместно выполняющих одну работу или операцию. Конструкция рабочего места должна обеспечивать быстроту, безопасность, простоту и экономичность технического обслуживания в нормальных и аварийных условиях; полностью отвечать функциональным требованиям и предполагаемым условиям эксплуатации. Конструкция рабочего стола должна обеспечивать оптимальное размещение на рабочей поверхности используемого оборудования с учетом его количества и конструктивных особенностей, характера выполняемой работы. Высота рабочей поверхности стола для взрослых пользователей должна регулироваться в пределах 680-800 мм; при отсутствии такой возможности высота рабочей поверхности стола должна составлять 725 мм. Конструкция рабочего стула (кресла) должна обеспечивать поддержание рациональной рабочей позы, позволять изменять позу с целью снижения статического напряжения мышц шейно-плечевой области и спины для предупреждения развития утомления. Тип рабочего стула (кресла) должен выбираться в зависимости от характера и продолжительности работы с учетом роста пользователя. Поверхность сиденья, спинки и других элементов стула (кресла) должна быть полумягкой, с нескользящим, неэлектризующимся и воздухонепроницаемым покры-

тием, обеспечивающим легкую очистку от загрязнений. Клавиатуру следует располагать на поверхности стола на расстоянии 100-300 мм от края, обращенного к пользователю, или на специальной, регулируемой по высоте рабочей поверхности, отделенной от основной столешницы,

#### **4.7 Напряженность трудового процесса**

Тяжесть трудового процесса в ходе работы над диссертацией можно отнести к оптимальному классу условий труда (легкая физическая нагрузка), основная нагрузка интеллектуальная, присутствует возможность гибкого графика работы, изменения рабочей позы. Классифицировать по степени напряженности выполняемую работу можно следующим образом: интеллектуальные нагрузки предполагают решение сложных задач с выбором по известным алгоритмам (напряженный труд 1-ой степени), а также эвристическую, творческую деятельность, требующую решения сложных задач при отсутствии алгоритма (напряженный труд 2-ой степени); большую часть времени работа проходит установленному графику с возможной его коррекцией по ходу деятельности (напряженный труд 1-ой степени); часто присутствует работа в условиях дефицита времени (напряженный труд 2-ой степени); сенсорные нагрузки (работа за экраном компьютера) присутствуют более четырех часов за рабочий день (напряженный труд 2-ой степени); фактическая продолжительность рабочего дня 8-9 часов (напряженность труда средней степени).

## Литература

1. Андреев А.Н. и др. Механика – от дискретного к сплошному / Под ред. В.М. Фомина. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2008. 343 с.
2. Hoover W.G. Smooth Particles Applied Mechanics. The State of the Art. World Scientific // Adv. Ser. Nonlin. Dyn. 2006. V. 25.
3. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: Физматлит, 2007. 304 с.
4. Гольдштейн Р.В., Морозов Н.Ф. Механика деформирования и разрушения наноматериалов и нанотехнологии // Физ. Мезомеханика. 2007. Т. 10. № 5. С. 17–30.
5. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. О механических характеристиках наноразмерных объектов // ФТТ. 2002. Т. 44. №12. С. 2158–2163.
6. Krivtsov A.M. From nonlinear oscillations to equation of state in simple discrete systems. // Chaos, Solitons & Fractals. 2003. V. 17. № 1. P. 79–87.
7. Nakazawa H. // Prog. Theor. Phys. Suppl. 1970. V. 45. P. 231–262.
8. Кривцов А.М., Ле-Захаров А.А. Исследование процесса теплопроводности кристаллах с дефектами методами молекулярной динамики // ДАН. 2008. Т. 420. № 1. С. 45–49.
9. Allen M.P., Tildesley A.K. Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarendon Press, 1987. 385 p.
10. Кривцов А.М. Колебания энергий в одномерном кристалле ДАН. 2014, том 458, № 3, с. 279–281.
11. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. Т. 1. Теоретическая физика. М.: Физматлит, 2004. 224 с.
12. Слепян Л.И. Нестационарные упругие волны. Л.: Судостроение, 1972. 376 с.
13. Морозов Н.Ф., Паукшто М.В. Дискретные и гибридные модели механики разрушения. СПб: Изд-во СПбГУ, 1995. 160 с.
14. Петров Ю.В., Груздков А.А., Казаринов Н.А. // ДАН. 2008. Т. 423. № 1. С. 51–55.
15. Krivtsov A.M. Proc. XXXIV Summer School “Advanced Problems in Mechanics”. St.-Petersburg, 2007. P. 261 - 273.
16. D.S. Chandrasekharaiah. Thermo-elasticity with second sound 1986. Appl. Mech. Rev. 39(3), 355–376.
17. K.V. Poletkin, G.G. Gurzadyan, J. Shang, V. Kulish. Ultrafast heat transfer on nanoscale in thin gold films // Applied Physics B, 2012, 107: 137-143.
18. Z. Rieder, J. L. Lebowitz, and E. Lieb. Properties of a Harmonic Crystal in a Stationary Nonequilibrium State. J. Math. Phys. 1967, 8(5), 1073-1078.

19. A. Dhar. Heat transport in low-dimensional systems // *Advances in Physics*. 2008, 57(5), 457–537.
20. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица, И. Стигана. М.: Наука, 1979. 830 с.
21. Giardina C., Livi R., Politi A., Vassalli M. // *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 84. № 10. P. 2144–2147.
22. Lepri S., Livi R., Politi A. // *Phys. Rev. Lett.* 1997. V. 78. < 10. P. 1896–1899.
23. Broido D.A., Ward A., Mingo N. // *Phys. Rev. B*. 2005. V. 72. № 1. P. 014308–1–014308–8.
24. Celata G.P. *Heat Transfer & Fluid Flow in Microchannels*. N.Y.: Begell House, 2004. V. 1. 280 p.
25. Gendelman O.V., Savin A.V. // *Phys. Rev. Lett.* 1999. V. 84. № 11. P. 2381–2384.
26. Mai T., Narayan O. // *Phys. Rev. E*. 2006. V. 73. № 6. P. 061202–061202–7.
27. Безручко Б.П., Прохоров М.Д. // *Письма в ЖТФ*. 1999. Т. 25. В. 12. С. 51–57.
28. Кривцов А.М., Мясников В.П. Моделирование методом динамики частиц изменения внутренней структуры и напряженного состояния в материале при сильном термическом воздействии // *Изв. РАН. МТТ*. 2005. № 1. С. 87–102.
29. M. Born and K. Huang. *Dynamical Theory of Crystal Lattices*. Clarendon Press, Oxford, 1954, 432 p.
30. Abramowitz M., Stegun I.A. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. U.S. Government Printing Office, 1972. 1046 p
31. M.B. Babenkov, E.A. Ivanova. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 2013. 26(4), 483–502