

Министерство науки и высшего образования 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  
«\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 г.

## **ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА**

**Исследование влияния разрывов связей на перенос энергии в одномерной  
цепочке**

по направлению подготовки

01.03.03 «Механика и математическое моделирование»

направленность

01.03.03\_01 Механика и математическое моделирование сред с  
микроструктурой

Выполнил

студент гр. 5030103/90101

А.А. Колбасов

Научный руководитель

Профессор ВШТМиМФ, д.ф.-м.н.

В. А. Кузькин

Санкт-Петербург 2023 г.

**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 Колбасову Алексею Алексеевичу, гр. 5030103/90101

1. Тема работы: Исследование влияния разрывов связей на перенос энергии в одномерной цепочке
2. Срок сдачи студентом законченной работы: 05.06.2023
3. Исходные данные по работе: справочная литература, актуальные научные публикации по теме работы.
4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов): Моделирование одномерной, линейной цепочки. Моделирование одномерной цепочки, частицы которой взаимодействуют между собой с помощью потенциала Леннарда-Джонса. Исследование изменения поведения кинетической температуры при изменениях начальных условий.
5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): не предусмотрено
6. Консультанты по работе: отсутствуют
7. Дата выдачи задания: 27.02.2023

Руководитель ВКР: \_\_\_\_\_ В. А. Кузькин, профессор ВШТМиМФ д.ф.-м.н.

Задание принял к исполнению: 27.02.2023

Студент: \_\_\_\_\_ А. А. Колбасов

## Реферат

На 38 с., 18 рисунков

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** ЛИНЕЙНАЯ ЦЕПОЧКА, НЕЛИНЕЙНАЯ ЦЕПОЧКА, ОДНОМЕРНЫЙ КРИСТАЛЛ, ПОТЕНЦИАЛ ЛЕННАРДА-ДЖОНСА, КИНЕТИЧЕСКАЯ ЭНЕРГИЯ, КИНЕТИЧЕСКАЯ ТЕМПЕРАТУРА, ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ, АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ.

В настоящей работе проводится исследование влияния разрывов связей на перенос энергии в одномерной цепочке. В ходе работы был проведен анализ современной литературы, посвященной данной теории. Исследованы две модели для одномерной цепочки. Первая линейная, вторая с нелинейным взаимодействием между частицами, с помощью парного потенциала Леннарда-Джонса.

Для линейной цепочки был проведен сравнительный анализ со статьей, а также построены графики изменения кинетической и потенциальной энергий. Были проведены расчеты для разного количества реализаций и числа частиц для нелинейной цепочки с маленькой нелинейностью  $k = 0.1$ . В качестве численного метода использовался симплектический метод второго порядка, метод Верле, который сохраняет энергию в процессе интегрирования. Также были проведены исследования с увеличенной нелинейностью  $k = 0.5, 1, 2$ . Рассмотрено изменение поведения кинетической температуры на больших временах, а также на малых. Полученные результаты показывают, что при повышении нелинейности меняется кривая, к которой асимптотически стремится кинетическая температура.

## ABSTRACT

38 page., 18 pictures

KEY WORDS: LINEAR CHAIN, NONLINEAR CHAIN, ONE-DIMENSIONAL CRYSTAL, LENNARD-JONES POTENTIAL, KINETIC ENERGY, KINETIC TEMPERATURE, NUMERICAL SOLUTION, ANALYTICAL SOLUTION.

In the present work, we study the breaking of energy transfer bonds in a one-dimensional chain. In the course of the work, an analysis of modern work devoted to this theory was carried out. Two models of a one-dimensional chain are investigated. The first is ordinary linear, the second with non-linear interaction between the parts, using the Lennard-Jones pair separation.

For a linear chain, a comparative analysis was carried out with the article, and graphs of changes in the kinetic and estimated energies were plotted. Calculations were carried out for a different number of realizations and the number of particles for a nonlinear chain with a small nonlinearity  $k = 0.1$ . As a numerical method, the second-order symplectic method, the Verlet method, is used, which conserves energy in the union. Studies have also been carried out with increased non-linearity

$k = 0.5, 1, 2$ . The change in the behavior of the kinetic temperature for long times, as well as for short ones, is excluded. Obtaining the results of the observation that when a nonlinearity occurs, the curve to which the asymptotically related kinetic temperature refers changes.

## Содержание

<b>Введение</b> .....	
<b>Глава 1. Обзор литературы</b> .....	8
<b>Глава 2. Постановка линейной задачи</b> .....	11
2.1. Уравнение движения .....	11
2.2. Граничные условия.....	12
2.3. Начальные условия.....	13
<b>Глава 3. Постановка нелинейной задачи</b> .....	15
3.1 Нелинейная цепочка.....	15
3.2 Потенциал Леннарда-Джонса.....	15
<b>Глава 4. Численный метод</b> .....	18
<b>Глава 5. Анализ результатов</b> .....	20
5.1 Кинетическая температура .....	20
5.2 Изменение кинетической температуры для линейной цепочки .....	21
5.3 Сравнение уравнения теплопереноса с уравнением теплопроводности, основанном на законе Фурье, и уравнением тепловых волн.....	22
5.4 Изменение кинетической температуры для нелинейной цепочки .....	26
5.5 Влияние нелинейности на поведение кинетической температуры .....	30
<b>Заключение</b> .....	36
<b>Список использованной литературы</b> .....	38

## Введение

В современном мире достаточно хорошо развиты способы тепловых расчетов различных объектов. Также существуют две достаточно большие и самостоятельные теории, на основании которых и проводятся расчеты. Теория сплошной среды, в ней такие материалы, как жидкости, газы и твердые тела, рассматриваются как непрерывные среды, которые могут быть описаны континуальными уравнениями. Теория сплошной среды имеет широкое применение в различных областях науки и техники, таких как механика деформируемых тел, гидродинамика, термодинамика, электродинамика и акустика. Эта теория позволяет нам более точно понимать и описывать различные физические процессы в сплошных средах, такие как распространение звуковых и световых волн, деформации материалов под действием сил и температурных изменений, потоки жидкостей и газов, а также процессы переноса тепла и массы. Кроме того, теория сплошной среды помогает разрабатывать математические модели и компьютерные симуляции, которые позволяют предсказывать поведение материалов в различных условиях и помогают инженерам и ученым разрабатывать новые материалы и технологии. Хотя теория сплошной среды имеет широкое применение в различных областях науки и техники, она также имеет некоторые ограничения, которые следует учитывать при ее использовании.

**Приближенность моделей:** Теория сплошной среды основана на предположении, что материалы рассматриваются как непрерывные среды, но на самом деле все материалы состоят из атомов и молекул. Таким образом, модели сплошной среды могут быть приближенными, и некоторые свойства материалов.

**Ограниченность области применения:** Теория сплошной среды не всегда может применяться к материалам, которые не являются сплошными, например, к твердым материалам с ярко выраженной микроструктурой или к материалам, которые не могут быть описаны континуальными уравнениями.

Сложность математических выкладок: Теория сплошной среды требует использования математических методов, которые могут быть сложными и требовать большого количества времени для вычислений и анализа результатов.

Ограниченность точности результатов: Использование теории сплошной среды может привести к ограниченной точности результатов, особенно при рассмотрении сложных и многокомпонентных систем.

Несмотря на эти недостатки, теория сплошной среды все еще остается важной и полезной теорией, которая используется во многих областях науки и техники.

Вторая теория – это дискретная теория. Дискретная теория - это научная теория, которая основывается на идее о том, что многие физические системы могут быть описаны в терминах дискретных состояний или событий. Дискретные системы состоят из конечного или счетного числа элементов или частиц, каждый из которых имеет определенное состояние или значение. Основная идея дискретной теории заключается в том, чтобы описать эти системы с помощью математических моделей, которые учитывают дискретную природу этих систем.

В отличие от теории сплошной среды, которая описывает материалы как непрерывные среды, дискретная теория моделирует системы, состоящие из отдельных частиц или элементов. Это может быть полезно, когда рассматриваются системы, в которых важно учитывать конечное число элементов или когда системы имеют дискретные свойства, такие как квантовые состояния.

Дискретная теория находит широкое применение в различных областях науки и техники, таких как квантовая механика, теория информации, теория вероятности и статистика, компьютерные науки и теория автоматов. Она позволяет создавать более точные модели для решения задач, связанных с дискретными системами, и может приводить к новым открытиям и

технологиям, которые могут быть применены в различных областях науки и техники.

В дискретной теории существуют способы “поддерживать температуру”, их называют термостатами, они достаточно широко используются на практике. Однако для потока, подобных вещей нет, поэтому необходимо придумать способ, который поможет решить эту проблему. Цель данной работы заключается в исследовании влияния разрывов связей на перенос энергии в одномерной цепочке, взаимодействие частиц в которой подчиняется нелинейному закону [7].



## Глава 1. Обзор литературы

История развития теплопроводности в рамках дискретной механики связана с изучением процесса передачи тепла на микроуровне, с учетом взаимодействия атомов и молекул вещества. С точки зрения численных исследований теплопроводность может быть рассмотрена с использованием методов молекулярной динамики (MD) или методов Монте-Карло (MC). Оба подхода основаны на моделировании взаимодействия атомов или молекул вещества для изучения их динамики и передачи энергии.

В MD-моделировании атомы или молекул вещества представлены в виде дискретных частиц, которые взаимодействуют между собой в соответствии с силовыми полями и потенциалами. Передача тепла в таких моделях происходит за счет колебательного движения и столкновений между частицами. Различные алгоритмы и методы могут быть применены для измерения теплопроводности на основе данных, полученных в MD-симуляциях [7, 13-14].

В MC-методах, где моделируются статистические процессы, можно использовать алгоритмы для оценки теплопроводности на основе сэмплирования различных состояний системы. В этом случае моделируется случайное перемещение частиц, и оценка теплопроводности основывается на анализе статистических свойств системы [3, 15].

Оба этих подхода позволяют изучать теплопроводность в дискретной механике и получать количественные результаты для различных материалов и условий. Они широко применяются в научных исследованиях и инженерных расчетах для изучения теплообмена и разработки новых материалов с заданными теплопроводностями.

Для составления замкнутой системы, которая описывает физическое явление или процесс необходимо было придумать методы, которые подойдут исследователем и инженерам. Для поддержания температуры во времени моделирования или симуляции используются термостаты. Термостаты

представляют собой модельные алгоритмы или методы, которые вводятся в систему для поддержания заданной температуры и регулирования теплового равновесия.

В дискретной механике, основанной на моделировании атомов или молекул вещества, существует несколько типов термостатов, которые могут быть использованы:

Термостат Беренсена-Хулла - этот термостат регулирует температуру системы путем масштабирования скоростей частиц в соответствии с разницей между текущей температурой системы и заданной температурой. Он является простым и широко используется в моделировании методом молекулярной динамики [6].

Термостат Нозе-Хувера - этот термостат использует дополнительные переменные, называемые "големы", для поддержания температуры системы. Големы взаимодействуют с атомами, регулируя их кинетическую энергию и температуру. Термостат Нозе-Хукаты обеспечивает более точное поддержание заданной температуры, особенно для систем с небольшим числом частиц [4].

Термостат Ландау-Лифшица - этот термостат моделирует влияние стохастических сил на систему и регулирует температуру путем добавления случайных сил и диссипации энергии. Он эффективно учитывает взаимодействие системы с окружающей средой и широко используется для моделирования систем в термодинамическом равновесии [4].

Каждый из этих термостатов имеет свои преимущества и ограничения, и выбор конкретного термостата зависит от типа системы, которую вы моделируете, и требуемой точности контроля температуры. Моделирование потока в дискретных средах является интересной исследовательской областью, где поток представлен как движение индивидуальных дискретных элементов, таких как частицы, агенты или молекулы. Этот подход позволяет учесть дискретные взаимодействия и макроскопические эффекты, которые могут возникать в таких системах. Несмотря на то, что в области моделирования теплового потока ведутся активные исследования [9], но простого решения

этой проблемы нет до сих пор. В данной работе были проведены исследования переноса энергии, рассматривались две постановки задачи: одна линейная, вторая нелинейная. Для обеих были найдены решения кинетической температуры с помощью численного метода интегрирования. Также были проведены исследования влияния нелинейности на систему.

## Глава 2. Постановка линейной задачи

### 2.1. Уравнение движения

Изначально необходимо построить линейную модель для сравнения с результатами из литературы, а так же с полученными результатами нелинейной модели.

Линейная цепочка - это система из последовательно соединенных элементов, каждый из которых является линейным, то есть его характеристики описываются линейными дифференциальными уравнениями. Каждый элемент в линейной цепочке может быть электрическим компонентом, таким как резистор, конденсатор или катушка индуктивности, или же механическим элементом, например, пружиной или амортизатором.

Линейные цепочки широко используются в технике, науке и инженерии для моделирования и анализа различных систем, таких как электрические цепи, механические системы и тепловые процессы. Они также могут использоваться для решения дифференциальных уравнений и моделирования поведения различных физических систем.

В данной задаче использовалась именно линейная цепочка, так как она очень простая в анализе и для нее есть аналитическое решение, с которым всегда можно сравнить результаты.

Уравнение линейной цепочки имеет вид:

$$\ddot{u}_n = \omega_0(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) \quad (2.1.1)$$

где  $\omega_0^2 = \frac{c}{m}$  — частота собственных колебаний  
 $c$  — жесткость связи  
 $m$  — масса частицы

## 2.2. Граничные условия

В дискретной среде граничные условия определяют поведение системы на ее границах. В зависимости от конкретной задачи и используемых методов решения, могут быть применены различные виды граничных условий.

Некоторые из наиболее распространенных видов граничных условий в дискретной среде.

Граничные условия первого рода - задают фиксированные значения решения на границе области. В этом случае задаются определенные перемещения границы или задаются конкретные положения границы во времени. Это может быть использовано для моделирования деформаций или перемещений структур.

$$\begin{aligned} u_1 &= F(t) \\ u_n &= G(t) \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

Граничные условия второго рода - задают производные решения на границе области. В этом случае задается фиксированный поток или скорость частиц или элементов на границе. Это может быть полезно при моделировании потоков внутри каналов или труб.

$$\begin{aligned} \dot{u}_1 &= f(t) \\ \dot{u}_n &= g(t) \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

Граничные условия периодических границ - используются для моделирования систем, которые могут быть представлены как бесконечно повторяющиеся блоки. В этом случае значения на границах области должны совпадать.

$$\begin{aligned} u_1 &= u_{n-1} \\ u_n &= u_2 \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

Свободные граничные условия - используются для задания границы, на которой не заданы условия или где граничные условия не имеют физического смысла. В этом случае граничные условия определяются исходя из требований самой задачи. С точки зрения математического описания, у частиц, которые принадлежат такой границе, меняется уравнение движения.

В данной задаче были выбраны именно периодические начальные условия, так как хотелось избежать краевых эффектов.

### 2.3. Начальные условия

В дискретной среде начальные условия определяют значение решения в начальный момент времени или начальной точке пространства. Начальные условия могут зависеть от конкретной задачи и используемых методов решения, но некоторые наиболее распространенные виды начальных условий в дискретной среде включают:

Начальное значение на перемещение (initial value)

$$u_i = F(x) \quad (2.3.1)$$

Начальные условия на производные (initial derivative conditions) - это условия, задающие значения производных решения в начальный момент времени или начальной точке пространства. Например, при численном решении уравнения колебаний пружинного маятника, начальным условием может быть скорость маятника в начальный момент времени.

$$\dot{u}_i = f(t) \quad (2.3.2)$$

Комбинированные начальные условия (mixed initial conditions) - могут включать комбинации вышеперечисленных типов начальных условий. Например, при численном решении уравнения колебаний пружинного

маятника, начальными условиями могут быть заданы как его начальное положение и начальная скорость.

Начальные условия в дискретной среде используются в сочетании с граничными условиями для определения решения задачи в заданной области пространства и времени.

В качестве начальных условий использовалась синусоидальное распределение скорости с весом, который нормально распределен на отрезке  $[-1,1]$ .

$$\dot{u}_i = p \sqrt{A + B_0 \sin(kia)} \quad (2.3.3)$$

где  $A, B_0$  – температурные константы,  $k = 2\pi/\lambda$  – частота возмущения,  $\lambda = an$  – длина волны возмущения,  $a$  – начальное расстояние между частицами,  $n$  – число частиц,  $p$  – случайный коэффициент ( $M[p] = 0, D[p] = 0$ ).

## Глава 3. Постановка нелинейной задачи

### 3.1 Нелинейная цепочка

Нелинейная цепочка - это математическая модель, которая описывает динамику системы в виде последовательности нелинейных уравнений. В отличие от линейной цепочки, в которой каждый элемент имеет линейную зависимость от своих соседних элементов, в нелинейной цепочке связи между элементами могут быть нелинейными.

В нелинейных цепочках могут возникать сложные и интересные явления, такие как нелинейные волны, солитоны, хаос и др. Такие цепочки могут использоваться для моделирования различных физических систем, таких как волноводы, цепочки молекул в кристаллах, электрические цепи и т.д.

Математически нелинейные цепочки могут быть решены с помощью различных методов, таких как численные методы, методы теории возмущений и другие. Однако, в отличие от линейных цепочек, аналитические решения нелинейных цепочек находятся гораздо сложнее и часто требуют использования численных методов.

В данной работе использовалась именно нелинейная цепочка для моделирования, так как линейная является моделью одномерного гармонического кристалла, в котором не работает привычный закон Фурье.

### 3.2 Потенциал Леннарда-Джонса

Потенциал Леннарда-Джонса (или потенциал Леннарда-Джонса - Джонсона - Мора) - это математическая функция, которая используется для описания взаимодействия между атомами или молекулами в химических системах [1].

Функция потенциала Леннарда-Джонса имеет вид:



$$\Pi(r) = D \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{a}{r} \right)^6 \right] \quad (3.1.1)$$

где  $D$  – свободная энергия;  
 $a$  – длина связи.

Потенциал убывает быстро с расстоянием, что соответствует притяжению между атомами или молекулами на близких расстояниях и отталкиванию на больших.

Сила взаимодействия Леннарда-Джонса находится по формуле:

$$F(r) = -\nabla \Pi(r) \quad (3.1.2)$$

Так как исследуется одномерная задача, то  $\nabla = \frac{d}{dr}$ . Таким образом, сила будет иметь вид:

$$F(r) = \frac{12D}{a} \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{13} - \left( \frac{a}{r} \right)^7 \right] \quad (3.1.3)$$

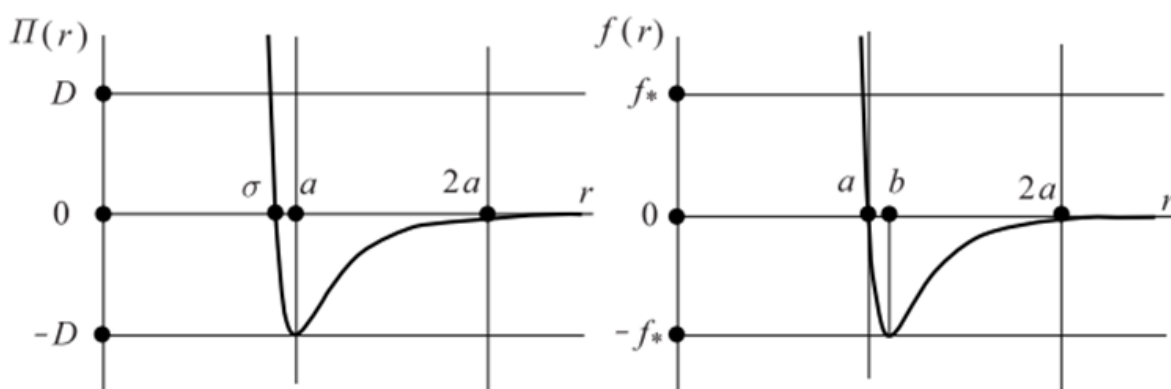


Рис. 3.2.1 Потенциал и сила взаимодействия

Потенциал Леннарда-Джонса широко используется для моделирования взаимодействия веществ в различных системах, таких как газы, жидкости и твердые тела. Этот потенциал часто используется в молекулярной динамике, которая является методом компьютерного моделирования, позволяющим

исследовать динамику молекулярных систем на основе уравнений движения, включая потенциалы межмолекулярного взаимодействия. Потенциал и сила взаимодействия представлены на рис. 3.2.1 [1].

В данной работе используется именно потенциал Леннарда-Джонса, так как это простейший пример парного потенциала. В нем всего лишь 2 параметра, что делает его очень удобным для анализа.

Тогда уравнение движения будет иметь вид:

$$\ddot{u}_n = \frac{12D}{a} \sum_{i=1, i \neq n}^N F(u_n - u_i) \quad (3.1.4)$$

Такая постановка задачи предполагает вычисление  $n^2$  сил, чтобы уменьшить это количество воспользуемся укороченным потенциалом [1].

Тогда потенциал будет иметь вид.

$$\Pi_{sh}(r) = \begin{cases} \Pi(r), & 0 < r \ll b \\ -a_2(a_{cut}^2 - r^2)^2 + a_3(a_{cut}^2 - r^2)^3, & b < r < a_{cut} \\ 0, & a_{cut} < r \end{cases} \quad (3.1.5)$$

где  $b = \sqrt[6]{\frac{13}{7}} a$  – расстояние, на котором реализуется минимальное значение силы Леннарда-Джонса;

$$a_{cut}^2 = b^2 \left( 5 - \sqrt{16 + \frac{24\Pi(b)}{bf_*}} \right) - \text{радиус обрезания};$$

$$f_* = \frac{504}{169} \sqrt[6]{\frac{7}{13}} \frac{D}{a} - \text{прочность связи};$$

$$a_2 = \frac{5b^2 - a_{cut}^2}{8b^3(a_{cut}^2 - b^2)} f_*, \quad a_3 = \frac{3b^2 - a_{cut}^2}{12b^3(a_{cut}^2 - b^2)^2} f_*.$$

## Глава 4. Численный метод

Метод Верле - это численный метод, который используется для решения уравнений движения в молекулярной динамике, в частности, для моделирования движения частиц вещества. Этот метод позволяет вычислить траектории движения молекул в заданной системе и предсказать их поведение во времени [10].

Метод Верле основан на разложении уравнений движения в ряд Тейлора, после чего используется аппроксимация многочленом второй степени. Этот метод позволяет точно интегрировать уравнения движения и обеспечивает высокую точность при симуляции динамики молекул.

Одно из основных применений метода Верле - моделирование молекулярной динамики жидкостей и твердых тел. Этот метод позволяет рассчитывать термодинамические свойства системы, такие как давление, плотность, теплоемкость и т.д., а также изучать структуру и динамику молекул вещества. Он также широко используется в биофизике и химической кинетике для моделирования биологических молекул и химических реакций.

Уравнения выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned}v_{i+\frac{1}{2}} &= v_{i-\frac{1}{2}} + \frac{F(t_i)}{m} \Delta t \\ x_{i+1} &= x_i + v_{i+\frac{1}{2}} \Delta t\end{aligned}\tag{3.2.1}$$

Матрица перехода  $S$  будет иметь определитель равный 1. Что означает, что метод симплектический (сохраняется фазовый объем рис. 2), и система будет сохранять энергию [12].

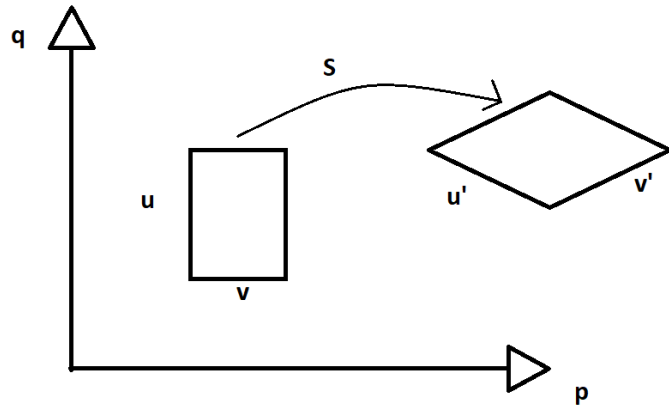


Рис. 4.1.1. Сохранение фазового объема

## Глава 5. Анализ результатов

### 5.1 Кинетическая температура

В дискретной механике кинетическая температура связана с движением дискретных частиц или молекул в системе. Она определяется на основе средней кинетической энергии частиц и связана с их скоростями.

В дискретной механике, систему, состоящую из  $N$  дискретных частиц, можно описать с помощью координат и скоростей каждой частицы. Кинетическая энергия каждой частицы вычисляется как половина массы частицы, умноженной на квадрат ее скорости. Таким образом, кинетическая энергия частицы  $i$  может быть записана как:

$$K_i = \frac{1}{2} m_i v_i^2 \quad (5.1.1)$$

где  $m_i$  — масса частицы  $i$ ;

$v_i$  — скорость частицы  $i$ .

Так как начальные условия являются случайно заданными скоростями, все результаты, в том числе и кинетическая температура, то их необходимо будет осреднить по реализациям [4].

$$\langle K_i \rangle = \frac{1}{2} m_i \langle v_i^2 \rangle \quad (5.1.2)$$

$$\langle v_i^2 \rangle = \frac{1}{H} \sum_{k=1}^H v_{ki}^2 \quad (5.1.3)$$

где  $v_{ki}$  — скорость частицы  $i$  на реализации  $k$ ;

$H$  — число реализаций.

Полная кинетическая энергия частиц в системе определяется как сумма кинетических энергий всех частиц:

$$\langle K \rangle = \sum_{i=1} \langle K_i \rangle \quad (5.1.4)$$

Кинетическая температура  $T$  в дискретной механике может быть определена через среднюю кинетическую энергию следующим образом:

$$T = \frac{2}{3k} \langle K \rangle \quad (5.1.5)$$

где  $k$  – постоянная Больцмана;

Таким образом, кинетическая температура в дискретной механике связана со средней кинетической энергией частиц и выражает степень их движения и энергетического состояния.

## 5.2 Изменение кинетической температуры для линейной цепочки

Моделируемая система является замкнутым объектом, из этого следует, что ее энергия должна сохраняться во время движения. Поэтому основным критерием проверки корректности модели является выполнение этого утверждения. График изменения кинетической температуры, потенциальной энергии, половины полной энергии, приведен на рисунке 5.1.1

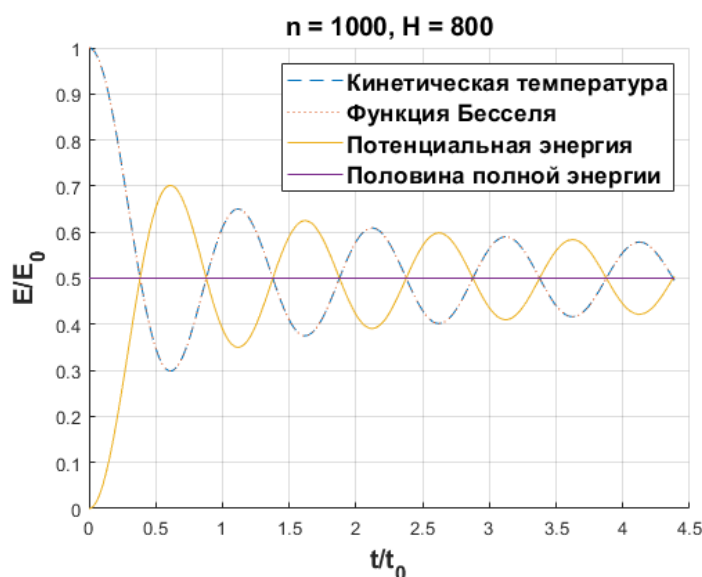


Рис. 5.1.1. Изменение энергий во времени

По графику видно, что кинетическая температура в точности совпадает с аналитической функцией и асимптотически приближается к половине полной энергии, как и потенциальная энергия, что согласуется с теорией.

$$K_J(t) = \frac{E}{2} (1 + J_0(4\omega_0 t)) \quad (5.2.1)$$

Где  $E$  – полная энергия системы;

$\omega_0$  – частота собственных колебаний.

### 5.3 Сравнение уравнения теплопереноса с уравнением теплопроводности, основанном на законе Фурье, и уравнением тепловых волн

Уравнение кинетической температуры для линейной цепочки имеет вид [9]:

$$\ddot{T} + \frac{1}{t}\dot{T} = c^2 T'' \quad (5.3.1)$$

При начальных условиях  $T|_{t=0} = T_0(x)$ ,  $\dot{T}|_{t=0} = 0$ , его решением будет иметь вид:

$$T(t, x) = \frac{1}{\pi} \int_{-t}^t \frac{T_0(x - c\tau)}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau \quad (5.3.2)$$

В таблице 5.3.1 представлены уравнения теплопроводности и 5.3.1, а также законы синусоидального теплового возмущения при начальных условиях, описанных в главе 2.3.

## Сравнение уравнений

	Уравнение теплопроводности (Фурье)	Уравнение 5.3.1
уравнения теплопередачи	$\dot{T} = \beta T''$	$\ddot{T} + \frac{1}{t}\dot{T} = c^2 T''$
законы затухания синусоидального теплового возмущения	$e^{-\beta k^2 t}$	$J_0(ckt)$

Результаты аналитического и численного решения линейной цепочки приведены на рисунке 5.3.1.

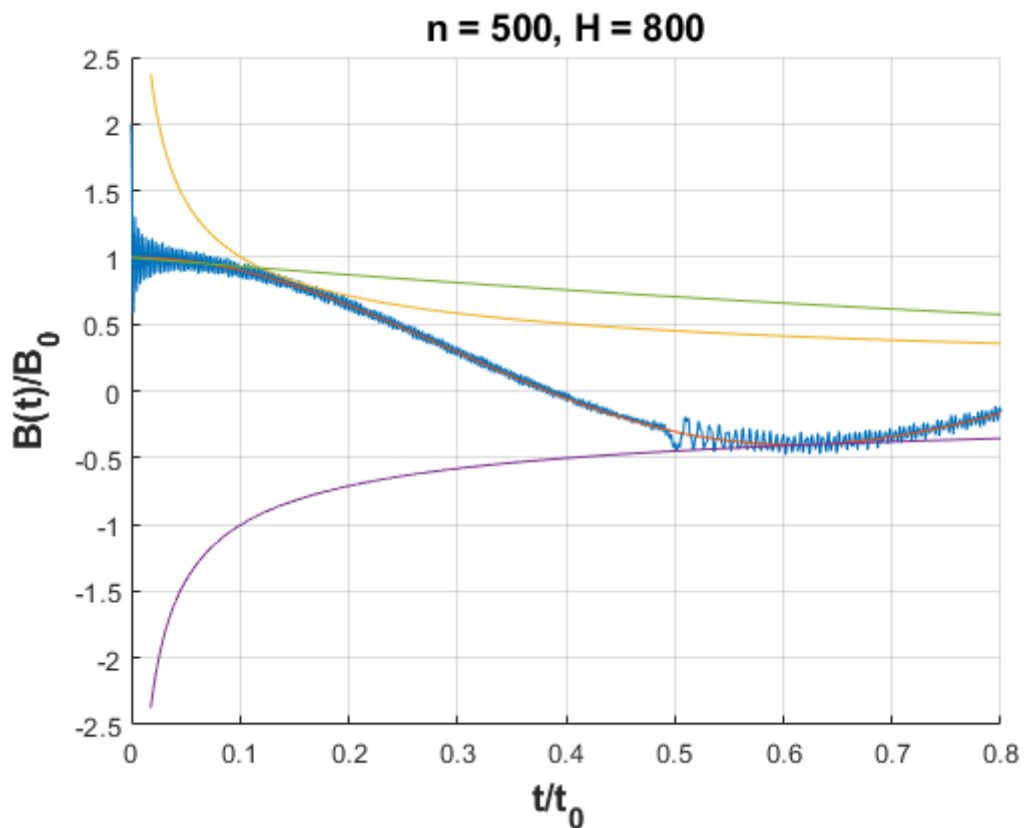


Рис. 5.3.1. Сравнение решений.

Синим – кинетическая температура, полученная численно для линейной цепочки, Оранжевым – аналитическое решение для уравнения теплопередачи,



зеленым – решение уравнения теплопроводности. Жёлтым и фиолетовым – огибающие для аналитического решения.  $\pm \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{t_0}{t}}$

График для кинетической температуры, полученной в результате численного моделирования, и аналитического решения, построенный на малых временах, приведен на рис. 5.3.2

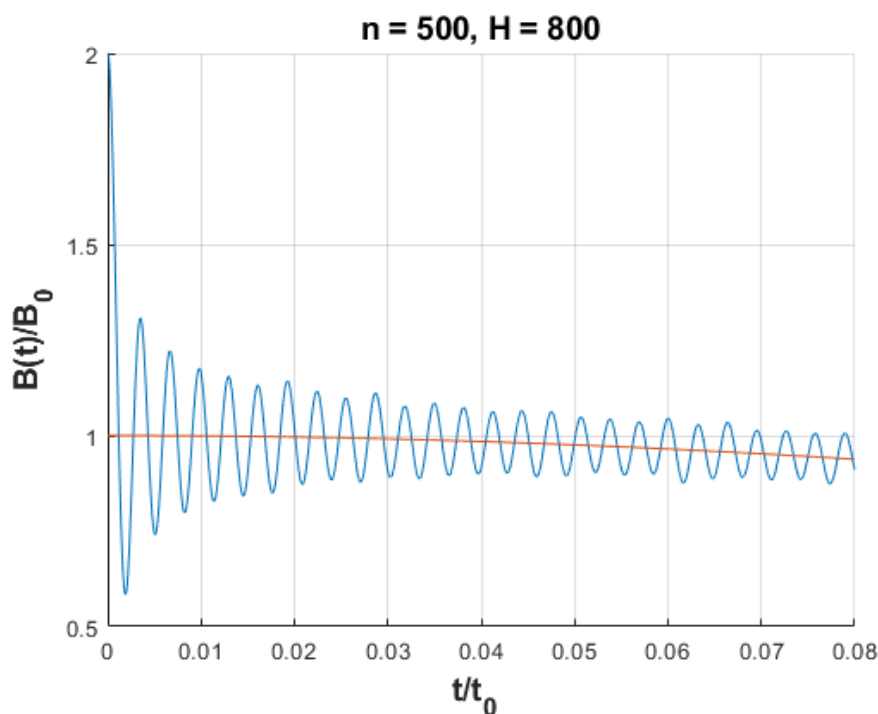


Рис. 5.3.2. Кинетическая температура на малых временах

По рис. 5.3.2 видно, что изменение кинетической температуры при численном моделировании имеет две частоты колебаний. Одна низкая, соответствует частоте начального возмущения  $kc$ , а вторая, наоборот, очень высокая, соответствует частоте собственных колебаний и отвечает за преобразование кинетической энергии в потенциальную энергию.

Численное решение колеблется около аналитического решения, но не совпадает с ним, это обусловлено тем, что в ходе моделирования использовалось 500 частиц. При таком количестве частиц вклад отдельных будет достаточно велик, что приводит к увеличению амплитуды колебаний.

Начальные условия для кинетической температуры:

$$T_0 = A + B_0 \sin(kx) \quad (5.3.3)$$

Решение для уравнения теплопереноса (5.3.1.) с начальными условиями (5.3.3) по формуле (5.3.2) будет иметь вид:

$$T(t, x) = B_0 J_0(kct) \sin(kx) + A \quad (5.3.4)$$

Рассмотрим зависимость кинетической температуры для моделируемой линейной цепочки.

$$T(t, x) = B(t) \sin(kx) + A \quad (5.3.5)$$

Где  $B(t)$  – функция, которая зависит от времени и  $B(0) = B_0$

Умножим обе части равенства на  $\sin(kx)$  и проинтегрируем по всей цепочке. Получим выражение:

$$\int_0^l T(t, x) \sin(kx) dx = B(t) \int_0^l \sin(kx) dx \quad (5.3.6)$$

Где  $l$  – длина цепочки

После интегрирования синуса, получим выражение  $B(t)$ :

$$B(t) = \frac{2}{l} \int_0^l T(t, x) \sin(kx) dx \quad (5.3.7)$$

Ввиду того, что линейная цепочка состоит из конечного числа частиц, то интеграл сводится к ряду, из-за чего и выходит несоответствие полученных результатов. Однако при увеличении количества частиц уменьшается ранг

дробления, что в предельном случае ( $n \rightarrow \infty$ ) даст абсолютное совпадение результатов.

$$B(t) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^N m_i \langle v_i^2 \rangle \quad (5.3.7)$$

#### 5.4 Изменение кинетической температуры для нелинейной цепочки

Рассмотрим изменение кинетической температуры в нелинейной модели. Поведение кинетической температуры должно быть таким же, как у линейной модели. Введем коэффициент  $k = \frac{A}{D}$ , который будет отвечать за нелинейность. Сравним нелинейное распределение кинетической температуры с аналитическим при  $k = 0.1$ .

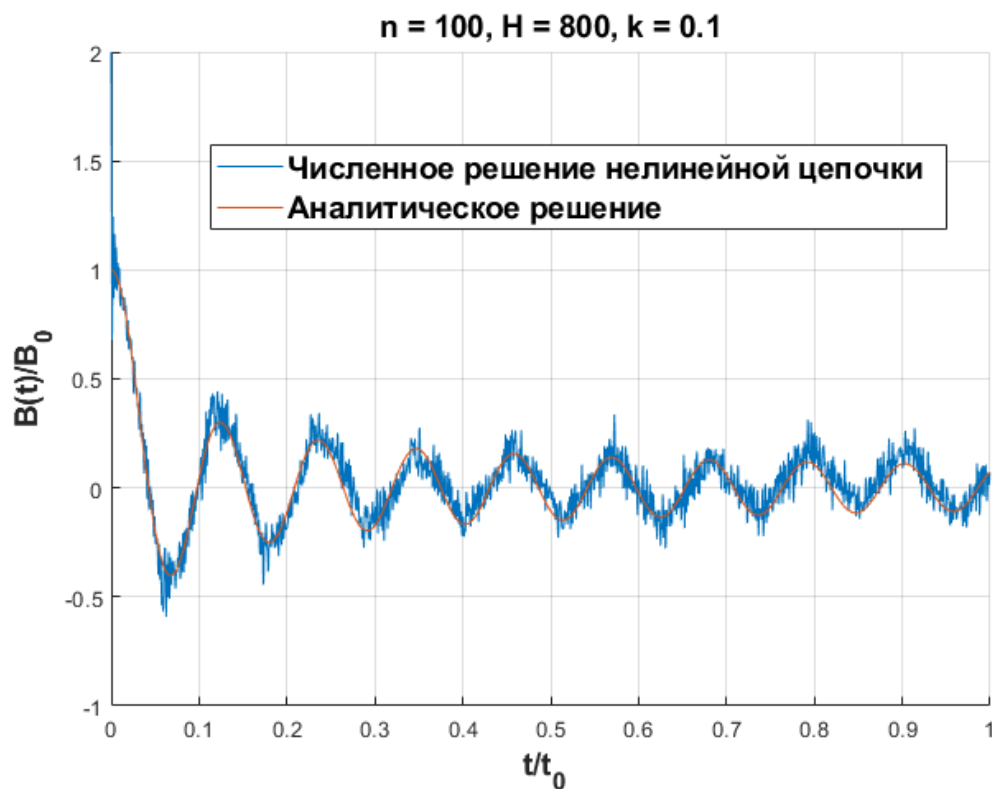


Рис. 5.4.1. Кинетическая температура нелинейной модели с маленькой нелинейностью

По рис. 5.4.1. видно, что результаты действительно похожи. Рассмотрим изменение поведения кинетической температуры при разном количестве реализаций. Будем оценивать это влияние с помощью средней квадратичной оценки по формуле 5.4.1.

$$\sigma = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^T |T_i^{kin} - J_0(kcdti)|^2 \quad (5.4.1)$$

Где  $T$  – число шагов по времени;

$T_i^{kin}$  – результат численного решения в момент времени  $I$ ;

$dt$  – шаг по времени.

Рассмотрим  $\sigma$  для различных значений реализаций ( $N = 10 - 4000$ ). Результаты приведены на рис. 5.4.2.

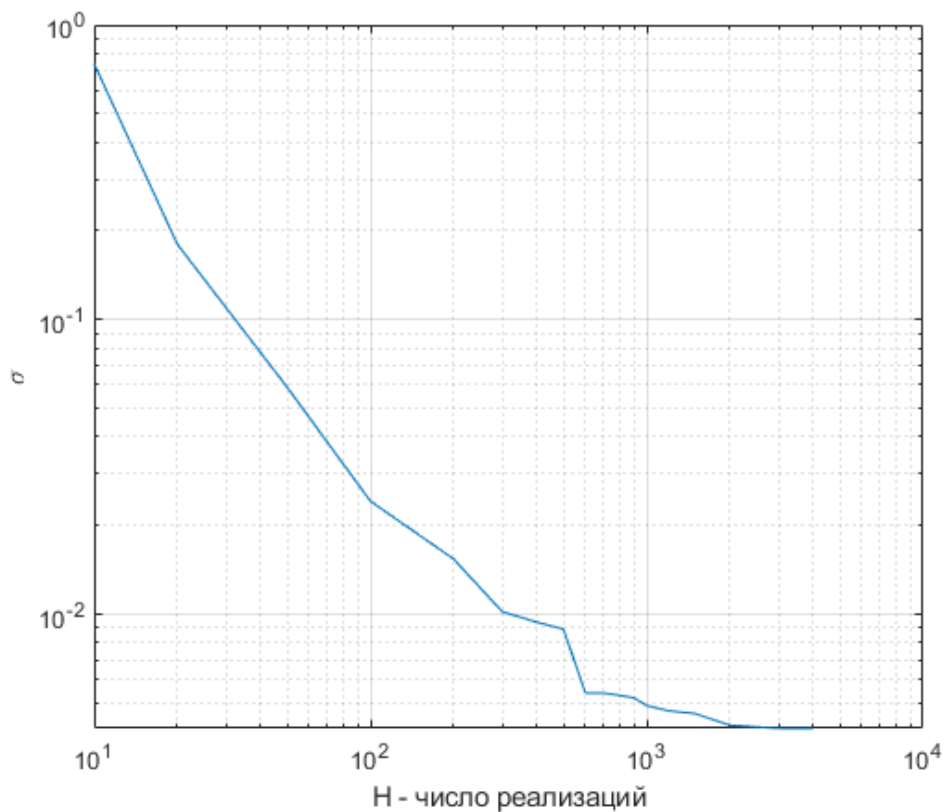


Рис. 5.4.1. Значение средней квадратичной ошибки от реализаций

Рассмотрим влияние количества частиц на изменение кинетической температуры. Число частиц будем изменять от 20 до 500.

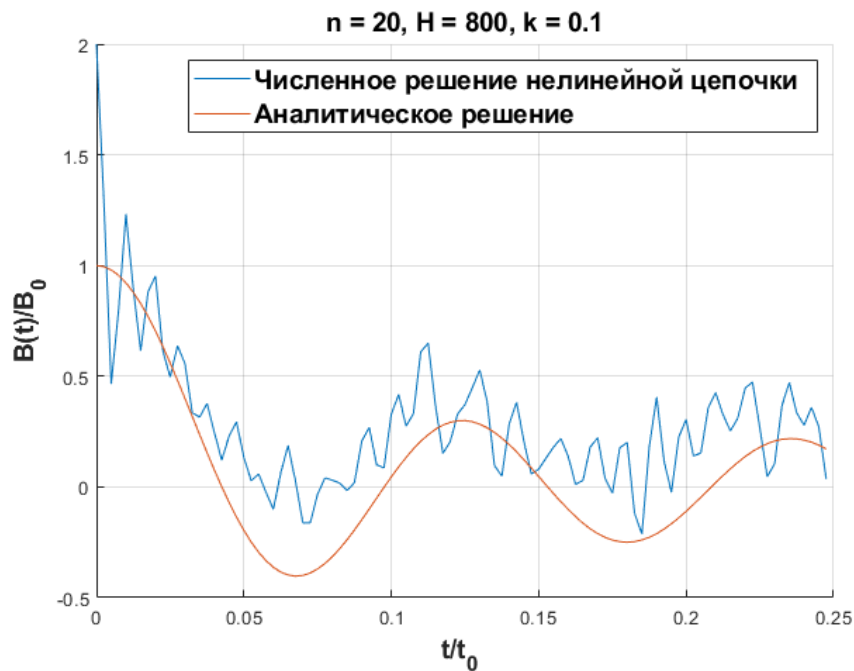


Рис. 5.4.2. Сравнение численного решения для 20 частиц с аналитическим

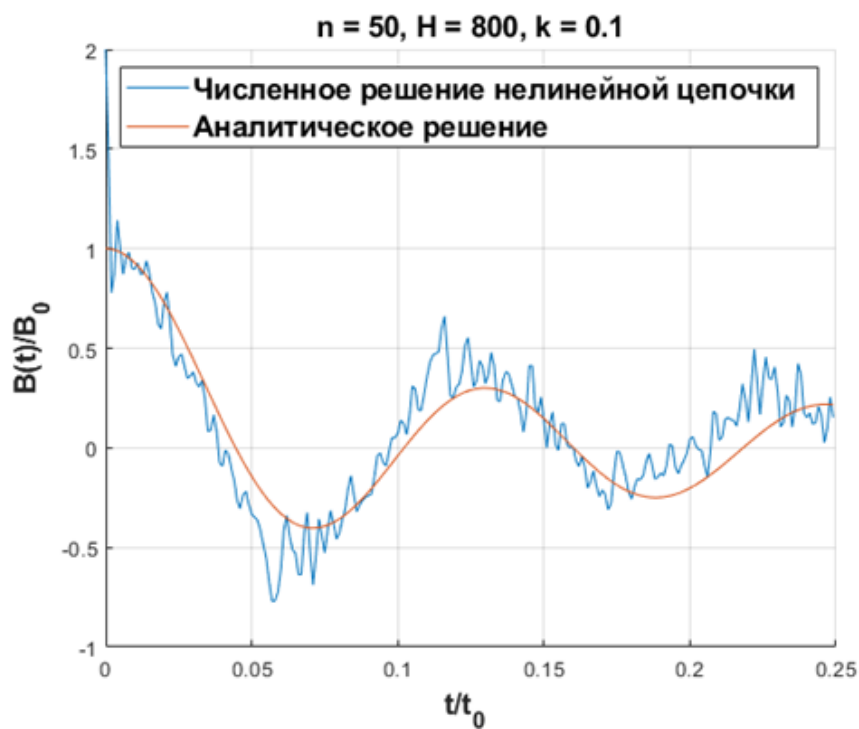


Рис. 5.4.3. Сравнение численного решения для 50 частиц с аналитическим

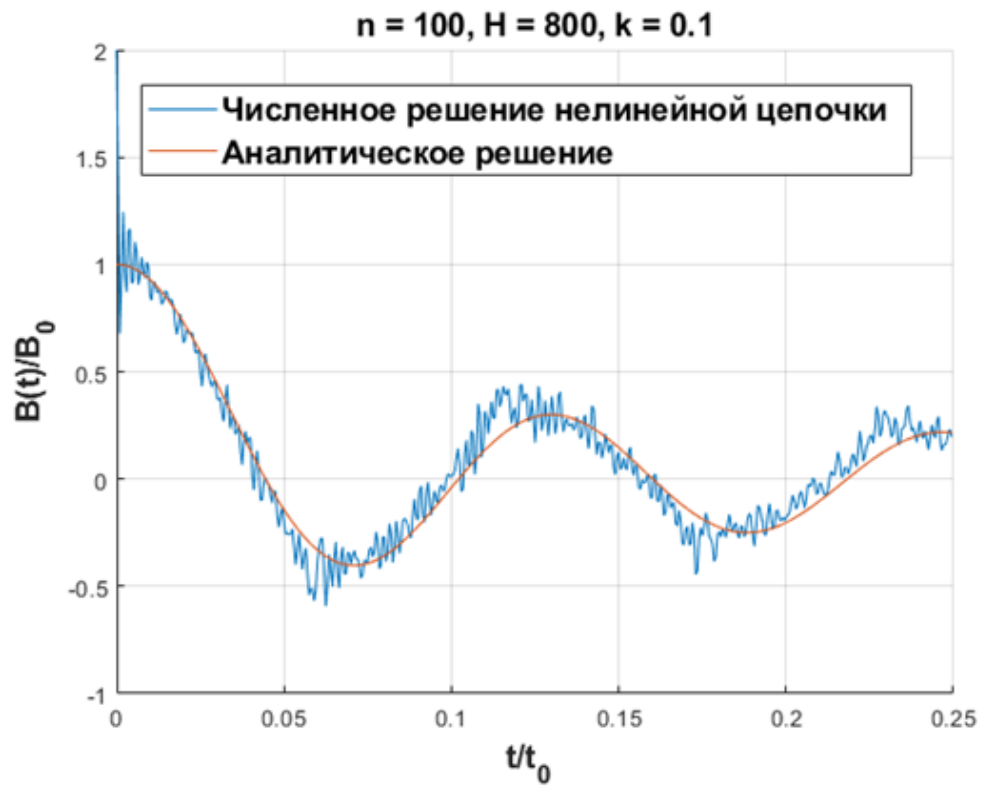


Рис. 5.4.4. Сравнение численного решения для 100 частиц с аналитическим

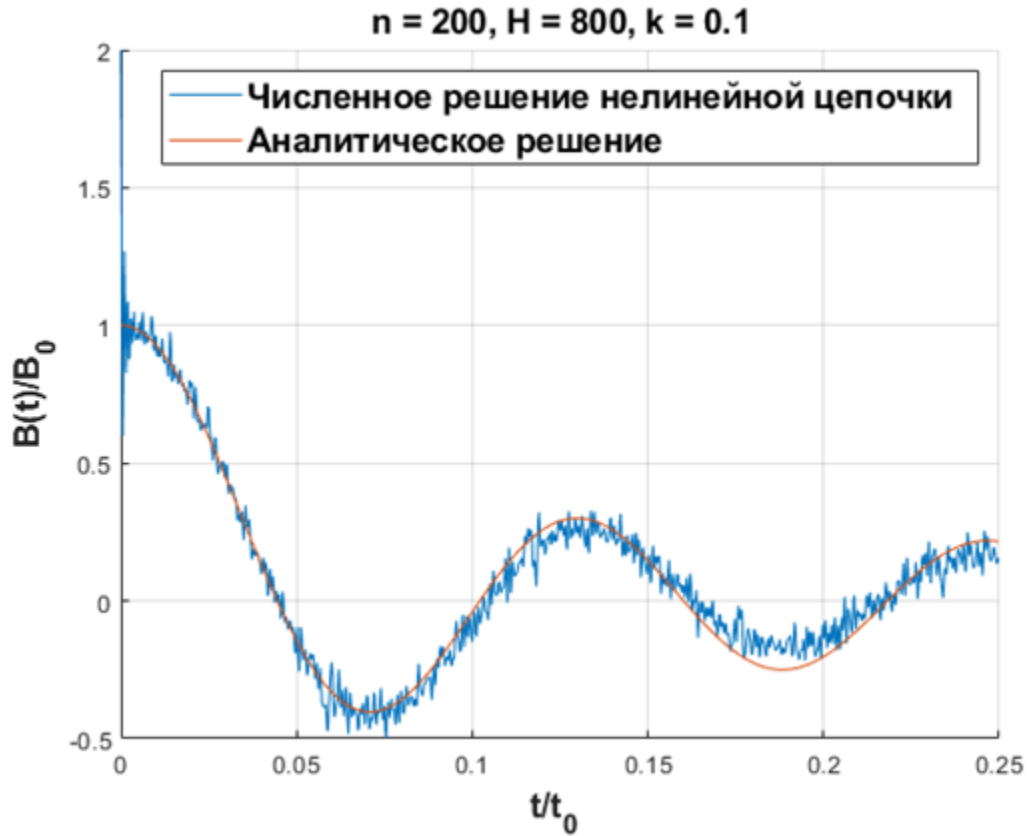


Рис. 5.4.5. Сравнение численного решения для 200 частиц с аналитическим

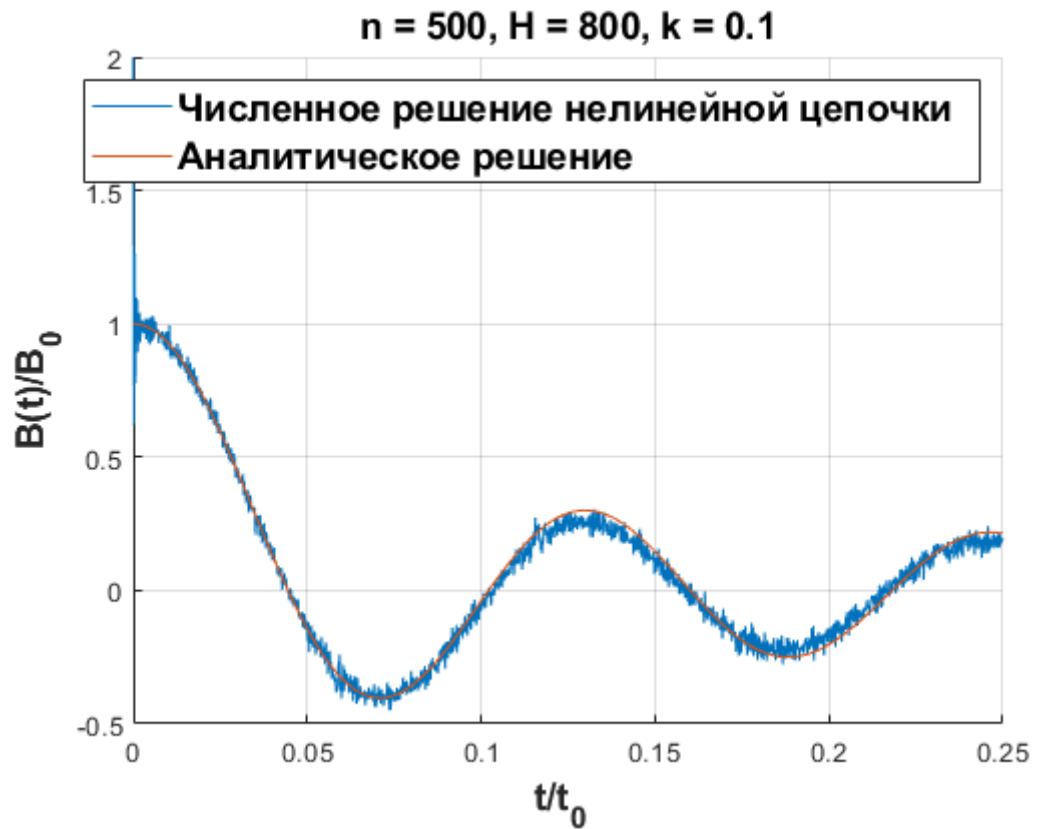


Рис. 5.4.6. Сравнение численного решения для 500 частиц с аналитическим

По рис. 5.4.2-5.4.6 видно, что с увеличением частиц численное решение для нелинейной модели стремится к аналитическому, что аналогично с линейной.

## 5.5 Влияние нелинейности на поведение кинетической температуры

Ранее все результаты были получены с малым значением нелинейности. Рассмотрим поведение системы при увеличении коэффициента нелинейности  $k$ .

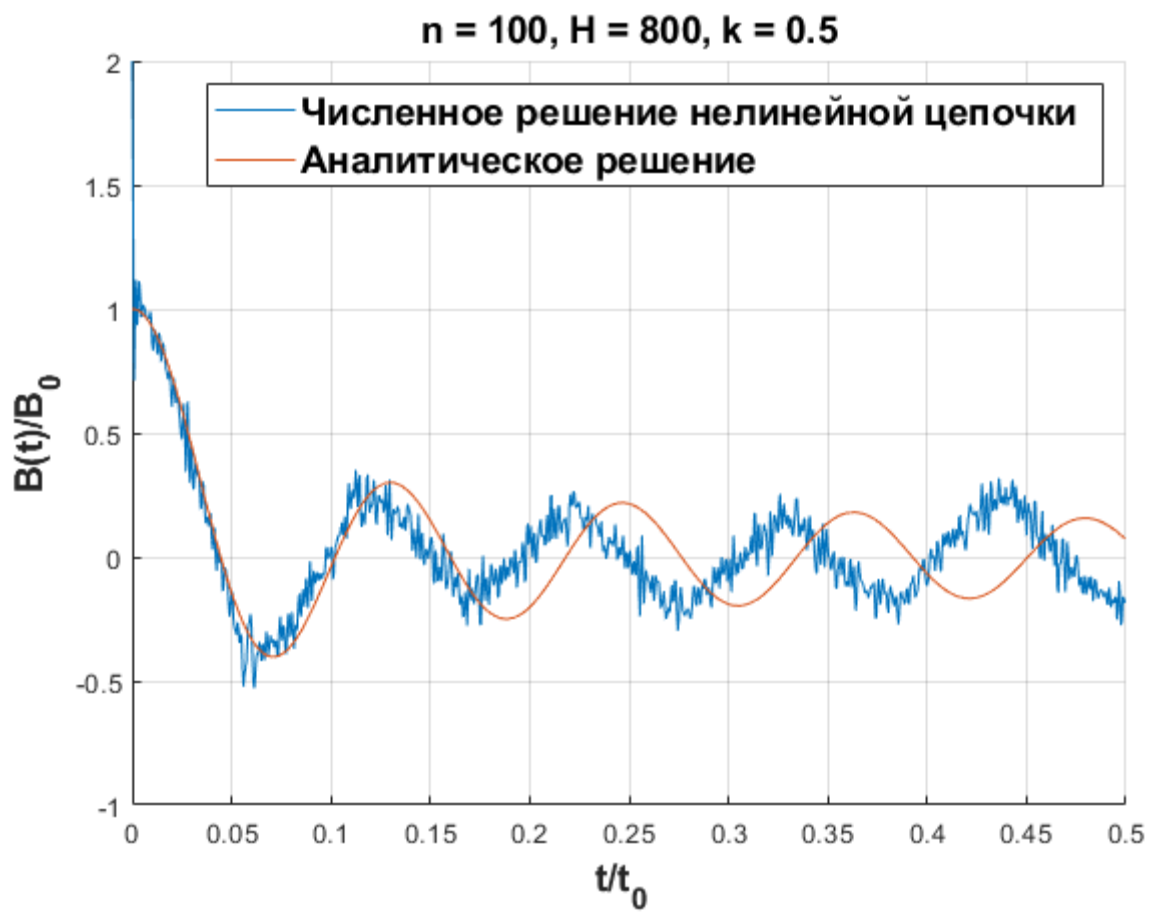


Рис. 5.5.1. Изменение кинетической температуры при  $k = 0.5$



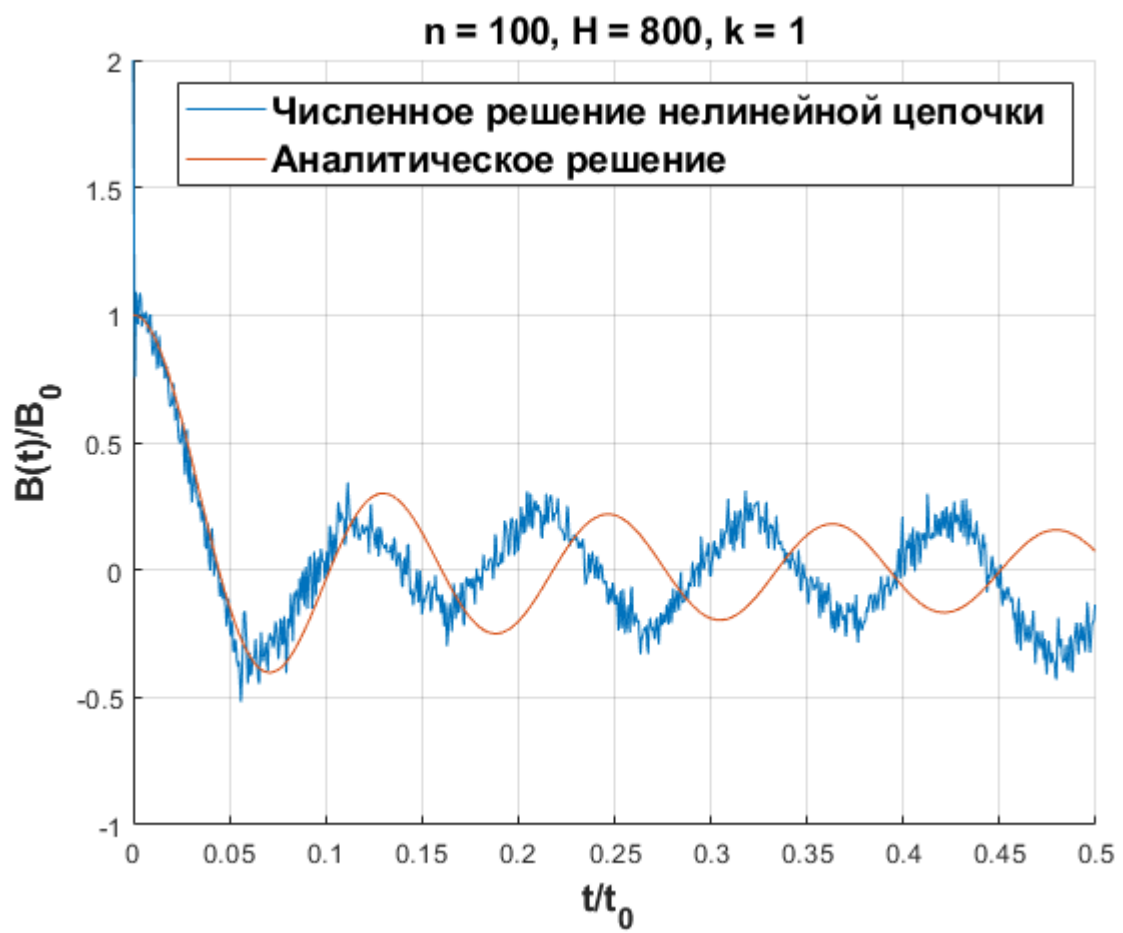


Рис. 5.5.2. Изменение кинетической температуры при  $k = 1$

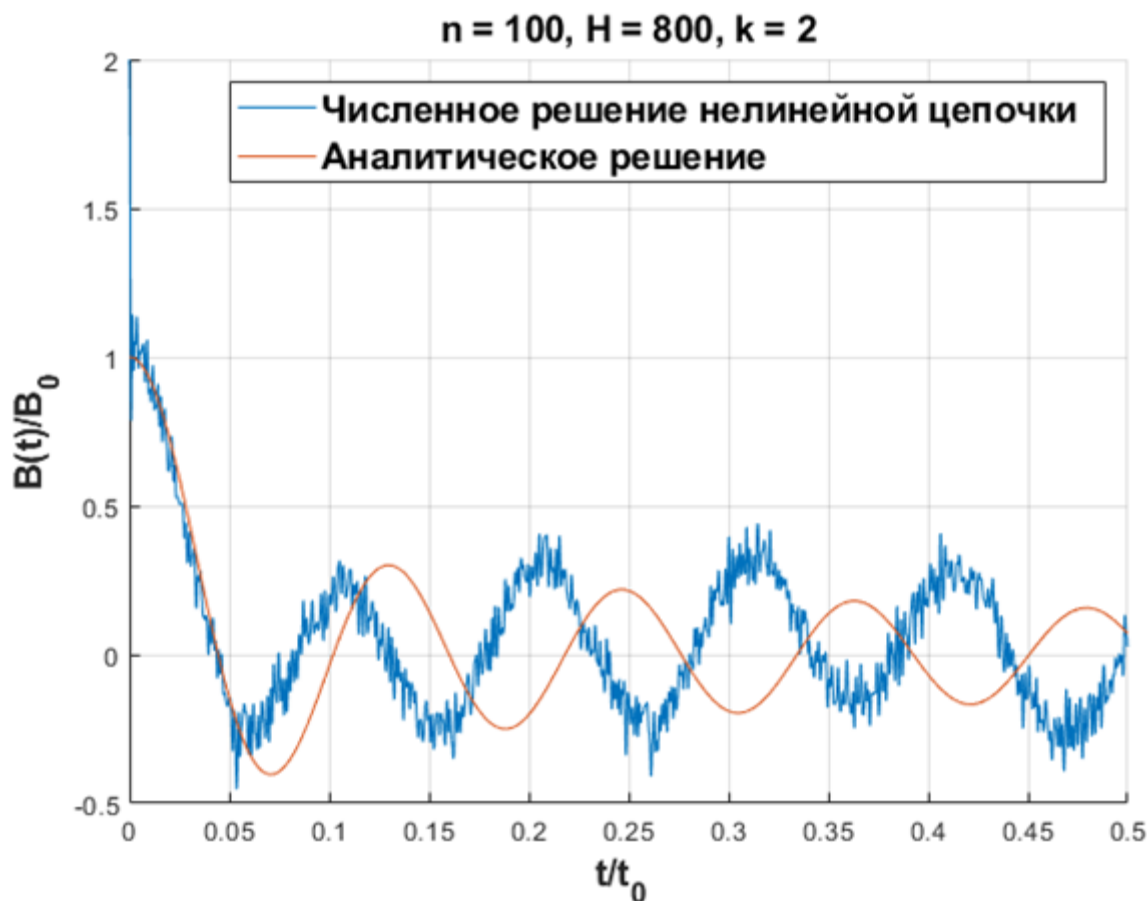


Рис. 5.5.3. Изменение кинетической температуры при  $k = 2$

Как видно по рисункам поведение кинетической температуры очень изменилось. Коэффициент нелинейности  $k$  линейно зависит от температурного коэффициента  $A$ , от которого зависит начальная скорость. Таким образом, при увеличении нелинейности возрастает начальная энергия системы, из-за чего физические процессы, начинают происходить быстрее. Частота больших колебаний значительно уменьшилась, а амплитуда возросла. Рассмотрим аналогичные колебания, но на малых временах. Как видно по рисункам с увеличением коэффициента нелинейности, происходит изменение преобразование кинетической энергии в потенциальную, если раньше кинетическая температура колебалась около половины полной энергии, то при высокой нелинейности она сдвинулась выше.

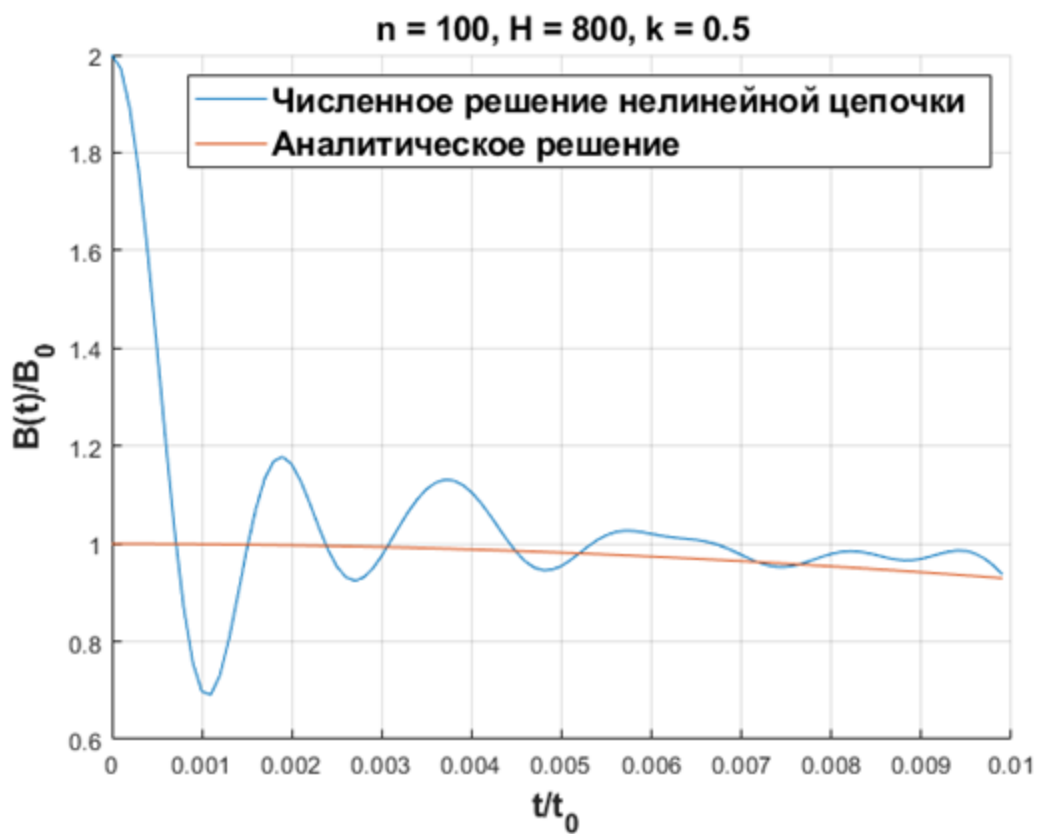


Рис. 5.5.4. Изменение кинетической температуры при  $k = 0.5$  на малых временах

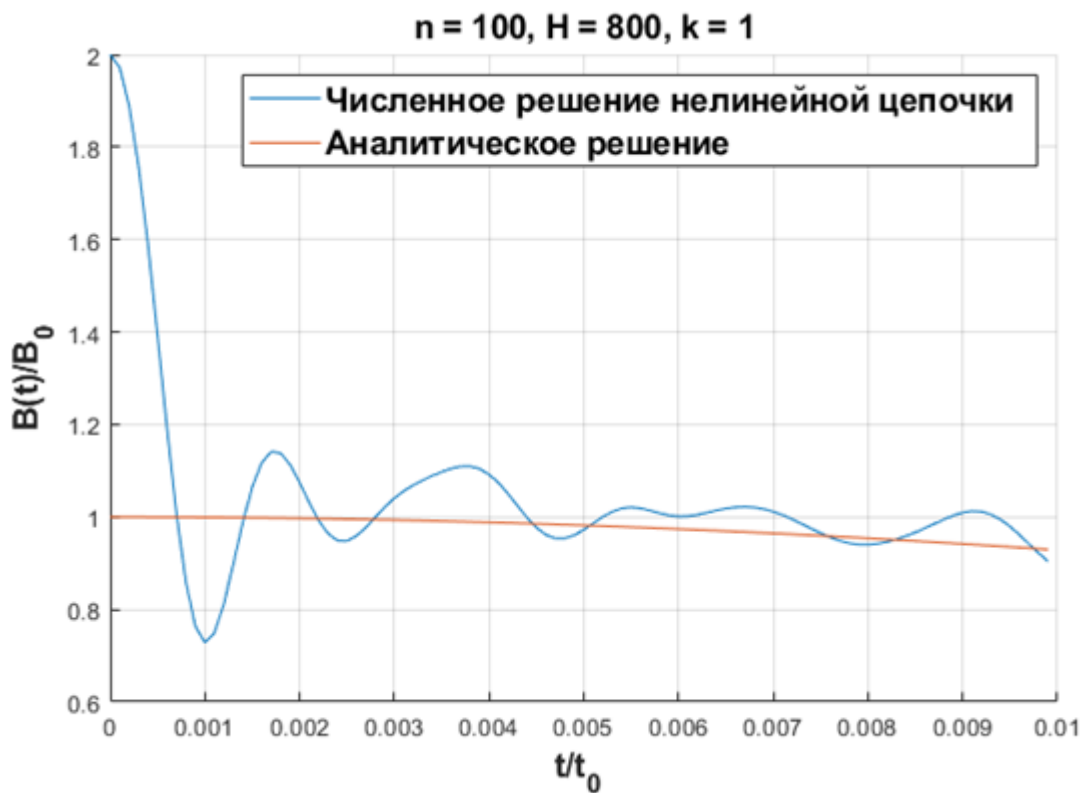


Рис. 5.5.5. Изменение кинетической температуры при  $k = 1$  на малых временах

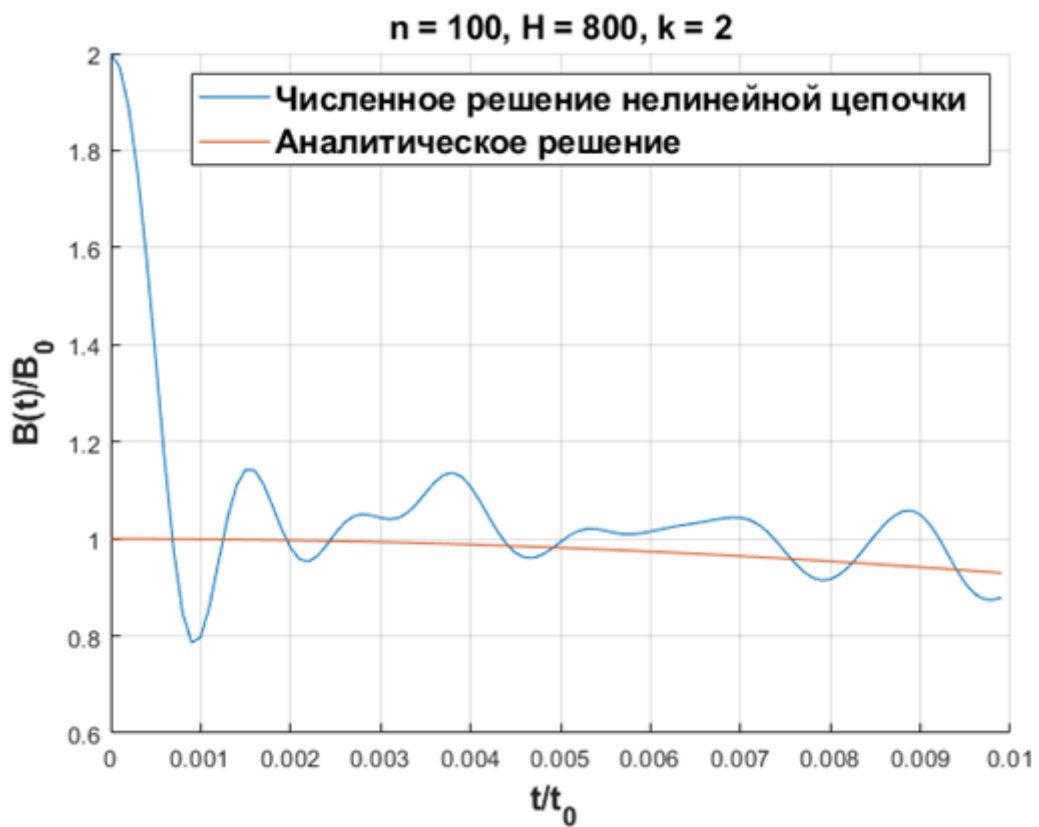


Рис. 5.5.6. Изменение кинетической температуры при  $k = 2$  на малых временах

В результате проведенных исследований с нелинейной моделью, были обнаружены новые эффекты в распределение кинетической температуры. Кривая, к которой асимптотически стремится кинетическая температура, поднимется. Чем больше  $k$ , тем выше поднимается эта кривая.

## Заключение

В результате проделанной работы был проведен анализ современной литературы, посвященной переносу энергии в кристаллах, были выявлены основные проблемы в данной области. Была написана программа численного расчета двух моделей: линейной и нелинейной цепочек. Для линейной цепочки построен график изменения кинетической температуры без синусоидальных возмущений. Проведен сравнительный анализ полученных результатов с актуальными статьями, также выявлены неточности в сравнении аналитического решения и численного. В нелинейной цепочке использовался потенциал Леннарда-Джонса, который для ускорения расчетов был обрезан. В качестве метода интегрирования был использован симплектический метод Верле второго порядка, для того чтобы сохранялась энергия на больших временах. Нелинейная цепочка была исследована при разных параметрах численного расчета. Во время исследования получена зависимость средней квадратичной разности между численным решением для нелинейной цепочки при маленькой нелинейности и аналитического решения от числа реализаций. Данное исследование показало, что зависимость практически линейна. Также были показаны результаты для одних и тех же систем при разном количестве частиц, в итоге была выявлена зависимость между количеством частиц и точностью расчета (как и в линейной модели). После проведенных экспериментов и расчетов, а также после подбора параметров были проведены численные расчеты с высокой нелинейностью ( $k = 0.5, 1, 2$ ). В результате получены зависимости, которые в корне отличались от расчетов при аналогичных параметрах, но для линейной цепочки, что говорит об изменении физики процесса теплопереноса. Энергии в системе стало много больше, чем энергии связи для потенциала Леннарда-Джонса, из-за чего изменилось преобразование кинетической энергии в потенциальную энергию (и обратно). В линейной модели такого эффекта не было, кинетическая энергия, которая соответствовала функции Бесселя, асимптотически стремилась к половине

полной энергии системы, потенциальная энергия вела себя аналогично. Для нелинейной модели с высоким значением коэффициента нелинейности, кинетическая температура стала стремиться к кривой, которая находится выше половины полной энергии системы.

## Список использованной литературы

1. Кривцов А. М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. - М.: Физматлит, 2007. – 304 с
2. Allen M. P., Tildesley D. J. Computer Simulation of Liquids. - 2 edit. - Oxford: Oxford University Press, 2017. - 378 p.
3. Christian R., George C Monte Carlo Statistical Methods. - 2 edit. - New York: Springer, 2004. - 645 p.
4. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. - 1 edit. - San Diego: Academic Press, 2001. - 662 p.
5. Hairer E., Wanner G., Lubich C. Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations. - 1 edit. - Berlin: Springer, 2002. - 431 p.
6. Haile J. M. Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods. - 3 edit. - New York: Wiley-Interscience, 2002. - 431 p.
7. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. - 2 edit. - Denmark: Department of Chemistry, University of Southern Denmark, 2017. - 583 p.
8. Landau D. P., Binder K. A. Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. - 2 edit. - Cambridge: Cambridge University Press, 2014. - 332 p.
9. Lepr S. Thermal transport in low dimensions: from statistical physics to nanoscale heat transfer. - 2 edit. - Singapore: World Scientific Publishing, 2016. - 921 с.
10. Leemis M., Park S. K. Discrete-Event Simulation: A First Course. - 2 edit. - New Jersey: Springer, 2016. - 484 p.
11. Lewis R. M., Miller W. F. Monte Carlo Methods for Particle Transport. - 2 edit. - Boca Raton, Florida: CRC Press, 2021. - 285 p.
12. Miller W. H Classical and Quantum Dynamics: From Classical Paths to Path Integrals. - 3 edit. - Berlin: Cambridge University Press, 2014. - 314 p.
13. Newman M. E. J., Barkema G. T. Monte Carlo Methods in Statistical Physics. - 2 edit. - Oxford: Oxford University Press, 1999. - 466 p.

14. Rapaport D. C. The Art of Molecular Dynamics Simulation. - 1 edit. - Cambridge: Cambridge University Press, 1997. - 414 p.
15. Krivtsov A. M. On Unsteady Heat Conduction in a Harmonic Crystal. [Электронный ресурс] // TM.SPBSTU.RU: [сайт] [2015]. URL: [http://tm.spbstu.ru/%D0%90.%D0%9C.\\_%D0%9A%D1%80%D0%B8%D0%B2%D1%86%D0%BE%D0%B2:%D0%98%D0%B7%D0%B1%D1%80%D0%B0%D0%BD%D0%BD%D1%8B%D0%B5\\_%D0%BF%D1%83%D0%B1%D0%BB%D0%B8%D0%BA%D0%B0%D1%86%D0%B8%D0%B8](http://tm.spbstu.ru/%D0%90.%D0%9C._%D0%9A%D1%80%D0%B8%D0%B2%D1%86%D0%BE%D0%B2:%D0%98%D0%B7%D0%B1%D1%80%D0%B0%D0%BD%D0%BD%D1%8B%D0%B5_%D0%BF%D1%83%D0%B1%D0%BB%D0%B8%D0%BA%D0%B0%D1%86%D0%B8%D0%B8)