

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

« ____ » _____ 2024 г.

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА

ДИНАМИКА ПРОСТЫХ И СЛОЖНЫХ РЕШЕТОК ПРИ СИЛОВОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

По направлению подготовки

01.03.03 «Механика и математическое моделирование»

Профиль

01.03.03_01 «Механика и математическое моделирование сред с микроструктурой»

Выполнил
студент гр.5030103/00101

А. Д. Кочикян

Руководитель
Профессор ВШТМиМФ, д.ф.-м.н.

В. А. Кузькин

Санкт-Петербург

2024

**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 Кочикян Анастасия Дмитриевна, гр. 5030103/00101

1. Тема работы: Динамика простых и сложных решеток при силовом воздействии
2. Срок сдачи студентом законченной работы: 10.06.2024
3. Исходные данные по работе: справочная литература, актуальные научные публикации по теме работы
4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов): найти аналитическое выражение для поля перемещений в цепочке Гука при локальном силовом воздействии; найти аналитическое выражение для поля перемещений в бесконечной цепочке Гука с частицами разной массы при локальном периодическом силовом воздействии.
5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): отсутствует
6. Консультанты по работе: не предусмотрено
7. Дата выдачи задания 28.02.2024

Руководитель ВКР _____ Кузькин В.А., профессор ВШТМиМФ, д.ф.-м.н.

Задание принял к исполнению 28.02.2024

Студент _____ Кочикян А.Д.

РЕФЕРАТ

На 38 с., 20 рисунков

ЦЕПОЧКА ГУКА, КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА, СОБСТВЕННЫЕ ФОРМЫ, ДИСКРЕТНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ, ПОЛНАЯ ЭНЕРГИЯ СИСТЕМЫ

Целью данной работы является вывод уравнений, описывающих поле перемещений частиц гармонического кристалла в случае простой и сложной решетки, с последующим исследованием зависимости полной энергии системы от частоты вынуждающей силы.

Для получения искомым уравнений в случае простой решетки используется метод разложения решения в ряд по собственным формам. Решение для сложной решетки строится с использованием прямого и обратного дискретного преобразования Фурье. Подтверждает аналитически полученные результаты численное моделирование методом Верле (leap-frog).

ABSTRACT

38 pages, 20 figures

HOOKE CHAIN, CRYSTAL LATTICE, EIGENMODES, DISCRETE FOURIER TRANSFORM, TOTAL ENERGY OF THE SYSTEM

The aim of this study is to derive equations that describe the displacement field of particles in a harmonic crystal, both for simple and complex lattices. We will then investigate the dependence of the total energy in the system on the frequency of the external driving force.

To obtain the desired equations for a simple lattice, we use the method of decomposing the solution into a series of its own forms. For a complex lattice, the solution is constructed using the forward and inverse discrete Fourier transforms. The analytical results are confirmed by numerical simulations using the Verle method.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	5
ГЛАВА 1. ДИНАМИКА ПРОСТОЙ РЕШЕТКИ ПРИ СИЛОВОМ ВОЗДЕЙСТВИИ.....	6
1.1.Однородная цепочка Гука	6
1.2.Анализ результатов.....	8
1.3.Исследование поведения энергии при силовом воздействии	12
ГЛАВА 2. ДИНАМИКА СЛОЖНОЙ РЕШЕТКИ ПРИ СИЛОВОМ ВОЗДЕЙСТВИИ.....	18
2.1.Цепочка с чередующимися частицами двух видов	18
2.2.Анализ результатов.....	24
2.3.Исследование поведения энергии при силовом воздействии	27
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	36
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ	37

ВВЕДЕНИЕ

Одним из главных вопросов в инженерной сфере является отклик какой-либо конструкции на внешнее воздействие. В настоящее время фокус внимания сместился с макроуровня на микро, поэтому исследование поведения структуры материала при силовом воздействии является актуальной и практически полезной задачей. В современном мире особое внимание уделяется материалам с кристаллической структурой.

Основным свойством кристаллического состояния вещества, отличающим его от жидкого, газообразного и аморфного, является наличие упорядоченного и симметричного расположения атомов в пространстве. Такая правильная структура вещества называется кристаллической решеткой. Существует множество конфигураций решеток, и все они обладают уникальными свойствами, подробно описанными в [2, 6]. Самой простой и часто применяемой в расчетах моделью кристаллической решетки является одномерная цепочка, состоящая из атомов одного вида. Механика такой модели исследуется во множестве научных трудов [3 – 5, 7, 10, 11]. Усложненные модели, такие как гармонический кристалл на упругом основании и цепочка с частицами двух сортов, соединенными пружинками с разной жесткостью, рассматриваются в работах [9, 13] и [14].

Понимание того, как система отреагирует на гармоническое возбуждение, является ключом к описанию ее поведения при любой периодической нагрузке. Поэтому в настоящей работе будут рассматриваться простая решетка, представляющая собой однородную цепочку Гука, и сложная, являющаяся цепочкой, состоящей из чередующихся частиц двух видов, при силовом гармоническом воздействии.

ГЛАВА 1. ДИНАМИКА ПРОСТОЙ РЕШЕТКИ ПРИ СИЛОВОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

1.1. Однородная цепочка Гука

В настоящей главе исследуется поведение простой решетки при силовом воздействии. За математическую модель в данном случае целесообразно принять полубесконечную Цепочку Гука с одинаковыми частицами. Как изображено на рисунке 1.1, постановка задачи представляет собой цепочку, состоящую из N элементарных ячеек, которыми являются сами частицы. В роли граничных условий выступают запрет на перемещение нулевой частицы и вызывающая колебания гармоническая сила, приложенная к последней частице.



Рисунок 1.1– Постановка задачи для простой решетки

Целью данного параграфа является вывод аналитических уравнений, описывающих поле перемещений одинаковых частиц цепочки Гука в любой момент времени.

Уравнения движения данной системы имеют вид:

$$\begin{cases} u_0 = 0 \\ m\ddot{u}_n = k(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + \delta_N F \sin(\omega t) \end{cases} \quad (1.1)$$

где m – масса частицы;

u_n – перемещение частицы с номером n ;

k – жесткость пружины;

$\delta_N = 1$ при $n = N$, $\delta_N = 0$ при $n \neq N$, $n = 0, 1, \dots, N$.

Начальные условия задачи являются нулевыми:

$$u_n(0) = 0; \dot{u}_n(0) = 0. \quad (1.2)$$

При такой постановке удобно использовать метод, описанный в статье [13], заключающийся в представлении решения через ряд собственных форм. Выражения для них рассчитываются исходя из граничных условий:

$$u_n = \sum_{j=0}^N \varphi_j(t) \sin\left(\frac{\pi(2j+1)n}{2N+1}\right), \quad (1.3)$$

Решение (1.3) подставляется в систему (1.1). Затем каждое уравнение умножается на $\sin\left(\frac{\pi(2s+1)n}{2N+1}\right)$. Далее производится суммирование по числу частиц $n = 0, \dots, N$.

Таким образом, из системы связанных дифференциальных уравнений относительно u_n получился набор независимых уравнений одного вида относительно φ_j , $j = 0, \dots, N$:

$$\ddot{\varphi}_j + \Omega_j^2 \varphi_j = \frac{\alpha_j}{\beta_j} F \sin(\omega t), \quad (1.4)$$

$$\text{где } \Omega_j^2 = \frac{4k}{m} \sin^2\left(\frac{\pi(2j+1)}{2(2N+1)}\right);$$

$$\alpha_j = \sum_{n=0}^N \sin\left(\frac{\pi(2j+1)n}{2N+1}\right)^2;$$

$$\beta_j = \frac{F}{m} \sin\left(\frac{\pi(2j+1)N}{2N+1}\right).$$

Вывод формулы (1.4) основывается на ортогональности собственных форм $\sum_{n=0}^N \sin\left(\frac{\pi(2j+1)n}{2N+1}\right) \sin\left(\frac{\pi(2s+1)n}{2N+1}\right) = \alpha_j \delta_{js}$. [8 с. 29]

Начальные условия для φ_j являются нулевыми. В этом можно убедиться, если провести вышеупомянутые преобразования над начальными условиями (1.2).

Решение уравнения (1.4) имеет вид:

$$\varphi_j = \frac{\beta_j \omega}{\alpha_j (\Omega_j^2 - \omega^2)} \left(\frac{\sin(\omega t)}{\omega} - \frac{\sin(\Omega_j t)}{\Omega_j} \right). \quad (1.5)$$

Подстановка полученного выражения в формулу (1.3), связывающую перемещения частиц и собственные формы, дает искомое решение исходной задачи:

$$u_n = \sum_{j=0}^N \frac{\beta_j \omega}{\alpha_j (\Omega_j^2 - \omega^2)} \left(\frac{\sin(\omega t)}{\omega} - \frac{\sin(\Omega_j t)}{\Omega_j} \right) \sin \left(\frac{\pi(2j+1)n}{2N+1} \right). \quad (1.6)$$

Таким образом были получены формулы, способные описать перемещение каждой частицы цепочки Гука в любой момент времени при смешанных граничных условиях: при закреплении нулевой частицы и силовом гармоническом воздействии на последнюю частицу.

1.2. Анализ результатов

В настоящем параграфе представлен сравнительный анализ двух видов решения: аналитического (1.6) и численного, подробно описанного ниже.

На рисунке 1.2 представлена визуализация решения (1.6), выполненная на языке Matlab, для цепочки Гука с частицами равной массы при смешанных граничных условиях. Частота возбуждающей силы равна $\omega = 0.5 \sqrt{\frac{k}{m}}$, множитель силы $F = 1$, жесткость пружины $k = 1$, масса частицы $m = 1$.

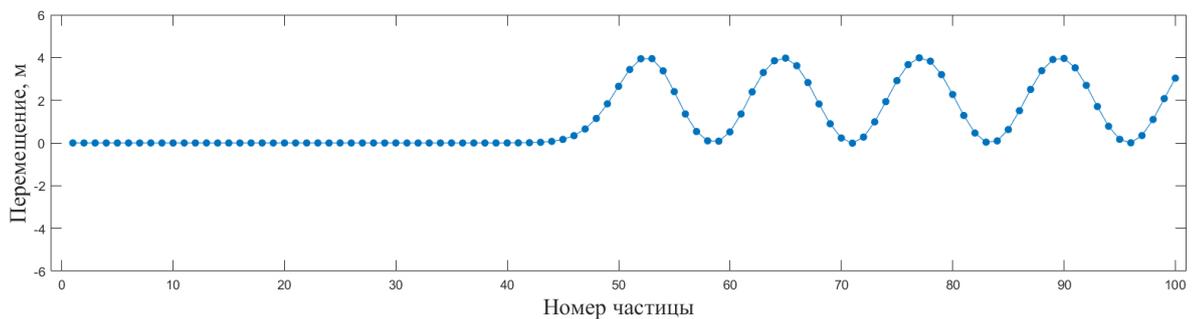


Рисунок 1.2 – Аналитическое решение для цепочки Гука с одинаковыми массами

Для проверки корректности полученных выражений было проведено сравнение аналитического решения с численным, полученным методом leap-frog

[16]. Данный метод является явным, в ходе решения значение функции на следующем шаге интегрирования напрямую вычисляются на основе известных значений, полученных на предыдущих шагах. Метод имеет второй порядок точности, а также является симплектическим.

Уравнения движения для численного интегрирования:

$$\begin{cases} \dot{m} = F \\ \dot{u} = v \end{cases}, \quad (1.7)$$

где m – масса частицы;

u – перемещение частицы;

v – скорость частицы;

F – сила действующая на частицу

Конечно-разностная аппроксимация:

$$\begin{aligned} v_{i+1} &= v_i + \frac{F_i}{m} \Delta t, \\ u_{i+1} &= u_i + v_{i+1} \Delta t \end{aligned}, \quad (1.8)$$

где v_i, u_i – скорость и перемещение частицы в данный момент времени;

v_{i+1}, u_{i+1} – скорость и перемещение частицы в следующий момент времени;

F_i – сила в настоящий момент времени;

Δt – шаг по времени;

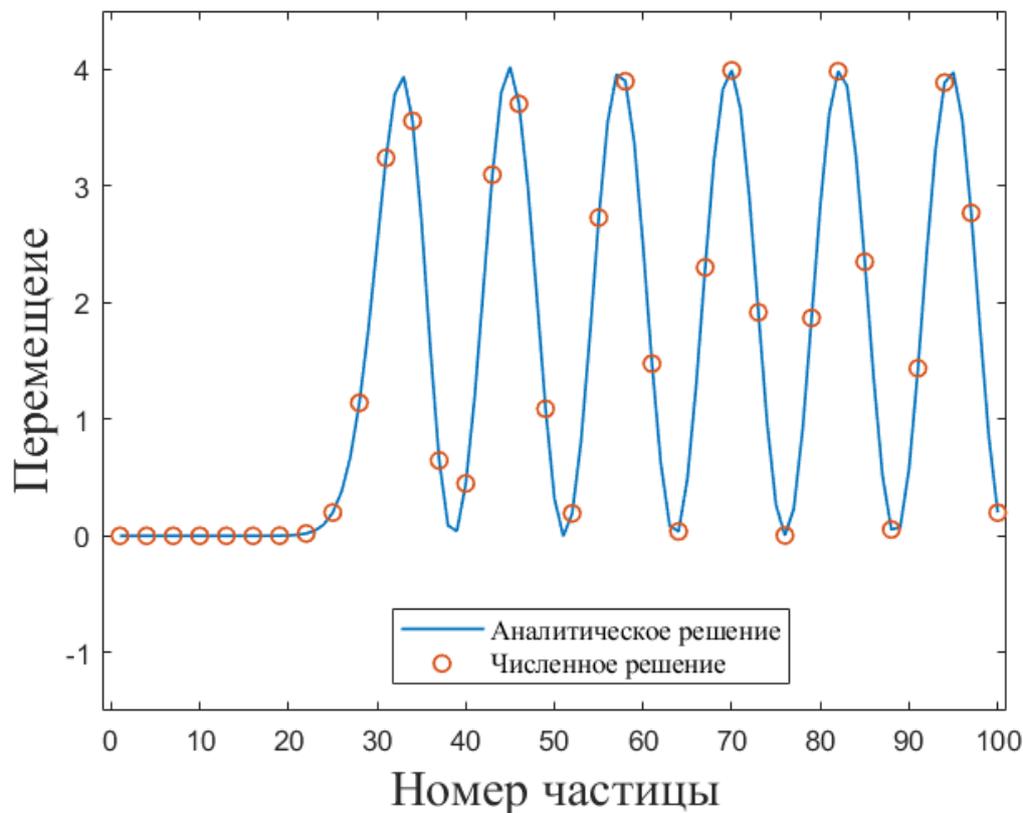


Рисунок 1.3 – Визуализация численного и аналитического решения для цепочки Гука с одинаковыми массами

На рисунке 1.3 представлена конфигурация цепочки Гука в момент времени $t = 90$. Численные расчеты проводились при следующих значениях параметров: $\Delta t = 0.01, F = 1, m = 1, k = 1, \omega = 0.5, N = 100$. Как видно из графика, численное решение совпадает с аналитическим. Оценим разницу между решениями, для этого рассмотрим относительную погрешность.

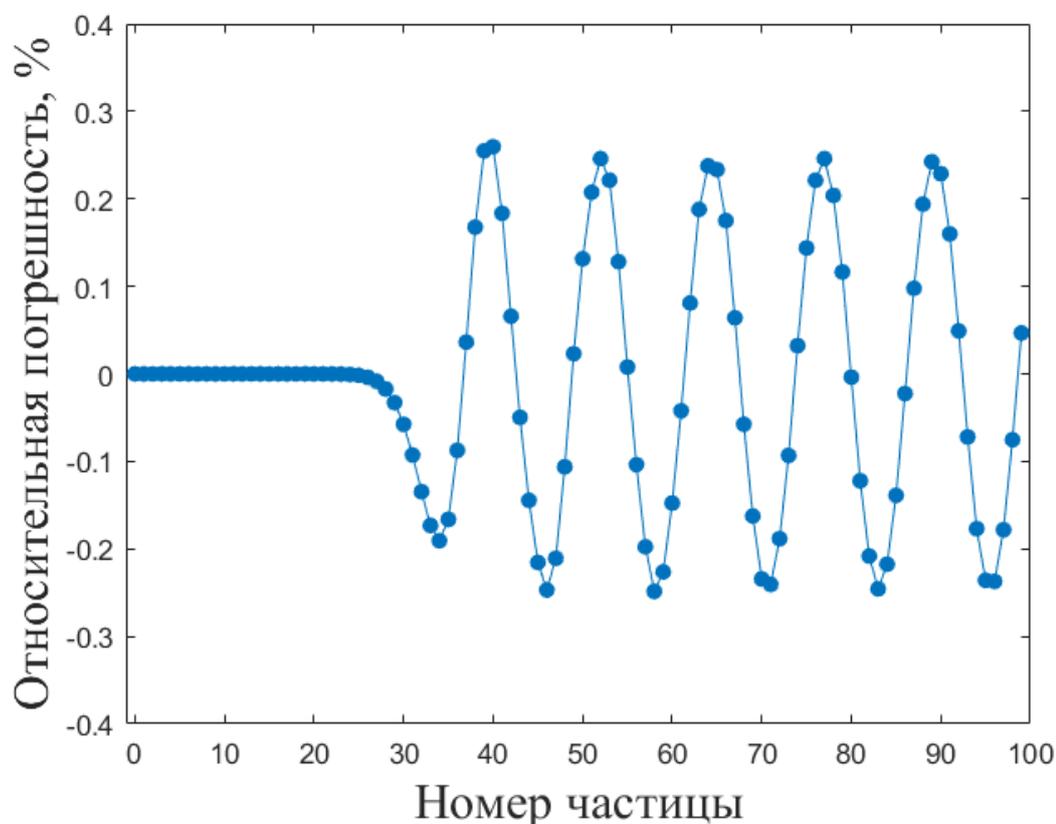


Рисунок 1.4 – Относительная погрешность для цепочки Гука с одинаковыми массами в момент времени $t = 70$ при шаге интегрирования $\Delta t = 0.01$

Относительная погрешность, представленная на рисунке 1.4, показывает, что аналитическое решение близко к численному, так как максимальное её значение в данный момент времени 0.26%.

Для определения природы возникающих отклонений был проведен численный расчет при шаге интегрирования $\Delta t = 0.005$. Результат представлен на рисунке 1.5.

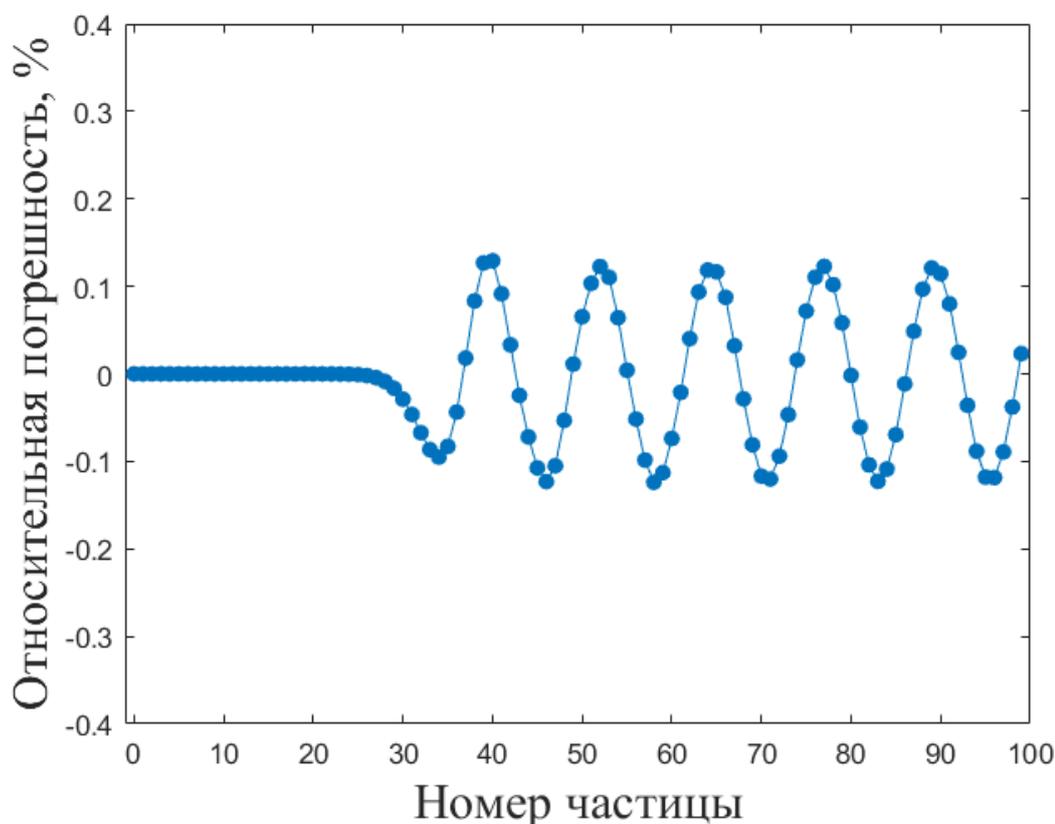


Рисунок 1.5 – Относительная погрешность для цепочки Гука с одинаковыми массами в момент времени $t = 70$ при шаге интегрирования $\Delta t = 0.005$

Как можно заметить из рисунков 1.4 и 1.5 относительная погрешность падает при уменьшении шага по времени, так как на данном графике максимальное её значение равно 0.13%. Из чего можно сделать вывод, что аналитические выражения корректны. Погрешность возникает из-за накопления ошибки при численном интегрировании.

1.3. Исследование поведения энергии при силовом воздействии

В данном параграфе будет освещаться тема зависимости энергии от частоты возбуждающей силы. Необходимо получить дисперсионное соотношение для задачи, описанной в параграфе 1.1.

Для этого подставим в уравнения движения (1.1) решение вида:

$$u_n = Ae^{i(\Omega t + pna)}, \quad (1.9)$$

где A – амплитуда колебаний;

Ω – собственная частота;

p – волновое число;

n – номер частицы;

a – длина недеформированной пружинки, соединяющей частицы.

Выражение (1.9) называется волновым уравнением и позволяет легко осуществить переход от дифференциального уравнения (1.1) к алгебраическому:

$$mi^2\Omega^2 = k(e^{ipa} - 2 + e^{-ipa}). \quad (1.10)$$

Решив (1.10), найдем выражение для спектра собственных частот, называемым дисперсионным соотношением:

$$\Omega = 2 \sqrt{\frac{k}{m}} \sin \frac{pa}{2}. \quad (1.11)$$

На рисунке 1.6 изображена дисперсионная кривая в первой четверти, так как в остальных квадрантах зависимость собственной частоты от волнового числа будет вести себя таким же образом.

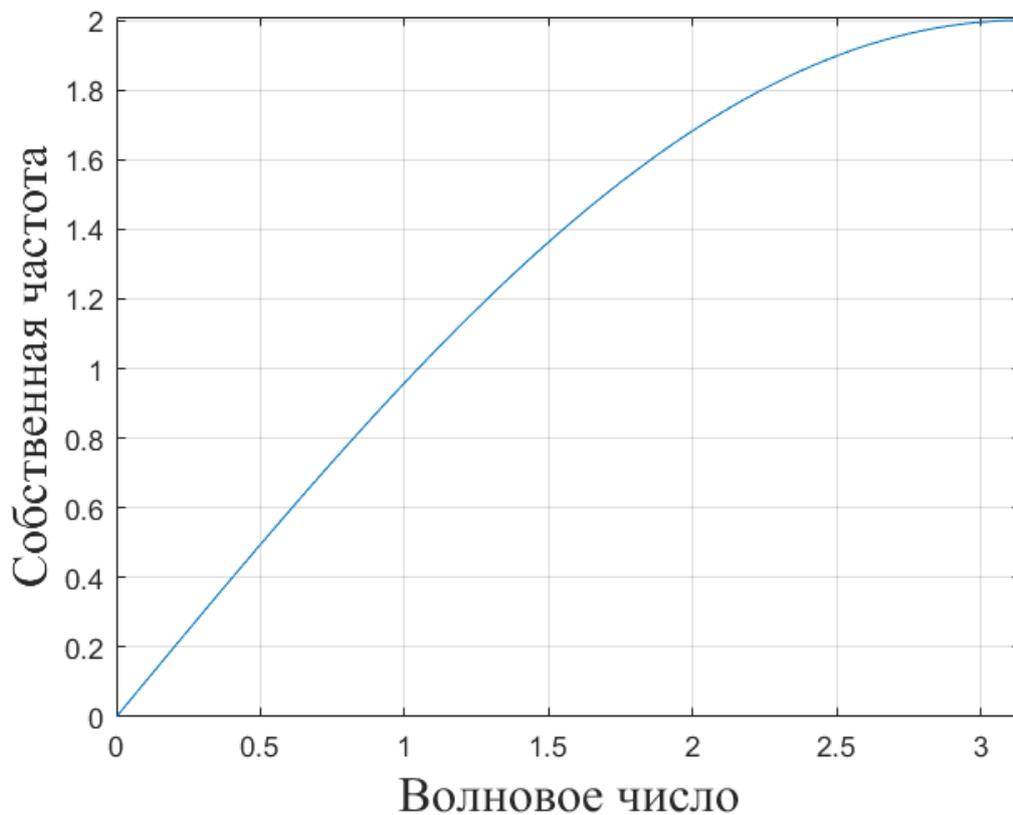


Рисунок 1.6 – Дисперсионная кривая для цепочки Гука

Следующим шагом является получение выражения для расчета полной энергии системы.

Кинетическая энергия частицы с номером n :

$$K_n = \frac{mv_n^2}{2}, \quad (1.12)$$

где v_n - скорость n -ой частицы;

m – масса частицы.

Деформация связи:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n+\frac{1}{2}} &= u_{n+1} - u_n \\ \varepsilon_{n-\frac{1}{2}} &= u_{n-1} - u_n \end{aligned} \quad (1.13)$$

Потенциальная энергия на частицу с номером n :

$$\Pi_n = \frac{k}{4} \left(\varepsilon_{n+\frac{1}{2}}^2 + \varepsilon_{n-\frac{1}{2}}^2 \right). \quad (1.14)$$

Полная энергия на частицу U_n представляет собой сумму кинетической (1.12) и потенциальной (1.14). Полной же энергий системы является выражение:

$$U = \sum_{n=0}^N U_n = \sum_{n=0}^N K_n + \Pi_n . \quad (1.15)$$

Целью данного параграфа является изучения поведения полной энергии системы в зависимости от частоты возбуждающей силы ω , значения которой соответствуют значениям из спектра собственных частот $\Omega \in (0; 2)$ (см. рисунок 1.6).

Согласно статье [15] полная энергия полубесконечной цепочки Гука при гармоническом нагружении на больших временах может быть описана следующим выражением:

$$U = \frac{F^2 v^g(\omega) a t}{2 m v^s}, \quad (1.16)$$

где F – множитель силы;

$v^g(\omega) = v^s \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{4\omega_e^2}}$ – групповая скорость;

a – длина недеформированной пружинки, соединяющей частицы;

t – время;

$v^s = \omega_e a$ – скорость звука;

$\omega_e = \sqrt{\frac{k}{m}}$ – элементарная атомная частота.

В статье [13] описывается процесс отыскания выражения для полной энергии системы в случае бесконечной цепочки Гука на упругом основании с таким же видом нагружения. Ниже представлена формула, описывающая поведение энергии на больших временах:

$$U = \frac{F^2 \omega t}{2m \sqrt{(\omega^2 - \omega_{\min}^2)(\omega_{\max}^2 - \omega^2)}}, \quad (1.17)$$

где $\omega_{\min}^2 = \frac{K}{m}$;

$$\omega_{\max}^2 = \frac{4k+K}{m};$$

K – жесткость упругого основания.

Упростим формулу (1.7), приняв $K = 0$. В таком случае данное выражение будет соответствовать рассматриваемой задаче:

$$U = \frac{F^2 t}{2m \sqrt{\omega^2 - \frac{4k}{m}}}. \quad (1.18)$$

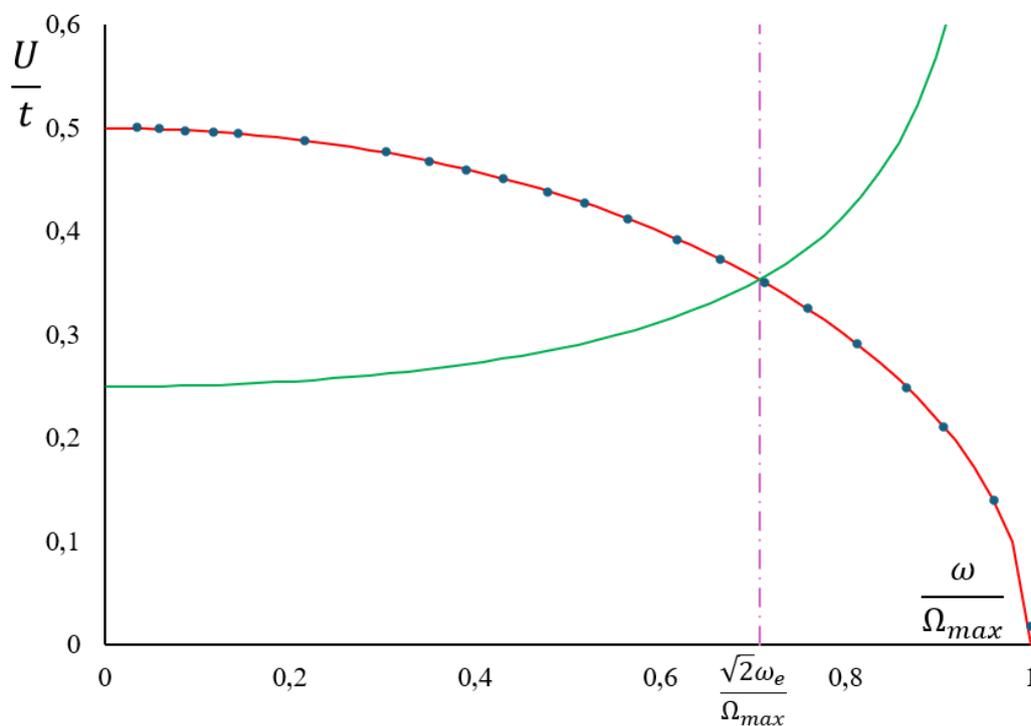


Рисунок 1.7 – Зависимость скорости роста энергии от частоты возбуждающей силы для полубесконечной и бесконечной цепочки Гука

На рисунке 1.7 изображены кривые, показывающие, как частота возбуждения ω из диапазона собственных частот Ω влияет на скорость роста энергии $\frac{U}{t}$. Красная кривая описывает скорость роста энергии в полубесконечной цепочке (1.16). Зеленой кривой соответствует случай бесконечной цепочки Гука (1.18). Результаты численного расчета, проведенного при параметрах: $N = 500, k = 1, m = 1, t = 500, \Delta t = 0.01, a = 1, F = 1$, для полубесконечной

цепочки представлены на графике синими точками. Как можно заметить из графика, численное решение совпадает с аналитическим с большой точностью. В диапазоне $\omega \in (0; \sqrt{2}\omega_e)$ в полубесконечную цепочку энергия подается быстрее, чем в бесконечную. На участке $\omega \in (\sqrt{2}\omega_e; \Omega_{\max})$ ситуация диаметрально противоположная – в бесконечную цепочку энергия поступает быстрее. Заметим, что на низких частотах энергия, подаваемая в полубесконечную цепь, примерно в 2 раза больше, чем энергия, подаваемая в бесконечную.

ГЛАВА 2. ДИНАМИКА СЛОЖНОЙ РЕШЕТКИ ПРИ СИЛОВОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

2.1. Цепочка с чередующимися частицами двух видов

В настоящей главе рассматривается динамика сложной решетки. За математическую модель в таком случае удобно принять цепочку с частицами, чередующимися по массе. Постановка задачи сформулирована следующим образом: элементарной ячейкой является пара частиц с различными массами, в начальный момент времени все частицы покоятся и их перемещения равны нулю, граничные условия являются периодическими, что означает равенство перемещений частиц с номерами 0 и N, на нулевую частицу действует внешняя гармоническая сила $F\sin(\omega t)$ (см. рисунок 2.1).

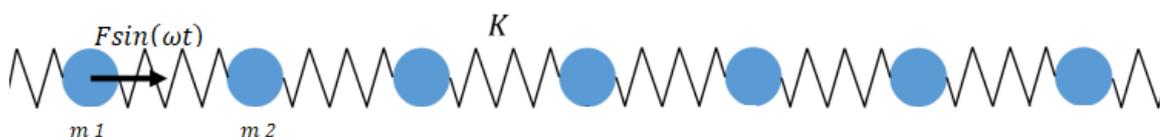


Рисунок 2.1 – Постановка задачи для сложной решетки

Уравнения движения в таком случае имеют вид:

$$\begin{cases} m_1 \ddot{x}_n = k(y_n - 2x_n + y_{n-1}) \\ m_2 \ddot{y}_n = k(x_{n+1} - 2y_n + x_n) + \delta_0 F \sin(\omega t) \end{cases} \quad (2.1)$$

где x_n – перемещение частицы массой m_1 с номером n ;

y_n – перемещение частицы массой m_2 с номером n ;

k – жесткость пружины;

$\delta_0 = 1$ при $n = 0$, $\delta_0 = 0$ при $n \neq 0$.

Для решения данной задачи удобно использовать дискретное преобразование Фурье. Важно отметить, что при такой постановке необходимо

проводить суммирование по количеству элементарных ячеек, а не по числу частиц.

Прямое и обратное дискретное преобразование Фурье определяются следующими выражениями:

$$\begin{aligned}\hat{u}_j &= \Phi(u_n) = \sum_{n=0}^{N-1} u_n e^{-i\frac{2\pi jn}{N}}, \\ u_n &= \Phi^{-1}(\hat{u}_j) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \hat{u}_j e^{i\frac{2\pi jn}{N}},\end{aligned}\quad (2.2)$$

где N – число элементарных ячеек;

\hat{u}_j – Фурье-образ исходной переменной.

Вычислим преобразование Фурье от системы (2.1), учтем, что $\Phi(\delta_0) = 1$, так же используем свойство:

$$\begin{aligned}\Phi(u_{n-1}) &= \Phi(u_n) e^{-i\frac{2\pi j}{N}} \\ \Phi(u_{n+1}) &= \Phi(u_n) e^{i\frac{2\pi j}{N}}.\end{aligned}\quad (2.3)$$

Тогда система (2.1) примет вид:

$$\begin{cases} m_1 \ddot{\hat{x}}_j = -2k\hat{x}_j + k(\hat{y}_j + \hat{y}_j e^{-i\frac{2\pi j}{N}}) \\ m_2 \ddot{\hat{y}}_j = k(\hat{x}_j e^{i\frac{2\pi j}{N}} + \hat{x}_j) - 2k\hat{y}_j + F\sin(\omega t) \end{cases}.\quad (2.4)$$

Для удобства последующих вычислений уравнения движения были записаны в матричном виде:

$$M\ddot{\hat{u}} + \Omega \hat{u} = f, \quad (2.5)$$

где $M = \begin{pmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{pmatrix}$ – матрица масс;

$\hat{u} = \begin{pmatrix} \hat{x}_j \\ \hat{y}_j \end{pmatrix}$ – столбец перемещений;

$$\Omega = \begin{pmatrix} 2k & -k\left(1 + e^{-i\frac{2\pi j}{N}}\right) \\ -k\left(1 + e^{i\frac{2\pi j}{N}}\right) & 2k \end{pmatrix} - \text{динамическая матрица;}$$

$$f = \begin{pmatrix} 0 \\ F\sin(\omega t) \end{pmatrix} - \text{столбец сил.}$$

В настоящий момент главной задачей является разделение дифференциальных уравнений. Для этого проводится следующее математическое преобразование: умножение системы (2.5) на обратную матрицу масс, из которой предварительно был извлечен квадратный корень.

$$M^{\frac{1}{2}}\ddot{\hat{u}} + M^{-\frac{1}{2}}\Omega M^{-\frac{1}{2}}M^{\frac{1}{2}}\hat{u} = M^{-\frac{1}{2}}f. \quad (2.6)$$

Данное действие позволило сформировать матрицу частот A и избавиться от множителя пред производной второго порядка, благодаря чему облегчается процесс отыскания решения дифференциального уравнения.

$$\ddot{\hat{U}} + A\hat{U} = F. \quad (2.7)$$

Матрица $A = M^{-\frac{1}{2}}\Omega M^{-\frac{1}{2}}$ является Эрмитовой, то есть транспонированная матрица A равна себе же комплексно-сопряженной. Для таких матриц, согласно учебному пособию [1], справедливо свойство:

$$A = P\Lambda P^H, \quad (2.8)$$

где P – матрица, столбцы которой являются собственными векторами матрицы A ;

P^H – эрмитово сопряженная матрица P ;

Λ – диагональная матрица, составленная из собственных чисел матрицы A .

Матрицы P и P^H должны быть унитарными – квадратными матрицами с комплексными элементами, то есть обладать следующим свойством:

$$PP^H = P^HP = E, \quad (2.9)$$

где E - квадратная матрица, компоненты которой, стоящие на главной диагонали, равны единице, остальные - нулю.

Чтобы составить матрицы P, P^H, Λ , необходимо найти собственные числа и векторы матрицы частот A . Алгоритм описан в пособии [1 с 27–29].

Собственные числа матрицы A :

$$\lambda_1 = \frac{k \left(m_1 + m_2 + \sqrt{4m_1m_2 \sin^2 \left(\frac{\pi j}{N} \right) + (m_1 + m_2)^2} \right)}{m_1 m_2}$$

$$\lambda_2 = \frac{k \left(m_1 + m_2 - \sqrt{4m_1m_2 \sin^2 \left(\frac{\pi j}{N} \right) + (m_1 + m_2)^2} \right)}{m_1 m_2}. \quad (2.10)$$

Собственные векторы матрицы A :

$$p_1 = \begin{pmatrix} \frac{2\sqrt{m_1 m_2} \cos \left(\frac{\pi j}{N} \right) e^{-i \frac{\pi j}{N}}}{\sqrt{4m_1 m_2 \cos^2 \left(\frac{\pi j}{N} \right) + \left(m_1 - m_2 + \sqrt{2m_1 m_2 \cos \left(\frac{2\pi j}{N} \right) + m_1^2 + m_2^2} \right)^2}} \\ \frac{m_1 - m_2 + \sqrt{2m_1 m_2 \cos \left(\frac{2\pi j}{N} \right) + m_1^2 + m_2^2}}{\sqrt{4m_1 m_2 \cos^2 \left(\frac{\pi j}{N} \right) + \left(m_1 - m_2 + \sqrt{2m_1 m_2 \cos \left(\frac{2\pi j}{N} \right) + m_1^2 + m_2^2} \right)^2}} \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

$$p_2 = \begin{pmatrix} \frac{2\sqrt{m_1 m_2} \cos \left(\frac{\pi j}{N} \right) e^{-i \frac{\pi j}{N}}}{\sqrt{4m_1 m_2 \cos^2 \left(\frac{\pi j}{N} \right) + \left(m_1 - m_2 - \sqrt{2m_1 m_2 \cos \left(\frac{2\pi j}{N} \right) + m_1^2 + m_2^2} \right)^2}} \\ \frac{m_1 - m_2 - \sqrt{2m_1 m_2 \cos \left(\frac{2\pi j}{N} \right) + m_1^2 + m_2^2}}{\sqrt{4m_1 m_2 \cos^2 \left(\frac{\pi j}{N} \right) + \left(m_1 - m_2 - \sqrt{2m_1 m_2 \cos \left(\frac{2\pi j}{N} \right) + m_1^2 + m_2^2} \right)^2}} \end{pmatrix}$$

Учитывая все вышесказанное, приведем систему (2.7) к виду:

$$\ddot{\hat{U}} + P\Lambda P^H \hat{U} = F. \quad (2.12)$$

$$P^H \ddot{\hat{U}} + P^H P \Lambda P^H \hat{U} = P^H F. \quad (2.13)$$

После умножения всего матричного уравнения слева на P^H , появляется возможность перейти к новым переменным:

$$\ddot{\hat{W}} + \Lambda \hat{W} = \Psi, \quad (2.14)$$

$$\text{где } \hat{W} = P^H \hat{U} = P^H M^{\frac{1}{2}} \hat{u};$$

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_{1j}^2 & 0 \\ 0 & \lambda_{2j}^2 \end{pmatrix};$$

$$\Psi = P^H M^{-\frac{1}{2}} f;$$

$$M^{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{m_1}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{m_2}} \end{pmatrix};$$

Система связанных дифференциальных уравнений (2.1) перешла в систему из двух видов независимых:

$$\begin{cases} \ddot{\hat{W}}_1 + \lambda_{1j}^2 \hat{W}_1 = \beta_{1j} \sin(\omega t) \\ \ddot{\hat{W}}_2 + \lambda_{2j}^2 \hat{W}_2 = \beta_{2j} \sin(\omega t) \end{cases}, \quad (2.15)$$

$$\text{Где } \Psi_1 = \beta_{1j} \sin(\omega t) = \frac{FP_{12}^H}{\sqrt{m_2}} \sin(\omega t);$$

$$\Psi_2 = \beta_{2j} \sin(\omega t) = \frac{FP_{22}^H}{\sqrt{m_2}} \sin(\omega t).$$

Начальные условия для данных переменных так же являются нулевыми. В таком случае решения дифференциальных уравнений (2.15) имеют вид:

$$\begin{cases} \widehat{w}_{1j} = \frac{\beta_{1j}\omega}{(\lambda_{1j}^2 + \omega^2)} \left(\frac{\sin(\omega t)}{\omega} - \frac{\sin(t\lambda_{1j})}{\lambda_{1j}} \right) \\ \widehat{w}_{2j} = \frac{\beta_{2j}\omega}{(\lambda_{2j}^2 + \omega^2)} \left(\frac{\sin(\omega t)}{\omega} - \frac{\sin(t\lambda_{2j})}{\lambda_{2j}} \right) \end{cases}. \quad (2.16)$$

Для перехода к исходным переменным - перемещениям частиц, необходимо повторить ранее произведенные математические операции в обратном порядке.

$$\widehat{w} = P^H \widehat{U} = P^H M^{\frac{1}{2}} \widehat{u}. \quad (2.17)$$

Следовательно, формула, описывающая связь перемещений с настоящими переменными имеет вид:

$$\widehat{u} = M^{-\frac{1}{2}} P \widehat{w}. \quad (2.18)$$

Таким образом, уравнения для перемещений частиц массой m_1 и m_2 соответственно принимают форму:

$$\begin{cases} \widehat{x}_j = \frac{\widehat{w}_{1j} P_{11} + \widehat{w}_{2j} P_{12}}{\sqrt{m_1}} \\ \widehat{y}_j = \frac{\widehat{w}_{1j} P_{21} + \widehat{w}_{2j} P_{22}}{\sqrt{m_2}} \end{cases}. \quad (2.19)$$

Последним шагом в решении данной задачи является вычисление обратного дискретного преобразования Фурье. Тогда искомое решение имеет вид:

$$\begin{cases} x_n = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\widehat{w}_{1j} p_{11} + \widehat{w}_{2j} p_{12}}{\sqrt{m_1}} e^{i \frac{2\pi j n}{N}} \\ y_n = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\widehat{w}_{1j} p_{21} + \widehat{w}_{2j} p_{22}}{\sqrt{m_2}} e^{i \frac{2\pi j n}{N}} \end{cases}. \quad (2.20)$$

Выражения (2.20) описывают перемещения частиц цепочки с чередующимися массами в каждый момент времени при периодических граничных условиях и силовом гармоническом воздействии. Наличие экспоненты в решение не означает, что решение имеет комплексную часть. В работе [14] строго доказано, что при вещественных начальных условиях поле перемещений цепочки, полученное с помощью дискретного преобразования Фурье, будет вещественным.

2.2. Анализ результатов

Данный параграф посвящен анализу полученных результатов: сравнению аналитического решения (2.20) с численным, описанным в предыдущей главе (1.17, 1.18).

На рисунке 2.2 представлена визуализация решения (2.20) для случая $m_1 = 2m_2$. Частота возбуждающей силы равна $\omega = 0.5 \sqrt{\frac{k}{m_2}}$, множитель силы $F = 1$, жесткость пружины $k = 1$.

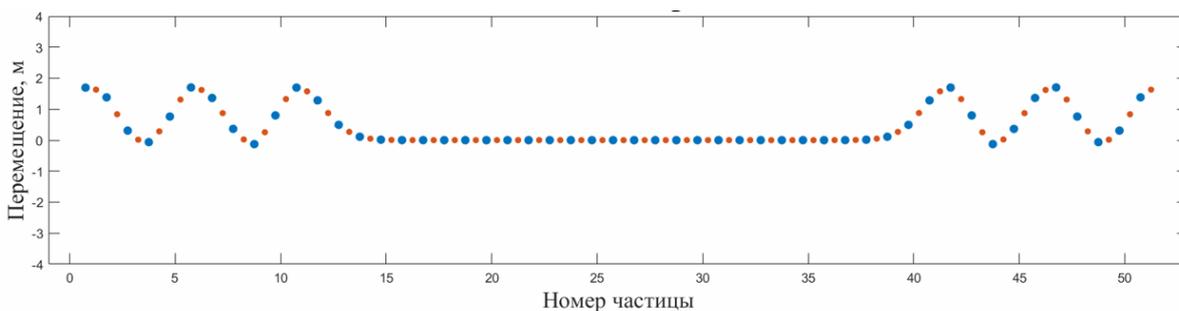


Рисунок 2.2 – Аналитическое решение для цепочки с чередующимися массами при периодических граничных условиях

Для данной задачи численное решение было проведено при параметрах: $\Delta t = 0.01$, $F = 1$, $m_1 = 2m_2$, $k = 1$, $\omega = 0.5$, $N = 100$. Конфигурация цепочки Гука в момент времени $t = 90$ приведена на рисунке 2.3.

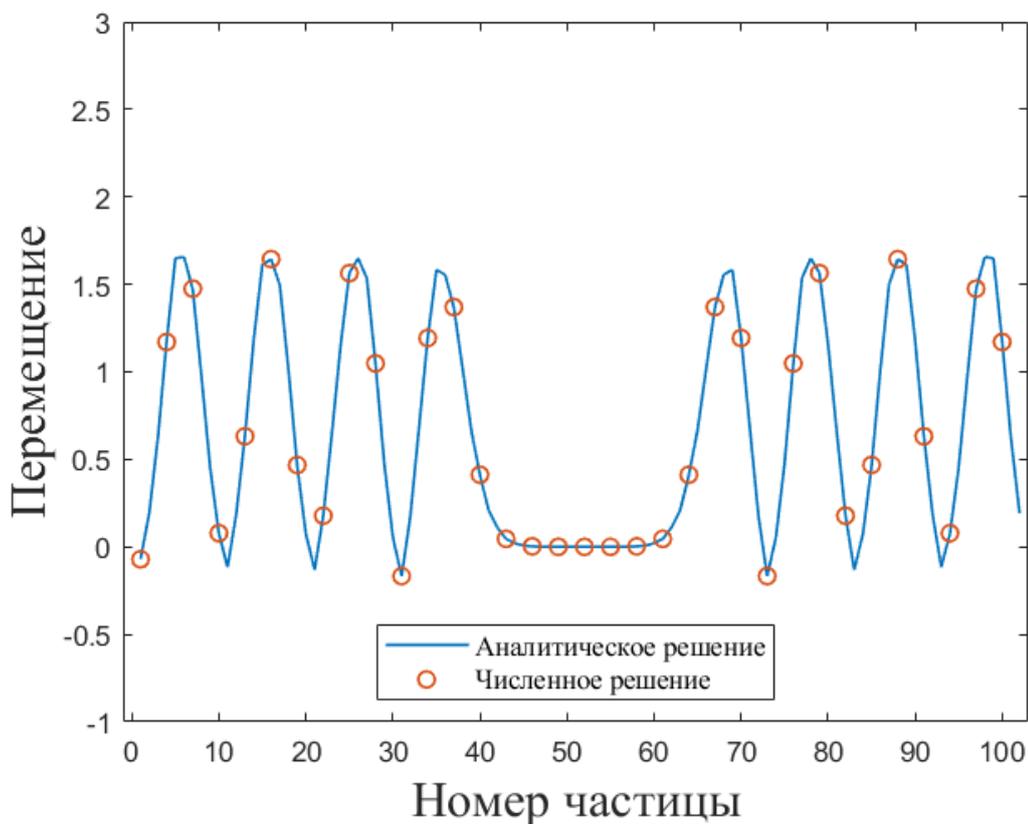


Рисунок 2.3 – Сравнение численного и аналитического решения для цепочки с чередующимися массами

Из графика, изображенного на рисунке 2.3, видно, что численное и аналитическое решения совпадают с большой точностью, что говорит о корректности выражения (2.20). Проведем оценку погрешности численного метода, рассмотрев изменение относительной погрешности при варьировании временного шага.

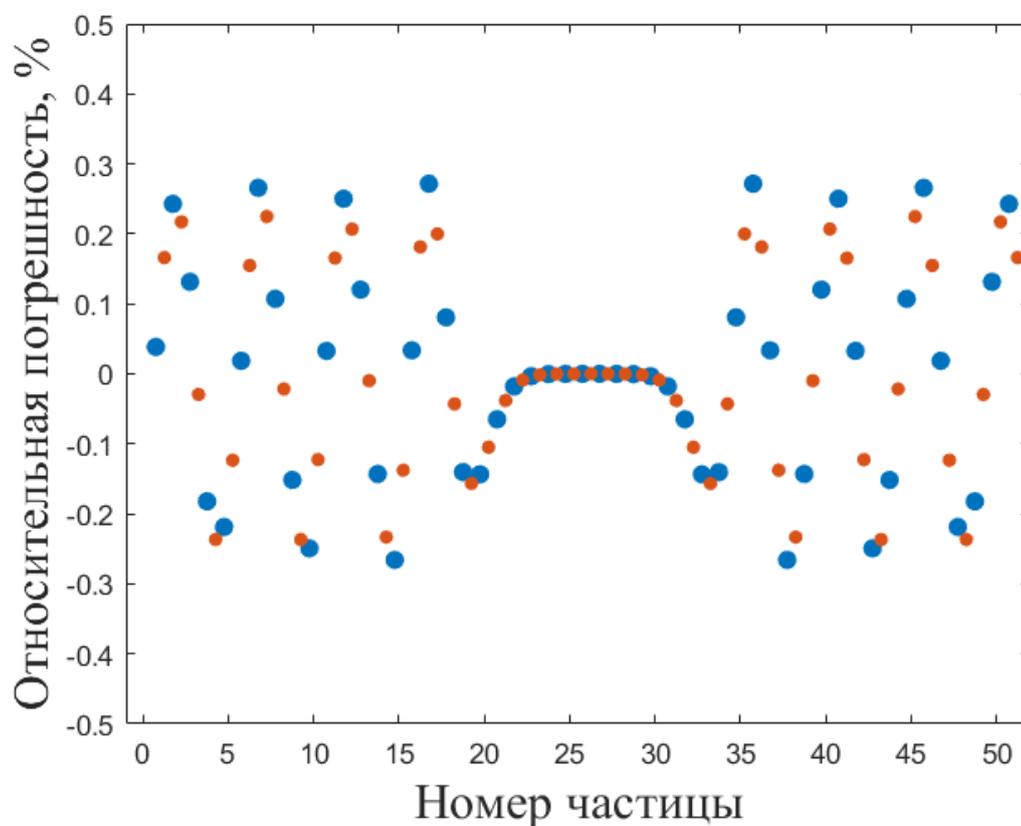


Рисунок 2.4 – Относительная погрешность между численным и аналитическим решением в момент времени $t = 50$ при шаге интегрирования $\Delta t = 0.01$

На рисунке 2.4 приведена относительная погрешность между численным и аналитическим решением. Как видно из данного графика максимальная погрешность составляет 0.27%. Было проведено исследование, как изменяется максимальное значение относительной погрешности при уменьшении шага по времени.

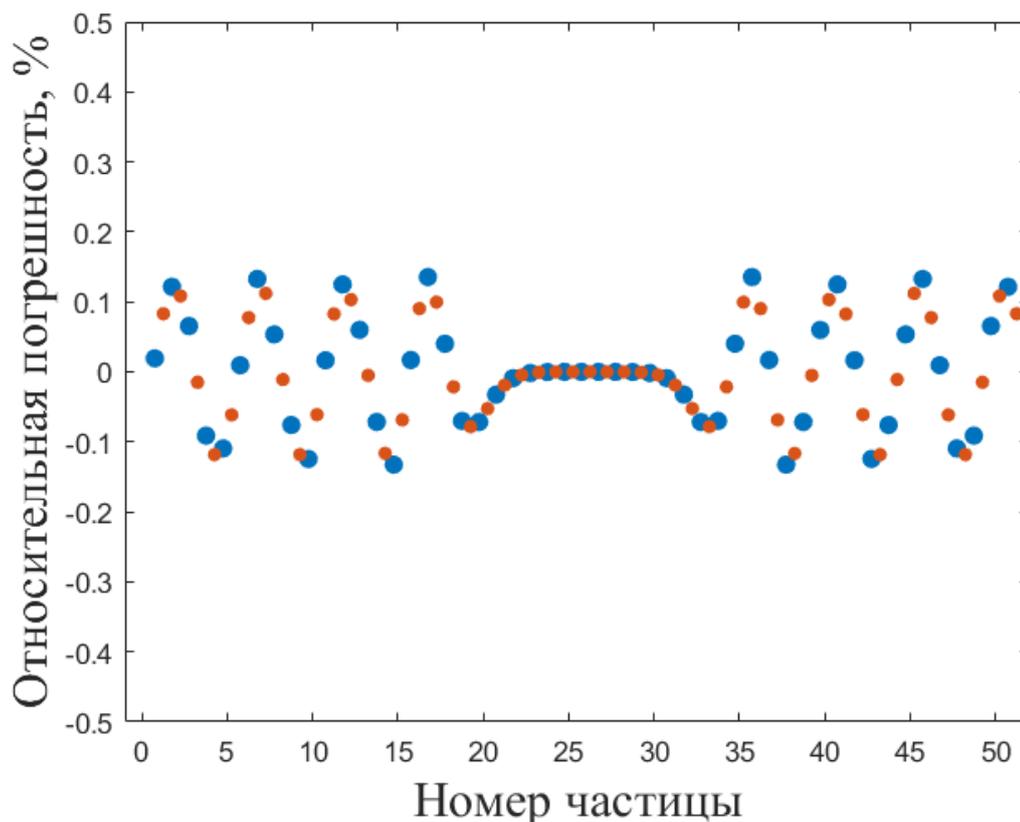


Рисунок 2.5 – Относительная погрешность между численным и аналитическим решением в момент времени $t = 50$ при шаге интегрирования $\Delta t = 0.005$

Рисунок 2.5 иллюстрирует, что при уменьшении шага по времени относительная погрешность тоже уменьшается, так как при шаге интегрирования $dt = 0.005$ максимальное значение относительной погрешности составляет 0.14%. Из всего вышесказанного можно сделать вывод, что аналитически полученные выражения верны, а погрешность возникает из-за накопления ошибки при численном интегрировании.

2.3. Исследование поведения энергии при силовом воздействии

В данном параграфе рассмотрена зависимость полной энергии цепочки с чередующимися частицами разных масс от частоты возбуждающей силы.

По аналогии с параграфом 1.3 получим дисперсионное соотношение, для этого подставим выражение (1.9) в уравнения движения (2.1):

$$\Omega_1 = \sqrt{k \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) - k \sqrt{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 \left(\frac{pa}{2} \right)}{m_1 m_2}}}, \quad (2.21)$$

$$\Omega_2 = \sqrt{k \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) + k \sqrt{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 \left(\frac{pa}{2} \right)}{m_1 m_2}}}$$

где k – жесткость пружины;

m_1, m_2 – массы частиц;

p – волновое число;

a – расстояние между покоящимися частицами.

Дисперсионное соотношение (2.21) имеет два корня, следовательно каждому волновому числу p соответствуют две собственные частоты Ω_1 и Ω_2 .

На примере случая $m_1 = 2m_2$. рассмотрим дисперсионную кривую, представленную на рисунке 2.6.

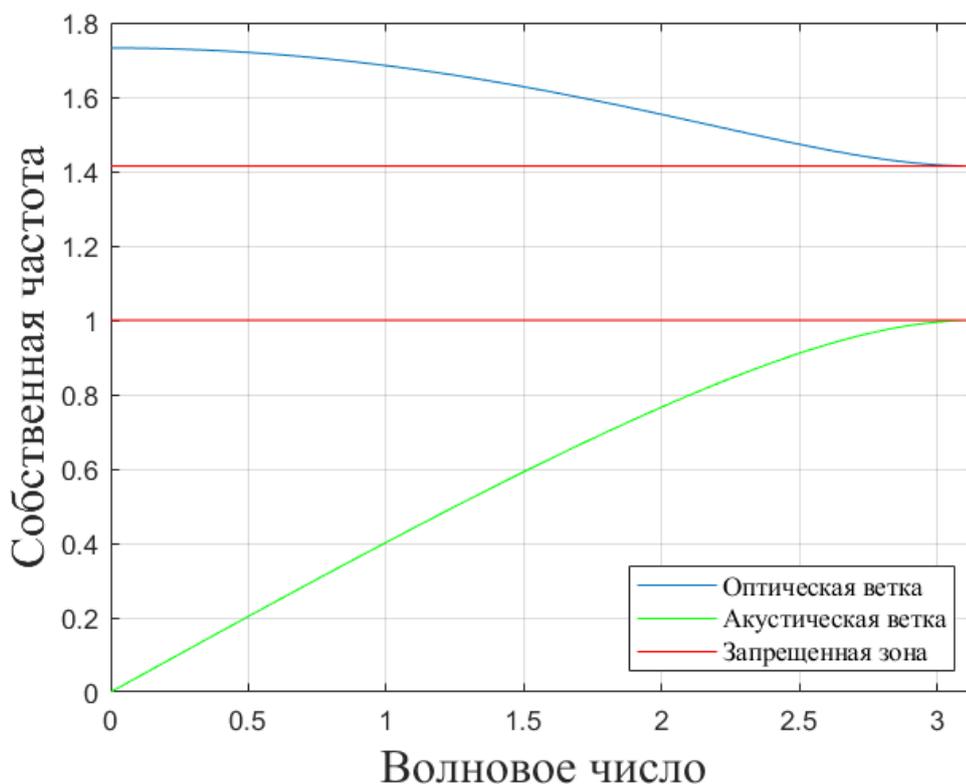


Рисунок 2.6 – Дисперсионная кривая для цепочки с чередующимися массами при $m_1 = 2m_2$

Ветвь, соответствующая дисперсионному соотношению Ω_2 , называется оптической, соотношению Ω_1 - акустической. Согласно лекциям [8 с. 275], частицы, колеблющиеся на частотах Ω_1 , двигаются в одной фазе. При частотах Ω_2 колебания происходят в противофазе. Введем обозначения: $\Omega_{1\min}$ и $\Omega_{1\max}$ – минимальное и максимальное значения из диапазона акустических частот, $\Omega_{2\min}$ и $\Omega_{2\max}$ – минимальное и максимальное значения из диапазона оптических частот.

Исследуем поведение энергии системы в зависимости от частоты возбуждающей силы, для это воспользуемся уравнениями (1.12–1.15) из параграфа 1.3. Скорость роста энергии системы в зависимости от частоты возмущающей силы для цепочки с чередующимися частицами, массы которых относятся друг к другу как $m_1 = 2m_2$, изображена на Рисунке 2.7.

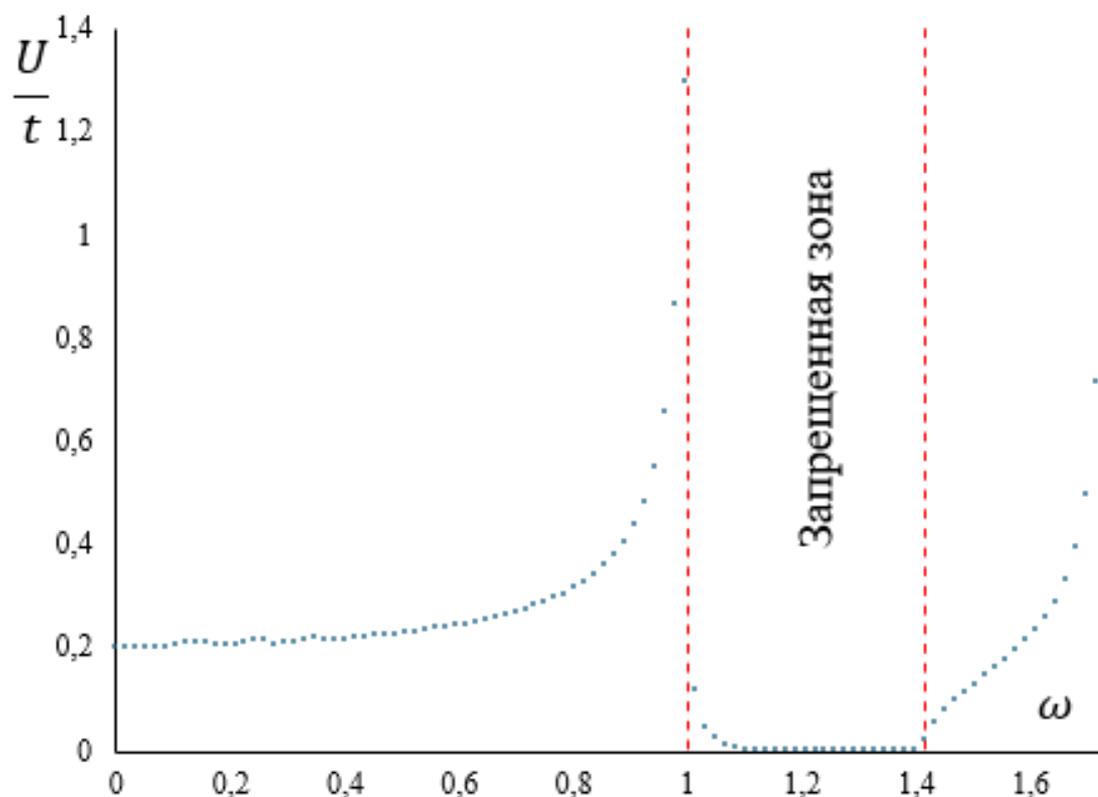


Рисунок 2.7 – Скорость роста энергии в зависимости от частоты возбуждения ω в случае $m_1 = 2m_2$

Расчет проводился при следующих параметрах: $N = 500, k = 1, F = 1, t = 400, \Delta t = 0.01$.

Как видно из рисунка 2.7, на участке, соответствующему диапазону акустических частот $\omega \in (\Omega_{1\min}; \Omega_{1\max})$, скорость роста энергии увеличивается. Следовательно, на данных частотах в систему закачивается энергия, причем, при приближении частоты возбуждающей силы ω к $\Omega_{1\max} = 1$, кривая устремляется в бесконечность, что говорит о приближении резонанса [12]. В начале следующего участка, называемом запрещенной зоной, $\frac{U}{t}$ резко падает, после чего перестает меняться. Колебания не распространяются вдоль всей цепочки, они сосредоточены около частицы, на которую действует сила. Поведение скорости роста энергии на последнем участке, соответствующему диапазону оптических частот $\omega \in (\Omega_{2\min}; \Omega_{2\max})$, совпадает с поведением на первом участке. Энергия снова закачивается в систему, и при $\omega = \Omega_{2\max} = \sqrt{3}$ наступает резонанс.

Данная задача интересна тем, что при разных отношениях масс вид дисперсионных кривых будет меняться. Для этого рассмотрим еще два случая: $m_1 = 1.5m_2$ и $m_1 = 5m_2$.

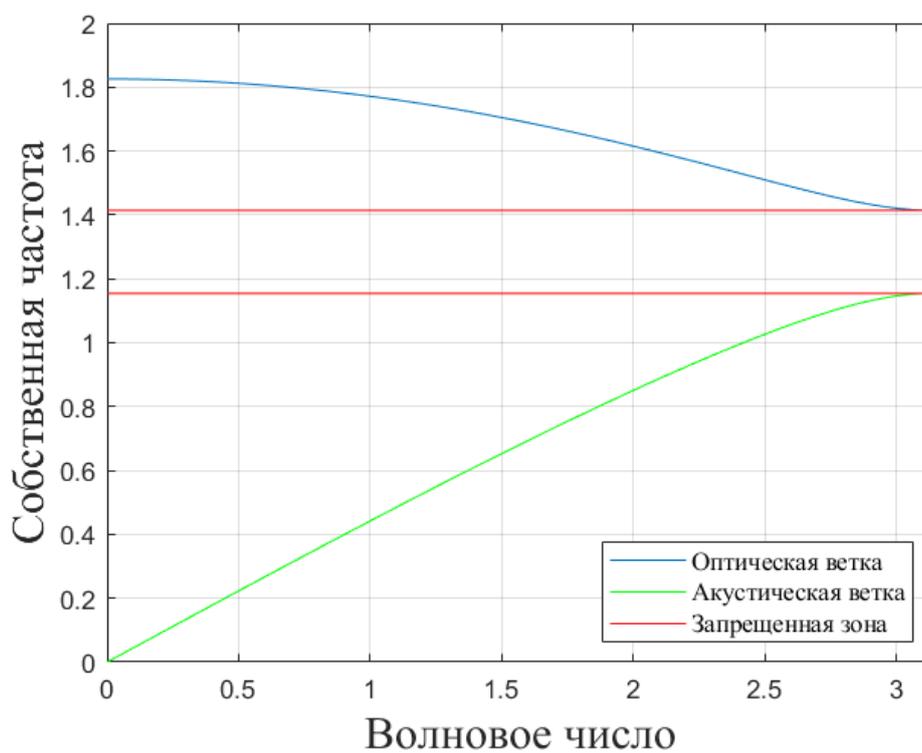


Рисунок 2.8 – Дисперсионная кривая для цепочки с чередующимися массами при $m_1 = 1.5m_2$

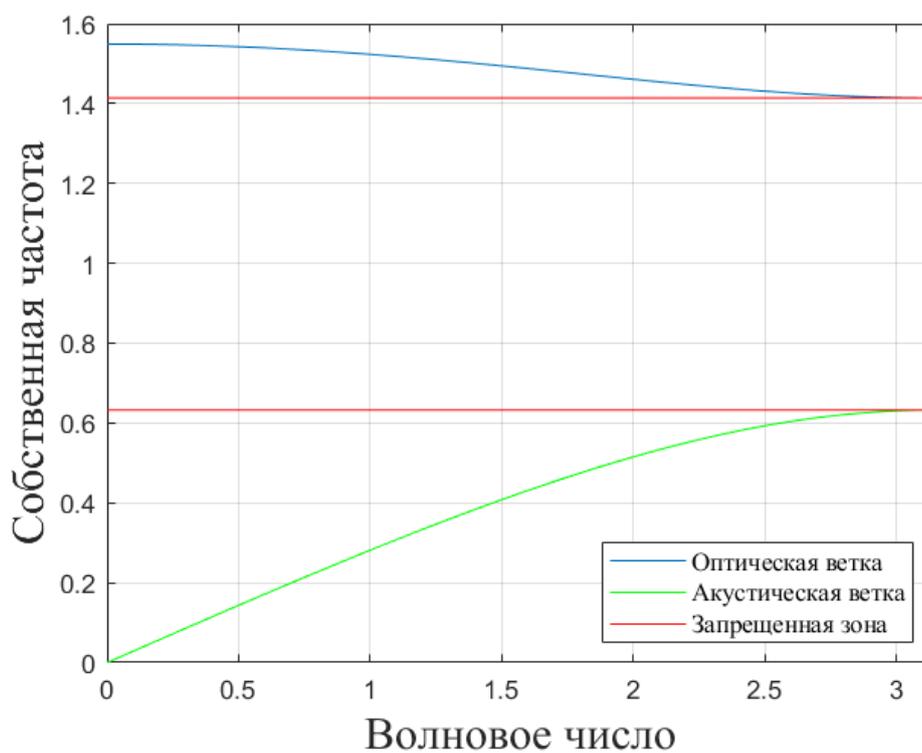


Рисунок 2.9 – Дисперсионная кривая для цепочки с чередующимися массами при $m_1 = 5m_2$

Изучив рисунки 2.6, 2.8, 2.9, можем заметить несколько тенденций. Во-первых, ширина запрещенной зоны увеличивается с ростом отношения масс друг к другу. Во-вторых, $\Omega_{1\min}$ и $\Omega_{2\min}$ остаются неизменными. В-третьих, значения $\Omega_{1\max}$ и $\Omega_{2\max}$ обратно пропорциональны отношениям масс, то есть в случае $m_1 = 5m_2$ максимальные значения из диапазонов акустических и оптических частот меньше, чем для соответствующих значений в случаях $m_1 = 2m_2$ и $m_1 = 1.5m_2$.

Рассмотрим изменение скорости роста энергии для цепочек с отношениями масс $m_1 = 1.5m_2$ и $m_1 = 5m_2$.

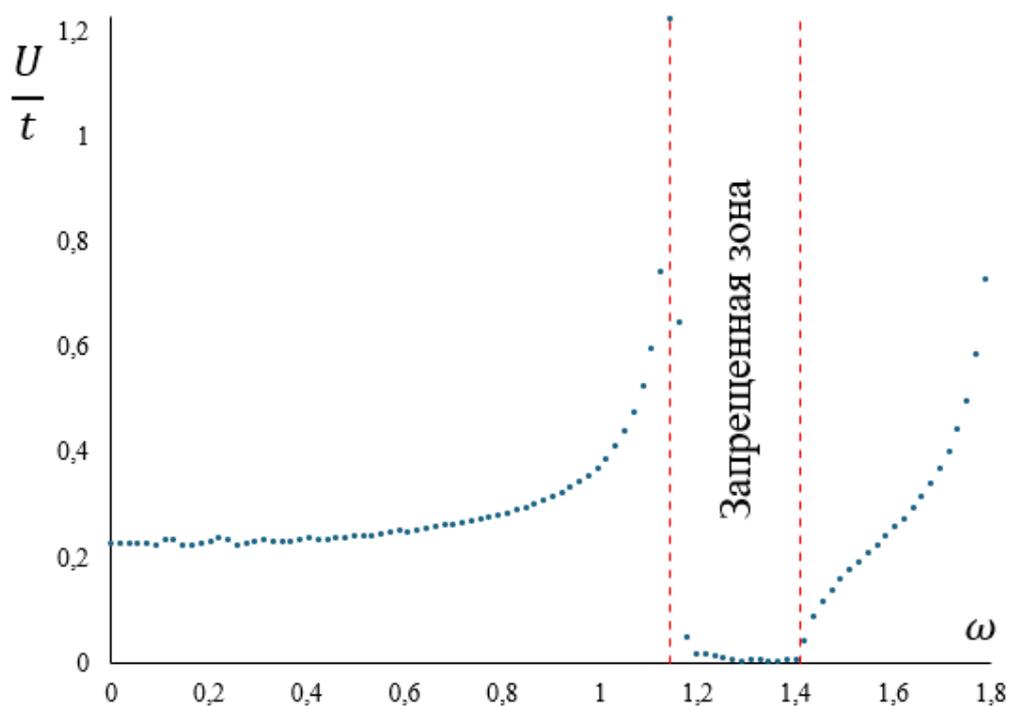


Рисунок 2.10 - Скорость роста энергии в зависимости от частоты возбуждения ω для случая $m_1 = 1.5m_2$

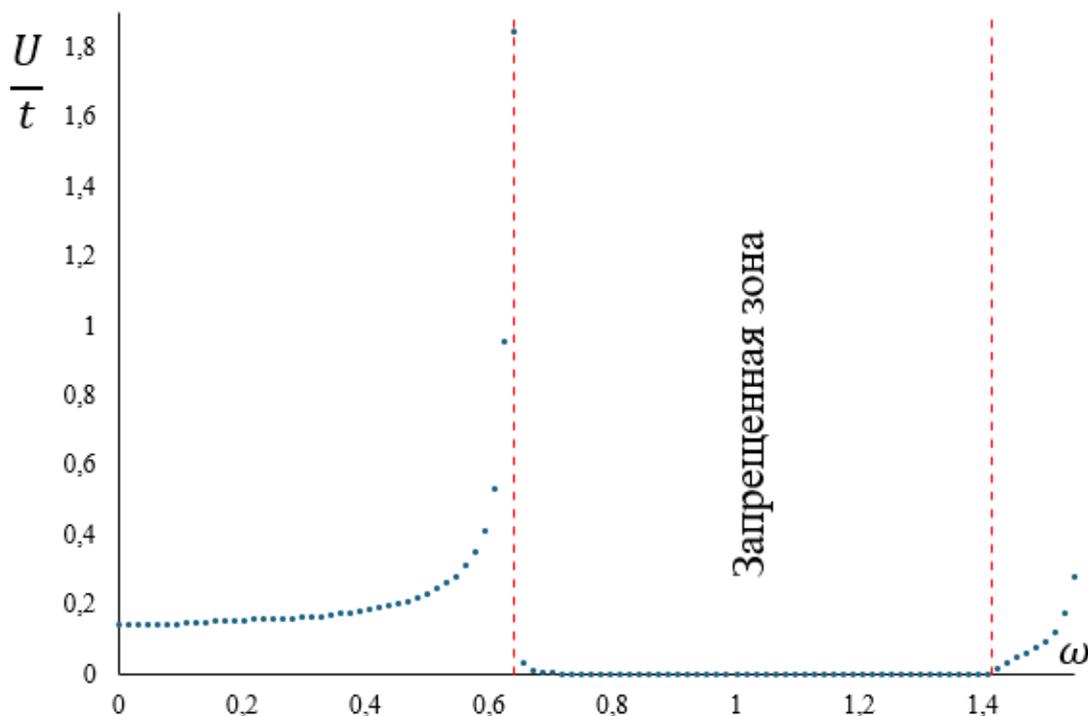


Рисунок 2.11 - Скорость роста энергии в зависимости от частоты возбуждения ω для случая $m_1 = 5m_2$

Кривые, изображенные на рисунках 2.10 и 2.11, описывающие скорость роста полной энергии системы при отношениях масс $\frac{m_1}{m_2} = 1.5; 5$, ведут себя таким же образом, как и кривая в случае $m_1 = 2m_2$ (см рисунок 2.7). На участках $\omega \in (\Omega_{1\min}; \Omega_{1\max}) \cup (\Omega_{2\min}; \Omega_{2\max})$ скорость роста энергии $\frac{U}{t}$ возрастает до бесконечности, в запрещенной зоне – падает и не изменяется.

На рисунках 2.12 и 2.13 представлены кривые $\frac{U}{t}$ для отношений масс частиц $\frac{m_1}{m_2} = 1.5; 2; 5$ в диапазоне акустических и оптических частот соответственно.

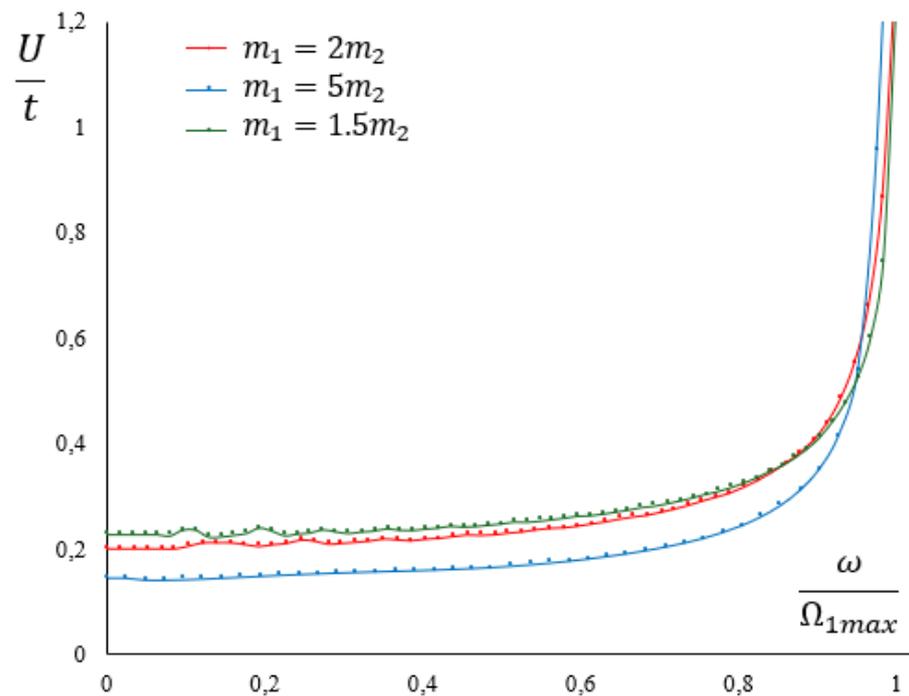


Рисунок 2.12 – Зависимость скорости роста полной энергии цепочки с чередующимися частицами при различных отношениях их масс от частоты возбуждающей силы $\omega \in (\Omega_{1min}; \Omega_{1max})$

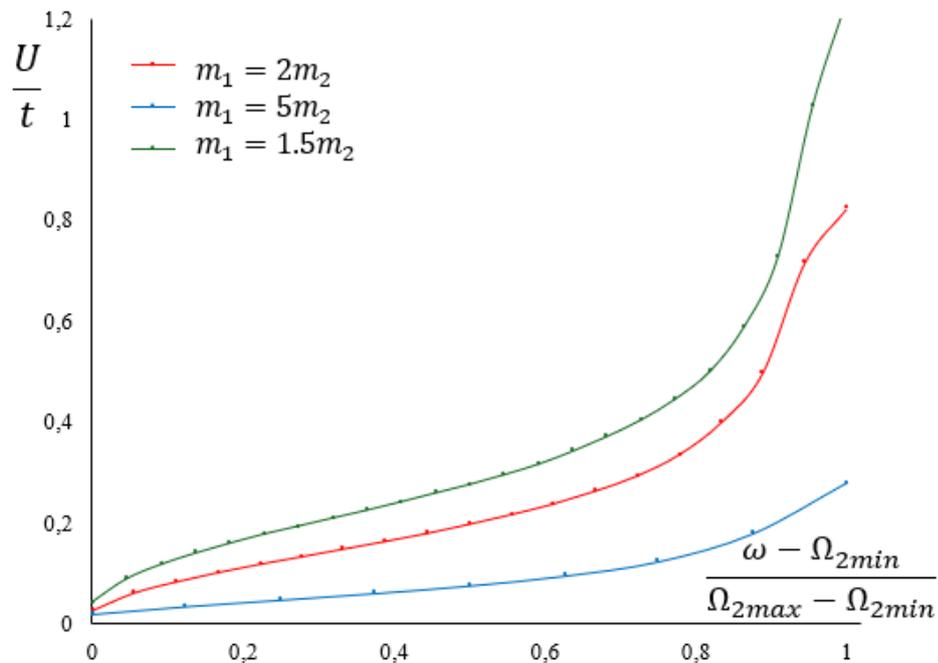


Рисунок 2.13 – Зависимость скорости роста полной энергии цепочки с чередующимися частицами при различных отношениях их масс от частоты возбуждающей силы $\omega \in (\Omega_{2min}; \Omega_{2max})$

Из представленных выше графиков (см. рисунки 2.12, 2.13) видно, что кривая, соответствующая самому маленькому отношению масс $\frac{m_1}{m_2} = 1.5$, лежит выше остальных и быстрее выходит на асимптоту. Следовательно, чем меньше массы частиц отличаются друг от друга, тем с большей скоростью энергия поступает в систему.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной выпускной квалификационной работе были исследованы два вида модели гармонического кристалла: одномерная цепочка с одинаковыми частицами и одномерная цепочка с чередующимися частицами двух сортов.

В первой главе были получены аналитические выражения, описывающие перемещения одинаковых частиц полубесконечной цепочки в любой момент времени при силовом воздействии и смешанных граничных условиях. Корректность аналитического решения задачи была подтверждена численным расчетом, проведенным по методу leap-frog. Было получено дисперсионное соотношение и исследована зависимость скорости роста полной энергии системы от частоты гармонического нагружения. Также проведено сравнение численных и аналитических результатов для кривой скорости роста энергии в случаях полубесконечной и бесконечной цепочки Гука.

Во второй главе было получено аналитическое решение, описывающее поле перемещений для цепочки с чередующимися частицами разной массы при периодических граничных условиях и гармоническом силовом воздействии. Результаты были проверены численно. Рассмотрены дисперсионные соотношения для цепочек с отношениями масс частиц $\frac{m_1}{m_2} = 1.5; 2; 5$. Была выявлена зависимость между значением отношения масс и шириной запрещенной зоны. Проведен расчет полной энергии системы при силовом гармоническом воздействии с частотами из диапазона собственных частот цепочки для всех вышеуказанных случаев. Сравнение кривых, описывающих скорость роста энергии для разных отношений масс, показало, что при большем значении отношения масс энергия растет медленнее.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Андрианов Ю.А., Андрианова Т.Н. Линейная алгебра: учебно-методическое пособие. – СПб.: Изд-во СПбПУ, 2018 – 90с.;
2. Васильев Д.М. Кристаллография / Д.М. Васильев. – СПб.: Изд-во СПбГПУ, 1996 – 474с.;
3. Косевич А.М. Основы механики кристаллической решетки. – М.: Наука, 1975 – 281с.;
4. Косевич А.М. Теория кристаллической решетки. – Харьков: Выща шк., 1988 – 303с.;
5. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой / А.М. Кривцов – М.: Физматлит, 2007 – 304с.;
6. Кривцов А. М. Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов: учеб. пособие. – СПб.: Изд-во СПбПУ, 2009 – 126 с.;
7. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов / Б. Я. Мойжес. – М.: Физматлит, 1963 – 312с.;
8. Мандельштам Л.И. Лекции по теории колебаний. – М: Наука, 1972 – 470с.;
9. Бабенков М.Б., Кривцов А.М., Цветков Д.В. Колебания энергий в одномерном гармоническом кристалле на упругом основании – Физ. Мезомех, 2016, Т. 19, № 1 – с.60–67;
- 10.Кривцов А.М. Морозов Н.Ф. О механических характеристиках наноразмерных объектов. – ФТТ, 2002, Т. 44, №12 – с. 2158-2163;
- 11.Кривцов А.М. Колебания энергий в одномерном кристалле - ДАН., 2014, Т. 458, № 3 – с. 279–281;
- 12.Hemmer, P. C. Dynamic and stochastic types of motion in the linear chain. – Norges tekniske hoiskole, 1959, 2, 58;

13. Kuzkin, V. A., Krivtsov, A. M. Energy transfer to a harmonic chain under kinematic and force loadings: Exact and asymptotic solutions. – *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*, 2018, 3(01n02).;
14. Kuzkin V.A. Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell – *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 2019, 31, pp. 1573–1599.;
15. Liazhkov S.D. Energy supply into a semi-infinite β -Fermi–Pasta–Ulam–Tsingou chain by periodic force loading - *Acta Mechanica*, 2024, 235, pp. 4005 – 4027.;
16. Van Gunsteren, W. F. & Berendsen, H. J. A leap-frog algorithm for stochastic dynamics. – *Molecular Simulation*, 1988, 1, pp.173—185.