КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ
ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ФІЗИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Макарець М.В.

Посібник з рівнянь теорії суцільного середовища

Навчальний посібник

Київ

2024

УДК 536.11; 536.12; 538.951; 538.953; 538.956; 538.931; 538.935; 539.313

PACS 65.50; 46,83.10.F; 62.10; 62.20; 62.40; 62.20F; 47.17; 05.70.L

Посібник з рівнянь теорії суцільного середовища: Навчальний посібник / Макарець М.В., — К.: 2024. 119 с.

Призначено для освоєння методів сучасної теорії суцільного середовища студентами та аспірантами при виводі рівнянь для різних моделей, які враховують нелінійний відгук на зовнішні збурення та нерівноважні процеси. Наведено приклади побудови термодинамічних потенціалів, їх розкладу навколо заданої точки у просторі термодинамічних змінних, виразів для потоків різної природи та для швидкості генерації нерівноважної ентропії. Може слугувати довідником для студентів, аспірантів та науковців фізичних і фізико-технічних спеціальностей при дослідженні рівноважних та нерівноважних процесів.

Зміст

ПЕРЕДМОВА

Даний навчальний посібник має на меті декілька застосувань:

1. Для поглибленого вивчення теорії суцільного середовища студентами та аспірантами, зокрема її застосування для побудови рівнянь руху середовища і наведених полів та дослідження механічних, теплових і електромагнітних явищ у кристалах та ізотропному середовищі.

2. Для практичного застосування методів теорії груп у спеціальних курсах для студентів та аспірантів, зокрема для побудови тензорів заданого рангу та симетрії, аналізу їх будови та дослідження зв'язку між різними компонентами відгуку кристалів та ізотропного середовища на зовнішні збурення.

3. Як довідник для студентів, аспірантів та науковців при дослідженні механічних, теплових та електромагнітних явищ у суцільному середовищі з урахуванням його кристалічної симетрії, або ізотропії.

У зв'язку з цим значну увагу приділено так званому фізичному підходу для побудови відгуку термодинамічного рівноважного середовища на зовнішні збурення. Варто підкреслити, що розглядався відгук системи на деформації, електричне поле та різницю температури, для опису якого достатньо використання груп точкової симетрії кристалів. Групи магнітної симетрії не розглядаються.

Вплив кристалічної симетрії на властивості матеріальних тензорів було враховані згідно принципу матеріальної симетрії, який стверджує, що так звані матеріальні рівняння, які описують відгук системи на зовнішнє збурення повинні бути інваріантними відносно всіх перетворень симетрії які допускають середовищем. Також було враховано лише локальний відгук середовища, який стверджує що відгук у даній точці формується середовищем у цій же точці, а сусідні області середовища на нього не впливають.

У посібнику побудова відгуку середовища на збурення послідовно розглядалася в рамках рівноважної термодинаміки, тому частина явищ, зокрема ті, що пов'язані із потоками тепла, маси, заряду і т.д., та відповідні тензори, що описують ці явища, наприклад, коефіцієнти в'язкості, теплопровідності, провідності, дифузії і т.д. тут також не розглядалися. Ці явища, та відповідні матеріальні тензори будуються в рамках локально-рівноважної термодинаміки на основі лінійної нерівноважної теорії Онзагера.

До частини розділів наведено задачі для самостійної роботи. Дано список літератури.

РОЗДІЛ 1

МЕХАНІКА ТА ТЕРМОДИНАМІКА СУЦІЛЬНОГО СЕРЕДОВИЩА

Розглянемо основні положення двох методів побудови нелінійних рівнянь руху, які використовується в роботах з механіки суцільного середовища. Детальне викладення обох підходів викладено в роботах [1, 2, 3, 4, 5].

1.1 „Математичний“ підхід

Основна ідея цього підходу — фізичні характеристики середовища повинні бути інваріантними при перетвореннях симетрії, яку допускає це середовище. Отже вони повинні залежати лише від інваріантів, які можна побудувати із незалежних величин, що є визначальними для даної характеристики.

З математичної точки зору проблема зводиться до побудови алгебраїчних інваріантів із заданого набору векторів і тензорів, які залишаться незмінними при дії певної групи перетворень (група симетрій середовища). Ця проблема в математиці вирішена [6], хоча громіздкість виразів для інваріантів із збільшенням числа змінних зростає дуже швидко.

Згідно [1], загальні визначальні рівняння для величин, які описують відгук суцільного середовища на зовнішнє, або внутрішнє збурення повинні бути інваріантними відносно групи перетворень симетрії, яку допускає це середовище. Це накладає певні обмеження на вигляд функцій, які визначають залежність відгуку від збурення. Для прикладу, згідно [1], в ролі параметрів, які описують збурення візьмемо так звану дисторсію $x_{k,K}(\tau) = \frac{\partial}{\partial X_k} x_k(\tau)$, яка не є тензором деформацій, а фактично є матрицею перетворення координат деформованого стану $x_k(\tau)$ до координат X_K початкового „недеформованого“ стану, температуру середовища $\theta(\tau)$ і градієнт температури $\theta_k(\tau) = \frac{\partial}{\partial x_k} \theta(\tau)$.

Зауважимо, що координати початкового „недеформованого“ стану X_K зручно вибирати у ролі координат у лабораторній системі із незмінним, сталим базисом. Ці координати для фізично нескінченно малих частинок середовища змінюються під час їх руху так само як у механіці Ньютона змінюються координати матеріальної точки внаслідок її руху. Координати деформованого стану $x_k(\tau)$ вибираються як координати у матеріальній системі координат із змінним базисом. Матеріальні координати фізично нескінченно малих частинок середовища залишаються незмінними під час її руху так само як у механіці Ньютона залишається незмінним індекс матеріальної точки. Але базис матеріальної системи координат під час руху зхмінюється.

В принципі, ми взяли величини тензорного, векторного і скалярного типу, тому їх достатньо для побудови загального вигляду функцій і у випадку більшої кількості параметрів, які описують збурення. В ролі відгуку системи розглянемо такі величини: t_{kl} — тензор механічних напружень, h_k — вектор потоку тепла, e — густину енергії, η — густину ентропії.

Якщо врахувати інваріантність лише відносно перетворень поворотів простору на довільний кут та трансляції простору на довільний вектор (тобто вважати середовище ізотропеим і однорідним), то ці вирази мають такий загальний вигляд [1], стор. 174:

$$t_{kl} = \int\limits_{-\infty}^{t} T_{NM}\left(C_{KL}(\tau),\, \theta(\tau),\, x_{k,\,K}(\tau)\,\theta_k(\tau)\right)\, x_{k,\,N}(\tau)\, x_{l,\,M}(\tau)\, d\tau, \tag{1.1}$$

$$h_k = \int\limits_{-\infty}^{t} Q_N(C_{KL}(\tau),\, \theta(\tau),\, x_{k,\,K}(\tau)\,\theta_k(\tau))\, x_{k,\,N}(\tau)\, d\tau, \tag{1.2}$$

$$e = \int\limits_{-\infty}^{t} E(C_{KL}(\tau),\, \theta(\tau),\, x_{k,\,K}(\tau)\,\theta_k(\tau))\, d\tau \tag{1.3}$$

$$\eta = \int\limits_{-\infty}^{t} H(C_{KL}(\tau),\, \theta(\tau),\, x_{k,\,K}(\tau)\,\theta_k(\tau))\, d\tau, \tag{1.4}$$

де $C_{KL} = x_{k,\,K}\, x_{k,\,L}$ — тензор скінченних (не малих) деформацій Коші: $2\, C_{KL} = U_{K,\,L} + U_{L,\,K} + U_{K,\,M}\, U_{M,\,L} + \delta_{KL}$. Звідси видно, що від звичайного тензора деформацій він відрізняється на одиничний тензор.

В (1.1–1.4) ми увели так звані функції відгуку системи T_{NM}, Q_N, E та H, кожна з яких є ядром інтегралу із запізненням по часу, що описують пам'ять системи про минулі збурення в точці спостереження. Фактично це аналоги функції діелектричного відгуку системи на зовнішнє поле, теорія якої добре розвинута для плазми та твердого тіла.

Якщо не враховувати часову дисперсію відгуку, то всі вони є $\delta(\tau - t)$–функціями Дірака і тоді інтеграли обчислюються елементарно і дають добре відомі локальні співвідношення. Вони пов'язують відгук системи в даній точці в даний момент із збуренням системи в цій же точці і в цей же момент.

Якщо ж врахувати і просторову дисперсію, то потрібно ще добавити просторові інтеграли в межах області з якої в момент t можуть прийти сигнали віпромінені іншими частинами системи в усі попередні моменти часу $\tau \leq t$. Наприклад, у випадку ізотропного середовища, коли швидкість звуку в усіх напрямах однакова і рівна V, ця область буде кулею, рівняння (1.4) набуде вигляду:

$$\begin{aligned} \eta \;=\; \int\limits_{-\infty}^{t} \int\limits_{0}^{V\,(t-\tau)} \int\limits_{0}^{\pi} \int\limits_{0}^{2\pi} H\Big(& C_{KL}(\tau,\, r,\, \psi,\, \phi),\, \theta(\tau,\, r,\, \psi,\, \phi),\, x_{k,\,K}(\tau,\, r,\, \psi,\, \phi), \\ & \theta_k(\tau,\, r\,\psi,\, \phi)\Big)\; r^2 \sin(\psi)\, d\phi\, d\psi\, dr\, d\tau. \end{aligned} \tag{1.5}$$

Зауважимо одразу, що для того, щоб знайти цю область, потрібно знати закон розповсюдження сигналу по середовищу. Але він нам залишається невідомим аж поки ми не розв'яжемо рівняння руху, яких ще немає. Отже в логічно послідовні рівняння, які б відповідали фізично справедливій моделі відгуку системи на збурення повинна входити невідома величина — межа області, яка фізично доступна для формування відгуку в даній точці в цей момент з урахуванням впливу оточення, яке мало певний стан в минулому. Проблеми, які пов'язані з врахуванням просторової дисперсії при розповсюдженні електромагнітних хвиль оптичного діапазону детально розглянуті в [7], але лише в лінійному наближенні по електричному полю.

Щоб не мати справу з інтегралами, за звичай, просторову та часову дисперсії враховують провівши під інтегралом (1.5) розклад збурення в ряд по часу запізнення та по зміщенню від точки спостереження до точки простору, яка формує відгук. Розклад ведеться навколо даної точки в даний момент з точністю до кількох перших доданків. Формально інтеграли після цього стають рівними якимось сталим, можливо залежним від координат і часу. Тому одержують зв'язок між відгуком і збуренням, в який окрім значень збурення в даній точці в даний момент входять і похідні від збурення по часу та по координатах. Ці вирази нелінійно залежать від інваріантів, побудованих із визначальних параметрів стану середовища, наприклад, деформацій, температури, електричного поля та, обов'язково їх просторових похідних. Якщо потім розкласти результат по інваріантах, то отримаємо нелінійні рівняння руху.

Згідно [2], у випадку деформацій залежних від густини, градієнтів переміщень (дисторсія) і градієнтів швидкостей для тензора механічних напружень справедлива залежність:

$$t_{ij} = t_{ij}\left(\frac{1}{\sqrt{J_3}},\, \frac{\partial}{\partial x_q}\, y_p,\, \frac{\partial}{\partial y_q}\, v_p\right). \tag{1.6}$$

Тут J_3 — третій інваріант тензора деформацій, який відповідає за зміну об'єму фізично нескінченно малої частинки, $J_3 = \det\left(\delta_{i\,j} + 2\,e_{i\,j}\right)$, а саме $2\,e_{i\,j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\,u_i + \frac{\partial}{\partial x_i}\,u_j + \frac{\partial}{\partial x_j}\,u_k\,\frac{\partial}{\partial x_i}\,u_k$.

Якщо тензор напружень позначити як T, матрицю дисторсії — як C, (зауважимо, що її вигляд повинний бути відомим щоб використати формули (1-4)), а матрицю градієнтів, наприклад, електричного поля — як A, то тоді нелінійний вираз (5), з урахуванням симетричності всіх матриць, що відповідають двохіндексним величинам, може мати такий і тільки такий вигляд для ізотропного середовища, (це показано у [6, 7]):

$$\begin{aligned} T \;=\; & E\phi_0 + \left[C\phi_1 + A\phi_2\right] + \left[C^2\phi_3 + A^2\phi_4 + (CA + AC)\,\phi_5\right] + \\ & + \left[\left(CA^2 + A^2C\right)\phi_6 + \left(C^2A + AC^2\right)\phi_7\right] + \left[A^2C^2 + C^2A^2\right]\phi_8, \end{aligned} \tag{1.7}$$

де E — одинична матриця, а скалярні функції $\phi_i \equiv \phi_i\left(J_1, J_2, \ldots, J_{10}\right)$, де $i =$

$0, 1, \ldots, 8$ — залежать лише від десяти інваріантів, які можна побудувати із елементів двох симетричних матриць:

$$\begin{aligned} &J_1 = \mathrm{Sp}(C), \quad J_2 = \mathrm{Sp}(C^2), \quad J_3 = \mathrm{Sp}(C^3), \quad J_4 = \mathrm{Sp}(A), \\ &J_5 = \mathrm{Sp}(A^2), \quad J_6 = \mathrm{Sp}(A^3), \quad J_7 = \mathrm{Sp}(A\,C), \quad J_8 = \mathrm{Sp}(A\,C^2), \\ &J_9 = \mathrm{Sp}(C\,A^2), \quad J_{10} = \mathrm{Sp}(A^2\,C^2), \end{aligned} \tag{1.8}$$

де $\mathrm{Sp}(A)$ — слід матриці A. Якщо ці функції наближати поліномами, а це завжди можна зробити з будь–якою точністю, згідно теореми Веєрштраса, то одержимо вираз, в якому можна врахувати доданки різного порядку по деформації та по швидкості деформації.

Оскільки слід матриці це лінійний інваріант тензора, а решта — нелінійні, то наближення першого порядку буде дуже простим. В ньому потрібно: 1) взяти один доданок нульового порядку і два першого порядку; 2) розкласти ϕ_0 по слідах обох матриць, врахувавши лише нульовий і перший доданки; 3) функції ϕ_1 та ϕ_3 — взяти в нульовому наближенні по слідах; 4) а решту скалярних функцій покласти рівними нулю; 5) в виразі для матриці C знехтувати квадратичним доданком по деформаціях. Тоді (1.7) для пружного середовища набуває вигляду:

$$T_{first} = (\lambda + \mu\,\mathrm{Sp}(C))\; E + \psi\, C, \tag{1.9}$$

де λ, μ, ψ — сталі величини, незалежні від матриці C, причому $\lambda + \mu + \psi = 0$. Остання умова необхідна для існування ненапруженого рівноважного стану і не є обов'язковою. Наприклад, для середовищ із внутрішніми напругами, якщо вони ізотропні, покладають $\lambda + \mu + \psi = p$, тобто за відсутності деформацій у середовищі є ізотропні напруження аналогічні гідростатичному тиску.

В покомпонентному запису (1.7) потрібно врахувати також, що в обидві матриці A і C входить одинична матриця. Тоді маємо такі визначальні рівняння для діагональних компонент:

$$t_{ii} = \mu\,(u_{11} + u_{22} + u_{33}) + \psi\, u_{ii} + \nu\,(v_{11} + v_{22} + v_{33}) + \zeta\, v_{ii}, \tag{1.10}$$

де $i = 1, 2, 3$, та для недіагональних компонент:

$$t_{ij} = \psi\, u_{ij} + \zeta\, v_{ij}, \tag{1.11}$$

де $i \neq j$. Підкреслимо спеціально, що сюди входить тензор нескінченно малої деформації: в якому відкинуті квадратичні доданки.

З точністю до позначень це закон Гука для ізотропного середовища, або закон Нав'є-Стокса для рідин і газів без паскалевого доданку із газо- або гідростатичним тиском (який ми вище самі поклали рівним нулю), відповідно. Останні два мають такий традиційний запис:

$$t_{ij} = \lambda\, \delta_{ij}\, \mathrm{div}(u) + 2\mu\, u_{ij},$$

для закону Гука, та

$$t_{ij} = -p\, \delta_{ij} + (\zeta - \eta)\, \delta_{ij}\, \mathrm{div}(v) + 2\eta\, v_{ij},$$

для закону Нав'є-Стокса.

В квадратичному наближенні необхідно: 1) врахувати в (6) ще три квадратичні доданки по A і C; 2) в ϕ_0 розклад по лінійних інваріантах робити до другого порядку включно, по квадратичних — до першого, а по решті — до нульового; 3) в ϕ_1, ϕ_2 розклад робити лише по інваріантах першого порядку до першого порядку; 4) враховувати, що в лінійні інваріанти в першій степені входять скінченні деформації, а в другій степені — малі деформації. Очевидно, що вирази стануть значно громіздкіші у порівнянні із (10). А це лише ізотропне середовище.

1.2 „Фізичний“ підхід.

Тут ми розглянемо метод побудови нелінійних рівнянь для суцільного середовища, який використовується в роботах фізичного характеру. Типові приклади — роботи [8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16].

Основна ідея цього підходу — інваріантний запис термодинамічних потенціалів, в якому замість інваріантів, побудованих із визначальних величин, використовують самі визначальні величини. Але конструкції, в які вони входять залишаються інваріантними. Це досягається введенням різного роду коефіцієнтів, які є тензорними величинами. Ці тензори повинні задовольняти групі симетрій середовища.

З математичної точки зору, задача зводиться до побудови тензорів, інваріантних відносно групи перестановок, яка випливає із самого означення даного тензора, та групи симетрій середовища. Ця задача легше формалізується, оскільки, з технічної точки зору, зводиться до усереднення заданого тензора по обох групах.

Розглянемо формально вільну енергію кристалу в квадратичному наближенні, як функцію таких величин: 1) температури T, 2) деформацій $u_{i,j}$, 3) електричного поля E_i. Ці величини називатимемо визначальними, саме їх зміна від рівноважних значень збурює середовище і в ньому формується відгук на це збурення. Поблизу положення рівноваги перші похідні вільної енергії по вказаних величинах рівні нулю, тому залишаються лише квадратичні доданки:

$$\begin{aligned} 2\,\mathrm{f}(\rho,\, T,\, u_{i,j},\, E_i) \;=\; & c_v\,(T-T_0)^2 + C_{i,j,k,l}\,u_{i,j}\,u_{k,l} + \varepsilon_{i,j}\,E_i\,E_j \\ & + 2\,\beta_{i,j}\,(T-T_0)\,u_{i,j} + 2\,b_i\,(T-T_0)\,E_i \\ & + 2\,e_{k,i,j}\,u_{i,j}\,E_k. \end{aligned} \tag{1.12}$$

З (1.12) одразу ж випливає симетрія тензорів вищих рангів відносно перестановки індексів, оскільки термодинамічні потенціали є скалярами, а визначальні величини вектори і тензори. Якщо тепер розглядати (1.12) для кристалу, то всі тензори, згідно принципу Неймана [8], повинні мати симетрію відповідної кристалічної групи.

Для середовища поблизу стану термодинамічної рівноваги вільну енергію, або якийсь із восьми термодинамічних потенціалів, в залежності від зовнішніх умов, розкладають в ряд до степені вищої за другу по всіх змінних і отримують нелінійні вирази для ентропії, механічних напружень та електричного поля, як це показано, наприклад в [8, 14, 15, 16].

Тепер, використовуючи термодинамічні співвідношення, можна записати вирази для зміни ентропії, механічних напружень та електричної індукції внаслідок збурення рівноважного стану середовища:

$$-\Delta\, s = c_v\,(T - T_0) + \beta_{i,\,j}\, u_{i,\,j} + b_i\, E_i, \tag{1.13}$$

$$\Delta\, \sigma_{i,\,j} = C_{i,\,j,\,k,\,l}\, u_{k,\,l} + \beta_{i,\,j}\,(T - T_0) + e_{k,\,i,\,j}\, E_k, \tag{1.14}$$

$$\Delta\, D_i = \varepsilon_{i,\,j}\, E_j + b_i\,(T - T_0) + e_{i,\,k,\,l}\, u_{k,\,l}. \tag{1.15}$$

В одержані вирази входять характеристики середовища c_v, b_i, $\beta_{i,\,j}$, $\varepsilon_{i,\,j}$, $e_{k,\,i,\,j}$, $C_{i,\,j,\,k,\,l}$, які є тензорами від нульового до четвертого рангу. Відмітимо, що це величини які виміряні при сталій температурі середовища, що відповідає експериментам при стаціонарних збуреннях. На експерименті їх дійсно простіше вимірювати.

Але процес розповсюдженні електромагнітних та акустичних хвиль достатньо високої частоти відбувається адіабатично. Тому потрібно в (1.13) покласти $\Delta\, s = 0$, знайти звідси $\Delta\, T = T - T_0$ і підставити його в (1.14), (1.15). Після перетворень одержимо вирази справедливі вже в адіабатичному наближенні.

Зауважимо, що для акустичних і електромагнітних хвиль наднизьких частот виникає питання про адіабатичність процесу їх розповсюдження. Окрім цього процеси повільної релаксації середовища також можуть впливати на розповсюдження таких хвиль, відкриваючи нові канали дисипації.

Формула (1.12) і співвідношення (1.13 – 1.15) одержані формально, в рамках лише рівноважної термодинаміки, без врахування кінетичних співвідношень, які дає нерівноважна термодинаміка. Використання останньої обов'язкове, бо ми розглядаємо нерівноважний процес — відгук середовища на збурення його рівноважного стану.

Розглянемо повну систему рівнянь руху і нерівноважної термодинаміки згідно [1]. Вона потрібна нам для логічно послідовної по удови нелінійних рівнянь руху суцільного середовища із складними моделями відгуку.

Закон збереження маси фізично нескінченно малої частинки. Далі у тексті будемо використовувати її скорочену назву фнм-частинка. За будь–якої моделі будови мікроскопічних частинок з яких складається фнм–частинка, при відсутності дифузії і хімічних реакцій в середовищі, має вигляд:

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\rho = \frac{\partial}{\partial x_k}\,(\rho\, v_k)\,. \tag{1.16}$$

Закон збереження імпульсу фнм-частинки. За будь–якої моделі будови мікроскопічних частинок з яких складається фнм– частинка, при відсутності дифузії і хімічних реакцій в середовищі, має вигляд:

$$\rho\,\left(\frac{\partial}{\partial t} + v_l\,\frac{\partial}{\partial x_l}\right) v_k = f_k + \frac{\partial}{\partial x_l}\,t_{itlk}. \tag{1.17}$$

Закон збереження моменту імпульсу фнм-частинки. Навіть при відсутності дифузії і хімічних реакцій в середовищі, залежить від моделі будови мікрочастинок, з яких складається кожна фнм–частинка. Так в моделі мікрополярних середовищ кожна мікрочастинка має тензор мікроінерції $\frac{J_{kn}}{\rho}$, компоненти якого можна одержати або в рамках феноменологічної, або мікроскопічної теорії. Тоді на кожну таку мікрочастинку всередині фнм–частинки діють об'ємні моменти сили з густиною m_{lk}, а на мікрочастинки на поверхні фнм–частинки діють поверхневі моменти сил густиною l_k. Відповідний момент імпульсу і моменти сил потрібно врахувати в повному балансі моментів імпульсу та сил. В результаті отримується таке рівняння:

$$J_{k\,n}\,\left(\frac{\partial}{\partial t} + v_l\,\frac{\partial}{\partial x_l}\right)\omega_n = \left(\frac{\partial}{\partial x_l}\,m_{l\,k}\right) + \varepsilon_{k\,l\,m}\,t_{k\,l} + \rho\,l_k, \tag{1.18}$$

де ω_n — кутова швидкість мікрочастинок, а ε_{ijk} — повністю антисиметричний тензор Леві–Чивіти. В класичних моделях $J_{kn} = 0$, $m_{kn} = 0$, $l_k = 0$, тому одержуємо умову симетричності тензора механічних напруг

$$t_{k\,l} = t_{l\,k}. \tag{1.19}$$

Закон збереження енергії — перше начало термодинаміки. За тих же умов що і для попередніх законів, для моделі так званого мікрополярного середовища, він має такий вигляд:

$$\rho\,\left(\frac{\partial}{\partial t} + v_l\,\frac{\partial}{\partial x_l}\right)\,e = t_{k\,l}\left(\frac{\partial}{\partial x_k}\,v_l - \varepsilon_{m\,k\,l}\,\omega_m\right) + m_{k\,l}\,\frac{\partial}{\partial x_k}\,\omega_l + \frac{\partial}{\partial x_k}\,h_k + \rho\,\Omega, \tag{1.20}$$

де e, h_k — відповідно, масова густина внутрішньої енергії, k–та компонента вектора об'ємної густини потоку тепла, Ω — масова густина джерел, або стоків тепла немеханічного і не теплообмінного походження, наприклад, джоулеве тепло при проходження електричного струму, виділення та поглинання тепла екзотермічних та ендотермічних хімічних реакцій, відповідно,виділення тепла при радіоактивному розпаді, поглинута або випромінена енергія теплового випромінення із елементу об'єму фнм–частинки.

Для переходу до класичної моделі, окрім умов $J_{kn} = 0$, $m_{kn} = 0$, $l_k = 0$, потрібно зв'язати просторові мікро- і макро- обертання $2\,\omega_k = \varepsilon_{klm}\,(\frac{\partial}{\partial x_m}\,v_l)$. Тоді закон збереження енергії набуває класичного вигляду:

$$\rho\left(\frac{\partial}{\partial t} + v_l\,\frac{\partial}{\partial x_l}\right)\,e \;=\; t_{k\,l}\,\left(\frac{\partial}{\partial x_k}\,v_l\right) + \left(\frac{\partial}{\partial x_k}\,h_k\right) + \rho\,\Omega. \tag{1.21}$$

Баланс ентропії — друге начало термодинаміки. Закон збереження енергії для термодинамічно квазістаціонарних процесів має вигляд:

$$d\,e = \delta\,A + \delta\,Q, \tag{1.22}$$

де $d\,e$ — диференціал масової густини внутрішньої енергії, $\delta\,A$ — нескінченно малий елемент масової густини роботи, яку виконала система, $\delta\,Q$ — нескінченно малий елемент масової густини теплоти, яку отримала система. Робота, яку виконує система залежить від її взаємодії із оточенням, а для теплоти у всіх випадках справедливо, що вона змінюється лише внаслідок теплопередачі та дії джерел або стоків. Отже завжди

$$\delta\,Q = \left(\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial}{\partial x_K}\,h_K + \Omega\right)\,d\,t. \tag{1.23}$$

Для неполярних середовищ і рівноважних процесів $\delta\,Q$ має інтегруючий множник — обернену абсолютну температуру, тобто $\delta\,Q = \theta\,d\,\eta$ і тоді використовується класичне формулювання для диференціалу ентропії:

$$d\,\eta = \frac{d\,e}{\theta} - \frac{T_{K\,L}(e,\,C_{I\,J})\,d\,C_{K\,L}}{2\,\rho_0\,\theta} \tag{1.24}$$

$$0 \leq d\,\eta, \tag{1.25}$$

де T_{KL}, C_{KL} — тензори механічних напружень Піоли і скінченних (не малих) деформацій Коші, які, по суті, є еквівалентами відповідних їм звичайних величин, але задані в матеріальній системі координат (система Лагранжа). З рівняння (1.25) у випадку статики можна одержати вирази для інших термодинамічних потенціалів. Якщо в системі здійснюється не тільки робота по деформуванню, то потрібно включити і ці доданки.

Друге начало термодинаміки, яке враховує нерівноважні процеси має назву нерівності Клаузіуса–Дюгема і стверджує, що:

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + v_l \frac{\partial}{\partial x_l} \right) \eta - \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{h_k}{\theta} - \frac{\rho \, \Omega}{\theta} = \rho \, \gamma_\eta, \tag{1.26}$$

$$0 \le \gamma_\eta, \tag{1.27}$$

де другий доданок — це потік ентропії, третій — густина джерел-стоків енергії ділена на абсолютну температуру, γ_η — це виробництво нерівноважної ентропії в фнм-частинці, воно завжди невід'ємне.

Підкреслимо, що (1.27) застосовне не тільки для нерівноважних систем, але і для систем із локальною рівновагою, для яких в (1.25) справедливий знак рівності. В цьому випадку замість другого і третього виразів підставляємо (1.23). Після спрощень одержується нерівність:

$$\rho \, \theta \, \gamma_{(\eta)} = h_k \frac{\partial}{\partial x_k} \, \theta, \tag{1.28}$$

$$0 \le h_k \, \frac{\partial}{\partial x_k} \, \theta. \tag{1.29}$$

Після підстановки в (1.27) виразу (1.23) одержуємо остаточне формулювання другого начала термодинаміки у вигляді:

$$\rho \left(\frac{D \, e}{Dt} - \theta \, \frac{D\eta}{Dt} \right) - \frac{1}{2} t_{k\,l} \, X_{K\,k} \, X_{L\,l} \frac{D \, C_{K\,L}}{Dt} - h_k \frac{\partial}{\partial x_k} \, \theta \, \le 0, \tag{1.30}$$

або, після введення масової густини вільної енергії $\psi = e - \theta \, \eta$, такий вираз:

$$\rho \left(\frac{D \, \psi}{Dt} + \eta \, \frac{D\theta}{Dt} \right) - \frac{1}{2} t_{k\,l} \, X_{K\,k} \, X_{L\,l} \frac{D \, C_{K\,L}}{Dt} - h_k \frac{\partial}{\partial x_k} \, \theta \, \le 0, \tag{1.31}$$

де уведено позначення $\frac{D\,\zeta}{Dt}$ для повної похідної по часу від величини ζ.

Варто відмітити таку деталь. Рівняння руху записуються в ейлерових координатах, оскільки це, по суті, лабораторна система відліку в якій проводяться всі виміри. Друге начало термодинаміки записується в матеріальних, лагранжевих координатах, які вморожені в середовище і в яких фнм–частинка має одну і ту ж форму і координати і, що найголовніше, одні і ті ж мікроскопічні складові. Друге начало стосується термодинамічної системи і тому при її механічному русі координати повинні рухатися разом із системою.

Таким чином схема одержання нелінійних рівнянь руху суцільного середовища набуває такого алгоритмічного втілення:

1. Вибираємо реактивні змінні, які описують збурення середовища. Наприклад, температура, деформації, електричне поле, градієнт температури, просторові похідні від електричного поля і т.п.

2. Виписуємо модельні феноменологічні вирази для активних змінних, які описують відгук середовища на збурення. Це лише ті величини, які входять як феноменологічні в рівняння руху (5–8,11,12): $t_{k\,l}$, h_k, e, η, ψ.

3. Підставляємо ці вирази в (1.31) і знаходимо такі зв'язки між активними змінними, при виконанні яких нерівність буде виконуватися при будь–яких значеннях швидкостей реактивних змінних.

4. Одержані вирази розкладаємо в ряд Тейлора навколо рівноважних значень реактивних змінних до потрібного порядку. Тим самим знаходимо термодинамічно правильні розклади відгуку середовища по збуренню.

5. Підставляємо одержані вирази в рівняння руху суцільного середовища.

Варто особливо підкреслити, що і в „механічному“ підході залишається ця ж сама схема, але розклади в ряд Тейлора ведуться не по активних змінних, а по інваріантах побудованих із їх сукупності. У випадку кристалів такі інваріанти потрібно будувати із величин, що описують збурення враховуючи і групу точкової симетрії кристалу.

1.3 Приклади побудови нелінійних рівнянь руху.

Викладену вище теорію застосуємо для деяких груп точкової симетрії. Буде показано застосування лише так званого „фізичного“ підходу, який є загальновживаним у літературі.

1.3.1 Лінійна термопружність

1. В ролі збурень суцільного середовища вважаємо температуру θ задану в матеріальних координатах, її градієнт в матеріальних координатах $\theta_N = \frac{\partial}{\partial X_N}\theta$ та деформації середовища в матеріальних координатах $2\,C_{KL} = U_{K,\,L} + U_{L,\,K} + U_{K,\,M}\,U_{M,\,L} + \delta_{KL}$.

2. Вважаємо середовище безструктурним просторово однорідним із нульовою пам'яттю. Тоді визначальні рівняння можна задати у вигляді:

$$t_{k\,l} = T_{NM}(C_{KL}(t),\,\theta(t),\,\theta_K(t))\,x_{k,\,N}(t)\,x_{l,\,M}(t), \tag{1.32}$$

$$h_k = Q_N(C_{KL}(t),\,\theta(t),\,\theta_K(t))\,x_{k,\,N}(tu), \tag{1.33}$$

$$e = E(C_{KL}(t),\,\theta(t),\,\theta_K(t)), \tag{1.34}$$

$$\eta = H(C_{KL}(t),\,\theta(t),\,\theta_K(t)), \tag{1.35}$$

$$\psi = \Psi(C_{KL}(t),\,\theta(t),\,\theta_K(t)). \tag{1.36}$$

Активні величини в лабораторній системі ми повинні задавати як якісь функції збурення що діє на один і той же реальний фізичний об'єкт — фнм–частинку, тобто в матеріальних координатах. Для переводу в лабораторну систему векторних і тензорних величин використовуємо матрицю переходу $x_{l,\,M}$.

3. Підставляємо вирази (1.32–1.36) в формулу (1.31) попереднього розділу і всі похідні від функцій відгуку які зустрічаються розписуємо через похідні від збурень:

$$\begin{aligned}\left(\rho\,\frac{\partial}{\partial C_{KL}}\,\psi - \frac{t_{k\,l}\,X_{K,\,k}\,X_{L,\,l}}{2}\right)\,C_{t,\,KL} + \rho\,\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\,\psi + \eta\right)\,\theta_t \\ +\rho\,\frac{\partial}{\partial\theta_K}\,\psi\,\theta_{t,\,K} - \frac{\theta_K\,h_K}{\theta}\ \le\ 0.\end{aligned} \tag{1.37}$$

Тут повні похідні по часу від збурень, тобто швидкості збурень позначено індексом t внизу. Щоб ця нерівність виконувалася при будь–яких значеннях швидкостей збурення необхідно щоб виконувалися такі умови:

$$\left\{\begin{array}{rcl} t_{k\,l}\,X_{K,\,k}\,X_{L,\,l} & = & 2\,\rho\,\dfrac{\partial}{\partial C_{KL}}\,\psi, \\ \eta & = & -\dfrac{\partial}{\partial \theta}\,\psi, \\ \dfrac{\partial}{\partial \theta_K}\,\psi & = & 0, \\ \theta_k\,h_k & \geq & 0. \end{array}\right. \tag{1.38}$$

Звідси видно, що вільна енергія не залежить від градієнта температури.

4. В рамках лінійної теорії вільна енергія повинна бути квадратичною формою збурень, а потік тепла лінійною. При запису цих формальних виразів враховуємо висновки п.3, а також те, що $C_{KL} = \delta_{KL} + 2\,u_{KL}$, де u_{KL} — тензор деформацій в матеріальних координатах, тому розклад одразу ж робимо по них. Після незначних математичних перетворень, одержуємо такі вирази:

$$2\,\rho_0\,\psi = E_{KLMN}\,u_{KL}\,u_{MN} + C\,(\theta - \theta_0)^2 + 2\,\alpha_{KL}\,u_{KL}\,(\theta - \theta_0),$$

$$T_{KL} = E_{KLMN}\,u_{MN} + \alpha_{KL}\,(\theta - \theta_0),$$

$$\rho_0\,\eta = -\alpha_{KL}\,u_{KL} - C\,(\theta - \theta_0),$$

$$h_K = \lambda_{KL}\,\theta_L.$$

5. Одержані вирази утримують матеріальні параметри середовища а також збурення, теж задані в матеріальних координатах. Що отримати рівняння руху в лабораторних, ейлерових координатах їх потрібно спочатку перетворити до цих координат, а потім підставити в рівняння (5–8) попереднього розділу. Для лінійних рівнянь ця процедура чисто формальна і зводиться просто до перепозначень, оскільки всі деформації малі і матриці переходу відрізняються від одиничної тільки в першому порядку по деформаціях. А оскільки деформації вже враховані в першому порядку, то нових доданків такі перетворення не дають. В результаті отримуємо відомі із літератури [17] лінійні рівняння термопружності.

1.3.2 Нелінійна термопружність.

В ролі прикладу застосування викладеної теорії отримаємо нелінійні рівняння для термопружного середовища.

Пункти 1–3 наведеної схеми виконуються повністю аналогічні до наведеного прикладу. Відмінність „математичного“ та „фізичного“ підходів появляється на останніх кроках, тому розглянемо їх детальніше.

4. „Математичний“ підхід. Для спрощення розглядатимемо ізотропне середовище. В цьому підході стверджується, що вільна енергія і потік тепла, повинні бути інваріантними відносно групи ортогональних перетворень. Згідно результатів [6], такими є лише наступні функції:

$$\psi = \psi(I_1,\, I_2,\, I_3,\, \theta),$$

$$h_k = (\phi_0\, \delta_{kl} + \phi_1\, c_{kl} + \phi_2\, c_{km}\, c_{lm})\, \theta_l,$$

причому $\phi_j = \phi_j(I_1, \ldots, I_6),\ j = 0, 1, 2$, а інваріанти тензорів виражаються через вектор градієнту тепла та тензор дисторсії: $I_1 = C_{KK},\ I_2 = C_{KL}\, C_{LK},\ I_3 = C_{KL}\, C_{LN}\, C_{NK},\ I_4 = c_{kl}\, \theta_k\, \theta_l,\ I_5 = c_{km}\, c_{lm}\, \theta_k\, \theta_l,\ I_6 = \theta_l\, \theta_l$. Всі функції ψ, ϕ_j є гладкими, а тензор $c_{k\, l}$ є оберненим до тензора C_{KL}. Розкладаючи їх в ряд по аргументах, після переходу у всіх виразах до збурень, отримують нелінійні рівняння, які гарантовано задовольняють термодинамічним вимогам і симетрії середовища.

4. „Фізичний“ підхід. Довільний кристал. Розкладаємо вільну енергію і потік тепла в ряд Тейлора, наприклад, до кубічних і квадратичних доданків, відповідно:

$$\begin{aligned}
\rho_0\, \psi \;=\;& \frac{1}{6} G_{KLMNPQ}\, u_{KL}\, u_{MN}\, u_{PQ} + \frac{1}{6} D\, (\theta-\theta_0)^3 + \frac{1}{2}\beta_{KLMN}\, u_{KL}\, u_{MN}\, (\theta-\theta_0) \\
& + \frac{1}{2}\delta_{KL}\, u_{KL}\, (\theta-\theta_0)^2 + \frac{1}{2} E_{KLMN}\, u_{KL}\, u_{MN} + \frac{1}{2} C\, (\theta-\theta_0)^2 \\
& + \alpha_{KL}\, u_{KL}\, (\theta-\theta_0) \\
h_K \;=\;& \lambda_{KL}\, \theta_L + A_{KLM}\, u_{LM} + N_K\, (\theta-\theta_0) + \frac{\mu_{KLM}\, \theta_L\, \theta_M}{2} \\
& + \frac{B_{KLMNP}\, u_{LM}\, u_{NP}}{2} + R_K\, (\theta-\theta_0)^2 + \kappa_{KLMN}\, \theta_L\, u_{MN} \\
& + \alpha_{KLM}\, u_{KM}\, (\theta-\theta_0) + S_{KL}\, \theta_L\, (\theta-\theta_0).
\end{aligned}$$

Якщо тепер вираз для потоку тепла підставити в останню нерівність в (1.38), то вона буде задовольнятися при будь–яких значеннях збуреннях лише тоді коли тензор λ_{KL} — не від'ємно означений, а решта рівні нулю. Легко здогадатися, що взагалі нетривіальні доданки в розкладі потоку тепла можуть мати лише такий вигляд:

$$h_K = \lambda_{KL}\,\theta_L + \frac{B_{KRLMNP}\,u_{LM}\,u_{NP}\,\theta_R}{6} + \frac{S_{KL}\,\theta_L\,(\theta-\theta_0)^2}{6},$$

який, фактично, є розкладом в ряд коефіцієнта теплопровідності по деформаціях і температурі.

Відповідні конструкції із цих коефіцієнтів повинні бути додатньо означені. Судячи із цього можна зробити висновок про несуттєвість залежності теплопровідності від механічних напружень, бо вона появляється аж у кубічних доданках.

Тепер по формулах із (1.38) знаходимо, урахуванням одержаних результатів для вигляду рядів:

$$\begin{aligned}
T_{KL} &= E_{KLMN}\,u_{MN} + \alpha_{KL}\,(\theta-\theta_0) + \frac{1}{2}G_{KLMNPQ}\,u_{MN}\,u_{PQ} \\
&\quad + \beta_{KLMN}\,u_{MN}\,(\theta-\theta_0) + \frac{1}{2}\delta_{KL}\,(\theta-\theta_0)^2, \\
\rho_0\,\eta &= -\alpha_{KL}\,u_{KL} - C\,(\theta-\theta_0) - \frac{1}{2}D\,(\theta-\theta_0)^2 \\
&\quad - \frac{1}{2}\beta_{KLMN}\,u_{KL}\,u_{MN} - \delta_{KL}\,u_{KL}\,(\theta-\theta_0), \\
h_K &= \lambda_{KL}\,\theta_L.
\end{aligned}$$

Якщо тепер підставити ці вирази в рівняння (5-8), то ми одержимо такі нелінійні рівняння для деформацій $u_i(x,\,y,\,z,\,t)$, густини середовища $\rho(x,\,y,\,z,\,t)$ і температури $\theta(x,\,y,\,z,\,t)$:

$$\left\{\begin{array}{l}
v_k(x,\,y,\,z,\,t) = \dfrac{\partial}{\partial t}\,u_k(x,\,y,\,z,\,t), \\
\dfrac{\partial}{\partial t}\,\rho = \dfrac{\partial}{\partial x_k}\,\rho\,v_k, \\
\rho\left(\dfrac{\partial}{\partial t} + v_l\,\dfrac{\partial}{\partial x_l}\right)v_k = f_k + \dfrac{\partial}{\partial x_l}\,t_{l\,k}, \\
\rho\left(\dfrac{\partial}{\partial t} + v_l\,\dfrac{\partial}{\partial x_l}\right)e = t_{k\,l}\,\dfrac{\partial}{\partial x_k}\,v_l + \dfrac{\partial}{\partial x_k}\,h_k + \rho\,\Omega,
\end{array}\right.$$

де $e = \psi + \eta\,(\theta - \theta_0)$, а вирази для вільної енергій, тензора механічних напруг та вектора потоку тепла записані вище як функції невідомих величин. При цьому останнє рівняння ми повинні розглядати як рівняння для температури.

Варто відмітити, що нелінійність рівнянь обумовлена тр ома причинами. Геометрична нелінійність, пов'язана із нелінійною залежністю тензора скінченних пружних деформацій від вектора деформацій. Конвективна нелінійність, яка обумовлена нелінійністю повної похідної по часу — конвективні доданки в лівій частині формул. Фізична нелінійність викликана нелінійною феноменологічною моделлю середовища. Причому вклади всіх нелінійностей потрібно враховувати одночасно.

РОЗДІЛ 2

ГРУПИ ВНУТРІШНЬОЇ СИМЕТРІЇ ТЕНЗОРІВ ТА ЇХ ПРЕДСТАВЛЕННЯ

Це симетрія, яка появляється при означенні тензора як похідної від термодинамічного потенціалу, або із кінетичних умов в силу принципу Онзагера. Ці умови появляються при розкладі в ряд Тейлора вільної енергії, або іншого термодинамічно потенціалу по його векторних і тензорних аргументах. Тому далі побудовані тензори із заданою внутрішньою симетрією, яка обумовлена рівноважними та нерівноважними властивостями, які він описує, а не симетрією кристалічної будови твердого тіла.

Наприклад: 1) симетричний по першій парі індексів (як тензор діелектричної проникності); 2) симетричний по другому і третьому індексу (як тензор п'єзоелектричних сталих); 3) симетричний всередині першої і другої пар індексів і симетричний відносно перестановки пар індексів (як тензор пружних сталих) і т.п. Ця група симетрії не має матричного представлення своїх елементів, оскільки такі елементи симетрії не зводяться до просторових перетворень елементів тензора.

Зауважимо, що матричне представлення таких груп у просторі індексів існує і воно майже очевидне, оскільки багатовимірний індекс — це вектор і саме його перетворює перестановка. Але нас цікавлять елементи тензора, яким ці вектори належать, тому можна не використовувати таке представлення. Ти більше, що воно залежить від рангу тензора, тому його потрібно задавати для кожного тензора своїм.

Спочатку будуємо групи перестановок тензорних індексів для тензорів різного рангу і різних внутрішніх симетрій. Цей крок аналогічний побудові кристалічних груп в наступному розділі.

На другому етапі буде проводитися усереднення тензора по групі перестановок. Тут потрібно також враховувати тип симетрії: симетрична, чи несиметрична перестановка.

Операція множення перестановок із елементами $p1_k$ і $p2_k$. Добуток цих перестановок $p1\ p2$ — це перестановка з елементами $res_k = p2_{p1_k}$.

Множення двох перестановок. Необхідність цієї програми обумовлена її відсутністю в пакеті, тим паче, що у нас останній елемент перестановки — показник її симетрії (+1), або антисиметрії (-1). Перестановку задаємо як впорядкований набір чисел, в якому на і–ому місці показано місце індексу до перестановки, а на останньому — парність, або непарність перестановки. Наприклад, запис [1,2,4,3,1] позначає парна перестановку третього і четвертого індексів в тензорі четвертого рангу, а [3,2,1,-1] — непарну перестановку першого і третього індексів в тензорі третього рангу. Для побудови повністю симетричних по всіх індексах тензорів використовується команда побудови всіх перестановок заданого набору чисел `permute`, яка є пакеті `combinat`. Але до кожної перестановки добавляється наш показник симетричності цих перестановок.

Позначення внутрішньої симетрії тензора. Формально задається за допомогою позначень Яна [13]. Форма запису позначення Яна наступна:

1) внутрішня симетрія вектора позначається як V;

2) внутрішня симетрія тензора n–го рангу загального вигляду позначається як V^n;

3) кожна пара, трійка і т.п. група індексів пов'язаних між собою симетричною перестановкою позначається у квадратних дужках як [V^2], [V^3] і т.д., відповідно;

4) кожна пара, трійка і т.п. група індексів пов'язаних між собою антисиметричною перестановкою позначається у фігурних дужках як {V^2}, {V^3} і т.д., відповідно;

5) правила 3) і 4) застосовуються і для задання симетрії відносно переста-

новок між собою пар, трійок і т.п. груп індексів як цілих комплексів.

Приклади позначень симетрії перестановок індексів. 1) Тензор третього рангу симетричний по другому і третьому індексах. Позначення Яна має вигляд V[V^2];

2) Тензор четвертого рангу симетричний всередині першої і антисиметричний всередині другої пар. Позначення Яна має вигляд [V^2]{V^2}.

3) Тензор четвертого рангу симетричний всередині двох пар та між парами. Позначення Яна має вигляд [[V^2]^2].

4) Тензор шостого рангу симетричний всередині кожної із трьох пар та між другою і третьою парами. Позначення Яна має вигляд [V^2][[V^2]^2].

5) Тензор третього рангу антисиметричний по трьох індексах. Позначення Яна має вигляд {V^3}.

6) Тензор п'ятого рангу симетричний всередині пар із другого і третього та четвертого і п'ятого індексів та антисиметричний відносно перестановки цих пар. Позначення Яна має вигляд V{[V^2]^2}.

Побудова груп перестановок індексів у тензорів різного рангу. Для позначення такої групи використовуємо позначення Яна, яке розглядається як ім'я впорядкованої сукупності переставлених індексів. Під цим іменем ховається певна послідовність виразів, йому присвоюється вираз цієї послідовності, тому тут використовується не знак рівності, а знак присвоєння =.

Група перестановок індексів у тензорі 2-го рангу. Побудовано перестановки: 1) [V^2] — симетричний тензор. Відповідає за вклад у вільну енергії наступних величин: а) лінійних доданків по симетричному тензору другого рангу, зокрема деформацій; б) квадратичних доданків векторної величини, зокрема електричного поля і т.п. Відповідний символ Яна позначає такий набір із переставлених індексів та відповідний цій перестановці множник перед тензором (останнє число), який появляється при такій перестановці індексів:

$$[V\hat{\ }2] = [[1,\ 2, 1], [2, 1, 1]].$$

2) {V^2} — антисиметричний тензор другого рангу. Відповідний символ Яна позначає такий набір:

$$\{V\hat{\ }2\} = [[1, 2, 1], [2, 1, -1]].$$

Групи перестановок індексів у тензорі 3-го рангу. Побудовано перестановки: 1) V[V^2] — тензор, симетричний всередині пари із другого і третього індексів. Описує вклад у вільну енергію наступних величин: а) квадратичних доданків із вектора і симетричного тензора другого рангу, зокрема електричне поле і деформації — лінійний п'єзоефект; градієнт температури і деформація — термопружність і т.п.); б) кубічних доданків із двох векторів різної природи (електричне поле, інші градієнти і т.п.). Відповідний символ Яна позначає такий набір і множники:

$$V[V\hat{\ }2] = [[1, 2, 3, 1], [1, 3, 2, 1]].$$

2) [V^3] — тензор, симетричний відносно перестановки всіх індексів. Описує вклад у вільну енергію: а) кубічних доданків від вектора, зокрема електричне поле — квадратична діелектрична проникність і т.п. Відповідний символ Яна позначає такий набір і множники:

$$[V\hat{\ }3] = [[1, 2, 3, 1], [1, 3, 2, 1], [2, 1, 3, 1], [2, 3, 1, 1], [3, 1, 2, 1], [3, 2, 1, 1]].$$

3) V{V^2} — тензор, антисиметричний відносно перестановки другого і третього індексів. Відповідний символ Яна позначає такий набір і множники:

$$V\{V\hat{\ }2\} = [[1, 2, 3, 1], [1, 3, 2, -1]].$$

4) {V^3} — повна антисиметрія по всіх індексах, тензор Леві-Чивіта. Відповідний символ Яна позначає такий набір і множники:

$$\{V\hat{\ }3\} = [[1, 2, 3, 1], [2, 1, 3, -1], [1, 3, 2, -1], [3, 1, 2, 1], [3, 2, 1, -1], [2, 3, 1, 1]].$$

Групи перестановок індексів у тензорі 4-го рангу. Побудовано перестановки: 1) [V^2]V^2 — симетрія всередині однієї пари (взято першу). Описує вклад у вільну енергію: а) кубічних доданків із симетричного тензора другого рангу і двох різних векторів (деформація, електричне поле і т.п.); б) доданків 4-го порядку із квадрата одного вектора і двох інших векторів. Відповідний символ Яна позначає такий набір і множники:

$$[V\hat{\ }2]\,V\hat{\ }2 = [[1,2,3,4,1],[2,1,3,4,1]].$$

2) [V^2]^2 — симетрія всередині першої та другої пар. Описує вклад у вільну енергію: а) квадратичних доданків по двох симетричних тензорах другого рангу різної природи (деформації і швидкості деформацій); б) кубічних доданків по симетричному тензору другого рангу і квадрату вектора (деформація і електричне поле — електрострикція і т.п.); в) доданків 4-го порядку по квадратах двох векторів. У цьому випадку можна створити два символи Яна, які обидва позначають однакові набори і множники:

$$[V\hat{\ }2][V\hat{\ }2] = [[1,2,3,4,1],[2,1,3,4,1],[1,2,4,3,1],[2,1,4,3,1]],$$

$$[V\hat{\ }2]\hat{\ }2 = [[1,2,3,4,1],[2,1,3,4,1],[1,2,4,3,1],[2,1,4,3,1]].$$

3) [[V^2]^2] — симетрія всередині першої та другої пар, та між парами. Описує вклад у вільну енергію квадратичних доданків по симетричному тензору другого рангу — закон Гука. Відповідний символ Яна позначає такий набір і множники:

$$\begin{aligned}[[V\hat{\ }2]\hat{\ }2] \;=\; & [[1,2,3,4,1],[2,1,3,4,1],[1,2,4,3,1],[3,4,1,2,1],[2,1,4,3,1],\\ & [3,4,2,1,1],[4,3,1,2,1],[4,3,2,1,1]].\end{aligned}$$

4) [V^4] — повна симетрія по всіх індексах. Описує вклад у вільну енергію доданків 4-го порядку по вектору (тензор кубічних діелектричних сталих). Відповідний символ Яна позначає такий набір і множники:

$$[V\hat{\ }4] = [[1,2,3,4,1],[1,2,4,3,1],[1,3,2,4,1],[1,3,4,2,1],[1,4,2,3,1],$$

$$[1,4,3,2,1],[2,1,3,4,1],[2,1,4,3,1],[2,3,1,4,1],[2,3,4,1,1],$$
$$[2,4,1,3,1],[2,4,3,1,1],[3,1,2,4,1],[3,1,4,2,1],[3,2,1,4,1],$$
$$[3,2,4,1,1],[3,4,1,2,1],[3,4,2,1,1],[4,1,2,3,1],[4,1,3,2,1],$$
$$[4,2,1,3,1],[4,2,3,1,1],[4,3,1,2,1],[4,3,2,1,1]].$$

5) {[V^2]^2} — тензор симетричний всередині першої і другої пар та антисиметричний між парами. Відповідний символ Яна позначає такий набір і множники:

$$\{[V\hat{\ }2]\hat{\ }2\} = [[1,2,3,4,1],[2,1,3,4,1],[1,2,4,3,1],[3,4,1,2,-1],[2,1,4,3,1],$$
$$[3,4,2,1,-1],[4,3,1,2,-1],[4,3,2,1,-1]].$$

6) {V^2}^2 — тензор антисиметричний всередині першої і другої пар. Відповідний символ Яна позначає такий набір і множники:

$$\{V\hat{\ }2\}\hat{\ }2 = [[1,2,3,4,1],[2,1,3,4,-1],[1,2,4,3,-1],[3,4,1,2,1],[2,1,4,3,1],$$
$$[3,4,2,1,-1],[4,3,1,2,-1],[4,3,2,1,1]].$$

Групи перестановок індексів у тензорі 5-го рангу. Побудовано перестановки: 1) V[V^2]V^2 — симетрія всередині однієї пари (взято другий і третій). Описує вклад у вільну енергію: а) доданків 4-го порядку із симетричного тензора другого рангу і трьох різних векторів; б) доданки 5-го порядку із квадрата одного вектора і трьох інших різних векторів. Відповідний символ Яна позначає такий набір і множники:

$$V[V\hat{\ }2]V\hat{\ }2 = [[1,2,3,4,5,1],[1,3,2,4,5,1]].$$

2) V[V^2]^2 — симетрія всередині першої та другої пар (взято другий-третій та четвертий-п'ятий). Описує вклад у вільну енергію: а) кубічних доданків із двох симетричних тензорів другого рангу різної природи і вектора; б) доданки 4-го порядку із симетричного тензора другого рангу, квадрата одного вектора і другого вектора іншої природи; в) доданки 5-го порядку по квадратах двох

різних векторів і третьому вектору. Відповідний символ Яна позначає такий набір і множники:

$$V[V\hat{\ }2]\hat{\ }2 = [[1,2,3,4,5,1],[1,3,2,4,5,1],[1,2,3,5,4,1],[1,3,2,5,4,1]].$$

3) V[[V^2]^2] — симетрія всередині першої та другої пар, та між парами (взято другий-третій та четвертий-п'ятий). Описує вклад у вільну енергію: а) кубічних доданків по квадрату симетричного тензора другого рангу і вектору. Відповідний символ Яна позначає такий набір і множники:

$$\begin{aligned}V[[V\hat{\ }2]\hat{\ }2] = {}&[[1,2,3,4,5,1],[1,3,2,4,5,1],[1,2,3,5,4,1],[1,4,5,2,3,1],\\&[1,3,2,5,4,1],[1,4,5,3,2,1],[1,5,4,2,3,1],[1,5,4,3,2,1]].\end{aligned}$$

4) [V^5] — повна симетрія по всіх індексах. Описує вклад у вільну енергію: а) доданків 5-го порядку по вектору (тензор діелектричних сталих 4-го порядку). Відповідний символ Яна позначає набір всіх перестановок із п'яти індексів, тобто $5! = 120$, та всі множники рівні $+1$ і тут не наводиться.

Групи перестановок індексів у тензорі 6-го рангу. Побудовано перестановки: 1) [V^2]^3 — симетрія всередині пар із першого і другого, третього і четвертого та п'ятого і шостого, індексів. Відповідний символ Яна позначає такий набір і множники:

$$\begin{aligned}[V\hat{\ }2]\hat{\ }3 = {}&[[1,2,3,4,5,6,1],[2,1,3,4,5,6,1],[1,2,4,3,5,6,1],[1,2,3,4,6,5,1],\\&[2,1,4,3,5,6,1],[2,1,3,4,6,5,1],[1,2,4,3,6,5,1],[2,1,4,3,6,5,1]].\end{aligned}$$

2) [[V^2]^2][V^2] — симетрія всередині пар із першого і другого, третього і четвертого та п'ятого і шостого, індексів та між першою і другою парами. Відповідний символ Яна позначає такий набір і множники:

$$\begin{aligned}&[[V\hat{\ }2]\hat{\ }2][V\hat{\ }2] =\\&\quad[[1,2,3,4,5,6,1],[2,1,3,4,5,6,1],[1,2,4,3,5,6,1],[1,2,3,4,6,5,1],\\&\quad[2,1,4,3,5,6,1],[2,1,3,4,6,5,1],[1,2,4,3,6,5,1],[2,1,4,3,6,5,1],\\&\quad[3,4,1,2,5,6,1],[4,3,1,2,5,6,1],[3,4,2,1,5,6,1],[3,4,1,2,6,5,1],\\&\quad[4,3,2,1,5,6,1],[4,3,1,2,6,5,1],[3,4,2,1,6,5,1],[4,3,2,1,6,5,1]].\end{aligned}$$

3) [[V^2]^3] — симетрія всередині пар із першого і другого, третього і четвертого та п'ятого і шостого, індексів та між всіма парами. (Квадратична пружність). Відповідний символ Яна позначає такий набір і множники:

$$
\begin{aligned}
&[[V\hat{\ }2]\hat{\ }3] = \\
&\quad [[5,6,4,3,2,1,1],[3,4,5,6,1,2,1],[2,1,4,3,6,5,1],[1,2,4,3,6,5,1], \\
&\quad [2,1,3,4,6,5,1],[2,1,4,3,5,6,1],[6,5,3,4,2,1,1],[4,3,2,1,6,5,1], \\
&\quad [4,3,6,5,1,2,1],[3,4,2,1,6,5,1],[4,3,5,6,2,1,1],[1,2,3,4,5,6,1], \\
&\quad [4,3,2,1,5,6,1],[4,3,1,2,6,5,1],[3,4,1,2,6,5,1],[3,4,2,1,5,6,1], \\
&\quad [4,3,5,6,1,2,1],[4,3,1,2,5,6,1],[6,5,4,3,2,1,1],[3,4,1,2,5,6,1], \\
&\quad [4,3,6,5,2,1,1],[1,2,5,6,3,4,1],[1,2,6,5,3,4,1],[2,1,5,6,3,4,1], \\
&\quad [1,2,5,6,4,3,1],[2,1,5,6,4,3,1],[2,1,6,5,3,4,1],[5,6,1,2,3,4,1], \\
&\quad [2,1,6,5,4,3,1],[1,2,6,5,4,3,1],[6,5,1,2,4,3,1],[6,5,2,1,3,4,1], \\
&\quad [5,6,1,2,4,3,1],[5,6,2,1,3,4,1],[6,5,1,2,3,4,1],[3,4,5,6,2,1,1], \\
&\quad [5,6,4,3,1,2,1],[3,4,6,5,2,1,1],[6,5,3,4,1,2,1],[6,5,2,1,4,3,1], \\
&\quad [5,6,3,4,1,2,1],[5,6,2,1,4,3,1],[5,6,3,4,2,1,1],[3,4,6,5,1,2,1], \\
&\quad [6,5,4,3,1,2,1],[2,1,3,4,5,6,1],[1,2,4,3,5,6,1],[1,2,3,4,6,5,1]].
\end{aligned}
$$

Для побудови представлення інших груп внутрішньої симетрії потрібно поступати аналогічно до вище наведених прикладів, тобто наступним чином (як приклад можна використати будь–що з проведених ви е побудов):

1) Спочатку задати природне розміщення тензорних індексів, тобто список чисел від одиниці до рангу і +1 в кінці списку.

2) Послідовно задати всі елементарні перестановки всередині лише тих груп індексів, які пов'язані між собою якоюсь симетрією. При цьому не зачіпати індекси в інших групах і обов'язково дописувати в кінці списку індексів число +1, або -1 відповідно до симетрії, або антисиметрії перестановки.

3) Користуючись програмою множення перестановок утворити всі можливі композиції перестановок із заданих елементарних. При цьому слід пам'ятати,

що пропуск якоїсь перестановки призведе до помилки, а її багатократний повтор — ні.

4) Для виключення повторів однієї і тієї ж перестановки із повного списку утворити з них набір, а потім запам'ятати його як список. (Так зроблено при побудові перестановок для [V^2]^3).

5) Запам'ятати цей список як символ Яна для цієї групи внутрішньої симетрії.

РОЗДІЛ 3

ВНУТРІШНЯ СИМЕТРІЯ ТЕНЗОРІВ

Програма перестановки заданих тензорних індексів. Перший аргумент — список тензорних індексів (фактично це багатовимірний індекс), другий аргумент — позиційно–числовий запис перестановки індексів. В k–ій позиції записується старий позиційний номер переставленого сюди тензорного індексу.

Програма побудови впорядкованого переліку індексів тензора R-го рангу в D– вимірному просторі. Задається розмірність простору і ранг тензора. Результат – список індексів елементів тензора впорядкований в стандартному вигляді, коли першим змінюється останній індекс, другим – передостанній і т.д.

Програма усереднення тензора по групі перестановок його індексу. Задаються тензор і група перестановок індексу. Шукається середнє по групі значення для кожного елемента тензора. Воно є лінійно комбінацією тих компонент цього ж тензора, які отримуються із задано о при всіх перестановках його індексів, заданих групою. Зауважимо, що ця програма аналогічна до програми усереднення тензора по групі симетрії кристалічної гратки. Але відрізняється лише операцією групового множення. Тут „множення“ елемента тензора на елемент групи призводить до перестановки індексів цього елемента і алгебраїчного множення на +1 для симетричної перестановки і на -1 для антисиметричної. У випадку груп кристалічної симетрії „множення“ зводиться до тензорного перетворення заданого елементом групи, тобто дає значно більшої кількості математичних операцій.

Симетрична та антисиметрична перестановки пари індексів i_l, i_m якогось елемента тензора k–го рангу задається формулами:

$$t_{i_1, i_2..i_l, i_m..i_k} = t_{i_1, i_2..i_m, i_l..i_k}, \tag{3.1}$$

та

$$t_{i_1,\, i_2..i_l,\, i_m..i_k} = -t_{i_1,\, i_2..i_m,\, i_l..i_k}, \tag{3.2}$$

відповідно. Аналогічно задаються вирази для складніших перестановок кількох індексів у тензорі.

Для усередненого по групі елемента тензора, беручи до уваги ці властивості та означення, одержуємо такий вираз:

$$N\, t_{i_1,\, i_2..i_k\, Aver} = \sum_{m=1}^{N} P_m\, t_{i_1,\, i_2..i_k}, \tag{3.3}$$

де індекс m в перестановці нумерує її як елемент групи. Це і є результуюча формула для роботи програми.

Якщо створити по цій формулі програму, то на її виході кожен елемент буде замінено на лінійну комбінацію елементів, які отримуються із нього шляхом перестановки індексів. Число таких комбінацій обов'язково менше за число компонент, якщо група не тотожна, а деякі із них можуть бути рівні нулю, якщо є антисиметричні перестановки. Як правило, вирази для компонент усередненого тензора ніколи не представляють у вигляді лінійної комбінації компонент стартового тензора. Лінійно незалежні комбінації якимось чином позначають, і доволі часто елементом із наймолодшим індексом, який в них входить, враховуючи знак перед елементом. Якщо такий елемент входить лише в одну комбінація, то це не викликає проблем, а якщо в різні, то потрібно вибрати серед цих комбінацій лінійно незалежні, а решту виразити через них. Тоді в кінцевому виразі частина елементів усередненого тензора матиме вигляд індексованих імен, а частина — їх лінійних комбінацій і, можливо, нулів. Якщо в просторі тензорних індексів ввести матричне представлення групи перестановок, то такі матриці матимуть в кожному рядку і стовпчику лише по одній одиниці, а решта їх елементів рівна нулю. Тому такі матриці лише переставляють рядки у векторних індексах, ніколи не змінюючи їх значень. Отже значення якоїсь компоненти векторного індексу ніколи не змінюється, а змінюється лише її позиція у векторному індексі. Тому векторний індекс із заданими компонентами після перестановок ніколи не змінить значення своїх компонент. Отже будь-який набір компонент векторного індексу уде утворювати лише одну лінійну комбінацію. Тому для перейменування лінійних комбінацій в усередненому по групі перестановок тензорі ви рано правило надання їй імені елемента з наймолодшим індексом, який вона утримує. Звичайно, з урахуванням знаку перед компонентою. Саме цей алгоритм перейменування і включено в програму. Він реалізується в програмі `Index_Sort`, яка наведена одразу ж після програми інтегрування по групі.

Отже потрібно створити програму, яка буде перейменовувати лінійні комбінації для компонент усередненого тензору. Щоб ці комбінації були лінійно незалежними, необхідно, щоб такими були елементи групи перестановок. Тому побудова груп перестановок індексів повинна робитися дуже ретельно.

Ідея цієї програми проста — в лінійній комбінації вибрати елемент з наймолодшим індексом, врахувати знак перед ним і запам'ятати замість цієї комбінації.

Загальна схема роботи обох програм. На вхід програми подається: 1) тензор, елементами якого є обов'язково лише індексоване ім'я (не число і не лінійна комбінація індексованих імен); 2) група перестановок. На виході буде усереднений тензор, кожна компонента якого представлена одним із наступних виразів : 1) індексоване ім'ям; 2) індексоване ім'ям помножене на число -1; 3) число 0.

Таким чином, маючи групу перестановок індексів для тензора будь-якого рангу можна знайти його усереднений по даній групі вигляд. Результатом буде вираз для кожного елемента усередненого тензора через пов'язаний із ним перестановкою елемент стартового тензора з наймолодшим індексом. Ненульові елементи з наймолодшими індексами є незалежними і не виражаються через інші.

РОЗДІЛ 4

ГРУПИ СИМЕТРІЇ КРИСТАЛІВ ТА ЇХ ПРЕДСТАВЛЕННЯ

У цьому розділі наведені матриці точкових перетворень симетрії, які допускає кристалічна структура твердого тіла взагалі. Матриця поворотів Ейлера задана згідно [18] щоб далі легше усереднювати ізотропні тензори по всіх кутах повороту. Справа в тому, що всі інтеграли по кутах обчислюються аналітично через β-функцію і залежать лише від степенів косинуса і синуса.

$$Eq = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad Inv = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

$$R1 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad R2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad R3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

$$D1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad D2 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad D3 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$T1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad T2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad T3 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$M1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad M2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$S1 = \begin{bmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{-1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad S2 = \begin{bmatrix} \frac{-1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{-1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\ddot{O}=\begin{bmatrix} \cos(\phi)\cos(\theta)\cos(\psi)-\sin(\phi)\sin(\psi) & -\cos(\phi)\cos(\theta)\sin(\psi)-\sin(\phi)\cos(\psi) & \cos(\phi)\sin(\theta) \\ \sin(\phi)\cos(\theta)\cos(\psi)+\cos(\phi)\sin(\psi) & -\sin(\phi)\cos(\theta)\sin(\psi)+\cos(\phi)\cos(\psi) & \sin(\phi)\sin(\theta) \\ -\sin(\theta)\cos(\psi) & \sin(\theta)\sin(\psi) & \cos(\theta) \end{bmatrix}.$$

Далі наведені групи перетворень симетрії, які допускаються класами симетрії кристалів. Всього 33 групи. Взято із [1], і звірено з [11, 19]. Символ $*$ позначає матричне множення.

Таблиця 4.1

Група	**Елементи її точкової симетрії**
G1	Eq
G2	Eq, Inv
G3	Eq, R3
G4	Eq, D3
G5	Eq, Inv, R3, D3
G6	Eq, R2, R1, D3
G7	Eq, D1, D2, D3
G8	Eq, Inv, R1, R2, R3, D1, D2, D3
G9	Eq, D3, D1*T3, D2*T3
G10	Eq, D3, R1*T3, R2*T3
G11	Eq, Inv, R3, D3, R1*T3, R2*T3, D1*T3, D2*T3
G12	Eq, D1, D2, D3, T3, D1*T3, D2*T3, D3*T3
G13	Eq, R1, R2, D3, T3, R1*T3, R2*T3, D3*T3
G14	Eq, D1, D2, D3, Inv*T3, R1*T3, R2*T3, R3*T3
G15	Eq, Inv, R1, R2, R3, D1, D2, D3, T3, Inv*T3, R1*T3, R2*T3, R3*T3, D1*T3, D2*T3, D3*T3
G16	Eq, D1, D2, D3, M1, D1*M1, D2*M1, D3*M1, M2, D1*M2, D2*M2, D3*M2
G17	Eq, Inv, R1, R2, R3, D1, D2, D3, M1, Inv*M1, R1*M1,R2*M1, R3*M1,D1*M1, D2*M1, D3*M1, M2, Inv*M2, R1*M2, R2*M2, R3*M2, D1*M2, D2*M2, D3*M2
G18	Eq, D1, D2, D3, T1, D1*T1, D2*T1, D3*T1, T2, D1*T2, D2*T2, D3*T2, T3, D1*T3, D2*T3, D3*T3, M1, D1*M1, D2*M1, D3*M1, M2, D1*M2, D2*M2, D3*M2
G19	Eq, D1, D2, D3, Inv*T1, R1*T1, R2*T1, R3*T1, Inv*T2, R1*T2, R2*T2, R3*T2, Inv*T3, R1*T3, R2*T3, R3*T3, M1, D1*M1, D2*M1, D3*M1, M2, D1*M2, D2*M2, D3*M2

G20	Eq, Inv, R1, R2, R3, D1, D2, D3, T1, Inv*T1, R1*T1, R2*T1, R3*T1, D1*T1, D2*T1, D3*T1, T2, Inv*T2, R1*T2, R2*T2, R3*T2, D1*T2, D2*T2, D3*T2, T3, Inv*T3, R1*T3, R2*T3, R3*T3, D1*T3, D2*T3, D3*T3, M1, Inv*M1, R1*M1, R2*M1, R3*M1, D1*M1, D2*M1, D3*M1, M2, Inv*M2, R1*M2, R2*M2, R3*M2, D1*M2, D2*M2, D3*M2
G21	Eq, S1, S2
G22	Eq, S1, S2, Inv, Inv*S1, Inv*S2
G23	Eq, S1, S2, R1, R1*S1, R1*S2
G24	Eq, S1, S2, D1, D1*S1, D1*S2
G25	Eq, S1, S2, Inv, Inv*S1, Inv*S2, R1, R1*S1, R1*S2, D1, D1*S1, D1*S2
G26	Eq, S1, S2, R3, R3*S1, R3*S2
G27	Eq, S1, S2, D3, D3*S1, D3*S2
G28	Eq, S1, S2, Inv, Inv*S1, Inv*S2, R3, R3*S1, R3*S2, D3, D3*S1, D3*S2
G29	Eq, S1, S2, R2, R2*S1, R2*S2, R3, R3*S1, R3*S2, D1, D1*S1, D1*S2
G30	Eq, S1, S2, D1, D1*S1, D1*S2, D2, D2*S1, D2*S2, D3, D3*S1, D3*S2
G31	Eq, S1, S2, R1, R1*S1, R1*S2, R2, R2*S1, R2*S2, D3, D3*S1, D3*S2
G32	Eq, S1, S2, Inv, Inv*S1, Inv*S2, R1, R1*S1, R1*S2, R2, R2*S1, R2*S2, R3, R3*S1, R3*S2, D1, D1*S1, D1*S2, D2, D2*S1, D2*S2, D3, D3*S1,D3*S2
G33	Euler

Якщо підставити наведені вище матриці поворотів у ці вирази, то отримаємо сукупність громіздких виразів, які ми наведемо пізніше для економії місця лише для деяких груп, які мають широке застосування.

У Таблиці 4.2 наведено поділ груп симетрії на сингонії. Згідно роботи [1], таких сингоній 6, а згідно вітчизняному поділу [8, 19], таких сингоній 7. Поділ на сингонії, та сукупності класів всередині сингоній зроблено згідно [11]. Там же дано відповідні міжнародні позначення для груп симетрії, згідно [19]. Їх зручно використовувати для проведення обчислень, оскільки, як правило, кристалічна симетрія в літературі задається за міжнародними позначеннями. Також дано широко розповсюджене позначення груп симетрії по Шенфлісу.

Таким чином при отриманні рівнянь, для дослідження різних тензорів можна задавати групу симетрії кристалів або по Шенфлісу, або по міжнародних позначеннях, або задаючи групу перетворень по [1].

Таблиця 4.2

Назви сингоній		**Позначення груп симетрії**		
Міжнародна	**Українська**	**Схоутен**	**Міжна-родне**	**Шенфліс**
Триклінна	Триклінна	G1 G2	1 _1	C1 Ci
Моноклінна	Моноклінна	G3 G4 G5	m 2 2/m	C1h C2 C2h
Ромбічна	Ромбічна	G6 G7 G8	mm^2 222 mmm	C2v D2 D2h
Тригональна	Тригональна-1	G21 G22	3 _3	C3 C3i
	Тригональна-2	G23 G24 G25	3m 32 _3m	C3v D3 D3d
Тетрагональна	Тетрагональна-1	G12 G13 G14 G15	_42m 4mm 422 4/mmm	D2d C4v D4 D4h
	Тетрагональна-2	G9 G10 G11	_4 4 4/m	S4 C4 C4h
Кубічна	Кубічна-1	G18 G19 G20	_43m 432 m3m	Td Oo Oh
	Кубічна-2	G16 G17	23 m/3	T Th
Гексагональна	Гексагональна-1	G29 G30 G31 G32	_6m2 622 6mm 6/mm	D3h D6 C6V 6/mm
	Гексагональна-2	G26 G27 G28	_6 6 6/m	C3h C6 C6h
Ізотропна	Ізотропна	G33	—	—

Наведемо матриці точкових перетворень симетрії для деяких груп, які мають практичне застосування. Зокрема це група симетрії $D3$ по Шенфлісу із тригональної сингонії для природного п'єзо-кристалу кварцу:

$$G24 = I32 = D3 \ = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{-1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \frac{-1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{-1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{-1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ \frac{-1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Група симетрії $C6$ по Шенфлісу, яка притаманна кристалам із віссю симетрії шостого порядку, що актуально для численних вуглецевих структур:

$$G27 = I6 = C6 \ = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{-1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \frac{-1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{-1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ \frac{-1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3}0 & 0 & 1 \end{bmatrix};$$

Група симетрії Oo по Шенфлісу, або ж $I\,432$ за міжнародним позначенням, або ж $G19$, яка притаманна кристалам із кубічною симетрії, найвищою перед ізотропними середовищами:

$$Oo \ = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

РОЗДІЛ 5

МАТЕРІАЛЬНІ ТЕНЗОРИ ТА ЇХ СИМЕТРІЯ

Програма усереднення тензора по групі симетрії із заданими елементами групи. Вхідні параметри: 1) тензор, який буде усереднений (це обов'язково одне індексоване ім'я, а не сума таких імен); 2) елементи групи, які даються як матриці перетворень, відносно яких даний тензор повинен бути інваріантним. Вихідні дані — елементи усередненого по групі тензора. Вони є лінійною комбінацією елементів вхідного тензора.

Спочатку визначається число елементів у групі, потім — ранг тензора, далі — розмірність простору, в якому задано тензор. Після цього будується впорядкований список індексів елементів тензора, визначається його довжина, та будується порожня матриця для усереднено.

Після цього усереднюється кожен елемент тензора по групі. Усереднений по групі елемент обчислюється як середнє арифметичне від усіх його перетворень елементами групи. Це є очевидним наслідком тривіального запису, в якому якийсь елемент тензора представлено сумою N–кратного додавання його ж самого, ділену на N. В силу симетрії тензора відносно елементів групи, кожен доданок в такій сумі замінюємо на його перетворення, задане елементом групи. Сума від цього не змінюється, але тоді елемент виражається, в принципі, через всі елементи групи. Деякі із таких сум стануть рівні нулю, а деякі — не стануть, а можуть утворювати якісь комбінації із елементів вхідного тензора. Число таких лінійно незалежних комбінацій буде рівне числу лінійно незалежних елементів вхідного тензора, якщо він задовольняє симетрії заданій групою. Число відмінних від нуля компонент і їх вирази через незалежні елементи також буде видно після такого усереднення.

Перетворення симетрії якогось елемента тензорів 1–го , 2–го, 3–го рангів задається формулами:

$$t_{i_1} = g_{i_1,\, j_1}\, t_{j_1}, \tag{1}$$

$$t_{i_1,\,i_2} = g_{i_1,\,j_1}\, g_{i_2,\,j_2}\, t_{j_1,\,j_2}, \tag{2}$$

$$t_{i_1,\,i_2,\,i_3} = g_{i_1,\,j_1}\, g_{i_2,\,j_2}\, g_{i_3,\,j_3}\, t_{j_1,\,j_2,\,j_3}, \tag{3}$$

де $g_{i,\,j}$ — матриця перетворення симетрії. Це одна із тих матриць, які входять в дану групу кристалічної симетрії. Звідси очевидна формула для для перетворення тензора довільного рангу k у вигляді:

$$t_{i_1,\,i_2..i_k} = g_{i_1,\,j_1}\, g_{i_2,\,j_2}..g_{i_k,\,j_k}\, t_{j_1,\,j_2..j_k}. \tag{4}$$

Для побудови програми обчислення перетвореного елемента тензора k-го рангу з індексами $[i_1,\, i_2..i_k]$ використано скалярне множення однаково впорядкованих елементів перетворення і елементів тензора. Перші утворені добутком k матриць $g_{i_1,\,j_1}\, g_{i_2,\,j_2}..g_{i_k,\,j_k}$ і впорядковані стандартно по індексах $[j_1,\, j_2..j_k]$, а другі — це стандартно впорядковані елементи тензора $t_{j_1,\,j_2..j_k}$. Отже алгоритмічна формула перетворення набуває вигляду:

$$t_{i_1,\,i_2..i_k} = \sum_{L=1}^{n^k} G_{i_1,\,i_2..i_k,\,L}\, t_L, \tag{5}$$

де n — розмірність простору, в якому задано тензор, k — ранг заданого тензора, $G_{i_1,\,i_2..i_k,\,L}$ – стандартно впорядкований по других індексах, тобто по $j_1,\, j_2..j_k$ добуток k матриць перетворення $g_{i_1,\,j_1}\, g_{i_2,\,j_2}..g_{i_k,\,j_k}$, t_L — стандартно впорядкований по індексах тензор. Фактично G це квадратна матриця розміром n^k на n^k. Тому із ростом рангу тензора кількість елементів в ньому росте експоненціально.

Для усередненого по групі елемента тензора, таким чином отримуємо наступний вираз:

$$N\, t_{i_1,\,i_2..i_k\,Aver} = \sum_{m=1}^{N} \left(\sum_{L=1}^{n^k} G_{m,\,i_1,\,i_2..i_k,\,L}\, t_L \right), \tag{6}$$

де перший індекс m в елементі групи нумерує його як елемент групи. Це і є результуюча формула для роботи програми.

У випадку усереднення псевдотензорів, праві частини формул (1-6) потрібно домножити на визначник матриці перетворення. Він рівний $+1$ для поворотних перетворень і -1 для дзеркальних перетворень.

Саме по цій формулі і працює наступна програма усереднення тензора по групі кристалічної симетрії. На вхід задаються тензор, якому присвоюється атрибут істинний чи псевдо, і група кристалічної симетрії.

Вхідний тензор має елементи, які є або індексованим ім'ям, або індексованим ім'ям помноженим на число -1, або число 0, але завжди не сума індексованих імен. Фактично, це представлення тензора усередненого по групі перестановок, яку він допускає в силу свого означення, то то це результат усереднення проведеного в попередньому розділі.

Група симетрії — це одна із заданих вище 32–ох кристалічних груп, або група ізотропного середовища.

На виході будуть елементи усередненого по групі тензора, представлені в одному із трьох виглядів: 1) число 0; 2) лише елемент вхідного тензора; 3) лінійна комбінація елементів вхідного тензора.

Підкреслимо, що для цього усереднення ми не проводимо одразу ж перейменування лінійних комбінацій, а залишаємо результати такими як вони є, тобто деякі елементи вихідного тензора будуть лінійними комбінаціями елементів вхідного тензора. Програма усереднення тензора по неперервній трьох–параметричній групі O(3) ізотропного тіла. Представлення групи реалізоване матрицею поворотів Ейлера. Проводиться усереднення по повному куту повороту навколо довільної осі та по всіх напрямах цієї осі у просторі. При цьому всі інтеграли виражені через бета-функцію. Її аргументи визначаються лише степенями косинуса і синуса в підінтегральному виразі. Тому замість косинусів і синусів в матричному представленні групи O(3) використані певні позначення, степені яких використовуються для обчислення інтегралів.

Для тензорів непарного рангу автоматично стають рівними нулю всі компоненти без проведення інтегрування по кутах, тому в представленні ізотропної групи не використано інверсії явно.

На вхід програми дається тензор усереднений по групі перестановок, тобто із заданою внутрішньою симетрією. Елементи тензора можуть бути лише індексованим іменем, або індексованим іменем помноженим на -1.

Для роботи та перетворення отриманих результатів створені допоміжні програми, які необхідні для проведення перейменування елементів усередненого по кристалічній групі тензора. Вони мають чисто технічний характер. Так, програма переводу одномірного індексу i в тензорний індекс для тензору R–го рангу в Dim–вимірному просторі.

Аналогічна обернена програма перетворення багатовимірного тензорного індексу в одновимірний. Застосовується для кожного з елементів тензора, що входить в задану лінійної комбінацію. Утворений список індексів впорядковано по їх зростанню.

Програма утворення списку із доданків лінійної комбінації елементів тензора. Список впорядковано по зростанню одновимірного тензорного індексу у елемента тензора, який входить в кожний доданок комбінації. Список може мати лише ті елементи, які є у шаблоні для всіх лінійних комбінації сімейства. Цей шаблон — це перелік всіх елементів стартового тензора, що входять в сімейство. Якщо якийсь елемент із шаблона не входить в дану комбінацію, то коефіцієнт перед ним рівний нулю.

Програма виділення сімейств у заданому наборі списків індексів. Сімейством вважаємо сукупність таких виразів, що для кожного із них знайдеться бодай один інший, з яким він має бодай один спільний елемент стартового вектора. Наприклад: [1,2,3,6,89], [1,2,3,67,90,123] — сімейство, бо перші три елементи спільні; [1,4,8,38], [5,38,45], [24,45,67,90], [4,101,130] — сімейство, бо кожний можна зв'язати хоча б із одним іншим (перший з другим і останнім, а третій з другим).

Вхідний тензор для цієї програми утворено із стартового тензора після його усереднення по групі перестановок і по групі кристалічної симетрії, або по ізотропній групі. Тому його елементи можуть бути рівними: 1) нулю; 2) елементу стартового вектора; 3) лінійній комбінації елементів стартового вектора.

Як зазначалося вище, вирази для компонент усередненого тензора ніколи не представляють у вигляді лінійної комбінації компонент вхідного тензора. Їх завжди перейменовують за якимось правилом. Для групи перестановок ми вибрали правило вибору імені і знаку по елементу із наймолодшим індексом, який входить в лінійну комбінацію.

Але для груп просторових перетворень бувають випадки, коли частина лінійних комбінацій є залежною від інших, незалежних лінійних комбінацій. Найвідоміший приклад — тензор пружних сталих ізотропного середовища, який має дві незалежні компоненти λ і μ, через які виражаються ненульові компоненти, причому $c_{i,i,i,i} = \lambda + 2\,\mu$, $i = 1, 2, 3$, $c_{i,i,j,j} = \lambda$, $c_{i,j,i,j} = \mu$ при $j = 1, 2, 3$, яке не рівне i.

Подібна ситуація для кристалічних груп із матрицями повороту третього порядку, Тому потрібно ще досліджувати всі отримані лінійні комбінації елементів даного тензора на предмет їх лінійної незалежності. Взагалі, це трапляється тоді, коли одні і ті ж елементи входять в декілька різних лінійних комбінацій. Зокрема, у випадку перестановки індексів це завжди так для антисиметричної перестановки. Але там дві лінійні комбінації відрізняються лише знаком і цю відмінність легко розпізнати по знаку наймолодшого елемента. У випадку точкових симетрій такі комбінації складніші і їх лінійну залежність потрібно досліджувати окремо. Але в будь-якому випадку це лише ті лінійні комбінації, в які входять одні і ті ж елементи заданого тензора.

Перейменування незалежних комбінацій робимо за правилом про наймолодший елемент. В програмі обчислюються дві глобальні змінні: $\_Numb\_Non$ — кількість ненульових компонент у вихідному тензорі; $\_Indep\_Elem$ — список імен незалежних компонент, через які виражаються всі інші. В цей список вносяться впорядковано спочатку ті елементи, які зустрічаються лише самі, або помножені на -1, а потім ті, які входять у більш складні комбінації.

Таким чином для заданого матеріального тензора будь-якого рангу можна встановити його вигляд у кристалі будь-якої симетрії. Для цього потрібно усереднити цей тензор по кристалічній групі.

РОЗДІЛ 6

ПОВНА СИМЕТРІЯ ТЕНЗОРА

Програма побудови матеріального тензора заданого рангу заданої внутрішньої симетрії і заданого типу для кристалу заданої точкової групи симетрій.

На вхід задається індексований масив елементів тензора, назва групи внутрішньої симетрії, назва групи кристалічної симетрії та тип тензора (тензор, або псевдотензор).

На виході тензор усереднений по обох групах згідно його типу. Елементи перейменовані по правилах: 1) внутрішня симетрія залишає незмінними елементи з наймолодшими індексами, які вважаються незалежними, а залежні виражає через них; 2) точкова симетрія залишає незмінними знайдені незалежні елементи з наймолодшими індексами, а залежні виражає через них.

Для виведення результатів розрахунку у звичайному вигляді створена програма перейменування елементів тензора. Воно відбувається за таким правилом: 1) задається ім'я, яке будуть носити елементи усередненого тензора. Воно може бути лише новим іменем; 2) замість багатокомпонентного тензорного індексу записується символ, побудований із його багатовимірного індексу за наступним правилом.

Для тензорів непарного рангу перший індекс не перекодовується і перекодування починається із пари, утвореної другим і третім індексами, четвертим і п'ятим і т.д. А для тензора парного рангу перекодування починається з першої пари індексів. Спочатку пара індексів перекодовується в позначення одним числом за стандартними правилами [8, 13, 19]. А потім ці числа послідовно записуються без розділових ком. Підкреслимо що так одержується індекс, який є символом, а не число.

Програма запису тензора у вигляді певних матриць. Для тензорів третього і четвертого рангів використано їх стандартний матричний запис [8, 13, 19].

Його ж можна одержати і за допомогою двох окремих програм, також наведених нижче.

Перерахунок пар індексів в один індекс здійснюється за традиційними правилами. Для тензорів вищих рангів друкуються лише ненульові компоненти в порядку зростання їх одновимірного індексу.

Програма знаходження тензора в новій системі координат. Алгоритм зводиться до перетворення тензора при заміні системи координат. На вхід даються тензор і матриця перетворення координат. На виході тензор в новій системі координат.

Програма перевірена, результати співпадають з відомими у літературі. Можна також переводити тензори до криволінійних координат, задаючи матрицю перетворення.

РОЗДІЛ 7

ПРИКЛАДИ РОЗРАХУНКУ ТОЧКОВОЇ СИМЕТРІЇ МАТЕРІАЛЬНИХ ТЕНЗОРІВ

Тепер будуємо матеріальні тензори різних рангів для різних точкових груп із різних сингоній. При цьому обов'язково враховуємо внутрішню симетрію тензорів, яку задаємо використовуючи символи Янга, побудовані раніше для всіх груп.

Варто відмітити таку особливість. Матеріальні тензори можуть мати різний ранг і розмірність, а їх запис, чи зображення ми повинні дати на поверхні паперу, або екрану. Найпростішим вибором є запис елементів у певній послідовності, але самі символи такого запису двовимірні — це літери, цифри, знаки і т.д., тому варто максимально використати цю двовимірність і зображати їх у вигляді двовимірних конструкцій із якихось дрібніших елементів. Історично склалося, що для цього використовується матричний запис. Для матеріальних тензорів рангу вище за другий у [13] запропоновано алгоритм перекодування двох тензорних індексів у один матричний. Його вигляд наступний:

$$ij \to \alpha, \qquad 11 \to 1, \quad 22 \to 2, \quad 33 \to 3, \quad 23 \to 4, \quad 13 \to 5, \quad 12 \to 6.$$

Далі ми будемо часто звертатися до нього як до правила Ная. Обернене правило очевидне.

7.1 Тензор діелектричних сталих

Є коефіцієнтом пропорційності вектора електричної індукції з компонентами D_i до вектора електричного поля з компонентами E_j. Цей аксіальний симетричний тензор другого рангу, має 6 незалежних компонент у 3-вимірному просторі. Означення:

$$D_i = \varepsilon_{i,j}\, E_j.$$

Ізотропне середовище та групи кубічної сингонії. Тензор діелектричних сталих має розмірність 3×3, символ Янга `[V^2]`, його група точкової симетрії у пакеті програм позначається як `'Isotropical'`. Пакет програм розрахунку матеріального тензора із вказаними характеристиками у кристалі вказаної симетрії використовує для цього робочі імена x та X, а результат обчислень є 2-мірним масивом розміру тензора з іменем $Epsilon\_Iso$, усі компоненти якого виражені через розраховані незалежні компоненти ε_α. Тензор зображується як матриця розміром 3×3. Матричний індекс α у зображенні побудований за правилом Ная із 1-го і 2-го тензорних індексів.

В результаті отримуємо: 1) кількість ненульових компонент тензора: 2) призначені пакетом незалежні компоненти, через які виражаються всі ненульові; 3) матричне представлення тензора. Вони мають наступний вигляд:

$$Non\_Vanish = 3$$

$$Indep\_Comp = [tens_{1,1}]$$

$$Epsilon\_Iso = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_1 \end{bmatrix}.$$

Отримані результати доступні для наступних обчислень. Для перевірки викликаємо деякі знайдені компоненти, наприклад $Epsilon\_Iso_{1,1}$, $Epsilon\_Iso_{3,3}$, $Epsilon\_Iso_{1,3}$. Це дає: ε_1, ε_1, 0, що повністю відповідає зображенню.

До кубічної сингонії належить 5 груп точкової симетрії з міжнародними позначеннями I 23, I m/3, I _43m, I 432, I m3m і всі вони мають аналогічну структуру $\varepsilon_{i,j}$.

Групи тригональної та тетрагональної сингоній. До тригональної сингонії належать 5 груп симетрії I 3, I _3, I 32, I 3m та I _3m, а до тетрагональної — 7 груп I _4, I 4, I 4/m, I _42m, I 4mm, I 422 та I 4/mmm. Розрахунки показують, що для всіх цих груп точкової симетрії структура тензора діелектричних сталих однакова. Для роботи пакету задаємо групу точкової симетрії

I 32 і початкові дані.

В результаті отримуємо: 1) кількість ненульових компонент тензора: 2) призначені пакетом незалежні компоненти, через які виражаються всі ненульові; 3) елементи тензора у матричному представленні. Вони мають наступний вигляд:

$$Non\_Vanish = 3$$

$$Indep\_Comp = [tens_{3,3},\ tens_{1,1}]$$

$$Epsilon\_32 = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{bmatrix}.$$

7.2 Симетричний псевдотензор другого рангу

Розглядаємо його для кристалів без зв'язку із фізичним явищем. Цей тензор змінює свій знак при інверсії координат, тому для всіх груп точкової симетрії, які мають центр інверсії він рівний нулю.

Розрахунки показали, що він має різну будову для різних груп тригональної та тетрагональної сингоній, на відміну від аксіального тензора.

Групи тригональної сингонії I 3, I 32. Лише вони мають нетривіальний симетричний псевдотензор 2-го рангу. Це абстрактний псевдотензор розмірністю 3×3 із символом Янга '`[V^2]`', групою точкової симетрії, наприклад, I 32. Задаємо ім'я тензора, наприклад, $Delta\_32$, з компонентами δ_i і початкові дані.

В результаті отримуємо:

$$Non\_Vanish = 3$$

$$Indep\_Comp = [tens_{3,3},\ tens_{1,1}]$$

$$Delta\_32 = \begin{bmatrix} \delta_1 & 0 & 0 \\ 0 & \delta_1 & 0 \\ 0 & 0 & \delta_3 \end{bmatrix}.$$

Групи тетрагональної сингонії I _4, I 4, I _42m, I 422. Лише ці чотири групи мають нетривіальний симетричний псевдотензор 2-го рангу розмірністю 3×3 із символом Янга ‘`[V^2]`‘. Вони мають три різні будови. Задаємо групу, наприклад I _4, ім’я тензора $Delta\_U4$ з компонентами δ_i і початкові дані.

В результаті отримуємо:

$$Non\_Vanish = 4$$

$$Indep\_Comp = [tens_{1,2},\ tens_{1,1}]$$

$$Delta\_U4 = \begin{bmatrix} \delta_1 & \delta_6 & 0 \\ \delta_6 & -\delta_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Аналогічні дії для груп I 4 та I 422, які мають однакову будову псевдотензора дають

$$Non\_Vanish = 3$$

$$Indep\_Comp = [tens_{3,3},\ tens_{1,1}]$$

$$Delta\_4 = \begin{bmatrix} \delta_1 & 0 & 0 \\ 0 & \delta_1 & 0 \\ 0 & 0 & \delta_3 \end{bmatrix}.$$

А для групи I _42m отримуємо такий же результат як і для I 32. Три інші групи тетрагональної сингонії мають тривіальний псевдотензор.

7.3 Тензор п’єзоелектричних та квадратичних діелектричних сталих

Перший є коефіцієнтом пропорційності вектора електричної поляризації P_i тензору деформацій $u_{k,l}$ — прямий п’єзоефект. Це полярний тензор 3-го рангу, симетричний по парі із 2-го і 3-го індексів, тому кількість його незалежних компонент не перевищує 18-и. Означення:

$$P_i = e_{i,k,l}\, u_{k,l},$$

а при заданих механічних напруженнях $\sigma_{k,l}$ маємо $P_i = d_{i,k,l}\,\sigma_{k,l}$, де $e_{i,k,l}$ та $d_{i,k,l}$ — різні тензори п'єзоефекту. Нескладно навести вирази для оберненого ефекту. Інверсія змінює знак тензора, тому у кристалах з центром інверсії п'єзоефект відсутній і всі компоненти цього тензора рівні нулю.

Другий є коефіцієнтом пропорційності вектора індукції D_i до квадратичних комбінацій із компонент електричного поля E_k:

$$D_i = \epsilon^{(2)}_{i,j,k}\,E_j\,E_k.$$

Симетрійні властивості тензорів п'єзоелектричних та квадратичних діелектричних сталих аналогічні.

Групи кубічної сингонії I 23, I _43m. Для них структура тензорів однакова: нетривіальний, 3-го рангу, симетричний по 2-у і 3-у індексу, має розмірність $3\times3\times3$ і символ Янга `V[V^2]`. Ім'я тензора, наприклад, $Piezo\_23$ зберігає всі 27 компонент. Записується як матриця розміром 3×6, кожний рядок якої побудований для фіксованого першого індексу i із елементів, побудованих за правилом Ная для 2-го і 3-го індексів. Задаємо початкові дані.

Отримуємо характеристики будови тензора та його матричне представлення розміром 3×6:

$$Non\_Vanish = 6$$

$$Indep\_Comp = [tens_{1,2,3}]$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{14} \end{bmatrix}.$$

Перевіряємо деякі його компонент, наприклад $Piezo\_23_{1,2,3}$, $Piezo\_23_{2,2,1}$, $Piezo\_23_{3,1,2}$. Якщо у цих компонент перекодувати 2-ий і 3-ій індекси у матричний індекс за правилом Ная, то отримаємо наступні індекси у матричному представленні [1, 4], [2, 6] та [3, 6], відповідно. Виведені програмою елементи матриці $e_{1,4}$, 0 та $e_{1,4}$ співпадають із виведеним матричним представленням.

Розраховану кількість ненульових компонент можна перевірити аналізуючи зображення та використовуючи обернене правило Ная. Так, ненульовому елементу матриці з індексом 14 відповідають дві компоненти тензора з індексами $[1, 2, 3]$ та $[1, 3, 2]$. Аналогічно, ненульовому елементу матриці 25 відповідають дві компоненти тензора з індексами $[2, 1, 3]$ та $[2, 3, 1]$; а ненульовому елементу матриці 36 відповідають дві компоненти тензора з індексами $[3, 1, 2]$ та $3, 2, 1$. В результаті маємо 6 ненульових компонент тензора.

Група тетрагональної сингонії I 422. Її вибір зумовлено тим, що у неї найбільша кількість нетривіальних елементів для цієї сингонії. Ще для двох груп цей тензор рівний нулю, а для інших має 4, 6, 7 та 11 компонент. Всі інші параметри роботи програми аналогічні попередньому випадку.

В результаті отримуємо:

$$Non\_Vanish = 12$$

$$Indep\_Comp = [tens_{3,1,2}, tens_{1,2,3}, tens_{1,1,3}, tens_{3,1,1}]$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -e_{15} & e_{14} & 0 \\ e_{31} & -e_{31} & 0 & 0 & 0 & e_{36} \end{bmatrix}.$$

Розраховану кількість ненульових компонент перевіряємо аналогічно попередньому випадку, але ненульовим елементам матриці 31 та 32 відповідають по одній компоненті тензора з індексами $[3, 1, 1]$ та $[3, 2, 2]$, відповідно. В результаті маємо 12 ненульових компонент.

Група тригональної сингонії I 32 (кварц). Її вибір зумовлений її прикладним значенням і тим, що у неї найменша кількість нетривіальних елементів для цієї сингонії. Ще для двох груп цей тензор рівний нулю, а для двох інших має 11 і 19 компонент. Всі інші параметри роботи програми аналогічні попередньому випадку.

В результаті отримуємо:

$$Non\_Vanish = 8$$

$$Indep\_Comp = [tens_{1,1,1},\ tens_{1,2,3}]$$
$$\begin{bmatrix} e_{11} & -e_{11} & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{14} & -e_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

7.4 Псевдотензор третього рангу

Вважаємо його симетричним по другому і третьому індексах, аналогічно до тензора п'єзоелектричного ефекту. З міркувань симетрії випливає, що для ізотропного середовища він дорівнює нулю. Проведені розрахунки для груп кубічної сингонії показали, що у трьох випадках він також рівний нулю, а для груп I 23 та I m/3 він має таку ж будову як і тензор п'єзоелектричних сталих для груп I 23 та I _43m.

Групи тетрагональної сингонії. Вибір I _42m, I 4mm, I 422, I 4/mmm зумовлений найменшою кількістю нетривіальних елементів рівною 4-м та єдиним незалежним елементом. Наведено результати для групи I 422. Ще для трьох груп цей тензор має по 11 компонент і 4 незалежних елементи. Всі інші параметри роботи програми аналогічні попередньому випадку.

В результаті отримуємо:

$$Non\_Vanish = 4$$

$$Indep\_Comp = [tens_{1,2,3}]$$
$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \tau_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\tau_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

7.5 Тензор пружних сталих

Є коефіцієнтом пропорційності тензора механічних напружень до тензора деформації, що називається лінійною пружністю. Четвертий ранг, симетричний всередині першої і другої пар індексів, та відносно перестановки пар, максимальна кількість незалежних компонент рівна 21. Означення:

$$\sigma_{i,\,j} = \lambda_{i,\,j,\,k,\,l}\, u_{k,\,l},$$

де $\sigma_{i,\,j}$, $u_{k,\,l}$ та $\lambda_{i,\,j,\,k,\,l}$ — тензори механічних напружень, деформацій та пружних сталих, відповідно.

Група ізотропного середовища. Властивості тензора пружних сталих: аксіальний тензор, розмірність $3\times3\times3\times3\times3$, символ Янга `‘[[V^2][V^2]]‘`, група точкової симетрії Isotropical. Ім'я тензора $Hooke\_Iso$ з компонентами $C_{i,j,k,l}$. Зображення побудоване за правилом Ная і представлене матрицею розміром 6×6 із елементами $c_{\alpha\,\beta}$ з матричними індексами α і β.

В результаті отримуємо:

$$Non\_Vanish = 21$$

$$Indep\_Comb = [tens_{1,\,1,\,1,\,1},\ tens_{1,\,1,\,2,\,2}]$$

$$\begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\,c_{11} - \frac{1}{2}\,c_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\,c_{11} - \frac{1}{2}\,c_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\,c_{11} - \frac{1}{2}\,c_{12} \end{bmatrix}.$$

Якщо тепер увести позначення $\lambda = c_{12}$ і $\mu = \frac{1}{2}\,(c_{11} - c_{12})$, і виразити пружні сталі $c_{\alpha\beta}$ через параметри Ламе λ і μ, то отриманий вираз набуде традиційного вигляду.

Розраховану кількість ненульових компонент можна перевірити аналізуючи зображення та використовуючи обернене правило Ная. Так, ненульовим елементам матриці з індексами від 1-го до 3-х відповідає по одній компоненти тензора з індексами, наприклад $1, 1, 1, 1$, $1, 1, 2, 2$ і т.д. Діагональним елементам з більшим матричним індексом, наприклад 44, відповідають наступні компоненти тензора з індексами $[2, 3, 2, 3]$, $[2, 3, 3, 2]$, $[3, 2, 2, 3]$ та $[3, 2, 3, 2]$, тобто чотири. Разом маємо 21 ненульову компонент тензора.

Групи кубічної сингонії. До цієї сингонії належить 5 груп точкової симетрії I 23, I m/3, I _43m, I 432, I m3m і всі вони мають однакову структуру тензора пружних сталих. Тому побудуємо його лише для групи I 23. Діємо аналогічно до попереднього, ім'я тензора задаємо як $Hooke\_23$.

В результаті отримуємо:

$$Non\_Vanish = 21$$

$$Indep\_Comb = [tens_{1,1,1,1},\ tens_{1,1,2,2},\ tens_{1,2,1,2}]$$

$$\begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{66} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{bmatrix}.$$

Видно, що тензори пружних сталих ізотропного середовища та всіх кристалів кубічної сингонії мають 21-у ненульову компоненту, а незалежних компонент — дві і три, відповідно.

Групи гексагональної сингонії. До цієї сингонії належить 7 груп точкової симетрії I _6, I _6m2, I 6, I 6mm, I 6/m, I 622 та I 6/mm. Всі вони мають однакову будову тензора пружних сталих, по 5 незалежних і 21 ненульовій компоненті. Тому побудуємо його лише для групи I 622. Всі параметри роботи програми аналогічні попередньому випадку.

В результаті отримуємо:

$$Non\_Vanish = 21$$

$$Indep\_Comb = [tens_{1,1,1,1},\ tens_{1,1,2,2},\ tens_{1,1,3,3},\ tens_{3,3,3,3},\ tens_{1,3,1,3}]$$

$$\begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\left(c_{11} - c_{12}\right) \end{bmatrix}.$$

Групи тетрагональної сингоній. Перші три групи I _4, I 4 та I 4/m мають по 7 незалежних і 29 ненульових компонент тензора пружних сталих і наведені у Додатку 1. Групи I _42m, I 4mm, I 422 та I 4/mmm — по 6 незалежних і 21 ненульовій компоненті. Для прикладу розглянута група I 422. Далі як попередньому випадку.

В результаті отримуємо:

$$\begin{aligned} Non\_Vanish &= 21 \\ Indep\_Comb &= [tens_{1,1,1,1},\ tens_{1,1,2,2},\ tens_{1,1,3,3},\ tens_{3,3,3,3}, \\ &\quad tens_{1,3,1,3},\ tens_{1,2,1,2}] \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{bmatrix}.$$

Звідси видно, що будова цих матриць і тензорів подібна до будови тензорів кубічної сингонії.

Групи тригональної сингонії. Перші дві групи I 3 та I _3 мають по 7 незалежних і 53 ненульових компонент тензора пружних сталих і наведені у Додатку 1. Групи I 32, I 3m та I _3m — по 6 незалежних і 37 ненульових компонент. Для прикладу розглянута група I 32, яку мають кристали кварцу. Далі як попередньому випадку.

В результаті отримуємо:

$$
\begin{aligned}
Non\_Vanish &= 37\\
Indep\_Comb &= [tens_{3,3,3,3},\ tens_{1,1,2,3},\ tens_{1,1,1,1},\ tens_{1,1,2,2},\\
&\quad tens_{1,1,3,3},\ tens_{1,3,1,3}]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{bmatrix}
c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & 0 & 0\\
c_{12} & c_{11} & c_{13} & -c_{14} & 0 & 0\\
c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0\\
c_{14} & -c_{14} & 0 & c_{55} & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & c_{14}\\
0 & 0 & 0 & 0 & c_{14} & \frac{1}{2}c_{11}-\frac{1}{2}c_{12}
\end{bmatrix}.
$$

Для перевірки збереження деяких компонент знайденого тензора задаємо їх, наприклад, $Hooke\_32_{1,1,1,1}$, $Hooke\_32_{2,2,2,3}$, $Hooke\_32_{1,2,1,2}$ та $Hooke\_32_{1,1,1,2}$, що після перекодування згідно [15] дає матричні індекси $[1,1]$, $[2,4]$, $[6,6]$, $[1,6]$, відповідно. Програма дає наступні результати: c_{11}, $-c_{14}$, $\frac{1}{2}(c_{11}-c_{12})$, 0, що повністю відповідає виведеному символьному представленню тензора у вигляді матриці.

Розраховану кількість ненульових компонент можна перевірити аналогічно попередньому випадку. Але тут вперше появилися елементи матриці з номером рядку від 1-го до 3-х, а стовпчика — від 4-х до 6-и та симетричні до них. Для таких елементів матриці її індексу, наприклад *14*, відповідають дві компоненти тензора з індексами $[1,1,2,3]$ та $[1,1,3,2]$. Далі розрахунок лає наведений результат — 37 ненульових компонент.

Перевірка узгодженості розрахунку тензорів 3-го і 4-го рангу. Згідно наведеного вище означення для п'єзоефекту, вектор поляризації можна представити як $P_i = e_{i,k,l}\, u_{k,l}$, або $P_i = d_{i,k,l}\, \sigma_{k,l}$, в залежності від причин, які її викликали. А згідно закону Гука $\sigma_{i,j} = \lambda_{i,j,k,l}\, u_{k,l}$. Якщо цей вираз підставити у попередню формулу і порівняти з першою, то отримаємо

$$e_{i,k,l} = \sum_{m,n=1}^{3,3} d_{i,m,n} \lambda_{m,n,k,l}.$$

Оскільки обидва матеріальні тензори п'єзоефекту мають однакову симетрію, то їх можна знайти як це показано вище, а потім, використовуючи знайдений тензор пружних сталих, перевірити симетрію згідно отриманого виразу.

Таком чином, для перевірки узгодженості розрахунків трьох тензорів необхідно: 1) розрахувати тензор пружності $\lambda_{i,j,k,l}$, тензори п'єзоефекту $e_{i,m,n}$ і $d_{i,m,n}$; 2) розрахувати праву частину наведеної вище формули; 3) якщо будова її та лівої частини формули однакові, то всі три розрахунки взаємно узгоджені.

Зробимо цю перевірку для тензора п'єзоефекту для групи кварцу I 32.

Для представлення громіздкого виразу спочатку виведемо його нетривіальні елементи:

$$e^{rhs}_{11} = d_{11}\, c_{11} - d_{11}\, c_{12} + 2\, d_{14}\, c_{14}, \quad e^{rhs}_{12} = d_{11}\, c_{12} - d_{11}\, c_{11} - 2\, d_{14}\, c_{14} = -e^{rhs}_{11},$$

$$e^{rhs}_{14} = 2\, d_{11}\, c_{14} + 2\, d_{14}\, c_{55},$$

$$e^{rhs}_{25} = -2\, d_{11}\, c_{14} - 2\, d_{14}\, c_{55} = -e^{rhs}_{14}, \quad e^{rhs}_{26} = d_{11}\, c_{12} - d_{11}\, c_{11} - 2\, d_{14}\, c_{14} = -e^{rhs}_{11}.$$

Тоді перетворена матриця п'єзоелектричних сталих набуває вигляду:

$$\begin{bmatrix} e^{rhs}_{11} & -e^{rhs}_{11} & 0 & e^{rhs}_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -e^{rhs}_{14} & -e^{rhs}_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Матриця до перетворення отримана вище

$$\begin{bmatrix} e_{11} & -e_{11} & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{14} & -e_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

і звідси видно, що симетрія матричного представлення і тензора збереглася.

Аналогічна перевірка для тензорів тетрагональної сингонії групи I 422 дає результат:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 2\,d_{14}\,c_{55} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2\,d_{14}\,c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

а його початкова форма мала вигляд:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Звідси випливає, що розраховані тензори взаємно узгоджені.

7.6 Тензор електрострикції

Є коефіцієнтом пропорційності між тензором деформації і квадратичними комбінаціями із компонент електричного поля. Це аксіальний тензор 4-го рангу, симетричний всередині 1-ї і 2-ї пар індексів, має не більше ніж 36 незалежних компонент. На відміну від тензора п'єзоефекту рівного нулю у кристалах з центром інверсії, цей тензор повинний завжди бути відмінним від нуля із міркувань симетрії. Означення:

$$u_{i,j} = r_{i,j,k,l}\,E_k\,E_l,$$

де $u_{i,j}$ та $r_{i,j,k,l}$ — тензори деформацій та електропружних сталих, відповідно, а E_k — компоненти електричного поля.

Група ізотропного середовища. Властивості тензора електрострикції наступні: аксіальний тензор, розмірність 3×3×3×3×3, група точкової симетрії Isotropical, символ Янга '[V^2][V^2]', . Ім'я розрахованого тензора R_Iso , матричне представлення аналогічне представленню тензора пружних сталих з компонентами $r_{\alpha\beta}$, де α і β — матричні індекси, побудовані за правилом Ная. Це дозволяє представити тензор у вигляді квадратної несиметричної матриці розміром 6×6.

В результаті отримуємо:

$$Non\_Vanish = 21$$

$$Indep\_Comb = [tens_{1,1,1,1},\ tens_{1,1,2,2}]$$

$$\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{12} & 0 & 0 & 0 \\ r_{12} & r_{11} & r_{12} & 0 & 0 & 0 \\ r_{12} & r_{12} & r_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}r_{11} - \frac{1}{2}r_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}r_{11} - \frac{1}{2}r_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}r_{11} - \frac{1}{2}r_{12} \end{bmatrix}.$$

Звідси видно, що для ізотропного тіла цей тензор відмінний від нуля і симетричний, як і тензор пружних сталих.

Групи кубічної сингонії. Групи I 23 та I m/3 мають по три незалежні та 21 ненульовій компоненті, тому тут наведено результат лише для групи I 23. Діємо аналогічно до попереднього, ім'я тензора задаємо як R_23.

В результаті отримуємо:

$$Non\_Vanish = 21$$

$$Indep\_Comb = [tens_{1,1,1,1},\ tens_{1,1,2,2},\ tens_{1,1,3,3},\ tens_{1,2,1,2}]$$

$$\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & 0 & 0 & 0 \\ r_{13} & r_{11} & r_{12} & 0 & 0 & 0 \\ r_{12} & r_{13} & r_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r_{66} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & r_{66} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & r_{66} \end{bmatrix}.$$

Це випадок групи, для якої матриця представлення тензора несиметрична.

Тензори груп I _43m, I 432 та I m3m мають по 3 незалежних і по 21 ненульовій компоненті, симетричні і мають будову аналогічну тензору пружних сталих для цих же груп.

Групи гексагональної сингонії. Розрахунки показали, що для цих груп тензор має від 5-и до 8-и незалежних та від 21 до 37 ненульових компонент. Зокрема, тензор групи I 6/mm найкомпактніший, симетричний, має 5 незалежних та 21 ненульову компоненту:

$$\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & 0 & 0 & 0 \\ r_{12} & r_{11} & r_{13} & 0 & 0 & 0 \\ r_{13} & r_{13} & r_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r_{55} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & r_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} r_{11} - \frac{1}{2} r_{12} \end{bmatrix}.$$

Однакові, але дещо громіздкіші і несиметричні тензори електрострикції мають групи I _6m2, I 6mm, I 6/m та I 622:

$$\begin{aligned} Non\_Vanish &= 21, \\ Indep\_Comb &= [tens_{3,3,3,3},\ tens_{1,3,1,3},\ tens_{1,1,3,3},\ tens_{1,1,1,1}, \\ &\quad tens_{1,1,2,2},\ tens_{3,3,1,1}] \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & 0 & 0 & 0 \\ r_{12} & r_{11} & r_{13} & 0 & 0 & 0 \\ r_{31} & r_{31} & r_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r_{55} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & r_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}r_{11} - \frac{1}{2}r_{12} \end{bmatrix}.$$

А найгроміздкішу несиметричну будову мають тензори груп I _6, I 6 та I 6/m, у яких по 8 незалежних ту 37 ненульових компонент:

$$\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & 0 & 0 & r_{16} \\ r_{12} & r_{11} & r_{13} & 0 & 0 & -r_{16} \\ r_{31} & r_{31} & r_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r_{55} & -r_{54} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r_{54} & r_{55} & 0 \\ -r_{16} & r_{16} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}r_{11} - \frac{1}{2}r_{12} \end{bmatrix}.$$

Групи тригональної сингонії. Перші дві групи I 3 та I _3 мають по 12 незалежних і 69 ненульових компонент тензора із 81-ї і наведені у Додатку 1. А групи I 32, I 3m та I _3m — по 8 незалежних і 37 ненульових компонент. Для прикладу наведено результат для групи I 32, яку мають п'єзокристали кварцу. Варто пам'ятати, що електрострикція квадратична, а п'єзоефект лінійний по електричному полю, тому обидва ці явища конкурують у кварці, але домінуючу роль грає п'єзоефект.

$$Non\_Vanish = 37$$

$$\begin{aligned} Indep\_Comb \;=\; & [tens_{3,3,3,3},\, tens_{1,1,1,1},\, tens_{1,1,2,2},\, tens_{1,1,3,3}, \\ & tens_{1,1,2,3},\, tens_{1,3,1,3},\, tens_{1,3,1,2},\, tens_{3,3,1,1}] \end{aligned}$$

$$
\begin{bmatrix}
r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} & 0 & 0 \\
r_{12} & r_{11} & r_{13} & -r_{14} & 0 & 0 \\
r_{31} & r_{31} & r_{33} & 0 & 0 & 0 \\
r_{56} & -r_{56} & 0 & r_{55} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & r_{55} & r_{56} \\
0 & 0 & 0 & 0 & r_{14} & \frac{1}{2} r_{11} - \frac{1}{2} r_{12}
\end{bmatrix}.
$$

Варто відмітити, що це якраз той випадок, коли вибір незалежних елементів за правилом вибору наймолодшого елементу із усіх комбінації, які існують після усереднення по елементах групи, дає вираз формально відмінний від прийнятого в літературі, наприклад [7]. Тут вибрано як незалежні, зокрема елементи r_{41} та r_{44}. Але насправді, як це видно із одержаного запису, справедливо, що $r_{56} = r_{41}$, а $r_{55} = r_{44}$, тому все співпадає літературними даними. Очевидно, що тензор не симетричний по перестановці пар, що і видно із його матричного представлення.

7.7 Тензор квадратичного п'єзоефекту

Є коефіцієнтом пропорційності між вектором електричної поляризації P і квадратичними конструкціями із тензора деформацій $u_{k,l}$. Це аксіальний тензор 5-го рангу має 243 компоненти, симетричний всередині пар із другого і третього та четвертого і п'ятого індексів, та відносно перестановки цих пар і може мати не більше ніж 63 незалежні компоненти. Означення:

$$P_k = \rho_{k,i,j,l,m} \, u_{i,j} \, u_{l,m}.$$

Зображення тензора 5-го рангу у вигляді матриць будується за правилом Ная як послідовність трьох квадратних матриць розміром 6×6, які побудовані з тензора 5-го рангу при фіксованих значеннях 1-го індексу рівних 1, 2, 3. Для економії місця зображення перейменовуємо, але у пам'яті програми залишені не перейменовані компоненти тензора.

Нетривіальні групи кубічної сингонії. Для ізотропного середовища та груп I m/3, I m3m цей тензор рівний нулю в силу існування для них симетрії інверсії. Для груп I 23, I _43m, та I 432 він має 4, 3 та 1 незалежну та 60, 60 і 24 ненульових компоненти, відповідно. Для прикладу наведемо їх для групи I _43m:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \rho_{114} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{124} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{124} & 0 & 0 \\ \rho_{114} & \rho_{124} & \rho_{124} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{165} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{165} & 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{124} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{114} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{124} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{165} \\ \rho_{124} & \rho_{114} & \rho_{124} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{165} & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{124} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{124} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{114} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{165} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{165} & 0 & 0 \\ \rho_{124} & \rho_{124} & \rho_{114} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

та найкомпактніший із них для групи I 432:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{124} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\rho_{124} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{124} & -\rho_{124} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -\rho_{124} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{124} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\rho_{124} & 0 & \rho_{124} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{124} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\rho_{124} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{124} & -\rho_{124} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Така значна кількість доданків у виразі для вільної енергії, або іншого термодинамічного потенціалу ускладнює аналітичні дослідження і вимагає чисельних методів.

Група тригональної сингонії I 32 (кварц). Як і лінійний, квадратичний п'єзоефект відсутній у кристалах груп I _3 та I _3m. Для груп I 3, I 32 та I 3m розрахунки показали, що цей тензор має 21, 8 та 13 незалежних і 213, 96 і 117 ненульових компонент, відповідно. Для прикладу наведемо результати для найкомпактнішого ненульового тензора групи I 32:

$$Non\_Vanish = 96$$

$$
\begin{aligned}
Indep\_Comb \; = \; & [\nu_{1,1,1,1,1},\, \nu_{1,1,1,2,2},\, \nu_{3,1,1,1,3},\, \nu_{1,1,1,2,3},\\
& \nu_{1,1,2,1,3},\, \nu_{1,1,1,3,3},\, \nu_{1,2,3,3,3},\, \nu_{1,1,3,1,3}]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{bmatrix}
\rho_{111} & \rho_{112} & \rho_{113} & \rho_{114} & 0 & 0\\
\rho_{112} & -\rho_{111}-2\,\rho_{112} & -\rho_{113} & R_{124} & 0 & 0\\
\rho_{113} & -\rho_{113} & 0 & \rho_{143} & 0 & 0\\
\rho_{114} & R_{124} & \rho_{143} & -\rho_{155} & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{155} & \rho_{165}\\
0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{165} & \rho_{112}
\end{bmatrix},
$$

$$
\begin{bmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 & -R_{124} & R_{216}\\
0 & 0 & 0 & 0 & -\rho_{114} & R_{226}\\
0 & 0 & 0 & 0 & -\rho_{143} & -\rho_{113}\\
0 & 0 & 0 & 0 & -\rho_{155} & -\rho_{165}\\
-R_{124} & -\rho_{114} & -\rho_{143} & -\rho_{155} & 0 & 0\\
R_{216} & R_{226} & -\rho_{113} & -\rho_{165} & 0 & 0
\end{bmatrix},
$$

$$
\begin{bmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{315} & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & -\rho_{315} & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\rho_{315}\\
\rho_{315} & -\rho_{315} & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & -\rho_{315} & 0 & 0
\end{bmatrix},
$$

де уведено позначення $R_{124} = \rho_{114} + 2\,\rho_{165}$, $R_{216} = -\frac{1}{2}\,(\rho_{111} + 3\rho_{112})$, $R_{226} = \frac{1}{2}\,(-\rho_{111} + \rho_{112})$ щоб зменшити розміри матриць.

Зазначимо, що це знову той випадок, коли вибір незалежних елементів за правилом вибору імені наймолодшого елементу із комбінації дає вираз формально відмінний від відомого у літературі. Тут алгоритм вибрав незалежними наступні елементи:

$$
\rho_{111},\ \rho_{112},\ \rho_{113},\ \rho_{114},\ \rho_{143},\ \rho_{155},\ \rho_{165},\ \rho_{315},
$$

а у [7] вручну незалежними вибрані такі елементи:

$$\mu_{111},\ \mu_{113},\ \mu_{114},\ \mu_{122},\ \mu_{124},\ \mu_{134},\ \mu_{155},\ \mu_{315}.$$

Порівняння цих списків показує, що другий список відрізняється у представленні таких елементів матриці: μ_{122}, μ_{124}, μ_{134}. Якщо тепер, аналогічно випадку тензора пружних сталих для ізотропного середовища, прирівняти ці елементи із [8] їх виразам у отриманій матриці, то отримаємо наступну систему рівнянь:

$$\mu_{122} = -\rho_{111} - 2\,\rho_{112},$$

$$\mu_{124} = \rho_{114} + 2\,\rho_{165},$$

$$\mu_{134} = \rho_{143}.$$

Якщо тепер із цієї невиродженої системи лінійних рівнянь виразити ρ_{112}, ρ_{165}, ρ_{143}, то отримаємо представлення відоме в літературі [8].

7.8 Тензор квадратичної пружності

Є коефіцієнтом пропорційності тензора механічних напружень $\sigma_{i,j}$ і до квадратичних конструкцій із тензора деформації $u_{m,n}$. Шостий ранг, кількість елементів 729, симетричний всередині першої, другої і третьої пар індексів, та відносно перестановки цих пар, максимальна кількість незалежних компонент рівна 56. Означення:

$$\sigma_{i,j} = \mu_{i,j,k,l,m,n}\, u_{k,l}\, u_{m,n}.$$

Група ізотропного середовища. Властивості: аксіальний тензор, розмірність $3 \times 3 \times 3 \times 3 \times 3 \times 3$, символ Янга `‘[[V^2][V^2][V^2]]‘`. Після обчислень 729 компонент зберігаються під іменем $Hooke_Q\_Iso$. Тензор зображується як послідовність шести квадратних матриць розміром 6×6, кожна із яких побудована для фіксованого першого матричного індексу α, який, разом із наступними β і γ, побудований за правилом Ная .

В результаті отримуємо:

$$Non\_Vanish = 183$$

$$Name\_mu = [\mu_{1,1,1,1,1,1},\ \mu_{1,1,1,1,2,2},\ \mu_{1,1,2,2,3,3}].$$

$$Numb\_Indep = 3$$

$$\begin{bmatrix} c_{111} & c_{112} & c_{112} & 0 & 0 & 0 \\ c_{112} & c_{112} & c_{123} & 0 & 0 & 0 \\ c_{112} & c_{123} & c_{112} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\left(c_{112}-c_{123}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}\left(c_{111}-c_{112}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}\left(c_{111}-c_{112}\right) \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} c_{112} & c_{112} & c_{123} & 0 & 0 & 0 \\ c_{112} & c_{111} & c_{112} & 0 & 0 & 0 \\ c_{123} & c_{112} & c_{112} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}\left(c_{111}-c_{112}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\left(c_{112}-c_{123}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}\left(c_{111}-c_{112}\right) \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} c_{112} & c_{123} & c_{112} & 0 & 0 & 0 \\ c_{123} & c_{112} & c_{112} & 0 & 0 & 0 \\ c_{112} & c_{112} & c_{111} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}\left(c_{111}-c_{112}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}\left(c_{111}-c_{112}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\left(c_{112}-c_{123}\right) \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\left(c_{112}-c_{123}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}\left(c_{111}-c_{112}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}\left(c_{111}-c_{112}\right) & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\left(c_{112}-c_{123}\right) & \frac{1}{4}\left(c_{111}-c_{112}\right) & \frac{1}{4}\left(c_{111}-c_{112}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{456} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{456} & 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}(c_{111}-c_{112}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(c_{112}-c_{123}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}(c_{111}-c_{112}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{456} \\ \frac{1}{4}(c_{111}-c_{112}) & \frac{1}{2}(c_{112}-c_{123}) & \frac{1}{4}(c_{111}-c_{112}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{456} & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}(c_{111}-c_{112}) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}(c_{111}-c_{112}) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(c_{112}-c_{123}) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{456} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{456} & 0 & 0 \\ \frac{1}{4}(c_{111}-c_{112}) & \frac{1}{4}(c_{111}-c_{112}) & \frac{1}{2}(c_{112}-c_{123}) & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

де уведено позначення $C_{456} = \frac{1}{8}(c_{111} + 2\,c_{123} - 3\,c_{112})$.

Звідси видно, що тензор пружних сталих другого порядку для ізотропного середовища має 3 незалежні компоненти і 183 ненульових, що значно ускладнює аналітичні дослідження нелінійних деформацій навіть у такому високо симетричному середовищі.

Тетрагональна сингонія, група I 422. Побудову зображень тензора проводимо аналогічно до попереднього. В результаті отримуємо:

$$Non\_Vanish = 183.$$

$$\begin{aligned} Name\_mu \ = \ [&\mu_{1,1,2,2,3,3},\ \mu_{1,2,1,2,3,3},\ \mu_{1,2,1,3,2,3},\ \mu_{3,3,3,3,3,3}, \\ &\mu_{1,1,1,1,2,2},\ \mu_{1,1,1,1,1,1},\mu_{1,1,1,2,1,2},\ \mu_{1,1,1,1,3,3}, \\ &\mu_{1,1,3,3,3,3},\ \mu_{1,3,1,3,3,3},\ \mu_{1,1,1,3,1,3},\ \mu_{1,1,2,3,2,3}] \end{aligned}$$

$$Numb\_Indep = 12.$$

$$\begin{bmatrix} c_{111} & c_{112} & c_{113} & 0 & 0 & 0 \\ c_{112} & c_{112} & c_{123} & 0 & 0 & 0 \\ c_{113} & c_{123} & c_{133} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{144} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{155} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{166} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} c_{112} & c_{112} & c_{123} & 0 & 0 & 0 \\ c_{112} & c_{111} & c_{113} & 0 & 0 & 0 \\ c_{123} & c_{113} & c_{133} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{155} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{144} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{166} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} c_{113} & c_{123} & c_{133} & 0 & 0 & 0 \\ c_{123} & c_{113} & c_{133} & 0 & 0 & 0 \\ c_{133} & c_{133} & c_{333} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{553} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{553} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{663} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & c_{144} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{155} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{553} & 0 & 0 \\ c_{144} & c_{155} & c_{553} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{654} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{654} & 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & c_{155} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{144} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{553} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{654} \\ c_{155} & c_{144} & c_{553} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{654} & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{166} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{166} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{663} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{654} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{654} & 0 & 0 \\ c_{166} & c_{166} & c_{663} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

У цьому випадку тензор має стільки ж ненульових компонент як ізотропне середовище, але серед них немає компонент, які є комбінаціями незалежних, тому кількість останніх зросла із 3-х до 12-и.

Тригональна сингонія, група I 32 (кварц). Побудову зображень тензора проводимо аналогічно до попереднього. В результаті отримуємо:

$$Non\_Vanish = 359.$$

$$Name\_mu = [\mu_{3,3,3,3,3,3},\ \mu_{1,1,1,3,1,3},\ \mu_{1,1,2,3,2,3},\ \mu_{1,1,2,3,3,3},\ \mu_{1,1,1,1,1,1},\ \mu_{1,1,1,1,2,2},\ \mu_{1,1,1,2,1,2},\ \mu_{1,1,3,3,3,3},\ \mu_{1,1,1,1,2,3},\ \mu_{1,1,1,2,1,3},\ \mu_{1,1,1,1,3,3},\ \mu_{1,1,2,2,3,3},\ \mu_{1,3,1,3,3,3},\ \mu_{1,3,1,3,2,3}]$$

$$Numb\_Indep = 14.$$

$$\begin{bmatrix} c_{111} & c_{112} & c_{113} & c_{114} & 0 & 0 \\ c_{112} & C_{122} & c_{123} & C_{124} & 0 & 0 \\ c_{113} & c_{123} & c_{133} & c_{143} & 0 & 0 \\ c_{114} & C_{124} & c_{143} & c_{144} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{155} & c_{165} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{165} & c_{166} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} c_{112} & C_{122} & c_{123} & C_{124} & 0 & 0 \\ C_{122} & C_{222} & c_{113} & C_{224} & 0 & 0 \\ c_{123} & c_{113} & c_{133} & -c_{143} & 0 & 0 \\ C_{124} & C_{224} & -c_{143} & c_{155} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{144} & C_{256} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{256} & C_{266} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} c_{113} & c_{123} & c_{133} & c_{143} & 0 & 0 \\ c_{123} & c_{113} & c_{133} & -c_{143} & 0 & 0 \\ c_{133} & c_{133} & c_{333} & 0 & 0 & 0 \\ c_{143} & -c_{143} & 0 & c_{553} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{553} & c_{143} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{143} & C_{366} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} c_{114} & C_{124} & c_{143} & c_{144} & 0 & 0 \\ C_{124} & C_{224} & -c_{143} & c_{155} & 0 & 0 \\ c_{143} & -c_{143} & 0 & c_{553} & 0 & 0 \\ c_{144} & c_{155} & c_{553} & -c_{554} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{554} & \frac{1}{2}c_{155} - \frac{1}{2}c_{144} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}c_{155} - \frac{1}{2}c_{144} & C_{466} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & c_{155} & c_{165} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{144} & \frac{2}{3}c_{114} - \frac{1}{3}c_{165} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{553} & c_{143} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{554} & \frac{1}{2}c_{155} - \frac{1}{2}c_{144} \\ c_{155} & c_{144} & c_{553} & c_{554} & 0 & 0 \\ c_{165} & \frac{2}{3}c_{114} - \frac{1}{3}c_{165} & c_{143} & \frac{1}{2}c_{155} - \frac{1}{2}c_{144} & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & c_{165} & c_{166} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3}\,c_{114} - \frac{1}{3}\,c_{165} & C_{266} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{143} & C_{366} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\,c_{155} - \frac{1}{2}\,c_{144} & C_{466} \\ c_{165} & \frac{2}{3}\,c_{114} - \frac{1}{3}\,c_{165} & c_{143} & \frac{1}{2}\,c_{155} - \frac{1}{2}\,c_{144} & 0 & 0 \\ c_{166} & C_{266} & C_{366} & C_{466} & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

де уведено позначення $C_{122} = \frac{1}{3}\,(c_{111} + 2c_{112} - 4c_{166})$, $C_{124} = \frac{1}{3}\,(-c_{114} + 2c_{165})$, $C_{222} = \frac{1}{3}\,(2c_{111} + c_{112} + 4c_{166})$, $C_{224} = -\frac{1}{3}\,(c_{114} + 4c_{165})$, $C_{256} = \frac{1}{3}\,(2c_{114} - c_{165})$, $C_{266} = \frac{1}{3}\,(c_{111} - c_{112} - c_{166})$, $C_{366} = \frac{1}{2}\,(c_{113} - c_{123})$, $C_{466} = \frac{1}{3}\,(-c_{114} + 2c_{165})$.

У цьому випадку кількість ненульових компонент зросла майже удвічі, хоча кількість незалежних практично не змінилася по відношенню до попереднього прикладу. Це зумовлено великою кількістю комбінаційних елементів.

Ромбічна сингонія, група I 222. Побудову зображень тензора проводимо аналогічно до попереднього. отримуємо:

$$Non\_Vanish = 183.$$

$$\begin{aligned} Name\_mu \;=\; & [\mu_{1,1,1,1,1,1},\ \mu_{1,1,1,1,2,2},\ \mu_{1,1,1,1,3,3},\ \mu_{1,1,1,2,1,2},\ \mu_{1,1,1,3,1,3}, \\ & \mu_{1,1,2,2,2,2}, \mu_{1,1,2,2,3,3},\ \mu_{1,1,2,3,2,3},\ \mu_{1,1,3,3,3,3},\ \mu_{1,2,1,2,2,2}, \\ & \mu_{1,2,1,2,3,3},\ \mu_{1,2,1,3,2,3},\ \mu_{1,3,1,3,2,2}, \mu_{1,3,1,3,3,3},\ \mu_{2,2,2,2,2,2}, \\ & \mu_{2,2,2,2,3,3},\ \mu_{2,2,2,3,2,3},\ \mu_{2,2,3,3,3,3},\ \mu_{2,3,2,3,3,3},\ \mu_{3,3,3,3,3,3}] \end{aligned}$$

$$Numb\_Indep = 20$$

$$\begin{bmatrix} c_{111} & c_{112} & c_{113} & 0 & 0 & 0 \\ c_{112} & c_{122} & c_{123} & 0 & 0 & 0 \\ c_{113} & c_{123} & c_{133} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{144} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{155} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{166} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} c_{112} & c_{122} & c_{123} & 0 & 0 & 0 \\ c_{122} & c_{222} & c_{223} & 0 & 0 & 0 \\ c_{123} & c_{223} & c_{233} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{244} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{552} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{662} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} c_{113} & c_{123} & c_{133} & 0 & 0 & 0 \\ c_{123} & c_{223} & c_{233} & 0 & 0 & 0 \\ c_{133} & c_{233} & c_{333} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{443} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{553} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{663} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & c_{144} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{244} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{443} & 0 & 0 \\ c_{144} & c_{244} & c_{443} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{654} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{654} & 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & c_{155} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{552} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{553} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{654} \\ c_{155} & c_{552} & c_{553} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{654} & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{166} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{662} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{663} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{654} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{654} & 0 & 0 \\ c_{166} & c_{662} & c_{663} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Попри те, що групи ромбічної сингонії мають невелику кількість елементів симетрії, ці симетрії зменшили кількість ненульових компонент до рівня ізотропного середовища, але це досягнуто за рахунок великої кількості незалежних елементів і повною відсутністю комбінаційних елементів.

РОЗДІЛ 8

СПИСОК ІМЕН ПРОГРАМ ТА ЗМІННИХ З ПЕРШОЇ ЧАСТИНИ ПАКЕТУ

Для того щоб при роботі з пакетом не виникали різні непорозуміння необхідно пам'ятати список використаних в ньому імен та програм. При цьому використання імені не за його призначенням та змістом гарантовано веде до помилки в обчисленнях, яку пакет може і не зареєструвати як таку, коли не порушені правилі синтаксису, або типу. Аналогічна ситуація і з використанням імен програм. Вихід із такої ситуації — запуск пакету після відповідних виправлень.

В першій частині пакету створено 19 програм і введено 223 глобальних для всього пакету імен, які потрібно вживати в програмах лише за їх призначенням. Далі наведено їх вичерпний перелік із поясненнями.

8.1 Програми

1. Mult_Perm — програма "множення"двох перестановок індексів. На вхід даються дві перестановки, із останнім елементом — вказівником парності перестановки, на виході результуюча перестановка з результуючим показчиком парності.

2. Ind_Perm — програма перестановки індексів всередині багатокомпонентного тензорного індексу. На вхід дається багатовимірний тензорний індекс та перестановка з показчиком парності. На виході — новий індекс з переставленими компонентами, тобто індекс так званого ізомера.

3. Poliad — програма побудови впорядкованого переліку індексів тензора R-го рангу в D– вимірному просторі. Задається розмірність простору і ранг тензора. Результат – список індексів елементів тензора впорядкований в

стандартному вигляді, коли першим змінюється останній індекс, другим – передостанній і т.д.

4. Int_Grup_Perm — програма усереднення тензора по рупі перестановок його індексу. Задаються ім'я формального (без задання компонент) тензора і ім'я групи перестановок індексу, тобто символ на. Результат — середнє по групі значення для кожного елемента тензора, виражене через ім'я спорідненого ізомера з наймолодшим індексом.

5. Index_Sort — програма перейменування лінійних ком інацій із елементів стартового тензора в усередненому по групі перестановок тензорі. Вибрано правило надання цій комбінації того імені, яке має елемент з наймолодшим індексом, що входить до неї. На вхід дається комбінація елементів, на виході — її нове ім'я, або її вираз через нові, незалежні імена.

6. Int_Grup_Crist — програма усереднення тензора по рупі кристалічної симетрії. Задаються тензор вже усереднений по групі перестановок, ім'я групи точкової симетрії (одне із трьох можливих для точкових груп) та тип тензора (true — для тензора і psevdo — для псавдотензора). Результат — середнє по групі значення для кожного елемента тензора, яке має вигляд лінійної комбінації всіх елементів усередненого тензора, що їх пов'язує група.

7. Int_Grup_Isotr — програма усереднення тензора по рупі ізотропної симетрії. Задаються тензор вже усереднений по групі перестановок, та тип тензора (true — для тензора і psevdo — для псавдотензора). Результат — середнє по групі значення для кожного елемента тензора, яке має вигляд лінійної комбінації всіх елементів усередненого тензора, що їх пов'язує група.

8. Ind_Conv — програма переводу одномірного індексу i в тензорний індекс для тензору R–го рангу в Dim –вимірному просторі. На вході: індекс,

розмірність простору, ранг тензора. На виході R–компонентний тензорний індекс.

9. List_Ind_Comb — програма утворення упорядкуваного списку індексів тих елементів тензора, які входять в якусь лінійну комбінацію утворену при усередненні тензора по групі кристалічної симетрії . На вхід дається лінійна комбінація із елементів тензора, розмірність простору і ранг тензора. На виході список одновимірних індексів елементів, впорядкований по їх зростанню.

10. Sort — програма утворення впорядкованого по заданому шаблону списку із тих елементів тензора, які входять в якусь лінійну комбінацію утворену при усередненні тензора по групі кристалічної симетрії. На вхід дається лінійна комбінація із елементів тензора, розмірність простору, ранг тензора і шаблон. На виході список елементів, впорядкований по заданому шаблону. Це значить що кожен елемент лінійної комбінації стає у списку точно на те місце де він стоять у шаблоні. Якщо якогось із шаблонних немає у комбінації, то на його місці ставиться нуль. Шаблон завжди повний.

11. Family_Search — програма пошуку сімейств серед лінійних комбінацій в усередненому по кристалічній групі тензорі. Якщо є хоч один спільний елемент тензора в двох лінійних комбінаціях, то вони сім'я. На вхід дається лише набір впорядкованих списків одновимірних індексів всіх лінійних комбінацій, які готується програмою List_Ind_Comb. На виході — по одному повному, впорядкованому по зростанню одновимірного індексу списку для кожного сімейства лінійних комбінацій. Це шаблони.

12. Comb_Sort — програма, яка доводить до звичного ви ляду тензор усереднений по кристалічній групі. Проводить виділення різних сімейств серед лінійних комбінацій, пошук лінійно незалежних елементів всередині кожного сімейства, розклад всіх членів сімейства по лінійно незалежних,

перейменування незалежних членів сімейства згідно правила вибору наймолодшого імені, запис залежних у вигляді комбінацій незалежних уже з новими іменами. На вхід дається тензор усереднений по кристалічній групі. На виході той же тензор, але вже лише з незалежними компонентами. Окрім цього обчислюється дві глобальні змінні — число ненульових компонент в тензорі _Numb_Non, і список лінійно незалежних компонент тензора — _Indep_Elem. (Фактично це найскладніша програма, яка відіграє ключову роль в першій частині пакету.)

13. Total_Sym — програма побудови матеріального тензора заданого рангу заданої внутрішньої симетрії і заданого типу для кристалу заданої точкової групи симетрій. На вхід задається індексований масив формальних елементів тензора, назва групи внутрішньо симетрії, назва групи кристалічної симетрії та тип тензора (тензор, або псевдотензор). На виході тензор усереднений по обох групах згідно його типу. Елементи перейменовані по описаних вище правилах.

14. Ren_Tens — програма перейменування елементів тензора з одночасним записом замість тензорних індексів так званих матричних індексів, які формуються як символи. Для тензорів парного рангу переіндексовуються всі пари, а для непарного — починаючи із другого індексу. На вхід даються тензор, список його незалежних елементів і ім'я, яке буде фігурувати в символьному запису елементів тензора. На виході — тензор з елементами, які мають задане символьне ім'я і такий же символьний матричний індекс. Ця програма створена для зручності перевірок результатів і їх порівняння із літературними даними.

15. Dec — програма перетворення багатокомпонентного тензорного індексу в символічний матричний. На вхід мультиіндекс, а на виході матричний символ.

16. Image_3T — програма для представлення симетричного, або антисиме-

тричного тензора третього рангу в матричному вигляді. На вхід тензор третього рангу, на виході — матриця 3 на 6, яку вже можна роздрукувати.

17. Image_4T — програма для представлення симетричного, або антисиметричного тензора четвертого рангу в матричному вигляді. На вхід тензор четвертого рангу, на виході — матриця 6 на 6, яку вже можна роздрукувати.

18. Image_Tens — програма для представлення симетричного, або антисиметричного тензора вищого рангу в матричному вигляді. Для тензорів 3–го і 4–го рангу використовуються дві попередні, а для вищих рангів друкуються лише ненульові компоненти, як в [8, 13, 20]. На вхід тензор деякого рангу, на виході — або матриця 3 на 6, або матриця 6 на 6, або список ненульових компонент тензора, в залежності від рангу тензора. Слід відмітити, що для тензорів вищих рангів $R > 4$ можна роздрукувати їх матричні представлення як тензорів четвертого рангу при певних фіксованих значеннях інших індексів. Наприклад, $H[1, i, j, k, l]$ — формально можна зображати як тензор четвертого рангу, потім аналогічно $H[2, i, j, k, l]$ і т.д. Цей прийом використано в прикладах, наведених вище.

19. Transform_Tens — програма перетворення тензора довільного рангу при заданому перетворенні координат згідно класичної формули. На вхід тензор і матриця перетворення. На виході — тензор в нових координатах.

8.2 Імена

1. p1, p2, ..., p64 — імена перестановок, з яких побудовано групи перестановок до `‘[V^2]^3‘` включно. Ці імена допоміжні, потрібні лише для побудови груп перестановок і після такої побудови можуть переозначуватися як завгодно. Всі наступні імена варто не переозначати.

2. `‘[V^2]‘` — символ Яна для позначення групи симетричної перестановки індексів у тензорі другого рангу.

3. ‘{V^2}‘ — символ Яна для позначення групи антисиметричної перестановки індексів у тензорі другого рангу.
4. ‘V[V^2]‘ — символ Яна для позначення групи симетричної перестановки другого і третього індексів у тензорі третього рангу.
5. ‘V{V^2}‘ — символ Яна для позначення групи антисиметричної перестановки другого і третього індексів у тензорі третього рангу.
6. ‘[V^3]‘ — символ Яна для позначення групи симетричної перестановки всіх індексів у тензорі третього рангу.
7. ‘{V^3}‘ — символ Яна для позначення групи антисиметричної перестановки всіх індексів у тензорі третього рангу.
8. ‘[V^2]V^2‘ — символ Яна для позначення групи симетричної перестановки індексів всередині однієї пари (взято першу) у тензорі четвертого рангу.
9. ‘[V^2]^2‘ — символ Яна для позначення групи симетричної перестановки індексів всередині першої та другої пар у тензорі четвертого рангу.
10. ‘[[V^2]^2]‘ — символ Яна для позначення групи симетричної перестановки індексів всередині першої та другої пар, та між парами у тензорі четвертого рангу.
11. ‘[V^4]‘ — символ Яна для позначення групи симетричної перестановки всіх індексів у тензорі четвертого рангу.
12. ‘{[V^2]^2}‘ — символ Яна для позначення групи симетричної перестановки індексів всередині першої і другої пар та антисиметричної перестановки між парами у тензорі четвертого рангу.
13. ‘{V^2}^2‘ — символ Яна для позначення групи антисиметричної перестановки індексів всередині першої і другої пар у тензорі четвертого рангу.

14. `V[V^2]V^2` — символ Яна для позначення групи симетричної перестановки індексів всередині однієї пари (взято другій і третій індекси) у тензорі п'ятого рангу.

15. `V[V^2]^2` — символ Яна для позначення групи симетричної перестановки індексів всередині першої та другої пар (взято другий-третій та четвертий-п'ятий) у тензорі п'ятого рангу.

16. `V[[V^2]^2]` — символ Яна для позначення групи симетричної перестановки індексів всередині першої та другої пар, та між парами (взято другий-третій та четвертий-п'ятий) у тензорі п'ятого рангу.

17. `[V^5]` — символ Яна для позначення групи симетричної перестановки по всіх індексах у тензорі п'ятого рангу.

18. `[V^2]^3` — символ Яна для позначення групи симетричної перестановки всередині пар із першого і другого, третього і четвертого та п'ятого і шостого, індексів у тензорі шостого рангу.

19. `[[V^2]^2][V^2]` — символ Яна для позначення групи симетричної перестановки всередині пар із першого і другого, третього і четвертого та п'ятого і шостого, індексів та між першою і другою парами у тензорі шостого рангу.

20. `[[V^2]^3]` — символ Яна для позначення групи симетричної перестановки всередині пар із першого і другого, третього і четвертого та п'ятого і шостого, індексів та між всіма парами у тензорі шостого рангу.

21. Eq, Inv, R1, R2, R3, D1, D2, D3, T1, T2, T3, M1, M2, S1, S2, Ry, Rz_phi, Rz_psi, Euler — матриці точкових перетворень груп кристалічної симетрії та неперервних поворотів Ейлера.

22. _Theta, _theta, _Phi, _phi, _Psi, _psi — косинуси і синуси кутів Ейлера в матриці поворотів.

23. G1, G2, ..., G33 — списки матриць представлення точкових груп симетрії кристалів та групи ізотропного середовища.

24. Threeclinic, Monoclinic, ..., Isotropical — назви сингоній кристалічної симетрії із розбиттям на під-сингонії.

25. ‘I 1‘, ‘I _2‘, ..., ‘I m3m‘| — міжнародні позначення груп симетрії кристалів, всього 32 імені.

26. ‘S C1‘, ‘S Ci‘, ..., ‘S Oh‘| — позначення груп симетрії кристалів по Шенфлісу, всього 32 імені.

27. _Numb_Non — число ненульових компонент в тензорі, усередненому по групі кристалічної симетрії.

28. _Indep_Elem — список лінійно незалежних компонент в тензорі, усередненому по групі кристалічної симетрії.

Як видно із наведеного списку задіяних імен, вони дійсно потрібні для подальшої роботи, оскільки задають імена груп симетрії. Оскільки позначення кристалічних груп симетрії широко відомі, то їх легко вгадати, а використана в пакеті символіка Яна наведена в деталях.

РОЗДІЛ 9

ФОРМАЛЬНИЙ ВІДГУК СИСТЕМИ В МАТЕРІАЛЬНИХ КООРДИНАТАХ

Метою цього розділу є побудова рівнянь, які описують рух та термодинамічний стан суцільного середовища для різних його моделей, а також рівняння електромагнітного поле, яке при цьому може створюватися, або змінюватися.

Фундаментальні рівняння руху, термодинаміки та кінетики необоротних процесів можна записувати лише у так званій матеріальній системі відліку, яка нерозривно пов'язана із суцільним середовищем і тому кожна його мала частинка нерухома відносно цієї системи. Це зумовлено тим, що рівняння термодинаміки і кінетики справедливі лише для нерухомих термодинамічних систем. Ми їх можемо використати лише локально, тобто для якихось малих частин, а не для всієї системи, бо глобально вона нерівноважна і навіть може не мати фізично вимірюваних усереднених характеристик, наприклад, температури. Вважаємо що ці малі частини, кожну з яких скрізь далі називатимемо фізично нескінченно мала частинка — фнм–частинка, знаходяться у стані своєї термодинамічної рівноваги і тому мають свої термодинамічні характеристики. Вони підкорюються рівнянням руху у лабораторній системі відліку, але фізичні закони потрібно записувати для них, як для термодинамічних систем, тобто у їхній, матеріальній системі відліку.

Першим кроком для виводу рівнянь повинна бути експериментально встановлена, або теоретично обґрунтована феноменологічна модель середовища, яка задає залежність відгуку середовища на збурення. Наприклад, залежність тензора механічних напруг та вектора потоку тепла від тензорів деформацій та вектора градієнта температури, які, у найпростішому випадку, можуть задаватися законом Гука, та законом Фур'є, відповідно. В рамках цієї моделі задається набір тих збурень середовища, які викличуть його відгук, а також їх характеристики як математичних об'єктів. Далі програма будує локальний у просторі і часі термодинамічний потенціал у вигляді абстрактної функції від цих цих збурень. Тип термодинамічного потенціалу визначається набором збурень. Його локальність означає, що ми не можемо задати інтегральний зв'язок відгуку від збурення, як це робиться, наприклад, при виводі співвідношень Крамерса-Кроніга. З фізичної точки зору це означає, що ми не розглядаємо середовища із пам'яттю. Після цього проводиться розклад потенціалу у ряд Тейлора по кожному із збурень до заданого порядку по кожному із них. Враховується математична структура збурення, а коефіцієнти розкладу інтерпретуються як матеріальні тензори у рамках вибраної моделі. Наприклад, при виборі збуренням тензора деформацій та температури лінійний доданок у розкладі потенціалу по деформації буде ізотермічним тензором пружних сталих у законі Гука.

Нелокальність можна частково врахувати задаючи потенціал як функцію похідних у тому числі вищих від збурення за координатами і часом. Наприклад, просторову дисперсію електричної індукції можна частково задати як її залежність від просторової похідної електричного поля. Аналогічно часова дисперсія частково задається через залежність від похідної електричного поля по часу і т.д.

9.1 Термодинамічні величини

Задаємо формальний перелік реактивних змінних, тобто збурень середовища. Список будуємо лише із якихось формальних імен, які задаємо як неіндексовані, скалярні величини, наприклад $a,\ b,\ c,\ d,\ldots$, але ті із них, які є дійсно скалярними, наприклад температура, концентрація і т.п. потрібно одразу ж задавати під своїми іменами, які будуть фігурувати і в рівняннях руху для цих величин. Причому температуру, якщо вона змінна, обов'язково потрібно назвати θ, бо саме на це ім'я налаштована подальша програма. Це пов'язано з тим, що у термодинаміці температура є специфічною змінною, відмінною від всіх інших. Стосовно імен інших змінних, то пізніше буде зроблено нове означення всіх формальних величин з урахуванням їх тензорного характеру.

Для прикладу ілюстрації роботи програми, задаємо як збурення середовища, тобто реактивні змінні, такі три величини: деформації u, електричне поле e, температуру θ:

$$Arg\_TD = [u,\, e,\, \theta].$$

Можна задати інші величини та іншу їх кількість — подальші програми побудови рівнянь розраховані на загальну ситуацію. Задаємо список математичних характеристик кожного збурення — це ранг кожної реактивної змінної як тензорної величини. Для цього прикладу вони очевидні: це тензор другого рангу, вектор і скаляр, тобто

$$Rank\_TD = [2,\, 1,\, 0].$$

Тепер задаємо список степенів нелінійності рівнянь руху по кожній змінній. Це, в загальному випадку, цілі числа, які показують нелінійність рівнянь по кожній змінній. Для наведеного прикладу враховуємо в майбутніх рівняннях квадратичні доданки по деформаціях і електричному полю та лінійні по температурі. Тому

$$Pow\_TD = [2,\, 2,\, 1].$$

Задаємо стаціонарні значення збурень, довкола яких відбуваються нестаціонарні збурення системи. Вважається, що всі стаціонарні збурення, окрім температури, рівні нулю. Якщо це не так, то окрім невідомих нестаціонарних величин є ще і відповідні їм відомі стаціонарні величини, які описують стаціонарний (нерівноважний) стан середовища. Тоді потрібно розклад в ряд по нестаціонарних збуреннях увести довкола цих стаціонарних величин, а їх формальні імена, (безіндексні, відмінні від змінних імен), задати аналогічно до змінних збурень. Програма розрахована на таку загальну ситуацію.

В нашому прикладі вважаємо, що розклад іде навколо нульових значень деформацій і поля, та навколо рівноважної температури t. Це означає, що в задачі немає сталих механічних напружень, які б дали сталі деформації, та сталого електричного поля, яке б дало сталу поляризацію.

$$Point = [0,\, 0,\, t].$$

Тепер задаємо список нерівностей і рівностей, які впорядковують імена по спаданню їх тензорної розмірності. Спочатку встановлюємо порядок імен збурень, а потім прирівнюємо порядок імен стаціонарних положень рівноваги до порядку відповідних збурень. Якщо збурення одне, а стаціонарне положення нульове, то цей список має вигляд рівності, в якій ім'я збурення рівне самому собі.

Для нашого прикладу збурення впорядковуються так: деформації старші за поле, поле старше за температуру, тобто

$$List\_Ord = [e < u,\, \theta < e,\, t = \theta].$$

Ненульова рівноважна температура температури має однакову розмірність із збуренням температури. Тут варто сказати, що пакет програм виводить результати такого впорядкування у своєму порядку, але їх зміст залишається заданим нами.

Тепер задаємо список імен формальних активних змінних, які описують відгук системи на задані вище збурення системи. В нашому прикладі відгуком системи є механічні напруження p, електрична індукція d, ентропія η, відповідно:

$$Response = [p,\, d,\, \eta].$$

Задаємо список формул по яких будуть обчислюватися відгук системи на кожне збурення при заданому термодинамічному потенціалі. Ім'я термодинамічного потенціалу завжди залишаємо одним і тим же — Potential. Окрім них завжди задаємо формулу для обчислення внутрішньої енергії, навіть якщо вона сама є потенціалом. Відмітимо, що диференціювання у пакеті потрібно задавати неактивним, формальним, бо інакше, очевидно, що будуть отримані тривіальні його результати.

Для нашого прикладу в ролі термодинамічного потенціалу, який описує систему ми вибираємо так звану вільну „електричну“ енергію [7], для якої перше і друге начала термодинаміки мають вигляд:

$$d\,F = p\,du - d\,e - \eta\,d\,\theta, \tag{1}$$

або формально, без обчислення інтегралів у термодинамічному просторі, можна записати вираз для неї як

$$F = E + p\,u + d\,e + \eta\,\theta,$$

де E — та складова вільної енергії, яка не залежить від уведених нами збурень.

Тепер для побудови відгуку системи, яка описується (1), використовуємо відомі формули термодинаміки:

$$Formula = \left[\frac{\partial}{\partial u}\,Potential,\ -\frac{\partial}{\partial e}\,Potential,\ -\frac{\partial}{\partial \theta}\,Potential,\ Potential\right], \tag{2}$$

де перші три вирази у правій частині задають відгук системи на відповідне збурення. Тому її праву частину можна записати у більш інформативному вигляді:

$$\left[p = \frac{\partial}{\partial u}\,Potential,\ d = \frac{\partial}{\partial e}\,Potential,\ \eta = \frac{\partial}{\partial \theta}\,Potential,\ F - E = Potential\right], \tag{3}$$

Заданих величин і формул достатньо для побудови формальних тензорних представлень відгуку системи і її внутрішньої енергії через збурення. Тому всі подальші програми просто потрібно запустити для виконання нічого більше не задаючи і не змінюючи в них нічого. Далі наводиться короткий опис всіх програм пакету.

Впорядкування імен. Воно проводиться автоматично проводиться командою `tassume` із пакету `totorder`. Процедура такого впорядкування дозволяє в майбутніх викладках впорядковувати ряди Тейлора функції багатьох змінних по цих змінних командою *assumed*, $e < u$, $\theta < e$, $t = \theta$.

Побудова формального ряду. Виконуємо її для вибраного нами термодинамічного потенціалу як функції заданих нами збурень. Для програми задаються наступні аргументи:

1. Список аргументів потенціалу, тобто збурення;
2. Список положень рівноваги;
3. Список порядків рівнянь руху по кожній змінній;
4. Індикатор типу розкладу: `true` для розкладу довкола положення термодинамічної рівноваги, або `false` в протилежному випадку.

Якщо розклад потенціалу ведеться довкола термодинамічно рівноважного положення, тоді він буде починатися з квадратичних доданків по всіх збуреннях. Якщо ж досліджується ситуація із стаціонарними потоками, тобто при відсутності термодинамічної рівноваги, тоді у розкладі потенціалу залишаться ще й лінійні доданки по всіх збуреннях.

Підкреслимо, що ця програма є по суті програмою розкладу функції багатьох змінних у ряд Тейлора довкола заданої точки до заданого степеня по кожному аргументу. Тому вона не залежить від типу вибраного термодинамічного потенціалу і однаково придатна для розкладу в ряд внутрішньої енергії, вільної енергії, ентальпії, потенціалу Гібса і всіх інших термодинамічних потенціалів, які можна ввести при включенні в систему рівнянь електромагнітного поля [7].

Як приклад роботи цієї програми задаємо її аргументами частину наведених вище виразів та вказуємо, що розклад ведеться навколо положення рівноваги до третього порядку і отримуємо наступний результат:

$$\begin{aligned} Pot &= \frac{1}{2}D_{1,1}(F)(0,0,t)u^2 + D_{1,2}(F)(0,0,t)ue + D_{1,3}(F)(0,0,t)u_\vartriangle\theta \\ &+ \frac{1}{2}D_{2,2}(F)(0,0,t)e^2 + D_{2,3}(F)(0,0,t)e_\vartriangle\theta + \frac{1}{2}D_{3,3}(F)(0,0,t)\left(_\vartriangle\theta\right)^2 \\ &+ \frac{1}{6}D_{1,1,1}(F)(0,0,t)u^3 + \frac{1}{2}D_{1,1,2}(F)(0,0,t)u^2e + \frac{1}{2}D_{1,1,3}(F)(0,0,t)u^2{}_\vartriangle\theta \end{aligned}$$

$$+ \ \frac{1}{2}D_{1,2,2}(F)(0,0,t)ue^2 + D_{1,2,3}(F)(0,0,t)ue{\vartriangle}\theta + \frac{1}{2}D_{1,3,3}(F)(0,0,t)u\left({\vartriangle}\theta\right)^2$$
$$+ \ \frac{1}{6}D_{2,2,2}(F)(0,0,t)e^3 + \frac{1}{2}D_{2,2,3}(F)(0,0,t)e^2{\vartriangle}\theta + \frac{1}{2}D_{2,3,3}(F)(0,0,t)e\left({\vartriangle}\theta\right)^2 .$$

Для скорочення запису тут уведено наступне позначення для частинної похідної від потенціалу, наприклад, третього порядку по його аргументах:

$$D_{k,l,m}(F)(0,0,t) \equiv \frac{\partial^{\,3} F}{\partial x_k \partial x_l \partial x_m}\left(x_1 = 0, x_2 = 0, x_3 = t\right), \quad \text{де} \quad k,l,m = 1,2,3,$$

яке застосовується і для похідних іншого порядку, а також ${\vartriangle}\theta = \theta - t$ для відхилення температури від початкової.

Перша стадія тензоризації термодинамічного потенціалу. Аргументи залишаються формальними, а тензоризуються лише похідні потенціалу у його ряді. Тензорний вигляд похідної визначається рангом аргументу, по якому вона береться. Ранги аргументів задано у списку Rank_TD.

Першою є програма тензоризації похідної в одному доданку ряду. На її вхід задаються:

1. Один доданок із ряду для потенціалу;
2. Список формальних аргументів;
3. Список значень аргументів, довкола яких ведеться розклад в ряд;
4. Список рангів аргументів.

На виході буде вираз, в якому похідні потенціалу позначено індексованою функцією, наприклад, у виразі

$$\Phi\left(l_1\, l_2 \ldots l_n\right)_{k1,k2..km}$$

числа $l_1\, l_2 \ldots l_n$ вказують номери аргументів, по яких взяті частинні похідні сумарного порядку n від термодинамічного потенціалу, а по індексах $k1, k2..km$ будуть іти суми із тензорами аргументів розкладу в ряд. Останні можуть мати ранг від нуля до двох.

Єдиний його аргумент це записані підряд, без пробілів номери збурень у списку `Arg_TD`, по яких відбулося диференціювання при побудові цього члену ряду Тейлора. Кількість тензорних індексів m відповідає його рангу як тензора.

Другою є програма тензоризації похідних у всьому ряді Тейлора для потенціалу. Ця програма просто керує роботою попередньої. Спочатку вона будує формальний ряд, потім кожен його доданок дає першій програмі тензоризації, потім збирає все разом, і нарешті сортує. На її вхід даються:

1. список формальних аргументів;
2. список рангів аргументів;
3. список значень аргументів, довкола яких ведеться розклад в ряд;
4. список степенів розкладу для кожного аргументу;
5. індикатор типу розкладу: true для розкладу довкола положення термодинамічної рівноваги, або false в протилежному випадку.

Приклад роботи програм першої стадії тензоризації потенціалу. Командний рядок побудований для уведеної вище моделі, використовує всі задані вище параметр. Виконання цих програм дає:

$$\begin{aligned}
Res \;=\;& \frac{1}{2}\Phi(\mathit{11})_{k_1,k_2,k_3,k_4}u^2 + \Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3}ue + \Phi(\mathit{13})_{k_1,k_2}u{\vartriangle}\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{22})_{k_1,k_2}e^2 \\
&+ \Phi(\mathit{23})_{k_1}e{\vartriangle}\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{33})\left({\vartriangle}\theta\right)^2 + \frac{1}{6}\Phi(\mathit{111})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5,k_6}u^3 \\
&+ \frac{1}{2}\Phi(\mathit{112})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5}u^2e + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{113})_{k_1,k_2,k_3,k_4}u^2{\vartriangle}\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{122})_{k_1,k_2,k_3,k_4}ue^2 \\
&+ \Phi(\mathit{123})_{k_1,k_2,k_3}ue{\vartriangle}\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{133})_{k_1,k_2}u\left({\vartriangle}\theta\right)^2 + \frac{1}{6}\Phi(\mathit{222})_{k_1,k_2,k_3}e^3 \\
&+ \frac{1}{2}\Phi(\mathit{223})_{k_1,k_2}e^2{\vartriangle}\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{233})_{k_1}e\left({\vartriangle}\theta\right)^2 .
\end{aligned}$$

Друга стадія тензоризації потенціалу і відгуку. На цій стадії тензоризуються збурення. Суми по тензорних індексах не вказуються явно, тому тензоризація також формальна.

Першою є програма тензоризації одного доданку ряду. Вона по зверненню аналогічна до програми `Tens_Term`, але проводить тензоризацію збурень. На її виході буде формальний вираз з урахуванням тензорного характеру кожного його компонента. Він формальний, бо сума по однакових індексах ніде не ведеться.

Голосні індекси, які відносяться до відгуку системи, якщо він вектор, або тензор, йдуть першими серед індексів матеріального тензора. Німі індекси, по яких іде згортка матеріального тензора із векторним, або тензорним збуренням, завжди наступні після голосних.

Другою є програма тензоризації рядів термодинамічних величин. На її вхід даються:

1. Список формальних аргументів;
2. Список рангів аргументів;
3. Список значень аргументів, довкола яких ведеться розклад в ряд;
4. Список степенів розкладу для кожного аргументу;
5. Список відгуку;
6. Список формул для побудови відгуку і внутрішньої енергії;
7. Індикатор типу розкладу: true для розкладу довкола положення термодинамічної рівноваги, або false в протилежному випадку.

Ця програма спочатку запускає першу стадію тензоризації, а потім керує роботою попередньої програми. Спочатку будує формальний ряд, потім кожен його доданок дає на першу стадію тензоризації, збирає все разом, сортує.

Програма перезапису виразів. Вона формує для термодинамічних величин формальний тензорний вигляд. Всі тензорні величини мають відповідну кількість тензорних індексів, тензорні індекси в добутках (згортках) двох і більше тензорів відповідно позначені. Формальність цих виразів полягає у відсутності сум по двічі повторених індексах. Окрім того для всіх тензорів використано однакове позначення, хоча тензори можуть мати абсолютно різний фізичний зміст. Тому потрібно мати це на увазі при порівнянні різних доданків у формальних виразах. Розмірність (одиниця вимірювання) кожного тензора визначається його входженням у вільну енергію як похідної по певній комбінації аргументів.

Приклад побудови термодинамічно рівноважного відгуку. Тепер ми можемо знайти формальний тензорний вигляд для відгуків за допомогою побудованих програм. Для нашого прикладу це будуть ряди для механічних напружень, електричної індукції, ентропії та внутрішньої енергії. Причому в цих виразах вже видно тензорний характер коефіцієнтів, їх ранг та внутрішню симетрію.

Підкреслимо, що всі формальні тензори поки що мають однакове ім'я T. В результаті отримуємо формулу, яка є розгорнутим записом виразу (3):

$$
\begin{aligned}
R_{TD} &= \Big[p = \frac{1}{2}\Phi(111)_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5,k_6}u_{k_5,k_6}u_{k_3,k_4} + \Phi(112)_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5}u_{k_4,k_5}e_{k_3} \\
&+ \Phi(113)_{k_1,k_2,k_3,k_4}u_{k_3,k_4}\triangle\theta + \frac{1}{2}\Phi(122)_{k_1,k_2,k_3,k_4}e_{k_4}e_{k_3} + \Phi(123)_{k_1,k_2,k_3}e_{k_3}\triangle\theta \\
&+ \frac{1}{2}\Phi(133)_{k_1,k_2}\left(\triangle\theta\right)^2 + \Phi(11)_{k_1,k_2,k_3,k_4}u_{k_3,k_4} + \Phi(12)_{k_1,k_2,k_3}e_{k_3} \\
&+ \Phi(13)_{k_1,k_2}\triangle\theta \\
d &= -\frac{1}{2}\Phi(112)_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5}u_{k_4,k_5}u_{k_2,k_3} - \Phi(122)_{k_1,k_2,k_3,k_4}u_{k_3,k_4}e_{k_2} \\
&- \Phi(123)_{k_1,k_2,k_3}u_{k_2,k_3}\triangle\theta - \frac{1}{2}\Phi(222)_{k_1,k_2,k_3}e_{k_3}e_{k_2} - \Phi(223)_{k_1,k_2}e_{k_2}\triangle\theta \\
&- \frac{1}{2}\Phi(233)_{k_1}\left(\triangle\theta\right)^2 - \Phi(12)_{k_1,k_2,k_3}u_{k_2,k_3} - \Phi(22)_{k_1,k_2}e_{k_2} - \Phi(23)_{k_1}\triangle\theta, \\
\eta &= -\frac{1}{2}\Phi(113)_{k_1,k_2,k_3,k_4}u_{k_3,k_4}u_{k_1,k_2} - \Phi(123)_{k_1,k_2,k_3}u_{k_2,k_3}e_{k_1} \\
&- \Phi(133)_{k_1,k_2}u_{k_1,k_2}\triangle\theta - \frac{1}{2}\Phi(223)_{k_1,k_2}e_{k_2}e_{k_1} - \Phi(233)_{k_1}e_{k_1}\triangle\theta \\
&- \Phi(13)_{k_1,k_2}u_{k_1,k_2} - \Phi(23)_{k_1}e_{k_1} - \Phi(33)\triangle\theta, \\
F - E &= \frac{1}{2}\Phi(11)_{k_1,k_2,k_3,k_4}u_{k_1,k_2}u_{k_3,k_4} + \Phi(12)_{k_1,k_2,k_3}u_{k_2,k_3}e_{k_1} + \Phi(13)_{k_1,k_2}u_{k_1,k_2}\triangle\theta
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&+\ \frac{1}{2}\Phi(\mathit{22})_{k_1,k_2}e_{k_1}e_{k_2}+\Phi(\mathit{23})_{k_1}e_{k_1}\triangle\theta+\frac{1}{2}\Phi(\mathit{33})\left(\triangle\theta\right)^2\\
&+\ \frac{1}{6}\Phi(\mathit{111})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5,k_6}u_{k_1,k_2}u_{k_3,k_4}u_{k_5,k_6}+\frac{1}{2}\Phi(\mathit{112})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5}u_{k_2,k_3}u_{k_4,k_5}e_{k_1}\\
&+\ \frac{1}{2}\Phi(\mathit{113})_{k_1,k_2,k_3,k_4}u_{k_1,k_2}u_{k_3,k_4}\triangle\theta+\frac{1}{2}\Phi(\mathit{122})_{k_1,k_2,k_3,k_4}u_{k_1,k_2}e_{k_1}e_{k_2}\\
&+\ \Phi(\mathit{123})_{k_1,k_2,k_3}u_{k_2,k_3}e_{k_1}\triangle\theta+\frac{1}{2}\Phi(\mathit{133})_{k_1,k_2}u_{k_1,k_2}\left(\triangle\theta\right)^2\\
&+\ \frac{1}{6}\Phi(\mathit{222})_{k_1,k_2,k_3}e_{k_1}e_{k_2}e_{k_3}+\frac{1}{2}\Phi(\mathit{223})_{k_1,k_2}e_{k_1}e_{k_2}\triangle\theta+\frac{1}{2}\Phi(\mathit{233})_{k_1}e_{k_1}\left(\triangle\theta\right)^2\Big].
\end{aligned}
$$

Тепер задаємо команду виводу отриманих виразів для тензорів відгуку та термодинамічного потенціалу, залежного від збурень системи. В результаті отримуємо наступні вирази:

$$
\begin{aligned}
p_{k_1,k_2}\ =&\ \frac{1}{2}\Phi(\mathit{111})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5,k_6}u_{k_3,k_4}u_{k_5,k_6}+\Phi(\mathit{112})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5}u_{k_4,k_5}e_{k_3}\\
&+\ \Phi(\mathit{113})_{k_1,k_2,k_3,k_4}u_{k_3,k_4}\triangle\theta+\frac{1}{2}\Phi(\mathit{122})_{k_1,k_2,k_3,k_4}e_{k_3}e_{k_4}+\Phi(\mathit{123})_{k_1,k_2,k_3}e_{k_3}\triangle\theta\\
&+\ \frac{1}{2}\Phi(\mathit{133})_{k_1,k_2}\left(\triangle\theta\right)^2+\Phi(\mathit{11})_{k_1,k_2,k_3,k_4}u_{k_3,k_4}+\Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3}e_{k_3}\\
&+\ \Phi(\mathit{13})_{k_1,k_2}\triangle\theta
\end{aligned}
$$

для тензора механічних напружень, який має другий ранг, що випливає із кількості індексів у доданках правої частини, у кожному із яких є два тензорні індекси k_1 і k_2, а по решті індексів від жодного до k_6 передбачено підсумовування;

$$
\begin{aligned}
d_{k_1}\ =&\ -\frac{1}{2}\Phi(\mathit{112})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5}u_{k_2,k_3}u_{k_4,k_5}-\Phi(\mathit{122})_{k_1,k_2,k_3,k_4}u_{k_3,k_4}e_{k_2}\\
&-\ \Phi(\mathit{123})_{k_1,k_2,k_3}u_{k_2,k_3}\triangle\theta-\frac{1}{2}\Phi(\mathit{222})_{k_1,k_2,k_3}e_{k_2}e_{k_3}-\Phi(\mathit{223})_{k_1,k_2}e_{k_2}\triangle\theta\\
&-\ \frac{1}{2}\Phi(\mathit{233})_{k_1}\left(\triangle\theta\right)^2-\Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3}u_{k_2,k_3}-\Phi(\mathit{22})_{k_1,k_2}e_{k_2}-\Phi(\mathit{23})_{k_1}\triangle\theta,
\end{aligned}
$$

для вектора електричної індукції, який є тензором першого рангу, що так само як і у попередньому випадку видно із правої частини;

$$
\begin{aligned}
\eta\ =&\ -\frac{1}{2}\Phi(\mathit{113})_{k_1,k_2,k_3,k_4}u_{k_1,k_2}u_{k_3,k_4}-\Phi(\mathit{123})_{k_1,k_2,k_3}u_{k_2,k_3}e_{k_1}\\
&-\ \Phi(\mathit{133})_{k_1,k_2}u_{k_1,k_2}\triangle\theta-\frac{1}{2}\Phi(\mathit{223})_{k_1,k_2}e_{k_1}e_{k_2}-\Phi(\mathit{233})_{k_1}e_{k_1}\triangle\theta\\
&-\ \Phi(\mathit{13})_{k_1,k_2}u_{k_1,k_2}-\Phi(\mathit{23})_{k_1}e_{k_1}-\Phi(\mathit{33})\triangle\theta,
\end{aligned}
$$

для ентропії системи згенерованої механічними деформаціями та зміною температури, яка є скаляром, що видно із правої частини як і у попередньому випадку;

$$\begin{aligned}
F - E \;=\; & \frac{1}{2}\Phi(\mathit{11})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4} + \Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3} u_{k_2,k_3} e_{k_1} + \Phi(\mathit{13})_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2} \triangle\theta \\
+\; & \frac{1}{2}\Phi(\mathit{22})_{k_1,k_2} e_{k_1} e_{k_2} + \Phi(\mathit{23})_{k_1} e_{k_1} \triangle\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{33}) \left(\triangle\theta\right)^2 \\
+\; & \frac{1}{6}\Phi(\mathit{111})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5,k_6} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4} u_{k_5,k_6} + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{112})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5} u_{k_2,k_3} u_{k_4,k_5} e_{k_1} \\
+\; & \frac{1}{2}\Phi(\mathit{113})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4} \triangle\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{122})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_1,k_2} e_{k_1} e_{k_2} \\
+\; & \Phi(\mathit{123})_{k_1,k_2,k_3} u_{k_2,k_3} e_{k_1} \triangle\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{133})_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2} \left(\triangle\theta\right)^2 \\
+\; & \frac{1}{6}\Phi(\mathit{222})_{k_1,k_2,k_3} e_{k_1} e_{k_2} e_{k_3} + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{223})_{k_1,k_2} e_{k_1} e_{k_2} \triangle\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{233})_{k_1} e_{k_1} \left(\triangle\theta\right)^2,
\end{aligned}$$

для термодинамічного потенціалу, який також є скаляром.

Отже остаточний результат для вибраної моделі термодинамічного відгуку системи на зовнішнє збурення — це формальне тензорне представлення відгуку системи та її внутрішньої енергії як ряду по збуреннях. Воно просто автоматично виписується для будь-якої моделі і має ім'я `Response_Tens`.

9.2 Кінетичні величини

Задаємо список формальних імен потоків лише тих фізичних величин, які змінюють внутрішню енергію середовища додатково до теплопровідності. Якщо такі потоки в моделі є, то тоді серед термодинамічних збурень, заданих в попередньому підрозділі, обов'язково повинна бути температура, бо вона тоді буде обов'язково змінюватися внаслідок наявності бодай одного додаткового потоку. Якщо таких потоків немає, тобто список формальних імен пустий, то температура може бути серед термодинамічних збурень в моделі, а може і не бути. Отже якщо список додаткових потоків тепла не пустий, то до нього завжди автоматично буде додано потік тепла внаслідок теплопровідності. Якщо ж список додаткових потоків тепла пустий, то потік тепла внаслідок теплопровідності буде автоматично включено в повний список потоків тепла лише при наявності температури серед термодинамічних збурень.

Відмітимо, що подальша програма розрахована на список загального вигляду, в тому числі і на пустий список, тобто на відсутність додаткових потоків.

Для прикладу в даній моделі вибираємо додатковим до теплопровідності лише один потік — джоулеве тепло. Формальну густину електричного струму, який це тепло створює, позначаємо через J:

$$Flows = [J].$$

Якби ми, допустим, врахували ще і дифузійні потоки якихось компонент середовища, а в твердому тілі вони, як правило, відсутні, то потрібно було б задати формальні імена ще й для цих потоків, наприклад, Y, Z, X і т.п. В цьому випадку нам було б потрібно також використати вирази із [21, 22] для необоротнього виробництва ентропії цими потоками.

Задаємо список тензорних розмірностей потоків. Якщо список додаткових потоків пустий, то і цей повинен бути таким же. Для нашої моделі ранг струму — одиниця.

$$Rank\_Flow = [1]$$

Задаємо список виразів для джерел-стоків внутрішньої енергії, які не є теплопровідністю та роботою — це доданок $\rho\Omega$ в рівняннях (8) та (8kl) із розділу "Фізичний підхід". Кожен елемент цього списку мусить мати вигляд добутку лише і тільки лише двох формальних імен: ім'я потоку, яке було задане в цьому підрозділі; ім'я збурення, яке цей потік викликає (задано в підрозділі термодинамічні величини) і обов'язково є, по фізичному змісту і, як правило, по математичному запису, градієнтом.

Коли таке збурення є вектором, то його можна представити як градієнт від скаляра, а коли воно є тензором другого рангу — це "градієнт"від вектора і т.д. Тому тензорна розмірність відповідного потоку потоку може бути і вища за одиницю, але для потоку тепла ми завжди приймаємо в подальшій програмі, що він є вектором.

Для нашого прикладу розглядаємо джоулеве тепло, яке виділяється при проходженні електричного струму в середовищі. Якщо середовище діелектричне, то такого доданку немає, якщо середовище напівпровідник, то таке тепло буде, але мале, якщо середовище провідник, то вклад такого доданку визначальний при проходженні електромагнітних хвиль. В нашому прикладі збуренням, яке створює додатковий потік, є напруженість електричного поля. Тому:

$$Sou\_Energ = [Je].$$

Далі ідуть обчислення, які виконуються автоматично при їх активізації. Тому не потрібно більше нічого задавати, або змінювати.

Далі йде підпрограма, яка створює список кінетичних параметрів системи. В ньому є:

1. Повний список джерел внутрішньої енергії для вибраної моделі середовища. Якщо список додаткових джерел внутрішньої енергії не пустий, то формальна густина потоку тепла — Q автоматично додаєт ся до заданих вище потоків першою. Якщо ж додаткових джерел немає, то теплопровідність враховується лише при наявності температури в списку термодинамічних збурень.

2. Повний список тензорних розмірністей потоків формується аналогічно до попереднього;

3. Список джерел генерації ентропії в необоротному процесі формується аналогічно до попереднього. Він може складатися із додаткових джерел-стоків внутрішньої енергії, ділених на температуру та/або із необоротної ентропії, яка виникає при теплопровідності [1, 21, 22];

4. Вираз для повної швидкості генерації нерівноважної ентропії [1, 21, 22].

Ці обчислення проводяться для заданої моделі. Їх результатом є списком кінетичних характеристик системи, в якому перший елемент це повний список потоків тепла в середовищі, другий — список рангів цих потоків, третій

— список джерел нерівноважної ентропії, четвертий — швидкість генерації нерівноважної ентропії.

Результат має вигляд:

$$Cin = \left[[Q, J], [1, 1], \left[-\frac{Q\theta_k}{\theta^2}, \frac{Je}{\theta} \right], -\frac{Q\theta_k}{\theta^2} + \frac{Je}{\theta} \right].$$

Для потоку тепла при теплопровідності і для Джоулевого тепла, у нас появляються поки що невідомі вирази для потоків — Q і J. Їх потрібно якось виразити через через збурення. Ці потоки також є відгуком системи на зовнішнє збурення, але їх зв'язок із збуреннями ніяк знайти із термодинамічного потенціалу. По суті, причиною цього є той факт, що потоки відсутні в оборотніх процесах термодинаміки, а саме для таких процесів і вводяться термодинамічні потенціали.

В нашому прикладі із вільної енергії ми їх не можемо знайти так як ми це зробили для ентропії, механічних напружень, електричної індукції чи для внутрішньої енергії в попередньому підрозділі.

Згідно загальних положень нерівноважної термодинаміки зв'язок цих потоків із збуреннями шукаємо використовуючи наступні її положення [1, 23, 24, 26, 27]:

1. Друге начало термодинаміки для необоротних процесів, тобто твердження про невід'ємність швидкості генерації нерівноважної ентропії (тут використовуємо закон природи);

2. Лінійний зв'язок між потоками і „узагальненими термодинамічними силами", які побудовані із збурень (тут пропонуємо модель кінетичного відгуку);

3. Співвідношення взаємності Онзагера, яке регламентує вигляд потоків для необоротних процесів (тут використовуємо формулювання закону природи в рамках запропонованої моделі відгуку).

При цьому вводимо феноменологічні коефіцієнти Онзагера в лінійних виразах для потоків через збурення. Зауважимо, що ця теорія застосовна лише до так званих лінійних необоротних процесів, коли відгук середовища (потік тепла, електричний струм, дифузійний потік, хімічна спорідненість і т.п.) лінійно залежить від збурень. Це справедливо для систем, які не далекі від рівноважного стану і еволюціонують до нього після зняття збурення. Внаслідок цього обмеження ми матимемо завжди лише перший порядок для розкладу потоків по збуреннях середовища. Можна підняти порядок похідних в потоках, задаючи складніші моделі для середовища, але лінійність виразу для потоків через збурення залишиться завжди. Це обмеження ослаблене у випадку необоротних процесів, які далекі від рівноважного стану (в просторі термодинамічних змінних). Тоді ці співвідношення потрібно замінити на рівняння Пригожина [21, 22], яке регламентує вже не самі потоки а швидкість їх зміни [22].

Матриця кінетичних коефіцієнтів Онзагера квадратна. Довжина її рядка, або висота стовпчика залежить лише від тензорних розмірностей потоків, які створюють джерело необоротньої ентропії, очевидним чином

$$\dim(L) = \sum_{i=1}^{n} 3^{r_i},$$

де r_i — ранг i–го потоку, а n — кількість потоків. Якщо, наприклад, є лише теплопровідність, то розмірність цієї матриці буде 3 на 3.

Невід'ємність виробництва ентропії приводить до умови додатності ізотропного коефіцієнта теплопровідності, а у випадку анізотропії — ще до певних співвідношень між елементами, зокрема, додатність діагональних елементів. Якщо враховані джоулеве нагрівання, як в наведеному прикладі, то розмір матриці буде 6 на 6, а умова додатності виробництва ентропії вимагає також і додатності діагональних елементів цієї матриці, тобто діагональних елементів тензорів теплопровідності і електропровідності, та ще цілого ряду інших умов, які, по суті, є прямим наслідком критерію Сільвестра додатності квадратичної форми.

У випадку більшої кількості потоків, або їх вищих тензорних розмірностей кількість елементів матриці Онзагера обчислюється за наведеною формулою, а кількість нестрогих зв'язків–нерівностей між її елементами стає надзвичайно великою. Наприклад, якщо ранги, мають значення 1, 2 і 3, то кількість їх елементів буде рівна $3 + 3^2 + 3^3 = 39$, тому розмірність матриці буде 39×39. Але, в будь-якому випадку вона симетрична при відсутності магнітного поля у задачі, а за його наявності — антисиметрична [21, 22]. Підкреслимо, що в теорії лінійного відгуку Онзагера, елементи матриці кінетичних коефіцієнтів L[i,j] є сталими величинами незалежними від збурень і їх градієнтів. Це припущення суттєве для теорії і не може бути порушеним. (Не виключено, що його можна порушити, але лише так, щоб квадратична форма для генерації необоротньої ентропії залишилася додатньо означеною. Але для багатовимірних просторів такий ефективний критерій знайти важко.)

В даному місці програми ми оперуємо лише з формальною матрицею Онзагера, тому фігурують лише її ім'я L, та формальні індекси, які просто вказують на зв'язок потоків. Далі вони будуть замінені на реальні індекси, які відповідатимуть компонентам потоків.

Це підпрограма, яка одержує формальні вирази для потоків нерівноважної ентропії у вигляді лінійного розкладу по відповідних збуреннях. На вхід задається лише список кінетичних характеристик системи. На виході отримуємо список формальних виразів для потоків через збурення.

Будуємо потоки для заданої моделі. Це формальні вирази, які ніде не використовуються, але допоможуть зрозуміти симетрію коефіцієнтів Онзагера при їх не формальному введенні.

Результатом розрахунків є вираз для потоків

$$\left[-\frac{L_{Q,Q}\theta_k}{\theta^2} + \frac{L_{Q,J}e}{\theta}, -\frac{L_{J,Q}\theta_k}{\theta^2} + \frac{L_{J,J}e}{\theta}\right].$$

Таким чином побудовані формальні вирази для кінетичного відгуку середовища через його збурення. Взагалі це густина потоку нерівноважної ентропії виражена через "узагальнені термодинамічні"сили, а також густина нерівноважного потоку тепла та густина електричного струму.

Тепер потрібно ці формальні вирази замінити на дійсні. Для цього спочатку потрібно провести переозначення всіх формальних величин на реальні, врахувавши їх тензорний характер. Звісно, що потрібно відповідним чином переозначити і формальні коефіцієнти, які входять у знайдені зв'язки.

Формальна тензоризації потоків. Це вирази для джерел, які створюють необоротну ентропію. Тут потрібно врахувати принцип взаємності Онзагера про симетрію матриці кінетичних коефіцієнтів. Оскільки число потоків, як правило, невелике і всі вони є векторами, то цю програму можна зробити просто врахувавши тензорну розмірність кожного потоку, яка була задана вище. При цьому потрібно обов'язково враховувати, що всі потоки утворюють один вектор (звісно, що неметричний, з різною розмірністю компонент), який за допомогою співвідношень Онзагера лінійно виражається також через один вектор (також неметричний, і з різною розмірністю компонент), створений із збурень середовища — градієнтів. Слід відмітити, що термодинамічні потенціали не залежать від градієнту температури, навіть якщо враховувати її часове запізнення, але залежать від градієнту електричного потенціалу, тобто від електричного поля. А якщо врахувати і просторову дисперсію, то ще і від вищих похідних електричного потенціалу.

Програма формальної тензоризації виразів для потоків, які генерують нерівноважну ентропію. На вхід програми даються: повний список потоків; список тензорних рангів цих потоків; список джерел підводу енергії, які відмінні від теплопровідності та роботи; список збурень, по яких проведено розклад вільної енергії.

На виході програми буде повідомлення про довжину рядка матриці Онзагера, а також список формально тензоризованих потоків даної задачі, які відповідають заданим на вхід програми формальним потокам та списку їх тензорних рангів.

Елементами цього списку є потоки, виражені через градієнти лише тих збурень, від яких вони можуть залежати в силу другого начала термодинаміки для необоротних процесів та в силу припущення про лінійну залежність потоків від збурень. При цьому в їх формальному запису будуть присутні елементи матриці Онзагера. Формальна індексація цих елементів проведена так, що його повний індекс вказує його місце саме в квадратній матриці. Перший, або кілька перших індексів елемента є індексом компоненти відповідного потоку, хоча він і позначається як найстарший із усіх присутніх в запису індексів. Так зроблено тому, що у випадку потоків вищої тензорної розмірності, для їх векторного запису потрібно провести впорядкування індексації компонент тензора. Оскільки це важко зробити взагалі, то формальний вираз і в цьому випадку матиме такий же вигляд, але тоді невпорядковані тензорні індекси утримуються в квадратних дужках.

Формальний тензорний вигляд потоків. Для нашого прикладу елементи матриці Онзагера мають різну розмірність, так само як і формальні матеріальні тензори, що входять у вирази для термодинамічних параметрів.

Отримуємо наступні результати:

$$\mathit{The\ length\ of\ Onsager\ matix\ row\ is}\ , 6,$$

$$\mathit{Flows\_tens} = \left[-\frac{L_{k_2,k_1}\theta_{k_1}}{\theta^2} + \frac{L_{k_2,3+k_1}e_{k_1}}{\theta}, -\frac{L_{3+k_2,k_1}\theta_{k_1}}{\theta^2} + \frac{L_{3+k_2,3+k_1}e_{k_1}}{\theta} \right].$$

У виразах для потоків, на відміну від виразів для термодинамічних величин, голосним індексом є завжди перший за положенням серед всіх індексів матриці Онзагера. Але він, по своєму позначенню в програмі, найстарший. На це треба звернути увагу. Така відмінність викликана тим, що потоки можуть бути тензорами вищого ран у ніж 1, і тоді потрібно проводити впорядкування їх індексів, а в загальному випадку це зробити важко.

9.3 Повний відгук системи на збурення

Як запрограмовано в попередніх підрозділах модель середовища однозначно задається, якщо ми задаємо сім характеристик термодинамічного характеру і три характеристики кінетичного характеру, а саме:

1. Список імен збурень середовища `Arg_TD`;
2. Список рангів цих збурень `Rank\_TD`;
3. Список степенів розкладу термодинамічного потенціалу по цих збуреннях `Pow_TD`;
4. Список стаціонарних значень цих збурень `Point`;
5. Список впорядкування імен аргументів по їх рангу `List\_Ord`;
6. Список імен відгуку системи на збурення `Response`;
7. Список формул для обчислення відгуку і внутрішньої енергії по потенціалу `Formula`;
8. Список імен потоків, додаткових до тепла і механічної роботи `Flows`;
9. Список рангів цих потоків `Rank\_Flow`;
10. Список додаткових джерел внутрішньої енергії `Sou_Energ`.

Для побудови формального тензорного представлення повного відгуку системи на збурення є наступна програма, яка залежить від вказаних 10 величин.

Її запуск для вибраної моделі суцільного середовища дає наступний результат:

$$\mathit{The\ length\ of\ Onsager\ matix\ row\ is}\ ,6,$$

$$\begin{aligned}
R\ =\ & \Big[\Big[p = \frac{1}{2}\Phi(\mathit{111})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5,k_6} u_{k_5,k_6} u_{k_3,k_4} + \Phi(\mathit{112})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5} u_{k_4,k_5} e_{k_3} \\
+\ & \Phi(\mathit{113})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_3,k_4} \triangle\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{122})_{k_1,k_2,k_3,k_4} e_{k_4} e_{k_3} + \Phi(\mathit{123})_{k_1,k_2,k_3} e_{k_3} \triangle\theta \\
+\ & \frac{1}{2}\Phi(\mathit{133})_{k_1,k_2} (\triangle\theta)^2 + \Phi(\mathit{11})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_3,k_4} + \Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3} e_{k_3} \\
+\ & \Phi(\mathit{13})_{k_1,k_2} \triangle\theta\Big], \\
\Big[d\ =\ & -\frac{1}{2}\Phi(\mathit{112})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5} u_{k_4,k_5} u_{k_2,k_3} - \Phi(\mathit{122})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_3,k_4} e_{k_2}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&- \ \Phi(\mathit{123})_{k_1,k_2,k_3} u_{k_2,k_3} \triangle\theta - \frac{1}{2}\Phi(\mathit{222})_{k_1,k_2,k_3} e_{k_3} e_{k_2} - \Phi(\mathit{223})_{k_1,k_2} e_{k_2} \triangle\theta \\
&- \ \frac{1}{2}\Phi(\mathit{233})_{k_1} (\triangle\theta)^2 - \Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3} u_{k_2,k_3} - \Phi(\mathit{22})_{k_1,k_2} e_{k_2} - \Phi(\mathit{23})_{k_1} \triangle\theta \Big],
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Big[\eta \ &= \ -\frac{1}{2}\Phi(\mathit{113})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_3,k_4} u_{k_1,k_2} - \Phi(\mathit{123})_{k_1,k_2,k_3} u_{k_2,k_3} e_{k_1} \\
&- \ \Phi(\mathit{133})_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2} \triangle\theta - \frac{1}{2}\Phi(\mathit{223})_{k_1,k_2} e_{k_2} e_{k_1} - \Phi(\mathit{233})_{k_1} e_{k_1} \triangle\theta \\
&- \ \Phi(\mathit{13})_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2} - \Phi(\mathit{23})_{k_1} e_{k_1} - \Phi(\mathit{33}) \triangle\theta \Big],
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Big[F - E \ &= \ \frac{1}{2}\Phi(\mathit{11})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4} + \Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3} u_{k_2,k_3} e_{k_1} + \Phi(\mathit{13})_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2} \triangle\theta \\
&+ \ \frac{1}{2}\Phi(\mathit{22})_{k_1,k_2} e_{k_1} e_{k_2} + \Phi(\mathit{23})_{k_1} e_{k_1} \triangle\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{33}) (\triangle\theta)^2 \\
&+ \ \frac{1}{6}\Phi(\mathit{111})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5,k_6} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4} u_{k_5,k_6} + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{112})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5} u_{k_2,k_3} u_{k_4,k_5} e_{k_1} \\
&+ \ \frac{1}{2}\Phi(\mathit{113})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4} \triangle\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{122})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_1,k_2} e_{k_1} e_{k_2} \\
&+ \ \Phi(\mathit{123})_{k_1,k_2,k_3} u_{k_2,k_3} e_{k_1} \triangle\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{133})_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2} (\triangle\theta)^2 \\
&+ \ \frac{1}{6}\Phi(\mathit{222})_{k_1,k_2,k_3} e_{k_1} e_{k_2} e_{k_3} + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{223})_{k_1,k_2} e_{k_1} e_{k_2} \triangle\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{233})_{k_1} e_{k_1} (\triangle\theta)^2 \Big],
\end{aligned}
$$

$$
\Big[Flows \ = \ \frac{L_{k_2,3+k_1} e_{k_1}}{\theta} - \frac{L_{k_2,k_1} \theta_{k_1}}{\theta^2}, \frac{L_{3+k_2,3+k_1} e_{k_1}}{\theta} - \frac{L_{3+k_2,k_1} \theta_{k_1}}{\theta^2}\Big]\Big].
$$

Таким чином для задання моделі суцільного середовища потрібно задати вказані вище десять списків і запустити програму Gen_Response з цими десятьмя аргументами. Результатом її роботи буде список із формальними тензорними рядами для відгуку системи.

РОЗДІЛ 10

ПРИКЛАДИ ФОРМАЛЬНОГО ВІДГУКУ

Розглянемо кілька прикладів виводу рівнянь для різних середовищ для тестування роботи програми і порівняння отриманих результатів із відомими літературними даними.

10.1 Лінійне пружне середовище

Збурення — це тензор деформацій, другого рангу, лінійна теорія, стаціонарний стан недеформований, відгук лише напруження, термодинамічний потенціал — внутрішня енергія, нерівноважних явищ немає.

Робота пакету програм дає наступний результат:

$$Arg\_TD = [u], \quad Rank\_TD = [2], \quad Pow\_TD = [1],$$

$$Point = [0], \quad List\_Ord = [u = u], \quad Response = [p],$$

$$Formula = \left[\frac{\partial}{\partial u} Potential, Potential\right],$$

$$Flows = [\,], \quad Rank\_Flow = [\,], \quad Sou\_Energ = [\,],$$

$$The\ length\ of\ Onsager\ matix\ row\ is\ , 0,$$

$$\left[\left[p = \Phi(11)_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_3,k_4}, F - E = \frac{1}{2}\Phi(11)_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4}\right], [Flows = [\,]]\right].$$

Нескладно перевірити ці результати і переконатися, що вони вірні.

10.2 Нелінійне пружне середовище

Аналогічно до попереднього, але враховуємо нелінійні доданки у законі Гука, наприклад, до квадратичних.

У цьому випадку пакету програм дає наступний результат:

$$Arg\_TD = [u], \quad Rank\_TD = [2], \quad Pow\_TD = [2],$$

$$Point = [0], \quad List\_Ord = [u = u], \quad Response = [p],$$
$$Formula = \left[\frac{\partial}{\partial u} Potential, Potential\right],$$
$$Flows = [\,], \quad Rank\_Flow = [\,], \quad Sou\_Energ = [\,],$$
$$The\ length\ of\ Onsager\ matix\ row\ is\ , 0,$$

$$\left[\left[p = \frac{1}{2}\Phi(111)_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5,k_6} u_{k_3,\,k_4} u_{k_5,k_6} + \Phi(11)_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_3,k_4},\right.\right.$$
$$\left. F - E = \frac{1}{6}\Phi(111)_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5,k_6} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4} u_{k_5,k_6} + \frac{1}{2}\Phi(11)_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4}\right],$$
$$\left.[Flows = [\,]]\right],$$

який повністю співпадає з наведеними виразами у [1, 8].

10.3 Лінійне термопружне середовище

Збурення — це тензор деформацій і температура, другого і нульового рангу, відповідно. Будуємо рівняння в рамках лінійної теорії, стаціонарний стан задаємо недеформованим, із сталою температурою. Відгуком середовища є механічні напруження та ентропія, термодинамічним потенціалом — вільна енергія, нерівноважних, кінетичних явищ немає. У списку формул задаємо вираз для вільної енергії замість внутрішньої енергії.

У цьому випадку пакету програм дає наступний результат:

$$Arg\_TD = [u, \theta], \quad Rank\_TD = [2, 0], \quad Pow\_TD = [1, 1],$$

$$Point = [0, t], \quad List\_Ord = [\theta < u, t = \theta], \quad Response = [p, \eta],$$
$$Formula = \left[\frac{\partial}{\partial u} Potential, -(\frac{\partial}{\partial \theta} Potential), Potential\right],$$
$$Flows = [\,], \quad Rank\_Flow = [\,], \quad Sou\_Energ = [\,],$$
$$The\ length\ of\ Onsager\ matix\ row\ is\ , 3,$$

$$\left[\left[p \ = \ \Phi(\mathit{11})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_3,k_4} + \Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2} \triangle\theta,\right.\right.$$

$$\eta \ = \ -\Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2} - \Phi(\mathit{22}) \triangle\theta,$$

$$\left. F - E \ = \ \frac{1}{2}\Phi(\mathit{11})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4} + \Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2} \triangle\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{22}) \left(\triangle\theta\right)^2 \right],$$

$$\left.\left[Flows \ = \ -\left[\frac{L_{k_2,k_1}\theta_{k_1}}{\theta^2}\right]\right]\right].$$

Отримані результати повністю співпали із наведеними в [1].

10.4 Нелінійне термопружне середовище

Аналогічно до попереднього, але з урахуванням квадратичних ефектів по деформаціях отримуємо:

$$Arg\_TD = [u, \theta], \quad Rank\_TD = [2, 0], \quad Pow\_TD = [2, 1],$$

$$Point = [0, t], \quad List\_Ord = [\theta < u, t = \theta], \quad Response = [p, \eta],$$

$$Formula = [\frac{\partial}{\partial u} Potential, -(\frac{\partial}{\partial \theta} Potential), Potential],$$

$$Flows = [\,], \quad Rank\_Flow = [\,], \quad Sou\_Energ = [\,],$$

$$The \ length \ of \ Onsager \ matix \ row \ is \ , 3,$$

$$\left[\left[p \ = \ \frac{1}{2}\Phi(\mathit{111})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5,k_6} u_{k_3,k_4} u_{k_5,k_6} + \Phi(\mathit{112})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_3,k_4} \triangle\theta\right.\right.$$

$$+ \ \frac{1}{2}\Phi(\mathit{122})_{k_1,k_2} \left(\triangle\theta\right)^2 + \Phi(\mathit{11})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_3,k_4} + \Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2} \triangle\theta$$

$$\eta \ = \ -\frac{1}{2}\Phi(\mathit{112})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4} - \Phi(\mathit{122})_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2} \triangle\theta - \Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2}$$

$$- \ \Phi(\mathit{22}) \triangle\theta,$$

$$F - E \ = \ \frac{1}{6}\Phi(\mathit{111})_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5,k_6} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4} u_{k_5,k_6} + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{112})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4} \triangle\theta$$

$$+\frac{1}{2}\Phi(\mathit{122})_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2} \left(\triangle\theta\right)^2 + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{11})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4}$$

$$\left. +\Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2} \triangle\theta \ \frac{1}{2} + \Phi(\mathit{22}) \left(\triangle\theta\right)^2 \right],$$

$$\left.\left[Flows \ = \ -\frac{L_{k_2,k_1}\theta_{k_1}}{\theta^2}\right]\right].$$

На жаль не вдалося знайти літературні джерела для порівняння.

10.5 Лінійне п'єзопружне середовище

Збурення — це тензор деформацій і електричне поле, другий і перший ранги, лінійна теорія, стаціонарний стан недеформований, без поля, відгук напруження і індукція, термодинамічний потенціал — електрична ентальпія [8], нерівноважних явищ немає.

У цьому випадку отримуємо:

$$Arg\_TD = [u, e], \quad Rank\_TD = [2, 1], \quad Pow\_TD = [1, 1],$$

$$Point = [0, 0], \quad List\_Ord = [e < u], \quad Response = [p, d],$$

$$Formula = [\frac{\partial}{\partial u} Potential, -(\frac{\partial}{\partial e} Potential), Potential],$$

$$Flows = [\,], \quad Rank\_Flow = [\,], \quad Sou\_Energ = [\,],$$

$$The\ length\ of\ Onsager\ matix\ row\ is\ , 0,$$

$$\left[\left[\begin{aligned} p &= \Phi(\mathit{11})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_3,k_4} + \Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3} e_{k_3}, \\ d &= -\Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3} u_{k_2,k_3} - \Phi(\mathit{22})_{k_1,k_2} e_{k_2}, \\ F - E &= \frac{1}{2}\Phi(\mathit{11})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4} + \Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3} u_{k_2,k_3} e_{k_1} + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{22})_{k_1,k_2} e_{k_2} e_{k_1}\end{aligned}\right], \left[Flows = [\,]\right]\right].$$

Отриманий результат співпадає [8] з точністю до позначень.

10.6 Нелінійне п'єзопружне середовище

Аналогічно до попереднього, але в ролі збурення беремо механічні напруження p і електричне поле e, а в ролі термодинамічного потенціалу — термодинамічний потенціал Гібса [8], нерівноважних явищ немає.

У цьому випадку отримуємо:

$$Arg\_TD = [p, e], \quad Rank\_TD = [2, 1], \quad Pow\_TD = [2, 2],$$

$$Point = [0, 0], \quad List\_Ord = [e < p], \quad Response = [u, d],$$

$$Formula = \left[-(\frac{\partial}{\partial p}Potential), -(\frac{\partial}{\partial e}Potential), Potential\right],$$

$$Flows = [\,], \quad Rank\_Flow = [\,], \quad Sou\_Energ = [\,],$$

$$The\ length\ of\ Onsager\ matix\ row\ is\ , 0,$$

$$\Bigg[\Bigg[\begin{aligned} u &= -\frac{1}{2}\Phi(111)_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5,k_6}p_{k_3,k_4}p_{k_5,k_6} - \Phi(112)_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5}p_{k_4,k_5}e_{k_3} \\ &- \frac{1}{2}\Phi(122)_{k_1,k_2,k_3,k_4}e_{k_3}e_{k_4} - \Phi(11)_{k_1,k_2,k_3,k_4}p_{k_3,k_4} - \Phi(12)_{k_1,k_2,k_3}e_{k_3}, \\ d &= -\frac{1}{2}\Phi(112)_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5}p_{k_2,k_3}p_{k_4,k_5} - \Phi(122)_{k_1,k_2,k_3,k_4}p_{k_3,k_4}e_{k_2} \\ &- \frac{1}{2}\Phi(222)_{k_1,k_2,k_3}e_{k_2}e_{k_3} - \Phi(12)_{k_1,k_2,k_3}p_{k_2,k_3} - \Phi(22)_{k_1,k_2}e_{k_2}, \\ G - E &= \frac{1}{6}\Phi(111)_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5,k_6}p_{k_1,k_2}p_{k_3,k_4}p_{k_5,k_6} + \frac{1}{2}\Phi(112)_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5}p_{k_2,k_3}p_{k_4,k_5}e_{k_1} \\ &+ \frac{1}{2}\Phi(122)_{k_1,k_2,k_3,k_4}p_{k_3,k_4}e_{k_1}e_{k_2} + \frac{1}{6}\Phi(222)_{k_1,k_2,k_3}e_{k_1}e_{k_2}e_{k_3} \\ &+ \frac{1}{2}\Phi(11)_{k_1,k_2,k_3,k_4}p_{k_1,k_2}p_{k_3,k_4} + \Phi(12)_{k_1,k_2,k_3}p_{k_2,k_3}e_{k_1} + \frac{1}{2}\Phi(22)_{k_1,k_2}e_{k_2}e_{k_1}\Bigg], \end{aligned}$$
$$\Bigg[Flows = [\,]\Bigg]\Bigg].$$

Доданки, отримані у лінійному наближенні аналогічні до рівнянь для прямого п'єзоефекту із [8] з точністю до позначень, а нелінійні доданки нескладно інтерпретувати беручи до уваги, що тут розглядається обернений п'єзоефект.

10.7 Лінійний термо-, п'єзо- пружний діелектрик

Збурення — це тензор деформацій, електричне поле і температура, другий, перший і нульовий ранги, лінійна теорія, стаціонарний стан недеформований, без поля, відгук напруження, індукція і ентропія, термодинамічний потенціал — так звана електрична ентальпія [8], додаткових нерівноважних явищ немає.

У цьому випадку отримуємо:

$$Arg\_TD = [u, e, \theta], \quad Rank\_TD = [2, 1, 0], \quad Pow\_TD = [1, 1, 1],$$

$$Point = [0, 0, t], \quad List\_Ord = [e < u, \theta < e, t = \theta], \quad Response = [p, d, \eta],$$

$$Formula = \left[\frac{\partial}{\partial u}Potential, -(\frac{\partial}{\partial e}Potential), -(\frac{\partial}{\partial \theta}Potential), Potential\right],$$

$$Flows = [\,], \quad Rank\_Flow = [\,], \quad Sou\_Energ = [\,],$$

$$The\ length\ of\ Onsager\ matix\ row\ is\ , 3,$$

$$\Bigg[\Bigg[\begin{aligned} p &= \Phi(\mathit{11})_{k_1,k_2,k_3,k_4}u_{k_3,k_4} + \Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3}e_{k_3} + \Phi(\mathit{13})_{k_1,k_2}\triangle\theta, \\ d &= -\Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3}u_{k_2,k_3} - \Phi(\mathit{22})_{k_1,k_2}e_{k_2} - \Phi(\mathit{23})_{k_1}\triangle\theta, \\ \eta &= -\Phi(\mathit{13})_{k_1,k_2}u_{k_1,k_2} - \Phi(\mathit{23})_{k_1}e_{k_1} - \Phi(\mathit{33})\triangle\theta, \\ F - E &= \frac{1}{2}\Phi(\mathit{11})_{k_1,k_2,k_3,k_4}u_{k_1,k_2}u_{k_3,k_4} + \Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3}u_{k_2,k_3}e_{k_1} + \Phi(\mathit{13})_{k_1,k_2}u_{k_1,k_2}\triangle\theta \\ &+ \frac{1}{2}\Phi(\mathit{22})_{k_1,k_2}e_{k_2}e_{k_1} + \Phi(\mathit{23})_{k_1}e_{k_1}\triangle\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{33})\left(\triangle\theta\right)^2 \Bigg], \end{aligned}$$
$$\left[Flows = -\frac{L_{k_2,k_1}\theta_{k_1}}{\theta^2}\right]\Bigg].$$

Доданки, отримані у лінійному наближенні аналогічні до рівнянь для лінійної термопружності та прямого п'єзоефекту, отриманих вище, і співпадають, з точністю до позначень, із результатами [8]. Нелінійні доданки, аналогічно до попередньої моделі, нескладно інтерпретувати беручи до уваги, що тут розглядається прямий п'єзоефект.

10.8 Лінійний термо-, п'єзо- пружний провідник

Збурення — це тензор деформацій, електричне поле і температура, другий, перший і нульовий ранги, лінійна теорія, стаціонарний стан недеформований, без поля, відгук напруження, індукція і ентропія, термодинамічний потенціал — електрична ентальпія [8], додаткові нерівноважні явища обумовлені проходженням струму. В результаті отримуємо:

$$Arg\_TD = [u, e, \theta],\ Rank\_TD = [2, 1, 0],\ Pow\_TD = [1, 1, 1],\ Point = [0, 0, t],$$

$$List\_Ord = [e < u, \theta < e, t = \theta], \quad Response = [p, d, \eta]$$
$$Formula = \left[\frac{\partial}{\partial u}Potential, -\frac{\partial}{\partial e}Potential, -\frac{\partial}{\partial \theta}Potential, Potential\right],$$

$$Flows = [J], \quad Rank\_Flow = [1], \quad Sou\_Energ = [Je],$$

$$The\ length\ of\ Onsager\ matix\ row\ is\ , 6,$$

$$\begin{aligned}
\Bigg[\Big[p \;&=\; \Phi(\mathit{11})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_3,k_4} + \Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3} e_{k_3} + \Phi(\mathit{13})_{k_1,k_2} \triangle\theta, \\
d \;&=\; -\Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3} u_{k_2,k_3} - \Phi(\mathit{22})_{k_1,k_2} e_{k_2} - \Phi(\mathit{23})_{k_1} \triangle\theta, \\
\eta \;&=\; -\Phi(\mathit{13})_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2} - \Phi(\mathit{23})_{k_1} e_{k_1} - \Phi(\mathit{33}) \triangle\theta, \\
F - E \;&=\; \frac{1}{2}\Phi(\mathit{11})_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_1,k_2} u_{k_3,k_4} + \Phi(\mathit{12})_{k_1,k_2,k_3} u_{k_2,k_3} e_{k_1} + \Phi(\mathit{13})_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2} \triangle\theta \\
&+\; \frac{1}{2}\Phi(\mathit{22})_{k_1,k_2} e_{k_2} e_{k_1} + \Phi(\mathit{23})_{k_1} e_{k_1} \triangle\theta + \frac{1}{2}\Phi(\mathit{33}) \left(\triangle\theta\right)^2 \Big], \\
\Big[Flows \;&=\; -\frac{L_{k_2,k_1}\theta_{k_1}}{\theta^2} + \frac{L_{k_2,3+k_1} e_{k_1}}{\theta}, -\frac{L_{3+k_2,k_1}\theta_{k_1}}{\theta^2} + \frac{L_{3+k_2,3+k_1} e_{k_1}}{\theta} \Big] \Bigg].
\end{aligned}$$

Доданки, отримані у лінійному наближенні аналогічні до рівнянь для лінійної термопружності та прямого п'єзоефекту, отриманих вище, і співпадають, з точністю до позначень, із результатами [8]. Нелінійні доданки, аналогічно до попередньої моделі, нескладно інтерпретувати беручи до уваги, що тут розглядається прямий п'єзоефект.

10.9 Лінійне середовище з абстрактним високорозмірним потоком

Збуреннями задаємо тензор деформацій u_{k_1,k_2}, деяке абстрактне тензорне „поле“ e_{k_1,k_2,k_3} і температуру θ, відповідно другого, третього і нульового рангів, розгляд ведемо в рамках лінійної теорії навколо рівноважного стаціонарного стану з нульовими напруженнями, „полем“ і температурю t. Тоді відгуком середовища будуть звичайні механічні напруження, деяке абстрактне тензорне поле третього рангу — своєрідна тензорна „індукція“ а також ентропія η, а термодинамічним потенціалом — внутрішня енергія. Також вважаємо, що додаткова ентропія генерується нерівноважними явищами обумовленими наявними заданими тензорними струмами.

$$Arg\_TD = [u, e, \theta], \quad Rank\_TD = [2, 3, 0], \quad Pow\_TD = [1, 1, 1],$$

$$Point = [0, 0, t], \quad List\_Ord = [e < u, \theta < e, t = \theta], \quad Response = [p, d, \eta],$$

$$Formula = [\frac{\partial}{\partial u} Potential, -(\frac{\partial}{\partial e} Potential), -(\frac{\partial}{\partial \theta} Potential), Potential],$$

$$Flows = [Y, J], \quad Rank\_Flow = [2, 3], \quad Sou\_Energ = [Yu, Je],$$

$$The\ length\ of\ Onsager\ matix\ row\ is\ , 39,$$

$$\begin{aligned}
\Big[\Big[p &= \Phi(11)_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_3,k_4} + \Phi(12)_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5} e_{k_3,k_4,k_5} + \Phi(13)_{k_1,k_2} \triangle\theta, \\
d &= -\Phi(12)_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5} u_{k_4,k_5} - \Phi(22)_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5,k_6} e_{k_4,k_5,k_6} - \Phi(23)_{k_1,k_2,k_3} \triangle\theta, \\
\eta &= -\Phi(13)_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2} - \Phi(23)_{k_1,k_2,k_3} e_{k_1,k_2,k_3} - \Phi(33) \triangle\theta, \\
F - E &= \frac{1}{2}\Phi(11)_{k_1,k_2,k_3,k_4} u_{k_3,k_4} u_{k_1,k_2} + \Phi(12)_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5} u_{k_4,k_5} e_{k_1,k_2,k_3} \\
&+ \Phi(13)_{k_1,k_2} u_{k_1,k_2} \triangle\theta + \frac{1}{2}\Phi(22)_{k_1,k_2,k_3,k_4,k_5,k_6} e_{k_1,k_2,k_3} e_{k_4,k_5,k_6} \\
&+ \Phi(23)_{k_1,k_2,k_3} e_{k_1,k_2,k_3} \triangle\theta + \frac{1}{2}\Phi(33) \left(\triangle\theta\right)^2 \Big] \\
\Big[Flows &= -\frac{L_{k_4,k_1}\theta_{k_1}}{\theta^2} + \frac{L_{k_4,3+[k_1,k_2]} u_{k_1,k_2}}{\theta} + \frac{L_{k_4,12+[k_1,k_2,k_3]} e_{k_1,k_2,k_3}}{\theta}, \\
&- \frac{L_{3+[k_4,k_5],k_1}\theta_{k_1}}{\theta^2} + \frac{L_{3+[k_4,k_5],3+[k_1,k_2]} u_{k_1,k_2}}{\theta} + \frac{L_{3+[k_4,k_5],12+[k_1,k_2,k_3]} e_{k_1,k_2,k_3}}{\theta}, \\
&- \frac{L_{12+[k_4,k_5,k_6],k_1}\theta_{k_1}}{\theta^2} + \frac{L_{12+[k_4,k_5,k_6],3+[k_1,k_2]} u_{k_1,k_2}}{\theta} \\
&+ \frac{L_{12+[k_4,k_5,k_6],12+[k_1,k_2,k_3]} e_{k_1,k_2,k_3}}{\theta} \Big]\Big].
\end{aligned}$$

Як видно з отриманих формул, матриця Онзагера має складні, багатокомпонентні індекси. Оскільки „потоки“ тепер стали тензорними величинами, то і відповідні їм індекси стали багатокомпонентними і для обчислення цих „потоків“ потрібно задавати правило обчислення їх багатокомпонентних індексів. Оскільки таке правило в кожному випадку може бути своїм, то ми його не регламентуємо, а записуємо взагалі. Тому отримали такі складні вирази для додаткових потоків тепла.

РОЗДІЛ 11

ФОРМАЛЬНИЙ ВІДГУК СИСТЕМИ В ЛАБОРАТОРНИХ КООРДИНАТАХ

В попередньому розділі ми побудували формальні тензорні вирази для термодинамічних величин та необоротніх потоків, які входять в закони термодинаміки (оборотні і необоротні) для фнм–частинки.

Найважливіша їх особливість — це величини задані в матеріальній системі відліку, яка рухається разом із середовищем. Тому для використання їх в рівняннях руху, які записуються в лабораторній, нерухомій системі відліку потрібно провести їх перетворення до цієї системи координат. Ця проблема відсутня в лінійній теорії, хіба що за винятком нерелятивістського перетворення електромагнітного поля по Лоренцу, особливо коли є стаціонарні компоненти електричного і ма нітного полів (звичайна магнітогідродинаміка). Це пов'язане з тим що матриці перетворення близькі до одиничної і відрізняються від неї лише у другому і вищих степенях розкладу по збуреннях. А такими доданками в лінійній теорії нехтують.

Тепер потрібно формальні тензорні вирази для термодинамі них величин і для потоків записати в лабораторній системі координат, о саме в цій системі виписані рівняння руху. Цей перехід необхідно ро ити лише для нелінійних рівнянь, бо для лінійних вказані величини не відрізняються.

Для такого переходу нам потрібно знати лише матрицю переходу, оскільки самі правила переходу при заміні базиса завжди одні і ті ж. Слід зауважити, що цей перехід не зводиться до ортогональних перетворень, оскільки середовище деформується, тому матриці переходу не ортогональні і їх визначник не рівний одиниці. Останнє означає, що при таких переходах елементарний об'єм змінює не лише свою форму, а й величину, тобто середовище або розтягується, або стискується.

Для обчислення всіх величин в лабораторній системі координат (це ейлерові координати в механіці суцільного середовища) використовуємо такі формули [20] для тензора механічних напружень:

$$t_{i,k} = \frac{Y_{i,j}\, Y_{l,k}\, T_{j,l}\, \rho}{\rho_0},$$

де $Y_{i,j}$ — матриця переходу, ρ — густина в деформованого середовища, тобто густина в лабораторній системі, ρ_0 — густина недеформованого середовища, $T_{i,j}$ — тензор деформації в матеріальних, тобто лагранжевих координатах — це ті механічні напруження, які „відчуває“ фнм–частинка.

Для матриці переходу справедливий такий вираз (по Murnaghan):

$$Y_{i,j} = \delta_{i,j} + \frac{\partial}{\partial x_j}\, u_i,$$

де u_i — компоненти вектора деформацій в л-системі, x_j — координати в л-системі.

Аналогічно для векторів справедливий такий вираз:

$$r_i = \frac{Y_{i,j}\, R_j\, \rho}{\rho_0},$$

де R_j — компоненти вектора в матеріальних координатах.

І, нарешті для скалярів справедлива формула переходу:

$$s = \frac{S\, \rho}{\rho_0},$$

де S — скаляр в матеріальних координатах.

Відмітимо, що наявність множника $\frac{\rho}{\rho_0}$ в усіх цих формул э наслідком переходу від елементу об'єму в матеріальних координатах до елементу об'єму в лабораторних координатах.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. *Петров Н., Бранков Й.* Современные проблемы термодинамики: Пер. с болгарского. — М.: Мир, 1986. — 288 с.
2. *Грин А., Адкинс Дж.* Большие упругие деформации и нелинейная механика сплошной среды. Пер. с англ. — М.: Мир, 1965. — 456 с.
3. *Лурье А.И.* Нелинейная теория упругости. — М.: Наука, 1980. — 512 с.
4. *Карнаухов В.Г.* Связанные задачи термоупругости. — К.: Наукова думка, 1982. — 260 с.
5. *Карнаухов В.Г., Гуменюк Б.П.* Термомеханика предварительно деформированных вязкоупругих тел. — К.: Наукова думка, 1990. — 304 с.
6. *Спенсер Э.* Теория инвариантов. — М.: Мир, 1974. — 160 с.
7. *Зарембо Л.К., Красильников В.А.* Ведение в нелинейную акустику. Звуковые и ультразвуковые волны большой интенсивности. — М.: Наука, 1966. — 520 с.
8. *Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П.* Основы кристаллофизики. — М.: Наука, 1975. — 680 с.
9. *Балакирев М.К., Гилинский И.А.* Волны в пьезокристаллах. — Новосибирск: Наука, 1982. — 240 с.
10. *Дмитриев В.Г., Тарасов А.В.* Прикладная нелинейная оптика. — М.: Наука, 1982. — 352 с.
11. *Схоутен Я.А.* Тензорный анализ для физиков. — М.: Наука, 1965. — 456 с.
12. *Эллиот Дж., Добер П.* Симметрия в физике: Пер. с англ. — М.: Мир, 1983. — т. 1, 368 с., т. 2, 416 с.
13. *Най Дж.* Физические свойства кристаллов. — М.: Мир, 1967. — 386 с.
14. *Наугольных К. А., Островский Л.А.* Нелинейные волновые процессы в акустике. — М.:Наука, 1990. — 237 с.

15. *Гусев В.Э.,. Карабутов А.А.* Лазерная оптоакустика. — М.: Наука, 1991. — 304 с.
16. *Баранский К.Н.* Физическая акустика кристаллов. — М.: Изд-во МГУ, 1991. 144 с.
17. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. т. VII. Теория упругости. — М.: Наука, 1987. — 248 с.
18. *Голод П.І., Клімик А.У.* Математичні основи теорії симетрій. — К.: Наукова думка, 1992. — 368 с.
19. *Бабичев А.Б., Бабушкина Н.А., Братковский А.М. и др.* Физические величины: Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. — М.: Энергоатомиздат, 1991. — 1232 с.
20. *Зарембо Л.К, Красильников В.А.* Нелинейные явления при распространении упругих волн в твердых телах. — УФН, 1970, т. 102, в. 4. — с. 549 — 586.
21. *Хаазе Р.* Термодинамика необратимых процессов. Пер. с нем. — М.: Мир, 1967. — 544 с.
22. *Пригожин И.* Введение в термодинамику необратимых процессов. Пер. с англ. — М.: ИЛ, 1960. — 128 с.
23. *Рашевский П.К.* Риманова геометрия и тензорный анализ. — М.: Наука, 1967.— 664 с.
24. *Агранович В.М., Гинзбург В.Л.* Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. — М.: Наука, 1979. — 432 с.
25. *Руденко О.В., Солуян С.И.* Теоретические основы нелинейной акустики. — М.: Наука, 1975. — 288 с.
26. *Truesdell C., Toupin R.A.* The Classical Field Theiries. In Handbuch der Physik. Bond III/1 — Berlin: Springer-Verlag, 1960.
27. *Truesdell C., Noll W.* The Nonlinear Field Theiries. In Handbuch der Physik. Bond III/3 — Berlin: Springer-Verlag, 1965.
28. *Thurston R.N.* Waves in Solids. In Handbuch der Physik. Bond VIa/4. — Berlin: Springer-Verlag, 1974. p. 109 – 313.

Навчальне видання

Посібник з рівнянь теорії суцільного середовища

Навчальний посібник

Упорядник: Макарець Микола Володимирович