

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
**Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого**

Институт прикладной математики и механики  
Кафедра «Теоретическая механика»

Работа допущена к защите  
Зав. кафедрой, д.ф.-м.н., проф.  
\_\_\_\_\_ А. М. Кривцов  
« » \_\_\_\_\_ 2017 г.

## **ДИССЕРТАЦИЯ**

на соискание академической степени

## **МАГИСТРА**

**Тема: Особенности нестационарных тепловых процессов в  
одномерных гармонических кристаллах**

Направление 010100 Математика

Направление: 01.04.03 - Механика и математическое моделирование

Выполнил: студент гр. 63604/1 \_\_\_\_\_ А.А. Соколов  
Руководитель: д.ф.-м.н., проф. \_\_\_\_\_ А. М. Кривцов

Санкт-Петербург  
2017

# Оглавление

Введение	4
<b>1 Локализованные тепловые импульсы в одномерных кристаллических структурах</b>	<b>6</b>
1.1 Уравнение аномальной теплопроводности в одномерном гармоническом кристалле . . . . .	6
1.2 Прямоугольное возмущение . . . . .	7
1.2.1 Решение . . . . .	7
1.2.2 Затухание . . . . .	9
1.2.3 Огибающая кривая . . . . .	10
1.2.4 Асимптотическое поведение вблизи волнового фронта . . . . .	10
1.3 Треугольное начальное возмущение . . . . .	11
1.4 Пилообразное возмущение . . . . .	14
1.5 Затухание произвольного локализованного импульса . . . . .	14
1.6 Обсуждения . . . . .	17
<b>2 Распространение тепла в одномерном кристалле: дискретный и континуальный подход.</b>	<b>18</b>
2.1 Решение дискретной задачи . . . . .	18
2.2 Задача о точечном тепловом воздействии . . . . .	19
2.3 Задача о тепловой ступеньке . . . . .	20
2.4 Прямоугольное возмущение . . . . .	22
<b>3 Производство энтропии при одномерном распространении тепла</b>	<b>25</b>
3.1 Простейшая термодинамика одномерной среды . . . . .	25
3.1.1 Уравнения баланса энергии . . . . .	25
3.1.2 Энтропия и второй закон термодинамики . . . . .	26
3.1.3 Универсальное диссипативное неравенство . . . . .	27
3.1.4 Определяющее соотношение . . . . .	28

3.1.5	Корректировка определяющих соотношений . . . . .	29
3.1.6	Время как переменная состояния . . . . .	31
3.1.7	Подход П. А. Жилина . . . . .	31
3.2	Гармонический кристалл . . . . .	33
3.2.1	Кинетическая температура . . . . .	33
3.2.2	Направление теплового потока . . . . .	34
3.2.3	Подсчет энтропии . . . . .	37
3.2.4	Непостоянство энтропии для гармонического кристалла . . . . .	40
3.2.5	Связь со статистической механикой . . . . .	41
3.3	Обсуждение и заключительные замечания . . . . .	41
<b>4</b>	<b>Более сложные системы</b>	<b>44</b>
4.1	Одномерный кристалл с внутренней массой . . . . .	44
4.2	Обсуждения . . . . .	45
	<b>Заключение</b>	<b>46</b>

# Введение

В настоящее время изучение нелинейных термомеханических процессов в низкоразмерных структурах привлекает особое внимание в связи с бурным развитием наноэлектронных устройств разработанных на основе материалов с микроструктурой [1, 2, 3, 4]. Достижения в области нанотехнологий позволили экспериментально подтвердить волновую природу теплопередачи и конечную скорость распространения тепловых возмущений [5, 6]. Результаты исследований подобных явлений могут послужить основой для создания универсальной теории теплопроводности, применимой как на микро-, так и на макромасштабах.

В данной работе мы выбрали для рассмотрения тепловых процессов одну из простейших систем: однородную одномерную среду, в которой отсутствуют механические движения. В этом случае уравнение баланса энергии может быть записано в виде<sup>1</sup>

$$\rho\dot{U} = -h', \quad (1)$$

где  $\rho$  — плотность среды,  $U$  — внутренняя (в данном случае чисто тепловая) энергия,  $h$  — тепловой поток, точкой обозначена производная по времени, штрихом — по координате. Так как в рассматриваемом случае изменение тепловой энергии связано только с изменением температуры, то

$$\dot{U} = c_V\dot{T}, \quad (2)$$

где  $T$  — температура,  $c_V$  — теплоемкость при постоянном объеме. Если изменения температуры невелики, то теплоемкость можно считать постоянной величиной. Связь теплового потока с температурой обычно описывается законом Фурье [7, 8]:

$$h = -\kappa T' \quad \Rightarrow \quad \dot{T} = \beta T'' \quad (3)$$

— в результате мы получили классическое уравнение теплопроводности, где  $\kappa$  — коэффициент теплопроводности,  $\beta = \kappa/(\rho c_V)$  — коэффициент температуропроводности, точка (  $\dot{\quad}$  ) обозначает дифференцирование по времени  $t$ , штрих (  $'$  ) дифференцирование по координате  $x$ . Уравнение получено подстановкой закона Фурье вместе с соотношением (2) в уравнение баланса энергии (1). На практике закон Фурье применяется для описания тепловых процессов на макромасштабе. Однако закон Фурье предсказывает бесконечную скорость распространения сигнала, что может быть парадоксально с физической точки зрения. Изучение процессов на микроуровне, когда характерные длины пропорциональны нескольким длинам межатомных связей, выявило необходимость использования более сложных моделей теплопроводности, учитывающих конечную скорость распространения тепловых возмущений. Значительные отклонения от закона Фурье наблюдаются в одномерных кристаллических

---

<sup>1</sup>Вывод уравнения будет дан ниже: (3.1)–(3.4). В упрощенной формулировке (1) не учтен объемный подвод тепла.

структурах [9]. Недавние экспериментальные исследования одномерных наноструктур показали зависимость теплопроводности от длины структуры [10]. Сильные отклонения от закона Фурье были экспериментально показаны для C и BN нанотрубок [11]. Тепловые аномалии, наблюдаемые в наноструктурах, могут быть использованы на практике для разработки перспективных устройств, таких как тепловой диод [4].

Аномальная природа тепловых процессов в одномерных кристаллических структурах была показана в работе [12], где рассматривалась задача о тепловом потоке между двумя тепловыми резервуарами. Множество результатов, посвященных аномальной природе распространения тепла в низкоразмерных структурах, собрано в книге [8]. Модификация закона Фурье, приводящая к уравнению гиперболической теплопроводности (Максвелл, Каттанео, Веронотт, Лыков) [13, 14],

$$\dot{h} + \frac{1}{\tau} h = -\frac{\kappa}{\tau} T' \quad \Rightarrow \quad \ddot{T} + \frac{1}{\tau} \dot{T} = \frac{\beta}{\tau} T'', \quad (4)$$

где  $\tau$  — время релаксации, одна из альтернатив классическому уравнению для описания подобных процессов. Однако, возникают сложности в применении его к описанию тепловых процессов в одномерных кристаллах, так как не удастся однозначно определить время релаксации [15].

Перспективный подход к описанию нестационарных тепловых процессов в одномерных кристаллах предложен в [16, 17, 18]. С использованием корреляционного анализа начальная стохастическая задача для отдельных частиц была сведена к детерминированной задаче для статистических характеристик кристалла. Ее решение дало континуальное уравнение (1.4), описывающее аномальное распространение тепла в одномерных гармонических решетках [17]. Данная работа посвящена исследованию уравнения аномальной теплопроводности, сравнения его решений с решениями других уравнений, описывающих распространение тепла, сравнению различных подходов к определению производства энтропии в процессах распространения тепла.

# Глава 1

## Локализованные тепловые импульсы в одномерных кристаллических структурах

### 1.1 Уравнение аномальной теплопроводности в одномерном гармоническом кристалле

В данной главе будут получены точные аналитические решения этого уравнения, в частности, для начальных тепловых возмущений в форме прямоугольного, треугольного и пилообразного импульса. Такие свойства, как затухание и асимптотика теплового фронта будут исследованы подробно на примере прямо-угольного начального возмущения. Эти результаты могут быть использованы для анализа аномального распространения тепла в более сложных структурах, таких как одномерный гармонический кристалл на упругом основании [19], двумерный и трехмерный кристаллы [20]. Понимание процессов аномального распространения тепла особенно важно для анализа экспериментальных данных, которые могут быть получены в ближайшем будущем в связи с активным развитием нанотехнологий.

Одномерный гармонический кристалл — это простая, но очень эффективная модель для изучения аномальных тепловых эффектов. Следуя работе [17], рассмотрим бесконечный гармонический кристалл. Каждая частица массой  $m$  соединена с соседней частицей линейной пружиной жесткости  $C$ . Уравнения движения частиц:

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

где  $u_k$  — отклонение от положения равновесия частицы с индексом  $k$ . Рассматриваются следующие начальные условия:

$$u_k|_{t=0} = 0, \quad \dot{u}_k|_{t=0} = \sigma(x)\rho_k, \quad (1.2)$$

где  $\rho_k$  — независимые случайные величины с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией;  $\sigma$  — дисперсия начальных скоростей частиц, являющаяся медленно изменяющейся функцией пространственной координаты  $x = ka$ , где  $a$  — начальное расстояние между соседними частицами. Данные начальные условия

можно интерпретировать, как результат воздействия на кристалл ультракороткого лазерного импульса [21]. Введем кинетическую температуру  $T$ :

$$k_B T = m \langle \dot{u}_k \rangle^2, \quad (1.3)$$

где  $\langle \dots \rangle$  оператор усреднения по реализациям,  $k_B$  — постоянная Больцмана. В работе [17] было получено континуальное дифференциальное уравнение в частных производных:

$$\ddot{T} + \frac{1}{t} \dot{T} = c^2 T'', \quad (1.4)$$

где  $c$  скорость звука в одномерном кристалле. Уравнение (1.4) описывает эволюцию пространственного теплового возмущения во времени. Следующие начальные условия для уравнения [17] соответствуют стохастической начальной задаче (1.2):

$$\dot{T}|_{t=0} = 0, \quad T|_{t=0} = T_0(x). \quad (1.5)$$

Решение задачи (1.4)–(1.5) может быть получено в интегральной форме [17]:

$$T(t, x) = \frac{1}{\pi} \int_{-t}^t \frac{T_0(x - c\tau)}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau. \quad (1.6)$$

Уравнение (1.4) частный случай уравнения Дарбу [22]. Данный тип уравнения был исследован в связи с решениями волнового уравнения в цилиндрической системе координат в двухмерном и трехмерном случаях. Однако оно не было изучено в связи с явлениями теплопроводности. Уравнение (1.4) внешне схоже с уравнением гиперболической теплопроводности (4), однако имеет переменный коэффициент при слагаемом с первой производной по времени. Эта особенность возникает в связи с аномальной природой переноса тепла в одномерных структурах. Из структуры уравнения (1.4) может показаться, что оно имеет сингулярность. Однако это не так, так как уравнение (1.4) должно использоваться с начальными условиями (1.5), исключая сингулярность. Отсутствие особенности подтверждается общим решением (1.6) и частными решениями, которые будут рассмотрены далее.

Данная работа посвящена нахождению точных аналитических решений уравнения (1.4) для случаев, когда функция начального распределения  $T_0(x)$  локализованная в пространстве функция координат  $x$ ,

$$T_0(x) = \begin{cases} 0, & x < -l, \\ \Phi(x), & -l < x < l, \\ 0, & x > l, \end{cases} \quad (1.7)$$

где  $\Phi(x)$  некоторая функция,  $l$  — половина ширины локализованного возмущения. Экспериментально подобное начальное возмущение (1.7) может быть получено путем сверхбыстрого нагрева лазером локализованного участка кристалла.

## 1.2 Прямоугольное возмущение

### 1.2.1 Решение

Рассмотрим прямоугольное начальное температурное распределение:

$$T_0(x) = A (\mathcal{H}(x + l) - \mathcal{H}(x - l)), \quad (1.8)$$

где  $\mathcal{H}(x)$  — функция Хевисайда:

$$\mathcal{H}(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x \geq 0. \end{cases} \quad (1.9)$$

$A$  — амплитуда начального температурного возмущения. Подставляя формулу (1.8) в решение (1.6) получаем:

$$T(t, x) = \frac{A}{\pi} \int_{-t}^t \frac{\mathcal{H}(x+l)}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau - \frac{A}{\pi} \int_{-t}^t \frac{\mathcal{H}(x-l)}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau. \quad (1.10)$$

Воспользуемся решением для начального возмущения в виде функции Хевисайда [17]:

$$T(x, t) \stackrel{\text{def}}{=} T_S(x, t) = \begin{cases} 0, & x \leq -ct, \\ \frac{A}{\pi} \arccos\left(\frac{x}{ct}\right), & -ct \leq x \leq ct, \\ A, & x \geq ct. \end{cases} \quad (1.11)$$

Подстановка формулы в интегральное представление (1.10) дает искомое решение. Оно имеет вид:

$$t \leq \tau_0 : \quad T(x, t) = \begin{cases} 0, & x < -l - ct; \\ A \left(1 - \frac{1}{\pi} \arccos\left(\frac{x+l}{ct}\right)\right), & -l - ct < x < -l + ct; \\ A, & -l + ct < x < l - ct; \\ \frac{A}{\pi} \arccos\left(\frac{x-l}{ct}\right), & l - ct < x < l + ct; \\ 0, & x > l + ct, \end{cases} \quad (1.12)$$

$$t \geq \tau_0 : \quad T(x, t) = \begin{cases} 0, & x < -l - ct; \\ A \left(1 - \frac{1}{\pi} \arccos\left(\frac{x+l}{ct}\right)\right), & -l - ct < x < l - ct; \\ \frac{A}{\pi} \left(-\arccos\left(\frac{x+l}{ct}\right) + \arccos\left(\frac{x-l}{ct}\right)\right), & l - ct < x < -l + ct; \\ \frac{A}{\pi} \arccos\left(\frac{x-l}{ct}\right), & -l + ct < x < l + ct; \\ 0, & x > l + ct, \end{cases} \quad (1.13)$$

где  $\tau_0 = l/c$ . Для отрицательных  $x$  решение может быть получено из соображений симметрии как  $T(x, t) = T(-x, t)$ .

Для сравнения рассмотрим решение классического уравнения теплопроводности:

$$\dot{T} = \beta T''. \quad (1.14)$$

Решение уравнения для начального распределения температуры в виде функции Хевисайда имеет вид [23]:

$$T(x, t) = \frac{1}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4\beta t}}\right), \quad (1.15)$$



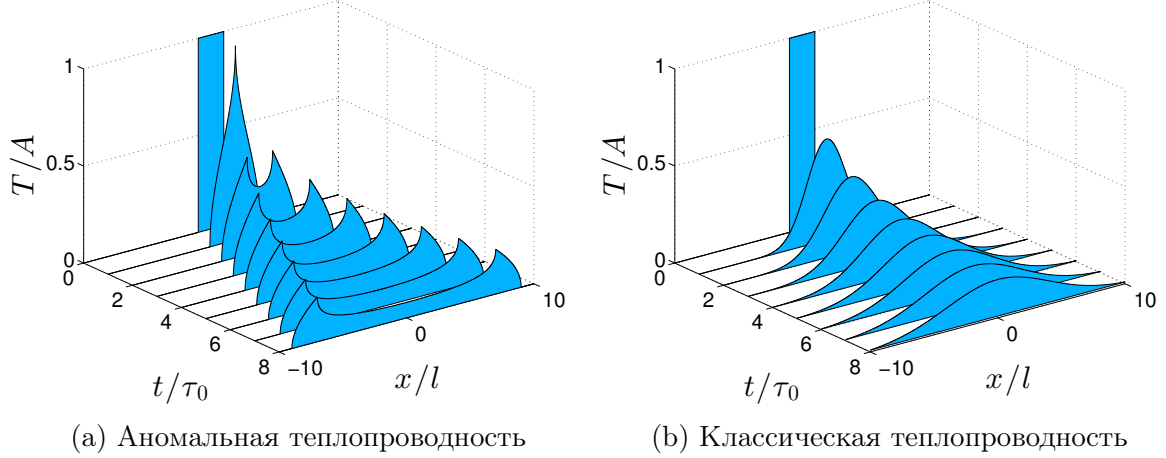


Рис. 1.1: Временная эволюция решений для прямоугольного теплового возмущения.

где  $\operatorname{erf}(x)$  — функция ошибок Гаусса. Тогда решение задачи (1.5), (1.8), (1.14):

$$T(x, t) = \frac{1}{2} \operatorname{erf} \left( \frac{x+l}{\sqrt{4\beta t}} \right) - \frac{1}{2} \operatorname{erf} \left( \frac{x-l}{\sqrt{4\beta t}} \right). \quad (1.16)$$

Временная эволюция решений для уравнения аномальной теплопроводности (1.4) и классического уравнения теплопроводности (1.14) показана на Рис. 1.1. Сравним эти решения. У решения классического уравнения наблюдается максимум в точке  $x = 0$ , который затухает экспоненциально. В случае аномальной теплопроводности решение затухает быстрее вблизи нуля  $x = 0$ , формируя два максимума, которые распространяются в положительном и отрицательном направлениях и имеют координаты  $x = -l + ct$  и  $x = l - ct$ .

## 1.2.2 Затухание

Рассмотрим затухание решения (1.13) в точке  $x = 0$  при больших временах. Представим решение в виде:

$$T(t, 0) = \frac{A}{\pi} \left[ \pi - 2 \arccos \left( \frac{l}{ct} \right) \right] = 2\varepsilon + O(\varepsilon^3), \quad (1.17)$$

где  $\varepsilon = \frac{l}{ct}$  малый параметр.

Теперь рассмотрим затухание максимумов с координатами  $x = l - ct$  и  $x = -l + ct$ . Из формулы (1.13) следует:

$$T(t, -l + ct) = T(t, l - ct) = \frac{A}{\pi} \left[ \pi - \arccos \left( \frac{2l}{ct} - 1 \right) \right] = 2\sqrt{\varepsilon} + O(\varepsilon^{\frac{3}{2}}), \quad (1.18)$$

Обобщая вышесказанное, получаем:

$$T(t, 0) \stackrel{t \rightarrow \infty}{\sim} 2\varepsilon \sim \frac{1}{t}, \quad T(t, -l + ct) = T(t, l - ct) \stackrel{t \rightarrow \infty}{\sim} 2\sqrt{\varepsilon} \sim \frac{1}{\sqrt{t}}. \quad (1.19)$$

Таким образом решение затухает быстрее в области начального возмущения (пропорционально  $1/t$ ) чем вблизи волнового фронта (пропорционально  $1/\sqrt{t}$ ). Таким образом максимумы остаются ярко выраженными при больших временах.

### 1.2.3 Огибающая кривая

Решение (1.13) имеет два максимума. Они распространяются в положительном и отрицательном направлениях со скоростью  $c$ . Так как решение симметрично, будем рассматривать только максимум с координатами  $x = ct - l$ . Найдем кривую, которую описывает точка максимума, по мере того, как волна движется в положительном направлении. Подставляя  $t = \frac{x+l}{c}$  в формулу (1.18), получаем выражение для огибающей кривой:

$$T_{\text{env}}(x) = \frac{A}{\pi} \left[ \pi - \arccos \left( \frac{2l}{x+l} - 1 \right) \right]. \quad (1.20)$$

для любых  $x$  имеем:  $T(x) \leq T_{\text{env}}(|x|)$ . Огибающая кривая показана на Рис.1.2. Вы-

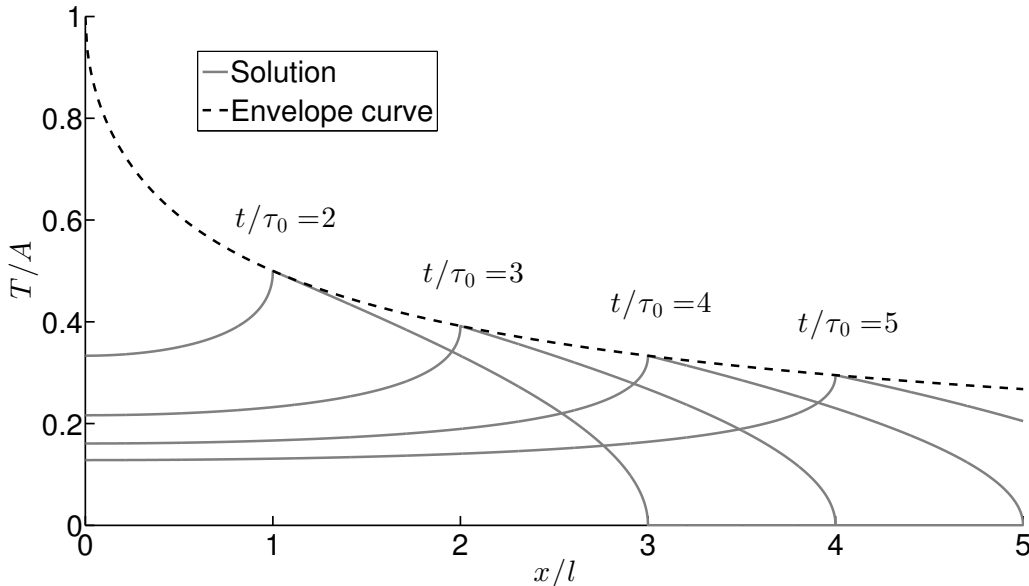


Рис. 1.2: Огибающая кривая для максимумов решения.

ражение убывает как  $1/\sqrt{x}$ , что согласуется с тем, что решение вблизи волнового фронта затухает со временем как  $1/\sqrt{t}$  (волновой фронт движется с постоянной скоростью).

### 1.2.4 Асимптотическое поведение вблизи волнового фронта

Рассмотрим решение (1.13) вблизи волнового фронта при больших временах  $t$ . Положим  $\xi = \frac{-x+ct}{l}$ . Для  $x \in [-l + ct; l + ct]$  имеем:

$$T(\xi, t) = \frac{A}{\pi} \arccos \left[ 1 - \frac{l}{ct}(\xi + 1) \right] \stackrel{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{A}{\pi} \sqrt{\frac{2l}{ct}} \sqrt{\xi + 1}, \quad (1.21)$$

где  $\frac{\xi + 1}{ct}$  — малый параметр, используемый для разложения. Для  $x \in [l - ct; -l + ct]$  имеем:

$$T(\xi, t) = \frac{A}{\pi} \left( -\arccos \left[ 1 - \frac{l}{ct}(\xi - 1) \right] + \arccos \left[ 1 - \frac{l}{ct}(\xi + 1) \right] \right) \stackrel{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{A}{\pi} \sqrt{\frac{2l}{ct}} \left( \sqrt{\xi + 1} - \sqrt{\xi - 1} \right). \quad (1.22)$$

Отметим, что функции (1.21) и (1.22) имеют вид:

$$T = \frac{A}{\pi} \sqrt{\frac{2l}{ct}} F(\xi). \quad (1.23)$$

График решения (1.13), выражения (1.21) и (1.22) соответствующие безразмерному временному параметру  $t/\tau_0 = 100$  показан на Рис. 1.3. Выражение (1.23) показывает, что решение сжимается вертикально со временем, но в остальном сохраняет свою форму. Асимптотические решения (1.21) и (1.22) достигают максимального значения температуры  $T$  в точке  $\xi = 1$ , при этом  $F(\xi) = \sqrt{2}$ . Заметим, что решение в этой точке остается непрерывным, но имеет излом (производная по координате терпит разрыв).

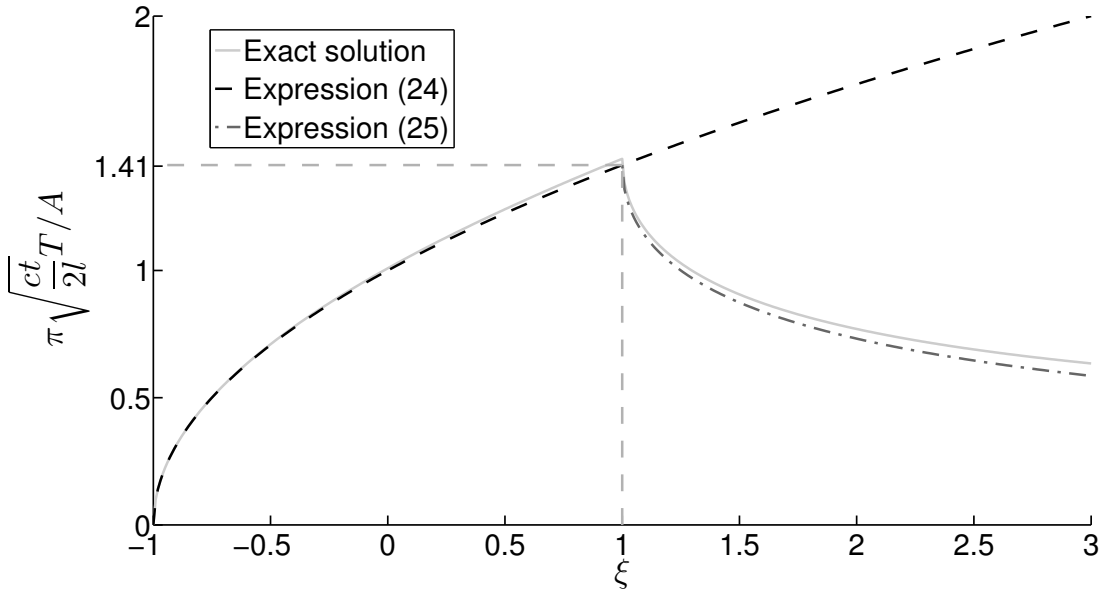


Рис. 1.3: Точное и приближенное решения вблизи волнового фронта (для прямоугольного теплового возмущения).

### 1.3 Треугольное начальное возмущение

Для получения решения в случае треугольного начального возмущения рассмотрим вспомогательную задачу о линейно-нагретом полупространстве:

$$T_0(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ Bx, & x \geq 0, \end{cases} \quad (1.24)$$

где  $B = A/l$  константа пропорциональности. Используется метод, описанный в [17]. Т.к. распространения возмущения происходит со скоростью  $c$ , рассмотрим  $x$  на промежутках:

$$\begin{aligned} x \in [-\infty; -ct] : x - c\tau < 0, f = 0; \\ x \in [-ct; ct] : x - c\tau <> 0, f = \begin{cases} 0, & \tau < \frac{x}{c}; \\ Bx, & \tau > \frac{x}{c}; \end{cases} \\ x \in [ct; \infty] : x - c\tau > 0, f = Bx. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Таким образом:

$$\begin{aligned} x \in [-\infty; -ct] : T(t, x) = 0; \\ x \in [-ct; ct] : T(t, x) = \frac{B}{\pi} \int_{-t}^{\frac{x}{c}} \frac{x - c\tau}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau = Bx \left( \frac{1}{\pi} \arcsin x + \frac{1}{2} \right) + \frac{B}{\pi} \sqrt{t^2 c^2 - x^2}; \\ x \in [ct; \infty] : T(t, x) = Bx. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Таким образом получаем решение для  $|x| < ct$ ,

$$T(t, x) = \xi(t, x) = \begin{cases} 0, & x < -ct; \\ Bx \left( \frac{1}{\pi} \arcsin x + \frac{1}{2} \right) + \frac{A}{\pi} \sqrt{t^2 c^2 - x^2}, & x < |ct|; \\ Bx, & x > ct, \end{cases} \quad (1.27)$$

для  $|x| > ct$  распределение температуры остается неизменным.

Теперь рассмотрим задачу о треугольном начальном тепловом возмущении:

$$T_0(x) = \begin{cases} 0, & x < -l, \\ (x + l)B, & -l \leq x < 0, \\ (-x + l)B, & 0 \leq x < l, \\ 0, & x \geq l. \end{cases} \quad (1.28)$$

Очевидно, решение для начальных условий (1.28) представляет собой линейную комбинацию:

$$T(t, x) = T_L(t, x - l) + T_L(t, x + l) - 2T_L(t, x), \quad (1.29)$$

где  $T_L$  - решение для линейно-нагретого полупространства. Решение симметрично,  $T(x, t) = T(-x, t)$ . Решение:

$$t \leq \tau_0/2 : T(t, x) = \begin{cases} 0, & x < -l - ct; \\ f(x + l), & -l - ct < x < -l + ct; \\ A(x + l), & -l + ct < x < -ct; \\ f(x + l) - 2f(x), & -ct < x < ct; \\ A(-x + l), & ct < x < l - ct; \\ A(-x + l) + f(x + l), & l - ct < x < l + ct; \\ 0, & x > l + ct, \end{cases} \quad (1.30)$$

$$\tau_0/2 \leq t \leq \tau_0 : \quad T(t, x) = \begin{cases} 0, & x < -l - ct; \\ f(x+l), & -l - ct < x < -ct; \\ f(x+l) - 2f(x), & -ct < x < -l + ct; \\ A(x+l) - 2f(x), & -l + ct < x < l - ct; \\ A(x+l) + f(x-l) - 2f(x), & l - ct < x < ct; \\ A(-x+l) + f(x-l), & ct < x < l + ct; \\ 0, & x > l + ct, \end{cases} \quad (1.31)$$

$$t \geq \tau_0 : \quad T(t, x) = \begin{cases} 0, & x < -l - ct; \\ f(x+l), & -l - ct < x < -ct; \\ f(x+l) - 2f(x), & -ct < x < l - ct; \\ f(x+l) + f(x-l) - 2f(x), & l - ct < x < -l + ct; \\ A(x+l) + f(x-l) - 2f(x), & -l + ct < x < ct; \\ A(-x+l) + f(x-l), & ct < x < l + ct; \\ 0, & x > l + ct. \end{cases} \quad (1.32)$$

График решения для треугольного начального возмущения показан на Рис. 1.4.

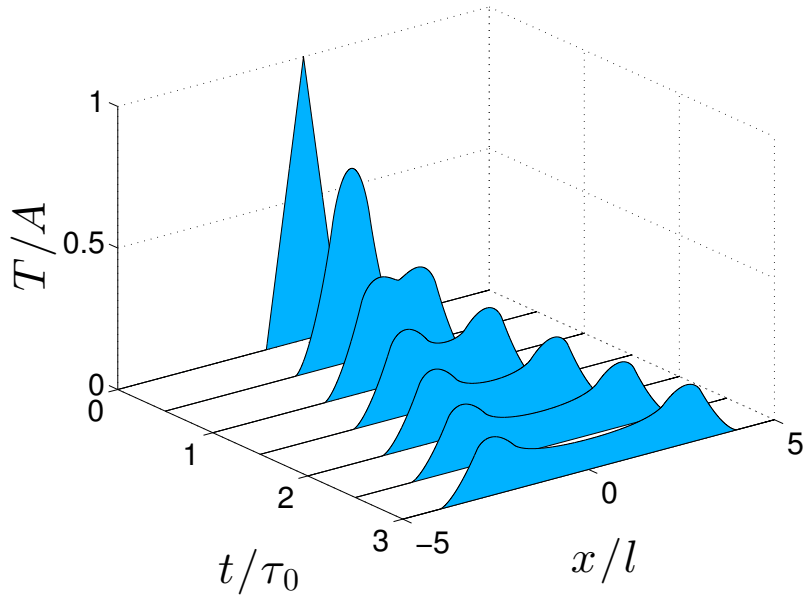


Рис. 1.4: Эволюция решения для треугольного теплового возмущения.

В отличие от прямоугольного теплового возмущения, для треугольного возмущения решение всюду гладкое: и в начале волнового фронта, и в точке максимума.

## 1.4 Пилообразное возмущение

Рассмотрим начальное возмущение, заданное в виде пилообразного импульса:

$$T_0(x) = \begin{cases} 0, & x \leq -l, \\ x + l, & -l \leq x < 0, \\ 0, & 0 \leq x. \end{cases} \quad (1.33)$$

Начальное возмущение (1.33) может быть записано как линейная комбинация линейно нагретого полупространства и функции Хевисайда. Тогда решение для пилообразного возмущения может быть получено как линейная комбинация решений для функции Хевисайда  $T_S(x, t)$  и линейно-нагретого полупространства  $T_L(x, t)$ :

$$T(t, x) = T_L(x + l, t) + T_L(x, t) + T_S(x, t), \quad (1.34)$$

оно имеет следующий кусочно-заданный вид:

$$t \leq \tau_0 : \quad T(x, t) = \begin{cases} 0, & x \leq -l - ct, \\ f(x + l), & -l - ct \leq x \leq -l + ct, \\ Bx, & -l + ct \leq x \leq -ct, \\ Bx - f(x) - \frac{A}{\pi} \arccos\left(\frac{x}{ct}\right), & -ct \leq x \leq ct, \\ 0, & x > ct, \end{cases} \quad (1.35)$$

$$t \geq \tau_0 : \quad T(x, t) = \begin{cases} 0, & x \leq -ct - l, \\ f(x + l), & -ct - l \leq x \leq -ct, \\ f(x + l) - f(x) - \frac{A}{\pi} \arccos\left(\frac{x}{ct}\right), & -ct \leq x \leq ct - l, \\ Bx - f(x) - \frac{A}{\pi} \arccos\left(\frac{x}{ct}\right), & ct - l \leq x \leq ct, \\ 0, & ct \leq x. \end{cases} \quad (1.36)$$

График решения представлен на Рис. 1.5. Тепловая волна, распространяющаяся в отрицательном направлении, имеет гладкое начало и излом с бесконечной производной в точке максимума. Напротив, тепловая волна, распространяющаяся в положительном направлении, имеет вертикальную касательную в начале и гладкое поведение в точке максимума.

## 1.5 Затухание произвольного локализованного импульса

Рассмотрим произвольный ограниченный симметричный импульс следующего вида:

$$T_0 = \begin{cases} 0, & x < -a; \\ \Phi(x), & -a < x < a; \\ 0, & x > a. \end{cases} \quad (1.37)$$

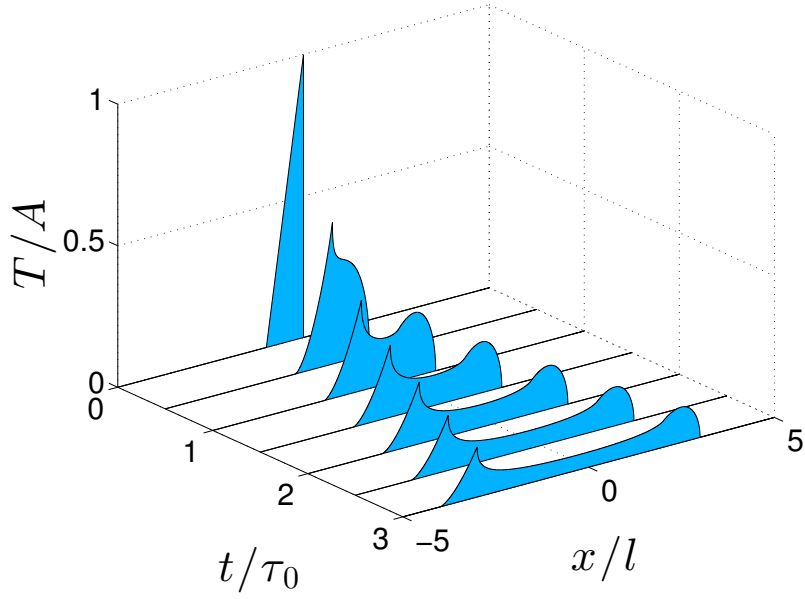


Рис. 1.5: Эволюция решения для пилообразного теплового возмущения.

Рассматриваются большие значения  $t$ .  $\Phi(x)$  — ограничена, четная.

Рассмотрим  $x \ll ct$ . Тогда  $T_0(x - c\tau) \sim T_0(-c\tau)$ ,  $a \ll ct$ . Тогда уравнение (1.6) запишется в следующем виде:

$$T(t, x) = \frac{1}{\pi} \int_{-t}^t \frac{T_0(x - c\tau)}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau \sim \frac{1}{\pi} \int_{-t}^t \frac{T_0(-c\tau)}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau. \quad (1.38)$$

### Затухание вблизи нуля

При  $t \gg 1$  и  $\tau \ll 1$ :

$$\frac{1}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} \sim \frac{1}{t} \quad (1.39)$$

Тогда уравнение (1.38) запишется:

$$\frac{1}{\pi} \int_{-t}^t \frac{T_0(-c\tau)}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau \sim \frac{1}{\pi t} \int_{-\frac{a}{c}}^{\frac{a}{c}} T_0(-c\tau) d\tau, \quad (1.40)$$

$$\int_0^t T_0(-c\tau) d\tau = \int_0^{\frac{a}{c}} T_0(-c\tau) d\tau + \int_{\frac{a}{c}}^t T_0(-c\tau) d\tau = \int_0^{\frac{a}{c}} T_0(-c\tau) d\tau \quad (1.41)$$

Таким образом  $\int_0^t T_0(-c\tau) d\tau$  не зависит от  $t$ . Тогда:  $\int_0^t T_0(-c\tau) d\tau = C_1$ . Можно говорить о том, что на больших временах функция температуры затухает вблизи нуля как  $\frac{1}{t}$ :

$$T(t, x) \stackrel{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{t} \quad (1.42)$$

## Затухание вблизи фронта волны

Рассмотрим  $x \sim ct$ . Представим  $x$  в виде  $x = c\xi$ .

$$\begin{aligned}
 T(t, x) &= \frac{1}{\pi} \int_{-t}^t \frac{T_0(x - c\tau)}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau = \frac{1}{\pi} \int_{-t}^t \frac{T_0(c(\xi - \tau))}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau = \\
 &= \frac{1}{\pi} \int_{-t}^{\xi - \frac{a}{c}} \frac{T_0(c(\xi - \tau))}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau + \frac{1}{\pi} \int_{\xi - \frac{a}{c}}^{\xi + \frac{a}{c}} \frac{T_0(c(\xi - \tau))}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau + \frac{1}{\pi} \int_{\xi + \frac{a}{c}}^t \frac{T_0(c(\xi - \tau))}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau = \\
 &= \frac{1}{\pi} \int_{\xi - \frac{a}{c}}^{\xi + \frac{a}{c}} \frac{T_0(c(\xi - \tau))}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau.
 \end{aligned} \tag{1.43}$$

Т.к.  $x \sim ct$ , то  $\xi \sim t$ . При интегрировании  $\tau$  изменяется от  $\xi - \frac{a}{c} \sim t - \frac{a}{c}$  до  $\xi + \frac{a}{c} \sim t + \frac{a}{c}$ . Можно разложить подинтегральную функцию  $\frac{1}{\sqrt{t^2 - \tau^2}}$  по  $\tau$  в окрестности точки  $t$ .

$$\frac{1}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} = \frac{1}{\sqrt{2t}\sqrt{t - \tau}} + O\left(\left(\frac{1}{t - \tau}\right)^{\frac{3}{2}}\right). \tag{1.44}$$

Уравнение (1.43) записывается в виде:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{t}} \int_{\xi - \frac{a}{c}}^{\xi + \frac{a}{c}} \frac{T_0(c(\xi - \tau))}{\sqrt{t - \tau}} d\tau. \tag{1.45}$$

Проведем замену переменной в интеграле:  $\zeta = \xi - \tau$ .

$$T(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{t}} \int_{-\frac{a}{c}}^{\frac{a}{c}} \frac{T_0(c\zeta)}{\sqrt{t - \xi + \zeta}} d\zeta \xrightarrow{\xi \sim t} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{t}} \int_{-\frac{a}{c}}^{\frac{a}{c}} \frac{T_0(c\zeta)}{\sqrt{\zeta}} d\zeta. \tag{1.46}$$

Можно говорить о том, что на больших временах вблизи фронта волны функция температуры затухает как  $\frac{1}{\sqrt{t}}$ :

$$T(t, x) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\sqrt{t}} \tag{1.47}$$

## Асимптотическое представление решения при больших временах на всем интервале $x$

Рассмотрим решение (1.6) на масштабах  $x \sim ct$  и больших значениях  $t$ . Т.к. функция  $T_0(x) = 0$  на интервалах  $x \in [-\infty; -a]$  и  $x \in [a; \infty]$ , заменой  $\xi = x - c\tau$  получается:

$$T(t, x) = \frac{A}{\pi} \int_{-t}^t \frac{T_0(x - c\tau)}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau = \frac{A}{\pi} \int_{-a}^a \frac{T_0(\xi)}{\sqrt{c^2 t^2 - (\xi + x)^2}} d\xi. \tag{1.48}$$



Формула 1.48 при  $t \rightarrow \infty$  приобретает вид

$$T(t, x) = \frac{A}{\pi} \frac{1}{\sqrt{c^2 t^2 - x^2}} \int_{-a}^a T_0(\xi) d\xi. \quad (1.49)$$

Подобный вид имеет решение уравнения (1.6) для начального условия в виде  $\delta(x)$ .

## 1.6 Обсуждения

В работе рассмотрен процесс распространения тепла в одномерном гармоническом кристалле. Исследована эволюция локализованных тепловых возмущений. Построены решения для уравнения, описывающего аномальное распространение тепла (1.4), выведенного в работе [17]. Получены точные аналитические решения для прямоугольного, треугольного и пилообразного начального возмущения. Показано, что в отличие от классического уравнения теплопроводности, решения уравнения (1.4) имеют четко выраженный волновой фронт. Для прямоугольного теплового возмущения показано, что затухание решения вблизи волнового фронта пропорционально  $1/\sqrt{t}$ , а вблизи нуля пропорционально  $1/t$ . Таким образом решение затухает медленнее вблизи волнового фронта, в результате чего наблюдаются четко выраженные максимумы. Решение вблизи волнового фронта описывается функцией, обратно пропорциональной корню из времени, и имеет вид:  $T = \frac{A}{\pi} \sqrt{\frac{2l}{ct}} F(\xi)$ .

Решение для треугольного начального возмущения имеет гладкое начало и гладкое поведение в точке максимума.

В случае пилообразного начального возмущения реализуется несимметричное решение: левый волновой фронт имеет гладкое начало и бесконечную производную в точке максимума; правый имеет бесконечную производную в начале, гладкое поведение и горизонтальную касательную в точке максимума. Полученные решения демонстрируют волновую природу и степенное затухание. Это отличает полученные решения от решений классического уравнения теплопроводности (3) (диффузионный характер, экспоненциальное затухание) и гиперболического уравнения теплопроводности (4) (волновой характер, экспоненциальное затухание). Свойства полученных решений могут быть использованы для анализа экспериментальных данных и выбора подходящей модели описания процесса. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда [грант 14-11-00599].

## Глава 2

# Распространение тепла в одномерном кристалле: дискретный и континуальный подход.

### 2.1 Решение дискретной задачи

В Главе 1 рассматриваются решения для континуального уравнения (1.4), описывающего аномальное распространение тепла в одномерном кристалле. Оно было получено на основании уравнения динамики гармонической цепочки (4.1). Данное уравнение описывает процесс на континуальном уровне, то есть когда индивидуальными механическими движениями частиц можно пренебречь, на масштабах расстояния, много больших, чем межатомное расстояние между частицами. В работе [24] рассматривается похожая задача, однако получены решения для значений энергий для каждой индивидуальной частицы. Известно, что в одномерном кристалле механические возмущения распространяются с бесконечной скоростью. Уравнение (1.4) описывает распространение тепла с конечной скоростью. Сравнивая эти два подхода в процессах распространения тепла можно увидеть краевые эффекты, связанные с этим. Также можно увидеть эффект от континуализации, рассмотреть аналогичные процессы на разных масштабах. В работе [24] рассматривается гармонический кристалл, рассматриваются уравнения движения (4.1). Вводится следующая величина:

$$\xi_n = m^{1/2} \dot{u}_n \quad (2.1)$$

половина квадрата этой величины представляет собой кинетическую энергию частицы. Далее рассматривается осреднение энергий по реализациям:

$$\varepsilon_n = \frac{1}{2} \langle \xi_n^2 \rangle, \quad (2.2)$$

где  $\varepsilon_n$  — средняя энергия частицы с индексом  $n$ . Для начальных условий:

$$\varepsilon_n^0 = \frac{1}{2} \langle \xi_n^{02} \rangle, \quad (2.3)$$

было найдено решение для энергий в момент времени  $t$

$$\varepsilon_n(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \varepsilon_k^0 J_{n-k}^2(\omega_0 t), \quad (2.4)$$

где  $J_n$  — функция Бесселя первого рода.

Уравнение (3.52) определяет значение энергии для каждой частицы с индексом  $n$  в момент времени  $t$  в отличие от континуального уравнения (1.4), которое описывает распространение температуры (в дальнейшем будет показано, что это уравнение описывает и распространение энергии, т.к. энергия в подобном процессе пропорциональна температуре) для непрерывной координаты  $x$ .

## 2.2 Задача о точечном тепловом воздействии

Рассмотрим точечное тепловое воздействие на гармонический кристалл. Для континуального уравнения описывающего эволюцию теплового возмущения (1.4) начальные условия записываются в виде:

$$T_0(x) = A\delta(x), \quad (2.5)$$

где  $\delta(x)$  — дельта-функция Дирака. Для уравнения (3.52) начальные условия записываются в виде:

$$\varepsilon_n^0 = \varepsilon^0 \delta_{k0}, \quad (2.6)$$

где  $\delta_{kn}$  — символ Кронекера. Далее для сравнения будем рассматривать полные энергии частиц.

**Континуальное уравнение** Решение уравнения (1.4) для данных начальных условий имеет вид:

$$T(x, t) = \frac{A}{\pi} \frac{1}{\sqrt{c^2 t^2 - x^2}}. \quad (2.7)$$

Тепловые движения в гармоническом кристалле представляют собой хаотические колебания атомов вблизи их положений равновесия. При этом внутренняя энергия представляет собой механическую энергию указанных колебаний, которая может быть разделена на кинетическую и потенциальную. Справедливы соотношения

$$\varepsilon = E_k + E_p, \quad E_k = E_p = \frac{d}{2} k_B T, \quad d = 1 \Rightarrow \varepsilon = k_B T. \quad (2.8)$$

Далее будем сравнивать значения энергии для двух уравнений.

**Дискретное решение** В работе [24] получено решение для дискретной задачи. Оно получается подстановкой начальных условий (3.55) в общее решение (3.52):

$$\varepsilon_n = \varepsilon^0 J_n^2(t). \quad (2.9)$$

**Сравнение** Построим графики решений (3.57) и (3.55). Т.к. решение симметрично будем рассматривать положительные  $x$ .

Видно, что решение (3.57) не сходится с континуальным решением, даже при больших временах, когда расстояние, пройденное тепловой волной сильно превосходит межатомное расстояние. Дискретное решение имеет высокочастотные колебания,

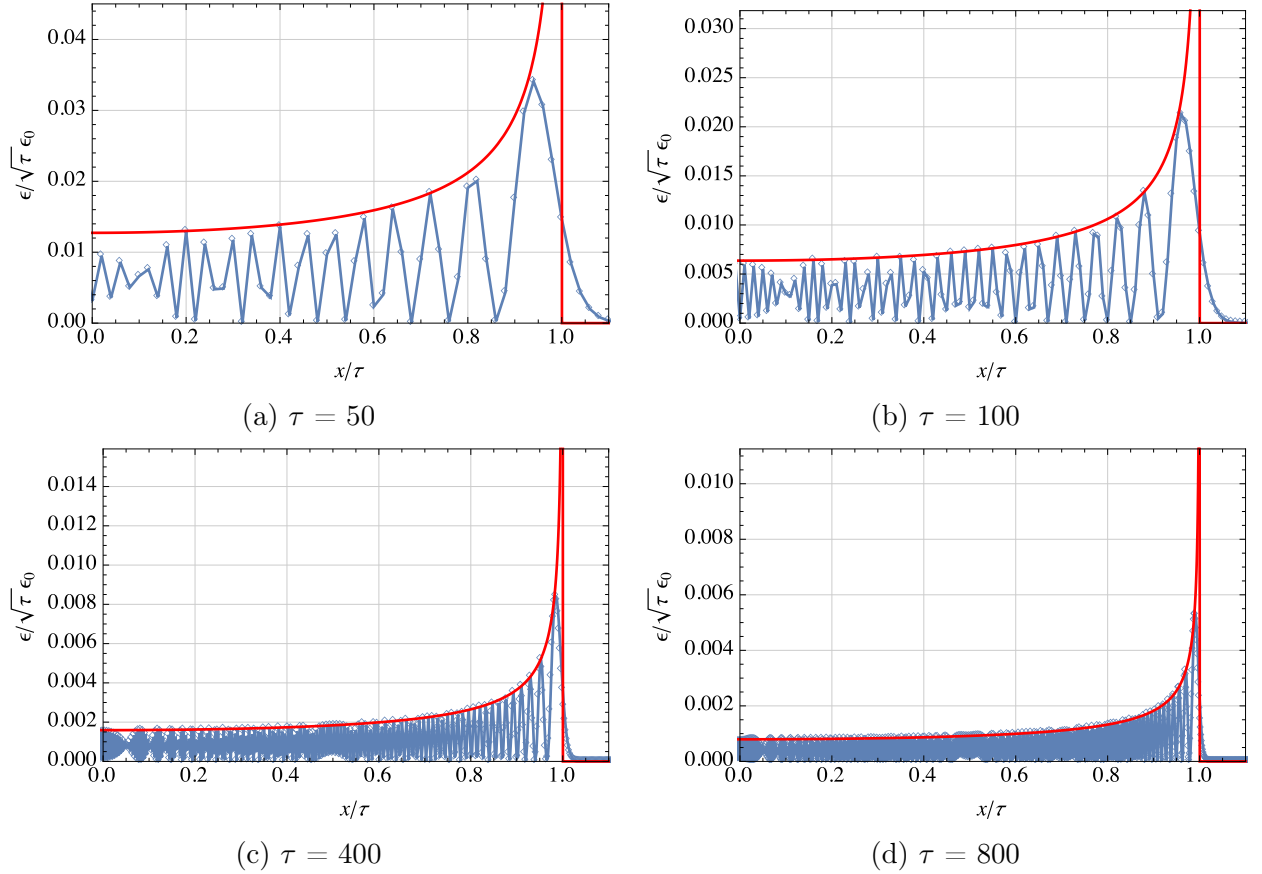


Рис. 2.1: Сравнение решения дискретной и континуальной задачи для различных значений безразмерного времени  $\tau$ .

а континуальная кривая является огибающей для дискретной кривой. Это происходит из-за того, что вообще говоря рассматриваемые задачи не являются аналогичными. Возмущение, которое на континуальном масштабе описывается дельта-функцией Дирака, на дискретном представляет возмущение центрального участка цепочки конечной ширины. Эта задача будет рассмотрена ниже.

## 2.3 Задача о тепловой ступеньке

Исследуется контакт горячего и холодного полупространств:  $T_0(x) = A$  при  $x \leq 0$ , иначе  $T_0(x) = 0$ , где  $A > 0$  — некоторая положительная константа, имеющая размерность температуры.

**Континуальное уравнение** В Главе 1 приводится решение(1.11) для данных начальных условий. Оно представляет собой непрерывную функцию координат. Возмущение распространяется с конечной скоростью  $c$ . В точке волнового фронта  $x = ct$  решение имеет вертикальную касательную. Далее будет показано, что в случае рассмотрения дискретной задачи в этой области наблюдается существенное отличие. На масштабах, сопоставимых с равновесным межатомным расстоянием имеет место краевой эффект, решение отличается от континуального.

**Дискретное уравнение** В работе [24] рассматривается аналогичная задача. Начальные условия записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} \varepsilon_k^0 &= A, & k > 0 \\ \varepsilon_k^0 &= 0, & k < 0. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Подставляя начальные условия (3.59) в общее решение (3.52) в работе [24] было получено решение для положительных  $n$ :

$$\varepsilon_n = A \sum_{k=-n}^{n-1} J_k^2. \quad (2.11)$$

**Сравнение** Рассмотрим графики решений (3.58) и (3.59). Т.к. решение симметрично будем рассматривать положительные  $x$ .

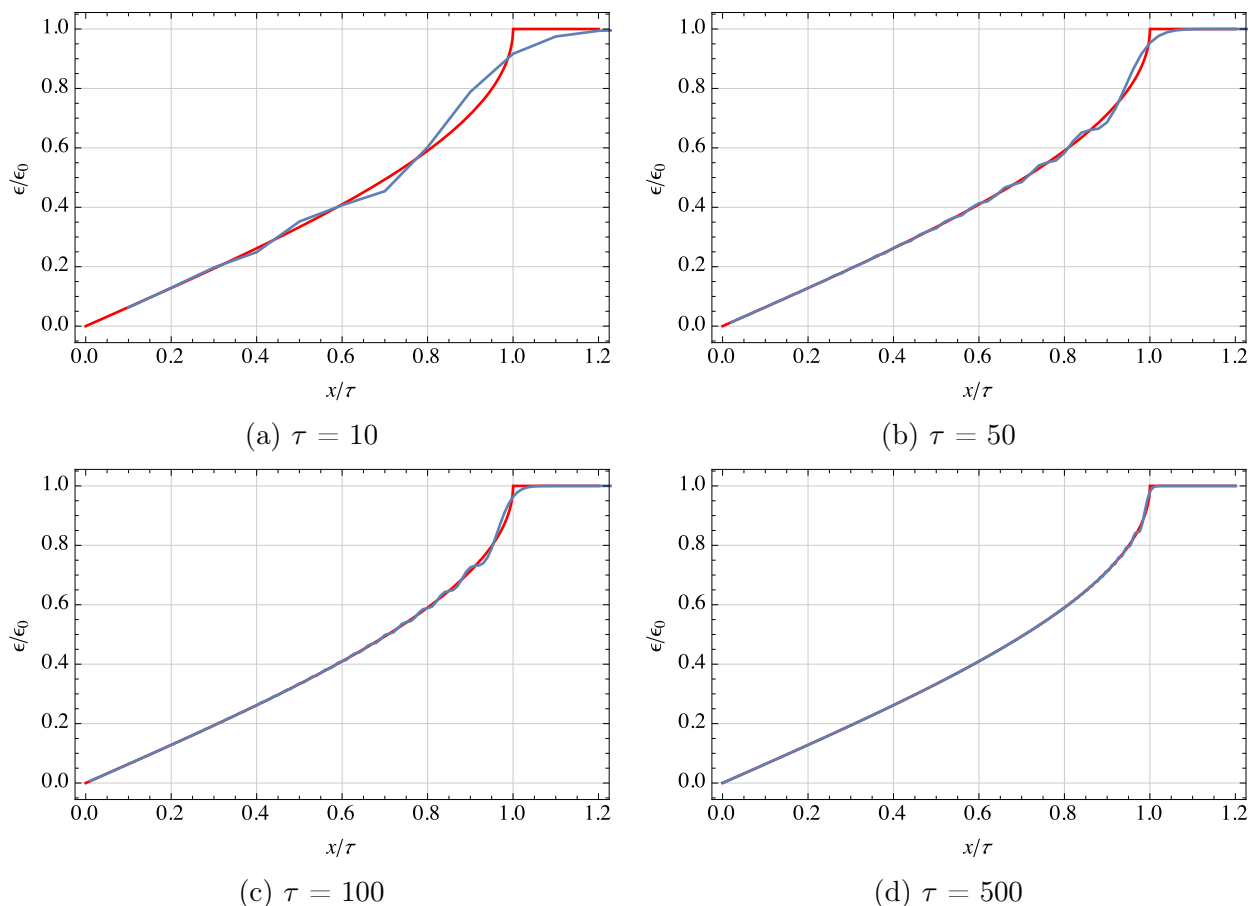


Рис. 2.2: Сравнение решения дискретной и континуальной задачи для различных значений безразмерного времени  $\tau$ .

Видно, что по мере того, как тепловая волна продвигается в положительном направлении, континуальное решение пересекает большее количество дискретных точек, вследствие этого дискретное решение достигает лучшего совпадения с континуальным.

Рассмотрим подробнее решения вблизи волнового фронта. На Рис. 2.3 показано сравнение решений (3.58) и (3.59).

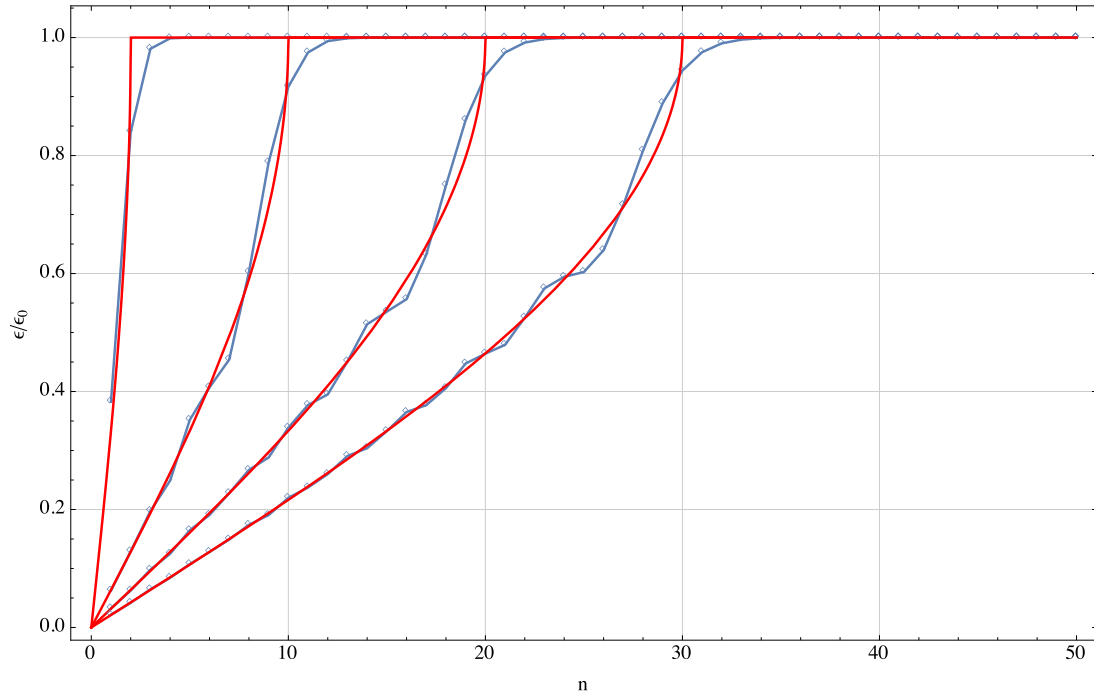


Рис. 2.3

Континуальное уравнение (1.4) описывает распространение тепловых возмущений с конечной скоростью. Видно, что дискретное решение имеет шлейф постоянной ширины, не совпадающий с континуальным решением. Это связано с тем, что для одномерного гармонического кристалла, вообще говоря, механические сигналы распространяются с бесконечной скоростью. Однако при рассмотрении системы на континуальном уровне, этим можно пренебречь.

## 2.4 Прямоугольное возмущение

Рассмотрим прямоугольное начальное возмущение.

**Континуальное уравнение** В случае континуального уравнения начальные условия записываются в виде:

$$T_0(x) = \begin{cases} 0, & x < -l, \\ A, & -l < x < l, \\ 0, & x > l. \end{cases} \quad (2.12)$$

Решение уравнения (3.52) было получено в Главе 1: уравнения (1.12) и (1.13). Будем использовать это решение для построения графиков и сравнения с решением из работы [24].

**Дискретное уравнение** Следуя работе [24] начальные условия для дискретного решения (3.60) записываются следующим образом:

$$\begin{aligned}\varepsilon_k^0 &= A, & -w < k < w \\ \varepsilon_k^0 &= 0, & k < -w, k > w,\end{aligned}\tag{2.13}$$

где  $w$  - ширина импульса. Решение для начальных условий (3.61) получается как суперпозиция решений для ступеньки (3.60):

$$\varepsilon_n = A \left( \sum_{k=-n+w}^{n+w-1} J_k^2 - \sum_{k=-n-w}^{n-w-1} J_k^2 \right).\tag{2.14}$$

**Сравнение** Может быть показано, что решение (1.13) на масштабах пропорциональных пробегу волны при больших временах сходится к решению для Дельта функции. Построим графики решений (3.55) и (2.14).

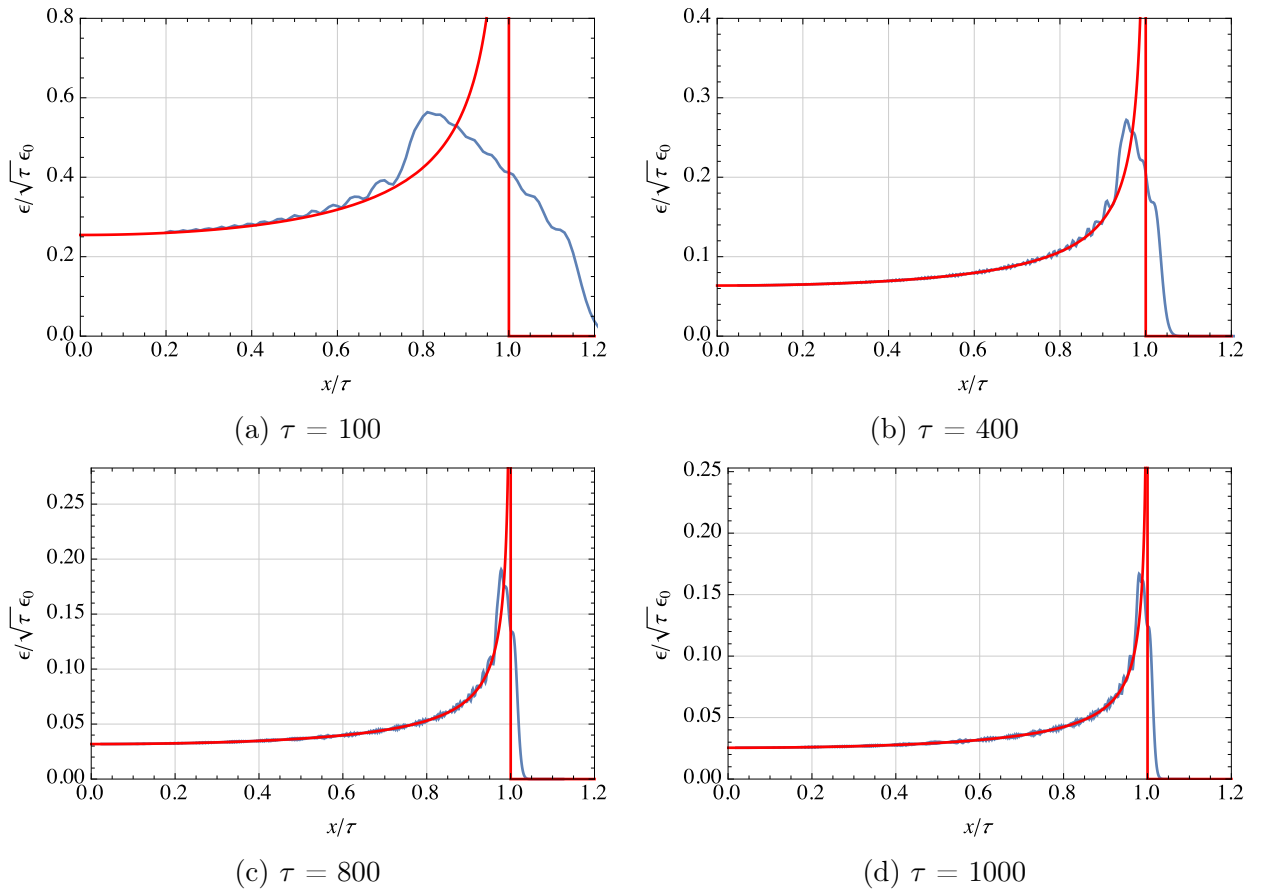


Рис. 2.4: Сравнение решения дискретной и непрерывной задачи для различных значений безразмерного времени  $\tau$ .

Видно, что при больших временах дискретное решение стремится к непрерывной кривой. Это обусловлено тем, что на масштабах длины пробега тепловой волны при больших временах, ширина начального возмущения для дискретной задачи стремится к нулю. При этом начальное возмущение в виде Дельта функции — бесконечно, поэтому непрерывная кривая стремится к бесконечности в начале волнового фронта. Начальное прямоугольное возмущение — конечно, поэтому дискретное решение также конечно и не имеет особенности.

В работе [25] было показано, что для прямоугольного начального возмущения (2.12) волновой фронт решения имеет постоянную ширину. Сравним решение дискретной и континуальной задачи вблизи волнового фронта. Так как ширина волнового фронта не изменяется, континуальное решение пересекает постоянное количество дискретных точек. Поэтому со временем характер дискретной не изменяется. Чем больше ширина начального импульса, тем лучше дискретное решение совпадает с континуальным.

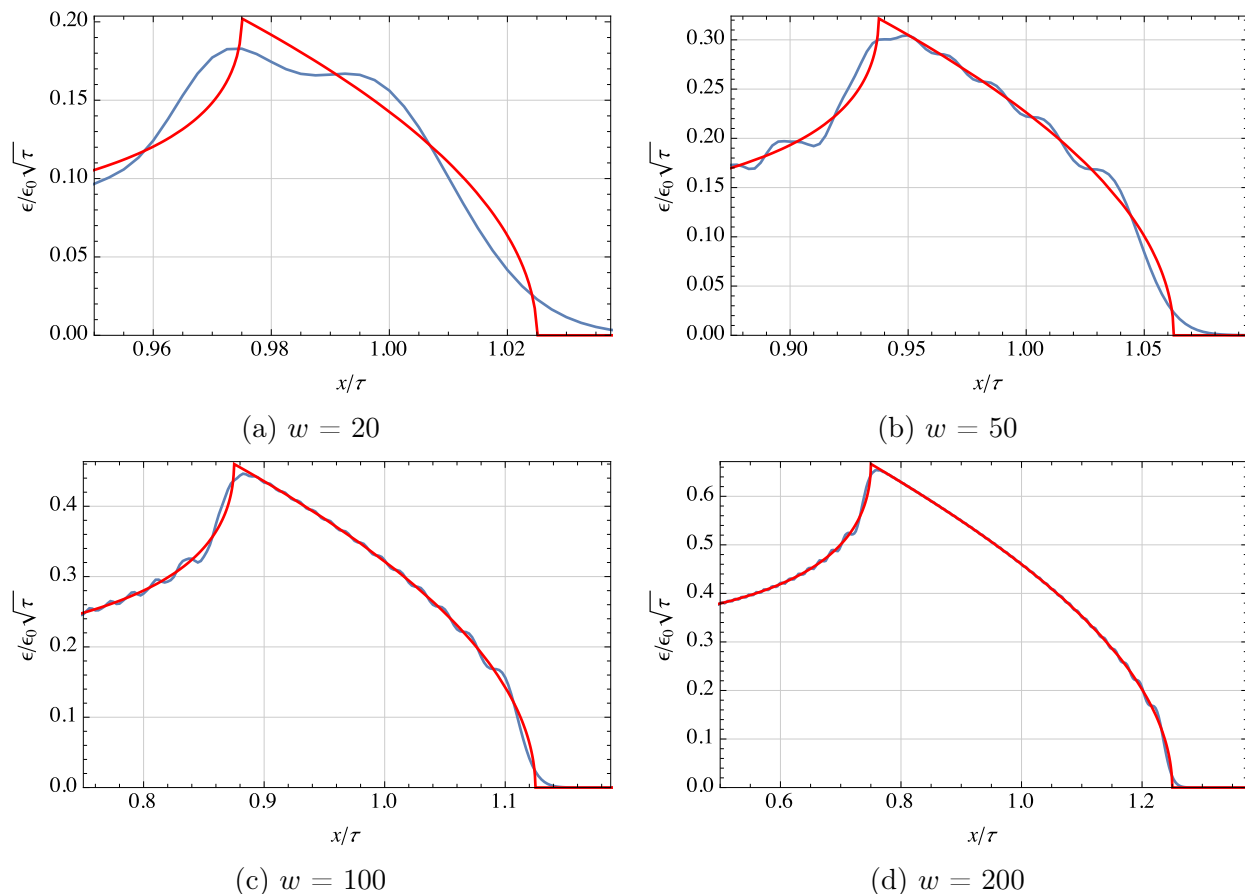


Рис. 2.5: Сравнение решения дискретной и континуальной задачи для различной ширины начального импульса  $w$ .



## Глава 3

# Производство энтропии при одномерном распространении тепла

### 3.1 Простейшая термодинамика одномерной среды

Закон Фурье (3.1) соответствует интуитивному представлению о том, что тепло должно течь от горячего к холодному — тепловой поток направлен в сторону убывания температуры. Уравнения (4) и (1.4) допускают и обратную ситуацию — когда тепло течет от холодного к горячему. Причина этого кроется в том, что эти уравнения инерционны (за счет слагаемого  $\dot{T}$ ), а в инерционных процессах направление реакции среды не обязательно совпадает с направлением внешнего воздействия. Однако, при этом возникает серьезный вопрос — не противоречит ли такое поведение системы второму закону термодинамики? Поиску ответа на этот вопрос посвящена данная работа.

#### 3.1.1 Уравнения баланса энергии

Рассмотрим простейшую теорию для одномерной сплошной среды. Ограничимся процессом распространения тепла, пренебрегая механическими движениями. В этом случае уравнение баланса энергии некоторого объема одномерной среды можно записать в виде

$$\dot{\mathcal{U}} = \mathcal{Q}, \quad (3.1)$$

где  $\mathcal{U}$  — внутренняя энергия рассматриваемого объема,  $\mathcal{Q}$  — подвод тепла через границы объема, точкой обозначена производная по времени. Данные величины можно представить в виде

$$\mathcal{U} = \int_V \rho U dV, \quad \mathcal{Q} = - \int_{\Gamma} \nu h d\Gamma + \int_V \rho r dV, \quad (3.2)$$

где  $\rho$  — плотность (число частиц в единице объема),  $U$  — удельная (приходящаяся на частицу) внутренняя энергия,  $h$  — поток тепла через границу,  $r$  — подвод тепла в объем материала,  $V$  — одномерный объем (длина) участка среды,  $\Gamma$  — граница участка,  $\nu = \pm 1$  — коэффициент направления. В силу отсутствия механических движений объем  $V$  неизменен и плотность  $\rho$  постоянна. Если рассматриваемая среда — одномерный кристалл, то  $\rho = 1/a$ , где  $a$  — шаг кристаллической решетки.

В соотношениях (3.2), следуя [27], используются обозначения  $V$ ,  $\Gamma$  и  $\nu$ , позволяющие в одномерном случае сохранить аналогию с трехмерной сплошной средой. Для одномерной среды объем  $V$  — это некоторый интервал изменения пространственной координаты  $x \in [x_1, x_2]$ , граница  $\Gamma$  — точки  $x_1$  и  $x_2$ . Коэффициент  $\nu$  принимает значение  $\nu = -1$  при  $x = x_1$  и  $\nu = +1$  при  $x = x_2$ , то есть играет ту же роль, что вектор нормали в трехмерном случае. Следовательно, интегралы, используемые в (3.2), могут быть записаны в виде

$$\int_V f dV = \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx, \quad \int_\Gamma \nu f d\Gamma = f(x) \Big|_{x_1}^{x_2} = \int_{x_1}^{x_2} f'(x) dx. \quad (3.3)$$

Здесь переход от дифференцирования по границе к дифференцированию по объему является аналогом формулы Гаусса-Остроградского для одномерного случая.

Подставим представления (3.2) в уравнение баланса (3.1). Далее, переходя от интегрирования по границе к интегрированию по объему, и, стягивая область интегрирования в точку (устремляя  $x_1 \rightarrow x_2$ ), получаем дифференциальную форму уравнения баланса энергии:

$$\rho \dot{U} = -h' + \rho r, \quad (3.4)$$

где штрихом обозначена производная по пространственной координате  $x$ .

### 3.1.2 Энтропия и второй закон термодинамики

Энтропия вводится как аддитивная функция объема:

$$\mathcal{S} = \int_V \rho S dV, \quad (3.5)$$

где  $S$  — удельная энтропия (приходящаяся на частицу). Скорость изменения энтропии имеет две составляющие:

$$\dot{\mathcal{S}} = \dot{\mathcal{S}}^i + \dot{\mathcal{S}}^e, \quad (3.6)$$

где индексом  $i$  обозначено производство энтропии за счет внутренних процессов в системе, индексом  $e$  — изменение энтропии за счет подвода тепла в объем и через границу области. Второе слагаемое в (3.6) определим соотношением

$$\dot{\mathcal{S}}^e = - \int_\Gamma \nu \frac{h}{T} d\Gamma + \int_V \rho \frac{r}{T} dV, \quad (3.7)$$

где  $T$  — температура. Формулы основаны на принципе, что элементарный внешний подвод энтропии в систему равен отношению элементарного подводимого тепла и температуры в точке подвода:  $\delta S^e = \delta Q/T$ . Для внутреннего производства энтропии нет аналогичного определения, однако для него постулируется выполнение неравенства

$$\dot{\mathcal{S}}^i \geq 0, \quad (3.8)$$

представляющего собой *второй закон термодинамики*.

Владимир Александрович Пальмов записывает [28] неравенство (3.8) в форме:

$$\dot{\mathcal{S}} \geq \dot{\mathcal{S}}^e. \quad (3.9)$$

Согласно [28], это соотношение представляет собой *неравенство Клаузиуса-Дюгема*. Его словесная формулировка [28]: скорость изменения энтропии материального тела не меньше, чем скорость подвода энтропии извне к этому телу<sup>1</sup>. Очевидно, эта формулировка эквивалентна использованной выше формулировке (3.8): внутреннее производство энтропии неотрицательно. Формулировка (3.8) короче и содержит только одно понятие, поэтому может быть предпочтительнее с методической точки зрения.

Подстановка соотношений (3.5) – (3.7) в неравенство (3.8) или (3.9) с переходом от интегрирования по границе к интегрированию по объему дает

$$\dot{S}^i = \int_V \left( \rho \dot{S} + \left( \frac{h}{T} \right)' - \rho \frac{r}{T} \right) dV \geq 0. \quad (3.10)$$

Используя произвольность объема, получаем локальную форму неравенства Клаузиуса-Дюгема:

$$\rho \dot{S} + \left( \frac{h}{T} \right)' - \rho \frac{r}{T} \geq 0 \quad \iff \quad \rho T \dot{S} + h' - \rho r - \frac{hT'}{T} \geq 0. \quad (3.11)$$

### 3.1.3 Универсальное диссипативное неравенство

Используя уравнение баланса энергии (3.4), приводим неравенство (3.11) к виду

$$\rho(T\dot{S} - \dot{U}) - \frac{hT'}{T} \geq 0. \quad (3.12)$$

Это неравенство можно записать в форме *универсального диссипативного неравенства* [28]:

$$\Phi - \frac{hT'}{T} \geq 0, \quad (3.13)$$

где

$$\Phi \stackrel{\text{def}}{=} \rho(T\dot{S} - \dot{U}) = -\rho(S\dot{T} + \dot{\Psi}) \quad (3.14)$$

— диссипативная функция. Вторая форма записи соотношения (3.14) использует свободную энергию Гельмгольца  $\Psi$ :

$$\Psi \stackrel{\text{def}}{=} U - TS. \quad (3.15)$$

Свободная энергия часто используется из соображений удобства в механике сплошной среды [28], однако в данной работе ограничимся использованием внутренней энергией  $U$ , так как в рассматриваемых задачах она имеет более ясную физическую интерпретацию.

Рассмотрим подробнее универсальное диссипативное неравенство (3.13). Оно содержит диссипативную функцию  $\Phi$  и слагаемое  $hT'/T$ . При наличии механических

---

<sup>1</sup>Дословно в формулировке В.А. Пальмова сказано “скорость изменения внутренней энтропии...” Однако при этом слово “внутренняя” используется исключительно как противопоставление подводу энтропии извне, поэтому указанная внутренняя энтропия эквивалентна просто энтропии в принятой в данной работе терминологии. Строго говоря, не может быть разделения на внутреннюю и внешнюю энтропию, различается ее подвод — извне и за счет внутренних процессов в системе. После того, как энтропия попала в систему, она “смешивается”, ее уже невозможно разделить на внутреннюю и внешнюю.

движений диссипативная функция содержит еще одно слагаемое, описывающее диссипацию механической энергии, с чем и связано название  $\Phi$ . Без указанного слагаемого это название становится менее понятным. Второе слагаемое характеризует связь направлений теплового потока и возрастания температуры. Как будет показано дальше, в нашем случае неравенство (3.13) распадается на два соотношения:

$$\Phi = 0, \quad hT' \leq 0. \quad (3.16)$$

Первое из них демонстрирует отсутствие диссипации в системе, второе — *неравенство Фурье* [28], согласно которому тепловой поток направлен в сторону, противоположную увеличению температуры.

### 3.1.4 Определяющее соотношение

Предположим, что внутренняя энергия — функция энтропии. Тогда

$$U = U(S) \quad \Rightarrow \quad \dot{U} = \frac{dU}{dS} \dot{S}. \quad (3.17)$$

Подставляя это соотношение в неравенство (3.12), получаем

$$\rho \left( T - \frac{dU}{dS} \right) \dot{S} - \frac{hT'}{T} \geq 0. \quad (3.18)$$

Если положить, что  $T$  и  $U$  не зависят от  $\dot{S}$ , а величина  $\dot{S}$  может принимать произвольные значения<sup>2</sup>, то из (3.18) получаем

$$T = \frac{dU}{dS}, \quad hT' \leq 0. \quad (3.19)$$

Первое соотношение дает связь внутренней энергии, энтропии и температуры, второе (неравенство Фурье) означает, что тепло течет в направлении уменьшения температуры (от горячего к холодному).

Предположим, что изменения температуры невелики, и теплоемкость в рассматриваемом температурном диапазоне можно считать постоянной. Постулируя дополнительно, что внутренняя энергия является функцией температуры<sup>3</sup>, получим

$$dU = c_V dT, \quad (3.20)$$

где  $c_V$  — константа: теплоемкость среды при постоянном объеме<sup>4</sup>. Как будет показано в дальнейшем (3.42), в случае гармонического кристалла  $c_V \equiv k_B$ . Подставляя (3.20) в (3.19), получаем

$$T = c_V \frac{dT}{dS} \quad \Rightarrow \quad \dot{S} = c_V \frac{\dot{T}}{T} \quad \Rightarrow \quad S = S_0 + c_V \ln \left( \frac{T}{T_0} \right), \quad (3.21)$$

<sup>2</sup>Полагается, что за счет внешнего подвода тепла, согласно формуле (3.7), можно реализовать любое значение  $\dot{S}$ .

<sup>3</sup>Указанная формулировка не противоречит зависимости внутренней энергии от энтропии. Подразумевается, что имеется только один независимый параметр состояния. Это может быть температура или энтропия. Что именно — не принципиально, так как эти величины могут быть выражены друг через друга. В принципе, возможно существование нескольких независимых параметров состояния, но это уже более сложная теория.

<sup>4</sup>Поскольку отсутствуют механические движения, объем остается неизменным.

где  $S_0$  и  $T_0$  — начальные значения температуры и энтропии в данной точке пространства. Таким образом, мы получаем явную зависимость энтропии от температуры для каждой точки среды. Используя то, что  $T - T_0 \ll T_0$ , получим из (3.21) приближенную формулу

$$S \approx S_0 + c_V \frac{T - T_0}{T_0}. \quad (3.22)$$

Если постоянство теплоемкости  $c_V$  выполняется лишь приближенно, то тогда формула (3.22), вообще говоря, не менее точна, чем (3.21). Другое дело гармонический кристалл, где теплоемкость  $c_V$  строго постоянна и формула (3.21) является точной.

Отметим, что зависимость (3.21) формально противоречит третьему закону термодинамики [28], согласно которому при стремлении абсолютной температуры к нулю энтропия также должна стремиться к нулю. Это связано с тем, что рассматриваются малые изменения температуры, в пределах которых теплоемкость остается постоянной. В общем случае обычно полагается, что теплоемкость стремится к нулю при уменьшении температуры, что позволяет выполнить третий закон термодинамики. С другой стороны, приближенная формула (3.22) свободна от этого недостатка. Отметим, однако, что для гармонического кристалла теплоемкость константа при любых температурах — так что для него третий закон термодинамики, действительно, не выполняется. Сложно сказать, является ли это критичным, так как единственное назначение указанного закона, по-видимому, состоит в том, чтобы определить постоянную константу, с точностью до которой определяется энтропия. Однако эта константа, вообще говоря, больше ни в каких физических построениях не используется.

Рассмотрим теперь второе следствие из второго закона термодинамики — неравенство Фурье:  $hT' \leq 0$ . Для закона Фурье (3) имеем

$$h = -\kappa T' \quad \Rightarrow \quad hT' = -\frac{1}{\kappa} h^2 \leq 0. \quad (3.23)$$

Таким образом, условием выполнения второго закона термодинамики является неотрицательность коэффициента теплопроводности. Однако для гиперболического (4) и баллистического (1.4) законов распространения тепла получаем

$$\dot{h} + \frac{1}{\tau} h = -\frac{\kappa}{\tau} T' \quad \Rightarrow \quad hT' = -\frac{1}{\kappa} \left( h^2 + \frac{\tau}{2} (\dot{h}^2) \right); \quad (3.24)$$

$$\dot{h} + \frac{1}{t} h = -\rho c_V c^2 T' \quad \Rightarrow \quad hT' = -\frac{1}{\rho c_V c^2} \left( h^2 + \frac{t}{2} (\dot{h}^2) \right). \quad (3.25)$$

В обоих случаях неравенство Фурье будет выполняться, если тепловой поток растет по модулю. Если же абсолютное значение теплового потока достаточно быстро убывает, то тогда неравенство может быть нарушено, а, следовательно, тепло может течь в обратную сторону: от холодного к горячему. Таким образом, может быть нарушено выполнение 2-го закона термодинамики в предлагаемой формулировке.

### 3.1.5 Корректировка определяющих соотношений

На примере соотношений (3.24) и (3.25) было показано, что неравенство Фурье может не выполняться для уравнений гиперболической теплопроводности и уравнения

баллистического распространения тепла. Означает ли это нарушение второго закона термодинамики? Предположим, что энтропия — функция внутренней энергии и теплового потока

$$S = S(U, h^2) \quad \Rightarrow \quad \dot{S} = \frac{\partial S}{\partial U} \dot{U} + 2 \frac{\partial S}{\partial h^2} \dot{h}h. \quad (3.26)$$

Подставляя это соотношение в неравенство (3.12), получаем

$$\rho \left( T \frac{\partial S}{\partial U} - 1 \right) \dot{U} + h \left( 2\rho T^2 \frac{\partial S}{\partial h^2} \dot{h} - \frac{T'}{T} \right) \geq 0. \quad (3.27)$$

Применяя подход, использованный при получении соотношений (3.19), предполагая, что  $S$  и  $T$  не зависят от  $\dot{U}$ , получаем:

$$\frac{\partial S}{\partial U} = \frac{1}{T}, \quad h \left( 2\rho T^2 \frac{\partial S}{\partial h^2} \dot{h} - T' \right) \geq 0. \quad (3.28)$$

Для того чтобы неравенство из (3.28) выполнялось для любых значений  $T$  и  $h$ , получаем:

$$h = \kappa \left( 2\rho T^2 \frac{\partial S}{\partial h^2} \dot{h} - T' \right). \quad (3.29)$$

Предположив, что:

$$\frac{\partial S}{\partial h^2} = -\frac{\tau}{2\kappa\rho T^2}, \quad (3.30)$$

где  $\tau$  — время релаксации. Получаем определяющее соотношение для потока и температуры:

$$\dot{h} + \frac{1}{\tau} h = -\frac{\kappa}{\tau} T', \quad (3.31)$$

что соответствует уравнению гиперболического распространения тепла. Подставляя (3.30) и первое равенство из (3.28) в (3.26), получаем выражение для определения энтропии:

$$\dot{S}(U, h) = \frac{1}{T} \dot{U} - \frac{\tau}{\kappa\rho T^2} \dot{h}h. \quad (3.32)$$

Таким образом, предположив, что энтропия — функция внутренней энергии и теплового потока, также сделав предположение (3.31), из (3.28) следует уравнение гиперболической теплопроводности, при этом второй закон термодинамики в форме (3.8) выполняется. Рассмотрим подробнее выражение (3.32). Добавив в обе части равенства слагаемое  $(\frac{h}{T})'$ , используя баланс энергии (3.1) можно привести к виду:

$$\rho \dot{S} + \left( \frac{h}{T} \right)' = \left( \frac{h}{T} \right)' - \frac{h'}{T} - \frac{\tau}{\kappa T^2} \dot{h}h \quad \Rightarrow \quad \rho \dot{S} + \left( \frac{h}{T} \right)' = h \left( \frac{1}{T} \right)' - \frac{\tau}{\kappa T^2} \dot{h}h. \quad (3.33)$$

Проинтегрировав по объему  $V$ , учитывая, что объем постоянный, и сравнивая с выражением (3.10) получаем что выражение (3.32), в отсутствие объемного подвода

энтропии представляет из себя скорость изменения энтропии за счет внутренних процессов:

$$\int_V \rho \dot{S} + \left(\frac{h}{T}\right)' = \int_V h \left(\frac{1}{T}\right)' - \frac{\tau}{\kappa T^2} \dot{h}h = S^i \geq 0 \quad (3.34)$$

### 3.1.6 Время как переменная состояния

В предыдущем разделе тепловой поток  $h$  рассматривался как переменная состояния. Было показано, что это приводит к уравнению гиперболической теплопроводности. Возможно ли получить уравнение баллистической теплопроводности используя аналогичные рассуждения? В уравнении баллистической теплопроводности вместо времени релаксации  $\tau$  используется реальное физическое время  $t$ . Предположим, что энтропия так же есть функция времени:

$$S = S(U, h^2, t) \quad \Rightarrow \quad \dot{S} = \frac{\partial S}{\partial U} \dot{U} + 2 \frac{\partial S}{\partial h^2} \dot{h}h + \frac{\partial S}{\partial t}. \quad (3.35)$$

Подставляя это соотношение в неравенство (3.12) получаем

$$\rho \left( T \frac{\partial S}{\partial U} - 1 \right) \dot{U} + h \left( 2\rho T \frac{\partial S}{\partial h^2} \dot{h} - \frac{T'}{T} \right) + \frac{\partial S}{\partial t} \geq 0. \quad (3.36)$$

Из вида соотношения (3.36) не ясно, как из неравенства Клаузиуса-Дюгема в форме (1.4) может быть получено уравнение баллистической теплопроводности в форме (1.4).

### 3.1.7 Подход П. А. Жилина

Воспроизведем подход Павла Андреевича Жилина [29] к введению энтропии применительно к рассматриваемой задаче<sup>5</sup>. Записывается уравнение баланса энергии (3.4):

$$\rho \dot{U} = -h' + \rho r. \quad (3.37)$$

Предполагается, что внутренняя энергия является функцией<sup>6</sup> плотности энтропии  $S$ , тогда

$$U = U(S) \quad \Rightarrow \quad \dot{U} = T \dot{S}, \quad T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{dU}{dS}. \quad (3.38)$$

Энтропия характеризует зависимость внутренней энергии от движения по игнорируемым степеням свободы. Температура вводится как коэффициент при скорости

<sup>5</sup>Предлагаемая трактовка подхода П.А. Жилина является точкой зрения одного из авторов данной работы (А.М. Кривцова) и, вообще говоря, может несколько расходиться с другими трактовками этого подхода.

<sup>6</sup>Особенностью подхода П.А. Жилина является то, что в общем случае аргументы внутренней энергии не задаются сразу, а определяются с использованием уравнения баланса энергии. Однако, это в первую очередь касается тензорных параметров состояния, отвечающих механическому движению, для которых сложно сделать выбор без анализа уравнения баланса энергии. В рассматриваемом же случае механическое движение отсутствует, и если имеется только один скалярный параметр состояния, то не остается выбора кроме как положить внутреннюю энергию функцией этого параметра.

изменения энтропии в представлении для скорости изменения внутренней энергии. Температура характеризует энергию движения системы по игнорируемым степеням свободы и считается измеряемым параметром<sup>7</sup>. Энтропия — параметр, сопряженный температуре, измеряемым не является.

Согласно (3.38), соотношение

$$T = \frac{dU}{dS} \quad (3.39)$$

является следствием а) зависимости внутренней энергии от энтропии, б) определения температуры как коэффициента при скорости изменения энтропии. В этом существенное отличие подхода П.А. Жилина от подходов, рассмотренных в предыдущих разделах, согласно которым соотношение (3.39) является следствием второго закона термодинамики.

В подходе П.А. Жилина второй закон термодинамики не рассматривается как общий закон природы и заменяется рядом частных законов. Так, вместо него используются неравенства

$$\Phi \geq 0, \quad hT' \leq 0. \quad (3.40)$$

Первое (неотрицательность диссипативной функции)<sup>8</sup> является отражением того факта, что диссипация всегда приводит к потере энергии. Второе неравенство — неравенство Фурье, отражает опытный факт, согласно которому тепло всегда течет от горячего к холодному — *нулевое начало термодинамики*<sup>9</sup>. В представленных выше подходах эти два неравенства объединены в одно (3.13)

$$\Phi - \frac{hT'}{T} \geq 0 \quad (3.41)$$

— универсальное диссипативное неравенство [28], являющееся отражением второго закона термодинамики в форме Клаузиуса-Дюгема.

Очевидно, что из неравенств (3.40) следует неравенство (3.41), но обратное неверно. В [29] указывается, что неравенство (3.41) является слишком слабым для практических приложений. Если становиться на позиции, что все-таки первичным является неравенство (3.40), то требуется показать, что существуют задачи, в которых выполняется (3.41), но при этом не выполняется одно из неравенств (3.40). Если же это показать не удастся, то тогда фундаментальность универсального диссипативного неравенства (3.40) может оказаться под сомнением.

В рассматриваемой задаче, в силу отсутствия механических движений  $\Phi \equiv 0$ , оба подхода сводятся к одному неравенству Фурье. Последнее, как уже упоминалось, не выполняется для систем, в которых имеется инерционность в распространении тепла. Решение этой проблемы в рассмотренных подходах требует различных действий. С точки зрения подхода П.А. Жилина невыполнение неравенства Фурье не является чем-то криминальным — оно является частным законом, и его невыполнение никак не сказывается на всех остальных построениях. Неравенство Фурье может быть заменено каким-то другим неравенством, а может и вообще быть отброшено. С точки

<sup>7</sup>Под измеряемостью, понимается существование прибора (например, термометр), позволяющего непосредственно измерить данную физическую величину.

<sup>8</sup>Это неравенство иногда называют неравенством Планка или Клаузиуса-Планка, однако в монографии [29] эти названия не используются.

<sup>9</sup>В монографии [29] термин “неравенство Фурье” не используется, но используется термин “нулевое начало термодинамики”.



зрения подходов, основанных на втором законе термодинамики, ситуация сложнее. Нарушение неравенства Фурье или свидетельствует о невыполнении второго закона термодинамики, что разрушает все построения, или требует модификации вывода универсального диссипативного неравенства. Это модификация может быть получена или изменением формулировки второго закона, или усложнением структуры внутренней энергии — введением дополнительных параметров состояния.

## 3.2 Гармонический кристалл

Рассмотрим применение полученных выше соотношений для модели одномерного гармонического кристалла. Указанная модель замечательна тем, что для нее возможно аналитически вывести уравнения распространения тепла (1.4) из уравнений динамики частиц кристалла [26], [30]. Вывод указанных уравнений, вообще говоря, не требует привлечения понятия энтропии и второго закона термодинамики. Однако, данная модель, в силу своей замкнутости, может быть эффективно использована для тестирования термодинамических понятий в случае неравновесных процессов.

### 3.2.1 Кинетическая температура

Тепловые движения в гармоническом кристалле представляют собой хаотические колебания атомов вблизи их положений равновесия. При этом внутренняя энергия представляет собой механическую энергию указанных колебаний, которая может быть разделена на кинетическую и потенциальную. Справедливы соотношения

$$U = K + \Pi, \quad \Pi = K = \frac{d}{2} k_B T, \quad d = 1 \quad \Rightarrow \quad U = k_B T. \quad (3.42)$$

Здесь  $K$  и  $\Pi$  — удельная кинетическая и потенциальная энергии (приходящиеся на частицу),  $d$  — размерность пространства,  $k_B$  — постоянная Больцмана. Равенство потенциальной и кинетической энергии выполняется в силу того, что 1) кристалл гармонический [31], 2) процесс распространения тепла значительно более медленный процесс, чем процесс выравнивания энергий [30]. Указанная связь кинетической энергии и температуры выполняется в силу того, что под температурой понимается *кинетическая температура кристалла*. Сравнивая соотношения (3.42) и (3.20) мы видим, что для гармонического кристалла теплоемкость равна постоянной Больцмана:  $c_V = k_B$ . Отметим, что соотношение (3.20) было получено в предположении малых изменений температуры по сравнению с ее абсолютным значением, для гармонического кристалла этих ограничений не требуется и имеется явное выражение внутренней энергии через температуру. Поэтому для гармонического кристалла соотношение (3.42) имеет более широкую область применимости, чем соотношение (3.20) для произвольной среды.

Подстановка полученной связи внутренней энергии и температуры в уравнение (3.4) и неравенство (3.12) дает

$$\rho k_B \dot{T} = -h' + \rho r, \quad \rho T \dot{S} - \rho k_B \dot{T} - \frac{hT'}{T} \geq 0. \quad (3.43)$$

Первое соотношение, в случае добавления определяющих соотношений для  $h$  и  $r$ , позволяет получить замкнутое уравнение распространения тепла. Так, если использовать соотношение (1.4) для теплового потока, полученного в [26] для гармонического кристалла при отсутствии объемного подвода тепла ( $r = 0$ ), то мы получим уравнение (1.4) баллистического распространения тепла:

$$\ddot{T} + \frac{1}{t} \dot{T} = c^2 T'' . \quad (3.44)$$

Второе соотношение из (3.43) позволяет получить выражение для энтропии аналогично тому, как это было сделано в (3.21). Для этого достаточно предположить, например, что энтропия является функцией температуры  $S = S(T)$ , тогда неравенство (3.43) примет вид

$$\rho \left( T \frac{dS}{dT} - k_B \right) \dot{T} - \frac{hT'}{T} \geq 0, \quad (3.45)$$

откуда, в силу произвольности  $\dot{T}$ , получаем

$$T \frac{dS}{dT} = k_B, \quad hT' \leq 0. \quad (3.46)$$

В точности тот же результат получается, если предположить, что температура является функцией энтропии:  $T = T(S)$ . Первое соотношение из (3.46) дает полученную выше (3.21) зависимость энтропии от температуры, которая в случае гармонического кристалла принимает вид:

$$S = S_0 + k_B \ln \left( \frac{T}{T_0} \right), \quad (3.47)$$

где  $S_0$  и  $T_0$  — начальные значения температуры и энтропии в данной точке пространства. Таким образом, мы получаем явную зависимость энтропии от температуры для каждой точки среды. Второе соотношение из (3.46) — неравенство Фурье. В следующем разделе будет показано, что это неравенство, вообще говоря, не выполняется для гармонического кристалла.

Если рассматривать малые отклонения температуры  $T$  от ее начального значения  $T_0$ , то легко получить приближенную формулу, аналогичную (3.22)

$$S \approx S_0 + k_B \frac{T - T_0}{T_0}. \quad (3.48)$$

Однако, в отличие от рассмотренного выше случая, когда обе зависимости энтропии от температуры — логарифмическая (3.21) и линейная (3.22) являются приближенными, для гармонического кристалла логарифмическая зависимость (3.48) является точной, а линейная (3.48) справедлива только для малых вариаций температуры.

### 3.2.2 Направление теплового потока

Из представленного выше термодинамического рассмотрения следует, что для гармонического кристалла должно выполняться неравенство Фурье

$$hT' \leq 0, \quad (3.49)$$

то есть направление теплового потока должно быть противоположно направлению возрастания температуры. Иными словами, тепло должно течь от горячего к холодному. Однако, для гармонического кристалла это условие может как выполняться, так и не выполняться — в зависимости от задачи. В [26] было получено, что в случае мгновенного теплового возмущения распространение тепла в гармоническом кристалле описывается соотношением

$$\dot{h} + \frac{1}{t} h = -k_B \rho c^2 T', \quad (3.50)$$

откуда получаем

$$hT' = -\frac{1}{k_B \rho c^2} \left( h^2 + \frac{t}{2} (h^2)' \right). \quad (3.51)$$

Из полученной формулы, как и из формулы (3.25), следует, что при достаточно быстром убывании теплового потока неравенство Фурье может не выполняться. Впрочем, требуется показать, что такое быстрое убывание может быть осуществлено. Для этого рассмотрим эволюцию мгновенного теплового возмущения в гармоническом кристалле. Такое возмущение может быть вызвано воздействием ультракороткого лазерного импульса. Соответствующая начальная задача (1.4), (1.5) была рассмотрена в Главе 1. Равенство нулю  $\dot{T}|_{t=0}$  следует из (3.50) в силу отсутствия начального теплового потока при мгновенном тепловом возмущении. Решение начальной задачи (2.3), приведено в Главе 1 в интегральной форме (1.6). Формула для теплового потока может быть получена из формулы для температуры с использованием уравнения баланса энергии (3.43) или соотношения теплопроводности (3.50):

$$h(t, x) = \frac{k_B \rho c}{\pi t} \int_{-t}^t \frac{T_0(x - c\tau)}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} \tau d\tau. \quad (3.52)$$

Рассмотрим примеры конкретных начальных распределений температуры.

**Задача о тепловой ступеньке.** Исследуется контакт горячего и холодного полупространств:  $T_0(x) = A$  при  $x \leq 0$ , иначе  $T_0(x) = B$ , где  $A > B$  — некоторые положительные константы, имеющие размерность температуры. Из формул (3.52) в этом случае получаем

$$|x| \leq ct : \quad T(t, x) = \frac{A}{\pi} \arccos \frac{x}{ct} + B, \quad h(t, x) = \frac{Ak_B \rho}{\pi t} \sqrt{c^2 t^2 - x^2}; \quad (3.53)$$

при  $|x| > ct$  сохраняется начальное распределение температуры и  $h \equiv 0$ . Непосредственное вычисление дает для  $|x| \leq ct$ :

$$hT' = -\frac{A^2 k_B \rho}{\pi^2 t} (c^2 t^2 - x^2) \leq 0; \quad (3.54)$$

при  $|x| > ct$  имеем  $hT' \equiv 0$ . Таким образом, в данной задаче неравенство Фурье выполняется. Это также следует из того, что, согласно (3.53) в данной задаче тепловой поток — положительная возрастающая функция времени (кроме зоны, где  $h \equiv 0$ ), а тогда из (3.51) следует выполнение равенства (3.49).

**Задача о точечном тепловом воздействии.** Рассматривается начальное тепловое возмущение:  $T_0(x) = A\delta(x) + B$ , где  $\delta(x)$  — дельта-функция Дирака,  $A$  и  $B$  — некоторые положительные константы. Из формул (3.52) в этом случае получаем

$$|x| \leq ct : \quad T(t, x) = \frac{A}{\pi\sqrt{c^2t^2 - x^2}} + B, \quad h(t, x) = \frac{Ak_B\rho x}{\pi t\sqrt{c^2t^2 - x^2}}; \quad (3.55)$$

при  $|x| > ct$  сохраняется начальное распределение температуры и  $h \equiv 0$ . Непосредственное вычисление дает для  $|x| \leq ct$ :

$$hT' = \frac{A^2k_B\rho x^2}{\pi^2t(c^2t^2 - x^2)^2} \geq 0; \quad (3.56)$$

при  $|x| > ct$  имеем  $hT' \equiv 0$ . Таким образом, в данной задаче неравенство Фурье НЕ выполняется во всей зоне, где  $hT'$  имеет конечные ненулевые значения. И действительно, согласно (3.55) для  $x \in (0, ct)$  температура — возрастающая функция  $x$ , а тепловой поток положителен. Следовательно, тепло течет в направлении возрастания температуры. Связано это с тем, что на фронте, при  $x = ct$ , реализуется особенность — температура и тепловой поток обращаются в бесконечность. Именно на фронте и инициируется тепловой поток в “правильном” направлении: от бесконечно горячего фронта к холодному окружению. Все, что следует за фронтом — это лишь шлейф, вызванный инерционностью теплового процесса в кристалле, и в этом шлейфе поток по инерции течет уже в аномальном направлении — в сторону возрастания температуры. Более наглядно это видно на следующей задаче — о прямоугольном тепловом возмущении.

**Задача о прямоугольном тепловом возмущении.** Рассматривается начальное тепловое возмущение:  $T_0(x) = A$  при  $|x| \leq l$ , иначе  $T_0(x) = B$ , где  $A > B$  — некоторые положительные константы, имеющие размерность температуры. Можно показать, что в этом случае температура будет четной, а поток — нечетной функцией  $x$ . Поэтому далее ограничимся рассмотрением положительных  $x$ .

Решение для температуры в данной задаче получено в работе [25]. Используя (3.52) можно получить, что при  $x > 0$  поток  $h$  неотрицателен. При  $t \leq l/c$  имеем, что  $T' \leq 0$ , и поэтому неравенство Фурье выполняется. При временах  $t > l/c$  ситуация меняется. Вблизи фронта, для  $x \in (ct - l, ct)$ , температура убывает по координате:  $T' < 0$ . Однако в области шлейфа, реализующейся для  $x \in (0, ct - l)$ , температура возрастает:  $T' > 0$ . Следовательно, в этой области неравенство Фурье не выполняется, аналогично случаю точечного возмущения (3.54). Таким образом, тепловой поток генерируется в области фронта, где он направлен в сторону резкого снижения температуры. В области шлейфа поток по инерции продолжает течь в том же направлении, хотя в этой области температура и повышается с ростом  $x$ .

**Задача о синусоидальном тепловом возмущении.** Рассматривается начальное распределение температуры вида  $T_0(x) = A \sin \kappa x + B$ , где  $A$  и  $B$  — положительные константы, имеющие размерность температуры,  $\kappa$  — волновое число. Решение имеет вид:

$$T(t, x) = AJ_0(\kappa ct) \sin \kappa x + B, \quad h(t, x) = -Ak_B\rho c J_1(\kappa ct) \cos \kappa x. \quad (3.57)$$

Непосредственное вычисление дает для  $|x| \leq ct$ :

$$hT' = -A^2 k_B \rho c k J_0(\kappa ct) J_1(\kappa ct) \cos^2 \kappa x. \quad (3.58)$$

Знак выражения зависит от знака произведения функций Бесселя, который меняется со временем. Так, для больших  $t$  выполняется

$$J_0(\kappa ct) J_1(\kappa ct) \simeq \frac{2}{\pi \kappa ct} \cos\left(\kappa ct - \frac{\pi}{4}\right) \cos\left(\kappa ct - \frac{3\pi}{4}\right). \quad (3.59)$$

Имеем

$$\cos\left(\xi - \frac{\pi}{4}\right) \cos\left(\xi - \frac{3\pi}{4}\right) = \cos\left(\xi - \frac{\pi}{4}\right) \sin\left(\xi - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{2} \sin\left(2\xi - \frac{\pi}{2}\right) = -\frac{1}{2} \cos 2\xi. \quad (3.60)$$

В результате получаем

$$hT' \simeq \frac{A^2 k_B \rho}{\pi t} \cos(2\kappa ct) \cos^2 \kappa x. \quad (3.61)$$

Таким образом, произведение  $hT'$  периодически меняет знак. Следовательно, вдоль всей оси  $x$  поток течет то в направлении убывания, то в направлении возрастания температуры, причем временные промежутки нормального и аномального распространения тепла при больших временах оказываются одинаковыми.

### 3.2.3 Подсчет энтропии

Рассмотрим применение полученных соотношений для подсчета производства энтропии в рассматриваемых процессах. Было показано, что все три подхода к введению энтропии приводят к единому соотношению, связывающему температуру  $T$ , удельную внутреннюю энергию  $U$  и удельную энтропию  $S$ :

$$S = \frac{dU}{dT}. \quad (3.62)$$

В случае гармонического кристалла, с учетом того, что внутренняя энергия системы пропорциональна температуре:

$$U = k_B T, \quad (3.63)$$

выражение (3.86) может быть представлено в локальной дифференциальной форме:

$$\dot{S} = k_B \frac{\dot{T}}{T}. \quad (3.64)$$

В случае одномерного кристалла полная энтропия получается путем интегрирования по всей области (3.5):

$$\mathcal{S} = \int_{-\infty}^{\infty} \dot{S} = k_B \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\dot{T}}{T}. \quad (3.65)$$

**Задача об автомодельном решении** Исследуется автомодельный тепловой профиль описываемый функцией вида:

$$T(x, t) = T(t^{-\alpha}x) \quad (3.66)$$

Такое решение может получаться при рассмотрении задачи о тепловой ступеньке, при этом автомодельность достигается как в случае классической теплопроводности так и в случае баллистической теплопроводности. Подставляя (3.66) в (3.64) получаем:

$$\dot{S} = -\alpha t^{-\alpha-1} x \frac{1}{T(t^{-\alpha}x)} \frac{\partial T(t^{-\alpha}x)}{\partial t^{-\alpha}x} \quad (3.67)$$

Рассмотрим случай, когда тепловое возмущение распространяется со скоростью  $c$ . В случае классической теплопроводности  $c = \infty$ . Тогда интегрирование выражения (3.67) необходимо проводить в пределах  $[-ct; ct]$

$$\dot{S} = k_B t^{\alpha-1} \int_{-ct^{1-\alpha}}^{ct^{1-\alpha}} \frac{1}{T(t^{-\alpha}x)} \frac{\partial T(t^{-\alpha}x)}{\partial t^{-\alpha}x} d(ct^{-\alpha}) = k_B t^{\alpha-1} F(ct^{1-\alpha}) \quad (3.68)$$

**Уравнение баллистического распространения тепла** Рассмотрим задачу о тепловой ступеньке. Из решения (3.53) видно, что  $\alpha = 1$ . Таким образом получаем:

$$\dot{S} = \text{const} \quad \Rightarrow \quad S \sim t \quad (3.69)$$

Энтропия такого процесса возрастает линейно.

**Классическое уравнение теплопроводности** В случае классического уравнения теплопроводности распространение сигнала происходит с бесконечной скоростью  $c = \infty$ . Тогда выражение (3.68) примет вид:

$$\dot{S} = k_B t^{\alpha-1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{T(t^{-\alpha}x)} \frac{\partial T(t^{-\alpha}x)}{\partial t^{-\alpha}x} d(ct^{-\alpha}) = k_B t^{\alpha-1} C, \quad (3.70)$$

где  $C$  - константа. Решение уравнения классической теплопроводности для начального возмущения в виде ступеньки имеет вид:

$$T(t, x) = \frac{A}{\pi} \left( 1 + \text{erf} \left( \frac{x}{\sqrt{4\beta t}} \right) \right) + B. \quad (3.71)$$

Эта функция является автомодельной, коэффициент  $\alpha = -1/2$ . Таким образом:

$$\dot{S} \sim t^{-\frac{1}{2}} \quad \Rightarrow \quad S \sim \sqrt{t}. \quad (3.72)$$

Энтропия процесса автомодельного распространения тепла, описываемого классическим уравнением теплопроводности возрастает пропорционально  $\sqrt{t}$ .

Вывод: для автомодельного решения, представимого в виде (3.66) энтропия пропорциональна  $t^{\alpha-1}$ :

$$S \sim t^{\alpha-1}. \quad (3.73)$$

**Задача о тепловой ступеньке** В параграфе выше было показано, что для автотомодельного решения в виде (3.66) энтропия пропорциональна  $t^{\alpha-1}$ . Покажем это для конкретной задачи о тепловой ступеньке. Рассмотрим уравнение баллистической теплопроводности и классическое уравнение теплопроводности. Исследуется контакт горячего и холодного полупространств:  $T_0(x) = A$  при  $x \leq 0$ , иначе  $T_0(x) = B$ , где  $A > B$  — некоторые положительные константы, имеющие размерность температуры.

**Уравнение баллистического распространения тепла** В разделе 3.2.2 было рассмотрено решение (3.53) для тепловой ступеньки. Подставим (3.53) в (3.47):

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &= k_B \int_{-ct}^0 \ln \frac{\frac{A}{\pi} \arccos \frac{x}{ct} + B}{A + B} dx + k_B \int_0^{ct} \ln \frac{\frac{A}{\pi} \arccos \frac{x}{ct} + B}{B} dx = \\ &= k_B ct \int_0^1 \ln \frac{(A\pi \arccos \frac{x}{ct} + B)(A\pi \arccos -\frac{x}{ct} + B)}{B(B + A)} d\frac{x}{ct}. \end{aligned} \quad (3.74)$$

Таким образом для уравнения баллистической теплопроводности, в задаче о тепловой ступеньке энтропия возрастает линейно со временем. Этот результат согласуется с (3.69)

**Классическое уравнение теплопроводности** Рассмотрим классическое уравнение теплопроводности. Решение задачи о тепловой ступеньке приведено в (3.71). Подставляя (3.71) в (3.47) получаем:

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &= k_B \int_{-\infty}^0 \ln \frac{\frac{1}{2} \left( 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{x}{\sqrt{4\beta t}} \right) \right) + C}{C} dx + k_B \int_0^{\infty} \ln \frac{\frac{1}{2} \left( 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{x}{\sqrt{4\beta t}} \right) \right) + C}{C + A} dx = \\ &= k_B \sqrt{\beta t} \int_0^{\infty} \ln \frac{1 - \operatorname{erf}^2 \zeta}{4C(C + A)} d\zeta, \end{aligned} \quad (3.75)$$

Таким образом для уравнения классической теплопроводности, в задаче о тепловой ступеньке энтропия возрастает пропорционально квадратному корню из времени. Этот результат согласуется с (3.69)

**Задача о периодическом возмущении** Исследуется периодический тепловой профиль, описываемый функцией вида:

$$T(x, t) = Af_0(\kappa ct) \sin \kappa x + B. \quad (3.76)$$

Такое решение получается при рассмотрении начального синусоидального возмущения, как в случае уравнения баллистического распространения тепла, так и при рассмотрении классического уравнения теплопроводности. Подставляя (3.76) в (3.64) получаем:

$$\dot{\mathcal{S}} = A\kappa ct \frac{\partial f_0(t^{-\alpha} x)}{\partial t^{-\alpha} x} \frac{\sin \kappa x}{Af_0(\kappa ct) \sin \kappa x + B}. \quad (3.77)$$

Для подсчета полной энтропии системы выражение (3.78) интегрируется по периоду  $[0, 2\pi]$ :

$$\dot{S} = A^2 f_0(\kappa ct) \frac{\partial f_0(\kappa ct)}{\partial(\kappa ct)} \int_0^{2\pi} \frac{\sin \kappa x}{\sin \kappa x + \frac{B}{A f_0(\kappa ct)}} dx. \quad (3.78)$$

$$\dot{S} = 2\pi A^2 f_0(\kappa ct) \frac{\partial f_0(\kappa ct)}{\partial(\kappa ct)} \left( A f_0(\kappa ct) - \frac{B^2}{\sqrt{B^2 - A^2 f_0^2(\kappa ct)}} \right). \quad (3.79)$$

Приведенные результаты получены с использованием определяющих соотношений (3.17). В этом случае было показано, что для уравнения баллистической теплопроводности второй закон термодинамики может локально нарушаться, производство энтропии будет отрицательным. Полученные результаты показывают, что глобальное значение производства энтропии остается неотрицательным даже при использовании определяющих соотношений (3.17).

### 3.2.4 Непостоянство энтропии для гармонического кристалла

Использованные выше предположения о связи температуры и энтропии привели к противоречию. Можно предположить, что противоречие может быть устранено, если положить, что энтропия в гармоническом кристалле вообще не изменяется. Действительно, для гармонического кристалла реализуется баллистическое распространение тепла — тепловой поток может быть представлен как суперпозиция гармонических волн. Кроме того, уравнение баллистического распространения тепла (3.44) может интерпретироваться, как обратимое: оно инвариантно относительно замены знака времени. Покажем, однако, что энтропия в гармоническом кристалле не постоянна. Рассмотрим первое из неравенств (3.11). В случае постоянства энтропии ( $\dot{S} = 0$ ) и при отсутствии объемного подвода тепла ( $r = 0$ ), оно примет вид

$$\left( \frac{h}{T} \right)' \geq 0. \quad (3.80)$$

Неравенство (3.80) означает неубывание по  $x$  отношения  $h/T$ . Это уже странно, так как непонятно, чем положительное направление оси  $x$  принципиально отличается от отрицательного.

Однако конкретизируем еще больше задачу. Рассмотрим периодическое по  $x$  тепловое поле. Тогда неравенство (3.80) может выполняться только в случае постоянства отношения  $h/T$ . Однако из решения (3.57) для синусоидального начального распределения температуры имеем

$$\frac{h}{T} = - \frac{A k_B \rho c J_1(\kappa ct) \cos \kappa x}{A J_0(\kappa ct) \sin \kappa x + B} \neq \text{const}. \quad (3.81)$$

Здесь  $c$  — скорость звука в гармоническом кристалле;  $J_n$  — функции Бесселя;  $A$ ,  $B$ ,  $\kappa$  — параметры начального распределения температуры. Таким образом, предположение о постоянстве энтропии для гармонического кристалла также приводит к противоречию.



### 3.2.5 Связь со статистической механикой

Выше была получена формула (3.47), устанавливающая связь между энтропией и температурой для гармонического кристалла. Одновременно с этим было получено неравенство Фурье  $hT' \leq 0$ , которое для гармонического кристалла, вообще говоря, не выполняется. Это порождает сомнения и в применимости формулы (3.44) для энтропии. Однако указанная формула для энтропии может быть получена и из других соображений — из статистической механики. Покажем это.

В работе [32] для энтропии получена формула, которая в текущих обозначениях может быть записана в виде

$$S = k_B \ln \left( \frac{2\pi eU}{h_P \omega_e} \right), \quad (3.82)$$

где  $S$  — удельная энтропия,  $U$  — удельная тепловая энергия,  $e$  — основание натурального логарифма,  $h_P$  — постоянная Планка<sup>10</sup>,  $\omega_e$  — элементарная частота<sup>11</sup>. Данная формула получена на основе принципа Больцмана, связывающего энтропию с логарифмом числа возможных микросостояний макроскопической системы. Формула выведена аналитически для одномерного гармонического кристалла с фиксированными граничными условиями, находящегося в состоянии термодинамического равновесия. Полагая, в соответствии с (3.42),  $U = k_B T$ , получаем из (3.82)

$$S = k_B \ln T + C, \quad C \stackrel{\text{def}}{=} \ln \left( \frac{2\pi e k_B}{h_P \omega_e} \right). \quad (3.83)$$

Данная формула получена из статистической механики. К аналогичной зависимости приводит формула (3.47), полученная из термодинамического рассмотрения:

$$S = k_B \ln T + C, \quad C \stackrel{\text{def}}{=} S_0 - k_B \ln T_0. \quad (3.84)$$

Формулы (3.83) и (3.84) совпадают, если начальная энтропия и температура связаны соотношением (3.83). Фактически, это дает возможность определить начальную энтропию как

$$S_0 = k_B \ln \left( \frac{2\pi e k_B T_0}{h_P \omega_e} \right). \quad (3.85)$$

Таким образом, статистическая механика дает подтверждение полученной выше связи энтропии и температуры (3.21). Следует, однако, учитывать, что в статистической механике рассматриваются равновесные процессы, в то время как мы исследуем неравновесные процессы распространения тепла.

## 3.3 Обсуждение и заключительные замечания

В работе рассмотрены **три подхода** к введению энтропии:

---

<sup>10</sup>В классической статистической механике это некоторая константа, имеющая размерность действия (Дж·с). Для соответствия с квантовой механикой ее принимают равной постоянной Планка.

<sup>11</sup>Частота колебаний частицы массы  $m$  на пружине с жесткости  $C$ , вычисляемая по формуле  $\omega_e = \sqrt{C/m}$ . Здесь  $m$  — масса атома,  $C = \Pi''(a)$  — жесткость межатомной связи,  $\Pi$  — потенциал взаимодействия,  $a$  — шаг кристаллической решетки.

1. Подход классической термодинамики на основе неравенства Клаузиуса-Дюгема [28].
2. Подход П. А. Жилина [29].
3. Подход классической статистической механики [32].

Для рассматриваемых систем все три подхода приводят к единому дифференциальному соотношению, связывающему температуру  $T$ , удельную внутреннюю энергию  $U$  и удельную энтропию  $S$ :

$$T = \frac{dU}{dS}. \quad (3.86)$$

Если теплоемкость  $c_V$  может считаться постоянной величиной, то из соотношения (3.86) следует явная связь энтропии и температуры:

$$S = c_V \ln T + C, \quad (3.87)$$

где  $C$  — константа, определяемая начальными значениями  $S$  и  $T$  в данной точке пространства. Далее, **первый подход**, основанный на выполнении второго закона термодинамики, дает неравенство Фурье:

$$hT' \leq 0, \quad (3.88)$$

означающее, что тепловой поток  $h$  должен течь в сторону убывания температуры. Это неравенство выполняется для классической теплопроводности (3), однако оно противоречит законам инерционного распространения тепла, таким как гиперболическая (4) или баллистическая (1.4) теплопроводность. Указанные законы, в силу их инерционности, допускают обратный транспорт тепла — в сторону возрастания температуры. Это могло бы быть аргументом против использования указанных законов, однако, если уравнение (4) эмпирическое, то уравнение (1.4) аналитически выведено из уравнений динамики кристаллической решетки и является строгим отражением динамики гармонического кристалла.

Возникающее противоречие требует или пересмотра формулировки второго закона термодинамики, или введения дополнительных переменных (параметров состояния), от которых зависит внутренняя энергия и/или энтропия. Согласно **второму подходу**<sup>12</sup> (П.А. Жилин) второй закон термодинамики не является общим законом, а вместо него формулируются набор частных законов, таких, как неравенство Фурье (3.87). В этом случае невыполнение для конкретных систем неравенства (3.87) не является критическим и лишь отражает особенность указанных систем. Однако для классического подхода невыполнение (3.87) критично, ибо ставит под сомнение выполнение второго закона термодинамики, являющегося основополагающим для этого подхода.

Перечислим возможные пути устранения возникшего противоречия, основанные на введении дополнительных параметров состояния.

- Согласно неравновесной термодинамике, энтропия может быть также функцией потоков.

---

<sup>12</sup>**Третий подход** описывает только равновесные процессы и поэтому не может быть использован для анализа неравенства Фурье.

- Как показано в [26], полное описание тепловых процессов в гармоническом кристалле требует, вообще говоря, рассмотрения, наряду с кинетической температурой, бесконечного числа обобщенных температур. Но тогда логично предположить, что энтропия гармонического кристалла также зависит от обобщенных температур.
- При рассмотрении медленных движений, связанных с распространением тепла, отбрасываются быстрые движения, приводящие к выравниванию кинетической и потенциальной энергий. Однако такое выравнивание также является необратимым процессом, приводящим к росту энтропии.

Учет одного или нескольких из перечисленных факторов, возможно, позволит обеспечить выполнение второго закона термодинамики во всех рассмотренных выше системах.

В заключение отметим важный факт, связанный с понятием необратимости. Уравнения классической (3) и гиперболической (4) теплопроводности не инвариантны относительно обращения времени: замены  $t$  на  $-t$ . Этим они отличаются, скажем, от волнового уравнения. Принято говорить, что это напрямую связано с необратимостью указанных уравнений. Однако уравнение баллистической теплопроводности (1.4)

$$\ddot{T} + \frac{1}{t} \dot{T} = c^2 T'' \quad (3.89)$$

инвариантно относительно обращения времени: оно НЕ изменяется при замене  $t$  на  $-t$ . Вместе с тем оно описывает необратимые процессы: например, затухание синусоидального теплового возмущения (3.57). Кроме того, в разделе 3.2.4 было показано, что энтропия для гармонического кристалла — системы, описываемой уравнением (3.89) — не является константой. Поэтому получается, что обратимость процесса напрямую не связана с инвариантностью уравнения относительно обращения времени.

# Глава 4

## Более сложные системы

### 4.1 Одномерный кристалл с внутренней массой

Рассмотрим бесконечную гармоническую цепочку, каждая частица массой  $M$  которого содержит внутреннюю степень свободы в виде массы  $m$  на упругом основании. Уравнения движения записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} M\ddot{u}_i &= C(u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}) - C_1(u_p - v_p), \\ m\ddot{v}_i &= C_1(u_i - v_i), \end{aligned} \quad (4.1)$$

где  $u$  — перемещения частиц массой  $M$ ,  $v$  — перемещения частиц массой  $m$ . Далее будем рассматривать векторные величины  $\mathbf{s}_i = [u_i \ v_i]^T$ . Тогда уравнение (4.1) может быть записано в операторном виде:

$$\ddot{\mathbf{s}}_i = \mathcal{L} \cdot \mathbf{s}_i, \quad (4.2)$$

где

$$\mathcal{L} = \begin{bmatrix} \omega_1^2 \Delta^2 & \omega_2 \\ \omega_3^2 & -\omega_3 \end{bmatrix}, \quad (4.3)$$

где  $\Delta f_i = f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}$ ,  $\omega_1 = \sqrt{\frac{C}{M}}$ ,  $\omega_2 = \sqrt{\frac{C_1}{M}}$ ,  $\omega_3 = \sqrt{\frac{C_1}{m}}$ .

В начальный момент времени перемещения и скорости частиц задаются следующим образом:

$$t = 0: \quad \mathbf{s}_i^0 = \begin{bmatrix} u_i^0 \\ v_i^0 \end{bmatrix}, \quad \dot{\mathbf{s}}_i^0 = \begin{bmatrix} \dot{u}_i^0 \\ \dot{v}_i^0 \end{bmatrix}, \quad (4.4)$$

Где  $\mathbf{s}_i, \dot{\mathbf{s}}_i$  - независимые случайные векторы с нулевым матожиданием. Уравнения (4.1) полностью описывают динамику кристалла, они могут быть решены численно или аналитический, однако для описания макроскопических характеристик больший интерес представляет изменение статистических характеристик.

Рассмотрим ковариации перемещений и скоростей двух частиц с индексами  $p$  и  $q$ . Частицы, соответствующие внутренним степеням свободы будут иметь те же индексы. Для описания статистических характеристик такой системы потребуется

рассматривать матрицы ковариаций соответствующих величин:

$$\begin{aligned}\xi_{pq} = \langle \mathbf{s}_p \mathbf{s}_q \rangle &= \begin{bmatrix} \langle u_p u_q \rangle & \langle u_p v_q \rangle \\ \langle v_p u_q \rangle & \langle v_p v_q \rangle \end{bmatrix}, & \kappa_{pq} = \langle \dot{\mathbf{s}}_p \dot{\mathbf{s}}_q \rangle &= \begin{bmatrix} \langle \dot{u}_p \dot{u}_q \rangle & \langle \dot{u}_p \dot{v}_q \rangle \\ \langle \dot{v}_p \dot{u}_q \rangle & \langle \dot{v}_p \dot{v}_q \rangle \end{bmatrix}, \\ \nu_{pq} = \langle \mathbf{s}_p \dot{\mathbf{s}}_q \rangle &= \begin{bmatrix} \langle u_p \dot{u}_q \rangle & \langle u_p \dot{v}_q \rangle \\ \langle v_p \dot{u}_q \rangle & \langle v_p \dot{v}_q \rangle \end{bmatrix}.\end{aligned}\quad (4.5)$$

Стоит отметить, что  $\xi_{pq} = \xi_{qp}^T$ ,  $\kappa_{pq} = \kappa_{qp}^T$ .

Дифференцируя систему (4.5), получаем следующие соотношения:

$$\dot{\xi}_{pq} = \nu_{pq} + \nu_{qp}^T, \quad \dot{\kappa} = \mathcal{L} \cdot \nu_{pq} + (\mathcal{L} \cdot \nu_{pq})^T, \quad \dot{\nu}_{pq} = \kappa + \xi_{pq} \cdot \mathcal{L}^T. \quad (4.6)$$

Повторное дифференцирование позволяет исключить смешанные ковариации и получить систему 2-го порядка относительно ковариаций перемещений и скоростей:

$$\ddot{\xi}_{pq} = 2\kappa_{pq} + \mathcal{L} \cdot \xi_{pq} + \xi_{pq} \cdot \mathcal{L}^T, \quad \ddot{\kappa}_{pq} = 2\mathcal{L} \cdot \xi_{pq} \cdot \mathcal{L}^T + \mathcal{L} \cdot \kappa_{pq} + \kappa_{pq} \cdot \mathcal{L}^T. \quad (4.7)$$

Выразив из первого уравнения (4.7)  $\kappa_{pq}$  и подставив во второе, получаем уравнение 4-го порядка для матрицы ковариаций перемещений:

$$\ddot{\xi}_{pq} - 2 \left( \mathcal{L} \cdot \ddot{\xi}_{pq} + \ddot{\xi}_{pq} \cdot \mathcal{L}^T \right) + \mathcal{L}^2 \cdot \xi_{pq} - 2\mathcal{L} \cdot \xi_{pq} \cdot \mathcal{L}^T + \xi_{pq} \cdot \mathcal{L}^{T^2} = 0. \quad (4.8)$$

Стоит отметить, что уравнению (4.8) также удовлетворяет  $\kappa_{pq}$ .

Начальные условия к уравнениям (4.6), (4.7), (4.8) определяются начальными скоростями и перемещениями частиц.

$$\xi_{pq} = \langle \mathbf{s}_p^0 \mathbf{s}_q^0 \rangle, \quad \kappa_{pq} = \langle \dot{\mathbf{s}}_p^0 \dot{\mathbf{s}}_q^0 \rangle, \quad \nu_{pq} = \langle \mathbf{s}_p^0 \dot{\mathbf{s}}_q^0 \rangle \quad (4.9)$$

Таким образом, для ковариаций, получаем замкнутую систему уравнений с *детерминированными* начальными условиями.

## 4.2 Обсуждения

В данной главе выработан подход к описанию стохастических процессов для системы с двумя степенями свободы. Показано, что необходимо рассматривать не скалярные, а матричные величины. Получено детерминированное уравнение для усредненных стохастических величин. На основании этого уравнения в дальнейшем могут быть получены уравнения, описывающие распространение тепла в подобных системах. Существенным вопросом дальнейших исследований является определение температуры. Для двухмерной решетки было показано, что температура является тензорной величиной и энергии распределяются независимо по степеням свободы. Также для диатомного кристалла было показано, что частицы с разными массами в стационарном процессе могут иметь разные температуры. Дальнейшее исследование уравнения (4.8) и нахождение его интегралов поможет найти определение температуры для подобных систем.

# Заключение

В работе рассматриваются особенности нестационарных процессов в одномерных гармонических кристаллах. Рассматривается аномальное уравнение теплопроводности, полученное в работе [26].

В Главе 1 получены и исследуются свойства решений для локализованных тепловых возмущений. Проводится сравнение полученных результатов с классическим уравнением теплопроводности. На примере полученных решений видно, что баллистическое распространение тепла имеет волновой характер, распространение тепловых волн происходит с конечной скоростью.

В Главе 2 проведено сравнение с решением точной дискретной задачи. Показано, что краевые эффекты, вызванные мгновенной скоростью возмущения, наблюдаются только на масштабах, сопоставимых с равновесным межатомным расстоянием. На масштабах, на которых гармонический кристалл может быть рассмотрен как сплошная среда, эти эффекты имеют незначительный характер и при рассмотрении определенных задач ими можно пренебречь.

Подобные процессы имеют как волновой, так и диффузионный характер. При этом уравнение баллистического распространения тепла является обратимым по времени (замена  $t$  на  $-t$  не изменяет уравнение). Полученные в Главе 3 результаты показали, что вообще говоря это не означает физическую необратимость. Для того, чтобы выяснить характер диффузии и меру необратимости было рассмотрено производство энтропии рассматриваемых процессов. Было показано, что классическая формулировка второго закона термодинамики приводит к противоречию в случае гиперболического и баллистического уравнений теплопроводности. Было показано, что для этих уравнений требуются дополнительные переменные состояния, которые учитывают тепловые потоки и время.

Приведенные результаты описывают свойства нестационарных тепловых процессов в одномерном гармоническом кристалле. Однако интересны для рассмотрения и более сложные модели такие как: двумерный кристалл, одномерный кристалл с частицами разной массы. Рассмотрение данных моделей имеет не только фундаментальный характер а может применяться для описания двухатомных кристаллов, или распределения энергий по внутренним степеням свободы (например по электронным степеням свободы). В Главе 4 был рассмотрен гармонический кристалл с внутренней массой. Получено детерминированное уравнение для ковариаций перемещений. В подобных системах температура может определяться отдельно для каждой степени свободы. Получение уравнений для распространения температур является темой для дальнейших исследований.

Автор благодарен Е.Н. Вильчевской, Е.А. Ивановой, В.А. Кузькину, В. Мюллеру,

А.Б. Фрейдину за полезные обсуждения.

# Литература

- [1] X. Zhang, D. Luo, G. Cui, Y. Wang, and B. Huang, “Construction of logic gate based on multi-channel carbon nanotube field-effect transistors,” in *2011 Third International Conference on Intelligent Human-Machine Systems and Cybernetics*, vol. 2, pp. 94–97, Aug 2011.
- [2] C. Chen, T. Jin, L. Wei, Y. Li, X. Liu, Y. Wang, L. Zhang, C. Liao, N. Hu, C. Song, and Y. Zhang, “High-work-function metal/carbon nanotube/low-work-function metal hybrid junction photovoltaic device,” *NPG Asia Mater*, vol. 7, pp. e220, 1–7, 10 2015.
- [3] R. Goldstein and N. Morozov, “Mechanics of deformation and fracture of nanomaterials and nanotechnology,” *Physical Mesomechanics*, vol. 10, no. 5–6, pp. 235 – 246, 2007.
- [4] B. Li, L. Wang, and G. Casati, “Thermal diode: Rectification of heat flux,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 93, p. 184301, Oct 2004.
- [5] E. Brown, L. Hao, J. C. Gallop, and J. C. Macfarlane, “Ballistic thermal and electrical conductance measurements on individual multiwall carbon nanotubes,” *Applied Physics Letters*, vol. 87, no. 2, p. 023107, 2005.
- [6] Z. Wang, J. A. Carter, A. Lagutchev, Y. K. Koh, N.-H. Seong, D. G. Cahill, and D. D. Dlott, “Ultrafast flash thermal conductance of molecular chains,” *Science*, vol. 317, no. 5839, pp. 787–790, 2007.
- [7] J. R. Cannon, *The One-Dimensional Heat Equation*. Cambridge University Press, 1984.
- [8] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, “Thermal conduction in classical low-dimensional lattices,” *Elsevier Science*, 2002.
- [9] T.-K. Hsiao, H.-K. Chang, S.-C. Liou, M.-W. Chu, S.-C. Lee, and C.-W. Chang, “Observation of room-temperature ballistic thermal conduction persisting over 8.3 micro meters in SiGe nanowires,” *Nat Nano*, vol. 8, pp. 534–538, 07 2013.
- [10] H. Zhang, C. Hua, D. Ding, and A. J. Minnich, “Length dependent thermal conductivity measurements yield phonon mean free path spectra in nanostructures,” *Scientific Reports*, vol. 5, pp. 9121 EP –, 03 2015.
- [11] C. W. Chang, D. Okawa, H. Garcia, A. Majumdar, and A. Zettl, “Breakdown of Fourier’s law in nanotube thermal conductors,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 075903, Aug 2008.



- [12] Z. Rieder, J. L. Lebowitz, and E. Lieb, “Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 8, no. 5, pp. 1073–1078, 1967.
- [13] C. Cattaneo, “Sur une forme de l’équation de la chaleur éliminant le paradoxe d’une propagation instantanée,” *Comptes Rendus*, vol. 247, pp. 431–433, 1958.
- [14] P. Vernotte, “Les paradoxes de la theorie continue de l’équation de la chaleur,” *Comptes Rendus*, vol. 246, pp. 3154–3155, 1958.
- [15] O. V. Gendelman and A. V. Savin, “Nonstationary heat conduction in one-dimensional chains with conserved momentum,” *Phys. Rev. E*, vol. 81, p. 020103, 2010.
- [16] A. Krivtsov, “Energy oscillations in a one-dimensional crystal,” *Doklady Physics*, pp. 427–430, 2014.
- [17] A. Krivtsov, “Heat transfer in infinite harmonic one dimensional crystals,” *Doklady Physics*, pp. 407–411, 2015.
- [18] A. Krivtsov, “On unsteady heat conduction in a harmonic crystal,” *ArXiv preprint*, p. 1509.02506, 2015.
- [19] M. Babenkov, A. Krivtsov, and D. Tsvetkov, “Energy oscillations in a one-dimensional harmonic crystal on an elastic substrate,” *PhysMesomech*, vol. 19, pp. 282–290, 2016.
- [20] V. Kuzkin and A. Krivtsov, “An analytical description of transient thermal processes in harmonic crystals,” *Physics of the Solid State*, no. 5, 2017.
- [21] K. V. Poletkin, G. G. Gurzadyan, J. Shang, and V. Kulish, “Ultrafast heat transfer on nanoscale in thin gold films,” *Applied Physics B*, vol. 107, no. 1, pp. 137–143, (2012).
- [22] A. D. Polyanin and V. E. Nazaikinskii, *Handbook of Linear Partial Differential Equations for Engineers and Scientists, Second Edition Handbook of Linear Partial Differential Equations for Engineers and Scientists, Second Edition*. Chapman and Hall/CRC, 2016.
- [23] I. Müller and W. H. Müller, *Fundamentals of Thermodynamics and Applications: With Historical Annotations and Many Citations from Avogadro to Zermelo*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009.
- [24] C. Hemmer, *Dynamic and Stochastic Types of Motion in the Linear Chain*. Nordita Publ. No. 32, 1959.
- [25] M. W. Sokolov A.A., Krivtsov A.M., “Localized heat perturbation in harmonic 1d crystals. solutions for an equation of anomalous heat conduction,” *ArXiv:1702.07855*., 2017.
- [26] А. Кривцов, “Распространение тепла в бесконечном одномерном гармоническом кристалле,” *Доклады Академии Наук*., vol. 464, pp. 162–166, 2015.
- [27] А. Кривцов, *Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой*. М.: Физматлит., 2007.

- [28] В. Пальмов, *Нелинейная механика деформируемых тел*. Изд-во Политехн. ун-та, 2014.
- [29] П. Жилин, *Рациональная механика сплошных сред*. Изд-во Политехн. ун-та., 2012.
- [30] А. Кривцов, “Динамика тепловых процессов в одномерных гармонических кристаллах. Вопросы математической физики и прикладной математики. Материалы семинара, приуроченного к 75-летию проф. Э.А. Троппа.,” *СПб.: Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе*, pp. 63–81, 30 сентября 2015.
- [31] А. Кривцов, “Колебания энергий в одномерном кристалле.,” *Доклады Академии Наук.*, vol. 458, no. 3, pp. 279–281, 2014.
- [32] А. Кривцов, “Микроканоническое распределение для одномерной цепочки..” Документ от 12.12.2013 – 08.01.2014. 32 стр.