

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Физико-механический институт
Высшая школа теоретической механики и математической физики

Работа допущена к защите
Директор ВШТМиМФ,
д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН
_____ А. М. Кривцов
«___» _____ 2024 г.

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

магистерская диссертация

НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ВОЛНОВЫЕ ПРОЦЕССЫ В ДИСКРЕТНЫХ И КОНТИНУАЛЬНЫХ СРЕДАХ

по направлению подготовки

01.04.03 Механика и математическое моделирование

направленность (профиль)

01.04.03_01 Механика деформируемого твердого тела

Выполнил
студент гр. 5040103/20101

И.Н. Трунова

Руководитель
директор ВШТМиМФ, д.ф.-м.н., доцент,
чл.-корр. РАН

А.М. Кривцов

Консультант
профессор ВШТМиМФ, д.ф.-м.н.

В.А. Кузькин

Санкт-Петербург – 2024

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО**
Физико-механический институт
Высшая школа теоретической механики и математической физики

УТВЕРЖДАЮ

Директор ВШТМиМФ

А.М.Кривцов

«__»_____20__г.

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

студенту Труновой Иоанне Николаевне

1. Тема работы: Нестационарные волновые процессы в дискретных и континуальных средах
2. Срок сдачи студентом законченной работы: 30.05.2024
3. Исходные данные по работе: актуальные научные публикации по теме, уравнения баллистической термоупругости, уравнения баланса энергии и потока энергии
4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов): построение фундаментального и общего решений задачи баллистической термоупругости; получение решений при различных начальных условиях
5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): не предусмотрено
6. Консультанты по работе: В.А. Кузькин, профессор ВШТМиМФ, д.ф.-м.н.
7. Дата выдачи задания 26.02.2024

Руководитель ВКР _____ А.М. Кривцов, директор ВШТМиМФ, д.ф.-м.н., доцент,
чл.-корр. РАН;

Задание принял к исполнению 26.02.2024

Студент _____ И.Н. Трунова

РЕФЕРАТ

На 102 с., 20 рисунков, 2 приложения.

БАЛЛИСТИЧЕСКАЯ ТЕРМОУПРУГОСТЬ, НЕЛИНЕЙНАЯ ЦЕПОЧКА, БАЛЛИСТИЧЕСКИЙ РЕЗОНАНС, ЦЕПОЧКА ЛЕННАРДА-ДЖОНСА, ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА, ДИСПЕРСИЯ ЭНЕРГИИ, СКАЛЯРНАЯ РЕШЕТКА

В работе получено общее и фундаментальное решение задачи баллистической термоупругости для нелинейной цепочки. Рассмотрены примеры начальных распределений температуры: ступенчатое и синусоидальное. Показано, что баллистический резонанс может наблюдаться в цепочке Леннарда-Джонса, а также в цепочке при начальном возмущении в виде синуса с огибающей.

С помощью методов энергетической динамики развит подход к описанию эволюции размера и формы локализованного возмущения, движущегося в упругой дискретной или континуальной среде.

THE ABSTRACT

102 pages, 20 pictures, 2 applications

BALLISTIC THERMOELASTICITY, NONLINEAR CHAIN, BALLISTIC RESONANCE, LENNARD-JONES CHAIN, ENERGY DYNAMICS, ENERGY DISPERSION, SCALAR LATTICE

The paper provides a general and fundamental solution to the ballistic thermoelasticity problem for a nonlinear chain. Examples of initial temperature distributions are considered: stepwise and sinusoidal. It is shown that ballistic resonance can be observed in the Lennard-Jones chain, as well as in the chain with an initial disturbance in the form of a sine with an envelope.

Using energy dynamics methods, an approach to describing the evolution of the size and shape of a localized disturbance moving in an elastic discrete or continuous medium has been developed.

Содержание

Введение	6
ГЛАВА 1. Баллистическая термоупругость нелинейных цепочек	8
1.1 Введение к главе 1	8
1.2 Уравнение движения цепочки и начальные условия	10
1.3 Уравнения баллистической термоупругости	11
1.3.1 Переход к макроскопическим уравнениям	11
1.3.2 Общее решение	13
1.3.3 Фундаментальное решение	14
1.4 Кусочно-линейное начальное распределение температуры	17
1.4.1 Ступенька. Континуальное решение	17
1.4.2 Ступенька. Дискретное решение для температуры	19
1.4.3 Влияние "наклона" ступеньки	24
1.5 Синусоидальное начальное распределение температуры	29
1.5.1 Баллистический резонанс в цепочке Леннарда-Джонса	30
1.5.2 Синус с огибающей	33
1.6 Заключение к главе 1	38
ГЛАВА 2. Дисперсия энергии при движении локализованного возмущения	40
2.1 Введение к главе 2	40
2.2 Уравнение движения среды	41
2.2.1 Дискретная среда	42
2.2.2 Континуальная среда	43
2.3 Энергетические характеристики: энергия, поток, суперпоток	44
2.3.1 Дискретная среда	46
2.3.2 Континуальная среда	47
2.4 Дисперсия энергии	48
2.5 Пример: волновой пакет	49
2.5.1 Волновой пакет в континуальной среде	49
2.5.2 Волновой пакет в дискретной среде	52

2.6	Дисперсия энергии: сравнение с численным моделированием . . .	60
2.6.1	Длинные волны	60
2.6.2	Короткие волны	63
2.7	Заключение к главе 2	64
	Заключение	68
	Список использованной литературы	73
	А Приложения к главе 1	74
	В Приложения к главе 2	89

Введение

Распространение волн в различных средах на микро- и наноуровне в последнее время привлекает внимание исследователей благодаря широкому спектру применений, включая контроль вибрации, развитие лазерной техники, создание ультразвукового оборудования, создание и изучение новых нано- и метаматериалов, в которых может проходить волновой перенос энергии [22, 50, 48, 32]. При анализе распространения волн подлежат обсуждению очень разные аспекты: распространение волн через границу раздела фаз [37, 43, 24], распространение волн в кристаллических решетках со сложной структурой [48, 12], исследование теплопроводности и термоупругости в цепочках и пространственных решетках [39]. Передача волновой энергии играет важную роль в электромагнитной, акустической, сейсмической и многих других областях [1, 55, 46, 20, 4, 5].

В настоящей работе решаются две задачи, связанные с волновым распространением энергии в дискретных и континуальных средах. Первая из них (глава) посвящена баллистической термоупругости нелинейных цепочек. Развивается аналитическое описание макроскопического теплового расширения в случае теплового удара для одномерной системы, в которой реализуется баллистический режим теплопроводности [18, 31, 3]. Получено общее решение, позволяющее найти поля перемещений и деформаций, возникающих вследствие теплового расширения, для произвольного начального профиля кинетической температуры. Рассматривается несколько примеров начальных температурных возмущений. Проводится сравнение полученных результатов с результатами численного моделирования динамики цепочки.

Вторая задача (глава 1.6) посвящена описанию движения локализованного возмущения в многомерной среде на основе методов энергетической динамики [32]. Такой подход позволяет получить представление о поведении локализованной волны без точного решения уравнения движения среды (волнового уравнения). Для этого вводятся и анализируются глобальные энергетические характеристики, которые дают возможность описать перемещение и эволюцию возмущения в целом, не прибегая к точному решению уравнения динамики среды. Данная работа является логическим продолжением статьи [7], где ис-

следовало движение энергетического сгустка как единого целого. В данной главе предлагается способ для описания изменения его формы и размеров во времени. Задача решается для континуальной и для дискретной среды.

Обзор литературы и более подробное введение к каждой из указанных задач приведены в начале соответствующих глав. Математические выкладки можно найти в приложениях в конце работы.

ГЛАВА 1. Баллистическая термоупругость нелинейных цепочек

1.1 Введение к главе 1

Исследование термоупругих эффектов в твердых телах является одной из актуальных задач современной механики. Макроскопическое поведение материалов описывается континуальной теорией термоупругости, предполагающей диффузионный перенос тепловой энергии (закон Фурье). Эта теория достаточно хорошо описывает теплопроводность материалов на макроуровне. Но недавние теоретические [41, 13, 9] и экспериментальные [11, 56, 21, 49, 19] исследования, показывают, что на микро- и наноуровне в некоторых материалах распространение тепла может не подчиняться закону Фурье. Изучение процессов на таких масштабах требует использования других моделей теплообмена. Одной из них является модель баллистического теплопереноса [18, 3], которая описывает волновое распространение тепла.

Баллистический режим теплопереноса аналитически описывается с помощью моделей идеальных кристаллах с линейными взаимодействиями между частицами, и такие модели довольно хорошо изучены. В [31] получено уравнение, описывающее баллистическую теплопроводность цепочки в континуальном пределе. В работе [52] эта задача решена для локализованных начальных температурных возмущений в одномерном гармоническом кристалле, показано отличие от соответствующих решений при классической теплопроводности. В [53] приводится сравнение решения, полученного из континуального уравнения баллистической теплопроводности [31, 27], с точным дискретным решением для кинетической температуры, полученным из уравнения динамики цепочки. Есть также работы, в которых модель баллистического теплопереноса обобщается на многомерные кристаллы [38] и кристаллы со сложной решеткой [36, 35].

Для описания теплового расширения и перехода механической энергии в тепловую линейных моделей недостаточно, и приходится учитывать нелинейность взаимодействия частиц. Такой подход позволяет получить классическое

уравнение термоупругости из дискретной модели цепочки, и установить связь между макроскопическими свойствами материала и параметрами цепочки [30]. Интерес к изучению термоупругости обусловлен еще и тем, что в некоторых физических экспериментах определение температуры материала основано в том числе на измерении искривления поверхности, возникающего из-за теплового расширения (метод *transient thermal grating*). Этот метод, описанный, например в работах [40, 54, 49, 19], опирается на стационарное уравнение термоупругости и не учитывает движение механических волн, вызванных тепловым воздействием. Возможно, такой подход применим в случае классической теплопроводности, где теплоперенос можно считать медленным процессом по сравнению с распространением упругих волн, но возникает вопрос, насколько оправдано это для систем, в которых реализуется баллистический режим теплопереноса. Аналитическое описание термоупругости в кристаллах может быть полезно для уточнения результатов таких экспериментов.

Не так много работ посвящено решению нестационарных задач термоупругости в кристаллических решетках. В работе [39] рассматривается цепочка с квадратичной нелинейностью — цепочка Ферми-Паста-Улама (α -FPU) [14]. Эта модель позволяет качественно описать тепловое расширение цепочки. В [39] аналитически решена задача баллистической термоупругости при синусоидальном и периодическом начальных профилях температуры. Обнаружено явление баллистического резонанса — неограниченный рост амплитуды механических колебаний, возникающий в результате начального температурного возмущения.

В настоящей работе результаты для слабонелинейной цепочки, полученные в [39], обобщены на случай произвольного начального температурного распределения. Получено общее и фундаментальное решение задачи баллистической термоупругости. Подробно рассмотрены два типа начальных условий для кинетической температуры: гладкий (в виде синуса с огибающей) и ступенчатый профиль. Первый тип интересен тем, что такое возмущение возможно сгенерировать в реальном эксперименте с помощью лазерных лучей (метод *transient thermal grating*) [40, 54, 49, 19]. Решается вопрос о том, будет ли наблюдаться баллистический резонанс в цепочке при учете ограниченности пятна, на котором задан начальный синус температуры. Решение термоупругой задачи для ступенчатого начального распределения приводит к неожиданному результату: на фронте волны возникают бесконечные деформации. Для устранения

этого эффекта решаются две вспомогательные задачи: в одной из них вместо уравнения баллистической теплопроводности для определения эволюции температуры используется дискретное решение, полученное в [53] при точном решении уравнения динамики цепочки. Во второй рассматривается более физичное кусочно-линейное начальное поле температур, которое при увеличении наклона линейного участка стремится к ступеньке.

1.2 Уравнение движения цепочки и начальные условия

В данном параграфе формулируются уравнение движения и начальные условия для цепочки, состоящей из N одинаковых частиц массы m , соединенных с ближайшими соседями нелинейными пружинками. Уравнение движения частицы с индексом n имеет вид

$$\begin{aligned} m\dot{v}_n &= F_n - F_{n-1}, \\ F_n &= \Pi'(a + \epsilon_n), \quad \epsilon_n = u_{n+1} - u_n, \end{aligned} \tag{1.1}$$

где u_n , v_n — перемещение и скорость частицы, F_n — сила, действующая на частицу n со стороны частицы $n + 1$, Π — потенциал взаимодействия, a — равновесное расстояние между частицами. При численном моделировании в данной работе применяется потенциал Леннарда-Джонса:

$$\Pi(r) = D \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right], \tag{1.2}$$

где D — энергия связи, r — расстояние между частицами. В отличие от потенциала α -FPU, который использовался в [39], потенциал Леннарда-Джонса не приводит к неустойчивости при разрыве связей (при больших деформациях).

Используются периодические граничные условия $u_n = u_{n+N}$ и начальные условия, соответствующие начальному полю температур $T_0(x)$

$$\begin{aligned} u_n &= 0, \quad v_n = \xi_n \sqrt{\frac{2k_B}{m} T_0(na)}, \\ \langle \xi_n \rangle &= 0, \quad \langle \xi_k \xi_n \rangle = \delta_{kn}, \end{aligned} \tag{1.3}$$

где ξ_n — некоррелированные случайные числа с нулевым математическим ожи-

данием и единичной дисперсией, δ_{kn} — дельта Кронекера. Такие условия соответствуют тепловому удару. Важно, что в начальный момент времени потоки энергии в цепочке отсутствуют. Заметим, что начальная температура в дискретных начальных условиях (1.3) предполагается в два раза большей, чем в континуальной постановке, которая будет обсуждаться дальше. Это связано с тем, что при выравнивании энергий половина кинетической энергии цепочки переходит в потенциальную [31, 27, 38]. Дальше при выводе континуальных уравнений этот быстрый процесс не учитывается.

В следующем разделе излагаются основные идеи перехода к макроскопическому описанию движения цепочки. Формулируется задача баллистической термоупругости, строятся ее общее и фундаментальное решения.

1.3 Уравнения баллистической термоупругости

1.3.1 Переход к макроскопическим уравнениям

В данном параграфе определяются макроскопические величины, характеризующие движение цепочки, и приводятся уравнения, описывающие термоупругость цепочки в континуальном пределе. Будем разделять механические и тепловые перемещения частиц [33]. Механическими назовем движения, соответствующие математическому ожиданию перемещений. Макроскопическое поле перемещений $u(x, t)$ определяют таким образом, чтобы в точках, соответствующих частицам, оно совпадало с математическим ожиданием перемещений частицы:

$$u(na, t) = \langle u_n \rangle, \quad (1.4)$$

где $\langle \dots \rangle$ — математическое ожидание (при моделировании заменяется на среднее по реализациям). Тепловое перемещение \tilde{u}_n определяется как разность между полным и механическим перемещениями:

$$\tilde{u}_n = u_n - \langle u_n \rangle. \quad (1.5)$$

Аналогично разделяются скорости частиц. В отличие от механических перемещений тепловые являются случайными величинами. Кинетическая температура

$T(na)$ частицы n определяется соотношением

$$k_B T(na, t) = m \langle \tilde{v}_n^2 \rangle, \quad (1.6)$$

где k_B — постоянная Больцмана, $\tilde{v}_n = v_n - \langle v_n \rangle$ — тепловая составляющая скорости частицы n .

Переход к континуальному описанию предполагает, что рассматриваемые поля перемещений и скоростей являются медленно меняющимися функциями координаты. Используется стандартное уравнение термоупругости

$$\ddot{u} = c_s^2 (u'' - \beta T'), \quad (1.7)$$

где c_s — скорость звука, β — коэффициент теплового расширения. Отметим, что уравнение (1.7) может быть получено из дискретной модели с помощью континуализации уравнений динамики и баланса энергии [30]. Основные идеи этого вывода приведены в приложении А.1. Уравнение (1.7) не замкнуто, так как в него входит неизвестная функция $T(x, t)$. Для определения поля температуры будем использовать решение [31, 27]:

$$T(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} T_0(x + v_g(p)t) dp, \quad (1.8)$$

где $T_0(x)$ — начальное поле температуры, v_g — групповая скорость цепочки. Формула (1.8) описывает изменение температуры в линейной цепочке с начальными условиями (1.3). Но в [39] показано, что при небольших временах уравнение (1.8) достаточно точно описывает эволюцию температуры и в слабонелинейной цепочке. В данной работе мы ограничимся рассмотрением цепочек, в которых учитывается взаимодействие только соседних частиц. В линейном приближении групповая скорость такой цепочки совпадает с групповой скоростью цепочки Гука¹. Групповая скорость такой цепочки имеет вид $v_g(p) = c_s \cos(p/2)$, где c_s — скорость звука, p — волновое число. Заметим также, что система уравнений (1.7), (1.8) не описывает переход механической энергии в тепловую. Этот переход является медленным по сравнению с иссле-

¹Под цепочкой Гука понимается цепочка, в которой сила взаимодействия соседних частиц линейно зависит от деформации связи между ними [32].

дваемыми волновыми процессами, поэтому на рассматриваемых временах его влияние незначительно [39].

В континуальной постановке используются начальные условия, соответствующие (1.3):

$$u(x, 0) = 0, \quad v(x, 0) = 0, \quad T(x, 0) = T_0(x). \quad (1.9)$$

Подчеркнем еще раз, что использование уравнения (1.8) предполагает отсутствие начальных тепловых потоков. Решение при ненулевых начальных полях перемещений и скоростей можно получить с помощью принципа суперпозиции (как сумму решения однородного уравнения с ненулевыми начальными условиями и решения неоднородного с нулевыми условиями).

Таким образом, макроскопическая термоупругость цепочки в случае теплового удара описывается уравнениями (1.7), (1.8). Ранее в [39] данная система была решена для синусоидального начального поля кинетической температуры (1.9). В настоящей работе будут найдены общее и фундаментальное решения задачи (1.7), (1.8) и рассмотрены различные случаи начальных условий (1.9).

1.3.2 Общее решение

В этом параграфе выводится общее решение задачи термоупругости (1.7), (1.8). Термоупругость нелинейной цепочки с взаимодействием ближайших соседей рассматривалась в работе [39], где для синусоидального начального профиля температуры

$$T_0(x) = T_b + \Delta T \sin qx, \quad (1.10)$$

было получено следующее решение задачи (1.7), (1.8) для перемещений:

$$u(x, t) = -\frac{\beta \Delta T}{q} \omega t J_1(\omega t) \cos qx, \quad (1.11)$$

где $q = 2\pi/\lambda$ — волновое число, λ — длина волны, $\omega = qc_s$, J_1 — функция Бесселя первого рода. Используя (1.11), получим общее решение для произвольной функции $T_0(x)$. Разложив $T_0(x)$ в интеграл Фурье и опираясь на решение (1.11)

и принцип суперпозиции, получим общее решение задачи термоупругости:

$$u(x, t) = \frac{\beta c_s}{\pi} \int_{-t}^t T_0(x - c_s \tau) \frac{\tau}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau. \quad (1.12)$$

Вывод формулы (1.12) приведен в приложении А.2. Решение (1.12) позволяет найти поле перемещений $u(x, t)$ при произвольном распределении начальной температуры $T_0(x)$. Замена $\tau/t = -\cos \frac{p}{2}$ в (1.12) приводит к следующей формуле для перемещений:

$$u(x, t) = -\frac{\beta t}{2\pi} \int_0^{2\pi} v_g(p) T_0(x + v_g(p)t) dp, \quad (1.13)$$

где $v_g(p)$ — групповая скорость цепочки Гука. Заметим, что интеграл в (1.12) (и в (1.13)) совпадает с интегралом в выражении для теплового потока [31].

Поле деформаций, соответствующее полю перемещений (1.13), выражается через производную начального профиля температуры:

$$\varepsilon(x, t) = \frac{\beta c_s}{\pi} \int_{-t}^t T_0'(x - c_s \tau) \frac{\tau}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau. \quad (1.14)$$

Видно, что если $T_0'(x) = \text{const}$ (начальное поле температур линейно), то деформаций в цепочке не возникает.

Таким образом, получено общее решение задачи баллистической термоупругости для нелинейной цепочки с взаимодействием ближайших соседей. Показано, что перемещение в каждой точке пропорционально локальному тепловому потоку. В следующем параграфе из общего решения выводится фундаментальное, а также исследуется его отличие от аналогичного решения задачи классической термоупругости, в которой используется уравнение теплопроводности Фурье.

1.3.3 Фундаментальное решение

В данном параграфе строится фундаментальное решение задачи баллистической термоупругости. Это решение описывает реакцию цепочки на мгновенный

точечный импульс.

Рассмотрим начальный профиль температуры в виде дельта-функции:

$$T_0(x) = A\delta(x), \quad (1.15)$$

где A — константа размерности $K \cdot m$, $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака. Вычисление интеграла (1.12) в этом случае дает

$$u(x/c_st) = \frac{A\beta}{\pi} \frac{x/c_st}{\sqrt{1 - (x/c_st)^2}}, \quad |x/c_st| < 1, \quad (1.16)$$

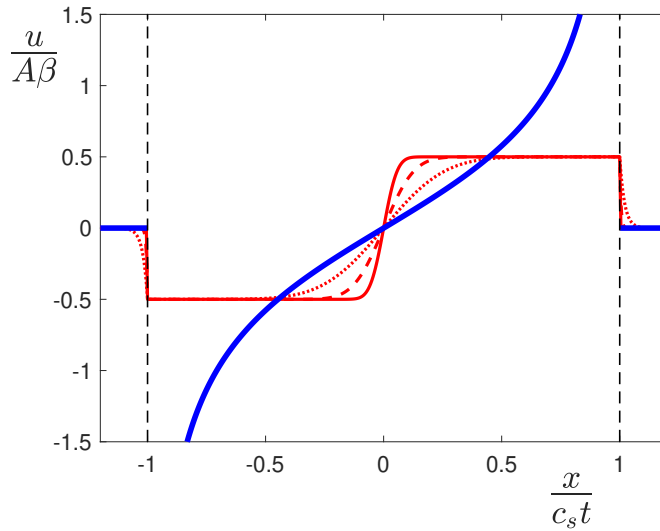
при $|x/c_st| \geq 1$ перемещения равны нулю. Видно, что решение (1.16) является автомодельным: $u(x, t)$ представляется как функция одной переменной x/c_st . Функция $u(x/c_st)$ имеет вертикальные асимптоты при $|x/c_st| = 1$. Дифференцирование $u(x/c_st)$ по x дает выражение для деформаций в цепочке:

$$\varepsilon(x/c_st, t) = \frac{A\beta}{\pi c_st} \frac{1}{(1 - (x/c_st)^2)^{\frac{3}{2}}}, \quad |x/c_st| < 1, \quad (1.17)$$

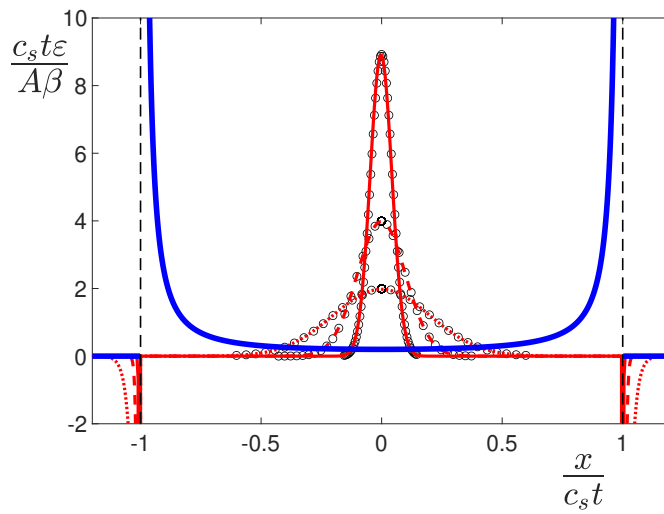
при $|x/c_st| \geq 1$ деформации равны нулю. В точке $x = 0$ деформации затухают со временем пропорционально $1/t$. Зависимости перемещений и деформаций от автомодельной переменной $x/(c_st)$ показаны синим цветом на рис. 1.1. В $x = 0$ находится минимум, и в основном деформации сосредоточены вблизи фронта волны. При $|x/(c_st)| = 1$ деформации стремятся к бесконечности. Данный факт связан с тем, что производная от температуры на фронте бесконечна. Более подробно зависимость решений от градиента температуры будет обсуждаться в параграфе 1.4.3.

Красным цветом на рис. 1.1 показано аналогичное решение для случая теплопроводности Фурье, полученное в Приложении А.4. Обезразмеривание уравнений классической термоупругости позволяет строить графики в тех же переменных, что и для баллистического режима (см. формулы (А.36), (А.37)). Черными кружками на рис. 1.1 показано решение стационарной системы термоупругости Фурье². При рассматриваемых (больших) временах оно совпадает с той частью решения динамической задачи, которая расположена вблизи точки начального возмущения. Это является важным отличием от баллистиче-

²То есть решение задачи $u'' = \beta T'$, $\dot{T} - \kappa^2 T'' = 0$, где κ^2 — коэффициент теплопроводности.



(a)



(b)

Рис. 1.1: Фундаментальное решение для поля перемещений (a) и деформаций (b) при баллистической теплопроводности (жирная синяя линия) и теплопроводности Фурье (красный цвет) при $t c_s^2 / \kappa^2 = 50$ (точки), 200 (пунктир), 1000 (сплошная линия), κ^2 — коэффициент температуропроводности. Черными кружками показаны решения соответствующих стационарных задач.

ской термоупругости, решение которой не может быть получено из статической постановки. Заметим также, что при теплопроводности Фурье максимальная механическая энергия, связанная с деформациями, находится в точке начального возмущения, а у фронта деформации равны нулю. На графике видно, что есть ненулевые деформации (и перемещения) за фронтом волны, это объясняется тем, что уравнение теплопроводности Фурье дает бесконечную скорость распространения тепла.

Таким образом, получено фундаментальное решение уравнения баллистической термоупругости. Его существенным отличием от аналогичного решения при теплопроводности Фурье является концентрация механической энергии, которая пропорциональна квадрату деформации, у фронтов волны. Это связано с тем, что скорости распространения тепловых и механических волн близки, в то время как в классическом случае теплоперенос является медленным процессом по сравнению с движением упругих волн, и в основном механическая энергия сосредоточена вблизи точки, где было задано начальное возмущение. Дальше также будет проведено сравнение решений при ступенчатом начальном профиле температуры.

1.4 Кусочно-линейное начальное распределение температуры

Целью данного раздела является описание поля перемещений и деформаций при ступенчатом начальном профиле температуры. Решение задачи (1.7), (1.8) приводит к выражению для деформаций, содержащему сингулярности на фронте волны. Предлагается два способа для устранения этой проблемы: использование точной зависимости поля температур от времени вместо приближенного континуального решения (1.8) и рассмотрение близкого к ступеньке, но более физического кусочно-линейного начального распределения температуры.

1.4.1 Ступенька. Континуальное решение

В этом параграфе рассматривается ступенчатый профиль начальной температуры:

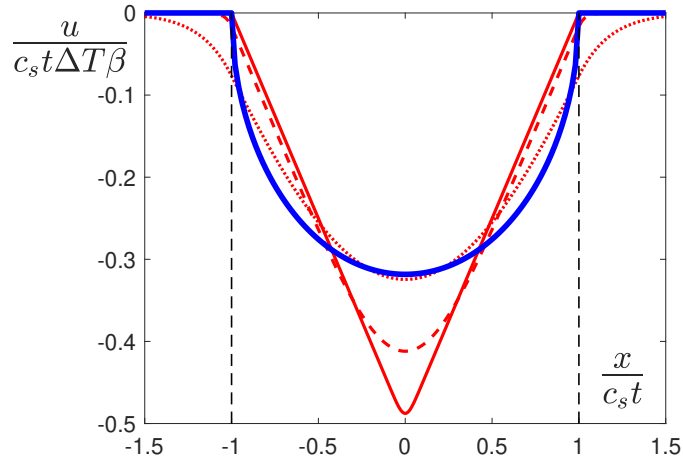
$$T_0(x) = T_b + \Delta T H(x), \quad (1.18)$$

где T_b — фоновая температура, ΔT — высота ступеньки, $H(x)$ — функция Хевисайда. Подставив (1.18) в интеграл (1.12), получим выражение для переме-

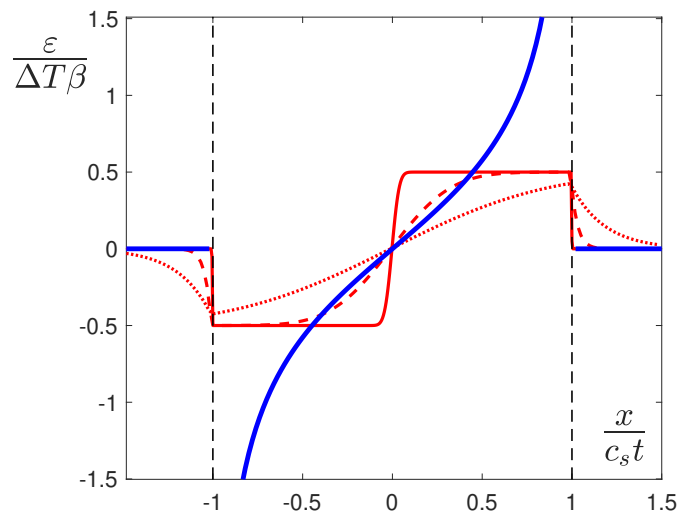
щений:

$$u(x/c_s t, t) = -\frac{\Delta T \beta c_s t}{\pi} \sqrt{1 - (x/c_s t)^2}, \quad |x/c_s t| < 1, \quad (1.19)$$

при $|x/c_s t| \geq 1$ перемещения равны нулю.



(a)



(b)

Рис. 1.2: Поля перемещений (a) и деформаций (b) для ступенчатого начального профиля температуры (1.18) при баллистической теплопроводности (жирная синяя линия) и теплопроводности Фурье (красный цвет) при $tc_s^2/\kappa^2 = 5$ (точки), 30 (пунктир), 2000 (сплошная линия).

Перемещение $u(x, t)$ представляется как функция $x/c_s t$ и времени. В каждый момент времени t решение является половиной эллипса с центром в точке $x = 0$ и полуосями $c_s t$ и $A\beta c_s t/\pi$. Интересно, что для теплопроводности Фурье автомодельное решение при большом времени имеет вид треугольника. Так же выглядит решение волнового уравнения для бесконечной струны под действием постоянной сосредоточенной постоянной силы. Это связано с тем, что темпера-

турное поле распространяется пропорционально \sqrt{t} , а фронт упругой волны – пропорционально t . Тогда при большом времени медленно распространяющееся тепловое возмущение можно рассматривать как точечное, расположенное в начале координат. В случае баллистической теплопроводности распространение тепловых и упругих волн происходит с близкими скоростями.

Перемещение в точке $x = 0$ растет пропорционально времени, как и в случае теплопроводности Фурье. Деформации зависят только от $x/c_s t$:

$$\varepsilon(x/c_s t) = \frac{\Delta T \beta}{\pi} \frac{x/c_s t}{\sqrt{1 - (x/c_s t)^2}}, \quad |x/c_s t| < 1, \quad (1.20)$$

в точках, где $|x/c_s t| \geq 1$, деформации равны нулю. Поля перемещений и деформаций показаны на рис.1.2. При $|x/c_s t| = 1$ график деформаций имеет вертикальные асимптоты, на фронте возникают бесконечные деформации. Такая особенность связана с тем, что зависимость $T(x, t)$, которую дает формула (1.8), имеет бесконечную производную при $x = c_s t$. Чтобы устранить этот эффект, в следующем параграфе вместо решения (1.8) рассмотрим дискретное решение для температуры, которое было получено в работе [53] при точном решении уравнения динамики линейной цепочки.

1.4.2 Ступенька. Дискретное решение для температуры

Аналитическое решение

В данном параграфе, как и в предыдущем, рассматривается ступенчатый начальный профиль температуры. Вместо уравнения (1.8), описывающего эволюцию температуры в континуальном пределе, используется точное дискретное поле температуры, полученное в [53] при решении уравнения динамики цепочки (1.1) с начальными условиями (1.18).

Точная зависимость температуры частицы с индексом n от времени имеет вид [53]:

$$T(na, t) = T_b + \Delta T \sum_{k=-2n}^{+\infty} J_k^2(2\omega_0 t), \quad (1.21)$$

где $\omega_0 = c_s/a$, J_k — функция Бесселя первого рода порядка k . Формула (1.21) имеет смысл для целых n . Чтобы обобщить ее на случай нецелых значений координаты, вместо функций Бесселя будем использовать функции Ангера $J_\nu(z)$

[16]:

$$J_\nu(z) = \int_0^\pi \cos(\nu\omega - z \sin \omega) d\omega. \quad (1.22)$$

При целых значениях индекса функция Ангера совпадает с функцией Бесселя. Полагая $n = x/a$, из (1.21) получим

$$T(x, t) = T_b + \Delta T \int_{-2x/a}^{+\infty} J_y^2(2\omega_0 t) dy. \quad (1.23)$$

Для решения уравнения термоупругости понадобится выражение для производной от температуры. Дифференцирование (1.23) по координате дает

$$T'(x, t) = \frac{2\Delta T}{a} J_{2x/a}^2(2\omega_0 t). \quad (1.24)$$

При известной зависимости $T(x, t)$, можно найти общее решение уравнения термоупругости (1.7) с помощью формулы Даламбера

$$u(x, t) = -\frac{\beta}{2c_s} \int_0^t \left(\int_{x-c_s(t-\tau)}^{x+c_s(t-\tau)} T'(y, \tau) dy \right) d\tau. \quad (1.25)$$

Дифференцирование $u(x, t)$ по x дает общее решение для поля деформаций:

$$\varepsilon(x, t) = -\frac{\beta}{2c_s} \int_0^t \left[T'(x + c_s(t - \tau), \tau) - T'(x - c_s(t - \tau), \tau) \right] d\tau. \quad (1.26)$$

Искомое решение для деформаций получается при подстановке (1.24) в (1.26). Поле деформаций антисимметрично по координате ($\varepsilon(-x) = -\varepsilon(x)$), его вид при положительных x показан на рис. 1.3. Видно, что максимум деформаций находится вблизи фронта волны. Бесконечных деформаций в этом случае не возникает, но максимальная деформация растет со временем.

Заметим, что максимальная деформация достигается не на фронте волны, а при немного меньшей координате ($x < c_s t$). Рассмотрим, как на больших

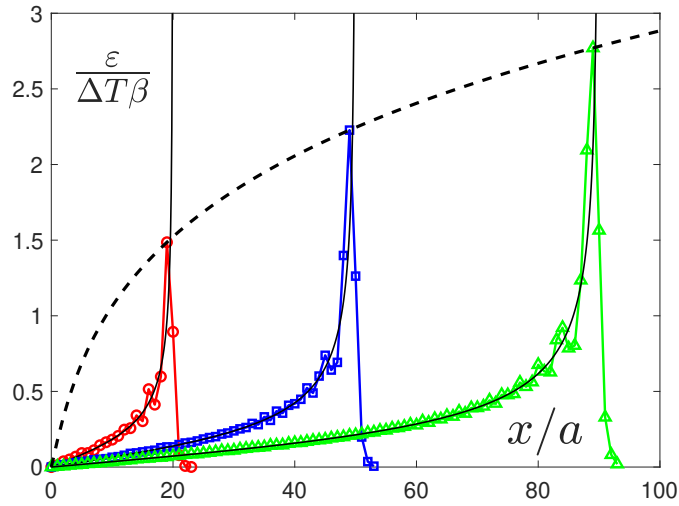


Рис. 1.3: Поле деформаций (1.26) при ступенчатом начальном распределении температуры в моменты времени $\omega_0 t = 20$ (красные круги), 50 (синие квадраты), 90 (зеленые треугольники). Черными сплошными линиями показаны соответствующие непрерывные решения (1.20). Черной пунктирной линией показана огибающая для максимумов деформаций.

временах меняется деформация на фронте. Подстановка $x = c_s t$ в (1.26) дает

$$\varepsilon(c_s t, t) = -\frac{\beta}{2c_s} \int_0^t \left[T'(c_s(2t - \tau), \tau) - T'(c_s \tau, \tau) \right] d\tau. \quad (1.27)$$

Зависимость $T'(x, t)$ имеет максимум вблизи $x = c_s t$, и близка к нулю при $x > c_s t$, поэтому основной вклад в интеграл (1.27) вносит второе слагаемое. Используя асимптотическое приближение для функции Ангера с равными индексами и аргументом [47]

$$J_x(x) \approx \frac{\Gamma(\frac{1}{3})}{2^{\frac{2}{3}} 3^{\frac{1}{6}} \pi x^{\frac{1}{3}}}, \quad (1.28)$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция, преобразуем второе слагаемое в интеграле (1.27):

$$T'(c_s \tau, \tau) = \frac{2\Delta T}{a} J_{2\omega_0 \tau}^2(2\omega_0 \tau) \approx B(2\omega_0 \tau)^{-\frac{2}{3}}, \quad (1.29)$$

$$B = \frac{2\Delta T}{2^{\frac{4}{3}} 3^{\frac{1}{3}} \pi^2 a} \Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right).$$

Пренебрегая вкладом первого слагаемого в интеграл (1.27), после интегрирования получим

$$\varepsilon(c_s t, t) \approx \frac{\beta}{12c_s \omega_0} B(2\omega_0 t)^{\frac{1}{3}}. \quad (1.30)$$

Формула (1.30) показывает, что деформация на фронте растет как $t^{1/3}$. Отметим еще раз, что максимальная деформация достигается не в этой точке, но численный расчет по формуле (1.26) подтверждает, что и рост максимума, находящегося вблизи фронта, при больших временах имеет степенной характер с показателем $1/3$.

Таким образом, было получено описание для поля деформаций в цепочке, основанное на точном (дискретном) решении для температуры. Показано, что деформации конечны в любой момент времени, но максимальная деформация растет со временем как $t^{1/3}$. Далее будет рассмотрено сравнение полученного решения с численным моделированием динамики цепочки.

Численный эксперимент

В данном параграфе приводятся результаты численного моделирования динамики цепочки (1.1) при ступенчатом начальном распределении температуры (1.3), (1.18). Взаимодействие между частицами описывается потенциалом Леннарда-Джонса. Связь микро- и макропараметров модели:

$$\begin{aligned} c_s &= a\sqrt{\frac{C}{m}}, & \rho &= \frac{m}{a}, & E &= Ca, & \beta &= -\frac{\Gamma k_B}{Ea}, \\ C &= \Pi''(a) = 72\frac{D}{a^2}, & \Gamma &= -\frac{\Pi'''(a)}{a\Pi''(a)} = 10.5, \end{aligned} \quad (1.31)$$

где ρ — плотность, C — жесткость связи, E — модуль Юнга, Γ — параметр Грюнайзена [33, 25].

Для вычисления макроскопических характеристик используется осреднение по большому числу N_r реализаций цепочки со случайными начальными условиями. На каждой реализации уравнение движения решается численно с помощью симплектического интегратора четвертого порядка [10] с оптимизированными параметрами [44]. Шаг по времени во всех расчетах равен $\Delta t = 0.05\tau_*$, $\tau_* = 2\pi\sqrt{m/C}$. Используются периодические граничные условия и начальные условия (1.3). Ступенька задается в середине цепочки:

$$T_0(an) = T_b + \Delta T H\left(n - \frac{N}{2}\right). \quad (1.32)$$

Время моделирования t_{\max} и длина цепочки N выбираются таким образом, что-

бы возмущения, идущие от центра и от границ цепочки, не успевали встретиться, т.е. $Na > 4c_s t_{\max}$. Используются следующие значения параметров:

$$\begin{aligned} t_{\max}/\tau_* = 50, \quad \Delta T/T_b = 0.1, \quad T_b/D = 0.01, \\ N = 1500, \quad N_r = 6 \cdot 10^6, \end{aligned} \tag{1.33}$$

где T_b — фоновая температура.

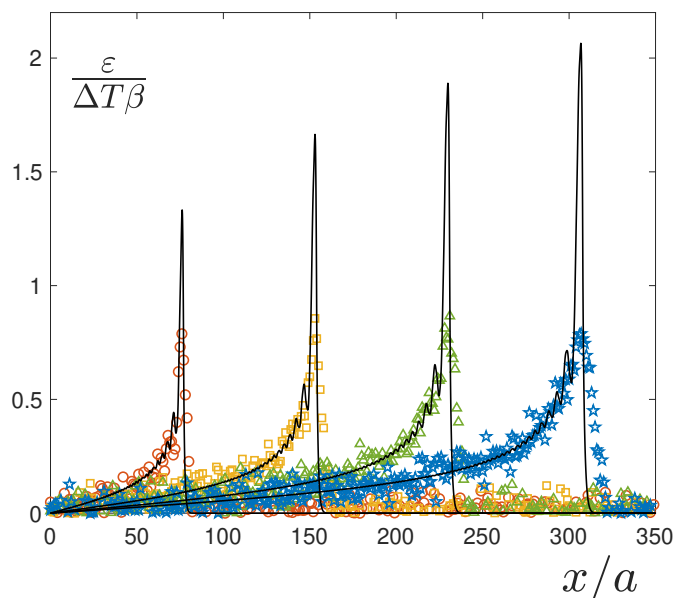


Рис. 1.4: Поле деформаций при ступенчатом распределении начальной температуры (1.32) в разные моменты времени: $\omega_0 t = 77$ (красные круги), 154 (желтые квадраты), 231 (зеленые треугольники), 308 (синие звездочки). Черными сплошными линиями показаны соответствующие аналитические решения (1.26).

Полученное поле деформаций антисимметрично ($\varepsilon(-x, t) = -\varepsilon(x, t)$), поэтому на графиках показаны только положительные значения координат. На рис. 1.4 видно, что графики хорошо совпадают вдали от фронта волны, но на фронте и перед ним заметна существенная разница. Кроме того, в отличие от аналитического решения, в численном эксперименте максимум деформаций сначала растет, а затем выходит на постоянное значение. Таким образом, учет дискретности цепочки в уравнении для температуры устраняет бесконечные деформации и хорошо описывает поле деформаций вдали от фронта, но не дает точного совпадения аналитики с экспериментом вблизи фронтов волны. Это может быть связано с тем, что при ступенчатом начальном профиле производная от температуры, входящая в уравнение термоупругости, очень велика вблизи фронта. Поэтому в следующем параграфе исследуется влияние величи-

ны начального градиента температуры на поведение поля деформаций. Вместо начальной ступеньки предлагается задавать линейный участок температуры на небольшом интервале.

1.4.3 Влияние "наклона" ступеньки

В данном параграфе предпринимается попытка определить условия применимости модели (1.7), (1.8) для больших градиентов температур. Вместо ступенчатого задается кусочно-линейный профиль температуры, в пределе (при увеличении угла наклона) совпадающий со ступенькой. В работе [29] рассматривалось поведение поля температуры вблизи фронта при локализованных начальных возмущениях. Было показано, что при наличии разрыва в начальных условиях температура имеет бесконечную производную на фронте независимо от конкретной формы начального профиля. Рассматриваемые в настоящей работе условия не являются локализованными, но тепловая волна, идущая от точки скачка, также имеет бесконечную производную на фронте, а сглаженная ("наклонная") ступенька даст ограниченную производную. Поэтому можно ожидать, что и деформации получатся конечными. Также проводится исследование точности совпадения аналитики с численным экспериментом в зависимости от начального градиента температуры.

Аналитическое решение

Итак, пусть начальное распределение температуры имеет вид

$$T_0(x) = \begin{cases} T_b, & x \leq -l, \\ T_b + \frac{\Delta T}{2} \left(1 + \frac{x}{l}\right), & -l < x < l, \\ T_b + \Delta T, & x \geq l, \end{cases} \quad (1.34)$$

где l — половина отрезка, на котором температура распределена линейно. При $l = 0$ (1.34) совпадает со ступенчатым распределением (1.18), а при $l \neq 0$ функция $T_0(x)$ (1.34) не имеет бесконечных производных, а значит в решении термоупругой задачи не возникнет бесконечных деформаций.

Подстановка (1.34) в (1.14) дает при $x > 0$, $t < l/c_s$

$$\varepsilon(x, t) = \begin{cases} \frac{\Delta T \beta c_s t}{2\pi l} \sqrt{1 - \left(\frac{x-l}{c_s t}\right)^2}, & |x-l| < c_s t, \\ 0, & |x-l| \geq c_s t, \end{cases} \quad (1.35)$$

при $t > l/c_s$:

$$\varepsilon(x, t) = \begin{cases} \frac{\Delta T \beta c_s t}{2\pi l} \left[\sqrt{1 - \left(\frac{x-l}{c_s t}\right)^2} - \sqrt{1 - \left(\frac{x+l}{c_s t}\right)^2} \right], & x \leq c_s t - l, \\ \frac{\Delta T \beta c_s t}{2\pi l} \sqrt{1 - \left(\frac{x-l}{c_s t}\right)^2}, & c_s t - l < x < c_s t + l, \\ 0, & x \geq c_s t + l. \end{cases} \quad (1.36)$$

Решение при отрицательных x можно получить, используя антисимметричность поля деформаций $\varepsilon(-x, t) = -\varepsilon(x, t)$. Вычисление предела при $l \rightarrow 0$ от функции (1.36) приводит к выражению для деформаций (1.20), которое было получено для ступенчатого начального профиля температуры. При $t < l/c_s$ поле

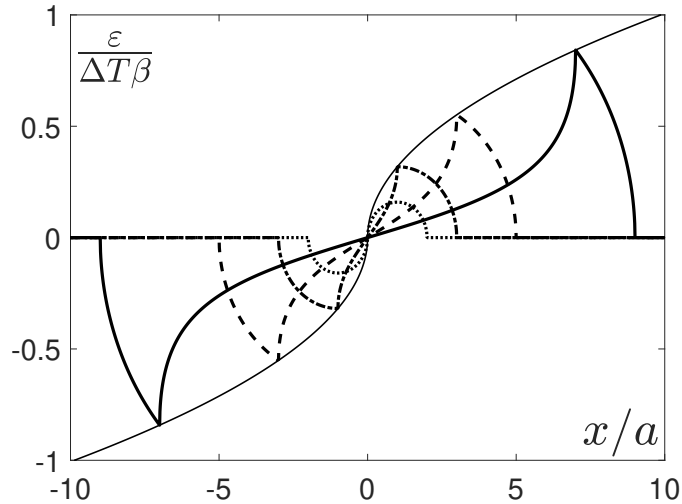


Рис. 1.5: Поле деформаций (1.36) при кусочно-линейном начальном распределении (1.34) при $l/a = 1$. Показаны моменты времени $\omega_0 t = 1$ (точки), 2 (штрихпунктир), 4 (пунктир), 8 (жирная сплошная линия). Тонкой сплошной линией показана огибающая для максимумов (1.37).

деформаций при положительных x выглядит как половина эллипса с центром в

точке $x = l$, в момент $t = l/c_s$ волны, идущие от левой и правой границ возмущения встречаются, и дальше на кривой $\varepsilon(x, t)$ в точке $x = c_s t - l$ появляется излом, вскоре превращающийся в острый максимум, который перемещается в положительном направлении со скоростью c_s .

Найдем кривую, по которой движется этот максимум с течением времени. Для этого подставим $t = (x + l)/c_s$ в выражение (1.36) и получим уравнение огибающей:

$$\varepsilon_e(x) = \frac{\beta \Delta T}{\pi \sqrt{l}} \sqrt{x}. \quad (1.37)$$

Посмотрим, как изменяется со временем решение в точке максимума $x = c_s t - l$. Подстановка этой координаты в (1.37) при $t > l/c_s$ дает

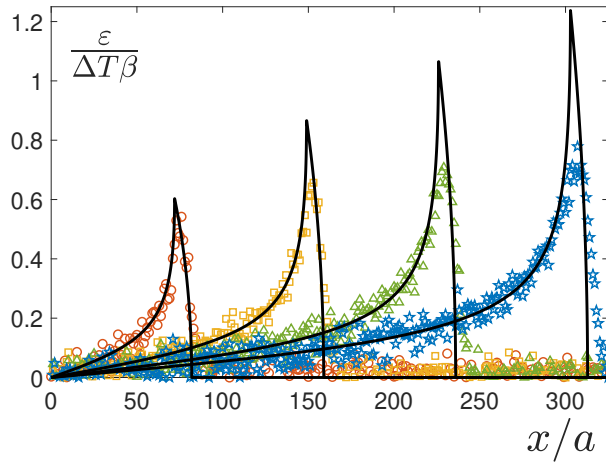
$$\varepsilon(c_s t - l, t) = \frac{\beta \Delta T}{\pi \sqrt{l}} \sqrt{c_s t - l}. \quad (1.38)$$

Таким образом, описанный подход дает ограниченное поле деформаций. При больших временах максимальная деформация растет как \sqrt{t} . Заметим, что коэффициент перед \sqrt{t} пропорционален $1/\sqrt{l}$, т.е. чем круче наклон линейного участка, тем быстрее растет максимальная деформация. В следующем параграфе полученное решение сравнивается с результатами численного моделирования динамики цепочки. Исследуется влияние начального градиента температуры на точность совпадения эксперимента с аналитикой.

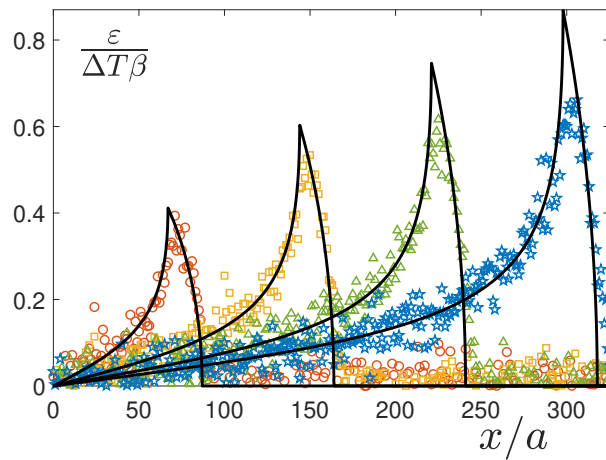
Численный эксперимент

При моделировании используются начальные условия (1.3), при которых линейный участок распределения температуры задается в середине цепочки:

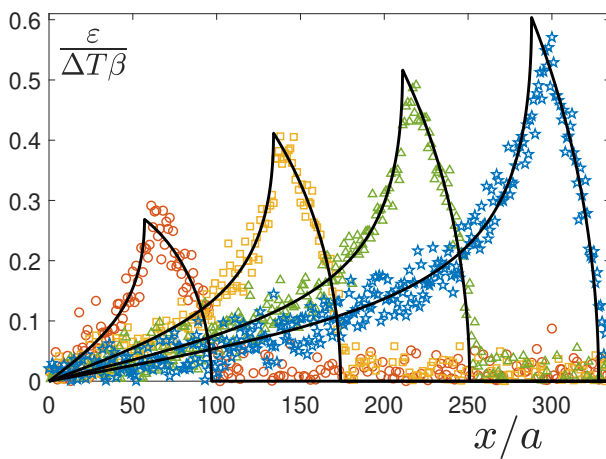
$$T_0(na) = \begin{cases} T_b, & n \leq \frac{N}{2} - l, \\ T_b + \frac{\Delta T}{2} \left(1 + \frac{n - N/2}{l} \right), & \frac{N}{2} - l < n < \frac{N}{2} + l, \\ T_b + \Delta T, & n \geq \frac{N}{2} + l, \end{cases} \quad (1.39)$$



(a)



(b)



(c)

Рис. 1.6: Поля деформаций при кусочно-линейном начальном распределении (1.39) при $l/a = 5$ (a), 10 (b) и 20 (c). Показаны моменты времени $\omega_0 t = 77$ (красные круги), 154 (желтые квадраты), 231 (зеленые треугольники), 308 (синие звездочки). Черными линиями показаны соответствующие аналитические решения (1.36).

где N — число частиц. Время моделирования t_{\max} и число частиц N выбираются таким образом, чтобы возмущения, идущие от центра и от границ цепочки, не успевали встретиться, т.е. $Na > 4(c_s t_{\max} + l)$. Используются следующие значения параметров:

$$\begin{aligned} t_{\max}/\tau_* = 50, \quad \Delta T/T_b = 0.1, \quad T_b/D = 0.01, \\ N = 1500, \quad N_r = 10^7. \end{aligned} \quad (1.40)$$

На рис. 1.6 показаны поля деформаций в разные моменты времени. Цветные точки — результат моделирования, черные линии — континуальное решение. Видно, что вдали от фронта решения совпадают. Около фронта аналитическое решение имеет острый максимум, на численном решении также наблюдается максимум деформаций на фронте, однако он меньше и не имеет выраженного излома. Это различие может быть связано с тем, что в аналитическом решении (в уравнении для температуры) не учитывается нелинейность взаимодействия частиц, которая присутствует в численной модели. Как было показано выше, аналитическое решение предсказывает неограниченный рост максимальной деформации. Увеличение деформаций связано с переходом тепловой энергии в механическую.

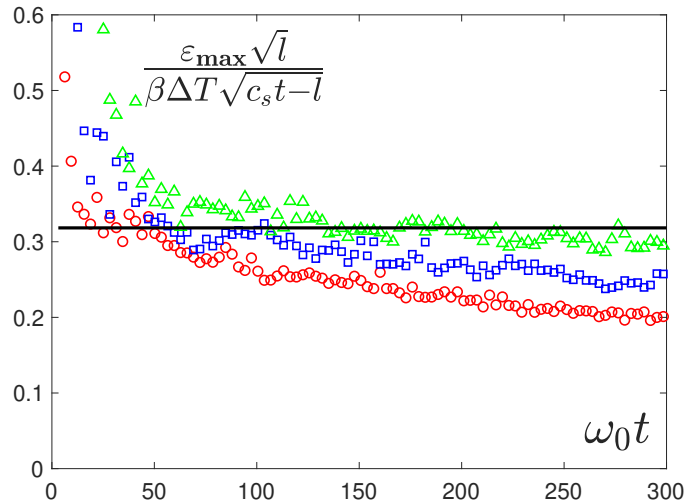


Рис. 1.7: Максимальная деформация при разных начальных наклонах ступеньки: $l/a = 5$ (красные круги), 10 (синие квадраты), 20 (зеленые треугольники). Черной линией показано аналитическое решение.

На рис. 1.7 показано влияние начального наклона ступеньки на точность аналитического решения. Сильное отличие при $\omega_0 t < 50$ объясняется тем, что при небольших временах максимум деформаций находится на одном уровне с «шу-

мом», связанным с недостаточным числом реализаций. Также при малых $\omega_0 t$ на численном решении может сказываться быстрый переходный процесс выравнивания кинетической и потенциальной энергий. Дальше на рис. 1.7 видно, что при меньшем начальном градиенте температуры результат расчетов лучше совпадает с теоретической кривой.

Итак, показано, что ступенчатый начальный профиль температуры приводит к бесконечным деформациям в континуальном решении задачи баллистической термоупругости. Это связано с тем, что поле температуры в каждый момент времени имеет бесконечную производную на фронте. Учет дискретности цепочки в выражении для температуры позволяет получить ограниченное поле деформаций, но не дает точного совпадения с экспериментом. Для оценки области применимости теоретической модели (1.7), (1.8) рассмотрено кусочно-линейное поле начальной температуры. Показано, что уменьшение наклона линейного участка (начального градиента температуры) приводит к более хорошему совпадению. Таким образом, система (1.7), (1.8) не способна точно описывать термоупругость цепочки при больших градиентах температур. Полученные результаты могут использоваться для развития градиентных теорий упругости и термоупругости (см. например [45, 2]).

1.5 Синусоидальное начальное распределение температуры

В данном разделе рассматривается синусоидальное распределение начальной температуры. В работе [39] для цепочки α -FPU было показано, что такое начальное тепловое возмущение приводит к неограниченному росту амплитуды механических колебаний. Это явление было названо баллистическим резонансом. В настоящей работе приводятся другие примеры задач, в которых также наблюдается этот эффект. В параграфе 1.5.1 решается вопрос о том, будет ли наблюдаться баллистический резонанс в цепочке Леннарда-Джонса. В параграфе 1.5.2 начальное поле температур задается не по всей длине цепочки, а на конечном интервале (на синусоиду накладывается огибающая), и рассматривается поведение поля перемещений в области начального возмущения.

1.5.1 Баллистический резонанс в цепочке Леннарда-Джонса

Рассматривается синусоидальное распределение начальной температуры. В работе [39] для цепочки α -FPU проводилось сравнение аналитического решения с численным моделированием динамики цепочки α -FPU, в которой потенциал взаимодействия имеет вид

$$\Pi(r) = \frac{1}{2}C(r - a) + \frac{1}{3}\alpha(r - a)^3, \quad (1.41)$$

где C — жесткость, α — коэффициент нелинейности. В рамках рассматриваемой аналитической модели (1.7), (1.8) задачи с различными потенциалами не отличаются. Интерес представляет сравнение результатов моделирования для цепочки α -FPU и более сложной системы — цепочки Леннарда-Джонса. В нашей работе проводится численный эксперимент для цепочки с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса.

Итак, для начального профиля температуры $T_0(x) = T_b + \Delta T \sin qx$ известно решение задачи баллистической термоупругости, полученное в [39]:

$$u(x, t) = z(t) \cos qx, \quad z(t) = -\frac{\beta\Delta T}{q}\omega t J_1(\omega t), \quad (1.42)$$

где $\omega = qc_s$, J_1 — функция Бесселя первого рода. Асимптотическое поведение при больших временах ($\omega t \rightarrow \infty$) описывается формулой

$$z(t) \approx -\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\beta\Delta T}{q}\sqrt{\omega t} \cos(\omega t - 3\pi/4). \quad (1.43)$$

Поле перемещений остается синусоидальным, при этом амплитуда растет со временем как \sqrt{t} . Механическую энергию цепочки (энергию, приходящуюся на одну длину волны) можно найти по формуле

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2L} \int_0^L (\rho v^2 + Eu^2) dx = \mathcal{E}_* \omega^2 t^2 (J_0^2 + J_1^2), \quad (1.44)$$

где $L = 2\pi/q$ — длина волны, ρ — плотность, $\mathcal{E}_* = E\beta^2\Delta T^2/4$, E — модуль

Юнга. При больших временах механическая энергия растет линейно:

$$\mathcal{E}(t) = \frac{2\mathcal{E}_*}{\pi}\omega t. \quad (1.45)$$

Это происходит из-за перехода тепловой энергии в механическую. На рисунках 1.8 и 1.9 показаны зависимость амплитуды колебаний и механической энергии цепочки от времени, полученные при моделировании взаимодействия частиц с помощью потенциала Леннарда-Джонса и потенциала α -FPU. Расчеты проводились при следующих значениях параметров:

$$t_{\max}/\tau_* = 1.4 \cdot 10^4, \quad N = 10^3, \quad N_r = 10^4. \quad (1.46)$$

Параметры цепочек подобраны таким образом, чтобы влияние нелинейности в обеих моделях было одинаковым. Как показано в приложении А.6, для этого необходимо выполнение условий

$$\frac{\Delta T^{(\alpha)}}{T_b^{(\alpha)}} = \frac{\Delta T^{(LJ)}}{T_b^{(LJ)}}, \quad \frac{\alpha a}{C} \sqrt{\frac{k_B T_b^{(\alpha)}}{C a^2}} = -\frac{7}{4\sqrt{2}} \sqrt{\frac{k_B T_b^{(LJ)}}{D}}. \quad (1.47)$$

То есть для цепочки α -FPU нелинейность характеризуется двумя безразмерными параметрами $\alpha a/C$ и $\sqrt{k_B T_b^{(\alpha)}/C a^2}$, а для цепочки Леннарда Джонса — одним параметром $\sqrt{k_B T_b^{(LJ)}/D}$. В расчете использовались значения

$$\frac{\Delta T}{T_b} = 0.1, \quad \frac{\alpha a}{C} = -1, \quad \sqrt{\frac{k_B T_b^{(\alpha)}}{C a^2}} = 0.1. \quad (1.48)$$

Видно, что на рассматриваемых временах графики качественно совпадают. Амплитуда механических колебаний и механическая энергия растут со временем. Достигнув максимального значения, зависящего от нелинейности взаимодействия, энергия начинает монотонно убывать к нулю из-за перехода механической энергии в тепловую. Как видно на рис. 1.9, в цепочках Леннарда-Джонса и α -FPU этот переход отличается слабо. Уравнениями (1.7), (1.8) данный процесс не описывается. Интересно, что в случае теплопроводности Фурье механическая энергия растет ограниченно (см. приложение А.4) и выходит на

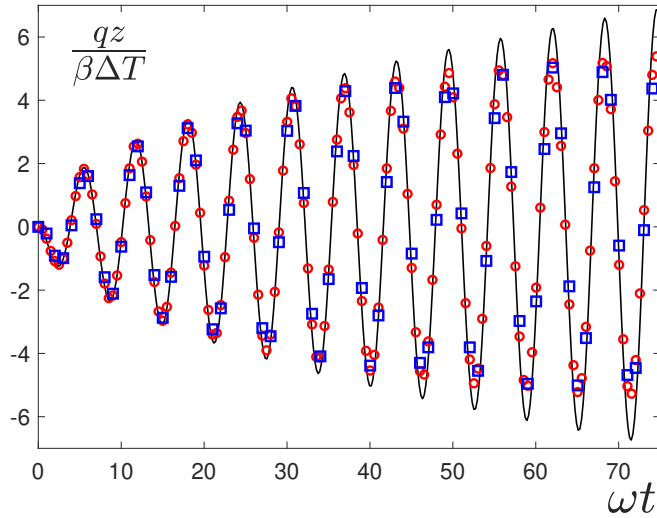


Рис. 1.8: Амплитуда перемещений $z(t)$ при синусоидальном начальном профиле температуры. Черная линия — аналитическое решение (1.42), красные круги — цепочка Леннарда-Джонса, синие квадраты — цепочка α -FPU.

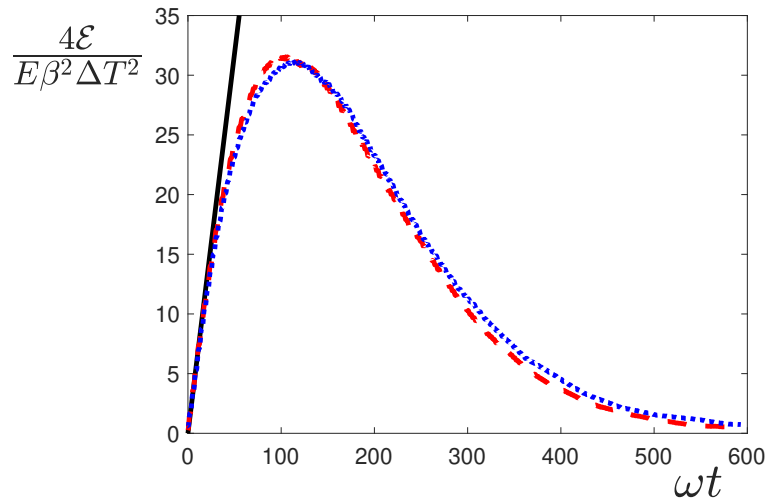


Рис. 1.9: Зависимость механической энергии от времени при синусоидальном начальном профиле температуры. Черная линия — аналитическое решение (1.45), красная пунктирная — цепочка Леннарда-Джонса, синяя точечная — цепочка α -FPU.

постоянное значение

$$\mathcal{E}(\infty) = \frac{E\beta^2\Delta T^2}{4(q^2\kappa^4/c_s^2 + 1)}, \quad (1.49)$$

где κ^2 — коэффициент температуропроводности.

Таким образом, было показано, что в цепочке Леннарда-Джонса наблюдается баллистический резонанс. При одинаковой степени нелинейности и рост механической энергии, и обратный ее переход в тепловую происходят практически одинаково в цепочках Леннарда-Джонса и α -FPU. В следующем разделе исследуется баллистический резонанс при начальном тепловом возмущении в виде синуса, заданного на ограниченном участке цепочки.

1.5.2 Синус с огибающей

В данном параграфе рассматривается синусоидальный профиль температуры, заданный на конечном интервале, т.е. на синусоиду накладывается огибающая, и предполагается, что под ней помещается много длин волн. Такие начальные условия интересны тем, что они могут быть получены в реальных экспериментах, например при использовании метода transient thermal grating [40]. Итак, рассмотрим начальную температуру

$$T_0(x) = T_b + A(x) \sin(qx), \quad (1.50)$$

где $A(x)$ — медленно меняющаяся амплитуда. При такой функции $T_0(x)$ применение полученных выше общих формул приводит к громоздким выражениям, но можно построить простое приближенное решение, справедливое при больших ωt :

$$u(x, t) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\beta}{q} \sqrt{\omega t} \left[A(x - c_s t) \sin\left(qx - \omega t + \frac{\pi}{4}\right) - A(x + c_s t) \sin\left(qx + \omega t - \frac{\pi}{4}\right) \right], \quad (1.51)$$

где $\omega = qc_s$. Вывод формулы (1.51) на примере огибающей $A(x) = \Delta T e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$ приведен в Приложении А.5. Он опирается на тот факт, что коэффициенты $b(k)$ разложения функции $T_0(x) - T_b$ в ряд Фурье сосредоточены вблизи $k = q$; также применяется асимптотическое приближение для функции Бесселя и условие $q\sigma \gg 1$, то есть ширина огибающей много больше длины волны. Полученное

решение показывает, что поле перемещений представляет собой две волны, бегущие в разные стороны, повторяющие по форме начальное температурное возмущение; амплитуда волн растет как \sqrt{t} .

Решение (1.51) можно применить для любой начальной температуры, коэффициенты Фурье которой сосредоточены вблизи одной точки. Примером огибающей для начальной температуры вида (1.50) может также служить функция $A(x) = \Delta T (H(x-l) - H(x+l))$, где $lq \gg 1$. Этому случаю соответствуют коэффициенты Фурье $b(k) = \frac{\Delta T l}{\pi} \text{sinc}(l(k-q))$.

В качестве еще одного примера можно рассмотреть предельный случай огибающей $A(x) = \Delta T$, тогда $b(k) = \Delta T \delta(k-q)$. В этом случае в формуле (1.51) функцию $A(c_s t \pm x) = \Delta T$ можно вынести за скобки и преобразовать разность косинусов. Получим

$$u(x, t) \approx -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\Delta T \beta}{q} \sqrt{\omega t} \cos\left(\omega t - \frac{3\pi}{4}\right) \cos(qx). \quad (1.52)$$

Формула (1.52) совпадает с асимптотикой при большом времени для точного решения (1.43), полученного при синусоидальном начальном профиле температуры.

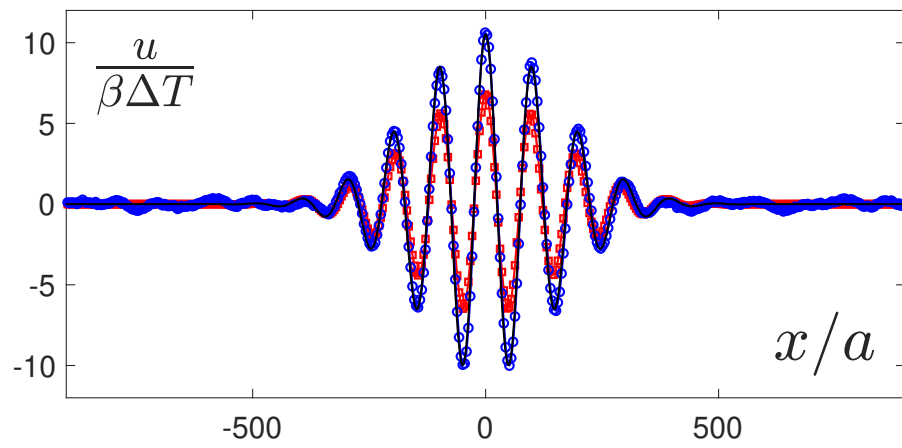
Аналогичные рассуждения позволяют получить и приближенное решение для температуры. Точное решение при начальных условиях (1.50) выражается следующим образом:

$$T(x, t) = T_b + \int_0^{\infty} b(k) J_0(k c_s t) \sin(kx) dk, \quad (1.53)$$

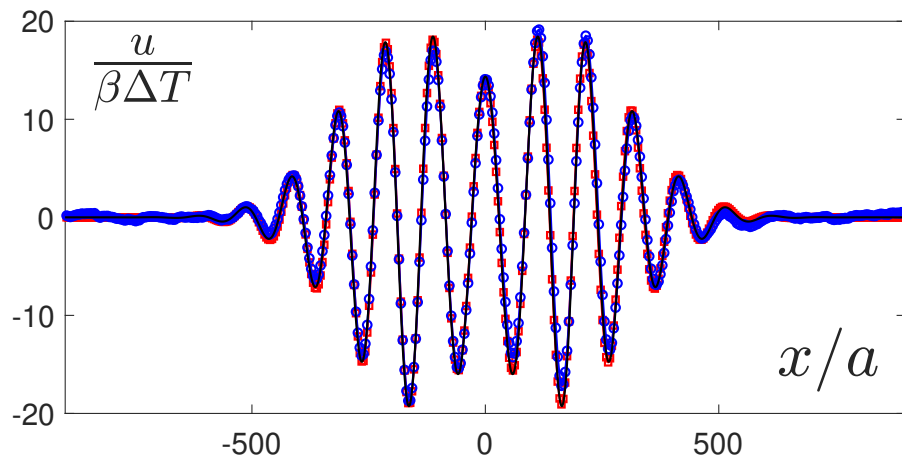
где $b(k)$ — коэффициенты (А.63) разложения функции $T_0(x) - T_b$ в интеграл Фурье. Далее по аналогии с решением для перемещений получим

$$T(x, t) \approx T_b + \frac{1}{\sqrt{2\pi\omega t}} \left[A(x + c_s t) \cos\left(qx + \omega t + \frac{\pi}{4}\right) - A(x - c_s t) \cos\left(qx - \omega t - \frac{\pi}{4}\right) \right]. \quad (1.54)$$

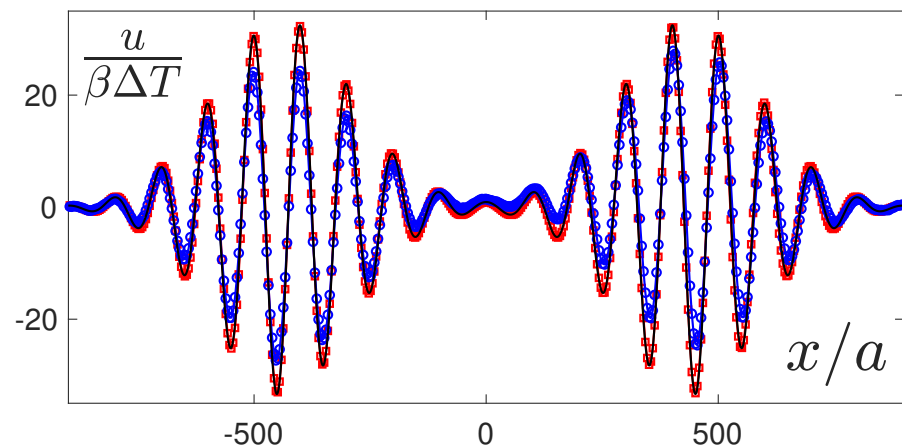
Следовательно, поле температур тоже представляет собой две разбегающиеся волны, но с убывающей как \sqrt{t} амплитудой.



(a)



(b)



(c)

Рис. 1.10: Поле перемещений при начальных условиях (1.50) в моменты времени $\omega_0 t = 20$ (a), 150 (b), 440 (c). Показаны результаты моделирования (синие круги), приближенное решение (1.51) (красные квадраты) и точное аналитическое решение (1.12) (черная линия).

На рис. 1.10 показано сравнение точного решения для перемещений, приближенного решения и результатов численного моделирования для начальных условий

$$T_0(n) = T_b + \Delta T e^{-\frac{n^2}{2\sigma^2}} \sin(qn). \quad (1.55)$$

Моделирование проводилось при параметрах

$$\begin{aligned} q &= 2\pi/100a, \quad \sigma/a = 150, \\ \Delta T/T_b &= 0.1, \quad T_b/D = 0.01, \end{aligned} \quad (1.56)$$

$$t_{\max}/\tau_* = 1.4 \cdot 10^4, \quad N = 2 \cdot 10^3, \quad N_r = 12 \cdot 10^4.$$

Видно, что при небольшом времени (рис. 1.10 (а)) приближенное решение отличается от точного, дальше они хорошо совпадают и правильно описывают численное решение, полученное при моделировании цепочки (рис. 1.10 (б)). На рис. 1.10 (с) видно, что при большом времени появляется отличие аналитических решений от моделирования, амплитуда которого растет не так быстро из-за влияния нелинейности и обратного перехода механической энергии в тепловую.

Посмотрим, как изменяется поле перемещений (1.51) в области, где было задано начальное тепловое возмущение. Для этого введем среднюю амплитуду перемещений $\bar{u}(t)$, характеризующую поле, расположенное в интервале $x \in (-3\sigma, 3\sigma)$:

$$\bar{u}(t) = \frac{1}{\sigma} \int_{-3\sigma}^{3\sigma} u(x, t) \cos(qx) dx. \quad (1.57)$$

Подстановка (1.51) в интеграл (1.57) и замена при интегрировании $\cos^2(qx)$ на среднее значение $1/2$ дает

$$\bar{u}(t) = -\frac{\Delta T \beta}{2q} \sqrt{\omega t} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{3}{\sqrt{2}} - \frac{\omega t}{q\sigma} \right) + \operatorname{erf} \left(\frac{3}{\sqrt{2}} + \frac{\omega t}{q\sigma} \right) \right] \sin \left(\omega t - \frac{\pi}{4} \right). \quad (1.58)$$

В пределе при $q\sigma \rightarrow \infty$ (или $\sigma/\lambda \rightarrow \infty$) приближенно³ получаем

$$\bar{u}_\infty(t) \approx -\frac{\Delta T \beta}{q} \sqrt{\omega t} \sin \left(\omega t - \frac{\pi}{4} \right). \quad (1.59)$$

³Считая, что $\operatorname{erf} \left(\frac{3}{\sqrt{2}} \right) \approx 1$

На рис. 1.11 показан график зависимости среднего перемещения от ωt при различных значениях σ/λ , где $\lambda = 2\pi/q$. График показывает, что сначала происходит рост, обусловленный увеличением амплитуды механической волны. Этот эффект аналогичен баллистическому резонансу, который мы наблюдали на рис. 1.8 для бесконечного синуса. Но через некоторое время среднее перемещение начинает убывать из-за того, что две волны, вызванные начальным возмущением, убегают из рассматриваемой области. Видно, что чем больше отношение ширины огибающей к длине волны, тем дольше продолжается рост. Введенная таким образом оценка перемещений может быть полезна для понимания результатов экспериментов, в которых исследуется эволюция начального синусоидального температурного поля, и определение температуры основано на учете теплового искажения решетки.

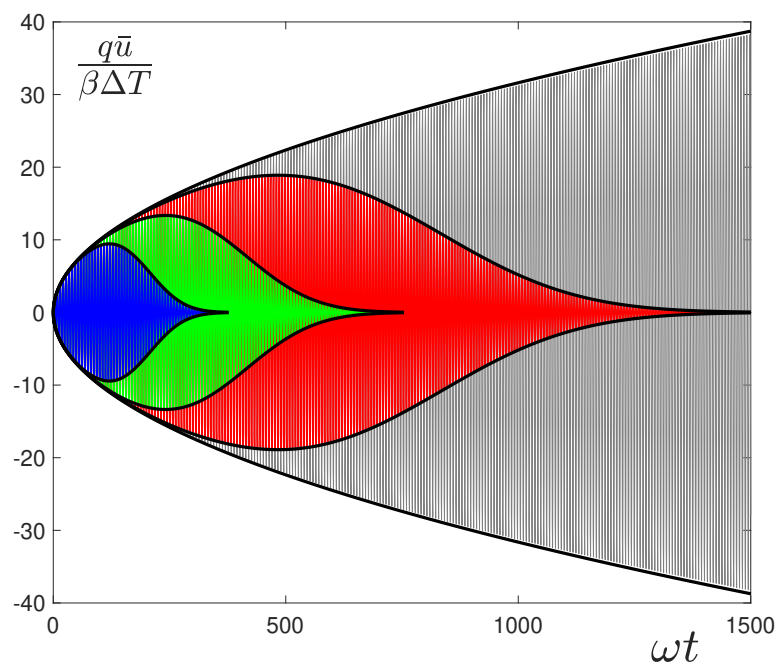


Рис. 1.11: Зависимость среднего перемещения \bar{u} (1.57) от времени при $\sigma/\lambda = 10$ (синяя линия), 20 (зеленая линия), 40 (красная линия) и $\sigma/\lambda \rightarrow \infty$ (серая линия). Черными линиями показаны огибающие.

Таким образом, показано, что задание синусоидального поля температуры на конечном интервале цепочки позволяет наблюдать баллистический резонанс, т.е. возрастание амплитуды механических колебаний цепочки в месте начального возмущения. Но, в отличие от случая с бесконечным начальным синусом, со временем амплитуда начинает затухать из-за того, что механические волны убегают из рассматриваемой области.

1.6 Заключение к главе 1

В работе рассмотрена задача термоупругости для нелинейной цепочки. Получено фундаментальное решение задачи баллистической термоупругости и проведено сравнение с аналогичным решением для термоупругости Фурье. Показаны отличия распространения механических волн, вызванных начальным тепловым возмущением в среде с баллистическим режимом теплопроводности, от волн в среде с классической теплопроводностью. Главная особенность состоит в том, что баллистический теплоперенос нельзя считать медленным процессом по сравнению с распространением упругих волн. При этом становится принципиальным учет динамических слагаемых в уравнении термоупругости.

Рассмотрено ступенчатое начальное распределение температуры. Для баллистической теплопроводности распределение перемещений имеет форму эллипса, а для классической — форму треугольника. Это объясняется тем, что в первом случае тепловые и механические волны бегут с одной скоростью, а во втором — тепловые распространяются медленно (как \sqrt{t}) по сравнению с механическими, и при больших временах влияние температурного поля становится практически эквивалентным точечному воздействию. При баллистической теплопроводности в цепочке возникают бесконечные деформации на фронте волны. Это связано с тем, что поле температуры имеет неограниченную производную на фронте. Этот эффект устраняется, если для температуры взять точное (дискретное) решение, полученное в [16]. В этом случае деформации оказываются конечными в каждый момент времени, но данное решение плохо описывает эксперимент вблизи фронта волны. Такое несоответствие говорит о непригодности используемой модели для больших градиентов температур. Для оценки области применимости модели рассмотрено начальное линейное распределение на небольшом отрезке, которое при увеличении угла наклона линейного участка стремится к ступенчатому. В этом случае поле деформаций оказывается конечным, причем точность совпадения аналитического решения с экспериментом возрастает с уменьшением начального градиента температуры. Данные результаты могут быть использованы для развития и тестирования градиентных теорий упругости и термоупругости [45, 2].

Рассмотрено синусоидальное начальное возмущение. Проведены численные эксперименты, демонстрирующие явление баллистического резонанса в

цепочке Леннарда-Джонса и показывающие, что процесс перехода механической энергии в тепловую в цепочках α -FPU и Леннарда-Джонса отличается мало. Получено аналитическое приближенное решение задачи баллистической термоупругости для начального температурного поля в виде синуса с огибающей (волнового пакета). Показано, что, как и в случае бесконечного синуса, в цепочке наблюдается баллистический резонанс — рост амплитуды механических колебаний в области начального возмущения, но этот рост ограничен, а его продолжительность зависит от отношения ширины огибающей к длине волны синуса.

Продолжением данной работы может быть обобщение полученных результатов на цепочки с взаимодействием дальних соседей, а также добавление вязкости. Интерес представляет и рассмотрение начальных условий с ненулевыми тепловыми потоками. Такое усложнение потребует модификации уравнения теплопроводности. Еще одной задачей является учет нелинейности цепочки в решении для температуры, а также аналитическое описание процесса перехода механической энергии в тепловую.

ГЛАВА 2. Дисперсия энергии при движении локализованного возмущения

2.1 Введение к главе 2

Теоретическое описание локализованных в пространстве и времени волн активно развивается в последние десятилетия с использованием линейных и нелинейных подходов [32, 22]. Исследование распространения волн и энергии в среде важно для понимания различных физических процессов, особенно на наноуровне [51, 7, 31, 17]. Для исследования материалов на микро- и наноуровнях часто используют модели кристаллических решеток, которые состоят из атомов, взаимодействующих между собой. Для аналитического описания волновых процессов в таких дискретных моделях используют, например, метод динамики решетки. Он успешно применяется для описания теплопередачи в твердых телах на наноуровне [26, 31, 8, 36, 15, 39, 23, 53, 28, 42]. Другой подход основан на кинетической теории, в которой любое возмущение в среде можно представить как совокупность фононов (квазичастиц). Кинетические уравнения позволяют получать наглядные, легко интерпретируемые решения для кинетической температуры и теплового потока [34].

Еще одним сравнительно новым способом описания процессов энергопереноса является метод энергетической динамики, предложенный в [32]. Данный подход строится на аналогии между переносом массы и энергии. Для каждой точки определяется локальная энергия, и аналогично тому, как описывается движение группы невзаимодействующих частиц, можно описать движение энергетического возмущения. Важно, что для такого описания используются глобальные величины (полная энергия, глобальный поток и суперпоток энергии), что позволяет предсказывать местоположение и изменение формы возмущения, не прибегая к точному решению уравнения динамики среды. Этот подход был применен в [32] для описания энергопереноса в одномерной линейной цепочке (цепочке Гука). Было доказано сохранение энергии, потока и суперпотока энергии. Показано, что энергетический центр (аналог центра масс) движется

с постоянной скоростью. Также была получена зависимость энергетического радиуса, характеризующего распределение энергии относительно центра) от времени.

С помощью энергетической динамики в работе [6] был получен закон движения энергетического центра для локализованного возмущения в скалярной решетке. На основе сохранения потока энергии показано, что энергетический центр движется с постоянной скоростью в произвольной скалярной решетке. На примере квадратной решетки было проведено численное моделирование, подтверждающее теоретические результаты.

В настоящей работе предлагается подход для описания дисперсии (расплывания) энергетического сгустка в континуальной и в дискретной средах произвольной размерности. Вводится понятие энергетического эллипса, характеризующего размеры возмущения в разных направлениях. Аналитически выводится зависимость энергетических радиусов (полуосей эллипса) от времени. Проводится численное моделирование, подтверждающее справедливость теоретических результатов.

Глава построена следующим образом. В разделе 2.2 приведены уравнения динамики для дискретной среды (кристаллической решетки) и для континуальной среды. Следующий параграф 2.64 содержит выражения для основных глобальных энергетических характеристик, используемых в работе, через скорости и перемещения точек среды (или частиц в дискретном случае). В параграфе 2.4 формулируется главная идея работы: вводится понятие энергетического эллипса и энергетических радиусов и предлагается алгоритм для описания их эволюции. Дальше в параграфе 2.5 рассматривается конкретный пример локализованного возмущения: волновой пакет в континуальной и дискретной средах. В разделе 2.6 описаны результаты численного моделирования для длинных волн (это позволяет моделировать континуальную среду) и для коротких волн. Моделирование проводится на примере квадратной решетки.

2.2 Уравнение движения среды

Данный раздел содержит уравнения, описывающие движения для дискретной и для континуальной упругой среды. Мы считаем, что среда однородна, но пока не делаем предположений об ее изотропности

2.2.1 Дискретная среда

Рассмотрим систему одинаковых частиц массой m , расположенных в узлах идеальной кристаллической решетки. Предположим, что каждая частица связана со своими ближайшими соседями упругими пружинками. Предполагается, что рассматриваемая решетка является инвариантной к сдвигу на вектор, соединяющий любые два узла (простая бесконечная решетка), и центрально-симметричной относительно любого узла (инверсионно-инвариантная решетка). Вектор \mathbf{a}_α соединяет узел с его соседним узлом, имеющим индекс α . Чтобы обеспечить центральную симметрию, мы полагаем, что $\mathbf{a}_{-\alpha} = -\mathbf{a}_\alpha$. Набор чисел α и векторов \mathbf{a}_α содержит всю геометрическую информацию о конкретном типе решетки.

Положение частицы определяется скалярной переменной $u = u(\mathbf{r})$, где \mathbf{r} — вектор положения узла. Таким образом можно описывать, например, поперечное смещение точек растянутой мембраны. Поскольку u является скалярной величиной, решетка называется скалярной. Решетка определена в пространстве размерности d . Наиболее распространенным случаем для скалярных решеток является случай $d = 2$, в частности, в качестве примера системы для вычислений в данной работе будет использоваться двумерная квадратная решетка. Однако все аналитические результаты, полученные в дальнейшем, справедливы для $d = 1$, $d = 3$ или даже для более высоких измерений.

Мы считаем систему гармонической, поэтому взаимодействие между частицами пропорционально деформациям, которые выражаются как разности $u(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\alpha) - u(\mathbf{r})$. Тогда уравнение движения частицы \mathbf{r} принимает вид

$$m \frac{d^2 u}{dt^2} = \sum_{\alpha} C_{\alpha} \left(u(\mathbf{r} + \mathbf{a}_{\alpha}) - u(\mathbf{r}) \right), \quad (2.60)$$

где t — время, $C_{\alpha} \equiv C_{-\alpha}$ — жесткость связи, соединяющей частицу \mathbf{r} с частицей $\mathbf{r} + \mathbf{a}_{\alpha}$, суммирование производится по всем соседним частицам, участвующим во взаимодействии. На рисунке 2.12 показан пример бесконечной двумерной квадратной решетки из одинаковых частиц со всеми указанными значениями. Период решетки (равновесное расстояние между частицами) равен a .

В квадратной решетке это значит $\alpha \in \{-2; -1; 1; 2\}$, и векторы \mathbf{a}_{α} принимают значения $\mathbf{a}_{\pm 1} = \pm a\mathbf{i}$, $\mathbf{a}_{\pm 2} = \pm a\mathbf{j}$, где \mathbf{i} , \mathbf{j} — единичные векторы декартова

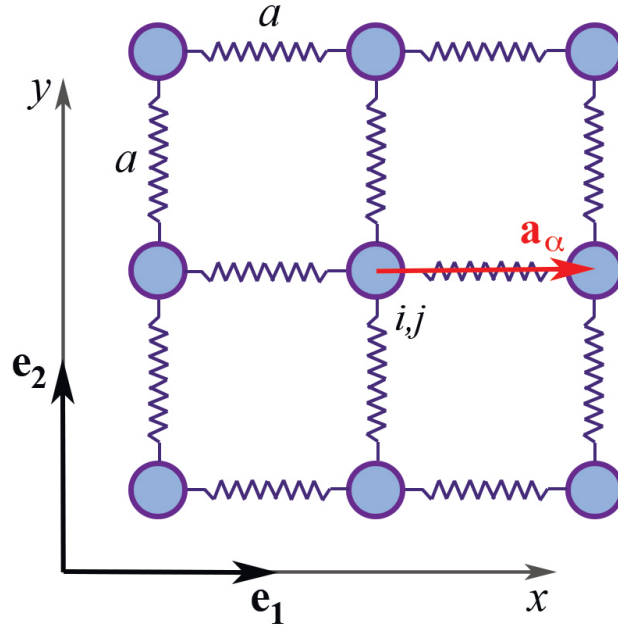


Рис. 2.12: Схема квадратной решетки

базиса (рис. 2.12). Вектор положения \mathbf{r} принимает дискретные значения, локализованные в узлах решетки. В случае квадратной решетки

$$\mathbf{r} \stackrel{\text{def}}{=} a i \mathbf{i} + a j \mathbf{j}; \quad i, j \in \mathbb{Z}, \quad (2.61)$$

где \mathbb{Z} — множество целых чисел. Используя представление \mathbf{r} из (2.61), смещение можно записать как $u(\mathbf{r}) = u_{i,j}$, что приводит к следующей скалярной формуле (2.60) (для изотропной квадратной решетки):

$$\frac{d^2 u_{i,j}}{dt^2} = \frac{C}{m} (u_{i+1,j} + u_{i,j+1} + u_{i-1,j} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j}), \quad (2.62)$$

где C — эффективная жесткость, равная отношению растягивающей силы к периоду решетки. При численном моделировании мы будем использовать именно формулу (2.62)

2.2.2 Континуальная среда

Уравнение равновесия для однородной анизотропной среды имеет вид

$$\rho \dot{v} = \mathbf{C} \cdot \cdot \nabla \nabla u, \quad (2.63)$$

где \mathbf{C} — тензор жесткости, ρ — плотность среды, ∇ — набла-оператор Гамильтона, u и v — локальное перемещение и скорость.

В следующем разделе для дискретной и континуальной сред будут определены основные величины, которые используются для описания движения возмущения: энергия, поток энергии, суперпоток энергии.

2.3 Энергетические характеристики: энергия, поток, суперпоток

В данном параграфе для дискретной и континуальной сред вводятся основные величины, характеризующие движение энергетического возмущения: энергия E , вектор потока энергии \mathbf{h} и тензор суперпотока энергии \mathbf{G} . Эти величины определяются через моменты энергии M , \mathbf{M}_1 , \mathbf{M}_2 одинаково для обеих сред:

$$E \stackrel{\text{def}}{=} M, \quad \mathbf{h} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d\mathbf{M}_1}{dt}, \quad \mathbf{G} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \frac{d^2\mathbf{M}_2}{dt^2}, \quad (2.64)$$

где для дискретной среды

$$M \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\mathbf{r}} \epsilon(\mathbf{r}), \quad \mathbf{M}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{r}\epsilon(\mathbf{r}), \quad \mathbf{M}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{r}\mathbf{r}\epsilon(\mathbf{r}), \quad (2.65)$$

для континуальной среды

$$M \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbf{r}} \epsilon(\mathbf{r}) dV(\mathbf{r}), \quad \mathbf{M}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbf{r}} \mathbf{r}\epsilon(\mathbf{r}) dV(\mathbf{r}), \quad \mathbf{M}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbf{r}} \mathbf{r}\mathbf{r}\epsilon(\mathbf{r}) dV(\mathbf{r}), \quad (2.66)$$

суммирование (интегрирование) ведется по всему пространству, $\epsilon(\mathbf{r})$ — локальная энергия в случае дискретной системы и удельная энергия (энергия, приходящаяся на элемент объема) в континуальном случае, $dV(\mathbf{r})$ — элемент пространственного объема. Мы предполагаем, что все перечисленные моменты энергии конечны.

Отметим, что указанные глобальные характеристики можно также ввести используя локальные определения для соответствующих величин [32]. Например, в континуальном случае производная локальной энергии по времени равна дивергенции от некоторого вектора, который называют локальным потоком энергии (и это считают определением потока). Тогда глобальный поток получается при интегрировании локальных потоков по всему пространству. Таким

же образом вводится и определение суперпотока: производная по времени от потока энергии может быть выражена как дивергенция тензора, называемого локальным суперпотоком. Глобальный суперпоток определяется как интеграл по пространству от локальных суперпотоков. Можно показать, что такие определения равносильны определениям (2.64). Для достижения целей, преследуемых в данной работе, потребуется выражение суперпотока через второй момент, поэтому мы сразу вводим глобальные величины (2.64).

Нулевой момент M (скаляр) совпадает с энергией возмущения, его аналогом в динамике массы является масса системы частиц. Первый момент M_1 (вектор) характеризует среднее положение возмущения и позволяет ввести понятия энергетического центра \mathbf{r}_c , который является аналогом центра масс (или аналогом математического ожидания случайной величины, если вместо энергии рассматривать плотность вероятности, а вместо радиуса-вектора саму случайную величину), и скорости энергетического центра \mathbf{v}_c :

$$\mathbf{r}_c \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathbf{M}_1}{E}, \quad \mathbf{v}_c \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathbf{h}}{E}. \quad (2.67)$$

В работе [6] для произвольной среды было показано, что поток энергии сохраняется, и энергетический центр движется с постоянной скоростью.

Второй момент энергии M_2 (тензор второго ранга) характеризует распределение энергии по пространству и является аналогом момента инерции. Можно также провести аналогию со вторым моментом распределения случайной величины в теории вероятностей. Как и в динамике массы, можно определить центральный момент: для дискретной среды

$$\mathbf{M}_c \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\mathbf{r}} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c)(\mathbf{r} - \mathbf{r}_c)\epsilon(\mathbf{r}), \quad (2.68)$$

и для континуальной среды:

$$\mathbf{M}_c \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbf{r}} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c)(\mathbf{r} - \mathbf{r}_c)\epsilon(\mathbf{r}) dV(\mathbf{r}). \quad (2.69)$$

Центральный момент описывает распределение энергии относительно энергетического центра и является аналогом центрального момента инерции (или аналогом дисперсии случайной величины). Через центральный момент вводит-

ся понятие центрального суперпотока

$$\mathbf{G}_c \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \frac{d^2 \mathbf{M}_c}{dt^2}. \quad (2.70)$$

Центральный суперпоток может быть представлен через обычный суперпоток и поток энергии

$$\mathbf{G}_c = \mathbf{G} - \frac{\mathbf{h}\mathbf{h}}{E}. \quad (2.71)$$

Далее будут найдены выражения для энергии, потока и суперпотока через перемещения и скорости точек среды.

2.3.1 Дискретная среда

В данном параграфе содержатся выражения для энергии, потока и суперпотока через перемещения и скорости точек дискретной среды.

Полная энергия возмущения находится как сумма локальных энергий всех частиц

$$E \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\mathbf{r}} \epsilon(\mathbf{r}), \quad (2.72)$$

где $\epsilon(\mathbf{r})$ — локальная энергия

$$\epsilon(\mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{m}{2} v^2(\mathbf{r}) + \frac{1}{4} \sum_{\alpha} C_{\alpha} \left(u(\mathbf{r} + \mathbf{a}_{\alpha}) - u(\mathbf{r}) \right)^2, \quad (2.73)$$

где u — перемещение, $v \stackrel{\text{def}}{=}} \dot{u}$ — скорость частицы. Локальная энергия представляет собой сумму кинетической и потенциальной компонент, которые пропорциональны массе m и жесткости C_{α} , соответственно. Суммирование в (2.72) производится по всем частицам, в (2.73) — по всем соседям выбранной частицы. Поскольку система консервативна, полная энергия сохраняется: $E = \text{const}$. Это можно показать, дифференцируя (2.72) по времени с использованием уравнения движения и свойств решетки.

Вычисление производной по времени от первого момента с использованием уравнения движения (2.60) дает выражение для потока энергии [6]:

$$\mathbf{h} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \alpha} \mathbf{a}_{\alpha} C_{\alpha} u(\mathbf{r}) v(\mathbf{r} + \mathbf{a}_{\alpha}). \quad (2.74)$$

Двукратное дифференцирование второго момента приводит к выражению для суперпотока (вывод приведен в приложении В.1.1):

$$\mathbf{G} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \alpha} \frac{C_\alpha}{m} \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha (\kappa(\mathbf{r}) - \pi(\mathbf{r})) + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{r}, \alpha, \beta} \frac{C_\alpha C_\beta}{m} \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\beta u(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\alpha) u(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\beta), \quad (2.75)$$

где $\kappa(\mathbf{r})$, $\pi(\mathbf{r})$ — локальные кинетическая и потенциальная энергии:

$$\kappa(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} m v^2(\mathbf{r}), \quad \pi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4} \sum_{\alpha} C_\alpha (u(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\alpha) - u(\mathbf{r}))^2. \quad (2.76)$$

В следующем параграфе будут найдены аналогичные формулы для континуальной среды.

2.3.2 Континуальная среда

В данном разделе получены выражения для энергии, потока и суперпотока в континуальной среде. Полная энергия выразится как интеграл по пространству от локальных энергий

$$E \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbf{r}} \epsilon(\mathbf{r}) dV(\mathbf{r}), \quad (2.77)$$

где $\epsilon(\mathbf{r})$ — удельная энергия

$$\epsilon \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} (\rho v^2 + \nabla u \cdot \mathbf{C} \cdot \nabla u). \quad (2.78)$$

Вычисление производной по времени от первого момента приводит к следующему выражению для глобального потока (см. приложение В.2.1)

$$\mathbf{h} = \mathbf{C} \cdot \int_{\mathbf{r}} v \nabla u dV(\mathbf{r}). \quad (2.79)$$

Двукратное дифференцирование второго момента с использованием уравнения движения (2.63) дает выражение для суперпотока (см. приложение В.2.2)

$$\mathbf{G} = \frac{1}{\rho} \int_{\mathbf{r}} \left((\mathbf{C} \cdot \nabla u)(\mathbf{C} \cdot \nabla u) + \mathbf{C} (\kappa(\mathbf{r}) - \pi(\mathbf{r})) \right) dV(\mathbf{r}), \quad (2.80)$$

где \mathbf{C} — тензор жесткости, $\kappa(\mathbf{r})$ и $\pi(\mathbf{r})$ — удельные кинетическая и потенциаль-

ная энергии:

$$\kappa(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\rho v^2, \quad \pi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(\nabla u \cdot \mathbf{C} \cdot \nabla u). \quad (2.81)$$

В следующем разделе будет введено понятие энергетических радиусов, и предложен способ описания изменения формы и размеров энергетического возмущения.

2.4 Дисперсия энергии

В данном параграфе предлагается алгоритм для описания расплывания локализованного возмущения. Вводится определение энергетических радиусов, характеризующих размер возмущения в различных направлениях.

Определим энергетические радиусы как корни из собственных чисел тензора, являющегося отношением центрального момента энергии к полной энергии:

$$R_i \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\lambda_i}, \quad (2.82)$$

где λ_i — собственные числа тензора

$$\Lambda \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathbf{M}_c}{E}. \quad (2.83)$$

Извлечение корня в (2.82) возможно, поскольку \mathbf{M}_c является положительно определенным тензором (это видно из определения центрального момента энергии), и его собственные числа положительны. Энергетические радиусы характеризуют размер возмущения в направлении соответствующего собственного вектора.

Целью данной работы является описание зависимости энергетических радиусов от времени. В работе [32] для одномерной цепочки было доказано, что суперпоток сохраняется. Этот факт позволил дважды проинтегрировать по времени суперпоток (2.70) и получить квадратичную зависимость центрального момента от времени. Тот же прием можно применить и для произвольной системы (среды или вида возмущения), в которой суперпоток сохраняется:

$$\mathbf{G}_c = \text{const} \quad \Rightarrow \quad \Lambda = \frac{\mathbf{G}_c t^2 + \dot{\mathbf{M}}_0 t + \mathbf{M}_0}{E}, \quad (2.84)$$

где \mathbf{M}_0 , $\dot{\mathbf{M}}_0$ — начальные значения центрального момента и его производной.

Таким образом, в системе с постоянным суперпотокм энергетические радиусы определяются как корни из собственных чисел тензора Λ , который описывается простой зависимостью от времени (2.84). Тогда при больших временах скорости изменения радиусов постоянны, и радиусы растут линейно.

Трудность заключается в том, что в общем случае доказать сохранение суперпотока не удастся. Но есть ситуации, когда это можно сделать приближенно. Такой пример будет рассмотрен в следующем разделе.

2.5 Пример: волновой пакет

2.5.1 Волновой пакет в континуальной среде

В данном параграфе изложенная выше теория применяется для описания эволюции волнового пакета в континуальной изотропной среде. Для него получена зависимость энергетических радиусов от времени.

Итак, предположим, что решение для перемещений имеет вид

$$u(\mathbf{r}, t) \approx A(|\mathbf{r} - \mathbf{v}_g t|) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad (2.85)$$

где \mathbf{k} — волновой вектор, $\mathbf{v}_g = c\mathbf{k}/k$ — групповая скорость, $\omega = ck$ — частота. Соответствующее поле скоростей:

$$\begin{aligned} v(\mathbf{r}, t) = \dot{u}(\mathbf{r}, t) \approx & -A(|\mathbf{r} - \mathbf{v}_g t|)\omega \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \\ & - \nabla A(|\mathbf{r} - \mathbf{v}_g t|) \cdot \mathbf{v}_g \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t). \end{aligned} \quad (2.86)$$

Подставляя $t = 0$, мы получим начальные условия, приводящие к приближенному решению в виде волнового пакета:

$$\begin{aligned} u(\mathbf{r}, 0) &= A(r) \sin \theta, \\ v(\mathbf{r}, 0) &= -A(r)\omega \cos \theta - \nabla A(r) \cdot \mathbf{v}_g \sin \theta, \quad \theta = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}. \end{aligned} \quad (2.87)$$

Мы считаем, что в начальный момент функция $A(\mathbf{r}, 0)$ зависит только от модуля радиуса-вектора. Также предполагается, что огибающая $A(\mathbf{r}, t)$ — медленно меняющаяся функция координаты. Поскольку полная энергия сохраняется, найдем ее по начальным условиям, подставив (2.87) в (2.77). При интегрирова-

нии по пространству используется замена множителей $\cos^2 \theta$, $\sin^2 \theta$ на среднее значение $1/2$, а произведений нечетных степеней $\cos \theta$, $\sin \theta$ — на 0. В результате получим следующее выражение для энергии (вывод в приложении В.3.2):

$$E = \frac{C}{2} \int_{\mathbf{r}} (Ak)^2 dV(\mathbf{r}) + \frac{C(d+1)}{4d} \int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 dV(\mathbf{r}), \quad (2.88)$$

где A — начальная огибающая, $k = |\mathbf{k}|$ — модуль волнового вектора, d — размерность пространства. Также через начальные условия можно выразить и поток энергии:

$$\mathbf{h} = cE\mathbf{i} - \frac{cC(d-1)}{4d} \int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 dV(\mathbf{r}) \mathbf{i}, \quad (2.89)$$

где $\mathbf{i} = \mathbf{k}/k$ — единичный вектор, сонаправленный с волновым вектором. Видно, что поток сонаправлен с волновым вектором, в случае $d > 1$ скорость движения энергетического центра меньше, чем волновая скорость c . Можно показать (см. приложение В.3.2), что второе слагаемое в (2.89) совпадает с начальным значением полного лагранжиана:

$$\mathbf{h} = cE\mathbf{i} + cL_0\mathbf{i}, \quad L_0 = \frac{cC(1-d)}{4d} \int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 dV(\mathbf{r}) \mathbf{i}, \quad (2.90)$$

т.е. максимальная скорость энергетического центра достигается при минимальном лагранжиане L_0 .

Сохранение суперпотока в общем случае не доказано. Как показывает численное моделирование, он выходит на постоянное значение только через некоторое время после начала движения, вместе со стремлением лагранжиана к нулю. Поэтому для вычисления установившегося суперпотока (для описания эволюции возмущения при больших временах) необходимо использовать не начальные условия с начальной огибающей $A(t=0)$, а огибающую в момент времени t^* , когда лагранжиан уже равен нулю. Затухание лагранжиана (выравнивание потенциальной и кинетических энергий) исследовалось в задачах теплопроводности в кристаллах [38], и было показано, что этот переходный процесс является быстрым по сравнению с процессами переноса энергии. Поэтому мы считаем, что лагранжиан стремится к нулю достаточно быстро, и огибающая не успевает за время его затухания сильно измениться, т.е. $A(t^* = 0) \approx A(t=0)$. Поэтому дальше при вычислении суперпотока мы полагаем, что лагранжиан уже равен нулю, но используем начальную огибающую.

Найдем суперпоток, предполагая, что полный лагранжиан уже равен нулю, но огибающая еще мало отличается от начальной. Тогда подстановка (1.32) в (2.80) дает следующее выражение для суперпотока (вывод в приложении В.3.4):

$$\mathbf{G} = c^2 E \mathbf{i} \mathbf{i} + \frac{C c^2}{4d} \int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 dV(\mathbf{r}) (\mathbf{E} - d \mathbf{i} \mathbf{i}) \quad (2.91)$$

где d — размерность пространства, $\mathbf{i} = \mathbf{k}/k$ — единичный вектор, сонаправленный с волновым вектором. Формула (2.91) позволяет найти суперпоток по начальной огибающей. Для нахождения энергетических радиусов необходимо вычислить центральный суперпоток. Для этого подставим (2.91), (2.89) в (2.71) и получим

$$\mathbf{G}_c = G_c (\mathbf{E} - \mathbf{i} \mathbf{i}), \quad G_c = \frac{c^2 C}{2d} \int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 dV(\mathbf{r}). \quad (2.92)$$

Для описания расплывания возмущения по формуле (2.84) также понадобятся выражения для начальных значений центрального момента и его производной $\mathbf{M}_0, \dot{\mathbf{M}}_0$ (см. приложение В.3.5):

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_0 &= M_0 \mathbf{E}, \quad \dot{\mathbf{M}}_0 = 0, \\ M_0 &= \frac{C}{2d} \int_{\mathbf{r}} \left(k^2 A^2 + \frac{1}{2} (\nabla A)^2 + \frac{1}{2d} (\nabla A)^2 \right) r^2 dV(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.93)$$

где $r = |\mathbf{r}|$. Из (2.82), (2.92), (2.93) видно, что радиус, направленный вдоль волнового вектора, не изменяется, а скорость изменения остальных радиусов одинакова. Они изменяются по закону

$$R = \sqrt{R_0^2 + v_R^2 t^2}, \quad (2.94)$$

где

$$R_0 = \sqrt{\frac{M_0}{E}}, \quad v_R = \sqrt{\frac{G_c}{E}}. \quad (2.95)$$

Пренебрегая слагаемыми второго порядка малости в выражениях для энергии и начального момента, начальный энергетический радиус и скорость расплывания можно представить в виде

$$R_0 \approx \sqrt{\frac{\int_{\mathbf{r}} A^2 r^2 dV(\mathbf{r})}{d \int_{\mathbf{r}} A^2 dV(\mathbf{r})}}, \quad v_R \approx \frac{c}{k} \sqrt{\frac{\int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 dV(\mathbf{r})}{d \int_{\mathbf{r}} A^2 dV(\mathbf{r})}}. \quad (2.96)$$

Таким образом, получена формула, описывающая изменение энергетических радиусов для волнового пакета. В качестве примера рассмотрим волновой пакет в двумерной среде с огибающей в виде кривой Гаусса

$$A(r) = e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}}. \quad (2.97)$$

В этом случае применение формул (2.96) дает

$$R_0 \approx \frac{\sigma}{\sqrt{2}}, \quad v_R \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{c}{k\sigma}. \quad (2.98)$$

Зависимость радиуса от времени тогда можно записать в безразмерных переменных:

$$\bar{R} = \sqrt{1 + \bar{t}^2}, \quad (2.99)$$

где

$$\bar{R} = \frac{\sqrt{2}}{\sigma} R, \quad \bar{t} = \frac{c}{k\sigma^2} t. \quad (2.100)$$

Дальше в разделе 2.6.1 будет проведено сравнение решения (2.99), (2.100) с результатами численного моделирования.

2.5.2 Волновой пакет в дискретной среде

Рассматривается дисперсия энергии для возмущения в виде волнового пакета в дискретной среде. Этот случай сложнее континуального, так как здесь присутствует дисперсия по скоростям движения волн (короткие волны движутся медленнее, длинные быстрее). Кроме этого, на деформацию начальной формы возмущения оказывает влияние и структура решетки. Групповая скорость и волновой вектор не всегда сонаправлены, поэтому возникает вопрос о том, как будут расположены оси эллипса энергии. В данном параграфе будет получен тензор суперпотока, позволяющий описать расплывание возмущения для волнового пакета с любым волновым вектором в произвольной решетке.

Дисперсионное соотношение $\omega(\mathbf{k})$ для произвольной простой скалярной решетки может быть получено при подстановке решения в виде плоской волны $u(\mathbf{r}) = B \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ в уравнение движения (2.60):

$$\omega^2 = \omega_0^2 \sum_{\alpha} (1 - \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha})), \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{C}{m}}. \quad (2.101)$$

Зависимость групповой скорости от волнового вектора:

$$\mathbf{v}_g = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} = \frac{\omega_0^2}{2\omega} \sum_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}). \quad (2.102)$$

Зададим начальные условия аналогично тому, как это было сделано для континуального случая:

$$\begin{aligned} u(\mathbf{r}, 0) &= A(r) \sin \theta, \\ v(\mathbf{r}, 0) &= -A(r)\omega \cos \theta - \nabla A(r) \cdot \mathbf{v}_g \sin \theta, \quad \theta = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}. \end{aligned} \quad (2.103)$$

Сохранение полной энергии и потока энергии доказано, поэтому найдем их по начальным условиям. Начальная кинетическая энергия имеет вид (вывод в приложении В.4.4)

$$K = \frac{m\omega^2}{4} \sum_{\mathbf{r}} A^2 + \frac{m\mathbf{v}_g^2}{4d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2. \quad (2.104)$$

Для получения этой и следующих формул используется предположение, что под огибающей помещается много длин волн, что позволяет заменить при интегрировании по пространству множители $\cos^2 \theta$, $\sin^2 \theta$ на среднее значение $1/2$, а произведений $\cos \theta \sin \theta$ — на 0 . Потенциальная энергия:

$$\begin{aligned} \Pi &= \frac{m\omega^2}{4} \sum_{\mathbf{r}} A^2 + \frac{C}{4d} T \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2, \\ T = \text{tr} \mathbf{T}, \quad \mathbf{T} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}). \end{aligned} \quad (2.105)$$

Полная энергия возмущения

$$\begin{aligned} E &= K + \Pi = \\ &= \frac{m\omega^2}{2} \sum_{\mathbf{r}} A^2 + \frac{m\mathbf{v}_g^2}{4d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 + \frac{C}{4d} T \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \end{aligned} \quad (2.106)$$

Глобальный лагранжиан (в начальный момент времени)

$$L = K - \Pi = \frac{m\mathbf{v}_g^2}{4d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 - \frac{C}{4d} T \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2. \quad (2.107)$$

Выражение для потока энергии выведено в приложении В.4.5. Оно имеет вид

$$\mathbf{h} = \mathbf{v}_g E - \frac{m\omega^2 a^2}{4d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \mathbf{v}_g - \frac{m\mathbf{v}_g^2}{4} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \mathbf{v}_g - \frac{C}{4d} T \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \mathbf{v}_g + \frac{C}{4d} \mathbf{v}_g \cdot \mathbf{T} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \quad (2.108)$$

Также, как и в континуальном случае, мы ищем установившееся значение суперпотока, предполагая, что лагранжиан уже равен нулю, но огибающая мало отличается от начальной (вывод дан в приложении В.4.6):

$$\mathbf{G} = E \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g + \frac{C^2}{2md} \mathbf{T} \cdot \mathbf{T} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 - \frac{m\omega^2 a^2}{2d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g - \frac{CT}{2d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g. \quad (2.109)$$

Центральный суперпоток получим при подстановке (2.108), (2.109) в (2.71).

$$\mathbf{G}_c = \frac{1}{2d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \left(\frac{C^2}{m} \mathbf{T} \cdot \mathbf{T} + m\mathbf{v}_g^2 \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g - 2C \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g \cdot \mathbf{T} \right), \quad (2.110)$$

где

$$\mathbf{T} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}). \quad (2.111)$$

Выражение для центрального суперпотока также можно представить в виде

$$\mathbf{G}_c = \frac{m}{2d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 (\omega_0^2 \mathbf{T} - \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g)^2. \quad (2.112)$$

Видно, что тензор суперпотока является положительно определенным. Это значит, что энергетическое возмущение может только увеличиваться и не может сжиматься.

Начальное значение центрального момента и его производной

$$\mathbf{M}_0 \approx \frac{m\omega^2}{2d} \sum_{\mathbf{r}} A^2 r^2 \mathbf{E}, \quad \dot{\mathbf{M}}_0 = 0. \quad (2.113)$$

Заметим, что здесь мы пренебрегаем слагаемыми второго порядка малости. Дальше при вычислении энергетических радиусов в выражении для энергии слагаемые второго порядка малости также учитывать не будем:

$$E \approx \frac{m\omega^2}{2} \sum_{\mathbf{r}} A^2. \quad (2.114)$$

Таким образом, подстановка (2.112), (2.113), (2.114) в (2.84) дает формулу, описывающую изменение энергетических радиусов. Дальше рассматриваются некоторые частные случаи для волновых чисел и видов кристаллической решетки.

Длинные волны

Дисперсионное соотношение и групповая скорость для длинных волн ($ak \rightarrow 0$) имеют вид

$$\omega = ck, \quad \mathbf{v}_g = c\mathbf{e}_v, \quad c = \omega_0 a. \quad (2.115)$$

где \mathbf{e}_v — единичный вектор, сонаправленный с групповой скоростью (и с волновым вектором в случае длинных волн). Найдем тензор \mathbf{T} для длинных волн:

$$\mathbf{T} = a^2 \mathbf{E}, \quad T = a^2 d. \quad (2.116)$$

Нетрудно убедиться, что выражения для кинетической (2.104), потенциальной (2.105) и полной (2.106) энергий совпадают с полученными в континуальном случае (2.88). Пренебрегая слагаемым $\frac{m\omega^2 a^2}{4d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2$ в выражении для потока (2.108), тоже получаем совпадение с потоком в континуальном случае (2.89). Суперпоток (2.109) также совпадает с полученным ранее для континуальной среды (2.91). Расплывание в этом случае происходит только в направлении, перпендикулярном направлению движения.

Квадратная решетка. Движение вдоль связи

Дальше рассмотрим квадратную решетку. Векторы \mathbf{a}_α в этом случае могут принимать значения $\pm\mathbf{i}, \pm\mathbf{j}$. Тензор \mathbf{T} для выражается довольно просто

$$\mathbf{T} = a^2 \left(\cos(ak_x)\mathbf{ii} + \cos(ak_y)\mathbf{jj} \right), \quad (2.117)$$

где k_x, k_y — компоненты волнового вектора. Рассмотрим возмущение, движущееся в квадратной плоской решетке вдоль ее связи. Пусть волновой вектор сонаправлен с вектором \mathbf{i} :

$$\mathbf{k} = k\mathbf{i}, \quad k = |\mathbf{k}|. \quad (2.118)$$

Тогда дисперсионное соотношение и групповая скорость:

$$\omega = 2\omega_0 \sin \frac{ak}{2}, \quad \mathbf{v}_g = c \cos \frac{ak}{2} \mathbf{i}. \quad (2.119)$$

Выражение для тензора \mathbf{T} :

$$\mathbf{T} = a^2 \left(\cos(ak)\mathbf{ii} + \mathbf{jj} \right), \quad (2.120)$$

Подставляя (2.119), (2.120) в (2.112), получим выражение для суперпотока

$$\mathbf{G}_c = \frac{mc^4}{2d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \left(\sin^4 \frac{ak}{2} \mathbf{ii} + \mathbf{jj} \right). \quad (2.121)$$

Выпишем в явном виде зависимости радиусов от времени. Радиус, перпендикулярный направлению движения:

$$R_\perp = \sqrt{R_0^2 + v_\perp^2 t^2}, \quad v_\perp = v_R. \quad (2.122)$$

Радиус, сонаправленный с направлением движения:

$$R_\parallel = \sqrt{R_0^2 + v_\parallel^2 t^2}, \quad v_\parallel = v_R \sin^2 \left(\frac{ak}{2} \right), \quad (2.123)$$

где

$$R_0 = \sqrt{\frac{\sum_{\mathbf{r}} A^2 r^2}{d \sum_{\mathbf{r}} A^2}}, \quad v_R = \frac{c^2}{\omega} \sqrt{\frac{\sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2}{d \sum_{\mathbf{r}} A^2}}. \quad (2.124)$$

Таким образом, возмущение деформируется в обоих направлениях, но при любых k расплывание поперек движения происходит быстрее.

Квадратная решетка. Движение по диагонали

Рассмотрим движение «по диагонали» в плоской квадратной решетке. Соответствующий волновой вектор имеет вид

$$\mathbf{k} = k(\mathbf{i} + \mathbf{j}), \quad (2.125)$$

заметим, что здесь k — не модуль волнового вектора, а его компоненты ($|\mathbf{k}| = k\sqrt{2}$). Групповая скорость:

$$\mathbf{v}_g = c \cos \frac{ak}{2} \mathbf{e}_v, \quad \mathbf{e}_v = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{i} + \mathbf{j}). \quad (2.126)$$

Выражение для тензора \mathbf{T} :

$$\mathbf{T} = a^2 \cos(ak) \mathbf{E}, \quad (2.127)$$

Подставив (2.126), (2.127) в (2.112), получим

$$\mathbf{G}_c = \frac{mc^4}{2d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \left(\sin^4 \frac{ak}{2} \mathbf{e}_v \mathbf{e}_v + \cos^2(ak) (\mathbf{E} - \mathbf{e}_v \mathbf{e}_v) \right). \quad (2.128)$$

Выпишем в явном виде зависимости радиусов от времени. Радиус, перпендикулярный направлению движения:

$$R_{\perp} = \sqrt{R_0^2 + v_{\perp}^2 t^2}, \quad v_{\perp} = v_R \cos(ak). \quad (2.129)$$

Радиус, сонаправленный с направлением движения:

$$R_{\parallel} = \sqrt{R_0^2 + v_{\parallel}^2 t^2}, \quad v_{\parallel} = v_R \sin^2 \left(\frac{ak}{2} \right), \quad (2.130)$$

где R_0, v_R определены в (2.124). При малых ak расплывание происходит поперек направления движения. При $ak = \arccos(1/3)$ скорости расплывания вдоль и поперек одинаковы. При больших k расплывание вдоль быстрее, чем поперек. При $ak = \pi/2$ меняется только продольный радиус. В разделе 2.6.2 проводится

сравнение полученных результатов с численным экспериментом.

Квадратная решетка. Движение в произвольном направлении

Как было сказано выше, в квадратной решетке направления волнового вектора и групповой скорости совпадают друг с другом только для длинных волн, при движении вдоль связи и по диагонали. Тогда и одна из собственных осей энергетического эллипса тоже совпадает с волновым вектором. В других случаях все эти направления могут различаться. Формулы для групповой скорости и тензора суперпотока полностью описывают расположение соответствующих направлений. Не останавливаясь на этом подробно, приведем иллюстрации для нескольких случаев волновых векторов.

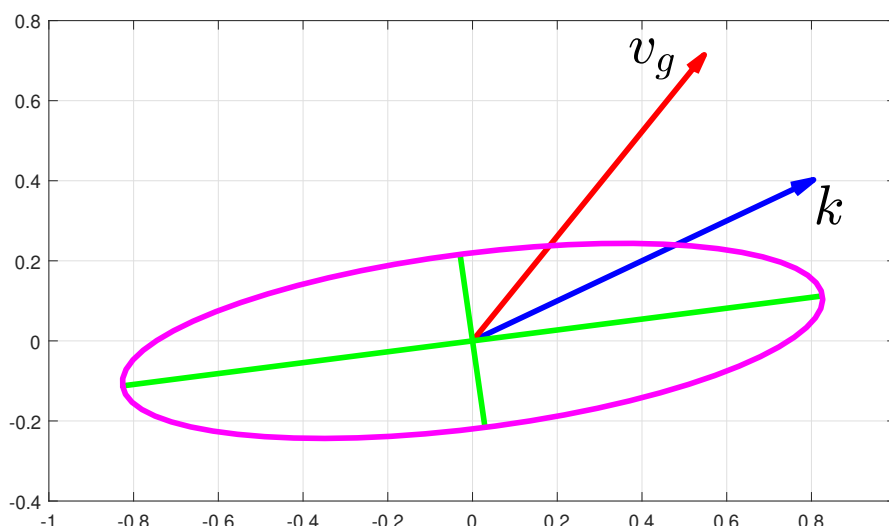


Рис. 2.13: Схема расположения волнового вектора \mathbf{k} , групповой скорости \mathbf{v}_g и эллипса энергии при $ak_x = 3\pi/4$, $ak_y = 3\pi/8$.

На рис. 2.13 для случая $ak_x = 3\pi/4$, $ak_y = 3\pi/8$ показаны волновой вектор, вектор групповой скорости, эллипс энергии (показывающий отношения скорости изменения радиусов) и энергетические радиусы (зеленый цвет). На рис. 2.14 то же изображено для разных волновых векторов. По осям отложены компоненты волнового вектора, красными стрелками показаны соответствующие им направления групповых скоростей, синим цветом — эллипсы энергии. Соблюден масштаб отношений осей эллипсов и длин для векторов групповой скорости. Видно, что при малых волновых числах эллипс расположен перпендикулярно скорости и вытянут в поперечном направлении, при $k \rightarrow 0$ эллипс

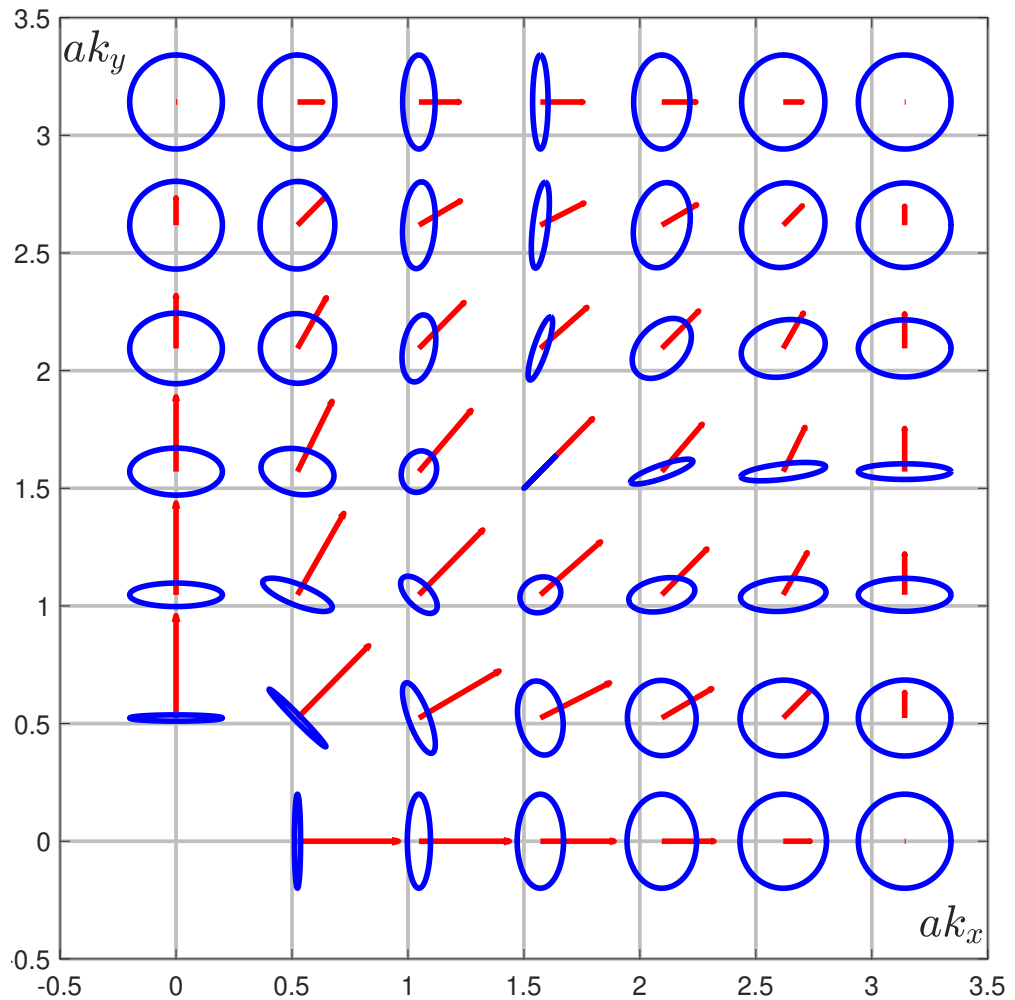


Рис. 2.14: Схема расположения эллипсов энергии и групповых скоростей при различных значениях волновых векторов. Красным цветом показаны векторы групповых скоростей.

стремится к отрезку. Это говорит о том, что в направлении движения размер возмущения не меняется. Для движения вдоль связи видно, как с увеличением волнового числа увеличивается скорость продольного роста возмущения, при этом поперечная скорость остается постоянной. Для движения по диагонали сначала поперечная скорость убывает, продольная увеличивается, как было показано выше, при $ak_x = ak_y = \arccos(1/3)$ скорости становятся равны. При $ak_x = ak_y = \pi/2$ поперечная скорость обращается в ноль, и расплывание происходит только вдоль движения. Дальше при больших ak меняются оба радиуса, но сильнее эллипс вытягивается вдоль направления групповой скорости. Для более сложных (несимметричных) направлений видно, что групповая скорость не сонаправлена с волновым вектором. Оси эллипсов при этом не совпадают ни с одним из этих векторов. Более подробное обсуждение таких случаев остается за рамками данной работы.

2.6 Дисперсия энергии: сравнение с численным моделированием

При моделировании мы рассматриваем квадратную сетку из $N \times N$ частиц с периодическими граничными условиями. Начальные скорости и перемещения частиц задаются с использованием начальных условий (2.101), (2.102), (2.103). В качестве огибающей выбрана функция Гаусса:

$$A(\mathbf{r}) = e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}}, \quad (2.131)$$

где $r \stackrel{\text{def}}{=} |\mathbf{r}|$. Количество частиц N и характеристика размера возмущения σ выбираются таким образом, чтобы выполнялось $\sigma \leq 0,1Na$. Для численного интегрирования используется метод Верле с шагом по времени $dt = 0,1$.

2.6.1 Длинные волны

В данном параграфе описаны результаты моделирования для длинных волн ($ak \rightarrow 0$). Для этого случая теория предсказывает, что изменяться будет только радиус, перпендикулярный направлению движения. В длинноволновом приближении квадратную решетку можно считать изотропной.

На рис. 2.15 показан вид возмущения в изометрии (а) и вид сверху (проекция на плоскость xy) (б). Эллипс энергии показан белым цветом. Видно, что эллипс энергии хорошо описывает форму возмущения и вытягивается поперек направления движения.

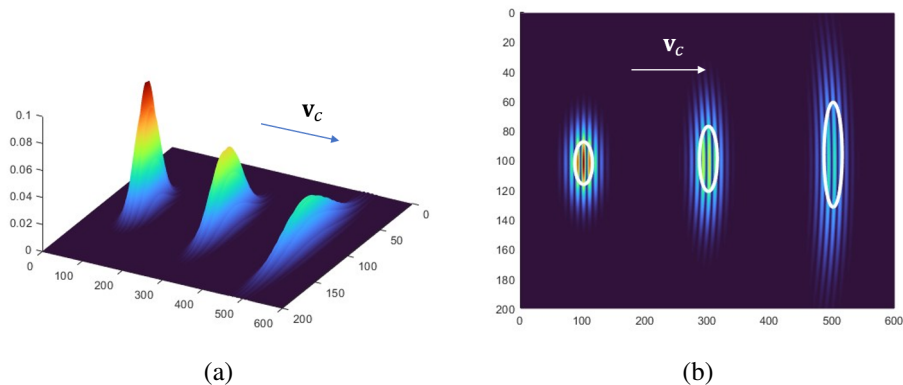


Рис. 2.15: Вид возмущения и энергетический эллипс

Также можно заметить (рис. 2.16), что гребни волн, которые в начальный

момент параллельны друг другу, со временем «закругляются» и располагаются по дуге окружности. С точки зрения кинетической теории это можно объяснить следующим образом. Начальное возмущение представляет собой набор квази-частиц (фононов), которые движутся с равными по модулю скоростями, но под немного различными углами. Разбегание квазичастиц в разных направлениях и обеспечивает расплывание исходного возмущения. При этом все они движутся с одной скоростью, поэтому размер возмущения вдоль движения не изменяется, а фронт волны приобретает форму дуги окружности. Однако, аналитическое описание этого процесса остается за рамками данной работы. На рис. 2.15 видно,

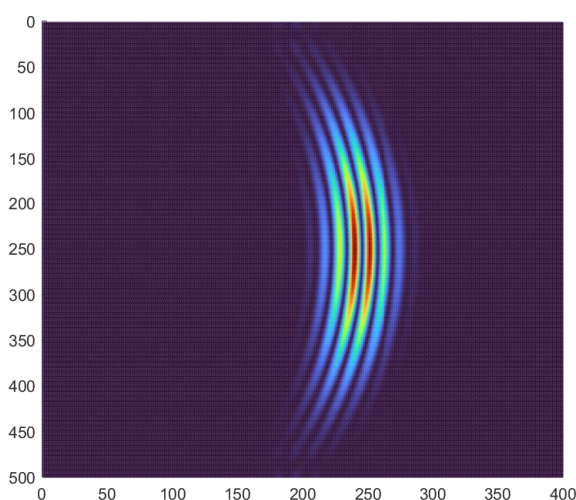


Рис. 2.16: Изменение формы возмущения со временем

что при движении и расплывании возмущения его амплитуда уменьшается. Это согласуется с законом сохранения энергии. Но рассматриваемая в настоящей работе теория этот процесс не описывает.

Движение в разных направлениях

Чтобы оценить влияние решетки на длинноволновое возмущение, сравним энергетические радиусы для разных направлений волновых векторов. На рис. (2.17) показана зависимость энергетического радиуса от времени (в безразмерных переменных) для трех возмущений, движущихся по разным направлениям: вдоль связи, по диагонали и по направлению «шахматного коня» ($k_x = 2k_y$). Модуль волнового вектора во всех случаях равен $\pi/10$. Видно, что полученные зависимости совпадают для всех направлений и хорошо согласуются с аналитическим решением. Такая независимость решений от направления движения

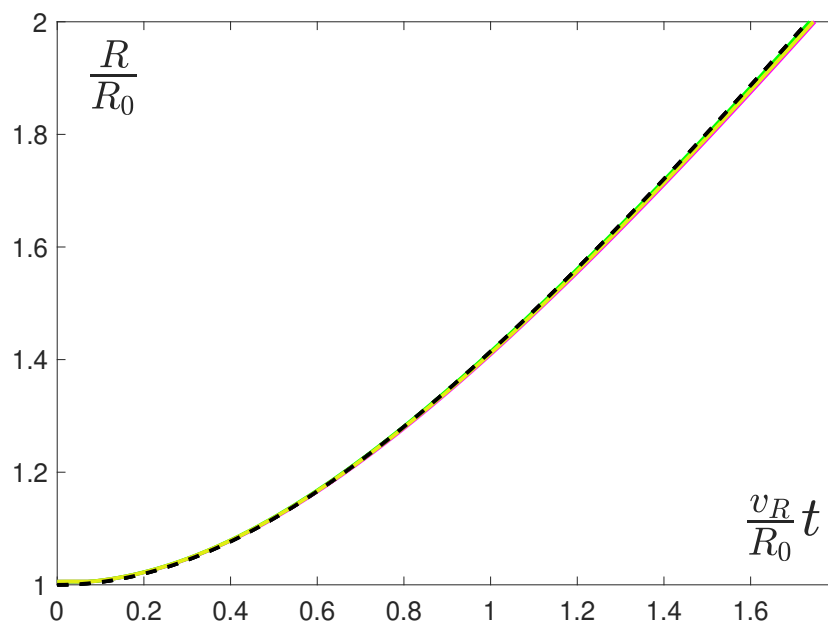


Рис. 2.17: Зависимость энергетического радиуса от времени для разных направлений движения: вдоль связи (зеленая линия), по диагонали (желтая линия), по направлению шахматного коня (розовая линия). Аналитическое решение показано пунктирной линией.

объясняется тем, что в случае достаточно длинных волн структура решетки не влияет на возмущение, и решетку можно считать изотропной.

Энергетический радиус при разных начальных размерах возмущения

Построим графики для возмущений разных размеров. На рис. 2.18 показана зависимость безразмерного энергетического радиуса от времени для возмущений различного размера $\sigma = \{20, 40, 80\}$. Видно, что в безразмерных переменных (2.99), (2.100) графики для разных σ совпадают. Стоит также отметить, что возмущение может распространяться довольно долго, и аналитическое решение при этом остается справедливым. Например, возмущение, соответствующее $\sigma = 20$, за время расчета увеличивается в 8 раз (красная линия).

Энергетический радиус при разных волновых числах

Оценим область применимости полученной континуальной теории. Для этого рассмотрим движение вдоль связи, и будем уменьшать длину волны. На рисунке 2.19 показано, как увеличение волнового числа влияет на решение. Рассмотрено движение вдоль связи для $ak_x = \{\pi/8; \pi/4; 3\pi/8; \pi/2\}$, $ak_y = 0$. Видно, что для длинных волн ($ak_x = \pi/8$) аналитическое решение хорошо согласуется

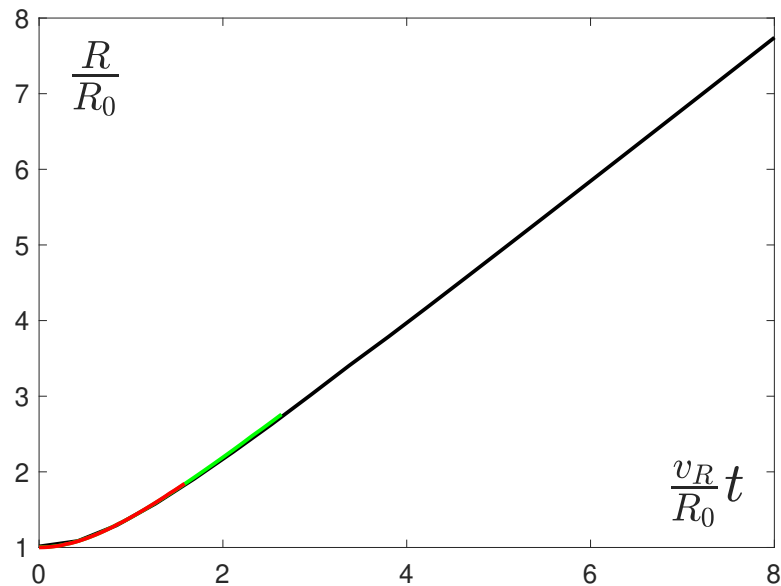


Рис. 2.18: Зависимость энергетического радиуса от времени при различных начальных размерах возмущения: $\sigma = 20$ (черная линия), $\sigma = 40$ (зеленая линия), $\sigma = 80$ (красная линия), .

с численным. Но с увеличением волнового числа результаты моделирования все сильнее отклоняются от аналитической кривой, то есть формула, полученная для континуальной среды, становится непригодной. Результаты моделирования для больших волновых чисел (коротких волн) приведены в следующем параграфе.

2.6.2 Короткие волны

В данном параграфе описаны результаты численного моделирования для больших волновых чисел (коротких волн). Как один из наиболее интересных случаев, мы рассматриваем движение по диагонали в квадратной решетке. С одной стороны, этот пример достаточно прост, так как групповая скорость сонаправлена с волновым вектором, и для этого случая удастся получить простую аналитическую зависимость радиусов от времени. Но с другой стороны, такой пример позволяет продемонстрировать, как длина волнового вектора может влиять на расположение максимального энергетического радиуса.

Рисунок 2.20 показывает, что при $ak_x = ak_y < \arccos(1/3)$ поперечная скорость расплывания больше продольной, при $ak_x = ak_y = \arccos(1/3)$ скорости равны, при $ak_x = ak_y > \arccos(1/3)$ расплывание вдоль направления движения происходит быстрее, чем поперек. Данные результаты точно согласуются с аналитическим решением, полученным в разделе 2.5.2.

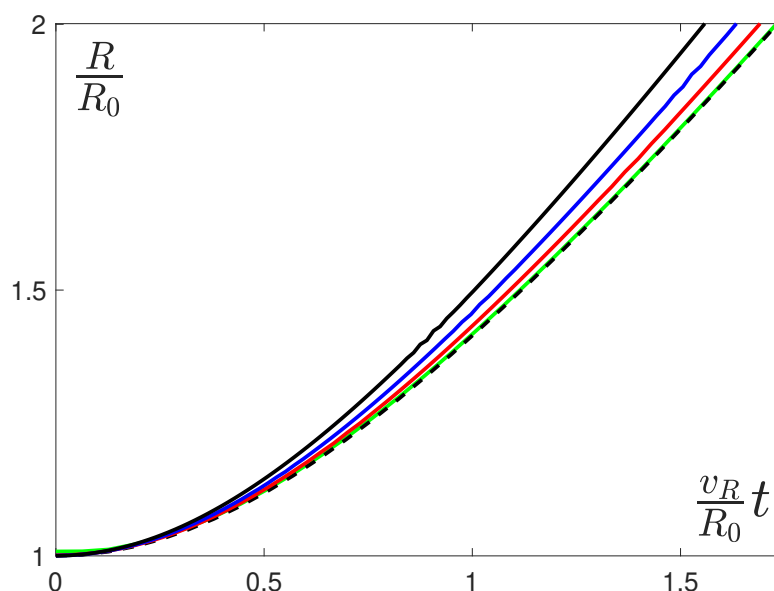
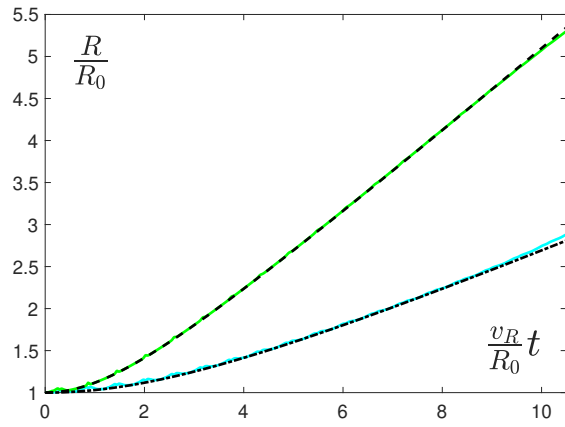


Рис. 2.19: Зависимость энергетического радиуса от времени при $ak_x = \pi/8$ (зеленая линия), $\pi/4$ (красная линия), $3\pi/8$ (синяя линия), $\pi/2$ (черная линия). Черной пунктирной линией показано аналитическое решение (2.99)

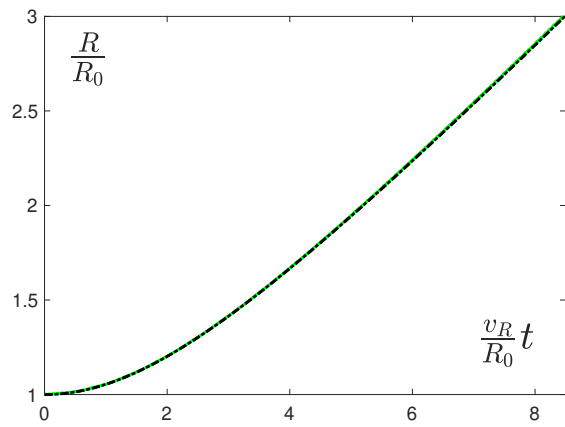
2.7 Заключение к главе 2

В данной главе с помощью методов энергетической динамики было исследовано распывание движущегося локализованного возмущения в многомерной упругой среде. Аналитические результаты получены для континуальной и для дискретной сред. Отметим, что континуальное описание можно получить из дискретного как длинноволновое приближение (предел при волновом числе, стремящемся к нулю). Однако мы продемонстрировали возможность прямого получения необходимых энергетических характеристик из уравнений сплошной среды.

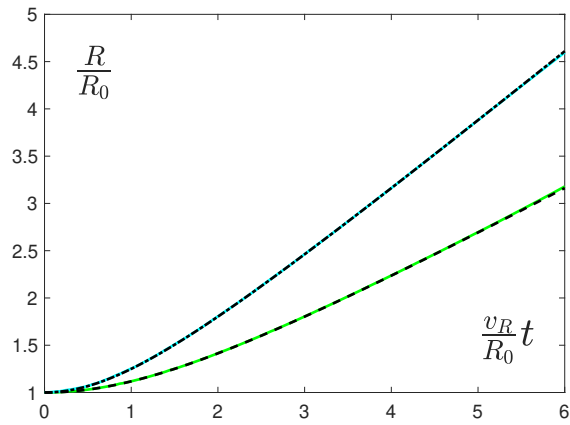
Для описания эволюции формы и размера энергетического сгустка введено понятие энергетического эллипса. Он определяется через центральный второй момент распределения энергии и характеризует размеры возмущения в различных направлениях. В качестве примера локализованного возмущения рассматривается волновой пакет. Показано, что для непрерывной среды (и для длинных волн в дискретной среде) распывание происходит поперек направления движения. Размер возмущения вдоль направления движения не изменяется. С точки зрения кинетической теории это можно объяснить тем, что в бездисперсионной среде все фононы (квазичастицы), совокупностью которых можно представить



(a)



(b)



(c)

Рис. 2.20: Зависимость поперечного R_{\perp} (зеленая линия) и продольного R_{\parallel} (голубая линия) энергетических радиусов от времени при движении по диагонали для разных волновых чисел: $ak_x = ak_y = \pi/3$ (а), $ak_x = ak_y = \arccos(1/3)$ (б), $ak_x = ak_y = 2\pi/3$ (с). Черными линиями показаны соответствующие аналитические решения.

волновой пакет, движутся с одной по модулю скоростью, но с небольшим разбросом по направлениям. Поэтому частицы не «отстают» и не «догоняют» друг друга, сохраняя постоянную ширину возмущения вдоль движения. При этом отличие в направлениях скоростей частиц приводит к расширению волнового пакета в поперечном направлении. Численный эксперимент также показывает, что волновой пакет при движении вытягивается в дугу с центром в начальной точке, что соответствует разбеганию частиц в разные стороны с одной по модулю скоростью. Однако развитая в настоящей работе теория не описывает данный процесс.

Для дискретной среды также получен тензор суперпотока, через который выражаются скорости изменения энергетических радиусов. Но здесь он имеет более сложный вид, зависящий от структуры кристаллической решетки и от волнового вектора. Дискретный случай усложняется еще и тем, что волновой вектор не всегда сонаправлен с групповой скоростью. Например, в квадратной решетке это выполняется только при малых волновых числах и при волновых векторах, направленных вдоль межатомной связи или по диагонали [6]. В пределе малых волновых чисел практически отсутствует дисперсия, и мы получаем то же, что и для континуальной среды. В случае движения вдоль связи волновой пакет может расплываться в обоих направлениях, но поперечное расплывание при любых волновых числах происходит быстрее, чем продольное. При движении по диагонали в квадратной решетке возможны три варианта: при малых волновых числах поперечный радиус растет быстрее продольного, то есть влияние дисперсии скорости не очень велико. Есть значение волнового числа, при котором продольная и поперечная скорости расплывания равны, то есть рост возмущения за счет дисперсии квазичастиц по модулям скоростей совпадает с его ростом за счет дисперсии по направлениям. В этом случае энергетический сгусток растет, но практически не меняет формы. При больших волновых числах преобладает дисперсия по модулям скоростей, и продольная скорость оказывается больше поперечной. Теоретические результаты хорошо согласуются с численным экспериментом.

Дальнейшим развитием данной работы может стать обобщение результатов на случай неизотропных сред. В этом случае скорости и направления изменения энергетических радиусов будут зависеть и от тензора жесткости. Также интерес представляет описание более сложных изменений формы возмущения,

например «закругления» волнового пакета в случае длинных волн.

Заключение

В работе рассмотрены две задачи, направленные на изучение нестационарных волновых процессов в дискретных и континуальных средах. В главе получено общее и фундаментальное решения задачи баллистической термоупругости для нелинейной цепочки в случае теплового удара. Проведено сравнение с аналогичными задачами при классической теплопроводности Фурье. Рассмотрены частные случаи начальных тепловых условий: ступенчатый профиль и профиль в виде синуса с огибающей. Проведены численные эксперименты, моделирующие динамику цепочки, и показано их сравнение с аналитическими решениями. Подробный обзор результатов, касающихся баллистической термоупругости, можно найти в заключении к первой главе 1.6.

В главе 1.6 развит подход к описанию распространения локализованного энергетического возмущения в упругой многомерной среде, основанный на методах энергетической динамики [32]. Введено понятие радиусов энергии, характеризующих размер возмущения в разных направлениях. Получены формулы, дающие зависимость энергетических радиусов от времени в дискретной и континуальной среде. Такой подход позволяет описывать движение и эволюцию формы энергетического сгустка без решения уравнений динамики среды. Обзор результатов по данной задаче содержится в заключении ко второй главе 2.7.

Список использованной литературы

1. Achenbach, J. Wave propagation in elastic solids. *North Holland Series in Applied Mathematics and Mechanics* (1973).
2. Ahmadi, G., and Firoozbakhsh, K. First strain gradient theory of thermoelasticity. *International Journal of Solids and Structures* 11, 3 (1975), 339–345.
3. Anufriev, R., Gluchko, S., Volz, S., and Nomura, M. Quasi-ballistic heat conduction due to lévy phonon flights in silicon nanowires. *ACS Nano* 12, 12 (2018), 11928–11935.
4. Babenkov, M., and Ivanova, E. Analysis of the wave propagation processes in heat transfer problems of the hyperbolic type. *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 26 (08 2013), 34–.
5. Babich, V., and Kiselev, A. *Elastic waves. A high-frequency theory*. 01 2014.
6. Baimova, J. A., Bessonov, N. M., and Krivtsov, A. M. Motion of localized disturbances in scalar harmonic lattices. *Phys. Rev. E* 107 (Jun 2023), 065002.
7. Baimova, Y., Murzaev, R., and Rudskoy, A. Discrete breathers in graphane in thermal equilibrium. *Physics Letters A* (07 2017).
8. Berinskii, I., and Kuzkin, V. Equilibration of energies in a two-dimensional harmonic graphene lattice. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 378 (11 2019), 20190114.
9. Bonetto, F., Lebowitz, J. L., and Rey-Bellet, L. *Fourier's law: A challenge to theorists*. pp. 128–150.
10. Candy, J., and Rozmus, W. A symplectic integration algorithm for separable hamiltonian functions. *Journal of Computational Physics* 92, 1 (1991), 230–256.

11. Chang, C. W., Okawa, D., Garcia, H., Majumdar, A., and Zettl, A. Breakdown of Fourier's law in nanotube thermal conductors. *Phys. Rev. Lett.* 101 (Aug 2008), 075903.
12. Cveticanin, L., C. D. Acoustic metamaterials: Theory and application. in: Herisanu, n., marinca, v. (eds.). *Acoustics and Vibration of Mechanical Structures-AVMS-2017* (2018).
13. Dhar, A. Heat transport in low-dimensional systems. *Advances in Physics* 57, 5 (2008), 457–537.
14. Fermi, E., Pasta, P., Ulam, S., and Tsingou, M. Studies of nonlinear problems. *Technical Report No. LA-1940 31* (1995), 1401–1423.
15. Gavrilov, S., and Krivtsov, A. Steady-state kinetic temperature distribution in a two-dimensional square harmonic scalar lattice lying in a viscous environment and subjected to a point heat source. *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 32 (01 2020).
16. Gavrilov, S. N. Discrete and continuum fundamental solutions describing heat conduction in a 1d harmonic crystal: Discrete-to-continuum limit and slow-and-fast motions decoupling. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 194 (2022), 123019.
17. Gendelman, O., and Paul, J. Kapitza thermal resistance in linear and nonlinear chain models: Isotopic defect. *Physical Review E* 103 (05 2021).
18. Hsiao, T. K., Chang, H. K., Liou, S. C., Chu, M. W., Lee, S. C., and Chang, C. W. Observation of room-temperature ballistic thermal conduction persisting over 8.3 μm size nanowires. *Nat. Nanotech* 8 (2013), 534–538.
19. Huberman, S., Duncan, R. A., Chen, K., Song, B., Chiloyan, V., Ding, Z., Maznev, A. A., Chen, G., and Nelson, K. A. Observation of second sound in graphite at temperatures above 100 K. *Science* 364, 6438 (2019), 375–379.
20. Indeitsev, D., Naumov, V., Semenov, B., and Belyaev, A. Thermoelastic waves in a continuum with complex structure. *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 89, 4 (2009), 279–287.

21. Johnson, J. A., Maznev, A. A., Cuffe, J., Eliason, J. K., Minnich, A. J., Kehoe, T., Torres, C. M. S., Chen, G., and Nelson, K. A. Direct measurement of room-temperature nondiffusive thermal transport over micron distances in a silicon membrane. *Phys. Rev. Lett.* 110 (Jan 2013), 025901.
22. Kiselev, A. Localized light waves: Paraxial and exact solutions of the wave equation (a review). *Optics and Spectroscopy (English translation of Optika i Spektroskopiya)* 102 (4) (2007).
23. Korznikova, E., Kuzkin, V., Krivtsov, A., Xiong, D., Gani, V., Kudreyko, A., and Dmitriev, S. Equilibration of sinusoidal modulation of temperature in linear and nonlinear chains, 01 2021.
24. Kosevich, Y. A. Multichannel propagation and scattering of phonons and photons in low-dimension nanostructures. *Physics-Uspekhi* 51, 8 (aug 2008), 848.
25. Krivtsov, A. From nonlinear oscillations to equation of state in simple discrete systems. *Chaos, Solitons Fractals* 17, 1 (2003), 79–87.
26. Krivtsov, A. Energy oscillations in a one-dimensional crystal. *Doklady Physics* 59 (10 2014), 427–430.
27. Krivtsov, A. *The Ballistic Heat Equation for a One-Dimensional Harmonic Crystal*. Springer International Publishing, Cham, 2019, pp. 345–358.
28. Krivtsov, A., and Murachev, A. Transition to thermal equilibrium in a crystal subjected to instantaneous deformation. *Journal of Physics: Condensed Matter* 33 (04 2021).
29. Krivtsov, A., Podolskaya, E., and Shubina, V. Asymptotics of a thermal wave in one-dimensional harmonic crystal. *Materials Physics and Mechanics* 42 (12 2019), 837–845.
30. Krivtsov, A. M. *Deformation and fracture of solids with microstructure*. Fizmatlit, Moscow, 2007. In Russian.
31. Krivtsov, A. M. Heat transfer in infinite harmonic onedimensional crystals. *Dokl. Phys.* 60 (2015), 407–411.

32. Krivtsov, A. M. Dynamics of matter and energy. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics* 103, 4 (2023), e202100496.
33. Krivtsov, A. M., and Kuzkin, V. A. *Discrete and Continuum Thermomechanics*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2017, pp. 1–16.
34. Kuzkin, V., and Krivtsov, A. Unsteady ballistic heat transport: linking lattice dynamics and kinetic theory. *Acta Mechanica* 232 (05 2021), 1–14.
35. Kuzkin, V. A. Thermal equilibration in infinite harmonic crystals. *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 31 (2019), 1401–1423.
36. Kuzkin, V. A. Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell. *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 31 (2019), 1573–1599.
37. Kuzkin, V. A. Acoustic transparency of the chain-chain interface. *Phys. Rev. E* 107 (Jun 2023), 065004.
38. Kuzkin, V. A., and Krivtsov, A. M. Fast and slow thermal processes in harmonic scalar lattices. *Journal of Physics: Condensed Matter* 29, 50 (nov 2017), 505401.
39. Kuzkin, V. A., and Krivtsov, A. M. Ballistic resonance and thermalization in the fermi-pasta-ulam-tsingou chain at finite temperature. *Phys. Rev. E* 101 (Apr 2020), 042209.
40. Käding, O. W., Skurk, H., and Maznev, A. A. Transient thermal gratings at surfaces for of bulk materials and thin films. *Appl. Phys. A* 61 (1995), 253–261.
41. Lepri, S., Livi, R., and Politi, A. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices. *Physics Reports* 377, 1 (2003), 1–80.
42. Liazhkov, S., and Kuzkin, V. Unsteady two-temperature heat transport in mass-in-mass chains. *Physical Review E* 105 (04 2022).
43. Ma, D., Xing, Y., and Zhang, L. Reducing interfacial thermal resistance by interlayer. *Journal of Physics: Condensed Matter* 35 (12 2022).
44. McLachlan, R. I., and Atela, P. The accuracy of symplectic integrators. *Nonlinearity* 5, 2 (mar 1992), 541.

45. Mindlin, R. D. Micro-structure in linear elasticity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 16 (1964), 51–78.
46. Morozov, N., P. Y. *Dynamics of Fracture*. Foundations of Engineering Mechanics, 2000.
47. Olver, F. *Asymptotics and Special Functions*. 1974.
48. Porubov, A. V., K. A. Dispersive propagation of localized waves in a mass-in-mass metamaterial lattice. *Continuum Mech. Thermodyn.* 34 (2022), 1475–1483.
49. Rogers, J. A., Maznev, A. A., Banet, M. J., and Nelson, K. A. Optical generation and characterization of acoustic waves in thin films: Fundamentals and applications. *Annual Review of Materials Research* 30, Volume 30, 2000 (2000), 117–157.
50. Romeo, F., and Ruzzene, M. Wave propagation in linear and nonlinear periodic media: Analysis and applications. *CISM Courses and Lectures Springer* (2021).
51. Savin, A., and Kosevich, Y. Conformations and thermal dynamics of graphene-based polymer nanocarpets. *Materials Science and Engineering: B* 264 (02 2021), 114920.
52. Sokolov, A., Krivtsov, A., and Mueller, W. Localized heat perturbation in harmonic 1d crystals. solutions for an equation of anomalous heat conduction. *Physical Mesomechanics* 20 (02 2017).
53. Sokolov, A., Mueller, W., Porubov, A., and Gavrilov, S. Heat conduction in 1d harmonic crystal: Discrete and continuum approaches. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 176 (09 2021), 121442.
54. Vicanek, M., Rosch, A., Piton, F., and Simon, G. Thermal deformation of a solid surface under laser irradiation. *Appl. Phys. A* 59 (1994), 407–412.
55. Whitham, G. Linear and nonlinear waves. *John Wiley Sons* (1974).
56. Xu, X., Pereira, L., and Wang, Y. Length-dependent thermal conductivity in suspended single-layer graphene. *Nat Commun* 5 (2014), 3689.

ГЛАВА А

Приложения к главе 1

А.1 Континуализация уравнений динамики

А.1.1 Континуализация уравнений динамики

Для перехода к макроскопическим уравнениям необходимо провести континуализацию уравнения динамики цепочки. Для этого вычисляется математическое ожидание от уравнения движения (1.1):

$$m \langle v_n \rangle' = \langle F_n - F_{n-1} \rangle. \quad (\text{A.1})$$

Сопоставим цепочке эквивалентную сплошную среду, положения точек r_n которой в деформированном состоянии определяются следующим образом:

$$r_n = na + \langle u_n \rangle. \quad (\text{A.2})$$

Введем непрерывные функции u и σ такие, что

$$u(r_n) = \langle u_n \rangle, \quad \sigma(r_n) = \langle F_n \rangle = \langle \Pi'(a + \epsilon_n) \rangle. \quad (\text{A.3})$$

Предполагая, что они мало меняются на расстояниях порядка a , уравнение динамики можно привести к виду

$$\rho \dot{v} = \frac{\partial \sigma}{\partial x}, \quad \rho(r_n) = \frac{m}{V(r_n)}, \quad V(r_n) = a + \epsilon_n. \quad (\text{A.4})$$

Это уравнение совпадает с уравнением одномерной сплошной среды. Макроскопические напряжения и плотность в этой эквивалентной сплошной среде определяются формулами (A.3), (A.4).

А.1.2 Континуализация уравнений баланса энергии

Дальше проводится континуализация уравнения баланса энергии, позволяющая получить выражения, связывающие тепловой поток в цепочке и тепловую

энергию с микропараметрами.

Рассмотрим уравнение баланса энергии для частицы. Полная энергия E_n частицы n имеет вид

$$E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 + \frac{1}{2}(\Pi_n + \Pi_{n-1}). \quad (\text{A.5})$$

Вычисление математического ожидания от производной полной энергии и ее континуализация приводят к следующему выражению:

$$\langle E_n \rangle' \approx \frac{V}{2} \frac{\partial}{\partial x} \langle F_n(v_{n+1} + v_n) \rangle. \quad (\text{A.6})$$

Определим внутреннюю энергию системы U и ее плотность \mathcal{U} :

$$U = \langle E_n \rangle - \frac{m}{2} \langle v_n \rangle^2, \quad U = m\mathcal{U} = \frac{m}{2} \langle \tilde{v}_n^2 \rangle + \langle \Pi(a + \epsilon_n) \rangle. \quad (\text{A.7})$$

Тогда уравнение (A.6) можно переписать в виде

$$\rho \left(\langle v_n \rangle^2 + \mathcal{U} \right)' = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} \langle F_n(v_{n+1} + v_n) \rangle \right). \quad (\text{A.8})$$

Подставив соотношения

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \langle F_n(v_{n+1} + v_n) \rangle &\approx \sigma(v_n) + \frac{1}{2} \langle \tilde{F}_n(\tilde{v}_{n+1} + \tilde{v}_n) \rangle, \\ \rho \langle \dot{v}_n \rangle \langle v_n \rangle &= \frac{\partial \sigma}{\partial x} \langle v_n \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

в (A.8), получим макроскопическое континуальное уравнение баланса энергии:

$$\rho \dot{\mathcal{U}} = \sigma \dot{\epsilon} - \frac{\partial h}{\partial x}, \quad h = -\frac{1}{2} \langle F_n(v_{n+1} + v_n) \rangle. \quad (\text{A.10})$$

A.1.3 Определяющие соотношения Грюнайзена и Дюамеля-Неймана

Для замыкания системы уравнений (A.4), (A.10) необходимы определяющие соотношения для напряжений σ и теплового потока h . Определяющие соотношения для напряжений в форме Ми-Грюнайзена и Дюамеля-Неймана можно получить с помощью подхода, предложенного в работе (ссылка?). Основная идея вывода состоит в том, что напряжения зависят от двух независимых малых ве-

личин: $\langle \epsilon_n \rangle$ и $\langle \tilde{\epsilon}_n \rangle$. Вводится разложение напряжений и внутренней энергии на холодную и тепловую составляющие:

$$\sigma = \langle \Pi'(V + \tilde{\epsilon}_n) \rangle = \sigma_0 + \sigma_T, \quad (\text{A.11})$$

$$\sigma_0 = \Pi'(V), \quad \sigma_T = \sigma - \sigma_0,$$

$$U = U_0 + U_T, \quad U_T = U - U_0, \quad U_0 = \Pi(V). \quad (\text{A.12})$$

Тепловые составляющие раскладываются в ряд по малому параметру $\langle \tilde{\epsilon}_n \rangle$. Также учитывается предположение о равенстве потенциальной и кинетической составляющих внутренней энергии. Исключение параметра из формул для напряжений и тепловой энергии позволяет получить уравнения состояния в форме Ми-Грюнайзена:

$$\sigma_0 = \Pi'(V), \quad \sigma_T = -\frac{\Gamma(V)}{V}U_T, \quad \Gamma = -\frac{V\Pi'''(V)}{2\Pi''(V)}, \quad (\text{A.13})$$

где $\Gamma(V)$ — коэффициент Грюнайзена. Можно показать, что в случае малых деформаций и температур определяющее уравнение (A.13) принимает форму уравнения Дюамеля-Неймана. Используя определение кинетической температуры и равенство кинетической и потенциальной составляющих тепловой энергии, получим

$$k_B T = m \langle \tilde{v}_n^2 \rangle, \quad U_T = c_V T, \quad c_V = \frac{k_B}{m}. \quad (\text{A.14})$$

Рассматривая малые деформации $\varepsilon = \frac{\partial u}{\partial x} \ll 1$ и считая, что $\Pi'(a) = 0$, раскладывая выражения для холодной и тепловой составляющих напряжений по ε и используя (A.14), получим

$$\sigma = E(\varepsilon - \beta T), \quad \beta = \frac{\Gamma(a)c_V \rho}{E}, \quad (\text{A.15})$$

где β — коэффициент теплового расширения.

Объединяя (A.4) и (A.15), получаем уравнение, описывающее макроскопическое поведение цепочки:

$$\ddot{u} = c_s^2(u'' - \beta T'). \quad (\text{A.16})$$

А.2 Вывод общего решения задачи термоупругости

А.2.1 Общее решение при произвольной групповой скорости

Решение задачи (1.7) с начальными условиями (1.9) можно найти с помощью формулы Даламбера:

$$u(x, t) = -\frac{\beta c_s}{2} \int_0^t \int_{x-c_s(t-\tau)}^{x+c_s(t-\tau)} (T'(y, \tau)) dy d\tau. \quad (\text{A.17})$$

Подстановка выражения для температуры (1.8) и интегрирование по координате приводит к следующей формуле для перемещений:

$$u(x, t) = -\frac{\beta c_s}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^t \left[T_0(x + c_s(t - \tau) + v_g(p)\tau) - T_0(x - c_s(t - \tau) + v_g(p)\tau) \right] d\tau dp. \quad (\text{A.18})$$

А.3 Общее решение для цепочки с взаимодействием ближайших соседей

В работе [39] для начальных условий

$$T_0(x) = T_b + \Delta T \sin qx, \quad (\text{A.19})$$

было получено следующее решение для перемещений:

$$u(x, t) = -\frac{\beta \Delta T}{q} \omega t J_1(\omega t) \cos qx, \quad (\text{A.20})$$

где $\omega = qc_s$, J_1 — функция Бесселя первого рода. Разложим произвольную функцию $T_0(x)$ в интеграл Фурье

$$T_0(x) = \int_0^\infty (a(k) \cos kx + b(k) \sin kx) dk, \quad (\text{A.21})$$

где $a(k)$, $b(k)$ — коэффициенты Фурье

$$\begin{aligned} a(k) &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} T_0(x) \cos kx \, dx, \\ b(k) &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} T_0(x) \sin kx \, dx. \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Переход от ряда к интегралу в решении для периодической $T_0(x)$ дает

$$u(x, t) = \beta c_s t \int_0^{\infty} J_1(c_s k t) (a(k) \sin kx - b(k) \cos kx) \, dk. \quad (\text{A.23})$$

Подставив (A.22) в (A.23) и изменив порядок интегрирования, получим

$$u(x, t) = \frac{\beta c_s t}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} T_0(y) \left(\int_0^{\infty} J_1(c_s k t) (\cos ky \sin kx - \sin ky \cos kx) \, dk \right) dy = \quad (\text{A.24})$$

$$= \frac{\beta c_s t}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} T_0(y) \left(\int_0^{\infty} J_1(c_s k t) \sin k(x - y) \, dk \right) dy. \quad (\text{A.25})$$

Интегрирование по k в (A.24) дает

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \frac{\beta c_s t}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} T_0(y) \frac{x - y}{c_s t \sqrt{(c_s t)^2 - (x - y)^2}} \times \\ &\quad \times H \left(1 - \left| \frac{x - y}{c_s t} \right| \right) dy. \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

Замена $(x - y)/c_s = \tau$ приводит к следующему выражению для перемещений:

$$u(x, t) = \frac{\beta c_s}{\pi} \int_{-t}^t T_0(x - c_s \tau) \frac{\tau}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau. \quad (\text{A.27})$$

Интегрирование (A.27) по частям дает еще одно выражение для поля перемещений:

$$u(x, t) = -\frac{\beta c_s^2}{\pi} \int_{-t}^t T_0'(x - c_s \tau) \sqrt{t^2 - \tau^2} d\tau. \quad (\text{A.28})$$

Общее решение для деформаций можно выразить через производную начального профиля температуры:

$$\varepsilon(x, t) = \frac{\beta c_s}{\pi} \int_{-t}^t T_0'(x - c_s \tau) \frac{\tau}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau. \quad (\text{A.29})$$

Интегрирование по частям в дает выражение для деформаций через вторую производную начального профиля температуры:

$$\varepsilon(x, t) = -\frac{\beta c_s^2}{\pi} \int_{-t}^t T_0''(x - c_s \tau) \sqrt{t^2 - \tau^2} d\tau. \quad (\text{A.30})$$

Видно, что если $T_0''(x) = 0$, то деформаций в цепочке не возникает, и поле перемещений однородно.

A.4 Классическая термоупругость

В данном параграфе рассматривается одномерная задача классической термоупругости, т.е. для описания эволюции температуры используется уравнение теплопроводности Фурье:

$$\ddot{u} = c_s^2(u'' - \beta T'), \quad \dot{T} - \kappa^2 T'' = 0, \quad (\text{A.31})$$

где β - коэффициент теплового расширения, κ^2 — коэффициент температуропроводности, $T(x, t)$, $u(x, t)$ — поля температуры и перемещений. Эту систему уравнений можно привести к безразмерному виду

$$\ddot{\bar{u}} - \bar{u}'' = -\bar{T}', \quad \dot{\bar{T}} - \bar{T}'' = 0, \quad (\text{A.32})$$

где точкой обозначены производные по безразмерному времени \bar{t} , штрихом — производные по безразмерной координате \bar{x} ,

$$\bar{t} = t/\tau, \quad \bar{x} = x/l, \quad \bar{u} = u/a, \quad \bar{T} = T/b, \quad (\text{A.33})$$

$$\tau = \kappa^2/c_s^2, \quad l = \kappa^2/c_s, \quad a = \beta\kappa^2 b/c_s, \quad (\text{A.34})$$

масштаб b выбирается в зависимости от начальных условий.

A.4.1 Фундаментальное решение

Рассмотрим начальные условия

$$T_0(x) = A\delta(x). \quad (\text{A.35})$$

Константа A здесь имеет размерность $K \cdot m$, поэтому в качестве масштаба температуры для безразмерного уравнения выберем $b = A/l = Ac_s/\kappa^2$, тогда масштаб перемещений будет иметь вид $a = A\beta$. Используя свойство дельта-функции

$$\delta(l\bar{x}) = \frac{1}{l}\delta(\bar{x}), \quad (\text{A.36})$$

преобразуем начальное условие к безразмерному виду

$$T_0(x) = A\delta(l\bar{x}) = \frac{A}{l}\delta(\bar{x}). \quad (\text{A.37})$$

Тогда начальные условия для безразмерной температуры:

$$\bar{T}_0(\bar{x}) = \delta(\bar{x}). \quad (\text{A.38})$$

Фундаментальное решение уравнения теплопроводности имеет вид

$$T(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} e^{-\frac{x^2}{4t}}. \quad (\text{A.39})$$

Здесь и далее в этом параграфе считаем все переменные безразмерными, черточки над буквами не пишем. Решение волнового уравнения (A.31) найдем с помощью формулы Даламбера. Получим следующее выражение для перемеще-

ний:

$$u(x, t) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{1}{\sqrt{\tau}} \left(e^{-\frac{(t-\tau-x)^2}{4\tau}} - e^{-\frac{(t-\tau+x)^2}{4\tau}} \right) d\tau. \quad (\text{A.40})$$

Максимальное значение перемещений достигается в точке $x = t$. В пределе при $t \rightarrow \infty$ функция $u(t, t)$ стремится к постоянной $1/2$, т.е. данная постановка задачи дает ограниченные перемещения.

A.4.2 Ступенчатое начальное распределение

Решение уравнений (A.31) при начальных условиях

$$T(x, 0) = T_b + \Delta T H(x), \quad (\text{A.41})$$

где $H(x)$ - функция Хевисайда. Константа ΔT здесь имеет размерность температуры, поэтому выберем ее в качестве масштаба температуры для безразмерного уравнения: положим $b = \Delta T$, тогда масштаб перемещений $a = \beta \kappa^2 \Delta T / c_s$. Начальные условия для безразмерной температуры:

$$\bar{T}(\bar{x}, 0) = \frac{T_b}{\Delta T} + H(\bar{x}). \quad (\text{A.42})$$

Дальше считаем все переменные безразмерными. Решение можно получить через свертку начальных условий с фундаментальным решением:

$$u(x, t) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \int_0^t \frac{1}{\sqrt{\tau}} \left(e^{-\frac{(t-\tau-x+y)^2}{4\tau}} - e^{-\frac{(t-\tau+x+y)^2}{4\tau}} \right) d\tau dy. \quad (\text{A.43})$$

Вычисление интеграла (A.58) по y приводит к следующему выражению для перемещений:

$$u(x, t) = \frac{1}{4} \int_0^t \left(\operatorname{erf} \frac{\tau - t + x}{2\sqrt{\tau}} - \operatorname{erf} \frac{t - \tau + x}{2\sqrt{\tau}} \right) d\tau. \quad (\text{A.44})$$

Вычислив этот интеграл при $x = 0$, получим

$$u(0, t) = -\frac{1}{2} \left(\frac{2\sqrt{t}}{\sqrt{\pi}} + \left(1 - e^t + e^t \operatorname{erf} \sqrt{t} \right) + t \right). \quad (\text{A.45})$$

При больших временах перемещение в точке $x = 0$ растет линейно:

$$u(0, t) \approx -\frac{1}{2}t. \quad (\text{A.46})$$

А.4.3 Синус

Рассмотрим начальные условия

$$T_0(x) = T_b + \Delta T \sin qx. \quad (\text{A.47})$$

Выберем масштаб температуры $b = \Delta T$, масштаб перемещений $a = \beta\kappa^2 \Delta T / c_s$, безразмерный волновой вектор: $\bar{q} = ql$. Тогда начальные условия можно записать в безразмерном виде

$$\bar{T}_0(x) = \frac{T_b}{\Delta T} + \sin \bar{q}\bar{x}. \quad (\text{A.48})$$

Дальше черточки не пишем, считаем все параметры безразмерными. Решения уравнений (А.31) для температуры и перемещений имеют вид

$$T(x, t) = \frac{T_b}{\Delta T} + e^{-q^2 t} \sin(qx), \quad (\text{A.49})$$

$$u(x, t) = A(t) \cos(qx),$$

$$A(t) = -\frac{e^{-q^2 t} + q \sin(qt) - \cos(qt)}{q^3 + q}. \quad (\text{A.50})$$

Поле перемещений остается синусоидальным, его амплитуда зависит от времени. Найдем зависимость механической энергии от времени. Безразмерная энергия: $\bar{\mathcal{E}} = \mathcal{E} / (E\beta^2 \Delta T^2)$, где E — модуль Юнга.

Выражение для механической энергии (все величины безразмерные)

$$\mathcal{E}(t) = \frac{q}{4\pi} \int_0^{2\pi/q} (\dot{u}^2 + u'^2) dx = \frac{1 + e^{-2qt} - 2e^{-qt} \cos(qt)}{4(q^2 + 1)}. \quad (\text{A.51})$$

Заметим, что $\bar{q}\bar{t} = qlt/\tau = qc_s t = \omega t$, где $\omega = qc_s$.

Со временем безразмерная механическая энергия стремится к значению $\frac{1}{4(q^2+1)}$. Коэффициент температуропроводности можно выразить через другие

параметры: $\kappa = \frac{\varkappa}{C_p \rho}$, где \varkappa — коэффициент теплопроводности. В размерном виде:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\infty) &= \frac{E \beta^2 \Delta T^2}{4 (q^2 \kappa^4 / c_s^2 + 1)} = \\ &= \frac{E^2 \beta^2 \Delta T^2}{4 (q^2 \kappa^4 \rho + E)} = \frac{E^2 \beta^2 \Delta T^2 C_p^4 \rho^3}{4 (q^2 \varkappa^4 + E C_p^4 \rho^3)}. \end{aligned} \quad (\text{A.52})$$

Найдем, как относится механическая энергия к начальной тепловой энергии. Тепловую энергию найдем по формуле

$$E_T = \frac{q}{2\pi} \int_0^{2\pi/q} \rho C_V T(x) dx = \rho C_V T_b, \quad (\text{A.53})$$

где C_V — удельная теплоемкость материала. Тогда отношение энергий:

$$\frac{\mathcal{E}}{E_T} = \frac{E^2 \beta^2 C_p^4 \rho^2}{4 C_V (q^2 \varkappa^4 + E C_p^4 \rho^3)} T_b \left(\frac{\Delta T}{T_b} \right)^2 \quad (\text{A.54})$$

или

$$\frac{\mathcal{E}}{E_T} = K T_b \left(\frac{\Delta T}{T_b} \right)^2, \quad (\text{A.55})$$

где K определяется параметрами материала. Для арсенида галлия $K \approx 2 \cdot 10^{-6}$, для стали $K \approx 1 \cdot 10^{-5}$ (при нормальных условиях).

А.4.4 Синус с огибающей

Рассмотрим безразмерные начальные условия

$$T_0(x) = e^{-\frac{x^2}{2s^2}} \sin kx, \quad (\text{A.56})$$

где x — безразмерная координата, k, s — безразмерные константы:

$$k = ql, \quad s = \sigma/l. \quad (\text{A.57})$$

Решение получим через свертку начальных условий с фундаментальным

решением:

$$u(x, t) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^t \frac{1}{\sqrt{\tau}} \left(e^{-\frac{(t-\tau-x+y)^2}{4\tau}} - e^{-\frac{(t-\tau+x+y)^2}{4\tau}} \right) e^{-\frac{y^2}{2s^2}} \sin ky \, d\tau \, dy. \quad (\text{A.58})$$

A.5 Вывод приближенного решения для синуса с огибающей

Для нечетной функции $T_0(x)$ перемещения можно найти по формуле (см. приложение A.2)

$$u(x, t) = -\beta c_s t \int_0^{\infty} J_1(c_s k t) b(k) \cos kx \, dk. \quad (\text{A.59})$$

где $b(k)$ - коэффициенты Фурье разложения функции $T_0(x) - T_b$:

$$T_0(x) - T_b = \int_0^{\infty} b(k) \sin kx \, dk, \quad (\text{A.60})$$

$$b(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} T_0(x) \sin kx \, dx. \quad (\text{A.61})$$

Найдем коэффициенты разложения начальной температуры (1.50) в интеграл Фурье:

$$b(k) = \frac{\Delta T \sigma}{\sqrt{2\pi}} \left[e^{-\frac{\sigma^2(k-q)^2}{2}} + e^{-\frac{\sigma^2(k+q)^2}{2}} \right]. \quad (\text{A.62})$$

Если $q\sigma \gg 1$ (то есть под огибающей помещается много длин волн), то второе слагаемое мало, и приближенно выполняется

$$b(k) \approx \frac{\Delta T \sigma}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\sigma^2(k-q)^2}{2}}. \quad (\text{A.63})$$

Введем обозначение

$$\tilde{b}(\varepsilon) = \frac{\Delta T \sigma}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\sigma^2 \varepsilon^2}{2}}, \quad \varepsilon = k - q. \quad (\text{A.64})$$

Рассматривая достаточно большие времена, можем использовать асимпто-

тическое выражение для функции Бесселя:

$$J_1(kc_s t) \sim B(kc_s t) \sin\left(kc_s t - \frac{\pi}{4}\right),$$

$$B(kc_s t) = \sqrt{\frac{2}{\pi kc_s t}}. \quad (\text{A.65})$$

Подставим (A.63), (A.65) в (A.59):

$$u(x, t) = -\beta c_s t \int_0^{\infty} b(k) B(kc_s t) \sin\left(kc_s t - \frac{\pi}{4}\right) \cos kx \, dk. \quad (\text{A.66})$$

Учитывая, что коэффициенты $a(k)$ сосредоточены вблизи $k = q$, вынесем монотонно меняющуюся с ростом k функцию $B(kc_s t)$ за знак интеграла в точке $k = q$. Произведение синусов преобразуем в разность косинусов

$$u(x, t) = \frac{\beta c_s t}{2} B(qc_s t) \int_0^{\infty} b(k) \left(\sin\left[k(x - c_s t) + \frac{\pi}{4}\right] - \sin\left[k(x + c_s t) - \frac{\pi}{4}\right] \right) dk. \quad (\text{A.67})$$

Рассмотрим первый интеграл в (A.67), обозначив $x - c_s t = z$:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} b(k) \sin\left[kz + \frac{\pi}{4}\right] dk &= \int_{-q}^{\infty} \tilde{b}(\varepsilon) \sin\left[\varepsilon z + qz + \frac{\pi}{4}\right] d\varepsilon = \\ &= \sin\left(qz + \frac{\pi}{4}\right) \int_{-q}^{\infty} \tilde{b}(\varepsilon) \cos(\varepsilon z) d\varepsilon + \\ &+ \cos\left(qz + \frac{\pi}{4}\right) \int_{-q}^{\infty} \tilde{b}(\varepsilon) \sin(\varepsilon z) d\varepsilon. \end{aligned} \quad (\text{A.68})$$

Поскольку $\tilde{b}(\varepsilon)$ быстро убывает с ростом $|\varepsilon|$, можно считать нижние пределы равными $-\infty$, тогда интеграл с синусом в (A.68) обращается в нуль, а второй можно вычислить, и он равен $A(z)$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{b}(\varepsilon) \cos(\varepsilon z) d\varepsilon = \Delta T e^{-\frac{z^2}{2\sigma^2}} = A(z). \quad (\text{A.69})$$

Преобразовав таким же образом второе слагаемое в (A.67) и подставив туда выражение для $B(qc_st)$ (A.65), получим

$$u(x, t) = \frac{\beta\sqrt{c_st}}{\sqrt{2\pi q}} \left[A(x - c_st) \sin\left(q(x - c_st) + \frac{\pi}{4}\right) - A(x + c_st) \sin\left(q(x + c_st) - \frac{\pi}{4}\right) \right]. \quad (\text{A.70})$$

Аналогичные рассуждения позволяют получить и приближенное решение для температуры. Оно при начальных условиях (1.50) выражается следующим образом:

$$T(x, t) = T_b + \int_0^\infty b(k) J_0(kc_st) \sin(kx) dk, \quad (\text{A.71})$$

где $a(k)$ — коэффициенты (A.63) разложения функции $T_0(x) - T_b$ в интеграл Фурье. Далее по аналогии с решением для перемещений получим

$$T(x, t) = T_b + \frac{1}{\sqrt{2\pi qc_st}} \left[A(x + c_st) \cos\left(q(x + c_st) + \frac{\pi}{4}\right) - A(x - c_st) \cos\left(q(x - c_st) - \frac{\pi}{4}\right) \right]. \quad (\text{A.72})$$

А.6 Обезразмеривание уравнения движения для нелинейной цепочки

Рассмотрим уравнение динамики цепочки

$$m\ddot{u}_n = k_1 [(u_{n+1} - u_n) - (u_n - u_{n-1})] + k_2 [(u_{n+1} - u_n)^2 - (u_n - u_{n-1})^2] \quad (\text{A.73})$$

с начальными условиями

$$u_n(0) = 0, \quad \dot{u}_n(0) = \sqrt{\frac{2k_B}{m} (T_b + \Delta T f(n))}. \quad (\text{A.74})$$

Введем безразмерные переменные

$$\bar{u} = \frac{u}{\xi}, \quad \bar{t} = \frac{t}{\tau}, \quad (\text{A.75})$$

где

$$\xi = \frac{k_1}{k_2}, \quad \tau = \sqrt{\frac{m}{k_1}}. \quad (\text{A.76})$$

Тогда уравнение (A.73) примет вид

$$\begin{aligned} \ddot{\bar{u}}_n = & [(\bar{u}_{n+1} - \bar{u}_n) - (\bar{u}_n - \bar{u}_{n-1})] + \\ & + [(\bar{u}_{n+1} - \bar{u}_n)^2 - (\bar{u}_n - \bar{u}_{n-1})^2] \end{aligned} \quad (\text{A.77})$$

где точкой обозначена производная по безразмерной координате \bar{t} . Начальные условия преобразуются к виду:

$$\begin{aligned} \bar{u}(0) &= 0, \\ \dot{\bar{u}}(0) &= \frac{k_2}{k_1^{3/2}} \sqrt{2k_B T_b \left(1 + \frac{\Delta T}{T_b} f(n)\right)}. \end{aligned} \quad (\text{A.78})$$

В итоге в задаче осталось два безразмерных параметра:

$$\frac{k_2 \sqrt{k_B T_b}}{k_1^{3/2}}, \quad \frac{\Delta T}{T_b}. \quad (\text{A.79})$$

Для цепочки α -FPU коэффициенты в уравнении движения (A.73):

$$k_1 = C, \quad k_2 = \alpha. \quad (\text{A.80})$$

Для цепочки Леннарда-Джонса аналогичные коэффициенты получаются при разложении силы Леннарда-Джонса в ряд вблизи положения равновесия:

$$k_1 = \frac{72D}{a^2}, \quad k_2 = -\frac{756D}{a^3}, \quad (\text{A.81})$$

где a — равновесное расстояние между частицами, D — энергия связи.

Приравняем значения безразмерных параметров для двух цепочек, и получим

условия, при которых влияние нелинейности в цепочках будет одинаковым:

$$\frac{\Delta T^{(\alpha)}}{T_b^{(\alpha)}} = \frac{\Delta T^{(LJ)}}{T_b^{(LJ)}}, \quad \frac{\alpha \sqrt{k_B T_b^{(\alpha)}}}{C^{3/2}} = -\frac{7}{4\sqrt{2}} \sqrt{\frac{k_B T_b^{(LJ)}}{D}}. \quad (\text{A.82})$$

Можно переписать это в виде

$$\frac{\Delta T^{(\alpha)}}{T_b^{(\alpha)}} = \frac{\Delta T^{(LJ)}}{T_b^{(LJ)}}, \quad \frac{\alpha a}{C} \sqrt{\frac{k_B T_b^{(\alpha)}}{Ca^2}} = -\frac{7}{4\sqrt{2}} \sqrt{\frac{k_B T_b^{(LJ)}}{D}}. \quad (\text{A.83})$$

Таким образом, для цепочки α -FPU нелинейность характеризуется двумя безразмерными параметрами $\alpha a/C$ и $\sqrt{k_B T_b^{(\alpha)}/Ca^2}$, а для цепочки Леннарда Джонса — одним параметром $\sqrt{k_B T_b^{(LJ)}/D}$

ГЛАВА В

Приложения к главе 2

В.1 Вывод общих формул для дискретной среды

В.1.1 Суперпоток

Второй момент распределения энергии:

$$\mathbf{M}_2 = \sum_{\mathbf{r}} \epsilon_{\mathbf{r}} \mathbf{r} \mathbf{r}. \quad (\text{B.1})$$

Найдем производную второго момента

$$\dot{\mathbf{M}}_2 = \sum_{\mathbf{r}} \dot{\epsilon} \mathbf{r} \mathbf{r} = \quad (\text{B.2})$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \alpha} \mathbf{r} \mathbf{r} C_{\alpha} (u_{\alpha} - u) (v_{\alpha} + v) = \dots \quad (\text{B.3})$$

$$= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{r}, \alpha} [\mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{r} + \mathbf{r} \mathbf{a}_{\alpha}] C_{\alpha} (u - u_{\alpha}) (v_{\alpha} + v). \quad (\text{B.4})$$

Вторую производную второго момента можно представить в виде:

$$\ddot{\mathbf{M}}_2 = \sum_{\mathbf{r}, \alpha} \frac{C_{\alpha}}{m} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} (\kappa - \pi) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \alpha, \beta} \frac{C_{\alpha} C_{\beta}}{m} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\beta} u_{\alpha} u_{\beta} = \quad (\text{B.5})$$

$$= \sum_{\mathbf{r}, \alpha} \frac{C_{\alpha}}{m} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} (\kappa - \pi) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \alpha, \beta} \frac{C_{\alpha} C_{\beta}}{m} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\beta} (u_{\alpha} - u) (u_{\beta} - u), \quad (\text{B.6})$$

где $\kappa_{\mathbf{r}}, \pi_{\mathbf{r}}$ — локальные кинетическая и потенциальная энергии.

В.2 Вывод общих формул для континуальной среды

В.2.1 Поток

Первый момент распределения энергии:

$$\mathbf{M}_1 = \int_{\mathbf{r}} \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{r} dV(\mathbf{r}). \quad (\text{B.7})$$

Подставим (2.78) в (B.7) и найдем производную по времени

$$\dot{\mathbf{M}}_1 = C \int_{\mathbf{r}} \nabla \cdot (v \nabla u) \mathbf{r} dV(\mathbf{r}). \quad (\text{B.8})$$

Используя тождество

$$\nabla \cdot (\mathbf{a}\mathbf{b}) = \nabla \cdot \mathbf{a}\mathbf{b} + \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}\nabla, \quad (\text{B.9})$$

равенство $\mathbf{r}\nabla = \mathbf{E}$ и то, что для локализованного возмущения выполняется

$$\int_{\mathbf{r}} \nabla \cdot (v \nabla u \mathbf{r}) dV(\mathbf{r}) = 0, \quad (\text{B.10})$$

получим выражение для потока энергии

$$\mathbf{h} = \dot{\mathbf{M}}_1 = C \int_{\mathbf{r}} v \nabla u dV(\mathbf{r}). \quad (\text{B.11})$$

В.2.2 Суперпоток

Второй момент распределения энергии:

$$\mathbf{M}_2 = \int_{\mathbf{r}} \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{r}\mathbf{r} dV(\mathbf{r}). \quad (\text{B.12})$$

Подставим в (B.12) выражение для энергии (2.78) и найдем производные второго момента.

$$\dot{\mathbf{M}}_2 = \int_{\mathbf{r}} \dot{\epsilon}(\mathbf{r}) \mathbf{r}\mathbf{r} dV(\mathbf{r}) = C \int_{\mathbf{r}} \nabla \cdot (v \nabla u) \mathbf{r}\mathbf{r} dV(\mathbf{r}). \quad (\text{B.13})$$

Преобразуем полученное выражение, используя тождество

$$\nabla \cdot (\mathbf{bA}) = (\nabla \cdot \mathbf{b})\mathbf{A} + \mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{A}, \quad (\text{B.14})$$

где \mathbf{b} — вектор, \mathbf{A} — тензор второго ранга. Тогда

$$\int_{\mathbf{r}} \nabla \cdot \mathbf{bA} \, dV(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{r}} \nabla \cdot (\mathbf{bA}) \, dV(\mathbf{r}) - \int_{\mathbf{r}} \mathbf{b} \cdot (\nabla \mathbf{A}) \, dV(\mathbf{r}). \quad (\text{B.15})$$

Полагая $\mathbf{A} = \mathbf{r}\mathbf{r}$, $\mathbf{b} = v\nabla u$ и учитывая, что $\nabla \mathbf{r} = \mathbf{E}$, а для локализованного возмущения

$$\int_{\mathbf{r}} \nabla \cdot (v\nabla u \mathbf{r}\mathbf{r}) \, dV(\mathbf{r}) = 0, \quad (\text{B.16})$$

получим

$$\int_{\mathbf{r}} \mathbf{b} \cdot \nabla(\mathbf{r}\mathbf{r}) \, dV(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{r}} (\mathbf{b}\mathbf{r} + \mathbf{r}\mathbf{b}) \, dV(\mathbf{r}). \quad (\text{B.17})$$

Таким образом,

$$\dot{\mathbf{M}}_2 = -C \int_{\mathbf{r}} v (\nabla u \mathbf{r} + \mathbf{r} \nabla u) \, dV(\mathbf{r}). \quad (\text{B.18})$$

Найдем вторую производную второго момента. Преобразуем первое слагаемое в (B.18) с использованием уравнения динамики:

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{M}}_2^{(1)} &= -C \int_{\mathbf{r}} (v\nabla u) \cdot \mathbf{r} \, dV(\mathbf{r}) = \\ &= -\frac{C}{\rho} \int_{\mathbf{r}} \nabla \cdot (C\nabla u \nabla u + (\kappa(\mathbf{r}) - \pi(\mathbf{r}))\mathbf{E}) \mathbf{r} \, dV(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Чтобы избавиться от \mathbf{r} под знаком интеграла, будем использовать тождество

$$\nabla \cdot (\mathbf{A}\mathbf{r}) = (\nabla \cdot \mathbf{A})\mathbf{r} + \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{r}. \quad (\text{B.20})$$

Считая, что $\mathbf{A}^T = \mathbf{A} = C\nabla u \nabla u + (\kappa(\mathbf{r}) - \pi(\mathbf{r}))\mathbf{E}$, преобразуем (B.19):

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{M}}_2^{(1)} &= -\frac{C}{\rho} \int_{\mathbf{r}} (\nabla \cdot \mathbf{A})\mathbf{r} \, dV(\mathbf{r}) = \\ &= -\frac{C}{\rho} \int_{\mathbf{r}} \nabla \cdot (\mathbf{A}\mathbf{r}) \, dV(\mathbf{r}) + \frac{C}{\rho} \int_{\mathbf{r}} \mathbf{A} \cdot (\nabla \mathbf{r}) \, dV(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Учитывая, что для локализованного возмущения первый интеграл в сумме В.21 равен нулю, а $\nabla \mathbf{r} = \mathbf{E}$, получим:

$$\ddot{\mathbf{M}}_2^{(1)} = \ddot{\mathbf{M}}_2^{(2)} = \frac{C}{\rho} \int_{\mathbf{r}} \left(C \nabla u \nabla u + (\kappa(\mathbf{r}) - \pi(\mathbf{r})) \mathbf{E} \right) dV(\mathbf{r}). \quad (\text{B.22})$$

Таким образом, получили выражение для суперпотока:

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= \frac{1}{2} \ddot{\mathbf{M}} = \frac{1}{2} \left(\ddot{\mathbf{M}}_2^{(1)} + \ddot{\mathbf{M}}_2^{(2)} \right) = \\ &= c^2 C \int_{\mathbf{r}} \nabla u \nabla u dV(\mathbf{r}) + c^2 L \mathbf{E}, \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

где L — полный лагранжиан, $c = \sqrt{C/\rho}$ — скорость звука в среде.

В.3 Вывод формул для волнового пакета в континуальной среде

В.3.1 Про начальные условия

Зададим начальные условия так, чтобы локальный лагранжиан в каждой точке был малой величиной порядка $(\nabla A)^2$.

Подставим (2.87), (1.32) в (2.81) и получим локальную потенциальную энергию

$$\pi = \frac{C}{2} \left((Ak)^2 \sin^2 \theta_0 + 2A\mathbf{k} \cdot \nabla A \sin \theta_0 \cos \theta_0 + (\nabla A)^2 \cos^2 \theta_0 \right) \quad (\text{B.24})$$

и локальную кинетическую энергию:

$$\kappa = \frac{\rho}{2} \left((A\omega)^2 \sin^2 \theta_0 - 2A\dot{A}\omega \sin \theta_0 \cos \theta_0 + \dot{A}^2 \cos^2 \theta_0 \right). \quad (\text{B.25})$$

Учитывая дисперсионное соотношение $\omega = ck$, $c = \sqrt{C/\rho}$, получим выражение для локального лагранжиана

$$\begin{aligned} \lambda &= \kappa - \pi = \\ &= \frac{\rho}{2} \left(2A(\omega\dot{A} + c^2\mathbf{k} \cdot \nabla A) \sin \theta_0 \cos \theta_0 + \left(\dot{A}^2 - c^2(\nabla A)^2 \right) \cos^2 \theta_0 \right). \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

Потребуем, чтобы слагаемое первого порядка в (В.26) было равно нулю. Тогда получим следующее условие для \dot{A} :

$$\omega \dot{A} + c^2 \mathbf{k} \cdot \nabla A = 0 \quad \Rightarrow \quad \dot{A} = -\frac{c^2}{\omega} \mathbf{k} \cdot \nabla A = -\frac{\omega}{k^2} \mathbf{k} \cdot \nabla A. \quad (\text{В.27})$$

В.3.2 Энергия

Найдем полную энергию по формуле (2.77), используя начальные условия (2.87). Потенциальная энергия:

$$П = \frac{C}{2} \int_{\mathbf{r}} ((Ak)^2 \sin^2 \theta_0 + (\nabla A)^2 \cos^2 \theta_0 + 2A \mathbf{k} \cdot \nabla A \sin \theta_0 \cos \theta_0) dV(\mathbf{r}) \quad (\text{В.28})$$

Заменяя при интегрировании по пространству $\sin^2 \theta$, $\cos^2 \theta$ на среднее значение $1/2$, $\sin \theta \cos \theta$ — на 0 , получим

$$П = \frac{C}{4} \int_{\mathbf{r}} ((Ak)^2 + (\nabla A)^2) dV(\mathbf{r}). \quad (\text{В.29})$$

Аналогично найдем кинетическую энергию:

$$K = \frac{\rho}{4} \int_{\mathbf{r}} ((A\omega)^2 + (\omega k)^2 (\mathbf{i} \cdot \nabla A)^2) dV(\mathbf{r}), \quad (\text{В.30})$$

где $\mathbf{i} = \mathbf{k}/k$ — единичный вектор, сонаправленный с волновым вектором. Интеграл во втором слагаемом в (В.30) можно преобразовать:

$$\int_{\mathbf{r}} (\mathbf{i} \cdot \nabla A)^2 dV(\mathbf{r}) = \mathbf{ii} \cdot \cdot \int_{\mathbf{r}} \nabla A \nabla A dV(\mathbf{r}). \quad (\text{В.31})$$

Пользуясь осесимметричностью начальной огибающей A , найдем полученный интеграл:

$$\int_{\mathbf{r}} \nabla A \nabla A dV(\mathbf{r}) = \delta \mathbf{E}, \quad (\text{В.32})$$

где \mathbf{E} — единичный тензор, δ — коэффициент пропорциональности, который можно найти, взяв след от (В.32):

$$\int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 dV(\mathbf{r}) = \delta d \Rightarrow \delta = \frac{1}{d} \int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 dV(\mathbf{r}), \quad (\text{В.33})$$

где d — размерность пространства. Учитывая, что $\omega = ck$, $c = \sqrt{C/\rho}$, получим

$$K = \frac{C}{4} \int_{\mathbf{r}} \left((Ak)^2 + \frac{1}{d} (\nabla A)^2 \right) dV(\mathbf{r}). \quad (\text{B.34})$$

Тогда полная энергия

$$E = \frac{C}{2} \int_{\mathbf{r}} (Ak)^2 dV(\mathbf{r}) + \frac{C(1+d)}{4d} \int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 dV(\mathbf{r}). \quad (\text{B.35})$$

Полный начальный лагранжиан:

$$L_0 = \frac{C(1-d)}{4d} \int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 dV(\mathbf{r}). \quad (\text{B.36})$$

В.3.3 Поток

Поток для произвольного возмущения можно найти по формуле

$$\mathbf{h} = C \int_{\mathbf{r}} v \nabla u dV(\mathbf{r}). \quad (\text{B.37})$$

Поток сохраняется, поэтому вычислим его по начальным значениям скоростей и перемещений. Подставив (2.87) в (B.37), заменяя квадраты синуса и косинуса на средние значения $1/2$ и используя преобразование (B.32), получим

$$\mathbf{h} = \frac{cC}{2} \int_{\mathbf{r}} \left((Ak)^2 + \frac{1}{d} (\nabla A)^2 \right) dV(\mathbf{r}) \mathbf{i}. \quad (\text{B.38})$$

Учитывая выражение для энергии (2.88), преобразуем поток к виду

$$\mathbf{h} = cE \mathbf{i} + \frac{Cc(1-d)}{4d} \int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 dV(\mathbf{r}) \mathbf{i}. \quad (\text{B.39})$$

Также для вычисления центрального суперпотока потребуется произведение $\mathbf{h}\mathbf{h}/E$, которое с точностью до малых второго порядка равно

$$\frac{\mathbf{h}\mathbf{h}}{E} = c^2 E \mathbf{i}\mathbf{i} + \frac{c^2 C(1-d)}{2d} \int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 dV(\mathbf{r}) \mathbf{i}\mathbf{i}. \quad (\text{B.40})$$

В.3.4 Суперпоток

Суперпоток может быть представлен в виде

$$\mathbf{G} = c^2 C \int_{\mathbf{r}} \nabla u \nabla u \, dV(\mathbf{r}) + c^2 L \mathbf{E}, \quad (\text{B.41})$$

где L — глобальный лагранжиан. Считая, что $L = 0$, найдем суперпоток для возмущения в виде волнового пакета, подставив (2.87) в (B.41). При интегрировании заменяем $\sin^2 \theta$, $\cos^2 \theta$ на $1/2$, произведение $\sin \theta \cos \theta$ — на 0:

$$\mathbf{G} = \frac{C}{2} \int_{\mathbf{r}} ((Ak)^2 \mathbf{i}\mathbf{i} + \nabla A \nabla A) \, dV(\mathbf{r}), \quad (\text{B.42})$$

где $\mathbf{i} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$ — единичный вектор, сонаправленный с волновым вектором. Подставляя (B.32) с учетом (B.33) в (B.42), получим

$$\mathbf{G} = \frac{C}{2} \int_{\mathbf{r}} \left((Ak)^2 \mathbf{i}\mathbf{i} + \frac{(\nabla A)^2}{d} \mathbf{E} \right) \, dV(\mathbf{r}). \quad (\text{B.43})$$

Учитывая выражение для энергии (2.88) и равенство лагранжиана нулю, суперпоток (B.43) можно преобразовать к виду:

$$\mathbf{G} = c^2 E \mathbf{i}\mathbf{i} + \frac{C}{2d} \int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \, dV(\mathbf{r}) (\mathbf{E} - d \mathbf{i}\mathbf{i}). \quad (\text{B.44})$$

В.3.5 Начальный момент и его производная

Найдем начальное значение тензора \mathbf{M}_0 . Будем считать для простоты, что в начальный момент $\mathbf{r}_c = 0$

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_0 &= \int_{\mathbf{r}} \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{r}\mathbf{r} \, dV(\mathbf{r}) = \\ &= \frac{C}{2} \int_{\mathbf{r}} \left(k^2 A^2 + \frac{1}{2} (\nabla A)^2 + \frac{1}{2d} (\nabla A)^2 \right) \mathbf{r}\mathbf{r} \, dV(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (\text{B.45})$$

Теперь найдем значение $\dot{\mathbf{M}}_0$. Продифференцируем \mathbf{M}_0 :

$$\dot{\mathbf{M}}_0 = \int_{\mathbf{r}} \dot{\epsilon}(\mathbf{r}) \mathbf{r}\mathbf{r} \, dV(\mathbf{r}). \quad (\text{B.46})$$

Подставляя (2.78) в (В.46) и пренебрегая величинами третьего порядка малости, получим

$$\dot{\mathbf{M}}_0 = 2C \int_{\mathbf{r}} \nabla u \cdot \nabla v \mathbf{r} \mathbf{r} \, dV(\mathbf{r}). \quad (\text{В.47})$$

Подставим сюда начальные условия (2.87), заменим множители $\sin^2 \theta$, $\cos^2 \theta$ на $1/2$, $\sin \theta \cos \theta$ — на 0:

$$\dot{\mathbf{M}}_0 = C \int_{\mathbf{r}} k^2 A \nabla A \cdot \mathbf{i} \mathbf{r} \mathbf{r} \, dV(\mathbf{r}). \quad (\text{В.48})$$

Градиент ∇A симметричной $A(\mathbf{r})$ будет антисимметричной функцией, поэтому

$$\dot{\mathbf{M}}_0 = 0. \quad (\text{В.49})$$

В.4 Вывод формул для волнового пакета в дискретной среде

В.4.1 Дисперсионное соотношение и групповая скорость

Дисперсионное соотношение

$$\omega^2 = \omega_0^2 \sum_{\alpha} (1 - \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha})), \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{C}{m}}. \quad (\text{В.50})$$

Групповая скорость

$$\mathbf{v}_g = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} = \frac{\omega_0^2}{2\omega} \sum_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}). \quad (\text{В.51})$$

В.4.2 Начальные условия

Предположим, что решение для перемещений имеет вид

$$u(\mathbf{r}, t) \approx A(|\mathbf{r} - \mathbf{v}_g t|) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t). \quad (\text{В.52})$$

Скорость:

$$\begin{aligned} v(\mathbf{r}, t) = \dot{u}(\mathbf{r}, t) &\approx -A(|\mathbf{r} - \mathbf{v}_g t|) \omega \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \\ &\quad - \nabla A(|\mathbf{r} - \mathbf{v}_g t|) \cdot \mathbf{v}_g \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t). \end{aligned} \quad (\text{В.53})$$

Тогда начальные условия

$$\begin{aligned} u(\mathbf{r}, 0) &= A(r) \sin \theta, \\ v(\mathbf{r}, 0) &= -A(r)\omega \cos \theta - \nabla A(r) \cdot \mathbf{v}_g \sin \theta, \quad \theta = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}. \end{aligned} \quad (\text{B.54})$$

В.4.3 Вспомогательные выражения

Дальше используются обозначения

$$\begin{aligned} u &= u(\mathbf{r}), \quad v = v(\mathbf{r}), \quad A = A(\mathbf{r}), \\ u_\alpha &= u(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\alpha), \quad v_\alpha = v(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\alpha), \quad A_\alpha = A(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\alpha) \end{aligned} \quad (\text{B.55})$$

Перемещение соседней частицы

$$\begin{aligned} u_\alpha &= A_\alpha \sin(\theta + \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha) = \\ &= A_\alpha [\sin \theta \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha) + \cos \theta \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha)], \end{aligned} \quad (\text{B.56})$$

Разложение медленно меняющейся функций A_α в ряд:

$$A_\alpha = A + \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla A + \frac{1}{2} \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \cdot \cdot \nabla \nabla A. \quad (\text{B.57})$$

В.4.4 Энергия

Найдем кинетическую и потенциальную энергии возмущения по начальным условиям (2.103). Кинетическая энергия

$$K = \frac{m}{2} \sum_{\mathbf{r}} v^2 = \frac{m}{4} \sum_{\mathbf{r}} ((A\omega)^2 + (\nabla A \cdot \mathbf{v}_g)^2). \quad (\text{B.58})$$

При суммировании по пространству $\sin^2 \theta$, $\cos^2 \theta$ заменяется на среднее значение $1/2$, $\sin \theta \cos \theta$ — на 0. Учитывая также соотношение

$$\sum_{\mathbf{r}} \nabla A \nabla A = \frac{1}{d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \mathbf{E}, \quad (\text{B.59})$$

где d — размерность пространства, получим

$$K = \frac{m\omega^2}{4} \sum_{\mathbf{r}} A^2 + \frac{m\mathbf{v}_g^2}{4d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2. \quad (\text{B.60})$$

Потенциальная энергия

$$\begin{aligned} \Pi &= \frac{C}{4} \sum_{\mathbf{r}, \alpha} (u_\alpha - u)^2 = \\ &= \frac{C}{8} \sum_{\mathbf{r}, \alpha} (A_\alpha^2 + A^2 - 2AA_\alpha \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha)) = \\ &= \frac{C}{4} \sum_{\mathbf{r}, \alpha} (A^2 - AA_\alpha \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha)). \end{aligned} \quad (\text{B.61})$$

Далее используем (B.57), (B.59) и соотношение

$$\sum_{\mathbf{r}} A \nabla \nabla A = - \sum_{\mathbf{r}} \nabla A \nabla A, \quad (\text{B.62})$$

которое выполняется, т.к. для локализованного возмущения

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{\mathbf{r}} \nabla \cdot (\mathbf{E} A \nabla A) = \sum_{\mathbf{r}} \nabla (A \nabla A) = \\ &= \sum_{\mathbf{r}} \nabla A \nabla A + \sum_{\mathbf{r}} A \nabla \nabla A. \end{aligned} \quad (\text{B.63})$$

Получаем

$$\begin{aligned} \Pi &= \frac{C}{4} \left(\sum_{\mathbf{r}, \alpha} A^2 (1 - \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha)) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2d} \sum_{\mathbf{r}, \alpha} \mathbf{a}_\alpha^2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha) (\nabla A)^2 \right) = \\ &= \frac{C\omega^2}{4\omega_0^2} \sum_{\mathbf{r}} A^2 + \frac{Ca^2}{8d} \left(\sum_{\alpha} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha) \right) \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 = \\ &= \frac{m\omega^2}{4} \sum_{\mathbf{r}} A^2 + \frac{Ca^2}{8d} \left(\sum_{\alpha} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha) \right) \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \end{aligned} \quad (\text{B.64})$$

где a — расстояние между частицами. Полученное выражение также можно представить в виде

$$\begin{aligned}
\Pi &= \frac{m\omega^2}{4} \sum_{\mathbf{r}} A^2 + \frac{C}{4d} T \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2, \\
T &= \text{tr} \mathbf{T}, \quad \mathbf{T} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha})
\end{aligned} \tag{B.65}$$

Полная энергия

$$\begin{aligned}
E &= K + \Pi = \\
&= \frac{m\omega^2}{2} \sum_{\mathbf{r}} A^2 + \frac{m\mathbf{v}_g^2}{4d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 + \frac{C}{4d} T \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2
\end{aligned} \tag{B.66}$$

Глобальный лагранжиан (в начальный момент времени)

$$\begin{aligned}
L &= K - \Pi = \\
&= \frac{m\mathbf{v}_g^2}{4d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 - \frac{C}{4d} T \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2.
\end{aligned} \tag{B.67}$$

В.4.5 Поток

Найдем выражение для глобального потока по начальным перемещениям и скоростям

$$\begin{aligned}
\mathbf{h} &= \frac{C}{2} \sum_{\mathbf{r}, \alpha} \mathbf{a}_{\alpha} u v_{\alpha} = -\frac{C}{2} \sum_{\mathbf{r}, \alpha} \mathbf{a}_{\alpha} u_{\alpha} v = \\
&= \frac{C}{4} \sum_{\mathbf{r}, \alpha} \mathbf{a}_{\alpha} A_{\alpha} (A\omega \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}) + \nabla A \cdot \mathbf{v}_g \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha})) = \\
&= \frac{C\omega}{4} \sum_{\mathbf{r}, \alpha} \mathbf{a}_{\alpha} A^2 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}) + \\
&\quad + \frac{C\omega}{8} \sum_{\mathbf{r}, \alpha} A \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \cdot \nabla \nabla A \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}) + \\
&\quad + \frac{C}{4} \sum_{\mathbf{r}, \alpha} \mathbf{a}_{\alpha} (\mathbf{a}_{\alpha} \cdot \nabla A) (\mathbf{v}_g \cdot \nabla A) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}).
\end{aligned} \tag{B.68}$$

Учтем выражение для групповой скорости (2.102), тождества (B.59), (B.62) и

преобразуем (B.68) к виду

$$\mathbf{h} = \frac{m\omega^2 \mathbf{v}_g}{2} \sum_{\mathbf{r}} A^2 - \frac{m\omega^2 a^2 \mathbf{v}_g}{4d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 + \frac{C}{2d} \mathbf{v}_g \cdot \mathbf{T} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \quad (\text{B.69})$$

Выделим в выражении для потока слагаемое $\mathbf{v}_g E$, используя полученное выше выражение для энергии

$$\mathbf{h} = \mathbf{v}_g E - \frac{m\omega^2 a^2}{4d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \mathbf{v}_g - \frac{m\mathbf{v}_g^2}{4} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \mathbf{v}_g - \frac{C}{4d} T \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \mathbf{v}_g + \frac{C}{4d} \mathbf{v}_g \cdot \mathbf{T} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \quad (\text{B.70})$$

В.4.6 Суперпоток

Найдем выражение для суперпотока, предполагая, что глобальный лагранжиан равен нулю.

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= \frac{C^2}{4m} \sum_{\mathbf{r}, \alpha, \beta} \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\beta u_\alpha u_\beta = \\ &= \frac{C^2}{8m} \sum_{\mathbf{r}, \alpha, \beta} \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\beta A_\alpha A_\beta (\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\beta) + \\ &\quad + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\beta)) = \\ &= \frac{C^2}{8m} \sum_{\mathbf{r}, \alpha, \beta} \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\beta (A + \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla A + \frac{1}{2} \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla \nabla A) \\ &\quad (A + \mathbf{a}_\beta \cdot \nabla A + \frac{1}{2} \mathbf{a}_\beta \mathbf{a}_\beta \cdot \nabla \nabla A) \\ &\quad (\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\beta) + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\beta)). \end{aligned} \quad (\text{B.71})$$

Упростим:

$$\begin{aligned}
\mathbf{G} &= \frac{C^2}{8m} \sum_{\mathbf{r}, \alpha, \beta} \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\beta A^2 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\beta) + \\
&+ \frac{C^2}{8m} \sum_{\mathbf{r}, \alpha, \beta} \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\beta \frac{1}{2} A \mathbf{a}_\beta \mathbf{a}_\beta \cdot \nabla \nabla A \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\beta) + \\
&+ \frac{C^2}{8m} \sum_{\mathbf{r}, \alpha, \beta} \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\beta \frac{1}{2} A \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla \nabla A \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\beta) + \\
&+ \frac{C^2}{8m} \sum_{\mathbf{r}, \alpha, \beta} \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\beta (\mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla A) (\mathbf{a}_\beta \cdot \nabla A) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\beta)
\end{aligned} \tag{B.72}$$

Учтем выражение для групповой скорости и тензора \mathbf{T}

$$\begin{aligned}
\mathbf{G} &= \frac{C^2}{8m} \frac{4\omega^2}{\omega_0^4} \sum_{\mathbf{r}} A^2 \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g - \frac{C^2}{8m} \frac{4\omega^2 a^2}{d\omega_0^4} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g + \\
&+ \frac{C^2}{2md} \mathbf{T} \cdot \mathbf{T} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2
\end{aligned} \tag{B.73}$$

Еще упростим

$$\begin{aligned}
\mathbf{G} &= \frac{m\omega^2}{2} \sum_{\mathbf{r}} A^2 \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g - \frac{m\omega^2 a^2}{2d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g + \\
&+ \frac{C^2}{2md} \mathbf{T} \cdot \mathbf{T} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2
\end{aligned} \tag{B.74}$$

Выделим слагаемое $E \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g$, считая, что $E = 2\Pi$

$$\begin{aligned}
\mathbf{G} &= E \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g + \frac{C^2}{2md} \mathbf{T} \cdot \mathbf{T} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 - \\
&- \frac{m\omega^2 a^2}{2d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g - \frac{CT}{2d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g.
\end{aligned} \tag{B.75}$$

Найдем центральный суперпоток по формуле

$$\mathbf{G}_c = \mathbf{G} - \frac{\hbar \mathbf{h}}{E}. \tag{B.76}$$

Пренебрегая слагаемыми выше второго порядка малости, получим

$$\mathbf{G}_c = \frac{C^2}{2md} \mathbf{T} \cdot \mathbf{T} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 + \frac{m\mathbf{v}_g^2}{2d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g - \frac{C}{d} \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g \cdot \mathbf{T} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2, \quad (\text{B.77})$$

или

$$\mathbf{G}_c = \frac{1}{2d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \left(\frac{C^2}{m} \mathbf{T} \cdot \mathbf{T} + m\mathbf{v}_g^2 \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g - 2C\mathbf{v}_g \mathbf{v}_g \cdot \mathbf{T} \right) \quad (\text{B.78})$$

где

$$\mathbf{T} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}). \quad (\text{B.79})$$