

Министерство образования и науки Российской Федерации
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Институт прикладной математики и механики
Высшая школа теоретической механики

Работа допущена к защите

Директор высшей школы

_____ А.М. Кривцов

«__» _____ 2021 г.

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

магистерская диссертация

**«НЕСТАЦИОНАРНЫЙ ПЕРЕНОС ТЕПЛОВОЙ ЭНЕРГИИ В
ОДНОМЕРНОМ ПОЛУБЕСКОНЕЧНОМ ГАРМОНИЧЕСКОМ
КРИСТАЛЛЕ»**

по направлению подготовки

01.04.03 «Механика и математическое моделирование»

Направленность

01.04.03_01 «Механика деформируемого твердого тела»

Выполнил

студент гр. 3640103/90101

С.Д. Ляжков

Руководитель

доцент, д.ф.-м.н.

В.А. Кузькин

Санкт-Петербург

2021

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО
Институт прикладной математики и механики

УТВЕРЖДАЮ

Директор

Высшей школы теоретической механики

А.М. Кривцов

« 25 » января 2021 г.

ЗАДАНИЕ

по выполнению выпускной квалификационной работы

студенту Ляжкову Сергею Дмитриевичу, гр. 3640103/90101

1. Тема работы: Нестационарный перенос тепловой энергии в одномерном полубесконечном гармоническом кристалле.

2. Срок сдачи студентом законченной работы: 07.06.2021

3. Исходные данные по работе: отсутствуют

4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов):

4.1. Найти поле дискретной кинетической температуры в полубесконечной цепочке Гука при начальном тепловом возмущении.

4.2. Найти поле континуальной кинетической температуры в полубесконечной цепочке Гука при начальном тепловом возмущении.

4.3. Выполнить пункты 4.1. и 4.2. в случае внешнего повода тепловой энергии.

5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): отсутствует

6. Консультанты по работе: отсутствуют

7. Дата выдачи задания 25.01.2021

Руководитель ВКР _____ В.А. Кузькин

Задание принял к исполнению 25.01.2021

Студент _____ С.Д. Ляжков

РЕФЕРАТ

На 71 с., 12 рисунков

ПОЛУБЕСКОНЕЧНАЯ ЦЕПОЧКА ГУКА, ПЕРЕНОС ТЕПЛОВОЙ ЭНЕРГИИ, КИНЕТИЧЕСКАЯ ТЕМПЕРАТУРА, ДИСКРЕТНОЕ РЕШЕНИЕ, КОНТИНУАЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ, ПРИНЦИП СИММЕТРИИ

Тема выпускной квалификационной работы: «Нестационарный перенос тепловой энергии в одномерном полубесконечном гармоническом кристалле».

Рассматривается перенос тепловой энергии в полубесконечной цепочке Гука в случае, как мгновенного теплового возмущения, так и внешнего подвода энергии. Предложено аналитическое описание тепловых процессов в континуальной и дискретной постановках. Показано, что вблизи границы континуальное и дискретное описания температурных полей различны. Однако, дальние поля можно описывать как дискретной, так и континуальной теорией. Предложен принцип симметрии континуального решения, позволяющий найти континуальное поле кинетической температуры в полубесконечной цепочке, зная поле в бесконечной.

ABSTRACT

71 pages, 12 figures

KEYWORDS: SEMI-INFINITE HOOKE'S CHAIN, HEAT TRANSPORT, KINETIC TEMPERATURE, DISCRETE SOLUTION, CONTINUUM SOLUTION, SYMMETRY PRINCIPLE

The subject of the graduate qualification work is «Unsteady heat transport in a one-dimensional semi-infinite harmonic crystal».

Heat transport in a semi-infinite Hooke's chain with free end is under investigation in the both cases of instantaneous thermal pulse and external heat supply. Analytical descriptions of thermal processes are proposed in the discrete and continuum formulations. It is shown that the continuum and discrete descriptions of the temperature profiles near the boundary are generally different. In contrast, far fields of the kinetic temperature can be described via both continuum and discrete solutions. A symmetry principle, allowing analyzing continuum problems for semi-infinite chains through solutions for infinite chains, is present.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение		6
1 Перенос энергии при начальном тепловом возмущении		10
1.1	Постановка задачи	10
1.2	Точное выражение для скоростей частиц	11
1.3	Точное выражение для дискретной кинетической температуры	14
1.4	Кинетическая температура в континуальном пределе	16
1.4.1	Континуализация	17
1.4.2	Дискретное фундаментальное решение	19
1.4.3	Континуальное фундаментальное решение	23
1.4.4	«Медленная» составляющая кинетической температуры	26
1.4.5	«Быстрая» составляющая кинетической температуры	27
1.5	Точечное тепловое возмущение. Принцип симметрии континуального решения	28
1.6	Анализ результатов	30
1.6.1	Обезразмеривание величин	31
1.6.2	Пример. Точечное тепловое возмущение	33
1.6.3	Пример. Прямоугольное тепловое возмущение, не касающееся границы	34
1.6.4	Пример. Прямоугольное тепловое возмущение, касающееся границы	38

1.7	Заключение к главе 1	40
2	Перенос энергии при внешнем ее подводе	43
2.1	Постановка задачи	43
2.2	Вывод формулы для дискретной кинетической температуры . .	44
2.2.1	Решение уравнения (2.9)	46
2.2.2	Матрица дисперсий	47
2.2.3	Точное выражение для дискретной кинетической температуры	49
2.3	Кинетическая температура в континуальном пределе	52
2.4	Пример. Постоянный точечный подвод тепловой энергии	53
2.4.1	Дискретная кинетическая температура	53
2.4.2	Континуальная кинетическая температура	54
2.5	Анализ результатов	55
2.5.1	Обезразмеривание величин	56
2.5.2	Случай отсутствия диссипации	58
2.5.3	Влияние диссипации. Стационарное решение	59
2.6	Заключение к главе 2	62
	Заключение	63
	СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	65

Введение

Актуальность

В задачах механики сплошной среды, связанных, в частности, с термоупругостью и гидродинамикой, используют определяющее соотношение, в котором фигурирует поле температуры (см., например, [61]). На макроуровне это — закон Фурье, согласно которому перенос тепловой энергии является диффузионным. Однако, недавние эксперименты [38], [12], [72], [40], [17] подтверждают, что на микро- и наноуровне перенос тепловой энергии имеет волновую природу. В таких материалах, как графит [38], силиконовые нанопроволоки [12], графен [72], силиконовые мембраны [40], нанотрубки [17] и пр., коэффициент теплопроводности на длинах в несколько микрон зависит от размера образца, что подтверждает нарушение закона Фурье.

Эксперименты, проведенные еще ранее, показали, что баллистический перенос тепла (что в литературе нередко связывают с потоком фононов [71], [59]) имеет характер поведения упругих волн. То есть, как и упругие волны, фононы могут локализовываться [39], [60], [22], отражаться [67], преломляться [37], дифрагировать [35]. Кроме того, баллистический перенос тепла может вызвать пьезоэлектрический эффект, что обнаружено в кварце и ниобате лития [43]. Теоретическое описание некоторых явлений, изложенных выше, приводится через теорию эластодинамики в стационарной постановке.

Теоретически перенос тепла на микро- и наноуровне анализируется во многих работах, в частности, в [54], [55], [18], [19], [68]. Используются несколько подходов, наиболее популярные из которых заключаются либо в исследовании кинетического уравнения Больцмана [13], [14], [56], либо в постановке дискретной задачи уравнений динамики решетки. Например, популярный способ ответить на вопрос о характере переноса тепла заключается в вычис-

лении эффективного коэффициента теплопроводности. Первыми это сделали Ридер и Лебовиц в работе [62]. Далее такой задачей занимались как аналитически [54], [55], так и при численном моделировании [53], [70], [32], [57]. Однако, результаты задач, указанных выше, получены также только в стационарной постановке.

Решение стационарных задач не дает полной картины переноса тепловой энергии и характера ее распространения. Поэтому большой интерес представляет рассмотрение задач в нестационарной постановке.

Типовой нестационарной задачей переноса тепловой энергии является определение полей температуры в конкретный момент времени, что исследуется как аналитически на примере линейных моделей [65], [49], [48] и пр., так и методом молекулярной динамики [29], [30]. Преимущество аналитического исследования заключается в полноте определения, например, характера изменения полей температуры. Численное моделирование хоть и позволяет предсказать влияние нелинейности и рассмотреть наиболее близкое к реальности взаимодействие потенциалом, оно имеет недостаток в возникающих трудностях в варьировании параметров.

Удобной моделью для аналитического исследования процессов переноса тепловой энергии является кристалл Гука. Этот перенос является баллистическим, доказательство чего заключается в отсутствии обмена энергии между модами. Описание нестационарных тепловых процессов приведено, в частности, в [45], [47], [48], [50], [15], [64]. Как правило, рассматривается взаимодействие ближайших соседей в скалярных решетках, либо ближайших ячеек в полиатомных решетках. В приведенных работах рассматриваются бесконечные модели. Однако, чтобы аналитические описания процессов теплопереноса точнее согласовывались с результатами экспериментов, необходимо учитывать поведение температурных полей на границах и вблизи их. Насколько известно, влияние границ на нестационарный процесс тепловой энергии в литературе активно не изучается, хотя попытки уже с недавнего

времени предпринимаются [3].

Цели и задачи

Целью настоящей работы является аналитическое описание переноса тепловой энергии в одномерном полубесконечном кристалле со свободным концом. Для достижения поставленной цели рассматриваются две задачи: описание переноса при начальном тепловом возмущении (1 глава), то же — при постоянном подводе тепловой энергии извне (2 глава). Исследуются характер изменения полей температуры в дискретной и континуальной постановках и влияние свободной границы на это изменение. Дискретное решение находится напрямую через точное решение уравнений динамики рассматриваемого кристалла. В главе 1 приводится континуализация дискретного решения, результат которой взят за основу для формулировки принципа симметрии. Этот принцип затем используется для получения континуального решения в главе 2.

Теоретическая и практическая значимость

Исследования, предлагаемые в настоящей работе, преследуют цель в продвижении теории переноса тепла на микро- и наноуровне, что имеет критически важную значимость с развитием технологий производства процессоров и жестких дисков. В последние десятилетия закон Мура претерпевает крах из-за невозможности одновременно уменьшить размер транзистора и предотвратить перегрев процессора [23]. Следовательно, необходимо решать задачи, связанные с отводом тепла от микро- и нанопроцессоров. Что касается жестких дисков, главным препятствием качественной их работы является коэрцитивность материала. Лазерный нагрев уменьшает коэрцитивность, тем самым позволяя хранение данных на областях более мелкого размера и увеличение объема памяти диска. Такая технология лазерного нагрева на-

зывается термомагнитной записью (Heat Assisted Magnetic Recording) [46]. С уменьшением размера жестких дисков до микро- и наномасштабных размеров, необходимость применять на них технологию HAMR по-прежнему остается вызовом [21].

Кроме того, результаты, представленные в настоящей работе, могут быть обобщены на модели реальных кристаллических структур; могут быть использованы для описания переноса тепловой энергии в неоднородных средах с интерфейсами, а также для разработки моделей, точнее описывающих эксперимент.

Достоверность

Достоверность результатов, представленных в настоящей работе, обеспечивается строгой математической постановкой задач, строгим выводом выкладок аналитического решения и сравнением их с численным решением.

Апробация работы

Часть результатов настоящей работы представлена на конференции «Advanced Problems in Mechanics» в ноябре 2020 года и семинарах высшей школы теоретической механики.

Глава 1. Перенос энергии при начальном тепловом возмущении

1.1 Постановка задачи

В настоящей главе используется следующая модель деформируемого твердого тела: цепочка Гука, состоящая из одинаковых частиц массой m , соединенных линейными пружинками жесткостью c , имеющая два свободных конца. Рассматриваемая цепочка имеет конечное, постоянное во времени число частиц N . Выдвигаются следующие предположения:

1. Частицы взаимодействуют только с ближайшими соседями.
2. В начальный момент времени в рассматриваемой цепочке имеется некоторое тепловое возмущение, и отсутствуют тепловые потоки.

С учетом вышеуказанных предположений и граничных условий, напомним в следующем виде уравнение движения частицы n :

$$\begin{aligned} \ddot{u}_n &= \omega_e^2(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}), \quad n = 1, 2, \dots, N - 2, \\ \ddot{u}_{N-1} &= \omega_e^2(u_{N-2} - u_{N-1}), \\ \ddot{u}_0 &= \omega_e^2(u_1 - u_0), \quad \omega_e = \sqrt{c/m}, \end{aligned} \tag{1.1}$$

где ω_e — элементарная частота колебаний частицы; u_n — перемещение частицы номера n .

Согласно выдвинутым предположениям, в начальный момент времени частицы имеют нулевые перемещения и случайные скорости:

$$u_n = 0, \quad \dot{u}_n = v_n^0 = \rho_n \sqrt{\frac{k_B T_n^0}{m}}, \quad \langle \rho_n \rangle = 0, \quad \langle \rho_m \rho_n \rangle = \delta_{mn}, \tag{1.2}$$

где T_n^0 — начальная дискретная температура для частицы n (см. опреде-

ление (1.11)); k_B — постоянная Больцмана; $\langle \dots \rangle$ — символ математического ожидания; ρ_n — некоррелированные случайные величины с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией; δ_{mn} — символ Кронекера.

В силу того, что тепловой поток зависит от перемещения частиц, а оно в начальный момент времени равно нулю, то, действительно, тогда отсутствуют тепловые потоки. Случайные начальные скорости соответствуют начальному некоторому температурному полю, создаваемому, например, ультракоротким лазерным воздействием. Предположение о плотности распределения скоростей в данной работе не приводится. Во-первых, кинетическая температура является детерминированной величиной. Во-вторых, плотность любого распределения скоростей стремится к распределению Гаусса [20].

1.2 Точное выражение для скоростей частиц

Как известно, существует два подхода к нахождению аналитического решения задачи теплопереноса в гармонических кристаллах. Первый подход заключается в использовании ковариаций скоростей, перемещений и сведению к детерминированной системе обыкновенных дифференциальных уравнений относительно этих ковариаций. Такой подход рассмотрен в [15], [45], [55], [24], [25]. Например, в работах [54], [55] уравнения для ковариаций выводятся через интегрирование уравнения Фоккера-Планка-Колмогорова, записывающееся для плотности распределения фазового пространства соответствующей модели. В работах [15], [24], [25] проводится дифференцирование ковариаций с использованием уравнений динамики. Второй подход, заключающийся в использовании точной формулы для скоростей частиц, рассмотрен как для одномерного [42], [36], [50], так и для многомерных кристаллов [48].

В настоящем параграфе выводится точное выражение для скоростей частиц. Для цепочки с двумя свободными концами система уравнений динамики уже была решена сначала Хеммером [36], затем Такизавой и Кобаяси [69].

Формула для перемещения частицы представлена в виде разложения в ряд по функциям Бесселя. Однако, такой вид решения чрезвычайно громоздкий для нахождения искомых величин с учетом стохастических начальных условий. Поэтому для решения уравнений (1.1—1.2) будем использовать метод разложения по собственным формам [8].

Перемещение частицы u_n будем искать в таком виде, чтобы удовлетворить свободным граничным условиям:

$$u_n = \frac{2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \hat{u}_k \cos \frac{(2n+1)\pi k}{N}, \quad (1.3)$$

где \hat{u}_k — образ перемещения u_n . Выражение для u_n является обратным преобразованием, применяемое к образу \hat{u}_k .

Прямое преобразование для нахождения \hat{u}_k определяется как

$$\hat{u}_k = \sum_{n=0}^{N-1} u_n \cos \frac{(2n+1)\pi k}{N}. \quad (1.4)$$

Покажем, что одновременное применение преобразований (1.3) и (1.4) дает тождественное преобразование. В самом деле,

$$\begin{aligned} \frac{2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} u_n \cos \frac{(2n+1)\pi k}{N} \cos \frac{(2m+1)\pi k}{N} = \\ \frac{2}{N} \sum_{n=0}^{N-1} u_n \sum_{k=0}^{N-1} \cos \frac{(2n+1)\pi k}{N} \cos \frac{(2m+1)\pi k}{N} = \sum_{n=0}^{N-1} u_n \delta_{nm} = u_m = u_n, \end{aligned} \quad (1.5)$$

так как при $n \neq m$ выражение (1.5) равно нулю. Здесь использовано тождество для суммы

$$\sum_{k=0}^{N-1} \cos \frac{(2n+1)\pi k}{N} \cos \frac{(2m+1)\pi k}{N} = \frac{N}{2} \delta_{nm}. \quad (1.6)$$

Применяя дискретное преобразование (1.4) к уравнению (1.1), получим

обыкновенное дифференциальное уравнение для \hat{u}_k :

$$\ddot{\hat{u}}_k + \omega_k^2 \hat{u}_k = 0, \quad \omega_k = 2\omega_e \sin \frac{\pi k}{N}, \quad (1.7)$$

где ω_k — k -я собственная частота цепочки.

Из преобразования начальных условий следует:

$$\hat{u}_k = 0, \quad \dot{\hat{u}}_k = \sum_{n=0}^{N-1} v_n^0 \cos \frac{(2n+1)\pi k}{N}. \quad (1.8)$$

Уравнение (1.7) с начальными условиями (1.8) имеет следующее решение:

$$\hat{u}_k = \frac{\sin(\omega_k t)}{\omega_k} \sum_{n=0}^{N-1} v_n^0 \cos \frac{(2n+1)\pi k}{N}, \quad (1.9)$$

подстановка которого в формулу (1.3) с последующим дифференцированием по времени дает точное выражение для скоростей частиц:

$$v_n = \dot{u}_n = \frac{2}{N} \sum_{j,k=0}^{N-1} v_j^0 \cos \frac{(2j+1)\pi k}{N} \cos \frac{(2n+1)\pi k}{N} \cos(\omega_k t). \quad (1.10)$$

В отличие от решений, представленных Хеммером, Такизавой и Кобаяси, формула (1.10) несет в себе физический смысл. В скорость частицы n каждая частица с ненулевой начальной скоростью вносит вклад, представляющий собой суперпозицию гармонических волн ¹ с частотой ω_k . Далее выражение для скоростей частиц используется при выводе формулы для дискретной кинетической температуры.

¹В этом можно убедиться, раскрыв произведение косинусов и заменив результат комплексными экспонентами.

1.3 Точное выражение для дискретной кинетической температуры

Формула для скоростей частиц, полученная методом разложения по собственным формам, показывает, что скорости также являются случайными величинами в силу начальных условий (1.2). Рассмотрим бесконечное множество реализаций, различающихся случайными начальными скоростями (1.2). В гармонических кристаллах кинетические температуры, соответствующие разным степеням свободы, вообще говоря, различны. Поэтому тепловое состояние в сложных (с двумя и более частицами на элементарную ячейку) и многомерных скалярных решетках описывается матричной температурой: матрицей, на главной диагонали которой располагаются кинетические температуры, соответствующие различным степеням свободы. Однако, в настоящей работе, мы имеем дело с цепочкой Гука, располагающей одной частицей на элементарную ячейку. Следовательно, тепловые процессы будем описывать одной величиной — кинетической температурой.

Кинетическая температура частицы прямо пропорциональна кинетической энергии соответствующей ей степени свободы. Напишем для нее выражение через статистическое определение [7]:

$$k_B T_n = m \langle v_n^2 \rangle. \quad (1.11)$$

Подставим выражение для скоростей (1.10) в (1.11), используя правило пе-

ремножения сумм:

$$\begin{aligned} \frac{k_B}{m} T_n &= \left\langle \left(\frac{2}{N} \sum_{j,k=0}^{N-1} v_j^0 \cos \frac{(2j+1)\pi k}{N} \cos \frac{(2n+1)\pi k}{N} \cos(\omega_k t) \right)^2 \right\rangle = \\ &= \frac{4}{N^2} \sum_{i,j,k_1,k_2=0}^{N-1} \langle v_i^0 v_j^0 \rangle \cos \frac{(2i+1)\pi k_1}{N} \cos \frac{(2j+1)\pi k_2}{N} \times \\ &\quad \times \cos \frac{(2n+1)\pi k_1}{N} \cos \frac{(2n+1)\pi k_2}{N} \cos(\omega_{k_1} t) \cos(\omega_{k_2} t). \end{aligned} \quad (1.12)$$

Далее вычислим выражение, стоящее в угловых скобках в формуле (1.12).

Так как, в силу начальных условий (1.2), $\langle v_i^0 v_j^0 \rangle = k_B T_j^0 \delta_{ij} / m$, то

$$T_n = \frac{4}{N^2} \sum_{j=0}^{N-1} T_j^0 \left(\sum_{k=0}^{N-1} \cos \frac{(2j+1)\pi k}{N} \cos \frac{(2n+1)\pi k}{N} \cos(\omega_k t) \right)^2. \quad (1.13)$$

Выражение (1.13) — дискретная кинетическая температура для цепочки с *двумя свободными концами*. Это дискретная функция, поскольку область ее определения — множество неотрицательных целых чисел. Здесь сумма произведений обратно «свернута» в квадрат суммы.

Предположим, что правый конец цепочки, в отличие от левого, располагается бесконечно далеко от области, где могло бы быть сконцентрировано тепловое возмущение. Тогда модель, которая в дальнейшем предлагается к рассмотрению, есть *полубесконечная цепочка со свободным концом*. Перейдем к термодинамическому пределу, устремив число частиц N к бесконечности. Тогда дискретное волновое число, $\frac{2\pi k}{N}$, можно заменить на непрерывно меняющееся волновое число θ , $\theta \in [0; 2\pi]$. Сумма по k превращается в интеграл по отрезку, симметричному относительно нуля². Тогда получаем выражение для дискретной кинетической температуры для полубесконечной цепочки со

²Под знаком суммы по k в формуле (1.13) стоит периодическое выражение. Замена пределов интегрирования $-\pi$ и π на 0 и 2π в формуле (1.14) не влияет на конечный результат.

СВОБОДНЫМ КОНЦОМ:

$$T_n = \frac{1}{\pi^2} \sum_{j=0}^{\infty} T_j^0 \left(\int_{-\pi}^{\pi} \cos \frac{(2j+1)\theta}{2} \cos \frac{(2n+1)\theta}{2} \cos(\omega(\theta)t) d\theta \right)^2, \quad (1.14)$$

где $\omega(\theta) = 2\omega_e \sin \frac{\theta}{2}$ — дисперсионное соотношение. Формула (1.14) показывает, что каждая частица, нагретая в начальный момент времени, вносит вклад в температуру частицы n . Легко проверить, что при $t = 0$, выражение (1.14) становится равным T_n^0 .

1.4 Кинетическая температура в континуальном пределе

В настоящем параграфе выводится формула для кинетической температуры как функция от пространственной координаты, то есть континуальное решение. Представление кинетической температуры в континуальном пределе необходимо для того чтобы использовать полученное выражение как определяющее соотношение.

Для вывода континуального решения используется подход, предложенный в работе [50]. Раскроем квадрат в формуле (1.14), применяя правило произведения интегралов, и, используя свойство произведения косинусов, разделим результат на два слагаемых, которые отвечают за два различных процесса:

$$\begin{aligned} T_n &= T_n^F + T_n^S, \\ T_n^F &= \sum_{j=0}^{\infty} T_j^0 F_{nj}, \quad T_n^S = \sum_{j=0}^{\infty} T_j^0 S_{nj}, \end{aligned} \quad (1.15)$$

где F_{nj} и S_{nj} представляются как

$$\begin{aligned}
F_{nj} &= \frac{1}{2\pi^2} \iint_{-\pi}^{\pi} \cos \frac{(2j+1)\theta_1}{2} \cos \frac{(2j+1)\theta_2}{2} \cos \frac{(2n+1)\theta_1}{2} \times \\
&\quad \times \cos \frac{(2n+1)\theta_2}{2} \cos ((\omega(\theta_1) + \omega(\theta_2))t) d\theta_1 d\theta_2, \\
S_{nj} &= \frac{1}{2\pi^2} \iint_{-\pi}^{\pi} \cos \frac{(2j+1)\theta_1}{2} \cos \frac{(2j+1)\theta_2}{2} \cos \frac{(2n+1)\theta_1}{2} \times \\
&\quad \times \cos \frac{(2n+1)\theta_2}{2} \cos ((\omega(\theta_1) - \omega(\theta_2))t) d\theta_1 d\theta_2.
\end{aligned} \tag{1.16}$$

Первое слагаемое в выражении (1.15), T_n^F , соответствует «быстрому» процессу, происходящему на временах порядка нескольких периодов колебаний частиц. Как будет показано далее, это высокочастотные колебания кинетической температуры, вызванные выравниваем кинетической и потенциальной энергий. Второе слагаемое, T_n^S , соответствует «медленному» процессу, связанному с баллистическим переносом тепла. Таким образом, быстрый и медленный процессы, а, значит, слагаемые, им соответствующие, можно рассматривать отдельно. Ниже выводятся выражения для T_n^F и T_n^S в континуальном пределе. Рассмотрим для начала T_n^S .

1.4.1 Континуализация

Введем некоторый мезомасштаб длиной $2a\Delta N$ (a — длина недеформированной связи между ближайшими частицами, $\Delta N \gg 1$), который много больше, чем масштаб порядка a , но много меньший, чем макромасштаб ³ длины \mathcal{A} . Разделим цепочку на интервалы s , каждый из которых содержит $2\Delta N$ частиц (рисунок 1.1), начинается и заканчивается «промежуточными» узлами j_{s-1} и j_s соответственно.

Предположим, что поле начальной температуры, T^0 , медленно меняется в интервале $[j_{s-1}; j_s]$. Тогда, формулу (1.15) можно приближенно переписать

³Под макромасштабом может подразумеваться длина цепочки, если бы она была конечной.

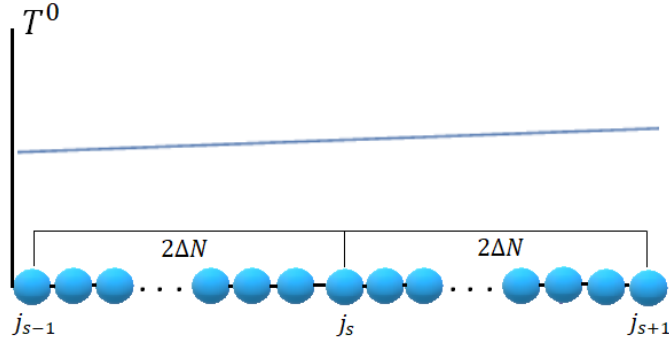


Рис. 1.1: Начальное распределение температуры.

следующим образом:

$$\begin{aligned}
 T_n^S &= \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{j=j_s-\Delta N+1}^{j_s+\Delta N} T_j^0 S_{nj} \approx \sum_{s=0}^{\infty} T_{j_s}^0 \sum_{j=j_s-\Delta N+1}^{j_s+\Delta N} S_{nj} = \\
 &2a\Delta N \sum_{s=0}^{\infty} T_{j_s}^0 g_{n,j_s}^S(\Delta N), \quad g_{n,j_s}^S(\Delta N) = \frac{1}{2a\Delta N} \sum_{j=j_s-\Delta N+1}^{j_s+\Delta N} S_{nj},
 \end{aligned} \tag{1.17}$$

где выражение $g_{n,j_s}^S(\Delta N)$ определяет вклад узла j_s в температуру частицы n . Для удобства, назовем этот вклад *дискретным фундаментальным решением*, то есть аналогом континуального фундаментального решения задачи переноса тепла в полубесконечной цепочке, которое определим в 1.4.3.

Введем функции начального поля температуры, $T^0(x)$, «медленной» составляющей температуры, $T^S(x)$ и континуального фундаментального решения, $g_c^S(x, y)$, определяемые как

$$\begin{aligned}
 T^0(an) &\equiv T_n^0, \quad g_c^S(x, y) = \lim_{\frac{a\Delta N}{A} \rightarrow 0} g_{n,j_s}^S(\Delta N), \\
 T^S(x) &= \lim_{\frac{a\Delta N}{A} \rightarrow 0} T_n^S = \int_0^{\infty} T^0(y) g_c^S(x, y) dy.
 \end{aligned} \tag{1.18}$$

Таким образом, зная дискретное фундаментальное решение, можно построить континуальное фундаментальное решение, а с ним, зная начальное распределение температуры — и поле температуры в любой момент времени.

1.4.2 Дискретное фундаментальное решение

Формула (1.17) показывает, что дискретное фундаментальное решение получается из осреднения функции S_{nj} , для которой ниже приводится преобразование по интервалу длиной $2a\Delta N$, соответствующему мезомасштабу. В дальнейшем выводится асимптотическое приближение для дискретного фундаментального решения, g_{n,j_s}^S по трем малым параметрам. Первые два из них — это $\frac{1}{\Delta N}$ и $\frac{a\Delta N}{\mathcal{A}}$, а третий, как будет показано далее — разность волновых чисел $\Delta\theta = \theta_1 - \theta_2$.

Раскроем произведение косинусов в формуле (1.16):

$$\begin{aligned}
 S_{nj} = \frac{1}{16\pi^2} \iint_{-\pi}^{\pi} & \left[\cos((n+j+1)(\theta_1 + \theta_2)) + \cos((n+j+1)(\theta_1 - \theta_2)) + \right. \\
 & \cos((n-j)(\theta_1 + \theta_2)) + \cos((n-j)(\theta_1 - \theta_2)) + \\
 & \cos\left(\frac{(2j+1)(\theta_1 + \theta_2)}{2} - \frac{(2n+1)(\theta_1 - \theta_2)}{2}\right) + \\
 & \cos\left(\frac{(2j+1)(\theta_1 + \theta_2)}{2} + \frac{(2n+1)(\theta_1 - \theta_2)}{2}\right) + \\
 & \cos\left(\frac{(2n+1)(\theta_1 + \theta_2)}{2} - \frac{(2j+1)(\theta_1 - \theta_2)}{2}\right) + \\
 & \left. \cos\left(\frac{(2n+1)(\theta_1 + \theta_2)}{2} + \frac{(2j+1)(\theta_1 - \theta_2)}{2}\right) \right] \cos((\omega(\theta_1) - \omega(\theta_2))t) d\theta_1 d\theta_2.
 \end{aligned} \tag{1.19}$$

Значит, выражение для $g_{n,j_s}^S(\Delta N)$ можно переписать в виде суммы из восьми слагаемых:

$$g_{n,j_s}^S(\Delta N) = \frac{1}{16\pi^2 a} \iint_{-\pi}^{\pi} \cos((\omega(\theta_1) - \omega(\theta_2))t) \sum_{i=1}^8 \phi_i(\theta_1, \theta_2) d\theta_1 d\theta_2. \tag{1.20}$$

Распишем слагаемые ϕ_i по отдельности:

$$\begin{aligned}\phi_1 &= \frac{1}{2\Delta N} \sum_{j=j_s-\Delta N+1}^{j_s+\Delta N} \cos((n+j+1)(\theta_1+\theta_2)) = \\ &= \frac{1}{2\Delta N} \cos\left(\frac{3(\theta_1+\theta_2)}{2} + (\theta_1+\theta_2)(n+j_s)\right) \frac{\sin((\theta_1+\theta_2)\Delta N)}{\sin\left(\frac{\theta_1+\theta_2}{2}\right)},\end{aligned}\quad (1.21)$$

$$\begin{aligned}\phi_2 &= \frac{1}{2\Delta N} \sum_{j=j_s-\Delta N+1}^{j_s+\Delta N} \cos((n+j+1)\Delta\theta) = \\ &= \frac{1}{2\Delta N} \cos\left(\left(n+j_s+\frac{3}{2}\right)\Delta\theta\right) \frac{\sin(\Delta N\Delta\theta)}{\sin\frac{\Delta\theta}{2}},\end{aligned}\quad (1.22)$$

$$\begin{aligned}\phi_3 &= \frac{1}{2\Delta N} \sum_{j=j_s-\Delta N+1}^{j_s+\Delta N} \cos((n-j)(\theta_1+\theta_2)) = \\ &= \frac{1}{2\Delta N} \cos\left((\theta_1+\theta_2)\left(\frac{1}{2}+j_s-n\right)\right) \frac{\sin((\theta_1+\theta_2)\Delta N)}{\sin\left(\frac{\theta_1+\theta_2}{2}\right)},\end{aligned}\quad (1.23)$$

$$\begin{aligned}\phi_4 &= \frac{1}{2\Delta N} \sum_{j=j_s-\Delta N+1}^{j_s+\Delta N} \cos((n-j)\Delta\theta) = \\ &= \frac{1}{2\Delta N} \cos\left(\Delta\theta\left(\frac{1}{2}+j_s-n\right)\right) \frac{\sin(\Delta N\Delta\theta)}{\sin\frac{\Delta\theta}{2}},\end{aligned}\quad (1.24)$$

$$\begin{aligned}\phi_5 &= \frac{1}{2\Delta N} \sum_{j=j_s-\Delta N+1}^{j_s+\Delta N} \cos\left(\frac{(2j+1)(\theta_1+\theta_2)}{2} - \frac{(2n+1)(\theta_1-\theta_2)}{2}\right) = \\ &= \frac{1}{2\Delta N} \cos\left(\theta_1\left(\frac{1}{2}+j_s-n\right) + \theta_2\left(\frac{3}{2}+j_s+n\right)\right) \frac{\sin((\theta_1+\theta_2)\Delta N)}{\sin\left(\frac{\theta_1+\theta_2}{2}\right)},\end{aligned}\quad (1.25)$$

$$\begin{aligned}\phi_6 &= \frac{1}{2\Delta N} \sum_{j=j_s-\Delta N+1}^{j_s+\Delta N} \cos\left(\frac{(2j+1)(\theta_1+\theta_2)}{2} + \frac{(2n+1)(\theta_1-\theta_2)}{2}\right) = \\ &= \frac{1}{2\Delta N} \cos\left(\theta_2\left(\frac{1}{2}+j_s-n\right) + \theta_1\left(\frac{3}{2}+j_s+n\right)\right) \frac{\sin((\theta_1+\theta_2)\Delta N)}{\sin\left(\frac{\theta_1+\theta_2}{2}\right)},\end{aligned}\quad (1.26)$$

$$\begin{aligned}
\phi_7 &= \frac{1}{2\Delta N} \sum_{j=j_s-\Delta N+1}^{j_s+\Delta N} \cos \left(\frac{(2n+1)(\theta_1+\theta_2)}{2} - \frac{(2j+1)(\theta_1-\theta_2)}{2} \right) = \\
&= \frac{1}{2\Delta N} \cos \left(\theta_1 \left(\frac{1}{2} + j_s - n \right) - \theta_2 \left(\frac{3}{2} + j_s + n \right) \right) \frac{\sin(\Delta N \Delta \theta)}{\sin\left(\frac{\Delta \theta}{2}\right)},
\end{aligned} \tag{1.27}$$

$$\begin{aligned}
\phi_8 &= \frac{1}{2\Delta N} \sum_{j=j_s-\Delta N+1}^{j_s+\Delta N} \cos \left(\frac{(2n+1)(\theta_1+\theta_2)}{2} + \frac{(2j+1)(\theta_1-\theta_2)}{2} \right) = \\
&= \frac{1}{2\Delta N} \cos \left(\theta_2 \left(\frac{1}{2} + j_s - n \right) - \theta_1 \left(\frac{3}{2} + j_s + n \right) \right) \frac{\sin(\Delta N \Delta \theta)}{\sin\left(\frac{\Delta \theta}{2}\right)}.
\end{aligned} \tag{1.28}$$

Перепишем слагаемые ϕ_i , содержащие разность волновых чисел $\Delta\theta$, следующим образом:

$$\begin{aligned}
\phi_2 &= \frac{\Delta\theta}{2} \left[\frac{\cos \frac{3\Delta\theta}{2}}{\sin \frac{\Delta\theta}{2}} (\cos((n+j_s)\Delta\theta)) - \frac{\sin \frac{3\Delta\theta}{2}}{\sin \frac{\Delta\theta}{2}} (\sin((n+j_s)\Delta\theta)) \right] \text{sinc}(\Delta N \Delta \theta), \\
\phi_4 &= \frac{\Delta\theta}{2} \left[\cot \frac{\Delta\theta}{2} \cos((n-j_s)\Delta\theta) + \sin((n-j_s)\Delta\theta) \right] \text{sinc}(\Delta N \Delta \theta), \\
\phi_7 &= \frac{\Delta\theta}{2} \left[\frac{\cos \frac{3\Delta\theta}{2}}{\sin \frac{\Delta\theta}{2}} \cos(\Delta\theta(n+j_s) - \theta_1(2n+1)) - \right. \\
&\quad \left. \frac{\sin \frac{3\Delta\theta}{2}}{\sin \frac{\Delta\theta}{2}} \sin(\Delta\theta(n+j_s) - \theta_1(2n+1)) \right] \text{sinc}(\Delta N \Delta \theta), \\
\phi_8 &= \frac{\Delta\theta}{2} \left[\cot \frac{\Delta\theta}{2} \cos(\theta_1(2n+1) - \Delta\theta(n-j_s)) - \sin(\theta_1(2n+1) - \Delta\theta(n-j_s)) \right] \\
&\text{sinc}(\Delta N \Delta \theta), \\
\text{sinc}(x) &= \frac{\sin x}{x}.
\end{aligned} \tag{1.29}$$

Упростим выражения (1.29) для ϕ_2 , ϕ_4 , ϕ_7 и ϕ_8 , используя малый параметр $\frac{1}{\Delta N}$ и свойства функции sinc. Поведение функции $\text{sinc}(\Delta\theta\Delta N)$ на отрезке $[-\pi; \pi]$ представлено на рисунке 1.2.

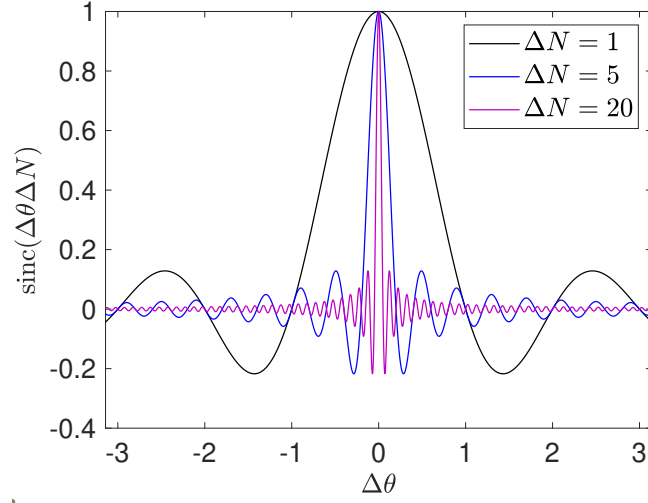


Рис. 1.2: Зависимость функции $\text{sinc}(\Delta\theta\Delta N)$.

В самом деле, при $\Delta N \gg 1$, $\text{sinc}(\Delta\theta)$ быстро стремится к нулю, при $\Delta\theta \neq 0$ и $\text{sinc}(\Delta\theta) = 1$ при $\Delta\theta = 0$. Следовательно, основной вклад в слагаемые ϕ_i , а значит, и в дискретное фундаментальное решение $g_{n,j_s}^S(\Delta N)$ вносят ближайшие волновые числа θ_1, θ_2 . Поскольку величина $\Delta\theta$ не фигурирует в слагаемых $\phi_{1,3,5,6}$, то, в дальнейшем, можно ими пренебречь. Следовательно, в пределах $\Delta\theta \rightarrow 0$ и $\Delta N \gg 1$ имеем

$$\begin{aligned}
 \phi_2 &= \cos((n + j_s)\Delta\theta)\text{sinc}(\Delta N\Delta\theta) + O\left(\frac{1}{\Delta N}\right), \\
 \phi_4 &= \cos((n - j_s)\Delta\theta)\text{sinc}(\Delta N\Delta\theta) + O\left(\frac{1}{\Delta N}\right), \\
 \phi_7 &= \cos(\theta_1(2n + 1) - (n + j_s)\Delta\theta)\text{sinc}(\Delta N\Delta\theta) + O\left(\frac{1}{\Delta N}\right), \\
 \phi_8 &= \cos(\theta_1(2n + 1) - (n - j_s)\Delta\theta)\text{sinc}(\Delta N\Delta\theta) + O\left(\frac{1}{\Delta N}\right), \\
 \phi_1 &= \phi_3 = \phi_5 = \phi_6 = O\left(\frac{1}{\Delta N}\right).
 \end{aligned} \tag{1.30}$$

В дальнейшем, слагаемые порядка $O\left(\frac{1}{\Delta N}\right)$ «отбрасываются». В пределе $\Delta\theta \rightarrow 0$ разницу $\omega(\theta_1) - \omega(\theta_2)$ можно переписать как

$$\omega(\theta_1) - \omega(\theta_2) \approx \omega'(\theta_1)\Delta\theta, \quad \omega'(\theta_1) = \left.\frac{d\omega}{d\theta}\right|_{\theta=\theta_1}. \tag{1.31}$$

Таким образом, выражение для дискретного фундаментального решения можно переписать в сокращенном виде:

$$\begin{aligned}
g_{n,j_s}^S(\Delta N) &\approx \frac{1}{16\pi^2 a} \iint_{-\pi}^{\pi} \left[\cos(\Delta\theta\omega'(\theta_1)t) \cos((n+j_s)\Delta\theta) \text{sinc}(\Delta N\Delta\theta) \right] d\theta_{1,2} \\
&+ \frac{1}{16\pi^2 a} \iint_{-\pi}^{\pi} \left[\cos(\Delta\theta\omega'(\theta_1)t) \cos((n-j_s)\Delta\theta) \text{sinc}(\Delta N\Delta\theta) \right] d\theta_{1,2} \\
&+ \frac{1}{16\pi^2 a} \iint_{-\pi}^{\pi} \left[\cos(\Delta\theta\omega'(\theta_1)t) \cos(\theta_1(2n+1) - (n+j_s)\Delta\theta) \text{sinc}(\Delta N\Delta\theta) \right] d\theta_{1,2} \\
&\frac{1}{16\pi^2 a} \iint_{-\pi}^{\pi} \left[\cos(\Delta\theta\omega'(\theta_1)t) \cos(\theta_1(2n+1) - (n-j_s)\Delta\theta) \text{sinc}(\Delta N\Delta\theta) \right] d\theta_{1,2}.
\end{aligned} \tag{1.32}$$

В следующем подпараграфе формула (1.32) используется для получения континуального фундаментального решения.

1.4.3 Континуальное фундаментальное решение

Сделаем замену переменных $\theta = \theta_1, q = \Delta\theta$ и перепишем выражение (1.32), используя свойство произведения, суммы и четности косинусов:

$$\begin{aligned}
g_{n,j_s}^S(\Delta N) &= \frac{1}{8\pi} \int_0^{\pi} (\psi_1(n+j_s+\omega'(\theta)t) + \psi_1(n+j_s-\omega'(\theta)t) d\theta \\
&+ \frac{1}{8\pi} \int_0^{\pi} (\psi_1(n-j_s+\omega'(\theta)t) + \psi_1(n-j_s-\omega'(\theta)t) d\theta \\
&+ \frac{1}{8\pi} \int_0^{\pi} \cos(\theta(2n+1)) (\psi_1(n+j_s+\omega'(\theta)t) + \psi_1(n+j_s-\omega'(\theta)t) d\theta \\
&+ \frac{1}{8\pi} \int_0^{\pi} \cos(\theta(2n+1)) (\psi_1(n-j_s+\omega'(\theta)t) + \psi_1(n-j_s-\omega'(\theta)t) d\theta \\
&+ \frac{1}{8\pi} \int_0^{\pi} \sin(\theta(2n+1)) (\psi_2(n+j_s+\omega'(\theta)t) + \psi_2(n+j_s-\omega'(\theta)t) d\theta \\
&+ \frac{1}{8\pi} \int_0^{\pi} \sin(\theta(2n+1)) (\psi_2(n-j_s+\omega'(\theta)t) + \psi_2(n-j_s-\omega'(\theta)t) d\theta, \\
\psi_1(\Xi) &= \frac{1}{2\pi a} \int_{\theta-\pi}^{\theta+\pi} \cos(\Xi q) \text{sinc}(q\Delta N) dq, \\
\psi_2(\Xi) &= \frac{1}{2\pi a} \int_{\theta-\pi}^{\theta+\pi} \sin(\Xi q) \text{sinc}(q\Delta N) dq,
\end{aligned} \tag{1.33}$$

где ψ_1 и ψ_2 — волновые пакеты, распространяющиеся с групповой скоростью $v_g = a\omega'$. Итак, при осреднении функции g_{n,j_s}^S по мезомасштабу, фундаментальное решение превращается в сумму интегралов от волновых пакетов, проходящих по разные стороны. Далее покажем, что в пределе $\Delta N \gg 1$ выражения для ψ_1 и ψ_2 соответствуют вещественным и мнимым частям от преобразования Фурье от функции sinc соответственно.

В самом деле,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi a} \int_{\theta-\pi}^{\theta+\pi} \cos(\Xi q) \operatorname{sinc}(q\Delta N) dq &= \frac{1}{2\pi a\Delta N} \int_{(\theta-\pi)\Delta N}^{(\theta+\pi)\Delta N} \cos\left(\frac{\Xi q}{\Delta N}\right) \operatorname{sinc} q dq \\ &\approx \frac{1}{2\pi a\Delta N} \int_{-\infty}^{\infty} \cos\left(\frac{\Xi q}{\Delta N}\right) \operatorname{sinc} q dq = \operatorname{Re} \left(\frac{1}{2\pi a\Delta N} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\left(\frac{\Xi q}{\Delta N}\right)} \operatorname{sinc} q dq \right), \\ i^2 &= -1. \end{aligned} \quad (1.34)$$

Аналогично,

$$\frac{1}{2\pi a} \int_{\theta-\pi}^{\theta+\pi} \sin(\Xi q) \operatorname{sinc}(q\Delta N) dq \approx \operatorname{Im} \left(\frac{1}{2\pi a\Delta N} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\left(\frac{\Xi q}{\Delta N}\right)} \operatorname{sinc} q dq \right). \quad (1.35)$$

Рассмотрим $\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\xi q} \operatorname{sinc} q dq$. Этот интеграл распадается на разность двух интегралов, которые нетрудно вычислить (см. в частности, [1]):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\xi q} \operatorname{sinc} q dq &= \frac{1}{4\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(\xi+1)q}}{q} dq - \frac{1}{4\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(\xi-1)q}}{q} dq \\ &= \frac{1}{2} \left(H(\xi+1) - H(\xi-1) \right) = \frac{1}{2} H(1 - |\xi|), \end{aligned} \quad (1.36)$$

где $H(\xi)$ — функция Хевисайда. Следовательно, выражение для пакета $\psi_2(\Xi)$ равно нулю. А пакет $\psi_1(\Xi)$ равен $\frac{1}{2a\Delta N} H\left(1 - \frac{|\Xi|}{\Delta N}\right)$, то есть подчиняется прямоугольной функции, имеющей ненулевые значения на отрезке $[-\frac{\Xi}{\Delta N}; \frac{\Xi}{\Delta N}]$.

Запишем окончательное выражения для дискретного фундаментального

решения и волновых пакетов:

$$\begin{aligned}
g^s(n, j_s, \Delta N) &\approx \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi (\psi(n - j_s + \omega'(\theta)t, \Delta N) + \psi(n - j_s - \omega'(\theta)t, \Delta N)) d\theta \\
&+ \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi (\psi(n + j_s + \omega'(\theta)t, \Delta N) + \psi(n + j_s - \omega'(\theta)t, \Delta N)) d\theta, \\
\psi(\Xi, \Delta N) &= \frac{\cos^2\left(\frac{\theta(2n+1)}{2}\right)}{2a\Delta N} H\left(1 - \frac{|\Xi|}{\Delta N}\right).
\end{aligned} \tag{1.37}$$

Рассмотрим волновой пакет $\psi(\Xi, \Delta N)$ в формуле (1.37). В пределе $\Delta N \gg 1$, то есть при стремлении ΔN к бесконечности, отрезок, на котором прямоугольная функция имеет ненулевые значения, «стягивается» в точку. С другой стороны, в пределе $a\Delta N \ll \mathcal{A}$, множитель, стоящий перед прямоугольной функцией, стремится к бесконечности. Из этого следует, что в пределах $\Delta N \gg 1$ и $a\Delta N/\mathcal{A} \rightarrow 0$, функция волнового пакета ψ стремится к дельта-функции:

$$\psi(n - j_s + \omega'(\theta)t, \infty) \approx \delta(a(n - j_s + \omega'(\theta)t)) = \delta(x - y + v_g(\theta)t), \tag{1.38}$$

где $v_g = a\omega' = v_s \cos \frac{\theta}{2}$, $v_s = a\omega_e$ — скорость звука.

Таким образом, континуальное фундаментальное решение может быть записано в виде

$$\begin{aligned}
g_c^S(x, y) &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \delta(x - y + v_g(\theta)t) d\theta + \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \delta(x - y - v_g(\theta)t) d\theta \\
&+ \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \delta(x + y + v_g(\theta)t) d\theta + \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \delta(x + y - v_g(\theta)t) d\theta.
\end{aligned} \tag{1.39}$$

Как будет показано далее, поведение фундаментального решения, g_c^S , определяет поведение кинетической температуры в пространстве. Континуальное фундаментальное решение — суперпозиция волновых пакетов ψ , распространяющихся с групповой скоростью, $v_g(\theta)$ и имеющих форму дельта-функции

Дирака. Поскольку формула для g_c^S получена в асимптотическом приближении ($\Delta N \gg 1, a\Delta N \ll 1$), положение волнового пакета можно определить с точностью до $a\Delta N$.

1.4.4 «Медленная» составляющая кинетической температуры

Используя (1.18) и свойство свертки с дельта-функциями, запишем выражение для слагаемого T^S , соответствующего баллистическому переносу тепла:

$$\begin{aligned}
T^S &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty T^0(y) \int_0^\pi \delta(x - y + v_g(\theta)t) d\theta dy \\
&+ \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty T^0(y) \int_0^\pi \delta(x - y - v_g(\theta)t) d\theta dy \\
&+ \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty T^0(y) \int_0^\pi \delta(x + y + v_g(\theta)t) d\theta dy \\
&+ \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty T^0(y) \int_0^\pi \delta(x + y - v_g(\theta)t) d\theta dy = \\
&\frac{1}{4\pi} \int_0^\pi T^0(x + v_g(\theta)t) H(x + v_g(\theta)t) d\theta + \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi T^0(x - v_g(\theta)t) H(x - v_g(\theta)t) d\theta \\
&+ \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi T^0(-x + v_g(\theta)t) H(-x + v_g(\theta)t) d\theta \\
&+ \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi T^0(-x - v_g(\theta)t) H(-x - v_g(\theta)t) d\theta.
\end{aligned} \tag{1.40}$$

Упростим выражение (1.40). Поскольку область определения функции кинетической температуры для полубесконечной цепочки $x \geq 0$, четвертое слагаемое в формуле (1.40) равно нулю. Сумму первых трех слагаемых можно преобразовать, используя тот факт, что функция групповой скорости неотрицательна на отрезке $[0; \pi]$. Следовательно, имеем окончательное выражение для T^S :

$$T^S = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi T^0(|x + v_s t \cos \theta|) d\theta. \tag{1.41}$$

Таким образом, кинетическая температура в «континуальном» пределе есть суперпозиция волновых пакетов, имеющих форму T^0 . Учитывая замечание о точности положения волнового пакета, можно прийти к выводу, что фор-

мула (1.41) применима только для начального температурного поля, медленно меняющегося в пределах длины порядка $a\Delta N$. Формула (1.41) построена на фундаментальном решении, полученном осреднением дискретного фундаментального решения по мезомасштабу, приводящем к волновым пакетам с близкими волновыми числами.

1.4.5 «Быстрая» составляющая кинетической температуры

Выведем выражение для «быстрой» составляющей кинетической температуры. С учетом предположения, выдвинутого в ходе континуализации, введем функцию $T^F(x)$ такую, что

$$T^F(x) = \int_0^\infty T^0(y)g_c^F(x, y)dy, \quad g_c^F(x, y) = \lim_{\frac{a\Delta N}{L} \rightarrow 0} g^F(n, j_s, \Delta N),$$

$$g^F(n, j_s, \Delta N) = \frac{1}{16\pi^2 a} \iint_{-\pi}^{\pi} \cos((\omega(\theta_1) + \omega(\theta_2))t) \sum_{i=1}^8 \phi_i(\theta_1, \theta_2) d\theta_1 d\theta_2, \quad (1.42)$$

где ϕ_i определяются формулами (1.30). В подпараграфе 1.4.2 было доказано, что основной вклад в фундаментальное решение дают точки при $\theta_1 \approx \theta_2 = \theta$. Тогда, учитывая (1.39), фундаментальное решение g_c^F можно переписать как

$$g_c^F(x, y) = \frac{\delta(x-y) + \delta(x+y)}{2\pi} \int_0^\pi \cos(2\omega(\theta)t) d\theta = \frac{\delta(x-y) + \delta(x+y)}{2} J_0(4\omega_\epsilon t), \quad (1.43)$$

где J_ν — функция Бесселя первого рода порядка ν . Тогда, аналогично, имеем окончательное выражение для быстрой составляющей T^F :

$$T^F(x) = \frac{T^0(x)H(x) + T^0(-x)H(-x)}{2} J_0(4\omega_\epsilon t) = \frac{T^0(x)}{2} J_0(4\omega_\epsilon t). \quad (1.44)$$

Таким образом, зная «быструю» и «медленную» составляющие (T^F и T^S соответственно), можно записать выражение для полной кинетической тем-

пературы в полубесконечной цепочке как их сумму:

$$T(x, t) = \frac{T^0(x)}{2} J_0(4\omega_e t) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi T^0(|x + v_s t \cos \theta|) d\theta. \quad (1.45)$$

Первое слагаемое в формуле (1.45) соответствует высокочастотным колебаниям кинетической температуры, происходящим на малых временах и вызванным необратимым превращением части (половины) кинетической энергии в потенциальную. Второе слагаемое отвечает за баллистический перенос тепловой энергии. Фронт распространяется с конечной скоростью, а именно со скоростью звука. В работе [48] показано, что в бесконечных гармонических кристаллах тепловая энергия распространяется с максимальной групповой скоростью, и в одномерных моноатомных цепочках это и есть скорость звука. Далее будет показано, что в полубесконечной гармонической цепочке кинетическая температура в континуальном пределе обладает еще двумя свойствами.

Замечание. Во множестве работ, посвященных баллистическому переносу тепла, формулу для температуры в континуальном пределе приводят и исследуют без слагаемого T^F , подразумевая рассмотрение исключительно медленных процессов. Вообще говоря, можно вообще «исключить» быстрые процессы, поставив задачу не со случайными начальными скоростями, а со случайными деформациями через переход к координатам Шредингера [63].

1.5 Точечное тепловое возмущение. Принцип симметрии континуального решения

Рассмотрим точечный источник тепловой энергии. Начальное распределение температуры имеет вид:

$$T^0(x) = A\delta(x - h_p a), \quad (1.46)$$

где h_p — номер частицы, соответствующей точке нагрева $h_p a$, расположенной на незначительном удалении от границы ⁴; A — константа, имеющая размерность м·К. Поскольку переход к тепловому равновесию здесь происходит мгновенно, будем считать, что $T \cong T^S$. Воспользуемся формулой (1.45):

$$T = \frac{A}{2\pi} \int_0^\pi \delta(|x + v_s t \cos \theta| - h_p a) d\theta. \quad (1.47)$$

Для вычисления интеграла (1.47) воспользуемся следующим тождеством [28]:

$$\int_{\mathcal{D}} \delta(f(\xi)) d\xi = \sum_i \frac{1}{|f'(\xi_i)|}, \quad f(\xi) = 0, \quad (1.48)$$

где ξ_i — нули функции $f(\xi)$, лежащие внутри области \mathcal{D} . Что касается интеграла в формуле (1.47), имеем:

$$\begin{aligned} |x + v_s t \cos \theta| - h_p a = 0 &\iff \theta = \arccos\left(\frac{h_p a - x}{v_s t}\right), \\ &\theta = \pi - \arccos\left(\frac{x + h_p a}{v_s t}\right). \end{aligned} \quad (1.49)$$

Следовательно, подставляя найденные значения волновых чисел в (1.48), получаем:

$$T = \frac{A}{2\pi} \left(\frac{H(v_s t - |x - h_p a|)}{\sqrt{v_s^2 t^2 - (x - h_p a)^2}} + \frac{H(v_s t - |x + h_p a|)}{\sqrt{v_s^2 t^2 - (x + h_p a)^2}} \right). \quad (1.50)$$

Итак, решена задача о распространении тепловой энергии в одномерной полубесконечной цепочке при точечном начальном тепловом возмущении. Кинетическая температура подчиняется закону (1.50). Однако, если рассмотреть бесконечную цепочку и задать тепловое возмущение одновременно в точках $h_p a$ и $-h_p a$, решение задачи о переносе тепла будет точно таким же (задачи теплопереноса в бесконечной цепочке с точечным тепловым источником

⁴Здесь и далее, левый конец цепочки, то есть нулевая частица, будем называть границей.

рассмотрены в [24], [26]). Для бесконечной цепочки, формула (1.50) — сумма из двух слагаемых, первое из которых отвечает за две тепловые волны, бегущие по обе стороны от точки $x = h_p a$. Второе слагаемое отвечает за две тепловые волны, бегущие от точки $x = -h_p a$. Волна, исходящая из точки $x = -h_p a$ в точку $x = 0$ в момент времени $t = \frac{h_p a}{v_s}$ после мгновенной интерференции со встречной волной, исходящей из точки $x = h_p a$, проходит дальше. В полубесконечной цепочке — другая ситуация. Две тепловые волны, исходящие из точки $x = h_p a$, бегут по обе стороны. Одна, приходя в точку $x = 0$ в момент времени $t = \frac{h_p a}{v_s}$, мгновенно *отражается* и идет в обратном направлении, в том же, в котором идет другая волна. Итак, *аналитически* показано свойство тепловых волн отражаться от границ.

Таким образом, решение континуальной задачи о переносе тепла в одномерном полубесконечном гармоническом кристалле с некоторым источником теплового возмущения эквивалентно тому же решению для бесконечного гармонического кристалла с двумя источниками, расположенными симметрично относительно точки $x = 0$. В этом заключается *принцип симметрии континуального решения*. С его помощью можно решить задачу баллистического переноса тепла в полубесконечной цепочке через решение для бесконечной. Остается открытым вопрос, работает ли аналогичный принцип для решеток большей размерности, а также для сложных решеток. Исследование этого вопроса остается за рамками настоящей работы.

1.6 Анализ результатов

В настоящем параграфе рассматриваются некоторые примеры поведения температурного поля в полубесконечной цепочке при некоторых начальных тепловых возмущениях. Приводятся случаи точечного возмущения, два примера прямоугольного возмущения (в одном случае возмущение не охватывает границу, а в другом — охватывает). Для одного случая приводится также

сравнение с теплопереносом в бесконечной цепочке. Поэтому воспользуемся формулами, справедливыми для описания поведения температуры в последней, а именно: в дискретном виде, предложенным Кляйном, Пригожиным [42] и Хеммером [36]:

$$T_n = \sum_{j=-\infty}^{\infty} T_j^0 J_{2(n-j)}^2(2\omega_e t), \quad (1.51)$$

а также в континуальном, полученным в [44], [45], [50]:

$$T(x, t) = \frac{T^0(x)}{2} J_0(4\omega_e t) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi T^0(x + v_s t \cos \theta) d\theta. \quad (1.52)$$

1.6.1 Обезразмеривание величин

Для того чтобы анализировать полученные выражения, обезразмерим их. Введем безразмерные переменные \tilde{x} , \tilde{u} , \tilde{v} , \tilde{t} , \tilde{T} , такие, что:

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= x/a, & \tilde{u} &= u/a, \\ \tilde{v} &= v/v_s, & \tilde{t} &= \omega_e t, & \tilde{T} &= Tk_B/(mv_s^2). \end{aligned} \quad (1.53)$$

В точках расположения частиц $\tilde{x} \equiv n$. Уравнения динамики (1.1) можно переписать следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \tilde{u}_n}{d\tilde{t}^2} &= \tilde{u}_{n+1} - 2\tilde{u}_n + \tilde{u}_{n-1}, & n &= 1, 2, \dots, N-2, \\ \frac{d^2 \tilde{u}_{N-1}}{d\tilde{t}^2} &= \tilde{u}_{N-2} - \tilde{u}_{N-1}, \\ \frac{d^2 \tilde{u}_0}{d\tilde{t}^2} &= \tilde{u}_1 - \tilde{u}_0, \end{aligned} \quad (1.54)$$

а начальные условия — в виде:

$$\tilde{u}_n = 0, \quad \tilde{v}_n = \frac{d\tilde{u}_n}{d\tilde{t}} = \rho_n \sqrt{\tilde{T}_n^0}, \quad \langle \rho_n \rangle = 0, \quad \langle \rho_m \rho_n \rangle = \delta_{mn}. \quad (1.55)$$

Выражения (1.14), (1.47), (1.52) для кинетической температуры для по-

лубесконечной цепочки соответственно перепишем как

$$\tilde{T}_n = \frac{1}{\pi^2} \sum_{j=0}^{\infty} \tilde{T}_j^0 \left(\int_{-\pi}^{\pi} \cos \frac{(2j+1)\theta}{2} \cos \frac{(2n+1)\theta}{2} \cos \left(2\tilde{t} \sin \frac{\theta}{2} \right) d\theta \right)^2, \quad (1.56)$$

$$\tilde{T}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \frac{\tilde{T}^0(\tilde{x})}{2} J_0(4\tilde{t}) + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \tilde{T}^0(|\tilde{x} + \tilde{t} \cos \theta|) d\theta, \quad (1.57)$$

$$\tilde{T}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{H(\tilde{t} - |\tilde{x} - h_p|)}{\sqrt{\tilde{t}^2 - (\tilde{x} - h_p)^2}} + \frac{H(\tilde{t} - |\tilde{x} + h_p|)}{\sqrt{\tilde{t}^2 - (\tilde{x} + h_p)^2}} \right), \quad (1.58)$$

а для бесконечной цепочки — как

$$\tilde{T}_n = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \tilde{T}_j^0 J_{2(n-j)}^2(2\tilde{t}) \quad (1.59)$$

и

$$\tilde{T}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \frac{\tilde{T}^0(\tilde{x})}{2} J_0(4\tilde{t}) + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \tilde{T}^0(\tilde{x} + \tilde{t} \cos \theta) d\theta. \quad (1.60)$$

Чтобы избежать путаницы, при обозначении дискретной кинетической температуры, указывается нижний индекс принадлежности ее к частице, а континуальная кинетическая температура обозначается как функция, зависящая от координаты.

Интегрирование в формулах (1.56), (1.57), (1.59), (1.60) производится методом прямоугольников при разбиении области волновых чисел на 10^3 равных отрезков. Для проверки проводится вычисление кинетической температуры для частицы как среднее по реализациям квадрата ее скорости:

$$\tilde{T}_n = \frac{1}{R} \sum_{i=1}^R \tilde{v}_{n,i}^2, \quad (1.61)$$

где R — число реализаций, различающихся начальными условиями (1.55), $R = 10^5$. Для нахождения скоростей частиц производится численное инте-

грирование уравнений динамики⁵ (1.54) с начальными условиями⁶ (1.55) симплектическим методом Кэнди и Розмуса четвертого порядка точности [16] с использованием оптимизирующих параметров, предложенных в [58] и шага по времени $\Delta\tilde{t} = 0.01$. Для бесконечной цепочки численное решение производится так же, только с периодическими граничными условиями.

1.6.2 Пример. Точечное тепловое возмущение

Рассмотрим точечное тепловое возмущение, заданное в полубесконечной цепочке на незначительном удалении от границы (пусть $h_p = 10$). Характер распространения тепла, подчиняющийся закону (1.58), представлен на рисунке 1.3. До отражения ($t < h_p = 10$), тепловые волны бегут по обе стороны от точки нагрева, и решение для континуальной температуры симметрично относительно нее, как для бесконечной цепочки. Однако, после отражения две тепловые волны бегут в одну сторону (что показано двумя пунктирными линиями на рисунке 1.3). При этом, фронт несимметричен относительно точки нагрева (см. рисунок 1.3). Заметим, что перенос тепловой энергии не

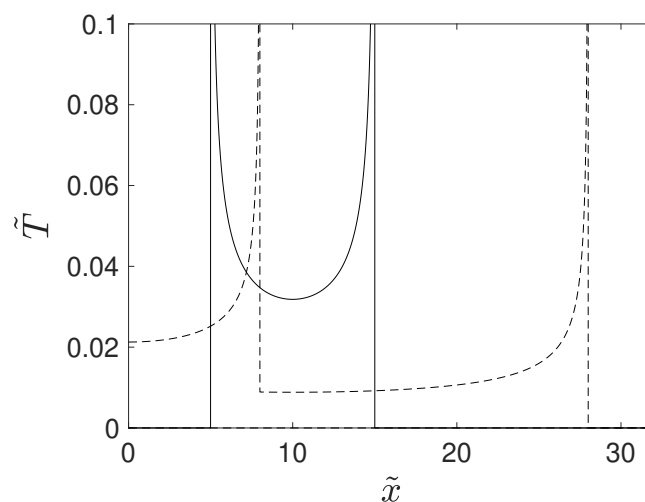


Рис. 1.3: Тепловые волны. $\tilde{t} = 5$ (сплошная линия), $\tilde{t} = 18$ (пунктирная линия).

соответствуют закону Фурье, что показано на рисунке 1.3 наличием зон поло-

⁵При моделировании используется цепочка $N = 500$ частиц.

⁶Случайные числа ρ_n равномерно распределены на отрезке $[-\sqrt{3}; \sqrt{3}]$.

жительного градиента температуры, которое интерпретируется следующим образом: «тепло идет от менее нагретого к более нагретому».

В настоящем параграфе точечное тепловое возмущение приводится в пример, чтобы показать характер распространения тепловой энергии, поэтому приводится только континуальное решение. В работе [26] показано, что континуальное и дискретное решения для бесконечной цепочки различаются. Причина этому является несоответствие задач: дискретное решение лучше рассматривать при мгновенном тепловом возмущении не одной частицы, а некоторого локализованного участка определенной ширины.

1.6.3 Пример. Прямоугольное тепловое возмущение, не касающееся границы

Рассмотрим прямоугольное тепловое возмущение, определяемое следующей функцией начальной температуры:

$$\tilde{T}^0(\tilde{x}) = H(\tilde{x} - \tilde{L}_1) - H(\tilde{x} - (\tilde{L}_1 + \tilde{L}_2)), \quad \tilde{L}_1 > 0, \tilde{L}_2 > 0. \quad (1.62)$$

где $\tilde{L}_1 a$ — расстояние от границы до возмущения, $\tilde{L}_2 a$ — ширина возмущения. При моделировании характера распространения тепла будем сравнивать с ситуацией в бесконечной цепочке при наличии двух симметричных относительно нуля источников, т.е:

$$\tilde{T}^0(\tilde{x}) = H(\tilde{x} - \tilde{L}_1) - H(\tilde{x} - (\tilde{L}_1 + \tilde{L}_2)) + H(\tilde{x} + (\tilde{L}_1 + \tilde{L}_2)) - H(\tilde{x} + \tilde{L}_1). \quad (1.63)$$

Дискретная и континуальная кинетические температуры, соответствующие рассматриваемому случаю до момента отражения ($\tilde{t} = 20$), представлены на рисунке 1.4. Пусть, например, $\tilde{L}_1 = 25$, $\tilde{L}_2 = 50$.

Как видно из графиков (рисунок 1.4), континуальное и дискретное решения, построенное на $\tilde{x} \in [0; 100]$ для полубесконечной цепочки согласуется

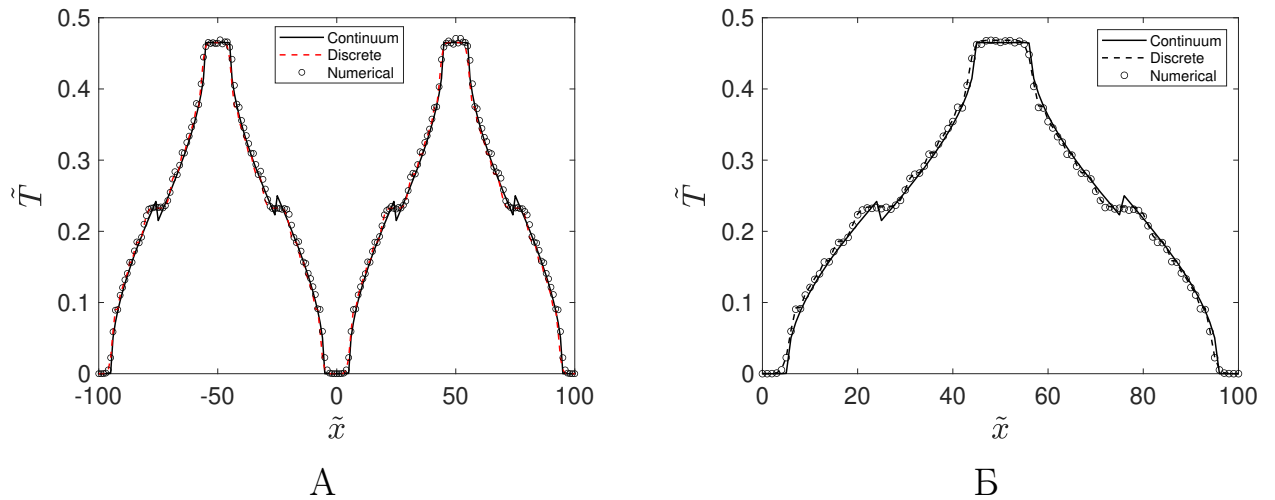


Рис. 1.4: Континуальное и дискретное решения для кинетической температуры для бесконечной цепочки (А) и полубесконечной цепочки со свободным концом (Б) при прямоугольном начальном возмущении (формула (1.63), для бесконечной цепочки; формула (1.62), для полубесконечной цепочки). $\tilde{t} = 20$.

с тем же решением для бесконечной цепочки. Кроме того, континуальное и дискретное решения почти согласуются между собой. Следовательно, характер распространения тепла в полубесконечной цепочке до предполагаемого отражения от границы можно описывать моделью бесконечной цепочки, притом, как в континуальной, так и в дискретной постановке. Для дискретного описания в таком случае годится решение Кляйна и Пригожина.

Рассмотрим теперь поведение температур после отражения $\tilde{t} = 100$ (рисунок 1.5). Как видно из графиков (рисунок 1.5), континуальное и дискретное решения для бесконечной цепочки согласуются. Континуальное решение для полубесконечной цепочки, построенное на $\tilde{x} \in [0; 100]$, согласуется с тем же для бесконечной цепочки. Однако, дискретные решения различаются. В самом деле, дискретная кинетическая температура для полубесконечной цепочки (см. рисунок 1.5Б) претерпевает скачок вблизи границы. Значения температур нулевой и первой частиц, найденные в дискретной постановке, существенно различаются от тех же в континуальной. Отсюда появляется вопрос, мгновенный ли это эффект или на протяжении некоторого временного масштаба. Чтобы на него ответить, исследуем поведение кинетической

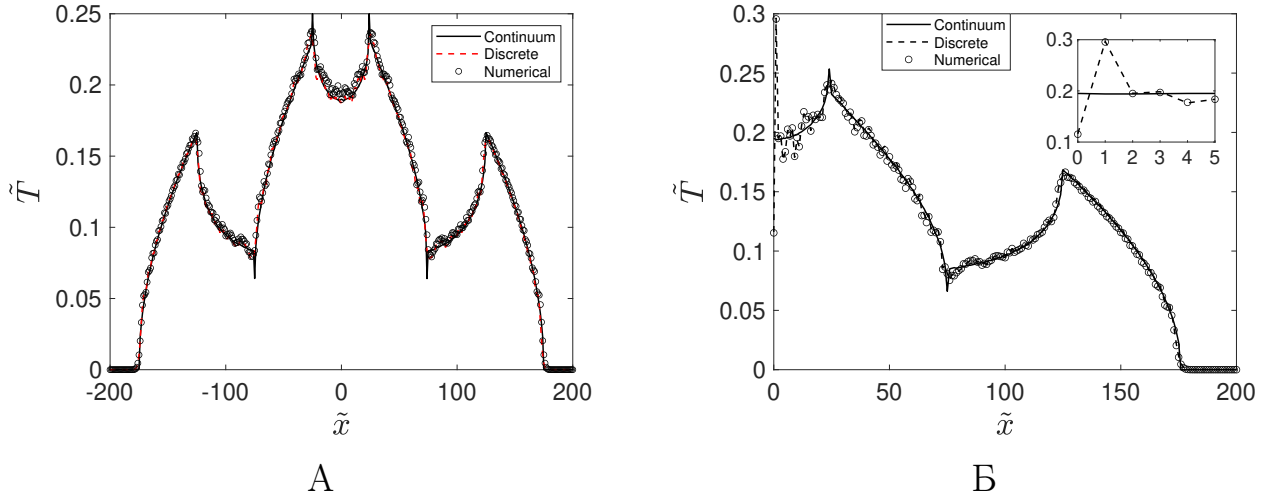


Рис. 1.5: Континуальное и дискретное решения для кинетической температуры для бесконечной цепочки (А) и полубесконечной цепочки со свободным концом (Б) при прямоугольном начальном возмущении (формула (1.63), для бесконечной цепочки; формула (1.62), для полубесконечной цепочки). $\tilde{t} = 100$.

температуры на границе в континуальной и дискретных постановках.

Вычислим $\tilde{T}(0, \tilde{t})$. Подставляя (1.62) в (1.57) и, вычисляя интеграл, получаем

$$\tilde{T}(0, \tilde{t}) = \frac{1}{\pi} \left(\arccos \left(\frac{\tilde{L}_1}{\tilde{t}} \right) H \left(\tilde{t} - \tilde{L}_1 \right) - \arccos \left(\frac{\tilde{L}_1 + \tilde{L}_2}{\tilde{t}} \right) H \left(\tilde{t} - (\tilde{L}_1 + \tilde{L}_2) \right) \right). \quad (1.64)$$

Формула (1.64) показывает, что изменение кинетической температуры на границе имеет три этапа. Первый этап происходит при движении тепловой волны к границе. Второй этап наступает в момент $\tilde{t} = \tilde{L}_1$. В это время происходит нагрев участка цепи, расположенного вблизи границы и ее самой. Такой этап описывается с помощью первого слагаемого в (1.64) и имеет продолжительность $\tilde{t} = \tilde{L}_2$. Третий этап — движение целого фронта, наступающий в момент $\tilde{t} = \tilde{L}_1 + \tilde{L}_2$. Температура на границе к этому этапу достигает максимального значения, равного $\frac{1}{\pi} \arccos \left(\frac{1}{1 + \frac{\tilde{L}_2}{\tilde{L}_1}} \right)$, после чего затухает. Для

функции $\tilde{T}(0, \tilde{t})$ на больших временах справедлив закон ее затухания:

$$\tilde{T}(0, \tilde{t}) = \frac{\tilde{L}_2}{\pi \tilde{t}} + O\left(\frac{1}{\tilde{t}^3}\right). \quad (1.65)$$

Рассмотрим теперь дискретную температуру на границе, \tilde{T}_0 . Ее можно вычислить, подставив (1.62), заменив⁷ $\tilde{T}^0(\tilde{x})$ на \tilde{T}_n^0 , в (1.56). Полученное выражение является громоздким для вычисления. Однако, легко можно показать, что функция $\tilde{T}_0 \tilde{t}$ затухает. Следовательно, асимптотические законы затухания у дискретного и континуального решения различны. Более подробное исследование асимптотики для \tilde{T}_0 заключается в использовании метода стационарной фазы [9], которое остается за рамками настоящей работы. Изменение континуальной и дискретной температур на границе представлено на рисунке 1.6 при $\tilde{L}_1 = 25$, $\tilde{L}_2 = 50$.

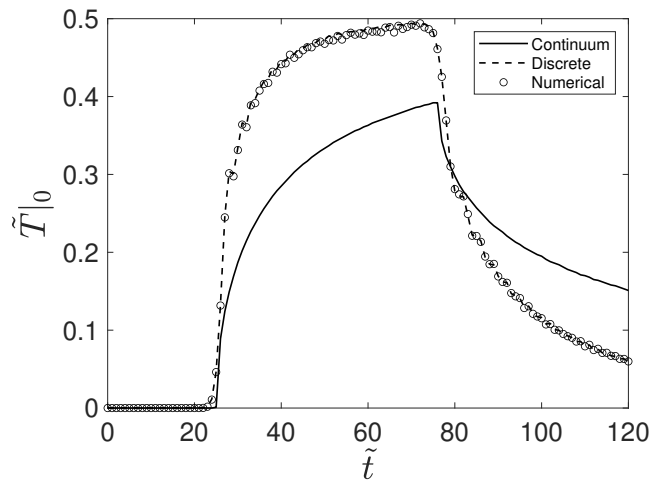


Рис. 1.6: Дискретная и континуальная температуры на границе.

Как показывают графики, для дискретной кинетической температуры этапы роста и затухания начинаются в те же самые моменты времени, как и для континуальной. Однако, значения для $\tilde{T}(0, \tilde{t})$ при $\tilde{L}_1 \leq \tilde{t} \leq \tilde{L}_1 + \tilde{L}_2$ меньше, чем \tilde{T}_0 . Но, при $\tilde{t} \rightarrow \infty$, $\tilde{T}(0, \tilde{t})$ больше, чем \tilde{T}_0 . Таким образом, континуальная и дискретная температуры на границе (и, вообще, вблизи границы)

⁷см. первое выражение в (1.18).

между собой различаются.

1.6.4 Пример. Прямоугольное тепловое возмущение, касающееся границы

Рассмотрим возмущение, определяемое следующей функцией начальной температуры:

$$\tilde{T}^0(\tilde{x}) = H(\tilde{L} - \tilde{x}), \quad \tilde{L} > 0, \quad (1.66)$$

где $\tilde{L}a$ — ширина возмущения. Дискретная и кинетическая температуры, соответствующие рассматриваемому случаю в моменты времени ($\tilde{t} = 20$, $\tilde{t} = 100$) при $\tilde{L} = 50$ представлены на рисунке 1.7. Графики (рисунок 1.7) показывают два процесса. Первый (при $\tilde{t} = 20$) процесс происходит до отражения фронта, сопровождающийся быстрыми движениями (это показывает дискретное решение). Второй (при $\tilde{t} = 100$) — при отражении фронта от границы. Из рисунка (1.7Б) видно, что, во-первых, есть некоторые различия дискретного и континуального решений на некотором участке фронта. Континуальная кинетическая температура получается как множество усредненных значений дискретной температуры. Несмотря на эти различия, распространение фронта подлежит континуальному описанию. Но не на участке вблизи границы, где наблюдается заметное отклонение дискретного решения от континуального в виде скачка.

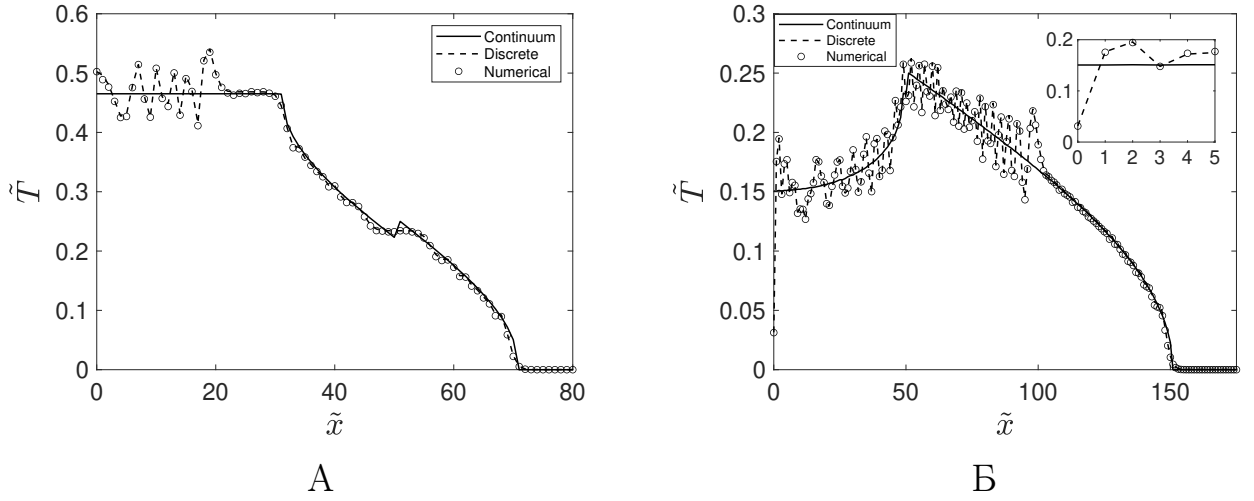


Рис. 1.7: Континуальное и дискретное решения для кинетической температуры для полубесконечной цепочки со свободным концом при прямоугольном начальном возмущении (формула (1.66)). А. $\tilde{t} = 20$. Б. $\tilde{t} = 100$.

Найдем изменение температуры в континуальном пределе на границе. Для этого подставим выражение (1.66) в (1.57) и вычислим получившийся интеграл:

$$\tilde{T}(0, \tilde{t}) = \frac{H(\tilde{L} - \tilde{t}) + J_0(4\tilde{t})}{2} + \frac{\arcsin\left(\frac{\tilde{L}}{\tilde{t}}\right)}{\pi} H(\tilde{t} - \tilde{L}). \quad (1.67)$$

Следовательно, изменение во времени кинетической температуры на границе происходит в два этапа. Первый связан с выравниванием кинетической и потенциальной энергий и имеет продолжительность, равную \tilde{L} . Решение, описывающее первый этап в континуальном приближении, совпадает с законом его затухания для бесконечной цепочки Гука [44]. Далее, в момент $\tilde{t} = \tilde{L}$ наступает второй этап, связанный с отражением целого фронта от границы. На больших временах справедлив следующий закон затухания континуального решения, который можно получить через асимптотики функции Бесселя и арксинуса:

$$\tilde{T}(0, \tilde{t}) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\tilde{t}}} \cos\left(4\tilde{t} - \frac{\pi}{4}\right) + \frac{\tilde{L}}{\pi\tilde{t}} + O\left(\frac{1}{\tilde{t}}\right). \quad (1.68)$$

Аналогично случаю, рассмотренному в параграфе 1.6.3, асимптотика дис-

кретного решения не совпадает с асимптотикой континуального. Изменение во времени дискретного и континуального решений представлено на рисунке (1.8) для ширины возмущения $\tilde{L} = 50$.

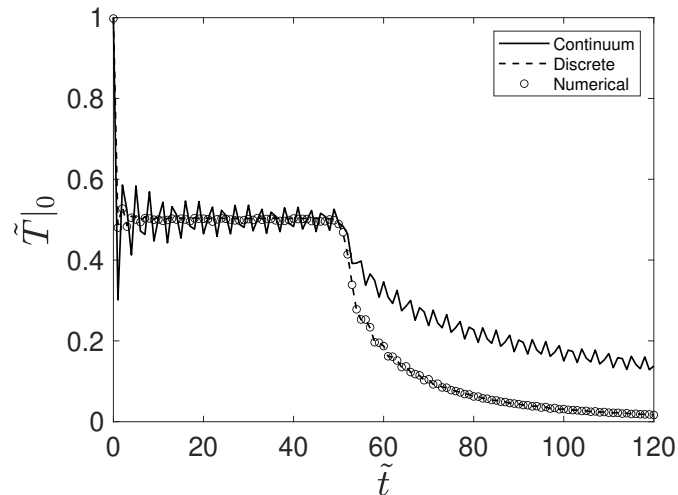


Рис. 1.8: Дискретная и континуальная температуры на границе.

Таким образом, начиная с момента $\tilde{t} = \tilde{L}$, дискретное решение для кинетической температуры на границе существенно отличается от континуального, что сопровождается наличием того самого скачка вблизи границы у температурного профиля. Предварительные расчеты показывают: функция как дискретной, так и континуальной температуры на границе масштабно инвариантна относительно изменения ширины возмущения.

1.7 Заключение к главе 1

Рассмотрен перенос тепловой энергии в одномерной полубесконечной цепочке Гука со свободным концом при мгновенном тепловом возмущении. Получены точное решение для кинетической температуры в дискретном виде, а также решение в континуальном приближении. Показано на примере локализованного на отрезке начального возмущения, что изменение температуры происходит в несколько этапов, последний из которых — отражение фронта тепловой волны от границы. Как оказалось, вдали от границы перенос опи-

сывается континуальной теорией, а вблизи границы — нет, из-за различия дискретной и континуальной кинетической температур. Это различие показано на рисунках 1.5 — 1.8.

Приведем причины возникновения расхождения дискретного и континуального решений. Прежде всего, рассмотрим процесс изменения температурного профиля в бесконечной цепочке, который, например, в начальный момент времени описывается выражением (1.63). После того, как две волны, движущиеся навстречу друг к другу от двух противоположных источников с одинаковой скоростью (скоростью звука), сталкиваются, образовывается стоячая тепловая волна. В течение времени, равного $\tilde{L}_2 a / v_s$ (поскольку возмущение прямоугольное, а не точечное, нет мгновенного отражения), нулевая частица нагревается возникшей стоячей волной. Связи, соединяющие эту частицу с соседями, деформированы, и соответствующее значение кинетической температуры в нуле меняется плавно.

Что касается полубесконечной цепочки при начальном возмущении, описываемом формулой (1.62), континуальное решение для кинетической температуры в момент после приближения тепловой волны к границе подчиняется тому же решению для бесконечной цепочки, о котором шла речь выше, согласно сформулированному принципу симметрии. В данной ситуации физически это бы означало, что тепловая волна, дошедшая до границы, сталкивается с откуда-то приходящей навстречу волной, что невозможно. Свободное граничное условие приводит к скачкообразному изменению дискретной температуры (см. рисунок 1.6). В момент отражения фронта от границы происходит резкое ее уменьшение, что, за счет отраженной волны влечет резкое увеличение температуры соседней частицы.

Принцип симметрии континуального решения обеспечивает решение для полубесконечной цепочки при одном источнике таким же в области $x \geq 0$, как и для бесконечной цепочки при двух источниках, расположенных симметрично относительно точки $x = 0$. Однако, при этом симметрии дискретного

решения нет. В самом деле, даже если начальные температуры в бесконечной цепочке заданы одинаково, как величины, пропорциональные математическому ожиданию их квадратов, то сами начальные скорости, в силу того, что они некоррелированные — различны. Отсутствие корреляции между скоростями приводит к нарушению симметрии дискретного решения. Предварительные численные расчеты показывают, что, если в бесконечной цепочке с обеих сторон задать равные начальные скорости симметрично относительно нуля, то решение для дискретной температуры в этом месте будет иметь скачок из-за нулевой деформации связи между соседями. Дискретное решение для кинетической температуры получается точно таким же, как и для полубесконечной цепочки в одной и той же области его определения. Строгое доказательство этого совпадения на основе соответствующих аналитических выкладок является предметом дальнейшего исследования.

Глава 2. Перенос энергии при внешнем ее подводе

2.1 Постановка задачи

В настоящей главе используется следующая модель деформируемого твердого тела: цепочка Гука, состоящая из одинаковых частиц массой m , соединенных линейными пружинками жесткостью c , имеющая два свободных конца и располагающаяся в слабовязкой среде. Рассматриваемая цепочка имеет конечное, постоянное во времени число частиц N . Предполагается, что с начального момента времени $t = 0$ частицам извне придается броуновское движение.

С учетом предположения и граничных условий, напишем уравнения Ланжевена [51] для каждой частицы в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 du_n &= v_n dt, \\
 dv_n &= (\omega_e^2(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - 2\eta v_n) dt + b_n dW_n, \quad n = 1, 2, \dots, N-2, \\
 dv_{N-1} &= (\omega_e^2(u_{N-2} - u_{N-1}) - 2\eta v_{N-1}) dt + b_{N-1} dW_{N-1}, \\
 dv_0 &= (\omega_e^2(u_1 - u_0) - 2\eta v_0) dt + b_0 dW_0, \\
 \omega_e &= \sqrt{c/m}, \quad \eta \ll \omega_e, \quad dW_n = \rho_n \sqrt{dt}, \quad \langle \rho_n \rangle = 0, \quad \langle \rho_m \rho_n \rangle = \delta_{mn},
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

где W_n — некоррелированные Винеровские процессы; ρ_n — некоррелированные случайные величины с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией; η — кинематическая вязкость среды; $b_n(t)$ — функция внешнего воздействия; u_n и v_n — перемещения и скорость частицы n соответственно.

В начальный момент времени частицы имеют нулевые перемещения и скорости:

$$u_n = 0, \quad v_n = 0. \tag{2.2}$$

Уравнения Ланжевена для одной степени свободы анализировались в [51], [36], [66], для цепочек и решеток — в [52], [55], [41], [24], [25], [27], [31], притом в [41], [31], [55], [52] использовалась модель цепочки с тепловыми резервуарами на ее концах. Как правило, перенос тепловой энергии рассмотрен в стационарном состоянии. В работе [24] рассмотрен подвод тепловой энергии в бесконечную цепочку Гука. Получены аналитические выражения для кинетической температуры в континуальном пределе при точечном источнике, как при наличии диссипации, так и без нее. Насколько известно, аналитическое выражение для температуры в дискретном виде в нестационарной постановке задачи еще не найдено.

2.2 Вывод формулы для дискретной кинетической температуры

Дискретную кинетическую температуру будем находить, используя ее определение (1.11), а перемещение частицы — в следующем виде, удовлетворяющим свободным граничным условиям:

$$u_n = \frac{2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \hat{u}_k \cos \frac{(2n+1)\pi k}{N}, \quad (2.3)$$

где \hat{u}_k — некоторая зависящая от времени функция (назовем \hat{u}_k — образ перемещения). Выражение (2.3) — обратное преобразование, применяемое к \hat{u}_k для нахождения u_n . Прямое преобразование для нахождения \hat{u}_k определяется как

$$\hat{u}_k = \sum_{n=0}^{N-1} u_n \cos \frac{(2n+1)\pi k}{N}, \quad (2.4)$$

доказательство чего приведено в 1 главе. Аналогично определяются преобразования соответственно для v_n и \hat{v}_k , так как $\hat{v}_k = \dot{\hat{u}}_k$. Подставляя (2.3)

относительно \hat{v}_k в (1.11), получаем:

$$\frac{k_B}{m} T_n = \frac{4}{N^2} \sum_{k_1, k_2=0}^{N-1} \langle \hat{v}_{k_1} \hat{v}_{k_2} \rangle \cos \frac{(2n+1)\pi k_1}{N} \cos \frac{(2n+1)\pi k_2}{N}, \quad (2.5)$$

Таким образом, для нахождения T_n надо знать математическое ожидание от произведения образов скоростей, то есть $\langle \hat{v}_{k_1} \hat{v}_{k_2} \rangle$. Применим дискретное преобразование (2.4) к уравнениям динамики (2.1) и начальным условиям (2.2). Тогда получим уравнения для образов \hat{u}_k и \hat{v}_k :

$$\begin{aligned} d\hat{u}_k &= \hat{v}_k dt, \\ d\hat{v}_k &= (-\omega_k^2 \hat{u}_k - 2\eta \hat{v}_k) dt + \sum_{n=0}^{N-1} b_n dW_n \cos \frac{(2n+1)\pi k}{N}, \\ \omega_k &= 2\omega_e \sin \frac{\pi k}{N}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

с начальными условиями

$$\hat{u}_k = 0, \quad \hat{v}_k = 0. \quad (2.7)$$

Итак, получены N независимых уравнений для \hat{u}_k и \hat{v}_k . Их можно интерпретировать как уравнения колебания k -ого осциллятора в вязкой среде с некоторой стохастической добавкой, описываемой вторым слагаемым во втором уравнении в (2.6). Из-за наличия этого слагаемого решение полученной системы сразу найти нельзя.

Перепишем уравнения (2.6) в векторно-матричной форме. Введем вектор $\hat{\mathbf{u}}_k$, такой, что

$$\hat{\mathbf{u}}_k = \begin{pmatrix} \hat{u}_k \\ \hat{v}_k \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Тогда уравнения (2.6) могут быть записаны как

$$\begin{aligned} d\hat{\mathbf{u}}_k &= \mathbf{A}_k \hat{\mathbf{u}}_k dt + \mathbf{B}_k^n d\mathbf{W}, \\ \mathbf{A}_k &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega_k^2 & -2\eta \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_k^n = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 \\ b_0 \cos \frac{\pi k}{N} & \dots & b_{N-1} \cos \frac{\pi k}{N} \end{pmatrix}, \\ d\mathbf{W} &= \begin{pmatrix} dW_0 \\ \dots \\ dW_{N-1} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

а начальные условия как

$$\hat{\mathbf{u}}_k = 0. \quad (2.10)$$

2.2.1 Решение уравнения (2.9)

В настоящем подпараграфе приводится аналитическое решение уравнения (2.9).

Сделаем следующую замену переменной в уравнении (2.9):

$$\mathbf{z} = e^{-\mathbf{A}_k t} \hat{\mathbf{u}}_k. \quad (2.11)$$

Тогда $d\mathbf{z}$ можно найти, используя лемму Ито [4]. Для s -ой компоненты вектора $d\mathbf{z}$ ее можно записать в следующем виде [66]:

$$dz_s = \left(\frac{\partial z_s}{\partial t} + \frac{\partial z_s}{\partial (\hat{\mathbf{u}}_k)_j} (\mathbf{A}_k \hat{\mathbf{u}}_k)_j + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 z_s}{\partial (\hat{\mathbf{u}}_k)_i \partial (\hat{\mathbf{u}}_k)_j} (B_k^n)_{i\alpha} (B_k^n)_{j\alpha} \right) dt + \frac{\partial z_s}{\partial (\hat{\mathbf{u}}_k)_i} (B_k^n)_{i\alpha} dW_\alpha, \quad (2.12)$$

где по повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Перепишем лемму Ито (2.12) в векторно-матричной форме:

$$d\mathbf{z} = \left(\frac{\partial \mathbf{z}}{\partial t} + (\nabla_{\hat{\mathbf{u}}_k} \mathbf{z}) (\mathbf{A}_k \hat{\mathbf{u}}_k) + \frac{1}{2} \text{tr} \left(\mathbf{B}_k^{n\top} (\nabla_{\hat{\mathbf{u}}_k} \nabla_{\hat{\mathbf{u}}_k}) \mathbf{B}_k^n \right) \mathbf{z} \right) dt + (\nabla_{\hat{\mathbf{u}}_k} \mathbf{z}) \mathbf{B}_k^n d\mathbf{W}, \quad (2.13)$$

где $\text{tr}(\dots)$ — след матрицы; \top — символ транспонирования матрицы; $\nabla_{\hat{\mathbf{u}}_k} = \frac{\partial}{\partial \hat{\mathbf{u}}_k}$. Подставляя (2.11) в (2.13), убеждаемся, что первое слагаемое, стоящее

при dt , равно нулю. Следовательно, имеем уравнение для \mathbf{z} :

$$d\mathbf{z} = e^{-\mathbf{A}_k t} \mathbf{B}_k^n d\mathbf{W}, \quad (2.14)$$

откуда, с учетом начальных условий:

$$\mathbf{z} = \int_0^t e^{-\mathbf{A}_k \tau} \mathbf{B}_k^n(\tau) d\mathbf{W}. \quad (2.15)$$

Делая обратную замену переменной, получаем уже искомое выражение для $\hat{\mathbf{u}}_k$:

$$\hat{\mathbf{u}}_k = \int_0^t e^{\mathbf{A}_k(t-\tau)} \mathbf{B}_k^n(\tau) d\mathbf{W}, \quad (2.16)$$

представляющее собой интеграл по Винеровским процессам.

2.2.2 Матрица дисперсий

В настоящем подпараграфе найденное выражение для $\hat{\mathbf{u}}_k$ используется для вычисления матрицы дисперсий.

Для начала найдем математическое ожидание $\langle \mathbf{u}_k \rangle$, которое потребуется в дальнейшем. В силу того, что $\langle \rho_n \rangle$ равно нулю, имеем

$$\langle \hat{\mathbf{u}}_k \rangle = \mathbf{0}. \quad (2.17)$$

Введем матрицу дисперсий \mathbf{D} , такую, что

$$\mathbf{D} = \left\langle \left(\hat{\mathbf{u}}_{k_1} - \langle \hat{\mathbf{u}}_{k_1} \rangle \right) \otimes \left(\hat{\mathbf{u}}_{k_2} - \langle \hat{\mathbf{u}}_{k_2} \rangle \right) \right\rangle, \quad (2.18)$$

где \otimes — символ диадного умножения векторов¹. Используя (2.8) и (2.17),

¹Пусть даны векторы $\mathbf{a} = [a_1 \dots a_M]^\top$ и $\mathbf{q} = [q_1 \dots q_M]^\top$. Тогда элемент матрицы $\mathbf{a} \otimes \mathbf{q}$ размером $M \times M$ равен $\{\mathbf{a} \otimes \mathbf{q}\}_{ij} = a_i q_j$.

запишем \mathbf{D} в следующем виде:

$$\mathbf{D} = \left\langle \hat{\mathbf{u}}_{k_1} \otimes \hat{\mathbf{u}}_{k_2} \right\rangle = \begin{pmatrix} \langle \hat{u}_{k_1} \hat{u}_{k_2} \rangle & \langle \hat{u}_{k_1} \hat{v}_{k_2} \rangle \\ \langle \hat{v}_{k_1} \hat{u}_{k_2} \rangle & \langle \hat{v}_{k_1} \hat{v}_{k_2} \rangle \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

Следовательно, \mathbf{D} — ковариационная матрица, элементы которой — попарные ковариации величин \hat{u}_k и \hat{v}_k . С другой стороны, можно вычислить $\left\langle \hat{\mathbf{u}}_{k_1} \otimes \hat{\mathbf{u}}_{k_2} \right\rangle$, используя найденное в п. 2.2.1 выражение для $\hat{\mathbf{u}}_k$:

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{\mathbf{u}}_{k_1} \otimes \hat{\mathbf{u}}_{k_2} \right\rangle &= \left\langle \int_0^t \int_0^t \left(e^{\mathbf{A}_{k_1}(t-\tau_1)} \mathbf{B}_{k_1}^{\cdot n}(\tau_1) d\mathbf{W}_1 \right) \otimes \left(e^{\mathbf{A}_{k_2}(t-\tau_2)} \mathbf{B}_{k_2}^{\cdot n}(\tau_2) d\mathbf{W}_2 \right) \right\rangle \\ &= \int_0^t \int_0^t e^{\mathbf{A}_{k_1}(t-\tau_1)} \left\langle \mathbf{B}_{k_1}^{\cdot n}(\tau_1) d\mathbf{W}_1 \otimes \left(\mathbf{B}_{k_2}^{\cdot n}(\tau_2) d\mathbf{W}_2 \right) \right\rangle e^{\mathbf{A}_{k_2}^\top(t-\tau_2)}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

где $d\mathbf{W}_i = [dW_{0,i} \dots dW_{N-1,i}]^\top$, $dW_{n,i} = \rho_n \sqrt{dt_i}$. Здесь использовано свойство транспонирования матричной экспоненты [34]:

$$(e^{\mathbf{A}})^\top = e^{\mathbf{A}^\top}. \quad (2.21)$$

Рассмотрим матрицу, заключенную внутри угловых скобок в формуле (2.20). Используя запись уравнения (2.9) и правило перемножения сумм, находим

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{k_1}^{\cdot n}(t_1) d\mathbf{W}_1 \otimes \left(\mathbf{B}_{k_2}^{\cdot n}(t_2) d\mathbf{W}_2 \right) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & dg_{n,m,k_1,k_2} \end{pmatrix}, \\ dg_{n,m,k_1,k_2} &= \sum_{n,m=0}^{N-1} b_n(t_1) b_m(t_2) \cos \frac{(2n+1)\pi k_1}{N} \cos \frac{(2m+1)\pi k_2}{N} dW_{n,1} dW_{m,2}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Вычислим математическое ожидание от dg_{n,m,k_1,k_2} . В силу некоррелирован-

ности случайных чисел ρ_n , имеем:

$$\begin{aligned} \langle dg_{n,m,k_1,k_2} \rangle &= \sum_{n,m=0}^{N-1} b_n(t_1)b_m(t_2) \cos \frac{(2n+1)\pi k_1}{N} \cos \frac{(2m+1)\pi k_2}{N} \langle dW_{n,1}dW_{m,2} \rangle \\ &= \sqrt{dt_1 dt_2} \sum_{n=0}^{N-1} b_n(t_1)b_n(t_2) \cos \frac{(2n+1)\pi k_1}{N} \cos \frac{(2n+1)\pi k_2}{N}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Таким образом, выражение для матрицы дисперсий можно написать в упрощенном виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \int_0^t \int_0^t e^{\mathbf{A}_{k_1}(t-\tau_1)} \mathbf{G}(\tau_1, \tau_2) e^{\mathbf{A}_{k_2}^\top(t-\tau_2)} \sqrt{d\tau_1 d\tau_2} = \int_0^t e^{\mathbf{A}_{k_1}(t-\tau)} \mathbf{G}(\tau) e^{\mathbf{A}_{k_2}^\top(t-\tau)} d\tau, \\ \mathbf{G}(t) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sum_{n=0}^{N-1} b_n^2(t) \cos \frac{(2n+1)\pi k_1}{N} \cos \frac{(2n+1)\pi k_2}{N} \end{pmatrix} = \mathbf{B}_{k_1}^{\cdot n} \mathbf{B}_{k_2}^{\cdot n \top}. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Отсюда искомая ковариация $\langle \hat{v}_{k_1} \hat{v}_{k_2} \rangle$ вычисляется как \mathbf{D}_{22} .

2.2.3 Точное выражение для дискретной кинетической температуры

Дальнейшее вычисление матрицы дисперсий становится делом техники. Возведение матрицы в степень экспоненты производится через решение задачи на ее собственные значения. Запишем окончательное выражение для $\langle \hat{v}_{k_1} \hat{v}_{k_2} \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \hat{v}_{k_1} \hat{v}_{k_2} \rangle &= \sum_{n=0}^{N-1} \int_0^t b_n^2(\tau) e^{-2\eta(t-\tau)} \prod_{i=1,2} \cos \frac{(2n+1)\pi k_i}{N} \varphi_{k_i}(t-\tau) d\tau, \\ \varphi_{k_i}(t) &= \cos \left(t \sqrt{\omega_{k_i}^2 - \eta^2} \right) - \frac{\eta \sin \left(t \sqrt{\omega_{k_i}^2 - \eta^2} \right)}{\sqrt{\omega_{k_i}^2 - \eta^2}}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Введем дискретную функцию подвода энергии $\chi_n(t)$, выражаемую че-

рез b_n^2 , такую, что

$$k_B \chi_n = \frac{m}{2} b_n^2, \quad \chi_n|_{t < 0} = 0. \quad (2.26)$$

Первое выражение в (2.26) — аналог соотношения (1.11) для связи функции подвода тепловой энергии и функции внешнего воздействия. Соотношение (2.26) используется в работах [24], [25] для того чтобы записать функцию кинетической температуры как зависимость от подвода χ . Второе выражение в (2.26) математически определяет финитность функции χ . Физически χ можно интерпретировать как скорость нагрева.

Подставляя (2.26) и (2.25) в (2.5), получаем:

$$T_n = \frac{8}{N^2} \sum_{j=0}^{N-1} \int_0^t \chi_j(\tau) e^{-2\eta(t-\tau)} \left(\sum_{k=0}^{N-1} \cos \frac{(2n+1)\pi k}{N} \cos \frac{(2j+1)\pi k}{N} \varphi_k(t-\tau) \right)^2 d\tau. \quad (2.27)$$

Выражение (2.27) — дискретная кинетическая температура для цепочки с двумя концами. Сделаем те же предположения, что и в главе 1 и перейдем к термодинамическому пределу, устремив число частиц N к бесконечности. Тогда дискретное волновое число, $\frac{2\pi k}{N}$, заменяется на непрерывно меняющееся на отрезке $[0; 2\pi]$ волновое число θ . Сумма по k превращается в интеграл по отрезку, симметричному относительно нуля. Получаем формулу для дискретной температуры для полубесконечной цепочки со свободным концом при произвольном источнике χ и для произвольной вязкости η :

$$\begin{aligned} T_n &= \frac{2}{\pi^2} \sum_{j=0}^{\infty} \int_0^t \chi_j(\tau) e^{-2\eta(t-\tau)} I_{n,j}(t-\tau, \eta) d\tau, \\ I_{n,j}(t, \eta) &= \left(\int_{-\pi}^{\pi} \cos \frac{(2n+1)\theta}{2} \cos \frac{(2j+1)\theta}{2} \varphi(\theta, t) d\theta \right)^2, \\ \varphi(\theta, t) &= \cos \left(t \sqrt{\omega(\theta)^2 - \eta^2} \right) - \frac{\eta \sin \left(t \sqrt{\omega(\theta)^2 - \eta^2} \right)}{\sqrt{\omega(\theta)^2 - \eta^2}}, \\ \omega(\theta) &= 2\omega_e \sin \frac{\theta}{2}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Таким образом, получено точное выражение для дискретной кинетической

температуры T_n . Формула (2.28) показывает, что каждая нагретая частица j вносит вклад в температуру частицы n , а сумма этих вкладов и есть конечное ее определение.

Формула (2.28) может быть использована для вычисления кинетической температуры для полубесконечной цепочки со свободным концом, находящейся в произвольной среде. По условию задачи, кристалл находится в слабовязкой среде. Тогда формулу (2.28) можно упростить, используя приближение:

$$\sqrt{\omega(\theta)^2 - \eta^2} \approx \omega(\theta), \quad \eta \ll \omega_e. \quad (2.29)$$

Следовательно, в таком случае

$$I_{n,j}(t, \eta) \approx \left(\int_{-\pi}^{\pi} \cos \frac{(2n+1)\theta}{2} \cos \frac{(2j+1)\theta}{2} \left(\cos(\omega(\theta)t) - \frac{\eta \sin(\omega(\theta)t)}{\omega(\theta)} \right) d\theta \right)^2. \quad (2.30)$$

При отсутствии диссипации ($\eta = 0$) формула для T_n принимает еще более простой вид:

$$T_n = \frac{2}{\pi^2} \sum_{j=0}^{\infty} \int_0^t \chi_j(\tau) \left(\int_{-\pi}^{\pi} \cos \frac{(2n+1)\theta}{2} \cos \frac{(2j+1)\theta}{2} \cos(\omega(\theta)(t-\tau)) d\theta \right)^2 d\tau. \quad (2.31)$$

Если взять функцию $\chi_j(t) = \frac{T_j^0}{2} \delta(t)$, соответствующей мгновенному подводу тепловой энергии, то формула (2.31) приобретает вид (1.14). То есть дискретная кинетическая температура в таком случае равна ей же при начальном тепловом возмущении, при котором частицам задают случайные скорости. Отсюда следует очевидный вывод: тепловой удар — это мгновенный подвод тепла.

Подвод тепловой энергии, как правило, не располагает наличием в кристалле быстрых процессов, связанных с выравниванием кинетической и потенциальной энергий, а связан только с ее переносом. Именно поэтому в соотношении (2.26), определяющей функцию подвода, стоит множитель, рав-

ный $\frac{1}{2}$.

Таким образом, вычисление дискретной кинетической температуры в случае подвода тепла производится в три шага:

1. Запись ее определения через образы перемещений и скоростей частиц.
2. Вычисление матрицы дисперсий (формула (2.24)).
3. Подстановка найденной ковариации образов в выражение из пункта 1.

Следовательно, в случае подвода тепла дискретная кинетическая температура вычисляется более трудоемко, чем то же в случае начального возмущения, что реализуется в два шага: вычисление скоростей частиц, и следом — математического ожидания их квадрата.

2.3 Кинетическая температура в континуальном пределе

В настоящем параграфе строится выражение для кинетической температуры в континуальном пределе как функции от пространственной координаты x . Введем континуальную функцию подвода $\chi(x, t)$, такую, что

$$\chi(an, t) \equiv \chi_n(t). \quad (2.32)$$

Континуальное выражение для кинетической температуры можно найти по тому же алгоритму, представленному в параграфе 1.4, однако здесь это технически весьма трудоемко. Будем использовать сформулированный в главе 1 принцип симметрии континуального решения.

В работе [24] представлено фундаментальное решение для задачи переноса тепловой энергии в бесконечной цепочке:

$$\mathcal{G}(x, t) = \frac{H(v_s t - |x|) e^{-2\eta t}}{\pi \sqrt{v_s^2 t^2 - x^2}}, \quad (2.33)$$

где v_s — скорость звука. Так как дискретная функция подвода тепловой энергии финитная (см. (2.26)), то континуальная — тоже. Таким образом, решение

для континуальной кинетической температуры для полубесконечной цепочки существует [2], и его можно записать в виде свертки фундаментального решения \mathcal{G} и функции подвода χ через принцип симметрии:

$$T(x, t) = \iint_{-\infty}^{\infty} \chi(|\xi|, \tau) \mathcal{G}(x - \xi, t - \tau) d\xi d\tau. \quad (2.34)$$

Решение (2.34) справедливо для произвольного источника χ . В следующем параграфе формулы (2.28), (2.30), (2.31), (2.34) применяются для вычисления дискретной и континуальной кинетических температур в случае постоянного точечного подвода тепловой энергии.

2.4 Пример. Постоянный точечный подвод тепловой энергии

Здесь и далее, рассматривается точечный подвод тепловой энергии в полубесконечную цепочку, производимый на незначительном удалении от границы (левого края).

2.4.1 Дискретная кинетическая температура

Дискретная функция подвода, соответствующая внезапному нагреву некоторой частицы h_p , имеет вид

$$\chi_n(t) = \chi^0 H(t) \delta_{n, h_p}, \quad (2.35)$$

где χ^0 — константа, имеющая размерность К/с. Подставляя (2.35) в (2.28) с учетом (2.30), получим:

$$T_n = \frac{2\chi^0}{\pi^2} \int_0^t e^{-2\eta\tau} \left(\int_{-\pi}^{\pi} \cos \frac{(2h_p + 1)\theta}{2} \cos \frac{(2n + 1)\theta}{2} \left(\cos(\omega(\theta)\tau) - \frac{\eta \sin(\omega(\theta)\tau)}{\omega(\theta)} \right) d\theta \right)^2 d\tau. \quad (2.36)$$

Применяя (2.35) к формуле (2.28), функцию Хевисайда можно снять, что не изменит пределы интегрирования по времени, и, следовательно, результат. Итак, получено точное выражение для дискретной кинетической температу-

ры при постоянном точечном подводе тепловой энергии. С течением времени в полубесконечной цепочке устанавливается стационарное температурное поле, выражение для которого в дискретном виде можно записать, устремляя t в (2.36) к бесконечности.

2.4.2 Континуальная кинетическая температура

Пусть функция подвода тепловой энергии задана как

$$\chi(x, t) = \bar{\chi}H(t)\delta(x - h_p a), \quad (2.37)$$

где $\bar{\chi}$ — константа, имеющая размерность м·К/с. Применяя (2.34), получаем:

$$\begin{aligned} T(x, t) &= \frac{\bar{\chi}}{\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{H(\tau)H(v_s(t - \tau) - |x - \xi|)e^{-2\eta(t-\tau)}}{\sqrt{v_s^2(t - \tau)^2 - (x - \xi)^2}} \delta(|\xi| - h_p a) d\xi d\tau \\ &= \frac{\bar{\chi}}{\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{H(\tau)H(v_s(t - \tau) - |x - \xi|)e^{-2\eta(t-\tau)}}{\sqrt{v_s^2(t - \tau)^2 - (x - \xi)^2}} \delta(\xi - h_p a) d\xi d\tau \\ &+ \frac{\bar{\chi}}{\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{H(\tau)H(v_s(t - \tau) - |x - \xi|)e^{-2\eta(t-\tau)}}{\sqrt{v_s^2(t - \tau)^2 - (x - \xi)^2}} \delta(\xi + h_p a) d\xi d\tau \\ &= \frac{\bar{\chi}H(v_s t - |x - h_p a|)}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{H(t - \tau)H\left(\tau - \frac{|x - h_p a|}{v_s}\right) e^{-2\eta\tau}}{\sqrt{v_s^2\tau^2 - (x - h_p a)^2}} d\tau \\ &+ \frac{\bar{\chi}H(v_s t - |x + h_p a|)}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{H(t - \tau)H\left(\tau - \frac{|x + h_p a|}{v_s}\right) e^{-2\eta\tau}}{\sqrt{v_s^2\tau^2 - (x + h_p a)^2}} d\tau \\ &= \frac{\bar{\chi}H(v_s t - |x - h_p a|)}{\pi} \int_{\frac{|x - h_p a|}{v_s}}^t \frac{e^{-2\eta\tau} d\tau}{\sqrt{v_s^2\tau^2 - (x - h_p a)^2}} \\ &+ \frac{\bar{\chi}H(v_s t - |x + h_p a|)}{\pi} \int_{\frac{|x + h_p a|}{v_s}}^t \frac{e^{-2\eta\tau} d\tau}{\sqrt{v_s^2\tau^2 - (x + h_p a)^2}}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Стационарное температурное поле можно определить, устремляя в формуле (2.38) t к бесконечности. В пределе $t \rightarrow \infty$, интегралы в (2.38) стремятся

к модифицированным функциям Бесселя второго рода нулевого порядка:

$$T(x) = \frac{\bar{\chi}}{\pi v_s} \left(K_0 \left(\frac{2\eta|x - h_p a|}{v_s} \right) + K_0 \left(\frac{2\eta|x + h_p a|}{v_s} \right) \right). \quad (2.39)$$

В случае отсутствия диссипации формулу (2.38) можно упростить, поставив туда $\eta = 0$:

$$\begin{aligned} T(x, t) &= \frac{\bar{\chi} H(v_s t - |x - h_p a|)}{\pi} \int_{\frac{|x-h_p a|}{v_s}}^t \frac{d\tau}{\sqrt{v_s^2 \tau^2 - (x - h_p a)^2}} \\ &+ \frac{\bar{\chi} H(v_s t - |x + h_p a|)}{\pi} \int_{\frac{|x+h_p a|}{v_s}}^t \frac{d\tau}{\sqrt{v_s^2 \tau^2 - (x + h_p a)^2}} \\ &= \frac{\bar{\chi} H(v_s t - |x - h_p a|)}{\pi v_s} \ln \frac{v_s t + \sqrt{v_s^2 t^2 - (x - h_p a)^2}}{|x - h_p a|} \\ &+ \frac{\bar{\chi} H(v_s t - |x + h_p a|)}{\pi v_s} \ln \frac{v_s t + \sqrt{v_s^2 t^2 - (x + h_p a)^2}}{|x + h_p a|}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Из формулы (2.40) видно, что в случае без диссипации кинетическая температура растет со временем по логарифмическому закону. Более того, этот рост сильнее, чем в бесконечной цепочке, физически возникающий из-за отраженной тепловой волны. Заметим, что выражения для континуальной температуры (2.38), (2.39) и (2.40) имеют сингулярность в точке $x = h_p a$. Стоит отметить, что в квадратной [25] и графеновой [27] решетках сингулярность возникает в точках на их главных диагоналях.

2.5 Анализ результатов

В настоящем параграфе производится анализ дискретной кинетической температуры для полубесконечной цепочки со свободным концом при подводе тепловой энергии. Рассматривается постоянный подвод тепла в частицу на незначительном удалении от границы.

2.5.1 Обезразмеривание величин

Для того чтобы анализировать полученные выражения, обезразмерим их.

Введем безразмерные переменные $\tilde{x}, \tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{t}, \tilde{T}, \tilde{b}, \tilde{\eta}$, такие, что:

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= x/a, & \tilde{u} &= u/a, \\ \tilde{v} &= v/v_s, & \tilde{t} &= \omega_e t, \\ \tilde{b} &= b/(v_s \sqrt{\omega_e}), & \tilde{\eta} &= \eta/\omega_e, & \tilde{T} &= Tk_B/(mv_s^2). \end{aligned} \quad (2.41)$$

В точках расположения частиц $\tilde{x} \equiv n$. Уравнения динамики (2.1), с учетом того, что источник подвода — точечный, можно записать в виде

$$\begin{aligned} d\tilde{u}_n &= \tilde{v}_n d\tilde{t}, \\ d\tilde{v}_n &= (\tilde{u}_{n+1} - 2\tilde{u}_n + \tilde{u}_{n-1} - 2\tilde{\eta}\tilde{v}_n) d\tilde{t} + \tilde{b}\delta_{n,h_p}\rho_n \sqrt{d\tilde{t}}, \quad n = 1, 2, \dots, N-2, \\ d\tilde{v}_{N-1} &= (\tilde{u}_{N-2} - \tilde{u}_{N-1} - 2\tilde{\eta}\tilde{v}_{N-1}) d\tilde{t}, \\ d\tilde{v}_0 &= (\tilde{u}_1 - \tilde{u}_0 - 2\tilde{\eta}\tilde{v}_0) d\tilde{t}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Выражения (2.36), (2.38), (2.39) и (2.40) соответственно можно переписать как

$$\tilde{T}_n = \frac{\tilde{b}^2}{\pi^2} \int_0^{\tilde{t}} e^{-2\tilde{\eta}\tilde{\tau}} \left(\int_{-\pi}^{\pi} \cos \frac{(2h_p+1)\theta}{2} \cos \frac{(2n+1)\theta}{2} \left(\cos \left(2\tilde{\tau} \sin \frac{\theta}{2} \right) - \frac{\tilde{\eta} \sin \left(2\tilde{\tau} \sin \frac{\theta}{2} \right)}{2 \sin \frac{\theta}{2}} \right) d\theta \right)^2 d\tilde{\tau}, \quad (2.43)$$

$$\begin{aligned} \tilde{T}(\tilde{x}, \tilde{t}) &= \frac{\tilde{b}^2 H(\tilde{t} - |\tilde{x} - h_p|)}{2\pi} \int_{|\tilde{x}-h_p|}^{\tilde{t}} \frac{e^{-2\tilde{\eta}\tilde{\tau}} d\tilde{\tau}}{\sqrt{\tilde{\tau}^2 - (\tilde{x} - h_p)^2}} \\ &+ \frac{\tilde{b}^2 H(\tilde{t} - |\tilde{x} + h_p|)}{2\pi} \int_{|\tilde{x}+h_p|}^{\tilde{t}} \frac{e^{-2\tilde{\eta}\tilde{\tau}} d\tilde{\tau}}{\sqrt{\tilde{\tau}^2 - (\tilde{x} + h_p)^2}}, \end{aligned} \quad (2.44)$$

$$\tilde{T}(\tilde{x}) = \frac{\tilde{b}^2}{2\pi} \left(K_0(2\tilde{\eta}|\tilde{x} - h_p|) + K_0(2\tilde{\eta}|\tilde{x} + h_p|) \right), \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} \tilde{T}(\tilde{x}, \tilde{t}) = & \frac{\tilde{b}^2 H(\tilde{t} - |\tilde{x} - h_p|)}{2\pi} \ln \frac{\tilde{t} + \sqrt{\tilde{t}^2 - (\tilde{x} - h_p)^2}}{|\tilde{x} - h_p|} \\ & + \frac{\tilde{b}^2 H(\tilde{t} - |\tilde{x} + h_p|)}{2\pi} \ln \frac{\tilde{t} + \sqrt{\tilde{t}^2 - (\tilde{x} + h_p)^2}}{|\tilde{x} + h_p|}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

При обозначении дискретной кинетической температуры указывается нижний индекс принадлежности ее к частице, а континуальная кинетическая температура обозначается как функция, зависящая от координаты.

Интегрирование в формулах (2.43), (2.44) производится методом прямоугольников при разбиении области волновых чисел на 10^3 равных отрезков и шаге по времени $\Delta\tilde{t} = 0.02$. Для проверки проводится вычисление кинетической температуры для частицы как среднее по реализациям квадрата ее скорости:

$$\tilde{T}_n = \frac{1}{R} \sum_{i=1}^R \tilde{v}_{n,i}^2, \quad (2.47)$$

где $R = 5 \cdot 10^4$ — число реализаций. Для нахождения скоростей частиц производится численное интегрирование уравнений динамики (2.42) симплектическим методом Кэнди и Розмуса четвертого порядка точности [16] с использованием оптимизирующих параметров, предложенных в [58] и шага по времени $\Delta\tilde{t} = 0.01$. При этом на каждом шаге по времени при интегрировании уравнения движения для частицы $n = h_p$ генерируется случайное число ρ_{h_p} , равномерно распределенное на отрезке $[-\sqrt{3}; \sqrt{3}]$. При моделировании используются цепочка $N = 100$ частиц, а также параметры $\tilde{b} = 1$, $h_p = 10$.

Стоит отметить, что реализация численного решения задачи на ЭВМ трудозатратна даже при моделировании точечного подвода тепла, а для подвода во множество точек — еще трудозатратнее. Поэтому для расчета эффективнее использовать суперкомпьютерные мощности.

2.5.2 Случай отсутствия диссипации

В настоящем подпараграфе рассматривается случай, когда кристалл находится в бездиссипативной среде. Соответствующие результаты в различные моменты времени представлены на рисунке 2.1.

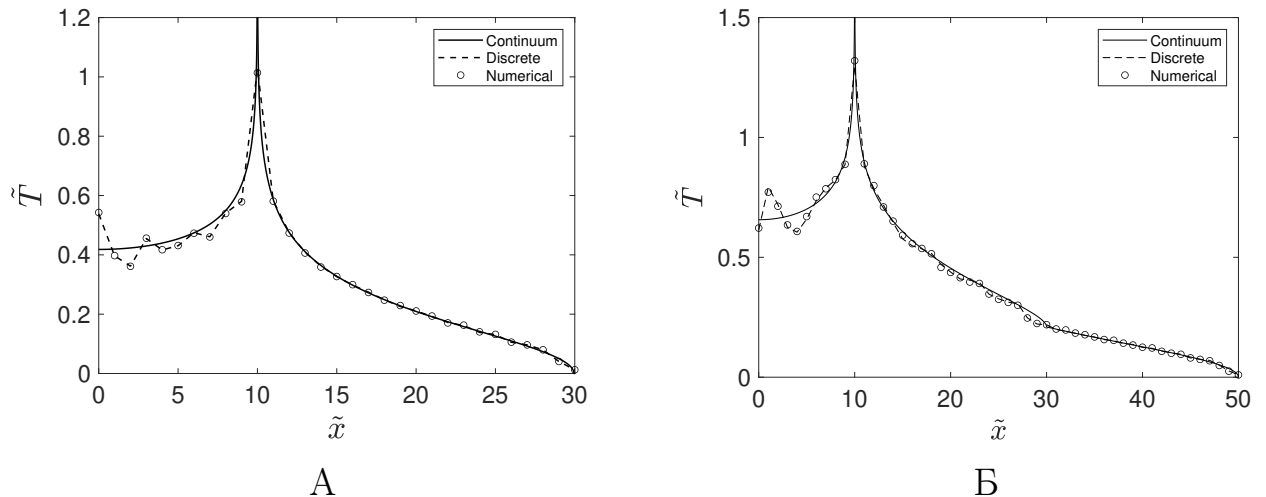


Рис. 2.1: Континуальное и дискретное решения для кинетической температуры для полубесконечной цепочки при точечном подводе тепла в моменты времени $\tilde{t} = 20$ (А), $\tilde{t} = 40$ (Б).

Из графиков (рисунок 2.1) видно, что, прежде всего, и континуальное, и дискретное решение растут со временем. В точке нагрева дискретное решение для кинетической температуры, \tilde{T}_n , в отличие от континуального, имеет конечное значение. При $\tilde{t} = 20$ оно примерно равно $\tilde{T}|_{n=10} \approx 1.02$, а при $\tilde{t} = 40$ $\tilde{T}|_{n=10} \approx 1.28$. Такие значения свидетельствуют о том, что и дискретное решение в полубесконечной цепочке растет быстрее чем в бесконечной.² Однако, графики показывают, что, хотя дискретное и континуальное решения вдали от границы почти совпадают, вблизи же границы они расходятся. Характер поведения кинетической температуры на границе представлен на рисунке 2.2.

²Для сравнения приведен результат из [24], для бесконечной цепочки значение для \tilde{T}_n в точке нагрева меньше 0.8 при $\tilde{t} = 70$.

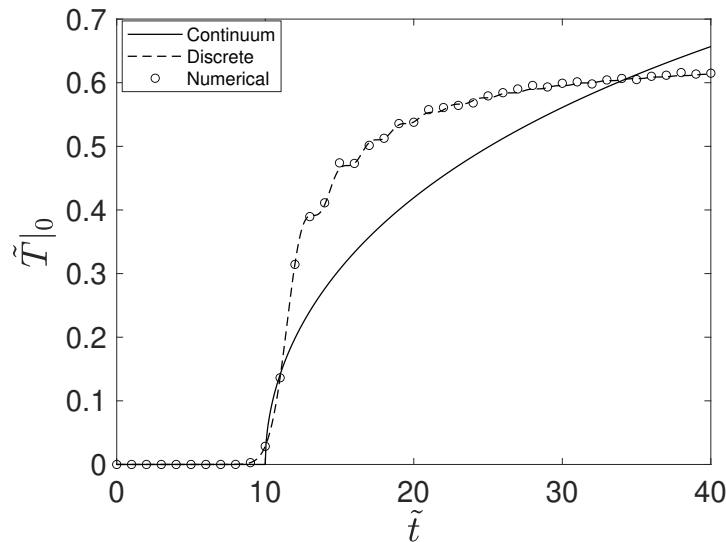


Рис. 2.2: Дискретная и континуальная кинетические температуры на границе.

Поведение кинетической температуры на границе можно разделить на два этапа. Первый соответствует движению тепловой волны от точки нагрева до границы (при этом значение $\tilde{T}|_0$, естественно, равно нулю). Второй происходит при отражении и после него — дискретная кинетическая температура на границе резко увеличивается (растет «быстрее логарифма»), однако после рост ее становится «медленнее логарифма». С момента времени $\tilde{t} = 34$ континуальное решение превосходит дискретное. Поскольку последнее растет много медленнее, чем континуальное, при $\tilde{t} \gg 34$ соответствующие значения будут уже значительно различаться.

2.5.3 Влияние диссипации. Стационарное решение

В настоящем подпараграфе рассматривается случай, когда кристалл находится в среде с вязкостью $\tilde{\eta} = 0.05$. Рассмотрим, как диссипация влияет на поведение температурного поля. Для этого вычислим дискретное и континуальное решение для кинетической температуры на границе, а также дискретное решение в точке нагрева (континуальное решение сингулярно (см. формулу (2.44))). Результаты представлены на рисунке 2.3.

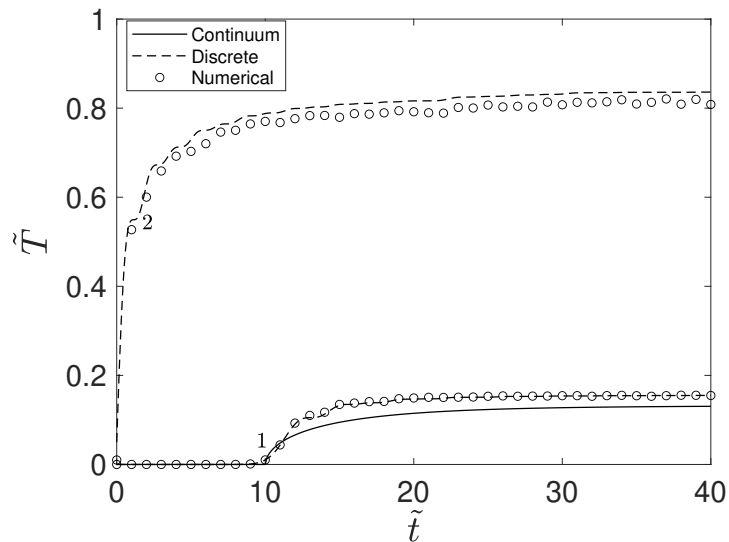


Рис. 2.3: Дискретная и континуальная кинетические температуры на границе (1). Дискретная температура в точке нагрева (2).

Из рисунка 2.3 видно, что профиль температуры в полубесконечной цепочке со временем стремится к стационарному полю, которое далее остается неизменным. В самом деле, начиная с $\tilde{t} = 30$ тепловое состояние рассматриваемого кристалла уже можно считать стационарным. Стационарное распределение дискретной (при $\tilde{t} = 40$) и континуальной кинетических температур представлено на рисунке 2.4. Итак, вблизи границы стационарное поле дис-

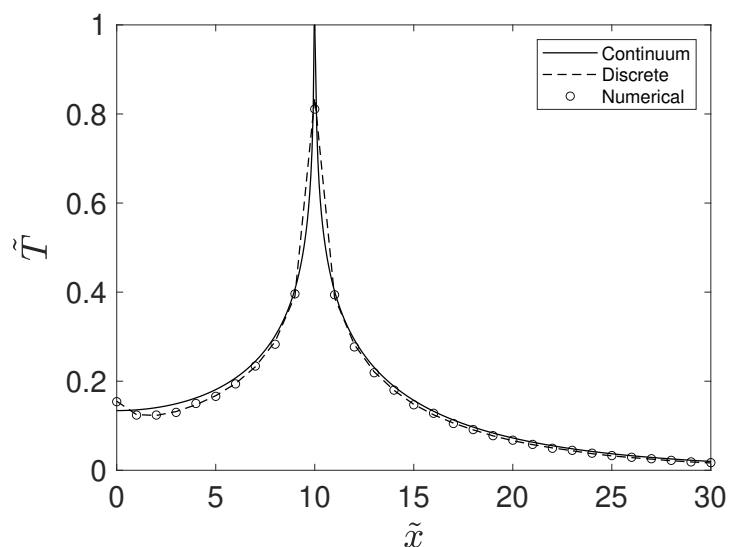


Рис. 2.4: Стационарное поле температуры.

кретной температуры все же отклоняется от континуального, хотя различия

существенно меньше, чем в случае отсутствия диссипации. Предварительные расчеты показывают: отклонение дискретного и континуального решений на границе и вблизи границы зависит, вообще говоря, от расположения источника.

Поля дискретной и континуальной температур вдали от границы почти совпадают. Таким образом, для дальнего поля стационарного решения справедлива следующая асимптотическая формула [11]:

$$\tilde{T} = \frac{e^{-2\tilde{\eta}\tilde{x}}}{4\sqrt{\pi}} \left(\frac{e^{2h_p\tilde{\eta}}}{\sqrt{\tilde{\eta}(\tilde{x} - h_p)}} + \frac{e^{-2h_p\tilde{\eta}}}{\sqrt{\tilde{\eta}(\tilde{x} + h_p)}} \right) \left(1 + O\left(\frac{1}{\tilde{x}}\right) \right). \quad (2.48)$$

Итак, получены стационарные значения для кинетических температур на границе и в точке нагрева:

$$\begin{aligned} \tilde{T}(0) &= \frac{K_0(1)}{\pi} \approx 0.134, & \tilde{T}_{10}^{\text{true}} &\approx 0.843, \\ \tilde{T}_0 &\approx 0.160, & \tilde{T}_{10}^{\text{num}} &\approx 0.813, \end{aligned} \quad (2.49)$$

где $\tilde{T}_{10}^{\text{true}}$ и $\tilde{T}_{10}^{\text{num}}$ — аналитическое и численные значения для дискретной кинетической температуры в точке нагрева $h_p = 10$. Как видно из значений (2.49) а также из графиков (рисунки 2.3 и 2.4), они несколько различаются. Оценим погрешность численного значения:

$$\Delta\tilde{T} = \frac{|\tilde{T}_{10}^{\text{num}} - \tilde{T}_{10}^{\text{true}}|}{\tilde{T}_{10}^{\text{true}}} 100 \approx 3.6\%. \quad (2.50)$$

Найденная погрешность показывает, что различие аналитического и численного решения для кинетической температуры несущественно по сравнению с различием дискретного и континуального решений вблизи границы.

2.6 Заключение к главе 2

Рассмотрен перенос тепловой энергии в полубесконечной цепочке Гука при наличии внешнего ее подвода. Получено точное решение для кинетической температуры в дискретном виде. Через принцип симметрии получено решение в континуальном приближении. На примере рассмотрения внезапного нагрева частицы на незначительном удалении от свободного края (границы) показано изменение со временем кинетических температур, а также построен профиль стационарного их распределения. Дискретное и континуальное решения различаются не только вблизи границы и на границе, но и в точке нагрева, что показано, в частности, на рисунках 2.2, 2.3 и 2.4. Дискретное решение в точке нагрева — конечное, а континуальное — сингулярное.

Приведем причины возникновения расхождения дискретного и континуального решений на границе. Как уже ранее отмечалось, наличие одинаковых симметричных относительно нуля источников в бесконечной цепочке обеспечивает такое же континуальное решение, что и в полубесконечной. Но то же про дискретное решение можно сказать только в том случае, если одинаковы и шумы (для мгновенного теплового возмущения — начальные скорости).

Если две тепловые волны в бесконечной цепочке без диссипации движутся навстречу друг к другу от двух противоположных источников, после столкновения мгновенно образовывается стоячая тепловая волна, являющаяся причиной нагрева нулевой частицы. Согласно дискретному решению, в полубесконечной цепочке свободное граничное условие является причиной резкого изменения кинетической температуры на границе. Но после рост ее замедляется, так как нет стоячей волны, которая была бы в бесконечной цепочке.

В свою очередь, если есть теплообмен со средой, после начала возмущения дискретное и континуальное решения для кинетической температуры быстро приближаются к стационарным значениям.

Заключение

Сформулируем **результаты, выносимые на защиту**:

1. Предложены аналитические описания нестационарного переноса тепловой энергии в полубесконечной цепочке Гука. Найдено как точное решение в дискретном виде, так и приближенное в континуальном (функция от пространственной координаты); как для начального мгновенного теплового возмущения, так и для постоянного внешнего подвода энергии.

2. Показано, что поля кинетической температуры вдали от границы могут быть описаны как дискретной теорией, так и континуальной. Поле вблизи границы континуальная теория описывает с погрешностью. Поведение дискретного решения на границе отличается от континуального.

3. Сформулирован принцип симметрии континуального решения, позволяющий получить континуальное поле кинетической температуры в полубесконечной цепочке, зная поле в бесконечной.

Все вышеуказанные результаты составляют научную новизну исследования.

Отметим, что задачи, рассмотренные в настоящей работе, решены в рамках подхода через динамику решетки. Исследование в рамках кинетической теории не проводилось. В работе [50] приведен строгий вывод выражения для кинетической температуры не только через уравнения динамики, но и через решение уравнения Больцмана без интеграла столкновений. Выяснилось, что тепловая энергия, согласно континуальной теории, переносится волновыми пакетами. Согласно кинетической теории — квазичастицами. Полученное совпадение позволило интерпретировать волновые пакеты как квазичастицы. В настоящей работе показано, что распространение тепловой энергии в полубесконечной цепочке вдали от границы происходит также ее переносом волновыми пакетами. Согласно принципу симметрии континуального реше-

ния, пакеты и в полубесконечной цепочке можно интерпретировать как квазичастицы. Однако, из расхождения дискретного и континуального решений может следовать вывод, что тепловая энергия вблизи границы — это уже не волновой пакет, и не квазичастица. Детальное исследование переноса тепловой энергии в полубесконечной цепочке с позиции кинетической теории является предметом дальнейшего исследования.

В качестве продолжения исследования можно также рассмотреть построение улучшенного континуального решения через сшивку дискретного поля вблизи границы с континуальным на удалении от нее. Возможно, ключ к решению этой задачи лежит через метод самосогласованного поля [6]. Сшитое континуальное решение с учетом «дискретностей» уже может быть в дальнейшем использовано как определяющее соотношение.

Модель составной цепочки с двумя разными свойствами можно рассматривать как две отдельные взаимодействующие полубесконечные цепочки. Аналитическое описание тепловой энергии в этой динамической системе также является актуальной задачей. В работе [57] с помощью численного моделирования показано, что на интерфейсе двух цепочек с различными массами возникает скачок температуры, что согласуется с экспериментом Капицы [5] и теорией Халатникова [10].

Автор выражает благодарность за полезные и мотивирующие обсуждения В.А. Кузькину, А.М. Кривцову, С.Н. Гаврилову, А.С. Мурачеву и Е.Ф. Грековой.

Послесловие

Earlier I could not solve problems because of lack of skills. Today that is because of lack of theories...

© Sergei Liashkov

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- [1] Анго Андре. Математика для электро- и радиоинженеров. 772 с. М.:Наука (1964)
- [2] Владимиров, В.С. Уравнения математической физики. 256 с. М.:Наука (1981)
- [3] Гудименко, А.И. Тепловой поток в одномерной полубесконечной гармонической решетке с поглощающей границей. Дальневосточный математический журнал. Т.20, No.1 (2020)
- [4] Диментберг, М.Ф. Нелинейные стохастические задачи механических колебаний. 368 с. М.:Наука (1980)
- [5] Капица, П.Л. ЖЭТФ 11, 1 (1941)
- [6] Канаун, С.К., Левин, В.М. Метод эффективного поля в механике композитных материалов. 598 с. Петрозаводск: ПУ, (1993)
- [7] Ландау, Л.Д., Лифшиц, Е.М. Статистическая физика. Часть 1. Издание 4-е. 586 с. М.:Наука (1995)
- [8] Мандельштам, Л.И. Полное собрание трудов IV. Издательство Академии наук СССР. 512 с. (1955)
- [9] Федорюк, М.В. Метод перевала. 368 с. М.:Наука (1977)
- [10] Халатников, И.М. Гидродинамика гелия II. Успехи физических наук (1956)
- [11] Abramowitz , M. and Stegun, I. Handbook of Mathematical Functions: with Formulas, Graphs and Mathematical Tables (Dover, New York, 1972)

- [12] Anufriev, R., Gluchko, S., Volz, S., Nomura, M. Quasi-ballistic heat conduction due to levy phonon ights in silicon nanowires. ACS Nano, Vol. 12(12), pp.1192811935 (2018)
- [13] Aristov, V.V., Zabelok, S.A., Frolova, A.A. Nonequilibrium transport processes in problems on the nonuniform relaxation. Matem. Mod., 21, 12, 59–75 (2009)
- [14] Aristov, V.V., Frolova, A.A., Zabelok, S. A. Nonequilibrium kinetic processes with chemical reactions and complex structures in open systems. Europhys. Lett. 106, 20002 (2014)
- [15] Babenkov, M.B., Krivtsov, A.M., Tsvetkov, D.V. Heat propagation in the one-dimensional harmonic crystal on an elastic foundation. Phys. Mesomech. (2019)
- [16] Candy, J and Rozmus, W. A symplectic integration algorithm for separable Hamiltonian functions, J. Comput. Phys. 92, 230 (1991)
- [17] Chang, C.W., Okawa, D., Garcia, H., Majumdar,A., Zettl, A. Breakdown of Fourier’s law in nanotube thermal conductors . Physical Review Letters, Vol.101, p. 075903 (2008)
- [18] Dhar A. Heat transport in low-dimensional systems , Advances in Physics,pp. 457-537 (2008)
- [19] Dhar, A., Kundu, A., Kundu, A. Anomalous heat transport in one-dimensional systems: a description using non-loca fractional-type diffusion equation. Fronters in Physics, 159 Vol.7 (2019)
- [20] Dudnikova, T.V., Komech, A.I., Spohn, H. On the convergence to statistical equilibrium for harmonic crystals. Journal of Mathematical Physics, Vol. 44, p. 2596 (2003)

- [21] Dwivedi, N., Ott, A.K., Sasikumar K., Dou, C., Yeo, R.J., Narayanan, B., et c. Graphene Overcoats for Ultra-High Storage Density Magnetic Media (2019)
- [22] Eichele, R. Huebener, R.H. and Seifert, H. Phonon Focusing in Quartz and Sapphire Imaged by Electron Beam Scanning. *Z. Phys. B Condensed Matter* 48, 89-97 (1982)
- [23] Erik P. DeBenedictis. Will Moore's Law be Sufficient? *IEEE* (2004)
- [24] Gavrilov, S.N., Krivtsov, A.M., Tsvetkov D.V. Heat transfer in a one-dimensional harmonic crystal in a viscous environment subjected to an external heat supply. *Continuum Mech. Thermodyn.* 31, 255–272 (2018)
- [25] Gavrilov, S.N., Krivtsov, A.M.. 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* (2019)
- [26] Gavrilov, S.N. Heat conduction in 1D harmonic crystal: discrete-to-continuum limit and slow-and-fast motions decoupling (2020) (pre-print)
- [27] Gavrilov, S.N., Krivtsov, A.M.. Steady-state ballistic thermal transport in a damped graphene lattice subjected to a point heat source (to be submitted)
- [28] Gelfand, I., Shilov, G.: *Generalized Functions. Properties and Operations*, vol. 1. Academic Press, New York (1964)
- [29] Gendelman, O.V., Savin, A.V. Nonstationary heat conduction in one-dimensional chains with conserved momentum. *Physical Review E*, Vol. 81, p. 020103, (2010)
- [30] Gendelman, O.V., Shvartsman, R., Madar, B., Savin, A.V. Nonstationary heat conduction in one-dimensional models with substrate potential. *Physical Review E*, Vol. 85(1), p. 011105, (2012)

- [31] Gendelman, O.V. Jithu Paul. Kapitza thermal resistance in linear and nonlinear chain models: Isotopic defect. *Phys. Rev E* 103, 052113 (2021)
- [32] Giovanni Dematteis, Lamberto Rondoni, Davide Proment, Francesco De Vita, and Miguel Onorato. Coexistence of ballistic and Fourier regimes in the β -FPUT lattice. *Phys. Rev. Lett.* 125, 024101 (2020)
- [33] Guzev, M.A. The exact formula for the temperature of a one-dimensional crystal. *Dal'nevost. Mat. Zh.*, 18, 39 (2018)
- [34] Hall, Brian C. *Lie Groups, Lie Algebras, and Representations*. Springer (2015)
- [35] Hauser, M.R., Weaver, R.L., and Wolfe, J.P. Internal diffraction of ultrasound in crystals: phonon focusing at long wavelengths, *Phys. Rev. Lett.* 68, 2604 (1992)
- [36] Hemmer, P.C. *Dynamic and stochastic types of motion in the linear chain*. Norges tekniskehoiskole (1959)
- [37] Hoss, C , Wolfe J. P., and H. Kinder, Total internal reflection of high-frequency phonons: a test of specular refraction, *Phys. Rev. Lett.* 64,1134 (1990)
- [38] Huberman, S., Duncan, R.A., Chen, K., Song, B., Chiloyan, V., Ding, Z., Maznev, A.A., Chen, G., Nelson, K.A. Observation of second sound in graphite at temperatures above 100 K. *Science*, Vol. 364(6438), pp. 375 - 379, (2019)
- [39] Hurley D. C., Ramsbey M. T., and Wolfe J. P., Phonon focusing near a conic point. *Phonon Scattering in Condensed Matter V* (1986)
- [40] Johnson, J.A., Maznev, A.A., Cuffe, J., Eliason, J.K., Minnich, A.J., Kehoe, T., Sotomayor Torres C.M., Chen, G., Nelson K.A. Direct measurement of

- roomtemperature nondiffusive thermal transport over micron distances in a silicon membrane. *Physical Review Letters*, Vol. 110, p. 025901, (2013)
- [41] Kim, Sangrak. Temperature Profile and Equipartition Law in a Langevin Harmonic Chain. *Journal of the Korean Physical Society*, Vol. 71, No. 5, pp.264-268 (2017)
- [42] Klein, G., Prigogine, I. Sur la mecanique statistique des phenomenes irreversibles III. *Physica*, Vol. 19, 1053, (1953)
- [43] Koos, G.L., Wolfe, J.P. Phonon focusing in piezoelectric crystals: Quartz and lithium niobate. *Phys.Rev B*, (1984)
- [44] Krivtsov, A.M. Energy Oscillations in a One-Dimensional Crystal. *Doklady Physics*. 2014, Vol. 59, No. 9, pp. 427–430
- [45] Krivtsov, A.M. Heat transfer in infinite harmonic one dimensional crystals. *Dokl. Phys.* 60(9), 407 (2015)
- [46] Kryder, M.H., Gage, E.C., McDaniel, T.W., Challener, W.A., et al. Heat Assisted Magnetic Recording. *IEEE* (2008)
- [47] Kuzkin, V.A, Krivtsov, A.M. Fast and slow thermal processes in harmonic scalar lattices. *J. Phys.: Condens. Matter*, 29, 505401, (2017)
- [48] Kuzkin, V.A. Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell. *Cont Mech Thermodyn*, 31, pp. 1573–1599, (2019)
- [49] Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M.. Ballistic resonance and thermalization in the Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou chain at finite temperature. *Physical Review*, E 101, 042209 (2020)
- [50] Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Unsteady ballistic heat transport: linking lattice dynamics and kinetic theory. *ActaMechanica* (2021)

- [51] Langevin, P.: Sur la théorie du mouvement brownien. C. R. L'Acad. Sci. 146(530–533), 530 (1908)
- [52] Lefevre, R. Schenkel, A. Perturbative analysis of anharmonic chains of oscillators out of equilibrium. Journal of statistical physics (2003)
- [53] Lepri, S., Livi, R., Politi, A. Energy transport in anharmonic lattices close to and far from equilibrium. Physica D: Nonlinear Phenomena 119 (1-2), 140-147 (1998)
- [54] Lepri, S., Livi, R., Politi, A. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices. Physics Reports, Vol. 377, pp. 1-80, (2003)
- [55] Lepri, S., Livi, R., Politi, A. A stochastic model of anomalous heat transport: analytical solution of the steady state. J. Phys. A: Math. Theor. 42 (2009)
- [56] Lukkarinen, J. Kinetic theory of phonons in weakly anharmonic particle chains. In: Lepri S. (eds) Thermal Transport in Low Dimensions. Lecture Notes in Physics, vol 921. Springer, Cham, (2016)
- [57] Lumpkin, M.E., Saslow, W.M., Visscher, W.M. Phys. Rev. B 17 4295 (1978)
- [58] McLachlan, R.I. and Atela, P. The accuracy of symplectic integrators, Nonlinearity 5, 541 (1992)
- [59] Northrop G.A. and Wolfe J.P. Phonon Imaging: Theory and Applications. Nonequilibrium Phonon Dynamics pp. 165-242 (1985)
- [60] Northrop G. A. and Wolfe J. P., Ballistic phonon imaging in germanium, Phys. Rev. B 22, 6196 (1980)
- [61] Rickert Wilhelm, Vilchevskaya, E.N., Müller, W.H. A note on Couette flow of micropolar fluids according to Eringen's theory Vol. 7, No. 1, 25–50 (2019)

- [62] Rieder, Z., Lebowitz, J.L., Lieb, E. Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state. *Journal of Mathematical Physics*, Vol. 8, 1073 (1967)
- [63] Schrödinger, E. Zur dynamik elastisch gekoppelter punktsysteme. *Annalen der Physik*, Vol. 44, p. 916 (1914)
- [64] Sokolov, A.A., Krivtsov, A.M., Müller, W.H. Localized heat perturbation in harmonic 1D crystals: Solutions for an equation of anomalous heat conduction. *Physical Mesomechanics*. 2017, Vol. 20, No. 3, pp. 305–310
- [65] Sokolov, A.A., Krivtsov, A.M., Müller, W.H., Vilchevskaya, E.N.. Change of entropy for one-dimensional ballistic heat equation — sinusoidal initial perturbation. *Physical Review E.*, Vol. 99, 042107 (2019)
- [66] Stepanov, S.: *Stochastic World*. Springer, Berlin (2013)
- [67] Taborek P. and Goodstein D., Diffuse reflection of phonons and the anomalous Kapitza resistance, *Phys. Rev.* 22,1550 (1980)
- [68] Takizawa, E. Kobayasi, K. Heat flow in a system of coupled harmonic oscillators. *Chinese Journal of physics*. Vol.2 No.2, (1963)
- [69] Takizawa, E. Kobayasi, K. On the Stochastic Types of Motion in a System of Linear Har-monic Oscillators. *Chinese Journal of Physics*, Vol. 6, No.1 (1967)
- [70] Vassalli, M. Diploma Thesis, University of Florence (1999)
- [71] Wolfe, James P.. *Imaging phonons. Acoustic wave propagation in solids*. Cambridge University Press (1998)
- [72] Xu, X., Wang Yu, Zhang, K et al. Length-dependent thermal conductivity in suspended single-layer graphene. *Nature Communications* (2014).