

На правах рукописи



Ляжков Сергей Дмитриевич

**ВЛИЯНИЕ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ И
НЕЛИНЕЙНЫХ ЭФФЕКТОВ НА ПЕРЕНОС И
ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ В
ДИСКРЕТНЫХ СРЕДАХ**

Специальность 1.1.8 — Механика деформируемого твёрдого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
Кузькин Виталий Андреевич
доктор физ.-мат. наук

Санкт-Петербург
2025

Работа выполнена: **ФГАОУ ВО Санкт-Петербургский Политехнический университет Петра Великого**

Научный руководитель: **Кузькин Виталий Андреевич**, доктор физико-математических наук

Официальные оппоненты: **Голуб Михаил Владимирович**, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник Кубанского государственного университета

Баимова Юлия Айдаровна, д.ф.-м.н., заведующий лаборатории «Физика и механика углеродных материалов» **ФГБУН Институт проблем сверхпластичности металлов**

Ведущая организация: **Федеральный исследовательский центр «Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова Российской академии наук»**

Защита состоится на заседании диссертационного совета ДС 24.1.097.01 на базе **ФГБУН Институт проблем машиноведения Российской академии наук** по адресу: 199178, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., д. 61.

С диссертацией можно ознакомиться в **ОНТИ ФГБУН Институт проблем машиноведения Российской академии наук** и на сайте института по адресу <https://ipme.ru>.

Автореферат разослан « » 2025 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета 24.1.097.01,
доктор технических наук

Е.Б. Седакова

Общая характеристика работы

Актуальность работы. Развитие технологий производства сверхчистых монокристаллических материалов и метаматериалов с уникальными термомеханическими характеристиками вызывает интерес к изучению свойств таких материалов и протекающих в них динамических процессов. В частности, изучение нестационарных волновых процессов в монокристаллах важно для решения проблем отвода тепловой энергии, возникающих в микроэлектронике и ядерной энергетике. Для описания нестационарных волновых процессов применяются дискретные и континуальные модели механики деформируемого твёрдого тела. Дискретные модели, описывающие тело как совокупность взаимодействующих частиц, дают дополнительную информацию о волновых процессах, описание которых макроскопическими моделями (основанными на классической механике сплошных сред) может оказаться затруднительным из-за необходимости выбора подходящих определяющих соотношений.

Один из примеров таких процессов — волновой перенос тепловой энергии, при котором наблюдаются существенные отклонения от закона Фурье. Кроме того, перенос тепловой энергии волнового характера наблюдается в диэлектриках при низких температурах. Поскольку основным носителем тепловой энергии в диэлектриках являются упругие волны, распространяющиеся в кристаллических решётках, задача о переносе тепловой энергии в диэлектрических материалах может решаться методами механики деформируемого твёрдого тела. Особый интерес представляют процессы, происходящие вблизи границ, поскольку в экспериментах, связанных с переносом тепловой энергии, на границах образцов, как правило, либо проводится измерение, либо подаётся возмущение.

Необходимость выбора определяющего соотношения зачастую возникает при описании термомеханических процессов вдали от теплового равновесия. В подобных условиях может потребоваться введение нескольких температур, соответствующих различным степеням свободы. Так, результаты численных расчётов методом молекулярной динамики демонстрируют наличие нескольких температур при распространении ударных волн. Экспериментально показано, что при быстром лазерном воздействии на твёрдые тела кристаллическая решётка и электронная подсистема могут иметь различные температуры. Разные температуры наблюдаются также при волновом переносе тепловой энергии в слабонелинейных кристаллах. По прекращении внешнего воздействия система, выведенная из состояния равновесия, стремится к нему вернуться. Переход к состоянию равновесия сопровождается выравниванием энергий, соответствующих различным степеням свободы. Механизмом данного процесса является обмен энергии между собственными формами, для описания которого необходимо учитывать нелинейность.

Исследование нестационарных волновых процессов в деформируемых твёрдых телах с применением исключительно дискретных моделей связано с существенными трудностями, среди которых основная — высокая вычислительная сложность (описание процессов на макроуровне требует использования огромного количества

частиц). Возможное разрешение данной проблемы заключается в использовании на макроуровне моделей механики сплошных сред с интегрируемыми в них определяющими соотношениями из дискретных моделей. Кроме того, для описания волновых процессов, в частности, в гранулированных средах или трещиноватых породах может применяться смешанная модель, сочетающая дискретные и континуальные методы их описания.

Таким образом, развитие дискретных и континуальных подходов к описанию переноса и перераспределения энергии с учётом влияния граничных условий и нелинейных эффектов является актуальной задачей механики деформируемого твёрдого тела. При решении данной задачи в диссертационной работе особое внимание уделяется установлению связи между дискретным и континуальным описаниями.

Степень разработанности темы исследования. Динамические процессы в деформируемых телах освещены многочисленными исследованиями. В частности, численному моделированию таких процессов посвящены работы следующих авторов: А.К. Абрамяна, С.М. Айзиковича, М. Аллена, И.Ш. Ахатова, Н.М. Бессонова, Е.В. Глушкова, Н.В. Глушковой, М.В. Голуба, Р.В. Гольштейна, С.В. Дмитриева, П.В. Захарова, Д.А. Индейцева, А.М. Кривцова, С.А. Кукушкина, Д.С. Лисовенко, Ю.И. Мещерякова, Н.Ф. Морозова, В.П. Мясникова, А.А. Назарова, П.Е. Товстика, В.М. Фомина, У. Хувера и других. В настоящей работе рассматривается аналитическое описание нестационарных волновых процессов в рамках дискретных моделей.

Простейшей дискретной моделью деформируемого твёрдого тела для аналитического описания нестационарных волновых процессов является одномерная решётка (цепочка), состоящая из одинаковых материальных точек (частиц), соединённых линейными пружинками. Вероятно, первый, кем решена задача динамики данной цепочки, был У. Гамильтон. Динамика той же модели привлекала внимание множества авторов; к числу наиболее ранних её исследователей после Гамильтона относятся М. Коппер, Т. Хавелок, Э. Шрёдингер, М. Борн, Т. Карман, Н.Е. Жуковский, Е. Гильемин, Л. Пайпс¹, Л. Бриллюэн, Л.И. Мандельштам и П. Хеммер. Детализированная теория динамики линейных кристаллических решёток представлена в работах А.М. Косевича, Дж. Займана, Л. Бриллюэна; А. Марадудина, Э. Монтролла, Дж. Вейсса и И. П. Ипатовой; П.Хеммера, А.Аскара, М. Борна и Х.Куны. Нелинейным задачам с применением дискретных моделей посвящены работы, в частности, М. Абловица, С.А. Беклемишева, О.В. Гендельмана, Б. Гершгорина, Е.Ф. Грековой, Т.Доксуа, Ф. Жени, Е.А. Ивановой, Е.А. Корзниковой, А.М. Косевича, Ю.А. Косевича, М.А. Ковалёвой, Л.И. Маневича, А.И. Мелькера, М. Милке, Э. Монтролла, А.А. Овчинникова, В.А. Полянского, А.В. Порубова, А.В. Савина, Р.Х. Сабирова, Л.И. Слепяна, М. Тоды, Д.В. Трещёва, Э. Ферми, Дж. Паста, С. Улама, М. Цингу; Г. Флаха, Р. Хомерики и других авторов. В диссертационной работе основное внимание уделяется процессам переноса и перераспределения энергии в дискретных средах с учётом граничных условий и нелинейных эффектов.

¹Гильемин и Пайпс рассматривали модель цепочки в рамках электродинамики.

Переносу энергии в дискретных средах посвящены многие работы, в частности, П. Аллена, Ю.А.Баимовой, Дж. Волфе, С.Н.Гаврилова, О.В.Гендельмана, М.В. Голуба, М.А. Гузева, С.В. Дмитриева, А. Дхара, А.И. Жмакина, Д. Кахилия, М. Клейна, А.М. Кривцова, В.А.Кузькина, И.А.Кунина, Дж.Лебовица, С.Лепри, Я. Луккаринена, В.Мюллера, А.Б.Фрейдина, А. Полити, И.Пригожина, Р.Рубина, Ч. Тяня, Г.Чена, Джи Чена, Е.В.Шишкиной, Х. Шпона и других авторов. Континуальным подходам к той же тематике посвящены работы, в частности, П.Аллена, С.Н.Гаврилова, А.М.Кривцова, В.А.Кузькина, И.А. Кунина, А.В.Порубова. В этих работах предложены методы континуализации решения задачи переноса энергии в бесконечных линейных однородных кристаллических решётках. Та же проблема в отношении цепочек с пространственной неоднородностью изучается в течение последних нескольких лет: описанию переноса энергии в континуальном приближении в цепочке с изотопным дефектом посвящены работы С.Н. Гаврилова и Е.В. Шишкиной. В диссертационной работе основное внимание уделяется описанию влияния граничных условий (свободная граница или граница под внешним воздействием) на перенос энергии в континуальном приближении, чем, насколько известно, ранее не занимались.

Наряду с переносом энергии в дискретных средах, регулярно исследуются процессы, происходящие вдали от теплового равновесия, в которых имеет место перераспределение энергии по степеням свободы. Описание данного процесса подразумевает введение нескольких температур, им соответствующим. Многотемпературным моделям механики деформируемых твёрдых тел посвящены работы, в частности, С. И. Анисимова, А.К. Беляева, М. Гартинга, Д.Жоу, Д.А. Индейцева, Р. Ковача, А.М. Кривцова, Дж. Лебовица, С. Л. Соболева, У. Хувера и других авторов. В диссертационной работе исследуются естественно возникающие вопросы, касающиеся перехода к равновесию, вызванного прекращением внешнего воздействия и сопровождающимся выравниванием энергий (характерный масштаб времени выравнивания кинетических энергий, соответствующих различным степеням свободы; необходимая степень нелинейности для выравнивания энергий; наблюдение нескольких различных энергий в ходе нестационарного переноса энергии).

Таким образом, влияние граничных условий и нелинейных эффектов на перенос и перераспределение энергии в дискретных средах к настоящему времени представляется недостаточно изученным.

Цели и задачи. Целью настоящей работы является анализ влияния граничных условий и нелинейных эффектов на перенос и перераспределение энергии в дискретных средах. Для достижения этой цели решаются следующие задачи:

1. Аналитическое описание переноса энергии в деформируемых твёрдых телах в континуальном приближении при наличии свободной границы как при начальном распределении энергии, так и при внезапном подводе энергии;
2. Нахождение нестационарного решения задачи динамики линейной цепочки под действием внезапно приложенного периодического силового нагружения;

3. Нахождение выражения для полной энергии, закачиваемой в цепочку при наличии периодического нагружения на границе и исследования влияния нелинейности на скорость закачки энергии;
4. Описание процессов перераспределения энергии между степенями свободы в упругих твёрдых телах с кристаллической структурой.

Методы исследования. Основным методом, которым получены результаты, представленные в диссертации, является метод динамики частиц. В линейном приближении задачи решались с использованием дискретного косинус-преобразования или разложения по собственным формам. Для упрощения аналитических решений задач применялись асимптотические методы; в частности, метод стационарной фазы. Для сравнения аналитических результатов использовались численные методы, основанные на интегрировании задач уравнений динамики частиц с применением симплектических методов.

Теоретическая и практическая значимость диссертации. Диссертация носит теоретический характер. Представленные в ней результаты могут быть использованы для построения моделей, описывающих эксперименты по переносу энергии в кристаллических твёрдых телах на микро- и наноуровне, в частности, для теоретического описания нестационарного эксперимента с установкой transient thermal grating (TTG). Результаты также могут способствовать развитию теории переноса тепловой энергии на наноуровне (и устройств для контроля этого процесса: тепловые диоды и транзисторы), что имеет важное значение для решения задач, связанных как с отводом тепловой энергии от нанопроцессоров или ядерных реакторов, так и с локальным нагревом носителей записи с целью уменьшения коэрцитивности материала (технология термомагнитной записи).

Результаты главы 1 дают представление о влиянии свободной границы на перенос энергии в кристаллических твёрдых телах. Результаты, представленные в главе для одномерных задач, могут быть обобщены на задачи переноса энергии в плоских и пространственных решётках со свободной поверхностью или с интерфейсом. Результаты главы 2 направлены на развитие теоретических подходов как к решению задачи динамики дискретных сред, находящихся под воздействием внешних сил (или поля), так и к описанию подвода энергии, вызванного внешним воздействием. Результаты главы 3 могут быть использованы для построения определяющих соотношений в механике многокомпонентных сплошных сред или метаматериалов, находящихся в неравновесных условиях.

Достоверность. Достоверность результатов, представленных в диссертации, обеспечивается строгой математической постановкой задач, применением математически обоснованных методов решения, совпадением аналитических результатов с результатами численного моделирования, а также сопоставлением некоторых из полученных результатов с ранее опубликованными в литературе.

Научную новизну составляют следующие **результаты, выносимые на защиту:**

1. Предложено аналитическое описание переноса энергии упругими волнами в одномерной линейной цепочке со свободной границей при произвольном начальном распределении кинетической энергии. Выведены формулы, описывающие изменение кинетической энергии в континуальном приближении в виде суммы вкладов падающей и отражённой волн. Показано, что любое начальное распределение энергии приводит к её затуханию вблизи границы на больших временах, которое происходит значительно быстрее, чем аналогичное решение для бесконечной цепочки.
2. Получено аналитическое решение в континуальном приближении, описывающее перенос энергии упругими волнами в одномерной полубесконечной линейной цепочке со свободной границей и линейным вязким трением при произвольном стохастическом воздействии. Показано, в частности, что при отсутствии трения кинетическая энергия вблизи границы прекращает рост (в отличие от бесконечной цепочки, где энергия, подводимая извне, растёт в любой точке).
3. Получено приближённое нестационарное решение для скоростей частиц на больших временах в одномерной полубесконечной линейной цепочке под действием внезапно приложенного периодического силового нагружения на границе. В частности, показано отсутствие резонанса вблизи границы при нагружении на максимальной частоте в полосе пропускания.
4. Проведён асимптотический анализ подвода энергии в одномерную полубесконечную цепочку с кубической нелинейностью, при наличии периодических силового и кинематического нагружений на границе. Получено приближённое выражение для полной энергии, закачиваемой в цепочку на больших временах, в том числе на частотах, лежащих выше полосы пропускания.
5. Предложено аналитическое описание волнового переноса энергии (частности, затухания синусоидальных профилей кинетических энергий) в одномерной цепочке с прикреплёнными осцилляторами (цепочки «масса-в-массе») в линейном приближении. Получено решение в замкнутой форме при малом соотношении масс осцилляторов и частиц цепочки. С использованием численного решения показано, что в нелинейном случае равные в начальный момент времени кинетические энергии, соответствующие цепочке и прикреплённым осцилляторам, различны в процессе затухания, как при слабой, так и при сильной нелинейности.
6. Получено аналитическое решение, описывающее выравнивание кинетической и потенциальной энергий и перераспределение энергии по пространственным направлениям в линейной гранецентрированной кубической решётке со случайными начальными скоростями. Показано, что колебания средней кинетической энергии имеют шесть характерных частот, и амплитуда колебаний затухает обратно пропорционально времени.

7. С использованием численного решения уравнений динамики границентрированной кубической решётки с взаимодействиями Леннард-Джонса и случайными начальными скоростями показано, что выравнивание кинетических энергий, соответствующих различным ортогональным направлениям, имеет два характерных масштаба времени. На малых временах выравнивание может быть описано в линейном приближении, на больших временах имеет место эволюционный процесс, связанный с влиянием нелинейности. Предложена эмпирическая зависимость масштаба времени данного процесса от начальной энергии.

Полнота изложения материала. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 10 работах [1, 2, 3, 5, 4, 6, 7, 8, 9, 10]. Все результаты опубликованы в изданиях, входящих в базы цитирования WoS/Scopus, РИНЦ или изданиях, рекомендованных ВАК России.

Личное участие автора. Автору принадлежат решения задач, приведённые в главе 1, главе 2 (результаты, приведённые в разделе 2.2.1, были получены совместно с соавтором работы [9]) и главе 3 (результаты, приведённые в разделах 3.2.3 и 3.2.4, были получены совместно с соавтором работы [4]). При этом, при нахождении асимптотического приближения решений задач, приведённых в разделе 1.1.4 главы 1 и разделах 2.1.3, 2.1.4, 2.2.1 главы 2, использовались подходы из работ А.М. Кривцова, В.А. Кузькина, С.Н. Гаврилова и Е.В. Шишкиной; в главе 3 аналитические решения задач были получены на основе формул, выведенных в работах В.А.Кузькина для произвольной бесконечной линейной решётки.

Апробация работы. Результаты, полученные в диссертации, представлялись на ежегодных школах-конференциях «Актуальные проблемы механики» (Санкт-Петербург, 2019—2022; Великий Новгород, 2024); на конференциях «Неделя науки СПбПУ» (Санкт-Петербург, 2018, 2019), «Неделя науки ФизМех» (Санкт-Петербург, 2022—2024); на семинаре научного центра «Корнинг» в 2021 г. (руководитель семинара — А.В. Доценко); на XXXVII Фортовской ежегодной международной конференции «Уравнения состояния вещества» (Эльбрус, 2022); на Санкт-Петербургском городском семинаре по механике в 2022 г. (руководитель семинара — чл.корр. РАН Д.А. Индейцев); на V всероссийской конференции молодых учёных механиков «YSM-2022» (Сочи, 2022); на шестой международной конференции «Моделирование нелинейных процессов и систем (MNPS — 2022)» (Москва, 2022); на конференции «NODYCON 2023» (Рим, Италия, 2023); на XIII Всероссийском съезде по теоретической и прикладной механике (Санкт-Петербург, 2023); на XXXIII всероссийской конференции «Математическое моделирование в естественных науках» (Пермь, 2024); на XI Всероссийском молодёжном научном форуме с международным участием «OpenScience» (Гатчина, 2024). В полном объёме результаты диссертации представлялись в 2025 году: на семинаре по механике, основанном Д.А. Индейцевым (руководитель семинара — д.ф.-м.н. А.Б. Фрейдин); на акустическом семинаре имени Д.П. Коузова (руководители семинара — д.ф.-м.н. А.П. Киселёв и к.ф.-м.н. Е.А. Злобина); на семинаре Высшей школы

теоретической механики и математической физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (руководитель семинара — чл.корр. РАН А.М. Кривцов).

На различных этапах диссертационная работа поддерживалась грантами РФФИ (20-37-70058), РНФ (21-71-10129, 22-11-00338) и грантом 23-1-5-112-1 Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

Структура и объём диссертации. Диссертация изложена на 199 страницах (основной текст занимает 171 страницу) и состоит из введения, трёх глав, заключения и списка использованной литературы. Диссертация содержит 54 рисунка. Библиография включает 313 наименований.

Краткое содержание диссертации

В диссертации приняты следующие обозначения, общие для всей работы: $\mathbb{N}$ — множество натуральных чисел; H — функция Хевисайда; i — мнимая единица; с.с. — комплексно-сопряжённое слагаемое; $\Re$ и $\Im$ — вещественная и мнимая части (числа или функции) соответственно; Γ — гамма-функция; T_k — полином Чебышева первого рода степени k ; $\delta(\dots)$ — дельта-функция Дирака; $\delta_{\dots,\dots}$ — символ Кронекера ($\delta_{k,k'} = 1$ при $k = k'$ и 0 при $k \neq k'$); J — функция Бесселя первого рода; K — модифицированная функция Бесселя второго рода; $(\dot{\dots})$ и $(\ddot{\dots})$ — производные по времени первого и второго порядка соответственно; t — время; $\top$ — символ транспонирования; $\langle \dots \rangle$ — символ математического ожидания; a — длина связи между частицами в недеформированном состоянии.

В первой главе решается задача о влиянии свободной границы на перенос энергии в твёрдых телах. В качестве модели деформируемого твёрдого тела используется полубесконечная линейная цепочка, состоящая из одинаковых частиц массой m , соединённых линейными пружинками жёсткостью c и имеющая один свободный конец (рисунок 1). Считается, что частицы взаимодействуют только с

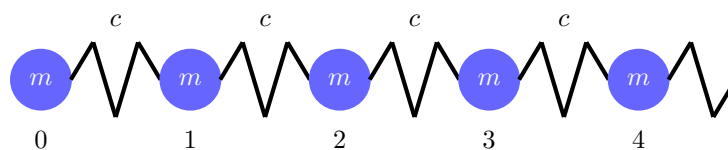


Рис. 1: Полубесконечная цепочка со свободной границей.

ближайшими соседями. Рассматриваются два случая: в начальный момент времени в цепочке задано распределение средней по ансамблю кинетической энергии при отсутствии потоков энергии; в цепочку производится стохастический подвод энергии произвольного типа. Исследованию первого случая посвящён **раздел 1.1**, второго — **раздел 1.2**.

В **разделе 1.1** постановка задачи (раздел 1.1.1) представляет собой следующее

уравнение движения частицы $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$:

$$\begin{aligned} \dot{u}_n &= v_n, \\ \dot{v}_n &= \omega_e^2(u_{n+1} - u_n) - \omega_e^2(u_n - u_{n-1})(1 - \delta_{n,0}), \quad \omega_e \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{c/m}, \end{aligned} \quad (1)$$

где u_n и v_n — перемещение и скорость частицы n соответственно; ω_e — элементарная частота колебаний частицы. Начальные условия имеют вид:

$$u_n = 0, \quad v_n = \mathcal{V}_n, \quad (2)$$

где $\mathcal{V}_n$ — поле некоррелированных случайных начальных скоростей частиц, удовлетворяющих условию задания распределения кинетической энергии, T_n^0 : $\mathcal{V}_n = \rho_n \sqrt{2T_n^0/m}$, где ρ_n — некоррелированные случайные числа с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией. Точное решение задачи (1—2), полученное в разделе 1.1.2, имеет вид

$$v_n = \sum_{j=0}^{\infty} \mathcal{V}_j \dot{\Phi}_{n,j}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \dot{\Phi}_{n,j} &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos \frac{(2j+1)\theta}{2} \cos \frac{(2n+1)\theta}{2} \cos(\omega(\theta)t) d\theta \\ &= J_{2|n-j|}(2\omega_e t) + J_{2(n+j+1)}(2\omega_e t), \end{aligned} \quad (4)$$

где $\omega(\theta) \stackrel{\text{def}}{=} 2\omega_e \left| \sin \frac{\theta}{2} \right|$ — дисперсионное соотношение для линейной цепочки, соответствующее полосе пропускания; $\dot{\Phi}_{n,j}$ — фундаментальное решение задачи динамики полубесконечной цепочки со свободной границей. Решение (3) может быть получено двумя способами: через выражение для скоростей частиц в цепочке с двумя свободными концами, полученное методом разложения по собственным формам, в пределе числа частиц, стремящегося к бесконечности, и через прямое и обратное дискретные косинус-преобразования.

Для описания переноса энергии рассматривается бесконечное множество реализаций, отличающихся случайными начальными условиями. В разделе 1.1.3 вводится средняя по ансамблю кинетическая энергия, определяемая в виде $T_n \stackrel{\text{def}}{=} m \langle v_n^2 \rangle / 2$. При подстановке в данное выражение решения для скоростей частиц с дальнейшими преобразованиями получается следующая точная формула для кинетической энергии:

$$T_n = \sum_{j=0}^{\infty} T_j^0 \dot{\Phi}_{n,j}^2, \quad (5)$$

которая далее именуется *дискретным решением*.

Полученная формула используется для получения выражения кинетической энергии в континуальном приближении двумя способами (см. раздел 1.1.4). Первый

способ континуализации производится с использованием подхода, предложенного А.М. Кривцовым и В.А. Кузькиным и заключающегося в осреднении дискретного решения в интегральной форме по пространственному мезомасштабу (много меньшего макроскопического, но много больше, чем длина межатомной связи в недеформированном состоянии, a) с последующим асимптотическим разложением. Таким образом получается выражение для кинетической энергии на больших временах которое именуется *симметричным континуальным решением* (это решение ведёт себя таким же образом, как в бесконечной цепочке, в силу его симметрии относительно границы), представляющим собой сумму вкладов от бегущей и отражённой волн (см. таблицу 1). Здесь $T^0(x)$ — такая функция начальной кинетической энергии, что $T^0(na) \equiv T_n^0$; $v_s \stackrel{\text{def}}{=} \omega_e a$ — скорость звука). В диссертации показано, что то же решение (с точностью до множителя) получается из бесстолкновительной кинетической теории. Второй способ континуализации производится с использованием подхода, предложенного С.Н. Гавриловым и Е.В. Шишкиной (оценка решения задачи динамики цепочки при её возмущении вне области пространственной неоднородности с применением метода стационарной фазы при $\omega_e t \rightarrow \infty$) и заключающегося в оценке замкнутой формы фундаментального решения, $\dot{\Phi}_{n,j}$, на фронтах падающей и отражённой волн и последующего разделения квадрата асимптотического решения на «осциллирующую» и «неосциллирующую» составляющие. Без «осциллирующей» компоненты полученное решение для кинетической энергии именуется «континуальным решением», с учётом этой компоненты — «дискретно-континуальным» решением. Полученные решения представлены в таблице 1. Сравнение континуальных решений разного типа с дискретным и численным решениями приведено на рисунке 2 при $T^0(x) = \mathcal{A}\delta(x - h)$. Из рисунка 2 видно,

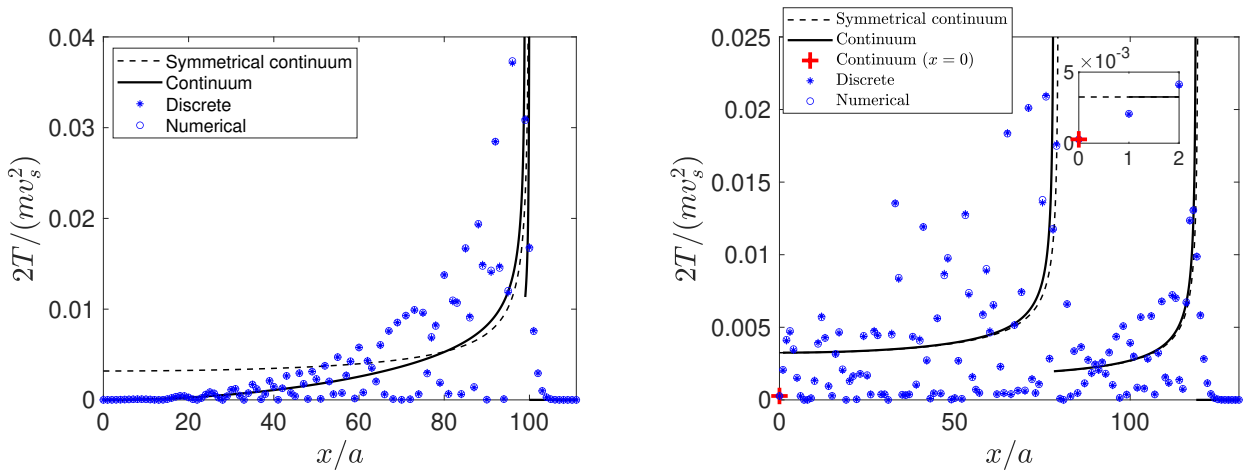


Рис. 2: Распределение кинетической энергии при возмущении в точке $h = 0$ (слева) и $h = 20a$ (справа) в момент времени $\omega_e t = 100$.

что поле кинетической энергии вблизи границы гораздо точнее описывается континуальным решением, которое затухает как $1/t^3$, чем симметричным континуальным, затухающим как $1/t$. Данный результат справедлив для любого начального распределения энергии, в частности, прямоугольного и ступенчатого распределений,

Тип континуального решения	Формула кинетической энергии, $T(t, x)$
Симметричное континуальное	$\int_0^\infty T^0(\xi) (G(t, x - \xi) + G(t, x + \xi)) d\xi$
Континуальное	$\int_0^\infty T^0(\xi) (G(t, x - \xi) + G(t, x + a + \xi)) d\xi +$ $\int_0^a T^0(\xi) \Delta g(t, x, \xi) _{q=0} d\xi, \quad x > 0,$ $\int_0^\infty T^0(\xi) (G(t, \xi) + \tilde{G}(t, \xi)) d\xi, \quad x = 0$
Дискретно-континуальное	$\int_0^\infty T^0(\xi) (G(t, x - \xi) + G(t, x + a + \xi) + \Delta g(t, x, \xi) _{q=1}) d\xi$
$G(t, x) = \frac{H(v_s t - x)}{2\pi \sqrt{v_s^2 t^2 - x^2}}, \quad \tilde{G}(t, x) \simeq \left(-\frac{1}{2\pi v_s t} + \frac{2a^2 + 8ax + 7x^2}{4\pi v_s^3 t^3} \right) H(v_s t - (x + a))$	
$\Delta g(t, x, \xi) = \frac{q \sin((\mathcal{W}(x - h) + \mathcal{W}(x + h + a))t) + \cos((\mathcal{W}(x - h) - \mathcal{W}(x + h + a))t)}{\pi^4 \sqrt{(v_s^2 t^2 - (x - h)^2)(v_s^2 t^2 - (x + h + a)^2)}}$	
$\mathcal{W}(x) = 2\omega_e \left(\sqrt{1 - \frac{x^2}{v_s^2 t^2}} - \frac{x}{v_s t} \arccos \frac{x}{v_s t} \right)$	

Таблица 1: Континуальные решения для кинетической энергии.

рассмотренных в разделе 1.1.5.

В разделе 1.2 рассматривается та же модель, что и в предыдущем разделе, но находящаяся в среде с линейным вязким трением, и вместо начального распределения энергии задаётся подвод энергии источником произвольного типа. В разделе 1.2.1 представлена постановка задачи: система уравнений Ланжевена:

$$\begin{aligned}
du_n &= v_n dt, \quad n \in \mathbb{N} \cup \{0\}, \\
dv_n &= (\omega_e^2(u_{n+1} - u_n) - \omega_e^2(u_n - u_{n-1})(1 - \delta_{n,0}) - 2\eta v_n) dt + b_n dW_n, \quad \eta \ll \omega_e \\
dW_n &= \rho_n \sqrt{dt}, \quad \langle \rho_n \rangle = 0, \quad \langle \rho_n(t_l) \rho_{n'}(t_{l'}) \rangle = \delta_{n,n'} \delta(t_l - t_{l'}),
\end{aligned} \tag{6}$$

где η — вязкость среды, $\eta \ll \omega_e$; W_n — некоррелированные Винеровские процессы; $\rho_n(t)$ — независимые случайные числа с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией; $b_n(t)$ — интенсивность стохастического возмущения.

В разделе 1.2.2 с использованием прямого и обратного дискретных косинус-преобразований и леммы Ито получена точная формула для кинетической энергии, которая в слабовязком случае ($\eta \ll \omega_e$) имеет следующий вид:

$$T_n = \sum_{j=0}^{\infty} \int_0^t \chi_j(t - \tau) \left(e^{-\eta\tau} (J_{2|n-j|}(2\omega_e\tau) + J_{2(n+j+1)}(2\omega_e\tau)) \right)^2 d\tau, \tag{7}$$

где величина $\chi_n = mb_n^2/2$ вводится как локальная скорость закачки энергии. В

разделе 1.2.3 производится континуализация решения (7), результаты этой процедуры приведены в таблице 2 (здесь $\chi(t, x)$ — такая функция скорости закачки энергии, что $\chi(t, na) \equiv \chi_n(t)$). Разделы 1.2.4 и 1.2.5 посвящены соответственно

Тип континуального решения	Формула кинетической энергии, $T(t, x)$
Симметричное континуальное	$\int_0^\infty (\mathcal{S}(t, x - \xi , \xi) + \mathcal{S}(t, x + \xi, \xi)) d\xi$
Дискретно-континуальное	$\int_0^\infty (\mathcal{S}(t, x - \xi , \xi) + \mathcal{S}(t, x + \xi + a, \xi)) d\xi + \Delta T_B$
$\mathcal{S}(t, x, \xi) = \frac{1}{2\pi} \int_{\frac{x}{v_s}}^t \frac{\chi(\tau, \xi) e^{-2\eta(t-\tau)} d\tau}{\sqrt{v_s^2(t-\tau)^2 - x^2}}$	
$\Delta T_B(t, x) = \int_0^\infty \int_{\frac{x+\xi+a}{v_s}}^t \chi(\tau, \xi) e^{-2\eta(t-\tau)} \Delta g(t-\tau, x, \xi) _{q=1} d\tau d\xi$	

Таблица 2: Континуальные решения для кинетической энергии.

сравнению континуальных решений с дискретным и численным на примере точечного мгновенного $\chi = T^0 \delta(t)$ и внезапного $\chi = 2\chi^0 H(t) \delta(x - h)$ точечного подводов энергии. Мгновенный подвод энергии (то же, что и начальное распределение энергии), рассмотрен в разделе 1.1 при отсутствии вязкого трения. В разделе 1.2.5 производится асимптотическая оценка дальнего поля кинетической энергии в случае подводов как на границе, так и вне границы. При сравнении аналитических и численных результатов (раздел 1.2.6) рассматриваются случаи отсутствия вязкого трения и его наличия. Результаты сравнения, соответствующего первому случаю, представлены на рисунке 3. Сравнение аналитических и

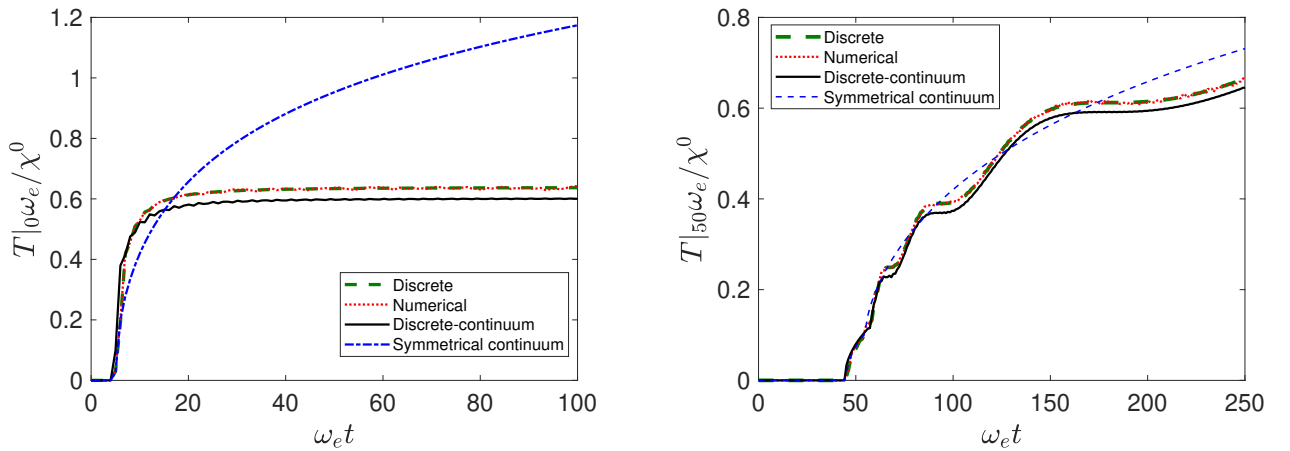


Рис. 3: Изменение во времени кинетической энергии в точках $x = 0$ (слева) и $x = 50a$ (справа) при подводе в точке $h = 5a$.

численных результатов демонстрирует следующее: при подводе в цепочку без

трения энергия растёт вдаль от границы, но не растёт вблизи границы (в отличие от бесконечной цепочки, в которой энергия росла бы везде). Приводится объяснение отсутствия роста энергии вблизи границы через анализ дискретно-континуального решения, в изменении которого решающую роль играет слагаемое ΔT_B . В разделе 1.3 приводится анализ результатов первой главы и выдвигается заключение: корректное континуальное описание переноса энергии в полубесконечную цепочку дают только континуальное и дискретно-континуальное решения, полученные через асимптотику фундаментального решения задачи динамики цепочки на фронтах волн.

Во второй главе решается задача о подводе энергии в полубесконечную цепочку β —Ферми-Паста-Улама-Цингу (ФПУЦ) при периодическом нагружении на границе. Рассматриваются силовое (раздел 2.1) и кинематическое (раздел 2.2) нагружения. Первый случай соответствует заданной периодической силе $F_0 \sin(\Omega t)H(t)$, второй — заданному закону движения $A_0 \sin(\Omega t)$ (см. рисунок 4).

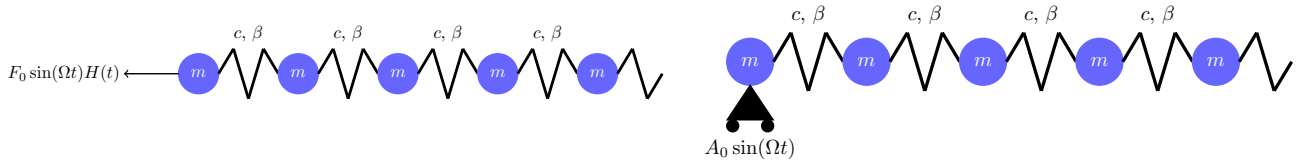


Рис. 4: Полубесконечная цепочка под действием силового (слева) и кинематического (справа) нагружений на границе.

В разделе 2.1 рассматривается силовое нагружение. Постановка задачи, соответствующая силовому нагружению: уравнение динамики частицы $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$

$$m\ddot{u}_n = c(u_{n+1} - u_n) + \beta(u_{n+1} - u_n)^3 - (c(u_n - u_{n-1}) + \beta(u_n - u_{n-1})^3)(1 - \delta_{n,0}) + F_0 \sin(\Omega t)H(t)\delta_{n,0}, \quad \beta F_0^2/c^3 \ll 1, \quad (8)$$

с нулевыми начальными условиями, приведена в разделе 2.1.1. Разделы 2.1.2—2.1.4 посвящены решению задачи в линейном приближении. Постановка задачи для линейной цепочки предполагает уравнение (8) при $\beta = 0$ но с добавлением слагаемого с вязким трением $(-2\eta\dot{u}_n)$, чтобы получить приближённое решение задачи в пределе $\eta \rightarrow 0+$ (принцип предельного поглощения). В разделе 2.1.2 с использованием прямого и обратного дискретных косинус-преобразований находится точное

решение для скоростей частиц, имеющее вид:

$$\begin{aligned}
\dot{u}_n &= \dot{u}_n^\omega + \dot{u}_n^\Omega, \quad \dot{u}_n^{\{\Omega, \omega\}} = \frac{H(t)}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \dot{u}_{\{\Omega, \omega\}}(\theta) \cos \frac{(2n+1)\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta, \\
\hat{u}_\Omega &= \frac{F_0 \sin(\Omega t - \phi_2)}{m \sqrt{(\Omega^2 - \omega^2)^2 + 4\eta^2 \Omega^2}}, \\
\hat{u}_\omega &= \frac{F_0 \Omega \sqrt{4\eta^2(\omega^2 - \eta^2) + (\Omega^2 - \omega^2 + 2\eta^2)^2}}{m((\Omega^2 - \omega^2)^2 + 4\eta^2 \Omega^2) \sqrt{\omega^2 - \eta^2}} e^{-\eta t} \sin \left(t \sqrt{\omega^2 - \eta^2} + \phi_1 \right), \quad (9) \\
\cos(\phi_1(\theta)) &= \frac{\Omega^2 - \omega(\theta)^2 + 2\eta^2}{\sqrt{4\eta^2(\omega(\theta)^2 - \eta^2) + (\Omega^2 - \omega(\theta)^2 + 2\eta^2)^2}}, \\
\cos(\phi_2(\theta)) &= \frac{\omega(\theta)^2 - \Omega^2}{\sqrt{(\Omega^2 - \omega(\theta)^2)^2 + 4\eta^2 \Omega^2}}.
\end{aligned}$$

В разделе 2.1.3 приводится приближённое решение (9) в пределе ($\eta \rightarrow 0+$). Приближённому решению задач динамики линейных цепочек под действием внешнего нагружения посвящены работы С. Каннаса, Э. Моколе, Д. Прато, П. Хеммера и других авторов. Единственный ранее полученный результат, относящийся к нестационарному приближённому решению, был получен П. Хеммером: он показал, что в бесконечной линейной цепочке при возбуждении максимальной в полосе пропускания частотой наблюдается резонанс. В остальных случаях находили лишь стационарное решение, соответствующее возмущениям только с частотой нагружения при $t \rightarrow \infty$. Нахождения приближённого нестационарного решения рассматриваемой задачи в пределе $\eta \rightarrow 0+$ производится согласно плану:

1. Вклад от вынужденных колебаний, $\dot{u}_n^\Omega$, вычисляется в замкнутой форме.
2. Вклад от собственных колебаний, $\dot{u}_n^\omega$, записывается в виде суммы вкладов от сингулярной и стационарной точек ($\dot{u}_{n,cr}^\omega$ и $\dot{u}_{n,st}^\omega$ соответственно). Выражения для вкладов оцениваются при $\omega_e t \rightarrow \infty$ (в частности, вклад $v_{n,st}^\omega$ оценивается на подвижном фронте методом стационарной фазы (подходом, предложенным С.Н. Гавриловым и Е.В. Шишкиной в рамках дискретных задач)).

Приближённое решение при произвольной частоте нагружения представлено в таблицах 3 и 4, где $\gamma(\omega) = 2 \operatorname{arccosh}(\omega/(2\omega_e))$ — дисперсионное соотношение для линейной цепочки, соответствующее полосе непропускания ($\omega > 2\omega_e$).

Таким образом, нагружение частотой строго в полосе пропускания приводит к распространению волн с двумя фронтами; нагружение частотой строго в полосе непропускания приводит к возникновению экспоненциально затухающей при удалении от границы неоднородной волны и бегущего возмущения, амплитуда которого затухает во времени как $t^{-3/2}$. Нагружение частотой $\Omega = 2\omega_e$, как и ожидалось, приводит к росту во времени амплитуды возмущений (резонансу). Однако резонанс наблюдается только в точках вдали от границы. Вблизи же границы резонанса нет (см. рисунок 5).

Ω/ω_e	$\dot{u}_n^\Omega$	$\dot{u}_{n,\text{cr}}^\omega$
< 2	$\frac{(-1)^{n+1}F_0}{m\omega_e} \mathcal{T}_{2n+1} \left(\frac{\Omega}{2\omega_e} \right) \cos(\Omega t)$	$\frac{F_0 \mathcal{T}_{2n+1} \left(\sqrt{1 - \frac{\Omega^2}{4\omega_e^2}} \right)}{m\omega_e} \sin(\Omega t)$
2	$\frac{(-1)^{n+1}F_0}{m\omega_e} \cos(2\omega_e t)$	$\frac{(-1)^n F_0 (2n+1)}{m\sqrt{\pi\omega_e^3 t}} \sin \left(2\omega_e t + \frac{\pi}{4} \right)$
> 2	$\frac{(-1)^{n+1}F_0(1-e^{-\gamma(\Omega)})}{m\sqrt{\Omega^2-4\omega_e^2}} e^{-\gamma(\Omega)n} \cos(\Omega t)$	0
$\dot{u}_{n,\text{st}}^\omega = \frac{2F_0\Omega H(\omega_e t - n)nt \sin \left(\mathcal{W}_n t + \hat{\varphi}_n - \frac{\pi}{4} \right)}{\sqrt{\pi}m\omega_e \sqrt[4]{\omega_e^2 t^2 - n^2} ((\Omega^2 - 4\omega_e^2) t^2 + 4n^2)}$		
$\mathcal{W}_n(t) = 2\omega_e \left(\sqrt{1 - \frac{n^2}{\omega_e^2 t^2}} - \frac{n}{\omega_e t} \arccos \frac{n}{\omega_e t} \right), \quad \hat{\varphi}_n(t) = \arcsin \frac{n}{\omega_e t}$		

Таблица 3: Вклады вынужденных и свободных колебаний в скорость частицы на больших временах.

Ω/ω_e	$\dot{u}_n$
< 2	$\begin{cases} \dot{u}_n^\Omega + \dot{u}_{n,\text{cr}}^\omega + \dot{u}_{n,\text{st}}^\omega, & na < v^g(\Omega)t, \\ \dot{u}_{n,\text{st}}^\omega, & v^g(\Omega)t < na < v_s t \end{cases}$
2	$\begin{cases} \dot{u}_n^\Omega + \dot{u}_{n,\text{cr}}^\omega, & \dot{u}_{n \in \mathbb{B}}, \\ \dot{u}_{n,\text{st}}^\omega, & n \gg 1 \end{cases}$
> 2	$\dot{u}_{n,\text{st}}^\omega + \dot{u}_n^\Omega$
$v^g(\omega) = v_s \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{4\omega_e^2}} \text{sgn } \omega \text{ — групповая скорость}$	
$\mathbb{B}$ — множество точек, близких к границе, включая $n = 0$	

Таблица 4: Итоговое приближённое выражение для скоростей частиц на больших временах.

Раздел 2.1.4 посвящён выводу и анализу выражения для полной энергии, закачиваемой в линейную цепочку, проделанному с использованием подхода, предложенного А.М. Кривцовым и В.А. Кузькиным и предположения, что частота нагружения находится в пределах полосы пропускания (нагружение частотой в полосе непропускания приводит к остановке закачки энергии по достижении её определённого значения по причине затухания собственных колебаний). Подстановка точного решения для скорости границы (формула (9) при $n = 0$ и $\eta = 0$) в выражение для полной энергии, определяемой в виде $U \stackrel{\text{def}}{=} F_0 \int_0^t v_0(\tau) \sin(\Omega\tau) d\tau$, с последующими преобразованиями даёт результат, приведённый в таблице 5. Из анализа приближённого выражения для полной энергии следует, что задача о подводе энергии может рассматриваться относительно границы только при низких частотах нагружения; также устанавливаются причины поведения полной энергии во времени на основе приближённого решения задачи динамики цепочки. В разделе

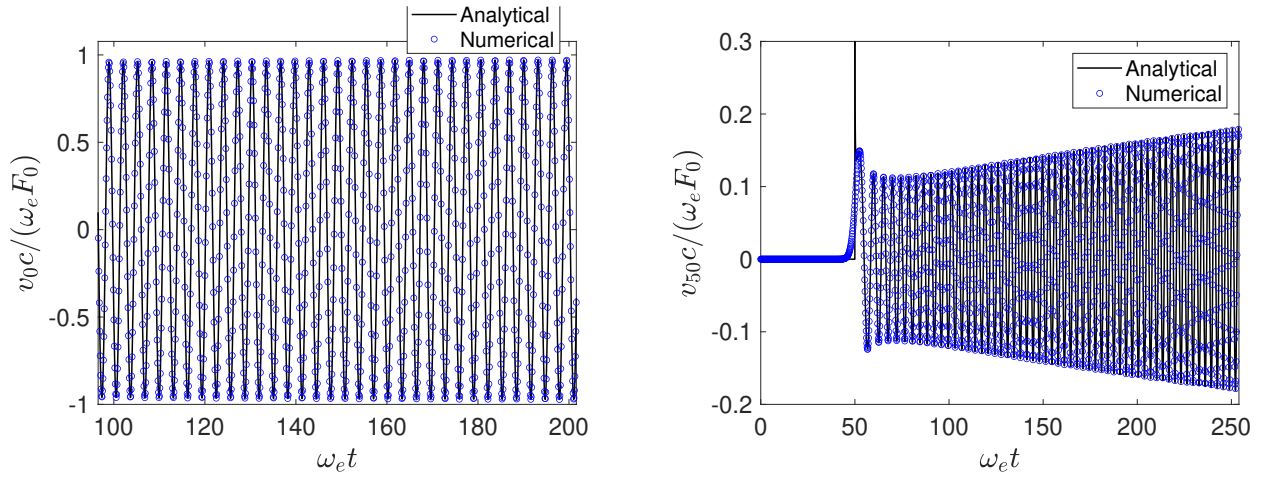


Рис. 5: Изменение во времени скорости частицы на границе (слева) и вдали от границы (справа) при нагружении частотой $\Omega = 2\omega_e$.

ле 2.1.5 рассматривается влияние слабой нелинейности на закачиваемую в цепочку энергию. Для получения оценки полной энергии используется ренормализованное дисперсионное соотношение, $\tilde{\omega} = \omega \sqrt{1 + \frac{3\beta}{2\pi c \omega_e^2} \int_{-\pi}^{\pi} \langle \hat{u}(t)^2 \rangle_t \omega(\theta)^2 d\theta}$, в котором $\hat{u}$ известно из задачи динамики цепочки в линейном приближении (из раздела 2.1.2), а $\langle \dots \rangle_t$ предусматривает усреднение по периоду осциллятора Дуффинга. Предполагается, что наибольший вклад в закачку энергии исходит от колебаний с частотами, находящимися в границах $\tilde{\omega}$ и от вынужденных колебаний с частотой Ω . Полученная оценка полной энергии на больших временах представлена в таблице 5 и именуется *квазилинейным приближением*. Из сравнения квазилинейного приближения с линейным приближением и численным решением следует, что линейная теория с высокой точностью работает при $\Omega \lesssim 1.5\omega_e$ (при частотах выше перестаёт работать, но работает квазилинейное приближение). Также показано, что квазилинейное приближение на больших, но не существенно больших временах описывает закачку энергии при частотах нагружения, лежащих в полосе непропускания (рисунок 6).

В **разделе 2.2** рассматривается подвод энергии в цепочку при кинематическом нагружении. Постановка задачи предполагает уравнение движения

$$\begin{aligned} m\ddot{u}_n &= c(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + \beta((u_{n+1} - u_n)^3 - (u_n - u_{n-1})^3), \quad n \in \mathbb{N}, \\ u_0 &= A_0 \sin(\Omega t), \quad \beta A_0^2/c \ll 1, \end{aligned} \quad (10)$$

с нулевыми начальными условиями для всех частиц $n \in \mathbb{N}$. Хотя полная энергия определяется в виде, отличном от случая с силовым нагружением ($U \stackrel{\text{def}}{=} A_0 \Omega \int_0^t f(\tau) \cos(\Omega \tau) d\tau$, $f(t) = m\ddot{u}_0 - c_1(u_1 - u_0)$), выражение для неё оценивается образом, аналогичным приведённому в разделе 2.1, как в линейной (раздел 2.2.1), так и в нелинейной (раздел 2.2.2) постановках. Полученные приближённые выражения для полной энергии, закачиваемой в цепочку, представлены в

$U, \omega_e t \rightarrow \infty$	$\beta = 0$	$\beta \neq 0$
Силовое нагружение	$\begin{cases} \frac{F_0^2 v^g(\Omega) a t}{2m v_s^2}, \Omega < 2\omega_e, \\ \frac{F_0^2 \sqrt{t}}{m \sqrt{2\pi \omega_e^3}}, \Omega = 2\omega_e \end{cases}$	$\frac{F_0^2 v^g(\tilde{\Omega}_1) a t}{2m v_s^2} \left(1 - \frac{\beta F_0^2}{c^3} \mu_1\right)$
Кинематическое нагружение	$\begin{cases} \frac{A_0^2 m \Omega^2 v^g(\Omega) t}{2a}, \Omega < 2\omega_e, \\ \frac{2\sqrt{2} c A_0^2 \sqrt{\omega_e t}}{\sqrt{\pi}}, \Omega = 2\omega_e \end{cases}$	$\frac{A_0^2 m \Omega^2 v^g(\tilde{\Omega}_2) t}{2a}$
$\tilde{\Omega}_1 = \Omega \left(1 - \frac{\beta F_0^2}{c^3} \mu_1\right), \quad \tilde{\Omega}_2 = \Omega \left(1 - \frac{\beta A_0^2}{c} \mu_2\right)$		
$\mu_1(\Omega) = \frac{3\omega_e^2}{8\pi^2} \iint_0^{2\pi} \frac{\left(\Omega \sin(\omega(\theta)t) - \omega(\theta) \sin(\Omega t)\right)^2 \cos^2 \frac{\theta}{2}}{(\Omega^2 - \omega(\theta)^2)^2} d(\omega_e t) d\theta$		
$\mu_2(\Omega) = \frac{3\omega_e^2}{8\pi^2} \iint_0^{2\pi} \frac{\left(\Omega \sin(\omega(\theta)t) - \omega(\theta) \sin(\Omega t)\right)^2 \sin^2 \theta}{(\Omega^2 - \omega(\theta)^2)^2} d(\omega_e t) d\theta$		

Таблица 5: Оценка полной энергии на больших временах, закачиваемой в цепочку на больших временах.

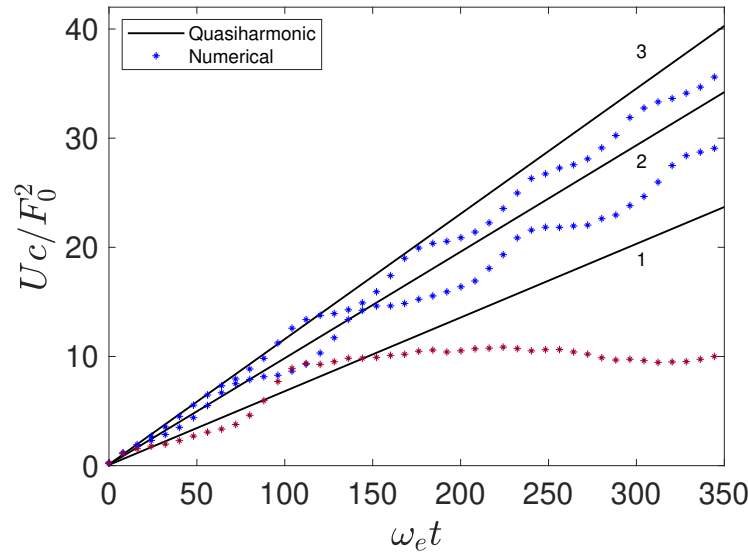


Рис. 6: Квазилинейное приближение для полной энергии, закачиваемой в полубесконечную цепочку на частотах $\Omega = 2.005\omega_e$ (3), $\Omega = 2.02\omega_e$ (2), $\Omega = 2.04\omega_e$ (1) при $\beta F_0^2/c^3 = 0.1$.

таблице 5. Отличие оценки полной энергии в линейном приближении (то есть для линейной цепочки) от той же для силового нагружения заключается в том, что, во-первых, задача о подводе энергии при кинематическом нагружении симметрич-

на относительно границы при всех частотах нагружения; во-вторых, максимум скорости закачки энергии наблюдается в области высоких частот (конкретно, при $\Omega/\omega_e = 2\sqrt{6}/3$), а не при низких. В нелинейном случае показано (рисунок 7), что частота максимальной скорости закачки энергии увеличивается с увеличением коэффициента нелинейности. Квазилинейное приближение с приемлемой

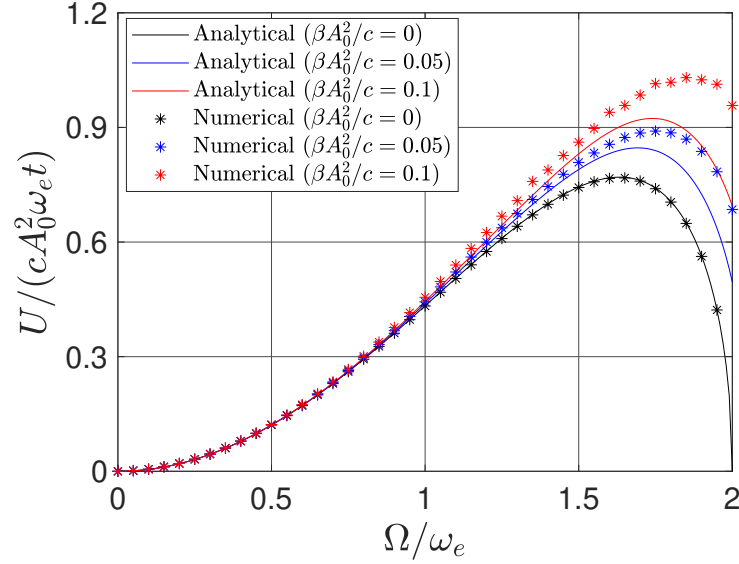


Рис. 7: Зависимости скорости закачки энергии в полубесконечную цепочку при кинематическом нагружении.

точностью описывает подвод энергии при низких и средних частотах нагружения (приблизительно меньше $1.6\omega_e$). На основе квазилинейного приближения и численного моделирования оценивается диапазон частот нагружения в полосе непропускания, позволяющих закачку энергии при силовом и кинематическом нагружениях. В разделе 2.3 приводится анализ результатов второй главы.

В третьей главе рассматривается изменение кинетических энергий, соответствующих различным степеням свободы, в цепочке частиц с прикреплёнными осцилляторами (также известной как «масса-в-массе», **раздел 3.1**) и гранецентрированной кубической (ГЦК) решётке (**раздел 3.2**).

Раздел 3.1 посвящён переносу энергии в цепочке «масса-в-массе» (рисунок 8). Данная цепочка регулярно рассматривается в работах, в частности, Н. Бёхлера, Е.Ф. Грековой, В.И. Ерофеева, Г. Милтона, А.В. Порубова и другими авторами. В

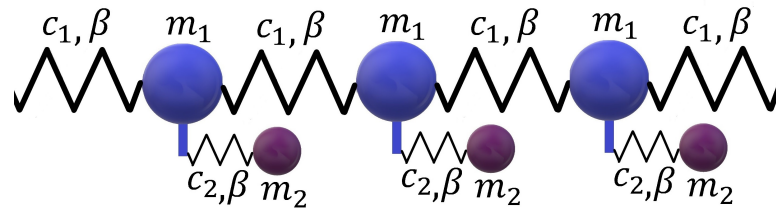


Рис. 8: Цепочка частиц с прикреплёнными массами («масса в массе»).

разделе 3.1.2 приведена постановка задачи для β — ФПУЦ цепочки, состоящей из частиц массой m_1 , к каждой из которых прикреплён осциллятор Дуффинга массой m_2 . Уравнение динамики ячейки j имеет вид

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{u}_{1,j} &= c_1 (u_{1,j+1} - 2u_{1,j} + u_{1,j-1}) + \beta \left((u_{1,j+1} - u_{1,j})^3 + (u_{1,j-1} - u_{1,j})^3 \right) \\ &+ c_2 (u_{2,j} - u_{1,j}) + \beta (u_{2,j} - u_{1,j})^3, \\ m_2 \ddot{u}_{2,j} &= c_2 (u_{1,j} - u_{2,j}) + \beta (u_{1,j} - u_{2,j})^3, \end{aligned} \quad (11)$$

где для простоты полагается $c_1 = c_2 = c$. Далее, числом 1 индексируются величины, соответствующие цепочке, числом 2 — прикреплённым осцилляторам. Начальные условия соответствуют заданному цепочке синусоидальному профилю распределения энергии $T^0(x) = T_b + \Delta T \sin \frac{2\pi x}{L}$, имеющему связь с экспериментом с установкой *thermal technique grating*. Здесь T_b и ΔT — константы, притом $\Delta T \ll T_b$; L — длина ячейки периодичности. Степень влияния нелинейности регулируется параметром $\tilde{\beta} = T_b \beta / c^2$. Перенос энергии описывается с помощью кинетических энергий, соответствующих цепочке (T_{11}) и прикреплённым осцилляторам (T_{22}). Поскольку начально заданный синусоидальный профиль кинетической энергии остаётся таковым в последующие моменты времени, целесообразно рассматривать изменение во времени амплитуд кинетических энергий: $A_{jj} = \frac{2}{L} \int_0^L T_{jj} \sin \frac{2\pi x}{L} dx$, $j = 1, 2$. Раздел 3.1.2 посвящён переносу энергии в линейной цепочке (при $\tilde{\beta} = 0$). В таком случае кинетические энергии, соответствующие цепочке и прикреплённым осцилляторам, существенно различны в процессе переноса энергии (см. рисунок 9). В

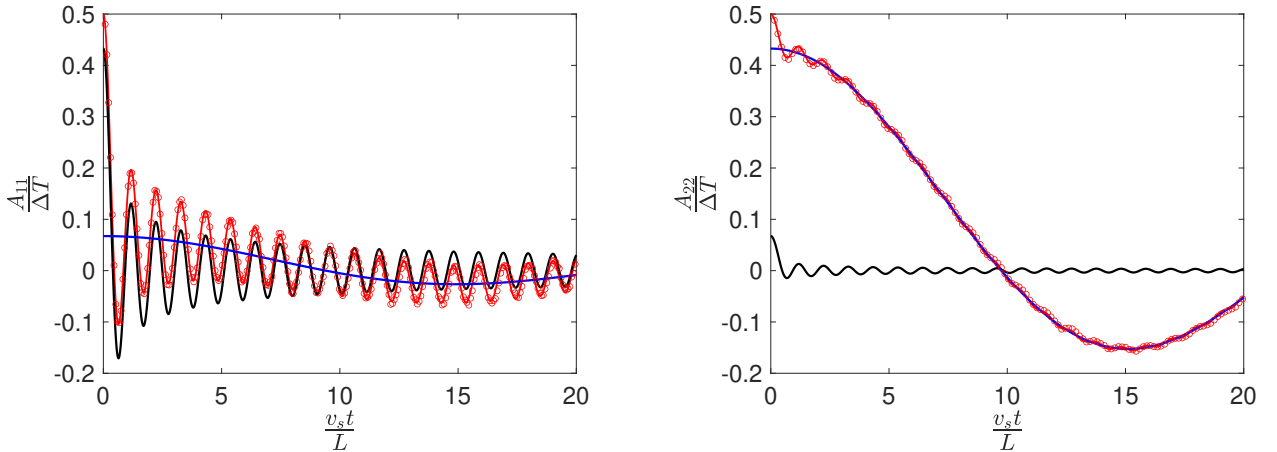


Рис. 9: Затухание амплитуд A_{11} (слева) и A_{22} (справа) кинетических энергий при $m_2/m_1 = 1/10$. Аналитическое (красная сплошная линия), численное (красные «кружки»), вклад акустической (чёрная сплошная линия) и оптической (синяя линия) веток дисперсионного соотношения.

диссертации показано, что при $m_2/m_1 \ll 1$ удаётся найти выражения для амплитуд кинетических энергий, соответствующих цепочке и прикреплённым осцилляторам

в замкнутой форме:

$$A_{11} \approx \frac{\Delta T}{2} J_0 \left(\frac{2\pi w_1 t}{L} \right), \quad A_{22} \approx \frac{\Delta T}{2} J_0 \left(\frac{2\pi w_2 t}{L} \right), \quad w_{1,2} = \max v_{1,2}^g, \quad (12)$$

где $w_{1,2}$ — групповые скорости, соответствующие акустической и оптической веток дисперсионного соотношения (построение дисперсионного соотношения рассматривается в разделе 3.1.2).

В разделе 3.1.3 рассматривается влияние нелинейности на затухание синусоидальных профилей кинетических энергий. Показывается, что при соотношении масс m_2/m_1 как порядка $O(1)$, так и при $m_2/m_1 \ll 1$, кинетические энергии, соответствующие подрешёткам, остаются различными в процессе затухания соответствующих синусоидальных профилей (рисунок 10), хотя с увеличением

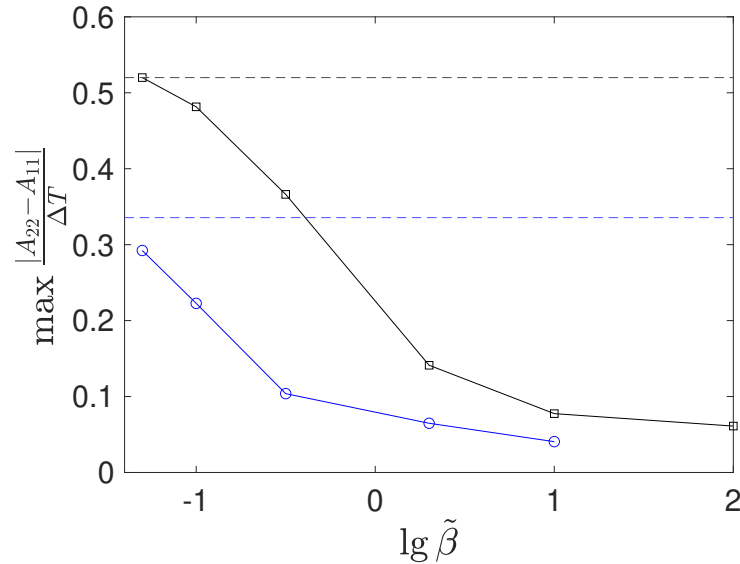


Рис. 10: Зависимость максимальной по модулю разницы амплитуд кинетических энергий от коэффициента нелинейности при $m_2/m_1 = 2$ (синие «кружки») и $m_2/m_1 = 1/10$ (чёрные квадраты). Решения в линейном приближении показаны соответствующими горизонтальными пунктирными линиями.

коэффициента нелинейности разница между энергиями уменьшается.

В разделе 3.2 рассматривается границентрированная кубическая (ГЦК) решётка, состоящая из одинаковых частиц. Частицы взаимодействуют парным потенциалом Леннард-Джонса $\Pi(r) = \varepsilon \left(\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right)$, где ε — энергия связи, притом учитывается взаимодействие только с ближайшими соседями. В начальный момент времени частицы имеют нулевые перемещения и случайные начальные скорости, заданные вдоль одного направления (оси x) и равномерно распределённые на отрезке $[-v_0\sqrt{2}; v_0\sqrt{2}]$. Следовательно, в начальный момент времени кинетические энергии, соответствующие различным пространственным направлениям, отличаются. В разделе 3.2.1 представлена постановка задачи в линейном

приближении: уравнения динамики решётки

$$m\ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} \mathbf{C}_{\alpha} \mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}), \quad (13)$$

где $\mathbf{x}$ — радиус-вектор частицы, $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = [u_x \ u_y \ u_z]^T$ — вектор-столбец, состоящий из компонент перемещений (проекций вдоль осей кубической симметрии: x, y, z); $\mathbf{a}_{\alpha}$ — вектор, соединяющий частицу с радиус-вектором $\mathbf{x}$ с соседней частицей; матрицы $\mathbf{C}_{\alpha}$ имеют вид

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_0 &= -4c\mathbf{I}, \mathbf{C}_1 = \mathbf{C}_{-1} = \frac{c}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}_2 = \mathbf{C}_{-2} = \frac{c}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{C}_3 &= \mathbf{C}_{-3} = \frac{c}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}_4 = \mathbf{C}_{-4} = \frac{c}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{C}_5 &= \mathbf{C}_{-5} = \frac{c}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}_6 = \mathbf{C}_{-6} = \frac{c}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (14)$$

где c — жёсткость пружины, равная $72\varepsilon/a^2$; $\mathbf{I}$ — единичная матрица. В разделе 3.2.2 строится дисперсионное соотношение для линейной ГЦК решётки. С этой целью строится динамическая матрица, Ω :

$$\Omega = -\frac{1}{m} \sum_{\alpha} \mathbf{C}_{\alpha} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}}, \quad (15)$$

где $\mathbf{k}$ — волновой вектор. В силу свойства матрицы Ω её собственные числа вещественны и положительны; они также равны квадратам веток дисперсионного соотношения, $\omega_j, j = 1, 2, 3$. В разделе 3.2.3 рассматривается переходный процесс в ГЦК решётке, сопровождающийся двумя процессами: колебаниями средней кинетической энергии, вызванные выравниванием кинетической и потенциальной энергий и перераспределение энергии по пространственным направлениям. Для описания первого процесса достаточно анализа стандартной (средней) кинетической энергии, формула которой имеет вид

$$T = \frac{T_0}{2} + T_1 + T_2 + T_3, \quad T_j = \frac{T_0}{6} \int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega_j(\mathbf{k})t) d\mathbf{k}, \quad (16)$$

где $T_j, j = 1, 2, 3$ — вклады веток дисперсионного соотношения в колебания кинетической энергии. Анализ формулы (16) показывает, что, во-первых, ветки T_2 и T_3 затухают как $1/t^{3/2}$, но ветка T_1 затухает медленнее, чем $1/t^{3/2}$ (примерно как $1/t$). Во-вторых, колебания средней кинетической энергии имеют 6 характерных

частот, определённых через Фурье-анализ формулы (16):

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_1/\omega_e &\approx 1.41 \pm 0.03, & \mathcal{W}_2/\omega_e &\approx 1.99 \pm 0.03, & \mathcal{W}_3/\omega_e &\approx 2.44 \pm 0.03, \\ \mathcal{W}_4/\omega_e &\approx 2.50 \pm 0.03, & \mathcal{W}_5/\omega_e &\approx 2.66 \pm 0.03, & \mathcal{W}_6/\omega_e &\approx 2.82 \pm 0.03. \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь $\mathcal{W}_1$ и $\mathcal{W}_2$ — характерные частоты, соответствующие вкладу первой ветки дисперсионного соотношения, T_1 ; $\mathcal{W}_1$, $\mathcal{W}_2$ и $\mathcal{W}_3$ — вкладу T_2 ; $\mathcal{W}_4$, $\mathcal{W}_5$ и $\mathcal{W}_6$ — вкладу T_3 . Некоторые из этих частот совпадают с максимумами веток дисперсионного соотношения, а именно: $\mathcal{W}_2 \approx \max_{\mathbf{k}} \omega_1 = 2\omega_e$, $\mathcal{W}_3 \approx \max_{\mathbf{k}} \omega_2 = \sqrt{6}\omega_e$, $\mathcal{W}_6 \approx \max_{\mathbf{k}} \omega_3 = 2\sqrt{2}\omega_e$. Дальнейший анализ показывает, что, во-первых, все характерные частоты, кроме $\mathcal{W}_3$ (которая соответствует разрыву групповой скорости), соответствуют нулевым групповым скоростям. Во-вторых, частота $\omega_1 = \mathcal{W}_2$ соответствует вырожденной стационарной точке (гессиан дисперсионного соотношения равен нулю), следовательно, соответствующая ей ветка затухает медленнее, чем $1/t^{3/2}$ (согласно теории метода стационарной фазы).

В разделе 3.2.4 рассматривается влияние нелинейности на перераспределение энергии по пространственным направлениям, для чего производится анализ разницы кинетических энергий $T_{xx} - T_{yy}$ (изменение её во времени представлено на рисунке 11).

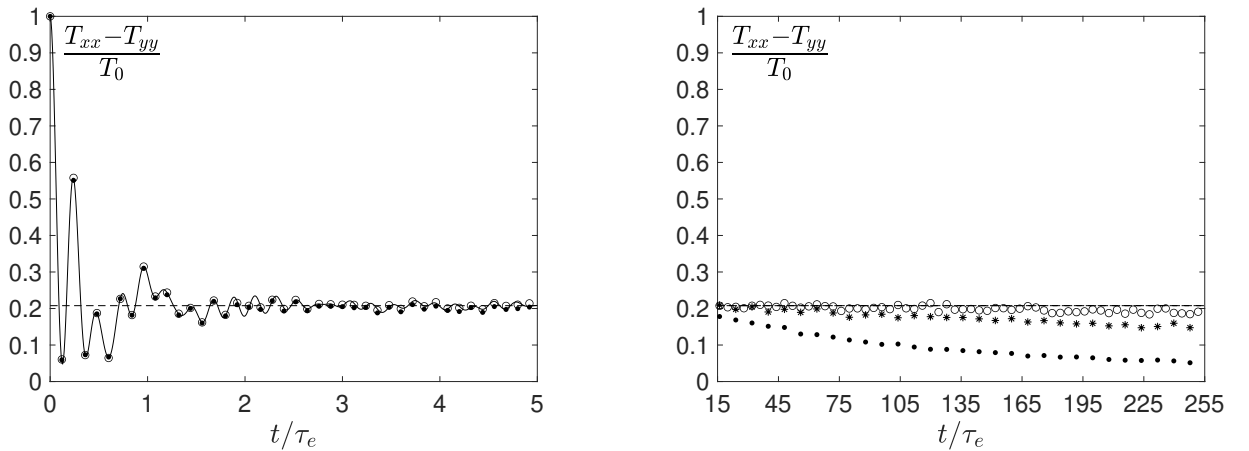


Рис. 11: Перераспределение кинетических энергий T_{xx} и $T_{yy} = T_{zz}$ в ГЦК решётке со взаимодействиями потенциалом Леннард-Джонса на малых (слева) и больших (справа) временах.

Из рисунка 11 видно, что перераспределение энергии имеет два характерных масштаба времени: на малых временах разница между энергиями стремится к значению $0.21T_0$, определяемой аналитически из задачи в линейном приближении. Этот процесс имеет масштаб времени периода колебаний частицы, $\tau_e = 2\pi\sqrt{m/c}$. На больших временах происходит постепенное выравнивание кинетических энергий и стремление к нулю их разницы. Этот эволюционный процесс имеет другой масштаб времени, τ_a , зависящий как от начальной энергии, T_0 так и от энергии связи ε . В ходе численного анализа предложена аппроксимация масштаба

времени τ_a :

$$\frac{\tau_e}{\tau_a} \approx \frac{T_0}{\varepsilon} + 1.496 \left(\frac{T_0}{\varepsilon} \right)^2 - 0.469 \left(\frac{T_0}{\varepsilon} \right)^3. \quad (18)$$

Тогда поведение функции $T_{xx} - T_{yy}$ на больших временах можно записать как

$$(T_{xx} - T_{yy})|_{t \gg \tau_e} = T_0 \Psi \left(\frac{t}{\tau_a} \right). \quad (19)$$

С помощью дополнительного численного анализа показано, что разница между кинетическими энергиями затухает по экспоненциальному закону:

$$\Psi \approx Ae^{-Bt/\tau_a}, \quad A = 0.044 \pm 0.004, \quad B = 0.046 \pm 0.005. \quad (20)$$

То есть, поведение кинетических энергий T_{xx} и T_{yy} на больших временах приблизительно может быть описано функцией Ψ , зависящей только от безразмерного времени t/τ_a . В разделе 3.3 приводится анализ результатов третьей главы.

В заключении сформулированы основные результаты, выносимые на защиту.

Публикации по теме диссертации

- [1] Ляжков С.Д., Бутузова Е.С. Подвод энергии в полубесконечную цепочку β -Ферми-Паста-Улама-Цингу при периодическом кинематическом нагружении //Прикладная математика и механика. – 2025. – Т. 89. – №. 4. – С. 546-558.
- [2] Liazhkov S. D. Energy supply into a semi-infinite β -Fermi–Pasta–Ulam–Tsingou chain by periodic force loading //Acta Mechanica. – 2024. – С. 1-23.
- [3] Liazhkov S. D. Unsteady thermal transport in an instantly heated semi-infinite free end Hooke chain //Continuum Mechanics and Thermodynamics. – 2023. – Т. 35. – №. 2. – С. 413-430.
- [4] Kuzkin V. A., Liazhkov S. D. Equilibration of kinetic temperatures in face-centered cubic lattices //Physical Review E. – 2020. – Т. 102. – №. 4. – С. 042219.
- [5] Liazhkov S. D., Kuzkin V. A. Unsteady two-temperature heat transport in mass-in-mass chains //Physical Review E. – 2022. – Т. 105. – №. 5. – С. 054145.
- [6] Ляжков С. Д. Переход к тепловому равновесию в гармонической ГЦК решетке //Неделя науки СПбПУ. – 2018. – С. 126-129.
- [7] Ляжков С. Д. О переносе тепла в одномерном гармоническом кристалле с прикрепленной массой //Неделя науки СПбПУ. – 2019. – С. 179-182.

- [8] Ляжков С. Д., Кузькин В. А. Двухтемпературный перенос тепловой энергии в β -ФПУТ цепочке с прикрепленными массами //Неделя науки ФизМех. – 2022. – С. 342-345.
- [9] Бутузова Е.С., Ляжков С.Д. Перенос энергии в полубесконечной цепочке Гука при кинематическом нагружении //Неделя науки ФизМех. – 2023. – С. 364-367.
- [10] Ляжков С. Д., Кузькин В. А. Многотемпературные термомеханические процессы в идеальных кристаллах //XIII Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике. – 2023. – С. 1141-1143.