

На правах рукописи



Ляжков Сергей Дмитриевич

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

1.1.8 — Механика деформируемого твёрдого тела

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург — 2025

Работа выполнена в Физико-механическом институте ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого».

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

Официальные оппоненты: **Голуб Михаил Владимирович**, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой теории функций ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет» (г. Краснодар);

Баимова Юлия Айдаровна, доктор физико-математических наук, заведующий лаборатории «Физика и механика углеродных материалов» ФГБУН «Институт проблем сверхпластичности металлов РАН» (г. Уфа).

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова РАН» (г. Нижний Новгород).

Защита состоится **29 апреля 2026 г. в 14:00** часов на заседании диссертационного совета Д 004.036.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Пермский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук» (филиал – Институт механики сплошных сред УрО РАН) по адресу: 614018, г. Пермь, ул. Академика Королёва, 1; тел: (342) 237-84-61; факс: (342) 237-84-87; сайт www.icmm.ru.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Института механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук.

Автореферат разослан «___» марта 2026 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических наук,
доцент



/ А.Л. Зуев

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. 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 процессах, описание которых макроскопическими моделями классической механики сплошных сред может оказаться затруднительным из-за необходимости выбора подходящих определяющих соотношений.

Одним из примеров таких процессов является 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 основными носителями тепловой энергии в диэлектриках являются упругие волны, распространяющиеся в кристаллической решётке, 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 прикладывается внешнее воздействие.

Необходимость выбора определяющих соотношений 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. После прекращения внешнего воздействия система стремится вернуться в равновесное состояние. 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.

Таким образом, исследование переноса и перераспределения энергии в дискретных средах с учётом влияния граничных условий и нелинейных эффектов является актуальной задачей механики деформируемого твёрдого тела. В настоящей работе данное исследование проводится на примере простых дискретных

моделей деформируемого твёрдого тела: одномерных цепочек и гранецентрированной кубической решётки. Особое внимание уделяется поведению дискретной среды вблизи границы (свободной либо подверженной силовому/кинематическому воздействию), сравнению результатов для бесконечных и полубесконечных сред и влиянию нелинейности.

Степень разработанности темы исследования. Динамические процессы в деформируемых телах освещены многочисленными исследованиями. В частности, численному моделированию таких процессов посвящены работы А.К. Абрамяна, 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, В.П. Матвеевко, Ю.И. Мещерякова, Н.Ф. Морозова, В.П. Мясникова, А.А. Назарова, О.Б. Наймарка, А.Л. Свисткова, П.Е. Товстика, В.М. Фомина, У. Хувера и других авторов. В настоящей работе рассматривается аналитическое описание нестационарных волновых процессов в дискретных моделях деформируемого твёрдого тела.

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, У. Гамильтон был первым, кто решил задачу динамики данной цепочки. Динамика той же модели привлекала внимание множества авторов; к числу наиболее ранних её исследователей относятся М. Коппер, Т. Хавелок, Э. Шрёдингер, М. Борн, Т. Карман, Н.Е. Жуковский, Л. Бриллюэн, Л.И. Мандельштам и П. Хеммер. Теория динамики линейных кристаллических решёток представлена в работах А.Аскара, М. Борна, Л. Бриллюэна, Дж. Вейсса, Дж. Займана, И.П. Ипатовой, А.М. Косевича, Х.Куня, А. Марадудина, Э. Монтролла и П. Хеммера. 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. Генье, Е.А. Корзниковой, Ю.А. Косевича, М.А. Ковалёвой, Л.И. Маневича, А.И. Мелькера, М. Милке, Э. Монтролла, А.А. Овчинникова, Дж. Паста, В.А. Полянского, А.В. Порубова, А.В. Савина, Р.Х. Сабирова, Л.И. Слепьяна, М. Тоды, Д.В. Трещёва, С. Улама, Э. Ферми, Г. Флаха, М. Цингу, Р. Хомерики и других авторов. Переносу энергии в дискретных средах посвящены многие работы, в частности, П. Аллена, Ю.А. Баимовой, Дж. Волфе, С.Н. Гаврилова, О.В. Гендельмана, 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, Ю.А. Мочаловой, В. Мюллера, А. Полити, А.В. Порубова, И. Пригожина, Р. Рубина, Ч. Тяня, Г. Чена, Д. Чена, Е.В. Шишкиной, Х. Шпона и других авторов. В работах данных авторов основное внимание уделяется бесконечным линейным кристаллическим решёткам. В настоящей работе делается акцент на исследовании влияния граничных условий (свободных, кинематических, силовых) и нелинейных эффектов на перенос энергии.

Наряду с переносом энергии в дискретных средах, регулярно исследуются процессы, происходящие вдали от теплового равновесия, в которых имеет место

перераспределение энергии по степеням свободы, для описания которого вводится несколько температур. Многотемпературным моделям механики деформируемых твёрдых тел посвящены работы, в частности, С. И. Анисимова, А.К. Беляева, М. Гартина, Д.Жоу, Д.А. Индейцева, Р. Ковача, Дж. Лебовица, Ю.В. Петрова, С.Л. Соболева, У. Хувера и других авторов. В настоящей 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 на примере одномерных цепочек и границентрированной кубической решётки. Для достижения этой цели решаются следующие задачи:

1. Нахождение аналитического решения, описывающего перенос энергии в полубесконечной линейной цепочке со свободной границей в континуальном приближении как при начальном распределении энергии, так и при подводе энергии;
2. Решение нестационарной задачи динамики линейной цепочки при силовом граничном условии, заданном периодической внешней силой;
3. Вывод выражений для полной энергии, закачиваемой в цепочку при силовых и кинематических граничных условиях, с учётом влияния нелинейности;
4. Исследование влияния нелинейности на перераспределение энергии между степенями свободы в цепочке масса-в-массе и границентрированной кубической решётке.

Методология и методы исследования. Для аналитического решения задач динамики полубесконечных цепочек при наличии свободной границы и при силовых граничных условиях использовалось дискретное косинус-преобразование. Для упрощения и анализа полученных аналитических решений применялись асимптотические методы, в частности, метод стационарной фазы. Для численного решения уравнений динамики использовались симплектические методы интегрирования.

Научная новизна.

1. Получено аналитическое решение, описывающее перенос энергии упругими волнами в полубесконечной линейной цепочке со свободной границей при стохастическом воздействии в континуальном приближении. Показано, что при воздействии в виде белого шума математическое ожидание кинетической энергии частиц вблизи границы изменяется во времени иначе, чем частиц вдали от границы.
2. Получено приближённое нестационарное решение задачи динамики полубесконечной линейной цепочки при наличии силового граничного условия, заданного периодической внешней силой. Впервые показано, что силовое нагруже-

ние на границе на максимальной частоте в полосе пропускания не приводит к росту амплитуды колебаний частиц вблизи границы (в отличие от бесконечной цепочки, в которой рост наблюдается для всех частиц).

3. Впервые получены приближённые формулы для полной энергии, закачиваемой в слабонелинейную полубесконечную цепочку при силовом и кинематическом граничных условиях на больших временах, в том числе при нагружении на частоте в полосе непропускания линейной цепочки. Показано, что нелинейность и кинематическое граничное условие приводят к увеличению частоты нагружения, при которой скорость закачки энергии имеет максимум.

4. Впервые показано, что в процессе переноса энергии в цепочке масса-в-массе кинетические энергии, соответствующие цепочке и прикреплённым осцилляторам, могут различаться как при слабой, так и при сильной нелинейности.

5. Получена формула, аппроксимирующая зависимость масштаба времени выравнивания кинетических энергий, соответствующих различным пространственным направлениям, от начальной энергии в нелинейной гранецентрированной кубической решётке.

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 на основе метода transient thermal grating (TTG). Результаты также могут способствовать развитию теории переноса тепловой энергии на наноуровне (и устройств для контроля данного процесса: тепловые диоды и транзисторы), в частности, при решении задач, связанных с отводом тепловой энергии от различных нано- и микропроцессорных устройств.

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 (или нагруженной) 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, изложенные в главах 1 и 2, могут быть также использованы для совершенствования моделей динамики технических систем (бурильных колонн, валопроводов, подвижного состава) или строительных систем (стержневых конструкций) посредством установления аналогий между ними и дискретными моделями. Результаты главы 3 могут быть использованы для построения определяющих соотношений в механике многокомпонентных сплошных сред или метаматериалов, находящихся в неравновесных условиях.

Положения, выносимые на защиту:

1. В полубесконечной линейной цепочке со свободной границей любое начальное распределение кинетической энергии затухает вблизи границы на больших

временах быстрее, чем в бесконечной цепочке.

2. В полубесконечной линейной цепочке со свободной границей при отсутствии трения и стохастическом воздействии в виде белого шума математическое ожидание кинетической энергии для частиц вблизи границы на больших временах стремится к константе, а вдали от границы — неограниченно растёт (в отличие от бесконечной цепочки, в которой энергии всех частиц растут).

3. В полубесконечной линейной цепочке при силовом граничном условии, заданном периодической внешней силой с частотой, соответствующей нулевой групповой скорости, рост амплитуды колебаний частиц вблизи границы не наблюдается (в отличие от бесконечной цепочки, в которой рост наблюдается для всех частиц).

4. Приближённые выражения для полной энергии, закачиваемой в слабонелинейную полубесконечную цепочку при силовом и кинематическом граничных условиях на больших временах, в том числе при нагружении на частоте в полосе непропускания линейной цепочки.

5. В нелинейной цепочке масса-в-массе 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. Колебания средней кинетической энергии в линейной гранецентрированной кубической решётке имеют шесть основных частот, а амплитуда колебаний затухает обратно пропорционально времени.

7. Формула, аппроксимирующая зависимость масштаба времени выравнивания кинетических энергий, соответствующих различным пространственным направлениям, от начальной энергии в нелинейной гранецентрированной кубической решётке.

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

Апробация работы. Результаты работы представлялись на ежегодных школах-конференциях «Актуальные проблемы механики» (Санкт-Петербург, 2019—2022; Великий Новгород, 2024); конференциях «Неделя науки СПбПУ» (Санкт-Петербург, 2018, 2019), «Неделя науки ФизМех» (Санкт-Петербург, 2022—2024); семинаре научного центра «Корнинг» в 2021 г. (руководитель семинара — А.В. Доценко); XXXVII Фортковской ежегодной международной конференции «Уравнения состояния вещества» (Эльбрус, 2022); Санкт-Петербургском городском семинаре по механике в 2022 г. (руководитель семинара — чл.-корр. РАН Д.А. Индейцев); V Всероссийской конференции молодых учёных механиков «YSM-2022» (Сочи, 2022); VI Международной конференции «Моделирование нелинейных процессов и систем (MNPS — 2022)» (Москва, 2022); конференции «NODYCON 2023» (Рим, 2023); XIII Всероссийском съезде по теоретической и прикладной механике (Санкт-Петербург, 2023); XXXIII Всероссийской конференции «Математическое модели-

рование в естественных науках» (Пермь, 2024); XI Всероссийском молодёжном научном форуме с международным участием «OpenScience» (Гатчина, 2024). В полном объёме результаты диссертации представлялись на семинарах по механике, основанном Д.А. Индейцевым (руководитель семинара — А.Б. Фрейдин); акустическом семинаре имени Д.П. Коузова (руководитель семинара — А.П. Киселёв); семинарах Высшей школы теоретической механики и математической физики СПбПУ (руководитель семинара — чл.-корр. РАН А.М. Кривцов); семинаре математико-механического факультета СПбГУ (руководитель семинара — академик РАН Ю.В. Петров).

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».

Полнота изложения материала. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 5 работах. Все результаты опубликованы в изданиях, входящих в базы цитирования WoS/Scopus 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, получены совместно с соавтором работы [1]) и главе 3 (результаты, приведённые в разделах 3.2.3 и 3.2.4, получены совместно с соавтором работы [4]). 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, использовались подходы из работ А.М. Кривцова, В.А. Кузькина, С.Н. Гаврилова и Е.В. Шишкиной.

Структура и объём диссертации. Диссертация изложена на 209 страницах (основной текст занимает 172 страницы) и состоит из введения, трёх глав, заключения и списка литературы. Диссертация содержит 54 рисунка. Библиография включает 311 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 соответственно; Γ — гамма-функция; \mathcal{T}_k — полином Чебышева первого рода степени k ; δ — дельта-функция Дирака; $\delta_{k,k'}$ — символ Кронекера; J — функция Бесселя первого рода; K — модифицированная функция Бесселя второго рода; (\dots) и (\dots) — производные по времени первого и второго порядка; t — время; \top — символ транспонирования; $\langle \dots \rangle$ — математическое ожидание; 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 (рис. 1). Считается, что частицы взаимодействуют только с

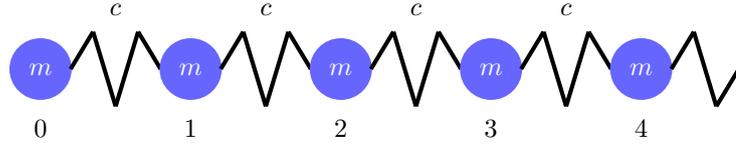


Рис. 1: Полубесконечная цепочка со свободной границей.

ближайшими соседями. Рассматриваются два случая: 1. В начальный момент времени в цепочке задано распределение средней по ансамблю кинетической энергии (**раздел 1.1**). 2. В цепочку производится стохастический подвод энергии произвольного типа (**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. Начальные условия имеют вид:

$$u_n = 0, \quad v_n = v_n, \quad (2)$$

где v_n — некоррелированные случайные начальные скорости частиц, удовлетворяющие условию задания распределения кинетической энергии, T_n^0 : $v_n = \rho_n \sqrt{2T_n^0/m}$, 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

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

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

где $\omega(\theta) \stackrel{\text{def}}{=} 2\omega_e \left| \sin \frac{\theta}{2} \right|$ — дисперсионное соотношение, соответствующее полосе пропускания; $\dot{\Phi}_{n,j}$ — фундаментальное решение задачи динамики полубесконечной цепочки со свободной границей. Решение (3) получается 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.

Рассматривается бесконечное множество реализаций, отличающихся слу-

чайными начальными условиями. В разделе 1.1.3 вводится средняя 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 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*.

Формула (5) 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 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). В диссертации показано, что то же решение (с точностью до множителя) получается из кинетической теории для невзаимодействующих частиц. 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 $T^0(x) = \mathcal{A}\delta(x - h)$, где $\mathcal{A} = mv_s^2 a / 2$. Из рисунка 2 видно, 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, 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. Вместо начального распределения энергии задаётся произвольный стохастический подвод энергии.

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

Таблица 1: Континуальные решения для кинетической энергии. 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).

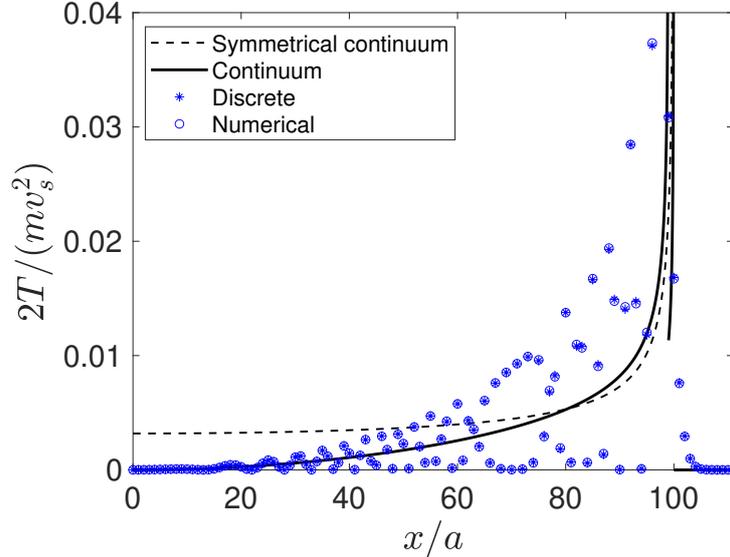


Рис. 2: Распределение кинетической энергии при возмущении в точке $h = 0$ в момент времени $\omega_e t = 100$.

В разделе 1.2.1 представлена постановка задачи в виде системы уравнений

Ланжевена:

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

где η — коэффициент вязкости 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 имеет вид:

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

где величина $\chi_n = mb_n^2/2$ — локальная скорость закачки энергии. В разделе 1.2.3 производится континуализация решения (7), результаты этой процедуры приведены в таблице 2. Разделы 1.2.4 и 1.2.5 посвящены соответственно сравнению

Тип решения	Формула для 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. Здесь $\chi(t, x)$ — такая функция скорости закачки энергии, что $\chi(t, na) \equiv \chi_n(t)$.

континуальных решений с дискретным и численным на примере мгновенного $\chi(t, x) = T^0(x)\delta(t)$ и внезапного $\chi(t, x) = 2\chi^0 H(t)\delta(x - h)$ точечного подводов энергии. В разделе 1.2.6 приводится сравнение аналитических и численных результатов. Результаты сравнения в случае без трения представлены на рисунке 3. Видно, что при подводе в цепочку без трения энергия растёт вдали от границы, но не растёт вблизи границы (в отличие от бесконечной цепочки, в которой энергия растёт в каждой точке). В разделе 1.3 приводится анализ результатов первой главы. Отмечается, в частности, что полученные результаты могут использоваться при

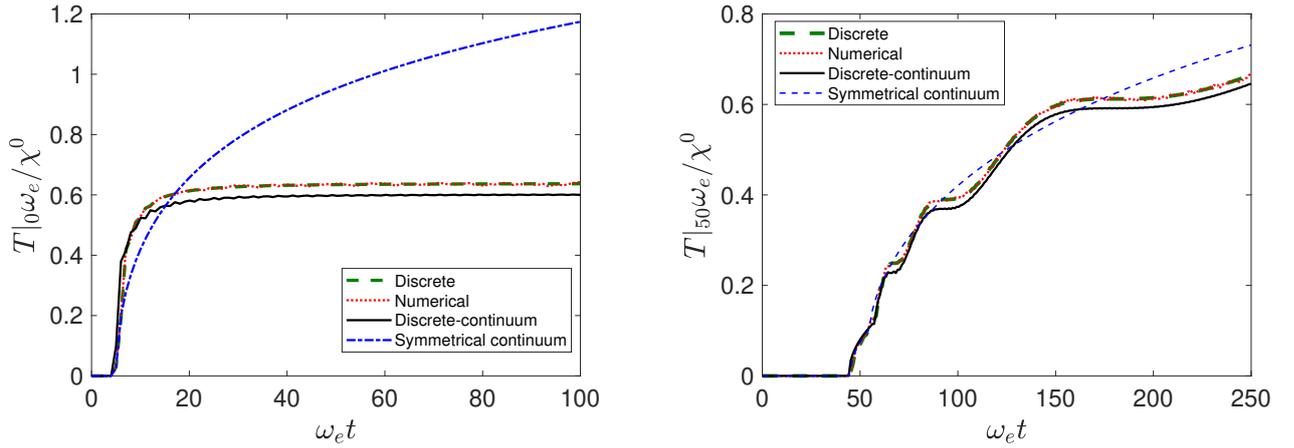


Рис. 3: Изменение во времени кинетической энергии в точках $x = 0$ (слева) и $x = 50a$ (справа) при подводе в точке $h = 5a$.

анализе экспериментов по волновому переносу тепловой энергии, проводимых на основе метода transient thermal grating.

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**) граничные условия. Первый случай соответствует заданной периодической силе $F_0 \sin(\Omega t)H(t)$, второй — заданному закону движения $A_0 \sin(\Omega t)$ (см. рис. 4).

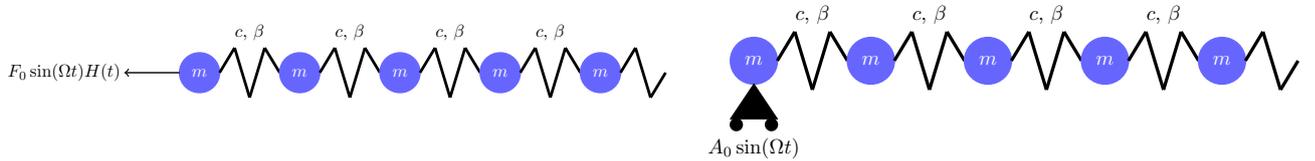


Рис. 4: Полубесконечная цепочка под действием силового (слева) и кинематического (справа) нагружений на границе.

Постановка задачи, соответствующая силовому нагружению (раздел 2.1.1), представляет собой 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. 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, отвечающего за вязкое трение ($-2\eta\dot{u}_n$), 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 реше-

ние для скоростей частиц:

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

В разделе 2.1.3 приводится приближённое решение (9) в пределе $\eta \rightarrow 0+$. Нахождение приближённого нестационарного решения рассматриваемой задачи в пределе $\eta \rightarrow 0+$ производится согласно плану:

1. Вклад от вынужденных колебаний, \dot{u}_n^Ω , вычисляется в замкнутой форме.
2. Вклад от собственных колебаний, \dot{u}_n^ω , записывается в виде $\dot{u}_{n,cr}^\omega + \dot{u}_{n,st}^\omega$ с последующей оценкой при $\omega_e t \rightarrow \infty$. Здесь первое слагаемое является вкладом от сингулярной точки, второе слагаемое получено путём континуализации вклада u_n^ω через его оценку на подвижном фронте.

Ω/ω_e	\dot{u}_n^Ω	$\dot{u}_{n,cr}^\omega$
< 2	$\frac{(-1)^{n+1} F_0}{m \omega_e} \mathcal{J}_{2n+1} \left(\frac{\Omega}{2\omega_e} \right) \cos(\Omega t)$	$\frac{F_0 \mathcal{J}_{2n+1} \left(\sqrt{1 - \frac{\Omega^2}{4\omega_e^2}} \right)}{m \omega_e} \sin(\Omega t)$
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
		$\dot{u}_{n,st}^\omega = \frac{2F_0 \Omega H(\omega_e t - n) n t \sin(\mathcal{W}_n t + \arcsin(n/(\omega_e t)) - \pi/4)}{\sqrt{\pi} m \omega_e^4 \sqrt{\omega_e^2 t^2 - n^2} ((\Omega^2 - 4\omega_e^2) t^2 + 4n^2)}$

Таблица 3: Вклады вынужденных и свободных колебаний в скорость частицы на больших временах. Здесь $\gamma(\omega) = 2 \operatorname{arccosh}(\omega/(2\omega_e))$ — дисперсионное соотношение, соответствующее полосе непропускания ($\omega > 2\omega_e$); $\mathcal{W}_n(t) = 2\omega_e \left(\sqrt{1 - \frac{n^2}{\omega_e^2 t^2}} - \frac{n}{\omega_e t} \arccos \frac{n}{\omega_e t} \right)$.

Приближённое решение при произвольной частоте нагружения представлено в таблицах 3 и 4. Таким образом, нагружение на частоте строго в полосе пропускания приводит к распространению волн с двумя фронтами; нагружение на частоте 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 на частоте $\Omega = 2\omega_e$ приводит к

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	$\dot{u}_{n,\text{st}}^\omega + \dot{u}_n^\Omega$

Таблица 4: Итоговое приближённое выражение для скоростей частиц на больших временах. Здесь $v^g(\omega) = v_s \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{4\omega_e^2}} \text{sgn } \omega$ — групповая скорость; \mathbb{B} — множество точек, близких к границе.

росту во времени амплитуды колебаний частиц. Однако, в отличие от бесконечной цепочки, где рост наблюдается в любой точке, в полубесконечной цепочке рост амплитуды колебаний частиц наблюдается только в точках вдали от границы. Вблизи же границы роста нет (см. рис. 5).

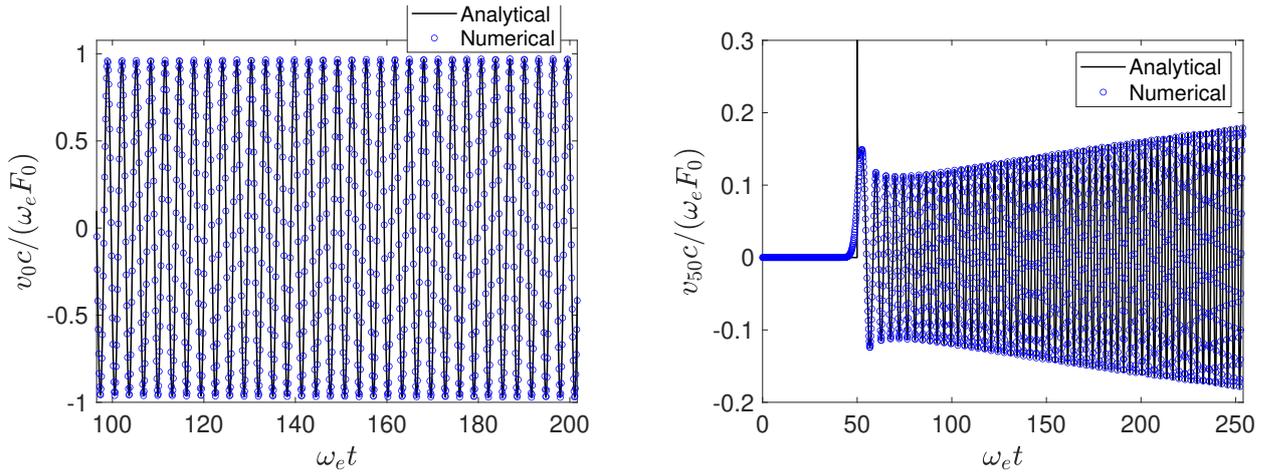


Рис. 5: Скорость частицы на границе (слева) и вдали от границы (справа) при нагружении на частоте $\Omega = 2\omega_e$.

Раздел 2.1.4 посвящён выводу и анализу выражения для полной энергии, закачиваемой в линейную цепочку при частоте нагружения, находящейся в пределах полосы пропускания. 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 симметричной относительно границы только при низких частотах нагружения; также устанавливаются причины поведения полной энергии во времени на основе приближённого решения задачи динамики цепочки. В разделе 2.1.5 рассматривается влияние слабой нелинейности на закачиваемую в цепочку энергию. Для

$U, \omega_e t \rightarrow \infty$	$\beta = 0$	$\beta \neq 0$
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: Приближённое решение для полной энергии, закачиваемой в полубесконечную цепочку на больших временах при силовом и кинематическом граничных условиях.

получения приближённого решения для 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 для частот Ω , приблизительно меньших $1.5\omega_e$ (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 (рис. 6).

Постановка задачи, соответствующая кинематическому нагружению (раздел 2.2.1), представляет собой уравнение движения

$$m \ddot{u}_n = c(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + \beta \left((u_{n+1} - u_n)^3 - (u_n - u_{n-1})^3 \right), \quad n \in \mathbb{N}, \quad (10)$$

$$u_0 = A_0 \sin(\Omega t), \quad \beta A_0^2 / c \ll 1,$$

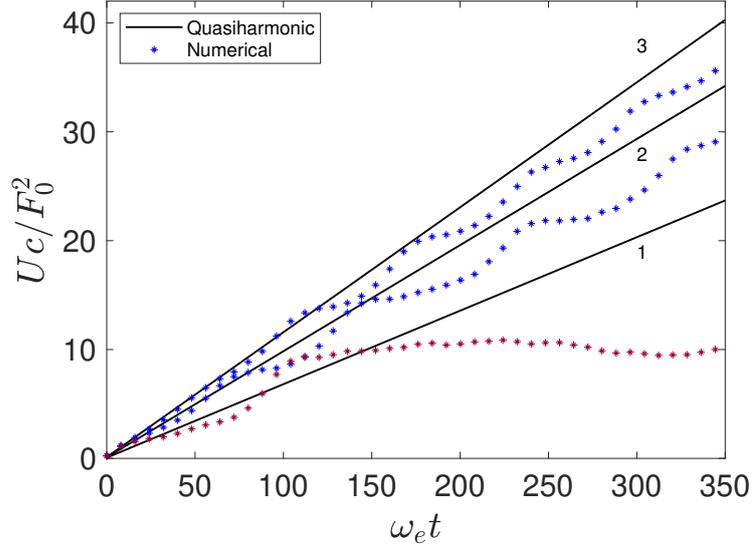


Рис. 6: Квазилинейное приближение для полной энергии, закачиваемой в полу-бесконечную цепочку на частотах $\Omega = 2.005\omega_e$ (3), $\Omega = 2.02\omega_e$ (2), $\Omega = 2.04\omega_e$ (1) при $\beta F_0^2/c^3 = 0.1$.

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 2.2.2), так и в нелинейной (раздел 2.2.3) постановках. Полученные приближённые выражения для полной энергии, закачиваемой в цепочку, представлены в таблице 5. Отличие оценки полной энергии в линейном приближении от той же для силового нагружения заключается в том, что, во-первых, задача о подводе энергии при кинематическом нагружении симметрична относительно границы при всех частотах нагружения; во-вторых, максимум скорости закачки энергии наблюдается в области высоких частот (при $\Omega/\omega_e = 2\sqrt{6}/3$). В нелинейном случае показано (рис. 7), что частота, соответствующая максимальной скорости закачки энергии, увеличивается с ростом коэффициента нелинейности. Квазилинейное приближение с приемлемой 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 перенос и перераспределение кинетических энергий, соответствующих различным степеням свободы, в цепочке масса-в-массе и гранецентрированной кубической (ГЦК) решётке.

Раздел 3.1 посвящён переносу энергии в цепочке масса-в-массе (рис. 8). Данная цепочка регулярно рассматривается в работах, в частности, Н. Бёхлера, Е.Ф. Грековой, В.И. Ерофеева, Г. Милтона, А.В. Порубова и других авторов. В разделе

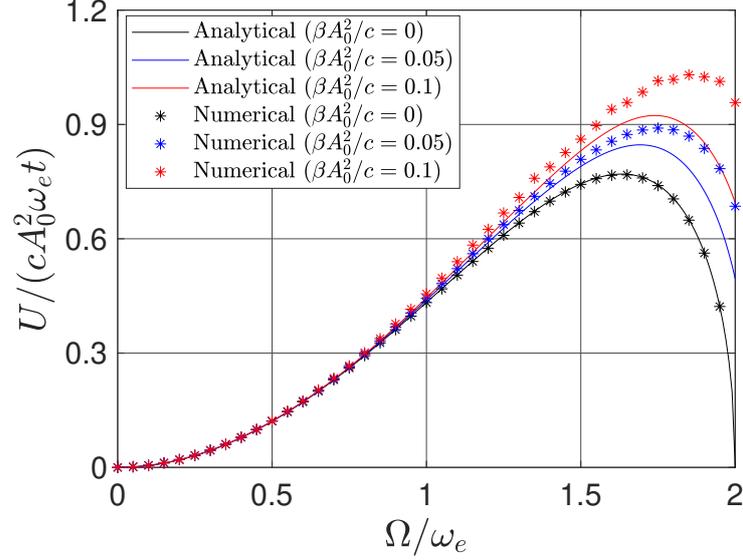


Рис. 7: Зависимости скорости закачки энергии в полубесконечную цепочку при кинематическом нагружении.

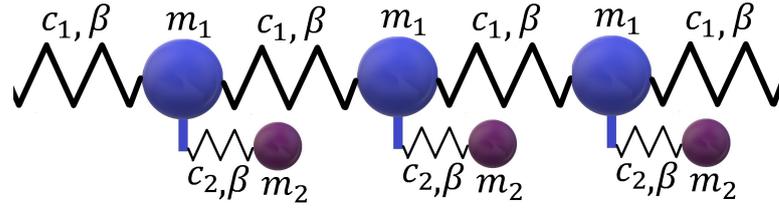


Рис. 8: Цепочка масса-в-массе.

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

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

Далее индекс 1 соответствует цепочке, индекс 2 — прикреплённым осцилляторам. Начальные условия соответствуют заданному цепочке синусоидальному профилю распределения энергии $T^0(x) = T_b + \Delta T \sin \frac{2\pi x}{L}$, где T_b и ΔT — константы, $\Delta T \ll T_b$; L — длина ячейки периодичности. Аналогичное распределение тепловой энергии возникает в эксперименте на основе метода thermal technique grating. 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 ($\tilde{\beta} = 0$). В таком случае кинетические энергии, соответствующие цепочке и прикреплённым осцилляторам, существенно различны в процессе переноса энергии (см. рис. 9). Показано, что при $m_2/m_1 \ll 1$

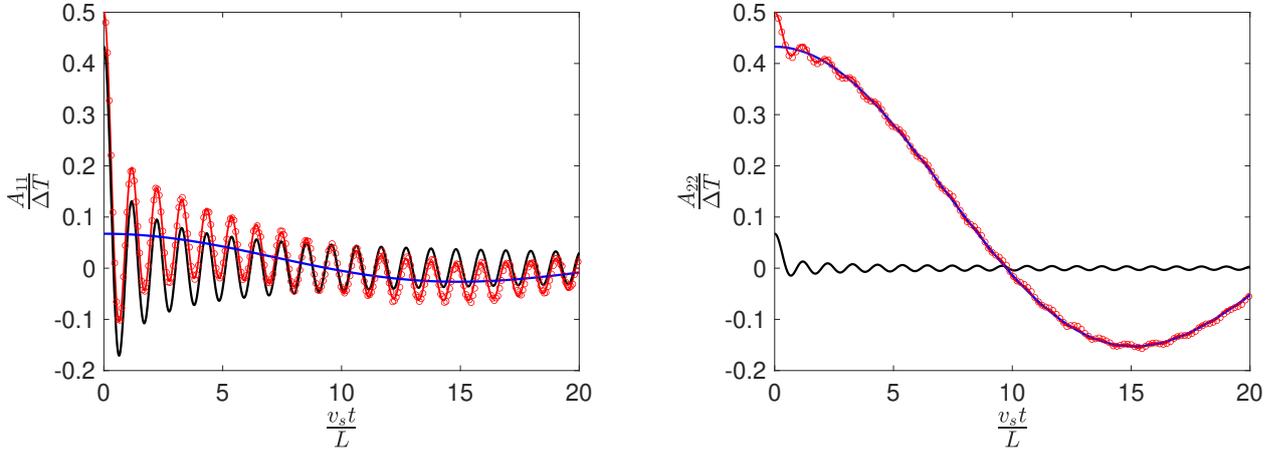


Рис. 9: Затухание амплитуд A_{11} (слева) и A_{22} (справа) кинетических энергий при $m_2/m_1 = 1/10$. Аналитическое (красная сплошная линия), численное (красные «кружки»), вклад акустической (чёрная сплошная линия) и оптической (синяя линия) веток дисперсионного соотношения.

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 веткам 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. Показано, 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 (рис. 10), хотя с увеличением коэффициента нелинейности разница между энергиями уменьшается.

В разделе 3.2 рассматривается границирированная 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. Учитывается взаимодействие только с ближайшими соседями. В начальный момент частицы имеют нулевые перемещения и случайные начальные скорости, заданные вдоль одного направления (оси x) и равномерно распределённые на отрез-

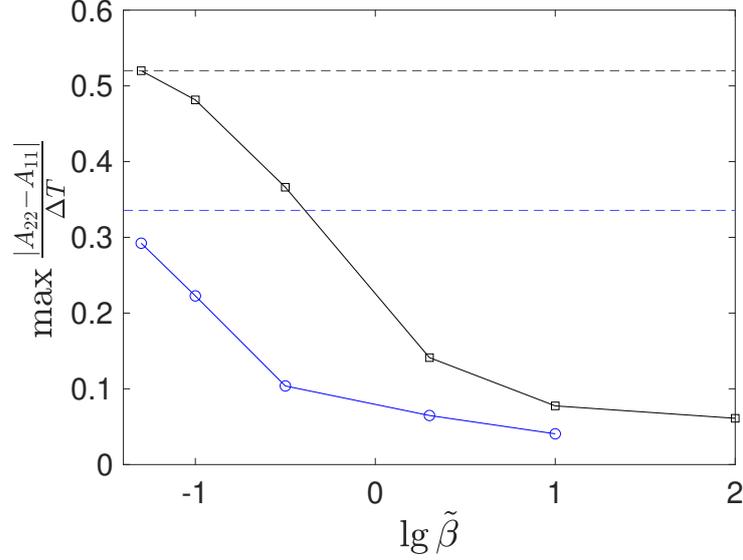


Рис. 10: Зависимость максимальной по модулю разницы амплитуд кинетических энергий от коэффициента нелинейности при $m_2/m_1 = 2$ (синие «кружки») и $m_2/m_1 = 1/10$ (чёрные квадраты). Пунктирными линиями показаны результаты, полученными в линейном приближении.

ке $[-v_0\sqrt{2}; v_0\sqrt{2}]$. Начальные кинетические энергии, соответствующие различным пространственным направлениям, отличаются. В разделе 3.2.1 представлена постановка задачи в линейном приближении. В разделе 3.2.2 строится дисперсионное соотношение для линейной ГЦК решётки. 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

$$T = \frac{T_0}{2} + T_1 + T_2 + T_3, \quad T_j = \frac{T_0}{6} \int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega_j(\mathbf{k})t) d\mathbf{k}, \quad (13)$$

где $T_j, j = 1, 2, 3$ — вклады веток дисперсионного соотношения в колебания кинетической энергии. Анализ формулы (13) 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 основных частот:

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_1/\omega_e &\approx 1.41 \pm 0.03, & \mathcal{W}_2/\omega_e &\approx 1.99 \pm 0.03, & \mathcal{W}_3/\omega_e &\approx 2.44 \pm 0.03, \\ \mathcal{W}_4/\omega_e &\approx 2.50 \pm 0.03, & \mathcal{W}_5/\omega_e &\approx 2.66 \pm 0.03, & \mathcal{W}_6/\omega_e &\approx 2.82 \pm 0.03. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь \mathcal{W}_1 и \mathcal{W}_2 — основные 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 все основные частоты, кроме \mathcal{W}_3 (которая соответствует разрыву групповой скорости), соответствуют нулевым групповым скоростям. Частота $\omega_1 = \mathcal{W}_2$ соответствует вырожденной стационарной точке (гессиан дисперсионного соотношения равен нулю), и соответствующая ей ветка затухает медленнее, чем $1/t^{3/2}$.

В разделе 3.2.4 рассматривается влияние нелинейности на перераспределение энергии по пространственным направлениям. Производится анализ разницы кинетических энергий $T_{xx} - T_{yy}$, изменение которой во времени представлено на рис. 11.

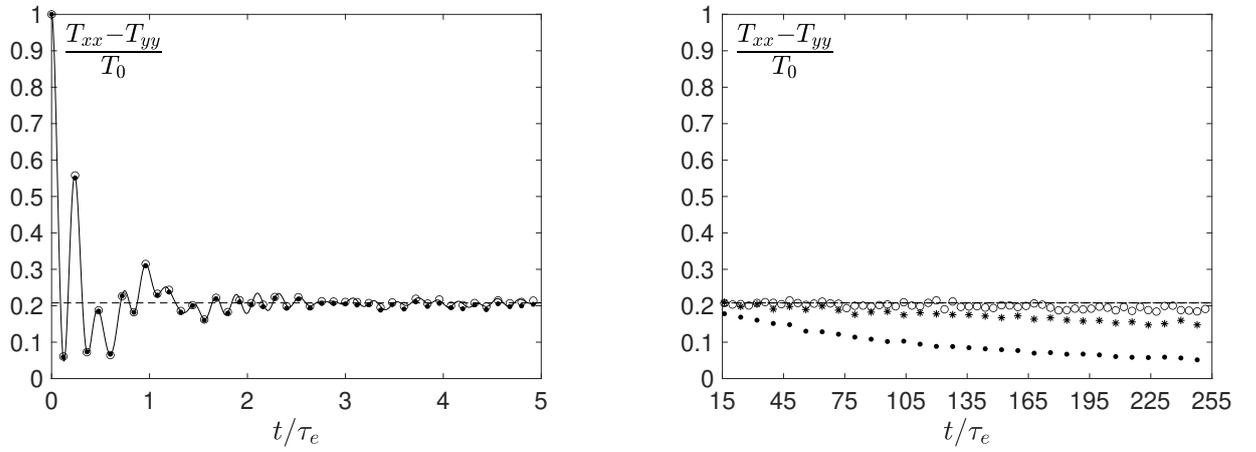


Рис. 11: Перераспределение кинетических энергий T_{xx} и $T_{yy} = T_{zz}$ в ГЦК решётке со взаимодействиями потенциалом Леннард-Джонса на малых (слева) и больших (справа) временах.

Из рисунка 11 видно, что перераспределение энергии имеет два характерных масштаба времени: на малых временах разница между энергиями стремится к значению $0.21T_0$, определяемому аналитически из задачи в линейном приближении. Этот процесс имеет характерный масштаб времени $\tau_e = 2\pi\sqrt{m/c}$. На больших временах происходит постепенное выравнивание кинетических энергий и стремление к нулю их разницы. Этот эволюционный процесс имеет другой масштаб времени, τ_a , зависящий от начальной энергии, T_0 . На основе анализа результатов молекулярно-динамического моделирования предложена аппроксимация масштаба времени τ_a :

$$\frac{\tau_e}{\tau_a} \approx \frac{T_0}{\varepsilon} + 1.496 \left(\frac{T_0}{\varepsilon} \right)^2 - 0.469 \left(\frac{T_0}{\varepsilon} \right)^3. \quad (15)$$

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

$$(T_{xx} - T_{yy})|_{t \gg \tau_e} = T_0 \Psi \left(\frac{t}{\tau_a} \right). \quad (16)$$

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 приведены итоги выполненного исследования в виде сформулированных **результатов, выносимых на защиту**:

1. Получено аналитическое решение, описывающее перенос энергии упругими волнами в полубесконечной линейной цепочке со свободной границей и произвольным начальным распределением кинетической энергии. Выведены формулы, описывающие изменение кинетической энергии в континуальном приближении в виде суммы вкладов падающей и отражённой волн. Показано, что любое начальное распределение кинетической энергии в полубесконечной цепочке затухает вблизи границы на больших временах 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 стохастическом воздействии в виде белого шума. Показано, в частности, что при отсутствии трения математическое ожидание кинетической энергии для частиц вблизи границы на больших временах стремится к константе, а на удалении от границы — неограниченно растёт (в отличие от бесконечной цепочки, в которой энергии всех частиц растут);

3. Получено приближённое нестационарное решение для скоростей частиц на больших временах в полубесконечной линейной цепочке при силовом граничном условии, заданном периодической внешней силой. В частности, показано отсутствие роста амплитуды колебаний частиц вблизи границы (в отличие от бесконечной цепочки, где рост наблюдается в каждой точке);

4. Проведён асимптотический анализ подвода энергии в одномерную полубесконечную цепочку с кубической нелинейностью при силовом и кинематическом граничных условиях. Получены приближённые выражения для полной энергии, закачиваемой в цепочку на больших временах, в том числе на частотах выше полосы пропускания линейной цепочки;

5. Получено аналитическое решение, описывающее затухание синусоидальных профилей кинетических энергий при волновом переносе энергии в цепочке 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 прикрепленным 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 энергий по пространственным направлениям в линейной границентрированной кубической решётке со случайными начальными скоростями. Показано, что колебания средней кинетической

энергии имеют шесть основных частот, а амплитуда колебаний затухает обратно пропорционально времени;

7. С использованием численного решения уравнений динамики гранецентрированной кубической решётки с взаимодействиями Леннарда-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 формула, аппроксимирующая зависимость масштаба времени данного процесса от начальной энергии.

Также обсуждаются перспективы дальнейшего исследования.

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.