

УДК 517.927,531,534.1

MSC2010 34A30,34B05,37L99,80A20

© А. И. Гудименко¹

Тепловой поток в одномерной полубесконечной гармонической решетке с поглощающей границей

Традиционно поглощающие граничные условия используются для ограничения бесконечных областей определения численной аппроксимации уравнений в частных производных. В настоящей работе простейшее из таких условий используется для получения аналитической аппроксимации решения задачи о распространении тепла в одномерной бесконечной цепи связанных гармонических осцилляторов, составленной из двух полубесконечных цепей с разными механическими характеристиками.

Ключевые слова: *гармоническая цепь, тепловой поток, поглощающие граничные условия.*

Введение

Задача о распространении тепла в одномерной бесконечной цепи связанных гармонических осцилляторов (кратко — гармонической цепи) из одной, первоначально более нагретой, половины цепи в другую рассматривалась в 60-х — начале 70-х годов прошлого века в работах [1–7]. Изучались случаи однородной цепи и цепей с изотопическими включениями. Были вычислены корреляционные функции частиц цепи и асимптотики при больших временах для распределений вдоль цепи температуры и теплового тока.

С другой стороны, с середины 70-х годов началось, инициированное работами [8–10], изучение искусственных граничных условий для волнового уравнения, заданного на бесконечной области. Решалась задача о минимизации отражения на границе, что требовалось для адекватной численной реализации уравнения. Такие граничные условия получили название поглощающих. Был предложен ряд методов конструирования поглощающих граничных условий, среди которых отметим метод работы [11], применяемый непосредственно к естественной полудискретной аппроксимации одномерного волнового уравнения. Напомним, что эта аппроксимация совпадает с уравнениями колебаний гармонической цепи.

¹ Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, г. Владивосток, ул. Радио, 7. Электронная почта: gudimenko@iam.dvo.ru

В настоящей работе мы возвращаемся к рассмотрению задачи о распространении тепла в бесконечной неоднородной гармонической цепи, но подходим к ней косвенно с учетом идеи об искусственных граничных условиях. А именно, мы изучаем движение тепла в полубесконечной однородной гармонической цепи с поглощающим граничным условием, соответствующим случаю, когда бесконечная цепь разделена на две полубесконечные однородные цепи с разными механическими характеристиками. В случае однородной цепи это условие совпадает с естественной полудискретной аппроксимацией однонаправленного одномерного волнового уравнения. В силу аппроксимационного свойства поглощающих граничных условий можно предположить, что решение задачи для полубесконечной цепи аппроксимирует решение соответствующей задачи для бесконечной цепи (см. Замечание 6 по поводу выполнения этого предположения).

Отметим, что задача о движении тепла в полубесконечной цепи с поглощающим граничным условием может представлять и независимый интерес, например, в контексте изучения ланжевеновских тепловых резервуаров. Такие резервуары используются для генерации потока тепла в одномерных кристаллах. В качестве необходимой компоненты определение этих резервуаров включает диссипацию энергии [12, 13].

Более конкретно, в статье вычисляются корреляции микроскопических состояний цепи и асимптотики этих корреляций на больших временах при каноническом распределении начальных состояний цепи, соответствующем фиксированной макроскопической температуре. Как следствие получены аналитические выражения для асимптотик локальной температуры и локального теплового тока в цепи. Задача решается в переменных Шредингера [14], которые удобны, в частности, для задания канонического распределения состояний цепи.

Помимо введения, статья включает пять разделов и приложение. Следуя подходу Гиббса к описанию статистических свойств механической системы [15], мы начинаем исследование с описания динамической системы, соответствующей рассматриваемой задаче (раздел 1). Особенность этой системы состоит в том, что она неконсервативна (энергия цепи диссипирует на границе). Поэтому естественная мера на ее фазовом пространстве неинвариантна относительно потока системы. Тем не менее, легко конструируется мера, зависящая от граничного условия, которая переносится этим потоком (вморожена в поток). Основным утверждением этого раздела является теорема 1. В ней устанавливается, что рассматриваемая динамическая система эквивалентна консервативной системе бесконечной гармонической цепи. Это позволяет выписать решение для рассматриваемой системы в терминах решения для бесконечной цепи.

В разделе 2 рассматриваемая задача формулируется как статистическая динамическая система и определяются исследуемые характеристики системы — локальная парциальная температура и локальный тепловой ток. В разделе 3 вычисляются корреляционные функции, в разделе 4 — их асимптотики. В разделе 5 аналитические результаты сравниваются с результатами численного анализа. В приложении (раздел 6) определяются координаты Шредингера, выводятся поглощающее граничное условие и выражение для локального микроскопического тока энергии.

1. Динамическая система

Определению рассматриваемой в работе динамической системы предположим ее обсуждение как начально-граничной задачи. В безразмерных координатах Шредингера эта задача формулируется следующим образом:

$$\frac{dx_l}{d\tau} = \frac{1}{2}(x_{l+1} - x_{l-1}), \quad l \geq 1, \quad t > 0; \quad (1)$$

$$x_l(0) = x_l^0, \quad l \geq 1, \quad (2)$$

$$x_0 + \lambda x_1 = 0, \quad \lambda \leq 0, \quad (3)$$

где l пробегает все целые числа из указанных интервалов и τ играет роль времени. Задача (1)–(3) описывает колебания однородной полубесконечной гармонической цепи при заданных начальных данных и поглощающем граничном условии (см. приложения П.1 и П.2). В настоящей статье мы ограничимся рассмотрением случая, когда $-1 \leq \lambda \leq 0$.

Замечание 1. Безразмерные координаты Шредингера $x_l := x_l(\tau)$ вводятся посредством соотношений $x_{2l+1} := q_{l+1} - q_l$ и $x_{2l} := \dot{q}_l$, где $q_l = q_l(t)$ — смещение l -ой частицы цепи от положения равновесия в момент времени t . Здесь q_l и t также безразмерные величины и $\tau := 2t$. Более обстоятельное определение координат и процедура их обезразмеривания приведены в приложении П.1. В терминах смещений задача (1)–(3) формулируется так:

$$\ddot{q}_l - q_{l-1} + 2q_l - q_{l+1} = 0, \quad l \geq 1, \quad t > 0;$$

$$q_l(0) = q_l^0, \quad \dot{q}_l(0) = \dot{q}_l^0, \quad l \geq 1,$$

$$\dot{q}_0 + \lambda(q_1 - q_0) = 0, \quad \lambda \leq 0.$$

Замечание 2. Хорошо известно, что гармоническую цепь можно рассматривать как дискретную аппроксимацию одномерной упругой среды. При этом уравнениям колебаний цепи соответствует одномерное волновое уравнение. В волновой механике параметр λ имеет смысл относительного волнового сопротивления (impedance ratio). Используя волновую терминологию, назовем границу *жесткой*, если импеданс цепи меньше граничного, $-1 < \lambda < 0$, и *мягкой*, если больше, $\lambda < -1$. Значениям $\lambda = 0$ и $\lambda = -\infty$ отвечает цепь с закрепленным (абсолютно жесткая граница) и свободным (абсолютно мягкая граница) концом соответственно. В настоящей статье рассматривается случай жесткой границы.

Введем также начальную задачу

$$\frac{dx_l}{d\tau} = \frac{1}{2}(x_{l+1} - x_{l-1}), \quad l \in \mathbb{Z}, \quad (4)$$

$$x_l(0) = x_l^0, \quad l \in \mathbb{Z}. \quad (5)$$

Она описывает свободные колебания бесконечной гармонической цепи и имеет решение [14]

$$x_l = \sum_{l' \in \mathbb{Z}} x_{l'}^0 J_{l-l'}(\tau). \quad (6)$$

Теорема 1. Задача (1)–(3) эквивалентна задаче (4), (5) при выборе в качестве (5) начальных условий (2), продолженных на неположительные $l \in \mathbb{Z}$ посредством соотношения

$$x_{-l} = (-1)^{l+1} \left[\lambda x_{l+1} + (\lambda^2 + 1) \sum_{l'=1}^l \lambda^{l-l'} x_{l'} \right]. \quad (7)$$

Задача (1)–(3) имеет решение

$$x_l = \sum_{l' \geq 1} x_{l'}^0 [J_{l'-l}(\tau) - (-1)^l \lambda J_{l'+l-1}(\tau)] - (-1)^l (\lambda^2 + 1) \sum_{l'' \geq 0} \sum_{l''' \geq 1} x_{l''}^0 \lambda^{l'} J_{l'+l''+l}(\tau). \quad (8)$$

Доказательство. Пусть (x_l) , $l \geq 0$, — произвольное решение задачи (1)–(3). Продолжим его посредством (7) на все $l \in \mathbb{Z}$. Непосредственно проверяется, что это продолжение удовлетворяет системе уравнений (4). Обратно, пусть (x_l) , $l \in \mathbb{Z}$, — произвольное решение системы (4) с начальными условиями (2), продолженными на $l \leq 0$ посредством (7). Проверка показывает, что любое решение системы (4) сохраняет (7). Так как (7) содержит граничное условие (3), мы заключаем, что (x_l) , $l \geq 0$, — решение задачи (1)–(3).

Соотношение (7) является решением рекуррентного уравнения

$$x_l + \lambda x_{l+1} + (-1)^l (x_{-l} + \lambda x_{-l+1}) = 0,$$

а это уравнение следует из требования, чтобы (6) удовлетворяло (3).

Решение (8) получается подстановкой (7) при $x_l = x_l^0$ в (6) с последующим преобразованием полученного выражения. \square

С задачей (1)–(3) свяжем динамическую систему с фазовым пространством $\mathbb{R}^{\mathbb{N}}$ (нуль не включается в \mathbb{N}), потоком ϕ_τ , который определяется в координатах $x = (x_1, x_2, \dots)$ уравнениями

$$\frac{dx_l}{d\tau} = \frac{1}{2}(x_{l+1} - x_{l-1}), \quad \frac{dx_1}{d\tau} = \frac{1}{2}(x_2 + \lambda x_1), \quad l \geq 2, \quad (9)$$

и нестационарной мерой

$$\mu := e^{-\lambda\tau/2} \prod_{l \geq 1} dx_l. \quad (10)$$

Покажем, что введенная мера переносится потоком системы.

Лемма 1. Мера (10) сохраняется на решениях системы (9).

Доказательство. Доказательство сводится к простой проверке. А именно, задаваясь произвольным решением $x = \phi_\tau(x^0)$ системы (9), переходим в (10) к координатам x^0 и берем производную полученного выражения по τ . Используя формулу дифференцирования определителя матрицы и учитывая, что след матрицы системы равен $\lambda/2$, получаем, что указанная производная равна нулю. \square

Замечание 3. В обычном определении динамической системы мера предполагается стационарной и инвариантной относительно потока системы [16].

С задачей (4), (5) также свяжем динамическую систему. Она описывается фазовым пространством $\mathbb{R}^{\mathbb{Z}}$, уравнениями движения (4) и инвариантной мерой $\prod_{l \in \mathbb{Z}} dx_l$. Эта система гамильтонова со скобкой Пуассона

$$\{F, G\} = \frac{1}{2} \sum_{l \in \mathbb{Z}} \left(\frac{\partial F}{\partial x_l} \frac{\partial G}{\partial x_{l+1}} - \frac{\partial F}{\partial x_{l+1}} \frac{\partial G}{\partial x_l} \right) \quad (11)$$

и гамильтонианом

$$H := \frac{1}{2} \sum_{l \in \mathbb{Z}} x_l^2. \quad (12)$$

В силу теоремы 1 динамические величины, ассоциированные с системой (9), (10), могут быть описаны в терминах гамильтоновой системы (11), (12). Например, положим

$$H_l := \frac{1}{2} \sum_{l' \geq l} x_{l'}^2, \quad l \in \mathbb{N}.$$

Величина H_{2l-1} (соотв. H_{2l}) интерпретируется как энергия в безразмерных единицах участка цепи $[l, \infty)$, где l — номер частицы, включая (соотв. исключая) энергию граничной l -ой пружины. Тогда ток энергии j_{2l-1} (соотв. j_{2l}), протекающий через участок цепи $(l-1, l)$, может быть определен посредством соотношения

$$j_l := 2\{H_l, H\} = 2\{H_l, H_{l-1}\} = -x_{l-1}x_l.$$

Вывод выражения для локального тока энергии в гармонической цепи, исходя из закона сохранения энергии, приведен в приложении П.3.

2. Статистический ансамбль

Опишем, следуя подходу Гиббса [15], статистический ансамбль, соответствующий динамической системе (9), (10). Введем на фазовом пространстве динамической системы нестационарную вероятностную меру

$$\nu := \rho(\tau, x)\mu, \quad (13)$$

требуя, чтобы эта мера сохранялась на решениях системы. Это требование приводит к тому, что и плотность ρ сохраняется на решениях системы.

Теорема 2. Плотность ρ — первый интеграл системы (9).

Доказательство. Следствие леммы 1. □

Замечание 4. В подходе Гиббса мера динамической системы предполагается стационарной и инвариантной относительно потока системы. В этом случае требование, чтобы вводимая вероятностная мера переносилась потоком, приводит к сохранению ее плотности. В нашем случае мера динамической системы не инвариантна относительно потока, однако выбрана так, чтобы этим потоком переноситься. Это также приводит к сохранению плотности вероятностной меры.

В качестве начальной плотности примем

$$\rho(0, x) := \prod_{l \geq 1} \frac{1}{\sqrt{2\pi \varkappa T}} \exp \left[-\frac{x_l^2}{2\varkappa T} \right], \quad (14)$$

где \varkappa — нормализованная постоянная Больцмана (см. приложение П.3 по поводу обезразмеривания энергетических величин) и T — температура. Такой выбор начальной плотности означает, что при $\tau = 0$ состояния рассматриваемой статистической динамической системы распределены канонически при температуре T .

Из (14) следует, что элементы начальной ковариационной матрицы имеют вид

$$\langle x_m^0 x_n^0 \rangle = \varkappa T \delta_{m,n}, \quad m, n \geq 1. \quad (15)$$

Замечание 5. В контексте рассматриваемой задачи распределение (14) имеет один существенный недостаток. Оно допускает ненулевую вероятность смещений, нарушающих естественный порядок частиц в цепи. Хотя это никак не сказывается на формально-математическом аспекте задачи (в частности, на справедливости последующих вычислений), но может, по-видимому, привести к трудностям при физической интерпретации результатов, например, при использовании концепции теплового тока (см. вывод выражения для локального тока энергии в приложении П.3, использующий естественную упорядоченность частиц цепи). Мы не беремся в этой статье как-либо решать указанную проблему, полагая, что параметры задачи можно выбрать так, чтобы вклад состояний, нарушающих целостность цепи, был сколь угодно малым.

Определим исследуемые в работе статистические величины. Введем *локальную парциальную температуру* $\theta_l := \frac{1}{2} \langle x_l x_l \rangle$ и *локальный парциальный тепловой ток* $\phi_l := \langle j_l \rangle = -\langle x_l x_{l-1} \rangle$. Парциальную температуру будем подразделять на *кинетическую* θ_{2l} и *потенциальную* θ_{2l-1} температуры. Определим *среднюю локальную температуру*, ассоциированную с l -ой частицей цепи, как сумму локальной кинетической и средней локальной потенциальной температур для этой частицы:

$$T_{2l} := \theta_{2l} + \frac{1}{2}(\theta_{2l-1} + \theta_{2l+1}).$$

Средний локальный тепловой ток, протекающий через участок цепи $(l-1, l)$, определим выражением

$$\Phi_{2l-1} := \frac{1}{2}(\phi_{2l-1} + \phi_{2l}).$$

(См. определение тока энергии, приведенное в конце раздела 1, и формулу 40 из приложения П.3).

3. Корреляционные функции

Вычисление корреляционных функций статистической динамической системы (9), (10), (13), (14) сводится к применению простейших свойств бесселевых функций

и на их основе — суммированию рядов. При этом, ориентируясь на последующее вычисление асимптотик, удобно использовать тождество

$$\sum_{l \geq 1} J_{l+m} J_{l+n} = -\frac{J_m J_n}{2} - \frac{\tau W(J_m, J_n)}{2(m-n)}, \quad m, n \in \mathbb{R}, \quad (16)$$

где $W(J_m, J_n) := J_m \dot{J}_n - \dot{J}_m J_n$ — вронскиан функций. Доказательство тождества после умножения его левой и правой частей на $2(m-n)/\tau$ сводится к применению рекуррентных соотношений для функций Бесселя с произвольным вещественным индексом [17, р. 45].

Из-за громоздкости вычислений мы приводим лишь результирующие выражения для корреляционных функций. Кроме того, мы опускаем далее аргумент τ в обозначениях бесселевых функций (как это мы уже сделали в формуле (16)) и полагаем равным единице множитель $\varkappa T$ в элементах ковариационной матрицы (см. формулу (15)).

Обозначая слагаемые первой и второй строк в выражении (8) через x_l^I и x_l^{II} соответственно и используя (14) и (16), находим

$$\begin{aligned} \langle x_m^I x_n^I \rangle &= \delta^{m,n} + (-1)^{m+n} \frac{\lambda^2 - 1}{2} \left[J_m J_n - \tau \frac{W(J_m, J_n)}{m-n} \right] + \\ &+ (-1)^m \lambda \left[J_{m-1} J_{-n} + \tau \frac{W(J_{m-1}, J_{-n})}{m+n-1} \right], \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \langle x_m^{II} x_n^{II} \rangle &= \frac{(-1)^{m+n} (\lambda^2 + 1)^2}{2(\lambda^2 - 1)} \left[2 \sum_{m' \geq 1} \sum_{n' \geq 1} \lambda^{m'+n'} J_{m'+m} J_{n'+n} + \right. \\ &+ \sum_{n' \geq 1} \lambda^{n'} \left[J_m J_{n'+n} + J_{n'+m} J_n + \tau \frac{W(J_{n'+m}, J_n)}{n'+m-n} - \tau \frac{W(J_m, J_{n'+n})}{n'+n-m} \right] + \\ &\left. + J_m J_n + \tau \frac{W(J_m, J_n)}{m-n} \right], \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \langle x_m^I x_n^{II} \rangle &= \frac{(-1)^n (\lambda^2 + 1)}{2} \left[J_{-m} J_n - \tau \frac{W(J_{-m}, J_n)}{m+n} + 2 \sum_{n' \geq 1} \lambda^{n'} J_{-m} J_{n'+n} - \right. \\ &\left. - \sum_{n' \geq 1} \lambda^{n'} \left[\tau \frac{W(J_{-m}, J_{n'+n})}{m+n'+n} + (-1)^m \tau \frac{W(J_m, J_{n'+n})}{m-n'-n} \right] \right]. \end{aligned} \quad (19)$$

Заметим, что из этих выражений сразу следует, что при $\lambda=0$, то есть для полубесконечной цепи с закрепленным концом, $\langle x^m x^n \rangle = \delta^{m,n}$. Это означает, в частности, что температура такой цепи сохраняется во времени и что тепловой ток в цепи отсутствует.

4. Асимптотики корреляционных функций

Для вычисления асимптотик корреляционных функций (17)–(19) при $\tau \rightarrow \infty$ будем использовать разложение Ханкеля бесселевых функций [17, р. 195]. В частности,

из этого разложения сразу следует, что

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \tau W(J_m, J_n) = -\frac{2}{\pi} \sin \frac{m-n}{2} \pi. \quad (20)$$

Подставляя в (17)–(19) указанное разложение и переходя к пределу $\tau \rightarrow \infty$ с учетом (20), находим

$$\begin{aligned} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \langle x^m x^n \rangle &= \delta^{m,n} - \frac{4(-1)^{m+n}}{\pi} \frac{\lambda^2}{\lambda^2 - 1} \frac{\sin \frac{\pi}{2}(m-n)}{m-n} - \\ &- \frac{2(-1)^{m+n}}{\pi} \frac{\lambda^2 + 1}{\lambda^2 - 1} \sum_{n' \geq 1} \lambda^{n'} \left[\frac{\sin \frac{\pi}{2}(n' + m - n)}{n' + m - n} + \frac{\sin \frac{\pi}{2}(n' + n - m)}{n' + n - m} \right] - \\ &- \frac{2(-1)^m}{\pi} \lambda \frac{\sin \frac{\pi}{2}(m+n-1)}{m+n-1} - \frac{(-1)^m + (-1)^n}{\pi} (\lambda^2 + 1) \sum_{n' \geq 0} \lambda^{n'} \frac{\sin \frac{\pi}{2}(m+n'+n)}{m+n'+n}. \end{aligned}$$

Отсюда, суммируя ряды с помощью формулы¹

$$\sum_{l \geq 1} \lambda^l \frac{\sin \frac{\pi}{2} l}{l} = \operatorname{arctg} \lambda,$$

получаем при $m \neq 0$

$$\begin{aligned} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \langle x^m x^m \rangle &= -\frac{\lambda^2 + 1}{\lambda^2 - 1} \left[1 + \frac{4}{\pi} \operatorname{arctg} \lambda \right] - \\ &- \frac{2(-1)^m}{\pi} \left[\lambda \frac{\sin \frac{\pi}{2}(2m-1)}{2m-1} + \frac{\lambda^2 + 1}{\lambda^{2m}} \left[\operatorname{arctg} \lambda - \sum_{n'=1}^{2m} \lambda^{n'} \frac{\sin \frac{\pi}{2} n'}{n'} \right] \right], \\ \lim_{\tau \rightarrow \infty} \langle x^m x^{m+1} \rangle &= \frac{2}{\pi} + \frac{2}{\pi} \frac{\lambda^2 + 1}{\lambda^2 - 1} \left[\frac{\lambda^2 + 1}{\lambda} \operatorname{arctg} \lambda + \frac{\pi}{2} \lambda \right]. \end{aligned}$$

Специально выделим случай $\lambda = -1$:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \langle x^m x^m \rangle = \frac{2}{\pi} - \frac{2(-1)^m}{\pi} \left[\frac{(-1)^m}{2m-1} - \frac{\pi}{2} - 2 \sum_{l=1}^m \frac{(-1)^l}{2l-1} \right], \quad (21)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \langle x^m x^{m+1} \rangle = \frac{4}{\pi} - 1. \quad (22)$$

Замечание 6. Используя результаты работ [1, 3], сравним асимптотики парциальной температуры и теплового тока при поглощающей границе $\lambda = -1$ и при свободном распространении тепла в бесконечной однородной цепи. Согласно формулам (21), (22) $\theta_l \approx 2/\pi$ при достаточно большом l и $\phi_l = 4/\pi - 1$ для всех l . В указанных работах $\theta_l = 1/2$ и $\phi_l = 1/\pi$. Мы видим определенное расхождение результатов. Однако напомним, что рассматриваемое поглощающее условие является только первым членом в аппроксимационном ряду поглощающих граничных условий (см. приложение П.2). Численный эксперимент, обсуждение которого выходит за рамки настоящей статьи, показывает, что использование поглощающих граничных условий более высокого порядка увеличивает точность аппроксимации.

¹Для доказательства этого соотношения нужно продифференцировать его левую и правую части по λ , затем умножить их на $1 + \lambda^2$ и непосредственно убедиться в истинности полученного равенства.

5. Сравнение с результатами численного анализа

Проведем сравнение аналитически полученных результатов с результатами численного анализа. Последний проводился для конечной системы, полученной из рассматриваемой в работе статистической динамической системы (9), (10), (13), (14) ограничением области изменения переменной l на отрезок $1 \leq l \leq 2L$, где L — длина цепи.

На рис. 1 показана эволюция средней локальной температуры для частицы с номером 5 и среднего локального теплового тока для участка цепи (4,5), полученные численным решением конечной системы для цепи длиной 100.

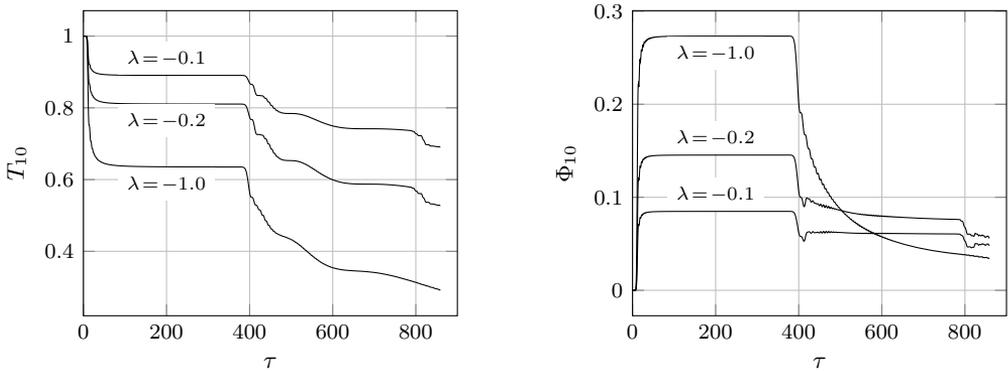


Рис. 1. Графики функций $T_{10}(\tau)$ и $\Phi_{10}(\tau)$ при различных значениях параметра λ , полученные численным решением конечной системы для цепи длиной 100.

На каждом графике приведенного рисунка отчетливо наблюдается плато, которое, как показывает численный эксперимент, неограниченно простирается вправо при увеличении длины цепи. Мы интерпретируем эти плато как значения локальной температуры и локального теплового тока, соответствующие полученным аналитически асимптотикам этих величин. Начиная с некоторого момента времени графики спадают к нулевой вертикальной отметке, что обусловлено поглощением энергии цепи на левой границе цепи.

Таблица 1. Значения средних локальных температуры и теплового тока, полученные аналитически и численно. Аналитические значения обозначены T_{10} и Φ_{10} . Численные взяты при $\tau = 250$ и $\tau = 2500$ для цепи длиной 100 и 1000 соответственно.

	T_{10}	$T_{10}(250)$	$T_{10}(2500)$	Φ_{10}	$\Phi_{10}(250)$	$\Phi_{10}(2500)$
$\lambda = -0.1$	0.89041977	0.89051969	0.89042078	0.08483794	0.08483536	0.08483794
$\lambda = -0.2$	0.81043936	0.81063146	0.81044131	0.14536844	0.14536374	0.14536844
$\lambda = -1.0$	0.63485948	0.63531705	0.63487044	0.27323954	0.27322992	0.27323955

В таблице 1 приведены полученные аналитически и численно значения средних локальных температуры и теплового тока для момента времени, примерно соответствующего центру плато. Мы отмечаем хорошее соответствие аналитических результатов численным, а также тенденцию к улучшению этого соответствия с увеличением длины цепи.

6. Приложение

П.1. Гармоническая цепь

Одномерная гармоническая цепь — это линейная цепь частиц массой m_l , соединенных последовательно пружинами жесткости k_l . Мы принимаем, что частицы и пружины расположены по порядку в соответствии с индексом l , который пробегает значения интервала целых чисел. При этом значению l индекса пружины соответствуют значения $l-1$ и l индекса частицы. Пространственная координата l -ой частицы задается ее смещением q_l от положения равновесия. В покое расстояние между соседними частицами предполагается одинаковым и равным h .

Свободные колебания бесконечной гармонической цепи описываются канонической гамильтоновой системой с гамильтонианом

$$H := \sum_{l \in \mathbb{Z}} \frac{p_l^2}{2m_l} + \frac{1}{2} \sum_{l \in \mathbb{Z}} k_l (q_l - q_{l-1})^2$$

и уравнениями движения

$$M \frac{d^2 q_l}{dt^2} + K q_l = 0,$$

где разностные операторы M и K определяются выражениями

$$M q_l := m_l q_l, \quad K q_l := -k_l q_{l-1} + (k_l + k_{l+1}) q_l - k_{l+1} q_{l+1}. \quad (23)$$

Если цепь *однородна*, то есть ее частицы имеют одинаковую массу m , а пружины — одинаковую жесткость k , то уравнения движения принимают вид

$$\frac{1}{c^2} \frac{d^2 q_l}{dt^2} - \frac{q_{l-1} - 2q_l + q_{l+1}}{h^2} = 0, \quad c := h \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (24)$$

В случае однородной цепи удобно использовать *координаты Шредингера* [14], которые вводятся выражениями

$$x_{2l} := \frac{1}{c} \frac{dq_l}{dt}, \quad x_{2l+1} := \frac{q_{l+1} - q_l}{h}.$$

В этих координатах уравнения движения имеют вид

$$\frac{1}{c} \frac{dx_l}{dt} - \frac{x_{l+1} - x_{l-1}}{h} = 0. \quad (25)$$

Уравнения (23)–(25) верны и для конечной, и для полубесконечной цепи. В случае однородной цепи используют безразмерные координаты, относя время к h/c , а

смещения к h . При этом в (25) переходят к временной координате $\tau := 2t$, так что уравнение принимает вид

$$\frac{dx_l}{d\tau} = \frac{1}{2}(x_{l+1} - x_{l-1}). \quad (26)$$

В случае бесконечной однородной цепи система уравнений (26) является гамильтоновой системой, скобка Пуассона и гамильтониан которой определяются формулами (11) и (12) соответственно.

П.2. Поглощающие граничные условия

Опишем способ получения поглощающих граничных условий для бесконечной гармонической цепи. Будем следовать работе [11] с учетом того, что у нас цепь не однородна, а составлена из двух полубесконечных однородных цепей — неограниченной слева, $l \leq 0$, и неограниченной справа, $l \geq 1$.

Запишем уравнения движения цепи в переменных Фурье по времени:

$$-\frac{\omega^2}{c_L^2}q_l^F - \frac{q_{l-1}^F - 2q_l^F + q_{l+1}^F}{h^2} = 0, \quad l \leq -1; \quad (27)$$

$$-\frac{\omega^2 h^2}{c_L^2}q_0^F - \frac{k_R}{k_L}(q_1^F - q_0^F) + q_0^F - q_{-1}^F = 0, \quad l = 0; \quad (28)$$

$$-\frac{\omega^2}{c_R^2}q_l^F - \frac{q_{l-1}^F - 2q_l^F + q_{l+1}^F}{h^2} = 0, \quad l \geq 1. \quad (29)$$

В качестве решения системы уравнений (27) для левой полубесконечной цепи примем

$$q_l^F = q_0^F r^l, \quad l \leq 0, \quad (30)$$

где r — корень характеристического уравнения

$$r^2 - 2\left(1 - \frac{1}{2}y^2\right)r + 1 = 0, \quad y := \omega h/c_L, \quad (31)$$

имеющий вид

$$r = \begin{cases} 1 - \frac{1}{2}y^2 + iy\sqrt{1 - \frac{1}{4}y^2}, & |y| \leq 2; \\ 1 - \frac{1}{2}y^2 - |y|\sqrt{\frac{1}{4}y^2 - 1}, & |y| \geq 2. \end{cases} \quad (32)$$

Выбранное решение описывает бегущую влево волну, когда ее длина достаточно большая, и исчезающую волну при достаточно малой ее длине.

Рассмотрим теперь решение всей системы (27)–(29), имеющее вид (30) при $l \leq 0$. При таком решении бегущая влево волна, проходя через точку $l=0$, не испытывает отражения вправо. На границе выполняется уравнение (28), которое после подстановок (30), (31) принимает вид

$$(r - 1)q_0^F - \frac{k_R}{k_L}(q_1^F - q_0^F) = 0. \quad (33)$$

Искомые граничные условия получаются подстановкой в (33) отрезков ряда Тейлора или Паде аппроксимаций функции (32) в точке $\omega = 0$ и последующим взятием

обратного преобразования Фурье. Так, беря первое приближение Тейлора, получаем условие

$$\frac{1}{c_R} \frac{dq_0}{dt} + \lambda \frac{q_1 - q_0}{h} = 0, \quad \lambda := -\frac{k_R c_L}{k_L c_R}. \quad (34)$$

В безразмерных координатах Шредингера условие (34) имеет вид

$$x_0 + \lambda x_1 = 0.$$

П.3. Ток энергии

Дадим вывод выражений для тока энергии полубесконечной вправо гармонической цепи, исходя из закона сохранения энергии.

Из условия, что в линейном проводнике плотность энергии $e=e(t,\xi)$ и ток энергии $j=j(t,\xi)$ связаны законом сохранения

$$\partial_t e + \partial_\xi j = 0,$$

следует, что

$$e = \partial_\xi E, \quad J = -\partial_t E, \quad (35)$$

где $E=E(t,\xi)$ — функция распределения энергии. Для неограниченного справа проводника в качестве $E(t,\xi)$ примем взятую с обратным знаком в момент времени t энергию участка проводника $[\xi, \infty)$. В частности, если проводник — цепь, то

$$E = -\sum_{l \geq 1} e_l \theta(\xi_l - \xi), \quad (36)$$

где θ — функция Хевисайда и e_l — локальная энергия, ассоциированная с l -ой частицей. Из (35) и (36) следует

$$e = \sum_{l \geq 1} e_l \delta(\xi_l - \xi), \quad J = \sum_{l \geq 1} \dot{e}_l \theta(\xi_l - \xi) + \sum_{l \geq 1} e_l \dot{\xi}_l \delta(\xi_l - \xi). \quad (37)$$

В случае гармонической цепи в качестве локальной энергии естественно принять одну из функций

$$e_l^L := \frac{p_l^2}{2m_l} + \frac{k_l}{2}(q_l - q_{l-1})^2, \quad e_l^R := \frac{p_l^2}{2m_l} + \frac{k_{l+1}}{2}(q_{l+1} - q_l)^2, \quad (38)$$

смотря по тому, включается ли в $E(t,\xi)$ энергия граничной пружины или нет. Обозначим J_l^L и J_l^R ток энергии в интервале $\xi_{l-1} < \xi < \xi_l$ при выборе в качестве локальной энергии e_l^L и e_l^R соответственно. Из (37), (38) и уравнений движения находим

$$J_l^L = -k_l(q_l - q_{l-1})\dot{q}_{l-1}, \quad J_l^R = -k_l(q_l - q_{l-1})\dot{q}_l. \quad (39)$$

В основной части статьи энергию и ток энергии однородной цепи мы относим к единицам kh^2 и ckh соответственно. Также к единицам kh^2 мы относим постоянную Больцмана. Выражения (39) в безразмерных координатах Шредингера имеют вид

$$j_{2l-1}^L = -x_{2l-1}x_{2l-2}, \quad j_{2l-1}^R = -x_{2l}x_{2l-1}. \quad (40)$$

Список литературы

- [1] E. Teramoto, “Heat Flow in the Linear Chain of Harmonically Coupled Particles”, *Prog. Theor. Phys.*, **28**:6, (1962), 1059–1064.
- [2] S. Kashiwamura, E. Teramoto, “Effect of an Isotopic Impurity on the Heat Flow in One-Dimensional Coupled Harmonic Oscillators”, *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, 1962, No 23, 207–222.
- [3] É. I. Takizawa, K. Kobayasi, “Heat Flow in a System of Coupled Harmonic Oscillators”, *Chin J. Phys.*, **1**:2, (1963), 59–73.
- [4] K. Kobayasi, É. I. Takizawa, “Effect of an Isotopic Impurity on the Energy Flow in a System of One-Dimensional Coupled Harmonic Oscillators”, *Chin J. Phys.*, **2**:1, (1964), 10–22.
- [5] K. Kobayasi, É. I. Takizawa, “Effect of a Light Isotopic Impurity on the Energy Flow in a System of One-Dimensional Coupled Harmonic Oscillators”, *Chin J. Phys.*, **2**:2, (1964), 68–79.
- [6] R. J. Rubin, “Momentum Autocorrelation Functions and Energy Transport in Harmonic Crystals Containing Isotopic Defects”, *Phys. Rev.*, **131**:3, (1963), 964–989.
- [7] R. J. Rubin, W. L. Greer, “Abnormal Lattice Thermal Conductivity of a One-Dimensional, Harmonic, Isotopically Disordered Crystal”, *J. Math. Phys.*, **12**:8, (1971), 1686–1701.
- [8] E. L. Lindman, “Free-space boundary conditions for the time dependent wave equation”, *J. Comp. Phys.*, **18**, (1975), 66–78.
- [9] B. Engquist, A. Majda, “Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves”, *Math. Comp.*, **31**:139, (1977), 629–651.
- [10] B. Engquist, A. Majda, “Radiation boundary conditions for acoustic and elastic wave calculations”, *Comm. Pure Appl. Math.*, **32**, (1979), 313–357.
- [11] L. Halpern, “Absorbing Boundary Conditions for the Discretization Schemes of the One-Dimensional Wave Equation”, *Mathematics of Computation*, **38**:158, (1982), 415–429.
- [12] A. Dhar, “Heat transport in low-dimensional systems”, *Advances in Physics*, **57**:5, (2008), 457–537.
- [13] *Thermal Transport in Low Dimensions*, Lecture Notes in Physics, **921**, ed. S. Lepri, Springer International Publishing, 2016.
- [14] E. Schrödinger, “Zur Dynamik elastisch gekoppelter Punktsysteme”, *Annalen der Physik*, **44**, (1914), 916–934.
- [15] J. W. Gibbs, *Elementary principles in statistical mechanics, developed with especial reference to the rational foundation of thermodynamics*, New York, 1902.
- [16] В. И. Арнольд, А. Авец, *Эргодические проблемы классической механики*, Ижевская республиканская типография, Ижевск, 1999.
- [17] G. N. Watson, *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*, Cambridge University Press, Cambridge, 1944.

Gudimenko A. I. Heat flow in a one-dimensional semi-infinite harmonic lattice with an absorbing boundary. *Far Eastern Mathematical Journal*. 2020. V. 20. No 1. P. 38–51.

ABSTRACT

Traditionally, absorbing boundary conditions are used to limit the domains of numerical approximation of partial differential equations in infinite domains. In the present paper, the simplest of these conditions is used to obtain an analytical approximation of the solution to the problem of heat propagation in a one-dimensional infinite harmonic lattice consisting of two semi-infinite homogeneous sublattices with different mechanical characteristics.

Key words: *harmonic chain, heat flow, absorbing boundary condition.*