

СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ ОДНОМЕРНОЙ ЦЕПОЧКИ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ

Computer simulations and analytical investigations of steady states of one-dimensional systems of particles with linear and nonlinear interactions are performed. The method of slowly varying amplitudes has indicated that the stability conditions select vibrational frequencies and spatial structures of the systems considered.

Введение

Распространение энергии вдоль одномерных структур привлекает внимание [1] как в связи с вопросами обоснования закона теплопроводности Фурье [2,3], так и ввиду необходимости понимания процессов передачи энергии в реальных квазиодномерных системах (биологические и органические молекулы, анизотропные кристаллы, наноразмерные трубки и т. д.) [4 – 6]. При этом основное внимание уделяется именно процессу распространения энергии вдоль одномерной системы.

При исследовании теплопроводности компьютерным моделированием этого неравновесного процесса часто рассматривают стационарное состояние системы, поддерживаемое с помощью подсистем, расположенных на ее границах, которые играют роль термостатов, соответствующих разным температурам. В некоторых случаях в качестве термостатов используют автоколебательные системы [7,8], обеспечивающие необходимые потоки энергии к одномерной цепочке или из нее. Ясно, что автоколебательные системы ввиду их детерминированности не могут в полной мере играть роль термостатов. Целью настоящей работы является исследование эффектов, возникающих в таких системах при переносе энергии вдоль одномерной цепочки, в том числе выявление и анализ структурных неоднородностей, а также аналитическое обоснование полученных результатов.

1. Уравнения движения системы частиц и их численное интегрирование

Рассматривается система $n+2$ частиц одинаковой массы m , линейно взаимодействующих между собой и с подложкой посредством упругих связей жесткости c и c_1 , соответственно (рис. 1). На крайние тела действуют силы, зависящие от скорости (μ и γ – соответствующие коэффициенты), которые моделируют связь системы с окружающей средой и обеспечивают устойчивое стационарное состояние. В качестве обобщенных координат принимаются смещения грузов от их положений равновесия.

Сформулируем систему $n+2$ дифференциальных уравнений движения:

$$\begin{aligned} m\ddot{x}_0 &= -cx_0 + \mu_0\dot{x}_0 - \gamma_0\dot{x}_0^3 + c(x_1 - x_0), \\ m\ddot{x}_j &= c(x_j - x_{j-1}) + c(x_{j+1} - x_j) - c_1x_j, \quad j = 1, \dots, n, \\ m\ddot{x}_{n+1} &= -cx_{n+1} + \mu_{n+1}\dot{x}_{n+1} - \gamma_{n+1}\dot{x}_{n+1}^3 - c(x_{n+1} - x_n). \end{aligned} \quad (1)$$

Полученная система дифференциальных уравнений нелинейна, и возможности ее



Рис. 1. Механическая модель системы частиц

аналитического решения ограничены. Поэтому в качестве первого шага было выполнено численное интегрирование уравнений в среде MatLab. Одной из важных характеристик движения тел в установившемся режиме является их средний квадрат скорости, который может быть интерпретирован как локальная температура ($k_B T = \langle mv^2 \rangle$, угловые скобки означают усреднение, k_B — постоянная Больцмана).

На рис. 2 показана зависимость температуры от номера тела в системе (нумерация начинается с левой частицы, которой приписан номер 0). Коэффициенты для первого и последнего тел в уравнениях движения подобраны таким образом, чтобы левая частица являлась более нагретой, чем правая, вследствие чего реализуется передача энергии вдоль системы, состоящей из ста тел ($n=98$).

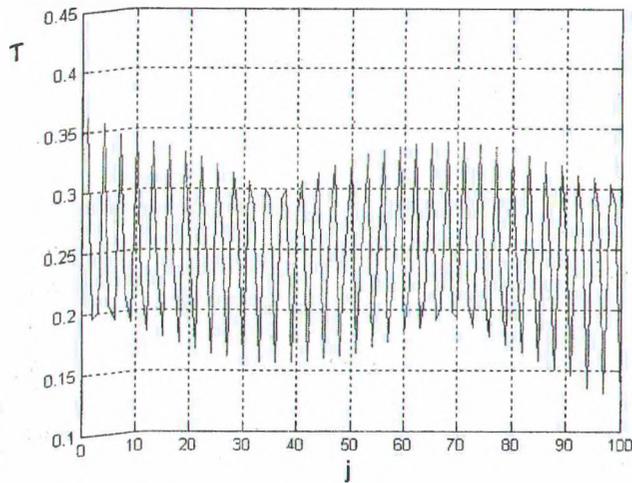


Рис. 2. Распределение энергии вдоль цепочки тел

Распределение энергии по цепочке характеризуется неоднородностями с предельно малой длиной волны, когда любые две соседние частицы находятся почти в противофазе друг по отношению к другу, и эти коротковолновые колебания модулируются волнами значительно большей длины. Посредством цепочки частиц устанавливается обратная связь между нелинейными подсистемами на ее концах, и результирующая система проявляет определенную самоорганизацию. Более подробные результаты приведены в работе [9].

3. Метод медленно меняющихся амплитуд

Аналитическое исследование поведения системы рассмотрим на упрощенной модели, состоящей из двух линейно взаимодействующих частиц массы m , которые прикреплены к неподвижным стенкам с помощью пружин. На первое тело действует возмущающая сила, пропорциональная первой степени скорости, и сила сопротивления, пропорциональная третьей степени скорости.

Система уравнений (1) при соответствующем переобозначении номеров частиц представляется в виде ($\mu_{n+1} = \gamma_{n+1} = 0$)

$$\begin{cases} m\ddot{x}_1 = -cx_1 + c(x_2 - x_1) + \mu\dot{x}_1 - \gamma\dot{x}_1^3, \\ m\ddot{x}_2 = -c(x_2 - x_1) - cx_2, \end{cases} \quad (2)$$

После деления уравнений на m получим

$$\begin{cases} \ddot{x}_1 + 2k_0^2 x_1 = \mu_0 \dot{x}_1 - \gamma_0 \dot{x}_1^3 + k_0^2 x_2, \\ \ddot{x}_2 + 2k_0^2 x_2 = k_0^2 x_1, \quad \mu_0 = \mu/m, \quad \gamma_0 = \gamma/m, \quad k_0^2 = c/m. \end{cases} \quad (3)$$

Для решения нелинейной системы уравнений (3) используем метод медленно меняющихся амплитуд. Решение будем искать в виде

$$x_i(t) = a_i(t) \cos(kt + \varphi_i(t)), \quad i = 1, 2, \quad (4)$$

где амплитуда и фаза предполагаются зависящими от времени. В (4) функция времени $x_i(t)$ представлена двумя функциями $a_i(t)$ и $\varphi_i(t)$, на которые можно наложить связь. Выбирая уравнение связи в виде

$$\dot{a}_i \cos(kt + \varphi_i) - a_i \dot{\varphi}_i \sin(kt + \varphi_i) = 0, \quad i = 1, 2, \quad (5)$$

получим для скорости простое соотношение

$$\dot{x}_i = -a_i k \sin(kt + \varphi_i), \quad i = 1, 2. \quad (6)$$

Тогда вторая производная принимает вид

$$\ddot{x}_i = -\dot{a}_i k \sin(kt + \varphi_i) - a_i \dot{\varphi}_i k \cos(kt + \varphi_i) - a_i k^2 \cos(kt + \varphi_i), \quad i = 1, 2. \quad (7)$$

После подстановки в систему уравнений (3) получим

$$\begin{cases} -\dot{a}_1 k \sin(kt + \varphi_1) - a_1 \dot{\varphi}_1 k \cos(kt + \varphi_1) - a_1 k^2 \cos(kt + \varphi_1) + \\ + 2k_0^2 a_1 \cos(kt + \varphi_1) = \mu \dot{x}_1 - \gamma \dot{x}_1^3 + x_2 k_0^2, \\ -\dot{a}_2 k \sin(kt + \varphi_2) - a_2 \dot{\varphi}_2 k \cos(kt + \varphi_2) - a_2 k^2 \cos(kt + \varphi_2) + \\ + 2k_0^2 a_2 \cos(kt + \varphi_2) = x_1 k_0^2. \end{cases} \quad (8)$$

Исследуем установившиеся состояния системы, когда средние за период колебаний значения производных амплитуд $\langle \dot{a}_i \rangle$ и сдвига фаз $\langle \dot{\varphi}_i \rangle$ по времени равны нулю. Выполняя усреднение уравнений (8) по периоду колебаний, переходя к полной фазе $\Phi_i = kt + \varphi_i$ и используя (6), найдем

$$(1/2)\mu \bar{a}_1 k - (3/8)\gamma \bar{a}_1^3 k^3 - a_2 k_0^2 \langle \sin \Phi_1 \cos \Phi_2 \rangle = 0, \quad (9)$$

$$k_0^2 \langle \sin \Phi_2 \cos \Phi_1 \rangle - \bar{a}_1 = 0, \quad (10)$$

$$(1/2)(2k_0^2 - k^2)\bar{a}_1 - k_0^2 \langle \cos \Phi_2 \cos \Phi_1 \rangle - \bar{a}_2 = 0, \quad (11)$$

$$-k_0^2 \langle \cos \Phi_1 \cos \Phi_2 \rangle - \bar{a}_1 + (1/2)(2k_0^2 - k^2)\bar{a}_2 = 0. \quad (12)$$

Здесь для сокращения записи средние значения амплитуд обозначены чертой над символом и учтено, что средние значения величин, содержащих нечетные степени $\sin \Phi_i$ или $\cos \Phi_i$, равны нулю, а средние значения четных степеней $\langle \sin^2 \Phi_i \rangle = \langle \cos^2 \Phi_i \rangle = 1/2$, $\langle \sin^4 \Phi_i \rangle = \langle \cos^4 \Phi_i \rangle = 3/8$.

Из уравнения (10) следует $\langle \sin \Phi_2 \cos \Phi_1 \rangle = 0$. Это означает, что фазы колебаний тел либо совпадают, либо отличаются на половину периода и, таким образом, $\langle \sin \Phi_1 \cos \Phi_2 \rangle = 0$, $\langle \cos \Phi_2 \cos \Phi_1 \rangle = \pm 1/2$. Система уравнений (9)–(12) не позволяет однозначно выбрать знак в правой части последнего соотношения, но численное решение уравнений (3) показывает, что фазы практически совпадают: $\Phi_1 \cong \Phi_2$. Этот результат отражает устойчивость решения, соответствующего верхнему знаку.

С учетом сказанного уравнение (9) становится эквивалентным уравнению для средней амплитуды колебаний одного тела с известным (см. напр. [10]) результатом $a_1^2 = 4\mu / (3\gamma k^2)$. Система двух уравнений (11) и (12) является линейной и однородной, так что для существования нетривиальных решений ее определитель должен быть равен нулю. Из этого требования вытекают два решения: $k = k_0$ и $k = \sqrt{3}k_0$. Первое решение соответствует движению тел с совпадающими фазами, а второе – движению в противофазах. Амплитуды колебаний одинаковы в обоих случаях $\bar{a}_1 = \bar{a}_0$, но, как отмечено выше, реализуется синфазное движение с низшей частотой. Более высокочастотные колебания в противофазе оказываются неустойчивыми.

Аналогично для системы из трех тел получим

$$(1/2)\mu\bar{a}_1k - (3/8)\gamma\bar{a}_1^3k^3 - a_2k_0^2 < \sin \Phi_1 \cos \Phi_2 > = 0; \quad (13)$$

$$-k_0^2 < \sin \Phi_2 \cos \Phi_1 > \bar{a}_1 - k_0^2 < \cos \Phi_3 \sin \Phi_2 > \bar{a}_3 = 0; \quad (14)$$

$$-k_0^2 < \cos \Phi_2 \sin \Phi_3 > \bar{a}_2 = 0; \quad (15)$$

$$(2k_0^2 - k^2)\bar{a}_1 \mp k_0^2\bar{a}_2 = 0; \quad (16)$$

$$\mp k_0^2\bar{a}_1 + (2k_0^2 - k^2)\bar{a}_2 \pm k_0^2\bar{a}_3 = 0; \quad (17)$$

$$\mp k_0^2\bar{a}_2 + (2k_0^2 - k^2)\bar{a}_3 = 0. \quad (18)$$

При $\bar{a}_2 \neq 0$ из (15) следует $< \cos \Phi_2 \sin \Phi_3 > = 0$ и $< \cos \Phi_3 \sin \Phi_2 > = 0$. Тогда из (14) получим $< \cos \Phi_1 \sin \Phi_2 > = 0$. Следовательно, уравнение (13), так же как и (9), становится эквивалентным уравнению для средней амплитуды колебаний одного тела.

В системе уравнений (16)–(18) наличие двух знаков при некоторых слагаемых обусловлено тем, что колебания тел 1 и 2 или 2 и 3 могут быть синфазными или в противофазе. Из равенства нулю определителя этой системы имеем

$$(2k_0^2 - k^2) \left[(2k_0^2 - k^2)^2 - 2k_0^4 \right] = 0. \quad (19)$$

Из трех решений уравнения (19) устойчивому движению, как это следует из численного решения, соответствует промежуточный корень $k = \sqrt{2}k_0$, тогда как две другие частоты ($k = \sqrt{2} \pm \sqrt{2}k_0$) не реализуются. Тогда из (16), (18) находим

$$\bar{a}_2 = 0, \quad \bar{a}_3 = -\bar{a}_1. \quad (20)$$

На рис. 3 представлен результат численного интегрирования системы уравнений (1) для трех тел. Из рисунка видно, что метод медленно меняющихся амплитуд позволяет описать движение системы с хорошей точностью: первое и третье тела колеблются в противофазе с амплитудами, практически равными амплитуде колебаний изолированного первого тела, а среднее тело почти неподвижно.

Таким образом, неоднородность распределения температуры вдоль цепочки (рис. 2) можно объяснить особой структурой уравнений динамики рассмотренной системы, приводящей к корреляциям в движении соседних частиц. Условия устойчивости движения обеспечивают отбор частот и фаз колебаний. При четном числе частиц реализуются состояния, когда некоторые пружины не деформируются (например, средняя в системе двух тел), а

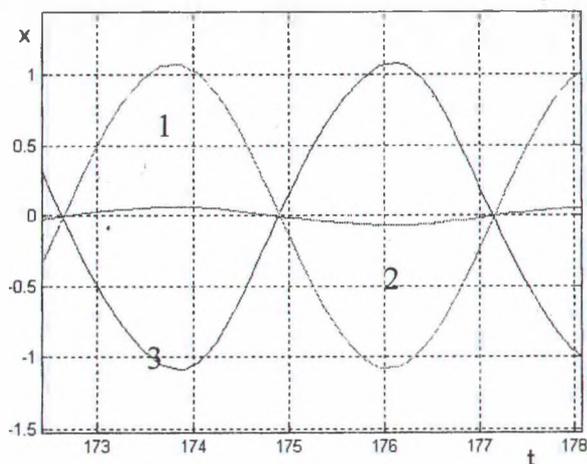


Рис. 3. Зависимость координаты от времени для первого, второго и третьего тел. x -координата задана в единицах амплитуды колебаний изолированного тела 1, $k_0 = 1$.

лишь способствуют самосинхронизации колебаний, тогда как при нечетном числе тел такую роль играют некоторые почти неподвижные тела.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lepri S., Livi R., Politi R. // Phys. Repts. 2003. V. 377. P. 1.
2. Гроот С. Р. де и Мазур П. Неравновесная термодинамика. – М.: Мир, 1964.
3. Лыков А.В. Теория теплопроводности. – М.: Высш. шк., 1967.
4. Smontara F., Lasjaunas J.C., Maynard R. // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. P. 5397.
5. Kim P., Shi L., Majumdar A., McEuen P.L. // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87. Art. 215502.
6. Schwarzer D., Hanisch C., Kutne P., Troe J. // J. Phys. Chem. B 2002. V. 106. P. 8019.
7. Lepri S., Livi R., Politi A. // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 78. P. 1896.
8. Lepri S., Livi R., Politi A. // Physica D. 1998. V. 119. P. 140.
9. Вихренко В.С., Дубинин С.В. // Автоматический контроль и автоматизация производственных процессов / Материалы конференции. – Мн.: БГТУ, 2003. – С. 363.
10. Вихренко В.С. Устойчивость и нелинейные колебания. – Мн.: БТИ, 1993.