Дальневосточный математический журнал. 2021. Т. 21. № 1. С. 39–44

УДК 517.927.2, 531
MSC2020 34A25, 34A30, 70B99

© М. А. Гузев[1], А. А. Дмитриев[1]

Тепловой поток в модели Ланжевена для двух частиц

В одномерной гармонической модели двух частиц на основе построенного решения получено аналитическое представление для потока тепла. Показано, что асимптотическое поведение при $t \to \infty$ амплитуды потока, идущего через частицу, определяется разностью температур левого и правого тепловых резервуаров, между которыми расположена система. Динамическое поведение тепловой характеристики является осциллирующим по времени, период колебаний которого задается параметрами системы.

Ключевые слова: *модель Ланжевена, тепловой поток, система частиц.*

DOI: https://doi.org/10.47910/FEMJ202103

Введение

В [1] был предложен метод описания движения броуновской частицы, основанный на применении уравнения Ланжевена для скорости частицы. Используя явную форму представления для решения одномерной модели, авторы проанализировали условия применимости формулы Эйнштейна для среднего значения квадрата смещения частицы.

В дальнейшем модель Ланжевена стала использоваться исследователями при описании переноса тепла в системе частиц (см., например, [2–4]). В частности, было показано, что в одномерной системе для стационарного случая поток тепла пропорционален разности температур левого и правого тепловых резервуаров, между которыми расположены частицы. Исследователи в [2–4] применяли гармонический анализ при построении решения, однако динамическое поведение потока не анализировали. Соответствующее поведение энергетических характеристик для случайного распределения начальной скорости в системе частиц представлено в [5, 6].

В настоящей работе рассматривается система двух частиц в модели Ланжевена и на основе построенного точного решения получено представление для потока тепла при произвольном времени.

[1] Институт прикладной математики ДВО РАН, 690043, г. Владивосток, ул. Радио, 7.
Электронная почта: `guzev@iam.dvo.ru` (М. А. Гузев), `dmitriev@iam.dvo.ru` (А. А. Дмитриев).

1. Модель переноса тепла

Уравнение Ланжевена для скорости $v = \dot{x}$ одной частицы с массой m имеет вид [1]

$$m\dot{v} = -\gamma v + \eta, \tag{1}$$

где первое слагаемое в правой части (1) задает силу трения, приводящую к диссипации энергии частицы, а второе характеризует случайное воздействие на нее. Для системы из двух частиц дополнительно задается взаимодействие между ними путем введения потенциала $W = W(x_2 - x_1)$, где x_1, x_2 — координаты 1 и 2 — частицы соответственно. Это приводит к появлению силы $F_{12} = -\dfrac{\partial W}{\partial x_1}$, действующей на первую частицу со стороны второй, при этом сила, действующая на вторую частицу со стороны первой, равна $F_{21} = -\dfrac{\partial W}{\partial x_2} = -F_{12}$. Моделирование процесса переноса тепла выполняется путем введения членов $-\gamma\dot{x}_1$, $-\gamma\dot{x}_2$ в уравнения движения и стохастических вкладов $\eta_1 = \eta_1(t)$, $\eta_2 = \eta_2(t)$ (по аналогии с уравнением (1)).

Из сказанного выше следует, что динамика системы двух частиц задаётся следующим образом:

$$m\ddot{x}_1 = F_{12} - \gamma\dot{x}_1 + \eta_1, \qquad m\ddot{x}_2 = -F_{12} - \gamma\dot{x}_2 + \eta_2. \tag{2}$$

В литературе [2–4] введение потока тепла связано с вычислением изменения энергии через j-сайт в единицу времени. Зададим локальную плотность энергии для каждой частицы:

$$E_1 = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{1}{2}W(x_2 - x_1), \qquad E_2 = \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}W(x_2 - x_1). \tag{3}$$

Вычисляя производную по времени от обеих частей соотношения (3), получаем уравнения для изменения плотности энергии:

$$\begin{gathered} \dot{E}_1 = -\gamma v_1^2 + \eta_1 v_1 + J_{12}, \qquad \dot{E}_2 = -\gamma v_2^2 + \eta_2 v_2 + J_{21}, \\ J_{21} = -J_{12}, \qquad J_{12} = \frac{1}{2}(v_1 + v_2)F_{12}. \end{gathered} \tag{4}$$

Уравнения (4) можно представить в виде

$$\dot{E}_j = -\gamma v_1^2 - \frac{\Pi_j}{a}, \qquad \Pi_1 = a(-\eta_1 v_1 - J_{12}), \quad \Pi_2 = a(-\eta_2 v_2 + J_{12}), \tag{5}$$

где подразумевается, что существует характерный внутренний масштаб, например, равновесное расстояние a между соседними частицами. Слагаемые $-\gamma v_1^2$, $-\gamma v_2^2$ характеризуют диссипацию энергии; комплекс Π_j определяет полный тепловой поток, проходящий через j-сайт в единицу времени и обусловленный механической работой случайных сил $\eta_1(t)$, $\eta_2(t)$ и соседней частицы.

Функции $\eta_1(t)$, $\eta_2(t)$ предполагаются гауссовым белым шумом с нулевым средним, и корреляция между значениями $\eta_1(t)$, $\eta_2(t)$ в разные моменты времени t_1, t_2 равна

$$\begin{gathered} \langle \eta_1(t_1), \eta_1(t_2) \rangle = 2\sigma^2 k_B T_1 \gamma \delta(t_1 - t_2), \quad \langle \eta_2(t_1), \eta_2(t_2) \rangle = 2\sigma^2 k_B T_2 \gamma \delta(t_1 - t_2), \\ \langle \eta_1(t_1), \eta_2(t_2) \rangle = 0. \end{gathered}$$

Здесь коэффициент k_B — постоянная Больцмана, параметры T_1, T_2 задают температуру левого и правого тепловых резервуаров, между которыми расположена система, а безразмерная величина σ^2 характеризует интенсивность флуктуаций.

2. Гармоническая модель

Для гармонической модели потенциал взаимодействия

$$W(x_2 - x_1) = \frac{k(u_2 - u_1)^2}{2},$$

где функция u_j определяет смещение частицы из положения равновесия, а координата частицы x_j равна $x_j = ja + u_j$. В этом случае величина J_{12}

$$J_{12} = \frac{k}{2}(v_1 + v_2)(u_2 - u_1).$$

Перейдем к безразмерным переменным, выбирая в качестве масштаба длины равновесное расстояние a между частицами; масштаб времени полагаем равным $t_0 = \sqrt{m/k}$; вместо параметра γ введем $\beta = \gamma t_0/2m$, температуру нормируем на ka^2/k_B, а тепловой поток — на ka^3/t_0. Для безразмерных характеристик сохраним обозначения, введенные для размерных, тогда система (2) для гармонической модели записывается в виде

$$\ddot{u}_1 = u_2 - u_1 - 2\beta\dot{u}_1 + \eta_1, \qquad \ddot{u}_2 = u_1 - u_2 - 2\beta\dot{u}_2 + \eta_2, \tag{6}$$

где безразмерные корреляционные характеристики даются соотношениями

$$\begin{gathered}\langle\eta_1(t_1), \eta_1(t_2)\rangle = 4\sigma^2\beta T_1\delta(t_1 - t_2), \quad \langle\eta_2(t_1), \eta_2(t_2)\rangle = 4\sigma^2\beta T_2\delta(t_1 - t_2), \\ \langle\eta_1(t_1), \eta_2(t_2)\rangle = 0.\end{gathered} \tag{7}$$

Перейдем к новым функциям

$$U = u_2 + u_1, \ V = u_2 - u_1,$$

тогда (6) редуцируется к виду

$$\ddot{U} = -2\beta\dot{U} + \Theta_+, \qquad \ddot{V} = -2(V + \beta\dot{V}) + \Theta_-, \qquad \Theta_+ = \eta_1 + \eta_2, \quad \Theta_- = \eta_2 - \eta_1. \tag{8}$$

Решение первого уравнения (8) дается квадратурой

$$U = \int_0^t dt_1 \exp(-2\beta t_1) \int_0^{t_1} dt_2 \exp(2\beta t_2)\Theta_+(t_2). \tag{9}$$

Выполняя замену $V = \tilde{V}\exp(-\beta t)$ во втором уравнении (8), получаем

$$\ddot{\tilde{V}} + \omega^2\tilde{V} = \exp(\beta t)\Theta_-, \qquad \omega^2 = 2 + 3\beta^2. \tag{10}$$

Решение для $\tilde{V}$ записывается в следующей форме:

$$\tilde{V} = \frac{1}{\omega}\int\limits_0^t dt_1 \sin\omega(t-t_1)\exp(\beta t_1)\Theta_-(t_1).$$

В результате функция V

$$V = \frac{1}{\omega}\int\limits_0^t dt_1 \sin\omega(t-t_1)\exp(-\,\beta(t-t_1))\Theta_-(t_1). \tag{11}$$

Интересующая нас величина — среднее значение теплового потока через первый сайт, обусловленный механической работой второй частицы. В безразмерных переменных он равен

$$\langle J_{12}\rangle_\eta = \frac{1}{2}\langle(\dot{u}_1+\dot{u}_2)(u_2-u_1)\rangle_\eta = \frac{1}{2}\langle\dot{U}V\rangle_\eta, \tag{12}$$

где скобки $\langle\cdot\rangle_\eta$ обозначают усреднение по всем реализациям случайных процессов η_1, η_2. Подставим (9), (11) в (12), тогда

$$\langle J_{12}\rangle_\eta = \frac{\exp(-\,3\beta t)}{\omega}\int\limits_0^t dt_2\exp(2\beta t_2)\int\limits_0^t dt_1\sin\omega(t-t_1)\exp(\beta t_1)\langle\Theta_+(t_2)\Theta_-(t_1)\rangle_\eta. \tag{13}$$

Учитывая (7), вычисляем коррелятор в (13):

$$\langle\Theta_+(t_2)\Theta_-(t_1)\rangle = 4\sigma^2\beta(T_2-T_1)\delta(t_2-t_1).$$

В результате (13) записывается в виде

$$\langle J_{12}\rangle_\eta = 2\sigma^2\frac{\beta(T_2-T_1)}{\omega}\exp(-\,3\beta t)\int\limits_0^t dt_2\exp(2\beta t_2)\int\limits_0^t dt_1\sin\omega(t-t_1)\exp(\beta t_1)\delta(t_2-t_1).$$

Переходя от интегрирования по области к повторному интегрированию и произведя замену $t-t_1$ на t_1, получаем

$$\langle J_{12}\rangle = 2\sigma^2\frac{\beta(T_2-T_1)}{\omega}\int\limits_0^t dt_1\sin\omega t_1\exp(-\,\beta t_1).$$

Вычисление интеграла дает окончательный результат:

$$\langle J_{12}\rangle_\eta = \sigma^2\frac{\beta(T_2-T_1)}{1+6\beta^2}\left[1-\exp(-\,3\beta t)\left(\cos\omega t+\frac{3\beta}{\omega}\sin\omega t\right)\right]. \tag{14}$$

Проводя вычисления, аналогичные выполненным при нахождении $\langle J_{12}\rangle_\eta$, нетрудно получить выражение для потока тепла, обусловленного механической работой случайных сил $\eta_1(t)$, $\eta_2(t)$:

$$\langle\eta_1 v_1\rangle_\eta = 2\sigma^2\beta T_1, \qquad \langle\eta_2 v_2\rangle_\eta = 2\sigma^2\beta T_2. \tag{15}$$

3. Обсуждение

Из (9) следует, что для малого затухания $\beta \ll 1$ тепловой поток, идущий через сайт, имеет следующее асимптотическое поведение на больших временах $t \gg 1/\beta \gg 1$:

$$\langle J_{12}\rangle_\eta = -\sigma^2\beta(T_2 - T_1)(1 + o(1)). \tag{16}$$

Значит, для гармонической модели существует стационарное распределение для величины локального потока и его абсолютное значение пропорционально разности температур тепловых резервуаров. Поток энергии через второй сайт равен $-\langle J_{12}\rangle_\eta$.

Введение затухания β в модель является принципиальным требованием для существования стационарного распределения величины при $t \to \infty$. Заметим, что предельные переходы по параметрам $\beta \to 0$ и $t \to \infty$ для $\langle J_{12}\rangle_\eta$ не перестановочны. В частности, при $\beta \to 0$ из (14) получаем осциллирующую по ω функцию:

$$\langle J_{12}\rangle_\eta\Big|_{\beta\to 0} = \sigma^2\beta(T_2 - T_1)\left(1 - \cos\omega t + o(1)\right). \tag{17}$$

Тогда переход от (17) к (16) достигается после выполнения дополнительного усреднения по времени, если положить

$$\frac{\omega}{2\pi}\int\limits_0^{2\frac{\pi}{\omega}} dt\langle J_{12}\rangle_\eta\Big|_{\beta\to 0} = \overline{\langle J_{12}\rangle}_\eta\Big|_{t\to\infty}.$$

Суммарный тепловой поток (5) для каждого сайта включает механическую работу (15), обусловленную случайными силами, и при $t \to \infty$ он равен:

$$\langle \Pi_1\rangle_\eta = -\sigma^2\beta(T_1 + T_2)(1 + o(1)), \qquad \langle \Pi_2\rangle_\eta = -\sigma^2\beta(T_1 + T_2)(1 + o(1)). \tag{18}$$

Полученный результат не зависит от номера частицы, что связано с симметрией системы. Отрицательный знак в (18) соответствует тому, что в систему идет «закачка» энергии благодаря эффекту стохастического резонанса.

Список литературы

[1] G. E. Uhlenbeck, L. S. Ornstein, “On the Theory of the Brownian Motion”, *Phys. Rev.*, **36** (1930), 823-–841.

[2] S. Lepri, R. Livi, A. Politi, “Thermal conduction in classical low-dimensional lattices”, *Physics Reports*, **377** (2003), 1–80.

[3] F. Bonetto, J. L. Lebowitz, J. Lukkarinen, “Fourier’s Law for a Harmonic Crystal with Self-Consistent Stochastic Reservoirs”, *Journal of Statistical Physics*, **116** (2004), 783—813.

[4] A. Dhar, R. Dandekar, “Heat transport and current fluctuations in harmonic crystals”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **418** (2015), 49–64.

[5] А. М Кривцов, “Распространение тепла в бесконечном одномерном гармоническом кристалле”, *ДАН*, **464**:2 (2015), 162–166.

[6] М. А. Гузев, А. А. Дмитриев, “Осцилляционно-затухающее поведение температуры в кристалле”, *Дальневосточный матем. журнал*, **17**:2 (2017), 170–179.

Поступила в редакцию
9 апреля 2021 г.

Guzev M. A.[1], *Dmitriev A. A.*[1] Heat flux in the Langevin model for two particles. *Far Eastern Mathematical Journal.* 2021. V. 21. No 1. P. 39–44.

[1] Institute for Applied Mathematics, Far Eastern Branch, Russian Academy of Sciences

ABSTRACT

The analytical representation for the heat flux is obtained on the basis of the constructed solution in a one-dimensional harmonic model for two particles. At $t \to \infty$, the amplitude asymptotic behavior of the flow passing through the particle is shown to be determined by the temperature difference between the left and right heat reservoirs, between which the system is located. The dynamic behavior of the thermal characteristic is oscillating in time; its oscillation period is set by the parameter of the system.

Key words: *the Langevin model, heat flux, particle system.*

References

[1] G. E. Uhlenbeck, L. S. Ornstein, "On the Theory of the Brownian Motion", *Phys. Rev.*, **36** (1930), 823-–841.

[2] S. Lepri, R. Livi, A. Politi, "Thermal conduction in classical low-dimensional lattices", *Physics Reports*, **377** (2003), 1–80.

[3] F. Bonetto, J. L. Lebowitz, J. Lukkarinen, "Fourier's Law for a Harmonic Crystal with Self-Consistent Stochastic Reservoirs", *Journal of Statistical Physics*, **116** (2004), 783—813.

[4] A. Dhar, R. Dandekar, "Heat transport and current fluctuations in harmonic crystals", *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **418** (2015), 49–64.

[5] A. M Krivtsov, "Rasprostranenie tepla v beskonechnom odnomernom garmonicheskom kristalle", *DAN*, **464**:2 (2015), 162–166.

[6] M. A. Guzev, A. A. Dmitriev, "Ostsilliatsionno-zatukhaiushchee povedenie temperatury v kristalle", *Dal'nevostochnyi matem. zhurnal*, **17**:2 (2017), 170–179.