

УДК 517.927.2, 531

MSC2020 34A25, 34A30, 70B99

© М. А. Гузев¹, А. В. Горбунов¹

Структура теплового потока для частиц Орнштейна – Уленбека одномерной гармонической цепочки

Рассматривается одномерная гармоническая цепочка из N частиц, расположенная между двумя тепловыми резервуарами (частицы Орнштейна – Уленбека). Для системы уравнений, описывающей динамику системы, построено точное решение. На основе этого решения получено аналитическое выражение для дискретного выражения локального потока тепла изучаемой модели, когда время $t \rightarrow \infty$, что соответствует рассмотрению стационарных условий переноса. Показано, что тепловой поток включает в себя две физически различных компоненты. Первая из них пропорциональна разности температур резервуаров и характеризует перенос тепла вдоль цепочки. Вторая определяет начальное значение потока при равенстве температур резервуаров.

Ключевые слова: *частицы Орнштейна – Уленбека, тепловой поток.*

DOI: <https://doi.org/10.47910/FEMJ202115>

Введение

В работе [1] на основе построенного решения одномерной гармонической модели системы двух частиц Орнштейна – Уленбека [2] получено аналитическое представление для локального потока тепла. Было показано, что асимптотическое поведение при $t \rightarrow \infty$ величины потока, идущего через частицу, определяется разностью температур левого и правого тепловых резервуаров, между которыми расположена система.

Исследователи [3–5] рассматривали перенос тепла для модели одномерной гармонической цепочки, состоящей из $N > 2$ частиц Орнштейна – Уленбека. Однако при анализе поведения локального теплового потока они не использовали динамического решения модели системы частиц.

В настоящей работе этот пробел восполнен. Мы рассмотрели одномерную гармоническую цепочку, состоящую из N частиц Орнштейна – Уленбека, и построили для

¹ Институт прикладной математики ДВО РАН, 690043, г. Владивосток, ул. Радио, 7.

Электронная почта: guzev@iam.dvo.ru (М. А. Гузев), gorbunov.avia@students.dvfu.ru (А. В. Горбунов).

модели точное решение, на основе которого получено аналитическое представление для потока тепла при $t \rightarrow \infty$.

1. Основные соотношения

Рассмотрим классическую одномерную систему частиц с равной массой m , взаимодействие между которыми задается с помощью потенциала $U(x_j - x_{j-1})$, где x_j — координата j -частицы, а внешнее воздействие задается через потенциал $V(x_j)$. Тогда гамильтониан системы частиц равен

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} + V(x_i) \right] + \sum_{i=1}^{N-1} U(x_{i+1} - x_i),$$

где $p_j = m\dot{x}_j \equiv mv_j$. Мы предполагаем, что частицы взаимно не проникают друг в друга, поэтому $0 \leq x_1 \leq \dots \leq x_N \leq L$, где параметр L определяет линейный размер системы частиц. При этом подразумевается, что существует характерный внутренний масштаб — например, равновесное расстояние a между соседними частицами, которое меньше L .

Чтобы исследовать процесс переноса тепла в гамильтоновой системе, необходимо ввести дополнительные силовые слагаемые. В простейшем виде эти слагаемые состоят из стохастических вкладов $\eta_1 = \eta_1(t)$, $\eta_N = \eta_N(t)$, включаемых в уравнения движения первой и последней частицы, а также диссипативных членов $-\frac{\gamma}{m}p_1, -\frac{\gamma}{m}p_2, \dots, -\frac{\gamma}{m}p_N$. Тогда уравнения движения задаются в следующем виде:

$$\begin{aligned} \dot{p}_1 &= F_1 - \frac{\gamma}{m}p_1 + \eta_1, \\ \dot{p}_j &= F_j - \frac{\gamma}{m}p_j, \quad \text{для } j=2, \dots, N-1, \\ \dot{p}_N &= F_N - \frac{\gamma}{m}p_N + \eta_N. \end{aligned} \quad (1)$$

Величина $F_j = -\partial H / \partial x^j$ определяет силу, действующую на j -частицу. Функции $\eta_1(t)$, $\eta_N(t)$ предполагаются гауссовым белым шумом с нулевым средним, и корреляция между значениями $\eta_1(t)$, $\eta_N(t)$ в разные моменты времени t_1, t_2 равна:

$$\begin{aligned} \langle \eta_1(t_1), \eta_1(t_2) \rangle &= 2\sigma^2 k_B T_1 \gamma \delta(t_1 - t_2), \\ \langle \eta_N(t_1), \eta_N(t_2) \rangle &= 2\sigma^2 k_B T_N \gamma \delta(t_1 - t_2), \\ \langle \eta_1(t_1), \eta_N(t_2) \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь коэффициент k_B — постоянная Больцмана, параметры T_1, T_N задают температуру левого и правого тепловых резервуаров соответственно. Таким образом, частицы цепочки взаимодействуют со своими резервуарами с помощью случайной силы, и резервуары являются источниками потока тепла.

Введем локальную плотность энергии, связанную с частицей [3, 4]:

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{p_1^2}{2m} + V(x_1) + \frac{1}{2}U(x_1 - x_2), \\ E_j &= \frac{p_j^2}{2m} + V(x_j) + \frac{1}{2}U(x_{j-1} - x_j) + \frac{1}{2}U(x_j - x_{j+1}), \text{ для } j=2, \dots, N-1, \\ E_N &= \frac{p_N^2}{2m} + V(x_N) + \frac{1}{2}U(x_N - x_{N-1}). \end{aligned} \quad (3)$$

Вычисляя производную по времени от обеих частей соотношений (3), запишем уравнения (1) для изменения плотности энергии в виде

$$\begin{aligned} \dot{E}_1 &= -\gamma v_1^2 - \frac{\Pi_1}{a}, \quad \Pi_1 = a(-\eta_1 v_1 - J_{1,2}), \\ \dot{E}_j &= -\gamma v_j^2 - \frac{\Pi_j}{a}, \quad \Pi_j = a(-J_{j,j-1} + J_{j+1,j}), \\ \dot{E}_N &= -\gamma v_N^2 - \frac{\Pi_N}{a}, \quad \Pi_N = a(-\eta_N v_N - J_{N-1,N}), \end{aligned} \quad (4)$$

в которых

$$J_{j-1,j} = \frac{1}{2}(v_j + v_{j-1})f_{j-1,j}, \quad f_{j-1,j} = -f_{j,j-1} = -\frac{\partial}{\partial x_{j-1}}U(x_{j-1} - x_j).$$

В научной литературе [4] величина $aJ_{j,j-1}$ называется локальным потоком тепла. Слагаемые $-\gamma v_1^2, -\gamma v_j^2, -\gamma v_N^2$ характеризуют диссипацию энергии. Комплекс Π_j определяет полный тепловой поток, проходящий через j -сайт в единицу времени и обусловленный механической работой частиц слева и справа от j -частицы. Комплексы Π_1, Π_N определяют полный тепловой поток, проходящий через 1- и N -сайты в единицу времени и обусловленный механической работой случайных сил $\eta_1(t), \eta_N(t)$ и соседней частицы.

Для гармонической модели потенциал взаимодействия равен $U(x_j - x_{j-1}) = k(u_j - u_{j-1})^2/2$, где функция u_j задает смещение частицы из положения равновесия, а координата частицы x_j равна $x_j = ja + u_j$. При этом полагаем, что первая и последняя частицы упруго взаимодействуют с граничными точками, а для остальных точек внешний потенциал полагаем равным нулю:

$$V(x_1) = k\frac{u_1^2}{2}, \quad V(x_j) = 0 \text{ для } j=2, \dots, N-1, \quad V(x_N) = k\frac{u_N^2}{2}.$$

Соответствующие этим потенциалам уравнения движения (1) являются линейными:

$$\begin{aligned} m\ddot{u}_1 &= k(u_2 - 2u_1) - \gamma\dot{u}_1 + \eta_1, \\ m\ddot{u}_j &= k(u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}) - \gamma\dot{u}_j, \quad j=2, \dots, N-1, \\ m\ddot{u}_N &= k(u_N - 2u_{N-1}) - \gamma\dot{u}_N + \eta_N. \end{aligned} \quad (5)$$

В этом случае объект $J_{j-1,j}$ равен

$$J_{j-1,j} = \frac{k}{2}(\dot{u}_j + \dot{u}_{j-1})(u_j - u_{j-1}). \quad (6)$$

Перейдем к безразмерным переменным в (5), полагая $u_j \rightarrow au_j, t \rightarrow t_0 t$:

$$\begin{aligned} \frac{m}{t_0^2} a \ddot{u}_1 &= ka(u_2 - 2u_1) - \gamma \frac{a}{t_0} \dot{u}_1 + \eta_1, \\ \frac{m}{t_0^2} a \ddot{u}_j &= ka(u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}) - \gamma \frac{a}{t_0} \dot{u}_j, \quad j=2, \dots, N-1, \\ \frac{m}{t_0^2} a \ddot{u}_N &= ka(u_N - 2u_{N-1}) - \gamma \frac{a}{t_0} \dot{u}_N + \eta_N. \end{aligned} \quad (7)$$

Масштаб времени выбираем равным $t_0 = \sqrt{m/k}$; вместо параметра γ введем $\beta = \gamma t_0/m$, тогда система (7) записывается в виде

$$\begin{aligned} \ddot{u}_1 &= -\beta \dot{u}_1 + u_2 - 2u_1 + \chi_1(t), \\ \ddot{u}_j &= -\beta \dot{u}_j + u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}, \quad j=2, \dots, N-1, \\ \ddot{u}_N &= -\beta \dot{u}_N + u_{N-1} - 2u_N + \chi_N(t), \end{aligned} \quad (8)$$

где введены безразмерные функции

$$\chi_1(t) = \frac{t_0^2}{ma} \eta_1(t), \quad \chi_N(t) = \frac{t_0^2}{ma} \eta_N(t).$$

Используя (2), получаем, что корреляционные характеристики $\chi_1(t), \chi_N(t)$ даются соотношениями

$$\begin{aligned} \langle \chi_1(t_1), \chi_1(t_2) \rangle &= 2\sigma^2 \beta \frac{k_B T_1}{ka^2} \delta(t_1 - t_2), \\ \langle \chi_N(t_1), \chi_N(t_2) \rangle &= 2\sigma^2 \beta \frac{k_B T_N}{ka^2} \delta(t_1 - t_2), \\ \langle \chi_1(t_1), \chi_N(t_2) \rangle &= 0. \end{aligned}$$

Отсюда видно, что переход к безразмерной температуре Θ_1, Θ_N выполняется по формулам $\Theta_1 = k_B T_1/ka^2, \Theta_N = k_B T_N/ka^2$ и корреляционные характеристики равны:

$$\begin{aligned} \langle \chi_1(t_1), \chi_1(t_2) \rangle &= 2\sigma^2 \beta \Theta_1 \delta(t_1 - t_2), \\ \langle \chi_N(t_1), \chi_N(t_2) \rangle &= 2\sigma^2 \beta \Theta_N \delta(t_1 - t_2), \\ \langle \chi_1(t_1), \chi_N(t_2) \rangle &= 0. \end{aligned}$$

Отметим, что переход к безразмерному тепловому потоку выполняется после перенормировки $J_{j-1,j} \rightarrow J_{j-1,j} ka^3/t_0$, тогда в безразмерных переменных формула (6) записывается в виде

$$J_{j-1,j} = \frac{1}{2} (\dot{u}_j + \dot{u}_{j-1})(u_j - u_{j-1}). \quad (9)$$

Интересующая нас величина – среднее значение локального потока тепла

$$\langle J_{j-1,j} \rangle_\eta = \frac{1}{2} \langle (\dot{u}_j + \dot{u}_{j-1})(u_j - u_{j-1}) \rangle_\eta, \quad (10)$$

где скобки $\langle \rangle_\eta$ обозначают усреднение по всем реализациям случайных процессов η_1, η_N . Знание величины (10) позволяет вычислить полный тепловой поток $\langle \Pi_j \rangle_\eta$, проходящий через j -сайт:

$$\langle \Pi_j \rangle_\eta = -\langle J_{j,j-1} \rangle_\eta + \langle J_{j+1,j} \rangle_\eta. \quad (11)$$

2. Решение для гармонической модели

Решение системы (8) при $\beta=0$ подробно анализировалось в [6]. Общая идея его построения состояла в разложении по базису, образованному собственными векторами $\alpha_j = (\alpha_{j1}, \dots, \alpha_{jN})$ трехдиагональной матрицы системы (8) при $\beta=0$. Собственные числа $-\omega_j^2$ и векторы α_j матрицы были вычислены в [6], и мы воспользуемся полученными результатами при построении решения системы (8) для $\beta \neq 0$.

Поскольку рассматривается задача исследования характеристик (11), определяемых через случайные силы $\chi_1(t), \chi_N(t)$, то начальные условия полагаем нулевыми: $u_j(0)=0, \dot{u}_j=0$. Справедливо утверждение: решение u_i системы (8) дается формулой

$$u_j = \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{jk} \int_0^t ds \frac{\sin \omega_k(t-s)}{\omega_k} \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)], \quad (12)$$

$$\alpha_{jk} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin 2jz_k, \quad z_k = \frac{\pi k}{2(N+1)}, \quad \omega_k = 2 \sin z_k.$$

Проверим, что функция u_i (12) удовлетворяет системе (8) тождественно.

Дифференцируя (12) по времени, получаем

$$\dot{u}_j = \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{jk} \int_0^t ds \cos \omega_k(t-s) \exp[-\beta(t-s)] [\eta_1(s) + (-1)^{k+1} \eta_n(s)] - \beta \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{jk} \int_0^t ds \frac{\sin \omega_k(t-s)}{\omega_k} \exp[-\beta(t-s)] [\eta_1(s) + (-1)^{k+1} \eta_N(s)]. \quad (13)$$

Отсюда и из (12) следует справедливость нулевых начальных условий: $u_j(0)=0, \dot{u}_j(0)=0$. Вторая производная функции (13) равна

$$\ddot{u}_j = \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{jk} (\eta_1(t) + (-1)^{k+1} \eta_N(t)) - \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{jk} \omega_k \int_0^t ds \sin \omega_k(t-s) \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)] - 2\beta \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{jk} \int_0^t ds \cos \omega_k(t-s) \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_n(s)] + \beta^2 \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{jk} \int_0^t ds \frac{\sin \omega_k(t-s)}{\omega_k} \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)]. \quad (14)$$

Поскольку

$$\alpha_{(j-1)k} - 2\alpha_{jk} + \alpha_{(j+1)k} = -\omega_k^2 \alpha_{jk},$$

то отсюда и из (12) следует, что

$$\begin{aligned}
 u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1} &= \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} (\alpha_{(j-1)k} - 2\alpha_{jk} + \\
 &+ \alpha_{(j+1)k}) \int_0^t ds \frac{\sin \omega_k(t-s)}{\omega_k} \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)] = \\
 &= - \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{jk} \omega_k \int_0^t ds \sin \omega_k(t-s) \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)].
 \end{aligned} \tag{15}$$

Из-за ортогональности единичных векторов α_j [6] выполняются условия

$$\sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{jk} = \delta_{1j}, \quad \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} (-1)^{k+1} \alpha_{jk} = \sum_{k=1}^N \alpha_{Nk} \alpha_{jk} = \delta_{Nj}. \tag{16}$$

Следовательно, в этом случае формула (14) с учетом (15) редуцируется к виду

$$\begin{aligned}
 \ddot{u}_j &= u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1} - \\
 &- 2\beta \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{jk} \int_0^t ds \cos \omega_k(t-s) \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)] + \\
 &+ \beta^2 \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{jk} \int_0^t ds \frac{\sin \omega_k(t-s)}{\omega_k} \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)].
 \end{aligned} \tag{17}$$

Последние два слагаемых в (17) равны $-\beta \dot{u}_j$ (13), тогда (17) записывается в следующем виде:

$$\ddot{u}_j = u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1} - \beta \dot{u}_j,$$

то есть справедливы уравнения (4) для внутренних частиц.

При $j=1$ соотношение (14) имеет вид

$$\begin{aligned}
 \ddot{u}_1 &= \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{1k} (\chi_1(t) + (-1)^{k+1} \chi_N(t)) - \\
 &- \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{1k} \omega_k \int_0^t ds \sin \omega_k(t-s) \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)] - \\
 &- 2\beta \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{1k} \int_0^t ds \cos \omega_k(t-s) \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)] + \\
 &+ \beta^2 \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{1k} \int_0^t ds \frac{\sin \omega_k(t-s)}{\omega_k} \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)].
 \end{aligned} \tag{18}$$

Если использовать тождество $a_{2k} - 2a_{1k} = -\omega_k^2 a_{1k}$, то отсюда и из (12) следует

$$\begin{aligned}
 u_2 - 2u_1 &= \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} (\alpha_{2k} - 2\alpha_{1k}) \times \\
 &\times \int_0^t ds \frac{\sin \omega_k (t-s)}{\omega_k} \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)] = \\
 &= - \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{1k} \omega_k \int_0^t ds \sin \omega_k (t-s) \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)].
 \end{aligned} \tag{19}$$

Первая сумма в (18) вычисляется с помощью (16), вторая сумма определяется из (19), в результате получаем из (18) следующее соотношение:

$$\begin{aligned}
 \ddot{u}_1 &= \eta_1(t) + u_2 - 2u_1 - \\
 &- 2\beta \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{1k} \int_0^t ds \cos \omega_k (t-s) \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)] + \\
 &+ \beta^2 \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{1k} \int_0^t ds \frac{\sin \omega_k (t-s)}{\omega_k} \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)].
 \end{aligned}$$

Оно совпадает с первым уравнением системы (8), если воспользоваться (13) при $j=1$:

$$\ddot{u}_1 = \chi_1(t) + u_2 - 2u_1 - \beta \dot{u}_1.$$

Наконец, рассмотрим (14) при $j=N$:

$$\begin{aligned}
 \ddot{u}_N &= \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{Nk} [\chi_1(t) + (-1)^{k+1} \chi_N(t)] - \\
 &- \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{Nk} \omega_k \int_0^t ds \sin \omega_k (t-s) \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)] - \\
 &- 2\beta \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{Nk} \int_0^t ds \cos \omega_k (t-s) \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)] + \\
 &+ \beta^2 \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{Nk} \int_0^t ds \frac{\sin \omega_k (t-s)}{\omega_k} \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)].
 \end{aligned} \tag{20}$$

Поскольку $\alpha_{(N-1)k} - 2\alpha_{Nk} = -\omega_k^2 \alpha_{Nk}$, то

$$u_N - 2u_{N-1} = \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} (\alpha_{Nk} - 2\alpha_{(N-1)k}) \times$$

$$\begin{aligned} & \times \int_0^t ds \frac{\sin \omega_k(t-s)}{\omega_k} \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)] = \\ & = - \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{Nk} \omega_k \int_0^t ds \sin \omega_k(t-s) \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)]. \end{aligned} \quad (21)$$

Используя (16), (21), получаем из (20) соотношение

$$\begin{aligned} & \ddot{u}_N = \chi_N(t) + u_N - 2u_{N-1} - \\ & - 2\beta \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{Nk} \int_0^t ds \cos \omega_k(t-s) \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)] + \\ & + \beta^2 \sum_{k=1}^N \alpha_{1k} \alpha_{Nk} \int_0^t ds \frac{\sin \omega_k(t-s)}{\omega_k} \exp[-\beta(t-s)] [\chi_1(s) + (-1)^{k+1} \chi_N(s)]. \end{aligned} \quad (22)$$

Если воспользоваться (13) при $j=N$, то (22) совпадает с последним уравнением системы (8):

$$\ddot{u}_N = \chi_N(t) + u_N - 2u_{N-1} - \beta \dot{u}_N.$$

3. Полный тепловой поток

Для определения потоков (10), (11) следует вычислить величину $\langle (\dot{u}_{j+1} + \dot{u}_j) \times (u_{j+1} - u_j) \rangle_\eta$. Используя (12), (13), получаем

$$\begin{aligned} & \langle (\dot{u}_{j+1} + \dot{u}_j)(u_{j+1} - u_j) \rangle_\eta = \frac{8}{N+1} \sum_{\substack{k=1, \\ p=1}}^N \alpha_{1k} \alpha_{1p} \sin z_k \cos[z_k(2j+1)] \times \\ & \times \cos z_p \sin[z_p(2j+1)] \int_0^t ds \frac{\sin(\omega_k s) \cos(\omega_p s)}{\omega_k} \exp(-\beta s) [\Theta_1 + (-1)^{k+p} \Theta_N] - \\ & - \beta \frac{8}{n+1} \sum_{\substack{k=1, \\ p=1}}^N \alpha_{1k} \alpha_{1p} \sin z_k \cos[z_k(2j+1)] \cos z_p \sin[z_p(2j+1)] \times \\ & \times \int_0^t ds \frac{\sin \omega_k s}{\omega_k} \frac{\sin \omega_p s}{\omega_p} \exp(-\beta s) [\Theta_1 + (-1)^{k+p} \Theta_N]. \end{aligned} \quad (23)$$

Соотношение (23) позволяет найти поток для произвольного момента времени. Однако для исследователей представляет интерес поведение теплового потока в стационарном случае, что соответствует условию $t \rightarrow \infty$. Последний интеграл в (23)

равен

$$-\beta \int_0^{\infty} ds \frac{\sin \omega_k s}{\omega_k} \frac{\sin \omega_p s}{\omega_p} \exp(-\beta s) = - \int_0^{\infty} ds \exp(-\beta s) \left[\cos \omega_k s \frac{\sin \omega_p s}{\omega_p} + \frac{\sin \omega_k s}{\omega_k} \cos \omega_p s \right].$$

Тогда (23) редуцируется к виду

$$\begin{aligned} \langle (\dot{u}_{j+1} + \dot{u}_j)(u_{j+1} - u_j) \rangle_{\eta} &= \frac{8}{N+1} \sum_{\substack{k=1, \\ p=1}}^N \alpha_{1k} \alpha_{1p} \sin z_k \cos [z_k(2j+1)] \times \\ &\times \cos z_p \sin [z_p(2j+1)] \int_0^{\infty} ds \cos \omega_k s \frac{\sin \omega_p s}{\omega_p} \exp(-\beta s) [\Theta_1 + (-1)^{k+p} \Theta_N]. \end{aligned}$$

Воспользуемся справочными формулами:

$$\begin{aligned} \sin(\omega_p s) \cos(\omega_k s) &= \frac{1}{2} [\sin(\omega_- s) + \sin(\omega_+ s)], \quad \omega_- = \omega_p - \omega_k, \quad \omega_+ = \omega_p + \omega_k, \\ \int_0^{\infty} ds \sin(\omega s) \exp(-\beta s) &= \frac{\omega}{\omega^2 + \beta^2}. \end{aligned}$$

Это позволяет определить

$$R_{kp} \equiv \int_0^{\infty} ds \sin(\omega_k s) \cos(\omega_p s) \exp(-\beta s) = \frac{1}{2} \left[\frac{\omega_-}{\omega_-^2 + \beta^2} + \frac{\omega_+}{\omega_+^2 + \beta^2} \right]. \quad (24)$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \langle (\dot{u}_{j+1} + \dot{u}_j)(u_{j+1} - u_j) \rangle_{\eta} &= \frac{4}{N+1} \sum_{\substack{k=1, \\ p=1}}^N \alpha_{1k} \alpha_{1p} \times \\ &\times \sin z_k \cos [z_k(2j+1)] \text{ctg} z_p \sin [z_p(2j+1)] R_{kp} [T_1 + (-1)^{k+p} T_N]. \end{aligned} \quad (25)$$

Введем функции

$$\begin{aligned} S_1 = S_1(j, N) &= \frac{4}{N+1} \sum_{\substack{k=1, \\ p=1}}^N \alpha_{1k} \alpha_{1p} \sin z_k \cos [z_k(2j+1)] \text{ctg} z_p \sin [z_p(2j+1)] R_{kp}, \\ S_2 = S_2(j, N) &= \frac{4}{N+1} \sum_{\substack{k=1, \\ p=1}}^N \alpha_{1k} \alpha_{1p} \sin z_k \cos [z_k(2j+1)] \text{ctg} z_p \sin [z_p(2j+1)] R_{kp} (-1)^{k+p}. \end{aligned}$$

Тогда выражение (25) представим в виде

$$\begin{aligned} \langle (\dot{u}_{j+1} + \dot{u}_j)(u_{j+1} - u_j) \rangle_{\eta} &= S_1 \Theta_1 + S_2 \Theta_N = \Sigma_-(j, N) (\Theta_N - \Theta_1) + \Sigma_+(j, N) (\Theta_N + \Theta_1), \\ \Sigma_-(j, N) &= \frac{(S_2 - S_1)}{2}, \quad \Sigma_+(j, N) = \frac{(S_2 + S_1)}{2}. \end{aligned}$$

Отсюда и из (10), (11) получаем представление для среднего значения локального потока тепла и полного теплового потока:

$$\langle J_{j-1,j} \rangle_\eta = \Sigma_-(j, N) \frac{\Theta_N - \Theta_1}{2} + \Sigma_+(j, N) \frac{\Theta_N + \Theta_1}{2}, \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \langle \Pi_j \rangle_\eta = & [\Sigma_-(j, N) - \Sigma_-(j-1, N)] \frac{\Theta_N - \Theta_1}{2} + \\ & + [\Sigma_+(j, N) - \Sigma_+(j-1, N)] \frac{\Theta_N + \Theta_1}{2}. \end{aligned} \quad (27)$$

4. Выбор параметров и тестовые расчеты

Полученные соотношения были использованы для численного анализа поведения исследуемых характеристик. При выборе значений параметров необходимо гарантировать объективность представления результатов. В частности, для используемой модели параметр β носит регуляризирующий характер и обеспечивает сходимость интегралов. Поэтому объективного характера результатов можно достичь при малых значениях β с последующим контролем поведения характеристик в зависимости от β . Из (24) видно, что при условии $\beta^2 \ll \min_{1 \leq p \neq k \leq N} \omega_{\pm}^2$ зависимость статистических средних от β становится несущественной. Поскольку функция $\omega_k = 2 \sin z_k$ является монотонной по переменной z_k , то $|\omega_+| > |\omega_-|$ и достаточно обеспечить выполнения неравенства

$$\beta^2 \ll \min_{1 \leq p \neq k \leq N} |\omega_-^2|. \quad (28)$$

Очевидно, что

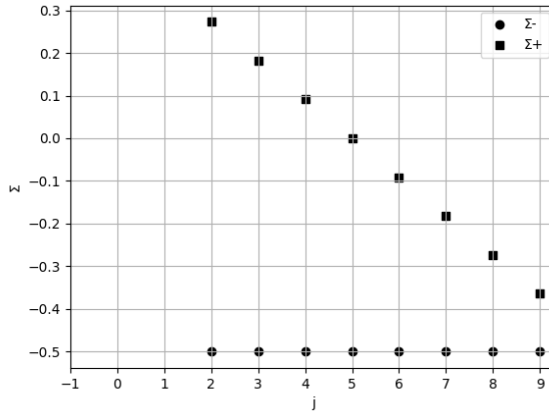
$$|\omega_-| = |\omega_p - \omega_k| = 4 \sin \frac{|z_p - z_k|}{2} \cos \frac{z_p + z_k}{2}. \quad (29)$$

Для вычисления величины $\min_{1 \leq p \neq k \leq N} |\omega_-|$ можно находить независимо значения аргумента, при котором каждый из множителей справа в (29) достигает минимума. Из-за монотонности функции $\sin \frac{|z_p - z_k|}{2}$ на интервале $(0, \pi/2)$ ее минимальное значение обеспечивается при $|p - k| = 1$, т.е. для $|z_p - z_k| = \frac{\pi}{2(N+1)} \equiv z_1$. При этом условии, выбирая $p \geq k$, получаем $z_p + z_k = 2z_k + z_1$, и минимальное значение $\cos \frac{z_p + z_k}{2} = \cos(z_k + z_1/2)$ достигается при $k = N$. Отсюда и из (29) получаем

$$\min_{1 \leq p \neq k \leq N} |\omega_-| = 4 \sin \frac{z_1}{2} \cos \left(z_N + \frac{z_1}{2} \right) = 4 \sin \frac{z_1}{2} \cos \left(\frac{\pi}{2} - \frac{z_1}{2} \right) = 4 \left(\sin \frac{z_1}{2} \right)^2.$$

Тогда требование (28) записывается в виде

$$\beta^2 \ll 16 \left(\sin \frac{\pi}{4(N+1)} \right)^4. \quad (30)$$

Рис. 1. Поведение Σ_- и Σ_+ в зависимости от j при $N=10$, $\beta=10^{-3}$ Таблица 1. Значения величин Σ_- и Σ_+ для разных j , N при $\beta=10^{-3}$

N = 10			N = 50			N = 200		
j	Σ_-	Σ_+	j	Σ_-	Σ_+	j	Σ_-	Σ_+
2	-0.4999815	0.2727228	5	-0.49977	0.3921	5	-0.4991	0.4723
3	-0.4999765	0.1818143	10	-0.4996	0.29404	10	-0.4982	0.4472
4	-0.4999735	0.0909064	15	-0.49948	0.19601	15	-0.4974	0.4221
5	-0.4999725	-0.0000011	20	-0.4994	0.098	20	-0.4967	0.3971
6	-0.4999735	-0.0909086	25	-0.49938	-0.0	25	-0.496	0.3721
7	-0.4999765	-0.1818164	30	-0.4994	-0.098	30	-0.4954	0.3471
8	-0.4999815	-0.2727248	35	-0.49948	-0.19601	35	-0.4948	0.3222
9	-0.4999885	-0.3636341	40	-0.4996	-0.29404	40	-0.4943	0.2973
			45	-0.49977	-0.3921	45	-0.4938	0.2724

Для тестовых расчетов были выбраны значения $N=10, \beta=10^{-3}$, что соответствует выполнению условия (30). Результаты представлены в таблице 1 и графически. Их анализ показывает, что изменения значений $\Sigma_-(j, N)$ происходят в пятом знаке после запятой, т.е. с погрешностью $10^{-3}\%$. С такой же точностью поведение $\Sigma_+(j, N)$ по j является линейным (Рис. 1).

Представлены также результаты при значениях $N=50, \beta=10^{-3}$, для которых неравенство (30) нарушено. Однако в этом случае качественное поведение $\Sigma_-(j, N)$, $\Sigma_+(j, N)$ не изменяется: с точностью $10^{-2}\%$ значения $\Sigma_-(j, N)$ остаются постоянными, а $\Sigma_+(j, N)$ линейно зависит от j (Рис. 2). Сохранение функционального поведения $\Sigma_-(j, N)$, $\Sigma_+(j, N)$ при невыполнении неравенства (30) можно объяснить следующим образом. Выполнение ограничения (28) приводит к необходимости анализировать вклад в сумму (25) слагаемых с номерами p, k , находящихся в окрестности диагонали $|z_p - z_k| = z_1$. Число таких слагаемых порядка N , тогда как общее число слагаемых суммы равно N^2 . Поэтому при вычислении характеристик в (25) вклад диагональных слагаемых является малым по сравнению со вкладом остальных сла-

гаемых, что и приводит к сохранению функциональных свойств $\Sigma_-(j, N), \Sigma_+(j, N)$. Для сравнения приведены также результаты для $N=200, \beta=10^{-3}$, при которых неравенство (30) заведомо не выполнено. В этом случае расхождение значений $\Sigma_-(j, N)$ при $N=50$ и $N=200$ для одинаковых j не превосходит $10^{-1}\%$ (Таблица 1). Линейное поведение $\Sigma_+(j, N)$ от j сохраняется, однако количественные значения $\Sigma_+(j, N)$ для одинаковых j для разных N отличаются существенно.

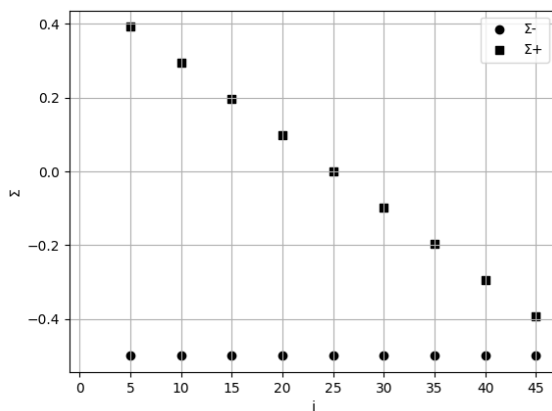


Рис. 2. Поведение Σ_- и Σ_+ в зависимости от j при $N=50, \beta=10^{-3}$

5. Обсуждение

Начальная мотивация при выполнении данной работы состояла в обосновании результата исследователей [3–5], говорящего о поведении стационарного теплового потока в одномерной гармонической цепочке, состоящей из N частиц. В их работах указано, что поток пропорционален разности температур резервуаров, между которыми располагается цепочка. Полученный в нашей работе результат уточняет выводы [3–5] для использованной модели цепочки.

Соотношение (26) показывает, что локальный тепловой поток включает две компоненты. Первая из них пропорциональна разности температур, что соответствует результатам [3–5]. Выполненные тестовые расчеты показали, что величина $\Sigma_-(j, N)$, определяющая коэффициент при этой разности, незначительно меняется в зависимости от N . С физической точки зрения $\Sigma_-(j, N)$ определяет коэффициент теплопроводности цепочки при отклонении от теплового равновесия, фиксируемого требованием равенства температур резервуаров. Таким образом, можно полагать, что коэффициент переноса тепла не зависит от размера цепочки, что также отмечено в [3–5].

Дополнительным результатом данной работы является установление факта, что для гармонической модели цепочки тепловой поток содержит ненулевую компоненту, существующую в условиях теплового равновесия. Она пропорциональна средней температуре резервуаров, и причиной ее появления является действие внешних сил.

Список литературы

- [1] М. А. Гузев, А. А. Дмитриев, “Тепловой поток в модели Ланжевена для двух частиц”, *Дальневосточный матем. журнал*, **21**:1 (2021), 39–44, <https://doi.org/10.47910/FEMJ202103>.
- [2] B. Luis, “Active Ornstein-Uhlenbeck particles”, *Physical Review E*, **100** (2019), <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.022601>.
- [3] S. Lepri, R. Livi, A. Politi, “Thermal conduction in classical low-dimensional lattices”, *Physics Reports*, **377** (2003), 1–80, [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(02\)00558-6](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(02)00558-6).
- [4] 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, <https://doi.org/10.1023/B:JOSS.0000037232.14365.10>.
- [5] A. Dhar, R. Dandekar, “Heat transport and current fluctuations in harmonic crystals”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **418** (2015), 49–64.
- [6] М. А. Гузев, А. А. Дмитриев, “Различные формы представления решения одномерной гармонической модели кристалла”, *Дальневосточный матем. журнал*, **17**:1 (2017), 30–47.

Поступила в редакцию
19 октября 2021 г.

*Guzev M. A.*¹, *Gorbunov A. V.*¹ Heat flux structure for Ornstein – Uhlenbeck particles of a one-dimensional harmonic chain. *Far Eastern Mathematical Journal*. 2021. V. 21. No 2. P. 180–193.

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

ABSTRACT

A one-dimensional harmonic chain of N particles is considered, located between two thermal reservoirs (Ornstein – Uhlenbeck particles). An exact solution is constructed for the system of equations describing the dynamics of the system. On the basis of this solution, an analytical expression is obtained for the discrete expression of the heat flux of the model under study, when the time $t \rightarrow \infty$, which corresponds to the consideration of stationary transport conditions. It is shown that the heat flux includes two physically different components. The first of them is proportional to the temperature difference between the reservoirs and characterizes the heat transfer along the chain. The second determines the initial value of the flow when the temperatures of the tanks are equal.

Key words: *Ornstein – Uhlenbeck particles, heat flux.*

References

- [1] М. А. Гузев, А. А. Дмитриев, “Тепловой поток в модели Ланжевена для двух частиц”, *Dal’nevostochnyi matem. zhurnal*, **21**:1 (2021), 39–44, <https://doi.org/10.47910/FEMJ202103>.

-
- [2] B. Luis, “Active Ornstein-Uhlenbeck particles”, *Physical Review E*, **100** (2019), <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.022601>.
- [3] S. Lepri, R. Livi, A. Politi, “Thermal conduction in classical low-dimensional lattices”, *Physics Reports*, **377** (2003), 1–80, [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(02\)00558-6](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(02)00558-6).
- [4] 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, <https://doi.org/10.1023/B:JOSS.0000037232.14365.10>.
- [5] A. Dhar, R. Dandekar, “Heat transport and current fluctuations in harmonic crystals”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **418** (2015), 49-64.
- [6] M. A. Guzev, A. A. Dmitriev, “Razlichnyye formy predstavleniya resheniya odnomernoy garmonicheskoy modeli kristalla”, *Dal’nevostochnyi matem. zhurnal*, **17**:1 (2017), 30-47.