

УДК 539.3

ТЕРМОУПРУГОСТЬ ОДНОМЕРНОЙ ЦЕПОЧКИ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ

© 2003 г. А. М. Кривцов

The equations of nonlinear theory of thermoelasticity are derived for one-dimensional chain formed by particles interacting via pair potential forces. Decomposition of the motions in slow (time-averaged) and oscillational component is used. For the slow component the long-wave approximation is applied. The microscopic interpretations for such macroscopic quantities as pressure, thermal energy and heat flux are given. For the adiabatic approximation the equations of state and closed system of macroscopic equations are obtained. The derived equations of state in a particular case can be reduced to the Mie-Grüneisen equation of state, but they have much wider area of applicability, in particular, they can be used for the strong tension of the chain up to the breakage point.

1 Введение

Хаотические процессы играют существенную роль при сильном деформировании и разрушении твердых тел. В частности, экспериментальные [1] и компьютерные [2], [3] исследования показывают, что хаотическая составляющая скоростей во фронте ударной волны оказывает существенное влияние на откольную прочность. На микроскопическом масштабном уровне эта хаотическая компонента тесно связана с тепловой энергией и температурой, а на мезоскопическом масштабном уровне она может описываться дисперсией скоростей мезочастиц [1]. Фундаментальные законы оставляют слишком много произвола для записи термодинамических уравнений состояния, которые необходимы для замыкания макроскопических уравнений движения. В частности, одним из широко используемых уравнений состояния является уравнение Ми-Грюнайзена [4], [5]

$$p = p(V, E_T) = p_0(V) + p_T(V, E_T),$$

$$p_T(V, E_T) = \Gamma(V) \frac{E_T}{V}, \quad (1.1)$$

в котором давление p представляется в виде суммы двух компонент. Первая из них, “холодное” давление p_0 является функцией только удельного объема V (величины, обратной плотности). Вторая компонента — тепловое давление p_T , являющееся функцией V и удельной тепловой энергии E_T . Безразмерный коэффициент $\Gamma(V)$, зависящий только от удельного объема, носит название коэффициента Грюнайзена. Отметим, что именно утверждение, что коэффициент Грюнайзена не зависит от тепловой энергии E_T , превращает уравнение (1.1) из тождества в уравнение состояния. Конкретная зависимость коэффициента Грюнайзена от удельного объема до сих пор является предметом дискуссий, так как экспериментальные данные в этой области обычно недостаточны. В результате простые приближения, которые широко используются в численных расчетах, подчас приводят к различного рода неустойчивостям и

могут послужить причиной физически некорректных результатов [5].

При использовании метода частиц [6] уравнение состояния, аналогичное уравнению Ми-Грюнайзена, связывающее давление и энергию хаотического движения частиц, может быть получено как аналитически, так и в ходе моделирования, что дает возможность для детального анализа влияния хаотического и теплового движения на процессы деформирования и разрушения. В данной статье предлагается аналитический вывод континуальных уравнений движения одномерной цепочки с учетом хаотического движения частиц. Для получения макроскопических уравнений предлагается метод, использующий временное осреднение, что сближает его с методикой, применяемой в вибрационной механике [7], и отличает его от подходов, используемых в статистической физике, где осреднение ведется по фазовому пространству [4, 8]. Причина такого предпочтения состоит в его относительной простоте и удобстве для применения к численному моделированию методом частиц. При подобном подходе удастся ограничиться рассмотрением только трех термодинамических величин — давления, объема и тепловой энергии. Подобный набор термодинамических параметров обычно достаточен для описания быстрых ударных процессов, при которых явлениями, связанными с теплопроводностью, можно пренебречь.

Ниже уравнения состояния будут получены во втором приближении по малому тепловому параметру. Обычно второе приближение рассматривают как уточнение первого приближения, т.е. второе слагаемое в разложении тепловой энергии считается много меньше первого [4]. Напротив, уравнение состояния, полученное ниже, справедливо даже в случае, когда первый член в разложении обращается в нуль. Это позволяет использовать данное уравнение состояния при сильном растяжении цепочки вплоть до ее разрыва, что чрезвычайно важно для описания процесса разрушения, и, в частности, откольного разрушения. Для равновесного состояния цепочки, без разделения движений, данные уравне-

ния были получены ранее в [9, 10].

2 Уравнения движения

Рассмотрим продольные колебания в одномерной цепочке, содержащей одинаковые частицы, взаимодействующие посредством некоторой потенциальной силы. Ограничим рассмотрение случаем, когда учитывается взаимодействие только между двумя ближайшими соседями. Уравнения движения частиц может быть записано в форме

$$\begin{aligned} m\ddot{u}_n &= \Phi_n, & \Phi_n &\stackrel{\text{def}}{=} F_{n+1} - F_n, \\ F_n &= -f(a + \Delta_n), & \Delta_n &\stackrel{\text{def}}{=} u_n - u_{n-1}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Здесь n — индекс, пробегающий целые значения от 1 до N , где N — число частиц в цепочке; u_n — перемещение частицы; F_n — сила, действующая на частицу $n-1$ со стороны частицы n ; функция f определяет силу взаимодействия между двумя частицами (отталкивание положительно); a — равновесное расстояние между частицами в цепочке. Будем использовать периодические граничные условия. Задать их удобно следующим образом: пусть индекс n может принимать любые целые значения, однако при этом должно выполняться условие периодичности $u_{n+N} \equiv u_n$. Будем считать, что в положении равновесия цепочка может быть сжата или растянута, т.е. равновесная сила взаимодействия не обязательно равна нулю.

3 Разделение движений

Введем оператор осреднения

$$\begin{aligned} \overline{\varphi_n(t)} &\stackrel{\text{def}}{=} \langle \varphi_n(t) \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \\ &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{T\Lambda} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \left(\sum_{k=n-\Lambda/2}^{n+\Lambda/2} \varphi_k(\tau) \right) d\tau. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Согласно (3.1), осреднение проводится как по времени, так и по координате. Период осреднения T и интервал осреднения Λ выбираются так, чтобы

$$T_{\min} \ll T \ll T_{\max}, \quad 1 \ll \Lambda \ll N,$$

где T_{\min} и T_{\max} — минимальный и максимальный периоды колебаний в системе. Любая величина может быть представлена в виде суммы медленной (осредненной) и осцилляционной компонент

$$\varphi_n(t) = \overline{\varphi_n(t)} + \widetilde{\varphi_n(t)}, \quad \text{где } \widetilde{\varphi_n(t)} \stackrel{\text{def}}{=} \varphi_n(t) - \overline{\varphi_n(t)}.$$

Очевидно, справедливы следующие тождества:

$$\langle \overline{\varphi_n(t)} \rangle \equiv \overline{\varphi_n(t)}, \quad \langle \widetilde{\varphi_n(t)} \rangle \equiv 0. \quad (3.2)$$

Будем считать, что значения осредненных величин близки для соседних частиц. Тогда для осредненных величин может быть использовано длинноволновое приближение, состоящее в том [11], что функции дискретного аргумента n заменяются функциями непрерывного аргумента x , медленно изменяющимися на расстояниях порядка a :

$$\begin{aligned} \overline{\varphi_n(t)} &= \varphi(x, t), & \overline{\varphi_{n+1}(t)} &= \varphi(x + a, t) \approx \\ &\approx \varphi(x, t) + a \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x, t) & \text{при } x = na. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Отметим, что координата x отвечает отсчетному равновесному состоянию цепочки, т.е. она является материальной (лагранжевой) координатой. Далее, для удобства записи, зависимость от аргументов t и x указывать не будем, в результате чего соотношения (3.3) могут быть записаны в виде

$$\overline{\varphi_n} = \varphi, \quad \overline{\varphi_{n+1}} \approx \varphi + a\varphi'; \quad \varphi' \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial}{\partial x} \varphi.$$

Таким образом, если индекс n не указан, то соответствующая величина считается функцией непрерывной переменной x . Причем эта функция медленно изменяющаяся, что может быть выражено соотношением

$$|a\varphi'| \ll |\varphi|.$$

4 Осреднение уравнений движения

Применение оператора осреднения к уравнениям движения (2.1) дает

$$m\ddot{\overline{u}}_n = \overline{\Phi}_n, \quad \overline{\Phi}_n = \overline{F_{n+1}} - \overline{F_n} \approx aF'. \quad (4.1)$$

Так как операторы дифференцирования и осреднения перестановочны, то уравнения (4.1) могут быть записаны в виде дифференциального уравнения для осредненных величин

$$m\rho_0\ddot{u} = F', \quad \rho_0 \stackrel{\text{def}}{=} 1/a. \quad (4.2)$$

Здесь ρ_0 имеет смысл плотности частиц в отсчетной конфигурации (число частиц в единице объема). Это классическое уравнение баланса количества движения в континуальной одномерной среде. Перемещение $u = u(x, t)$ и усилие $F = F(x, t)$ являются функциями материальной координаты x и времени t , точка обозначает частную производную по времени. Очевидно, что $\dot{u} = v$, где $v = \overline{v_n}$.

Сила F в уравнении (4.2) может быть представлена в виде суммы двух составляющих — холодной F_0 и тепловой F_T

$$F = F_0 + F_T; \quad F_0 \stackrel{\text{def}}{=} -f(a + \Delta), \quad (4.3)$$

$$F_T \stackrel{\text{def}}{=} F - F_0,$$

где $\Delta = \overline{\Delta_n} = \overline{u_n} - \overline{u_{n-1}}$ — среднее значение деформации. Сила F равна с противоположным знаком давлению p , которое аналогичным образом может быть разложено на две составляющие — холодную и тепловую

$$p = -F = p_0 + p_T; \quad p_0 \stackrel{\text{def}}{=} f(a + \Delta), \\ p_T \stackrel{\text{def}}{=} \left\langle f(a + \Delta_n) - f(a + \Delta) \right\rangle.$$

5 Осредненные энергетические характеристики

Осредненная кинетическая энергия одной частицы равна

$$\mathcal{K} = \left\langle \frac{1}{2} m v_n^2 \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} m (\overline{v_n} + \widetilde{v_n})^2 \right\rangle = \\ = \frac{1}{2} m \overline{v_n}^2 + \frac{1}{2} m \langle \widetilde{v_n}^2 \rangle.$$

Здесь использованы тождества (3.2). Таким образом, осредненная кинетическая энергия разбивается на сумму двух компонент, которые будем обозначать \mathcal{K}_0 и \mathcal{K}_T , и называть, холодной и тепловой кинетическими энергиями:

$$\mathcal{K} = \mathcal{K}_0 + \mathcal{K}_T; \quad \mathcal{K}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} m v^2; \\ \mathcal{K}_T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} m \sigma^2, \quad \sigma^2 \stackrel{\text{def}}{=} \langle \widetilde{v_n}^2 \rangle, \quad (5.1)$$

где v — средняя скорость; σ^2 — дисперсия скоростей частиц.

Обозначим потенциальную энергию взаимодействия двух частиц, находящихся на расстоянии r как $\Pi(r)$. Очевидно, сила взаимодействия частиц связана с потенциальной энергией соотношением $f(r) = -\Pi'(r)$. Осредненная потенциальная энергия, приходящаяся на одну частицу, равна

$$\mathcal{U} = \frac{1}{2} \left\langle \Pi(a + \Delta_n) + \Pi(a + \Delta_{n+1}) \right\rangle \approx \\ \approx \left\langle \Pi(a + \Delta_n) \right\rangle. \quad (5.2)$$

Здесь мы пренебрегли слагаемыми порядка $|a\mathcal{U}'| \ll |\mathcal{U}|$. По аналогии с (4.3), разобьем потенциальную энергию на две компоненты — холодную \mathcal{U}_0 и тепловую \mathcal{U}_T

$$\mathcal{U} = \mathcal{U}_0 + \mathcal{U}_T; \\ \mathcal{U}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \Pi(a + \Delta), \\ \mathcal{U}_T \stackrel{\text{def}}{=} \left\langle \Pi(a + \Delta_n) - \Pi(a + \Delta) \right\rangle.$$

Осредненная полная энергия, приходящаяся на одну частицу, равна

$$\mathcal{E} = \mathcal{K} + \mathcal{U} = \mathcal{E}_0 + \mathcal{E}_T, \\ \mathcal{E}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{K}_0 + \mathcal{U}_0, \quad \mathcal{E}_T \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{K}_T + \mathcal{U}_T. \quad (5.3)$$

Введенные выше энергии отвечают микроскопическому рассмотрению системы. При макро-скопическом подходе полная удельная энергия системы E является суммой удельной кинетической энергии K и удельной внутренней энергии U , которая в свою очередь может быть разбита на холодную энергию U_0 и тепловую энергию U_T

$$E = K + U, \quad U = U_0 + U_T. \quad (5.4)$$

Отметим, что на макроуровне, в отличие от микроскопики, кинетическая энергия не имеет тепловой составляющей. Введем следующую связь между холодными макро- и микроскопическими энергиями

$$K = \mathcal{K}_0, \quad U_0 = \mathcal{U}_0.$$

Тогда, полагая $\mathcal{E} \equiv E$, из сравнения уравнений (5.3) и (5.4) получим формулы связи тепловых энергий на микро- и макроуровнях:

$$U_T = \mathcal{K}_T + \mathcal{U}_T = \mathcal{E}_T.$$

6 Баланс энергии

Рассмотрим микроскопические энергии. Вычислим сначала производные от холодных составляющих кинетической и потенциальной энергии. Для кинетической энергии имеем

$$\dot{\mathcal{K}}_0 = m v \dot{v} \Rightarrow \rho_0 \dot{\mathcal{K}}_0 = v F'.$$

Здесь использовано уравнение движения (4.2). Для потенциальной энергии

$$\dot{\mathcal{U}}_0 = \frac{\partial}{\partial t} \Pi(a + \Delta) = -f(a + \Delta) \dot{\Delta} = F_0 \dot{\Delta}. \quad (6.1)$$

Перейдем теперь к вычислению производных от тепловых составляющих энергий. Вычитание из полных уравнений движения (2.1) осредненных (4.1) дает уравнения для осцилляционных компонент

$$m \ddot{\widetilde{u}}_n = \widetilde{\Phi}_n. \quad (6.2)$$

Домножим полученные уравнения на \widetilde{v}_n и осредним

$$m \widetilde{v}_n \dot{\widetilde{v}}_n = \widetilde{\Phi}_n \widetilde{v}_n \Rightarrow \left(\frac{1}{2} m \widetilde{v}_n^2 \right)' = \widetilde{\Phi}_n \widetilde{v}_n \Rightarrow \\ \Rightarrow \dot{\mathcal{K}}_T = \left\langle \widetilde{\Phi}_n \widetilde{v}_n \right\rangle. \quad (6.3)$$

Здесь использовано определение (5.1) для тепловой составляющей микроскопической кинетической

энергии. Преобразуем правую часть полученного уравнения

$$\begin{aligned} \langle \widetilde{\Phi}_n \widetilde{v}_n \rangle &= \langle \widetilde{F}_{n+1} \widetilde{v}_n \rangle - \langle \widetilde{F}_n \widetilde{v}_n \rangle = \\ &= \langle \widetilde{F}_{n+1} \widetilde{v}_n \rangle - \langle \widetilde{F}_n \widetilde{v}_n \rangle + \\ &+ \langle \widetilde{F}_n \widetilde{v}_{n-1} \rangle - \langle \widetilde{F}_n \widetilde{v}_{n-1} \rangle = \\ &= -\langle \widetilde{F}_n \dot{\Delta}_n \rangle + \langle \widetilde{F}_{n+1} \widetilde{v}_n \rangle - \langle \widetilde{F}_n \widetilde{v}_{n-1} \rangle. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Обозначим

$$\begin{aligned} h_n \stackrel{\text{def}}{=} \langle \widetilde{F}_n \widetilde{v}_{n-1} \rangle &\Rightarrow \langle \widetilde{F}_n \widetilde{v}_{n-1} \rangle = \overline{h}_n = h, \\ \langle \widetilde{F}_{n+1} \widetilde{v}_n \rangle &= \overline{h}_{n+1} \approx h + ah'. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Подстановка (6.4) и (6.5) в (6.3) дает выражение для производной тепловой составляющей средней кинетической энергии частицы

$$\dot{\mathcal{K}}_T = \langle \widetilde{\Phi}_n \widetilde{v}_n \rangle = -\langle \widetilde{F}_n \dot{\Delta}_n \rangle + ah', \quad (6.6)$$

$$h \stackrel{\text{def}}{=} \langle \widetilde{F}_n \widetilde{v}_{n-1} \rangle.$$

Вычислим теперь производную от средней потенциальной энергии, приходящейся на частицу

$$\begin{aligned} \dot{U} &= \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \Pi(a + \Delta_n) \right\rangle = \langle -f(a + \Delta_n) \dot{\Delta}_n \rangle = \\ &= \langle F_n \dot{\Delta}_n \rangle = F \dot{\Delta} + \langle \widetilde{F}_n \dot{\Delta}_n \rangle. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Здесь использованы разложение величин на осредненную и осцилляционную компоненты и тождества (3.2). Вычитая из (6.7) уравнение (6.1), получим выражение для производной от тепловой составляющей потенциальной энергии

$$\dot{U}_T = F_T \dot{\Delta} + \langle \widetilde{F}_n \dot{\Delta}_n \rangle. \quad (6.8)$$

Складывая уравнения (6.6) и (6.8) для кинетической и потенциальной энергий, получим уравнение баланса полной микроскопической тепловой энергии

$$\dot{\mathcal{E}}_T = \dot{\mathcal{K}}_T + \dot{U}_T = F_T \dot{\Delta} + ah'.$$

Для того, чтобы привести уравнения баланса к окончательному виду, вычислим $\dot{\Delta}$

$$\dot{\Delta} = \overline{v}_n - \overline{v}_{n-1} \approx av' \equiv ai'.$$

Отметим, что так как используется материальное описание, то операторы дифференцирования по координате и времени перестановочны.

7 Связь микро- и макроскопических величин

Выпишем полученные уравнения баланса

$$\begin{aligned} \rho_0 \dot{\mathcal{K}}_0 &= vF', \quad \rho_0 \dot{U}_0 = F_0 v', \\ \rho_0 \dot{\mathcal{E}}_T &= \rho_0 (\dot{\mathcal{K}}_T + \dot{U}_T) = F_T v' + h'. \end{aligned}$$

Эти уравнения описывают скорость изменения осредненных энергий, соответствующих микроскопическому описанию цепочки. Перепишем их теперь в терминах макроскопических энергий, заменив при этом силы на давления

$$\begin{aligned} \rho_0 \dot{K} &= -vp', \quad \rho_0 \dot{U}_0 = -p_0 v', \\ \rho_0 \dot{U}_T &= -p_T v' + h'. \end{aligned} \quad (7.1)$$

Первые два уравнения тривиальны, они непосредственно следуют из тождеств

$$K = \frac{1}{2} mv^2, \quad p_0 = -\frac{dU_0}{d\Delta} = -\rho_0 \frac{dU_0}{du'}$$

и уравнения баланса количества движения (4.2). Последнее же уравнение из (7.1) существенно, оно описывает баланс тепловой составляющей внутренней энергии и необходимо для замыкания системы уравнений движения при учете тепловых эффектов. Величина h , производная от которой входит в правую часть этого уравнения, имеет макроскопический смысл теплового потока в среде. Таким образом, получаем окончательно следующую систему уравнений движения

$$m\rho_0 \dot{v} = -p'_0 - p'_T, \quad \rho_0 \dot{U}_T = -p_T v' + h'. \quad (7.2)$$

Первое из них описывает баланс количества движения, второе — баланс тепловой энергии. Входящие в уравнения величины следующим образом выражаются через микроскопические параметры цепочки

$$\begin{aligned} \rho_0 &= 1/a, \quad v = \overline{v}_n, \\ p_0 &= f(a + \overline{\Delta}_n), \quad p_T = \langle f(a + \Delta_n) - p_0 \rangle, \end{aligned} \quad (7.3)$$

$$\begin{aligned} U_T &= \frac{1}{2} m\sigma^2 + \langle \Pi(a + \Delta_n) - \Pi(a + \overline{\Delta}_n) \rangle, \\ \sigma^2 &= \langle \widetilde{v}_n^2 \rangle, \quad h = \langle \widetilde{F}_n \widetilde{v}_{n-1} \rangle. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Для замыкания макроскопических уравнений движения (7.2) необходимы уравнения состояния (определяющие уравнения), выражающие давление p , тепловую энергию U_T и тепловой поток h как функции (операторы) двух макроскопических переменных, например, удельного объема V и температуры ϑ . Удельный объем V , приходящийся на одну частицу в актуальной конфигурации, связан с приращением Δ_n и перемещением u

$$V = a + \overline{\Delta}_n \approx a + au'.$$

Это позволяет записать определяющее уравнение для p_0

$$p_0 = f(V) = f(a + au'). \quad (7.5)$$

Получить уравнения состояния для величин p_T , U_T , h , определяющихся тепловым состоянием системы, значительно сложнее. Относительно просто могут быть описаны те слагаемые в системе (7.3)–(7.4), которые определяются деформацией Δ_n . Сложнее дело обстоит с дисперсией σ^2 и тепловым потоком h , так как они определяются осцилляционной компонентой скорости \tilde{v}_n . Для дисперсии эта проблема может быть преодолена, и дисперсия может быть выражена через деформацию Δ_n . Это будет рассмотрено ниже.

8 Виральное преобразование

Рассмотрим дисперсию скоростей $\sigma^2 = \langle \tilde{v}_n^2 \rangle$. Воспользуемся тождеством

$$\langle \tilde{v}_n^2 \rangle = \langle (\tilde{u}_n \tilde{v}_n) \dot{} \rangle - \langle \tilde{u}_n \dot{\tilde{v}}_n \rangle.$$

Заменив $\dot{\tilde{v}}_n$ его выражением из уравнения движения (6.2), получим

$$m\sigma^2 = \langle \tilde{u}_n \tilde{v}_n \dot{} \rangle - \langle \tilde{\Phi}_n \tilde{u}_n \rangle. \quad (8.1)$$

Второе слагаемое может быть преобразовано аналогично тому, как это было сделано при выводе баланса кинетической энергии (6.4)–(6.6):

$$\langle \tilde{\Phi}_n \tilde{u}_n \rangle = -\langle \tilde{F}_n \tilde{\Delta}_n \rangle + ag', \quad g \stackrel{\text{def}}{=} \langle \tilde{F}_n \tilde{u}_{n-1} \rangle. \quad (8.2)$$

Подставив (8.2) в (8.1), получим

$$m\sigma^2 = \langle \tilde{F}_n \tilde{\Delta}_n \rangle - ag' + m\dot{\alpha}, \quad \alpha \stackrel{\text{def}}{=} \langle \tilde{u}_n \tilde{v}_n \rangle. \quad (8.3)$$

Для медленных процессов, на которых ограничиваем наше рассмотрение, производные от осредненных величин являются малыми, и могут быть отброшены по сравнению с величинами, которые не стремятся к нулю при переходе к стационарному состоянию¹. Это обстоятельство позволяет пренебречь последними двумя слагаемыми в (8.3), что дает следующее представление для тепловой компоненты осредненной кинетической энергии частицы

$$\mathcal{K}_T = \frac{1}{2} m\sigma^2 \approx \frac{1}{2} \langle \tilde{F}_n \tilde{\Delta}_n \rangle. \quad (8.4)$$

Отметим, что не возможно аналогичным образом отбросить слагаемое ah' в (6.6), так как в нем все слагаемые обращаются в нуль при переходе к стационарному состоянию. Формула (8.4) является точной для стационарного состояния при $T \rightarrow \infty$ (T —

период осреднения) [10], где она является следствием теоремы о вириале. Подстановка (8.4) в (7.4) дает следующее представление для макроскопической тепловой энергии:

$$U_T = \frac{1}{2} \langle \tilde{F}_n \tilde{\Delta}_n \rangle + \langle \Pi(a + \Delta_n) - \Pi(a + \bar{\Delta}_n) \rangle. \quad (8.5)$$

Представление (8.5) предпочтительнее чем (7.4), так как тепловая энергия здесь может быть полностью выражена только через деформацию Δ_n , что позволит нам в дальнейшем получить определяющее уравнение для тепловой энергии.

9 Определяющие уравнения для давления и тепловой энергии

Обозначим $V_n \stackrel{\text{def}}{=} a + \Delta_n$ — микроскопический удельный объем, приходящийся на одну частицу (расстояние между частицами с номерами n и $n-1$). Представим V_n в виде суммы осредненной и осцилляционной компонент

$$V_n = \bar{V}_n + \tilde{V}_n = V + \tilde{\Delta}_n, \quad V = \bar{V}_n = a + \Delta.$$

Формулы (7.3) и (8.5), выражающие макроскопические давление и тепловую энергию через микроскопическую деформацию, могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} p &= \langle f(V + \tilde{\Delta}_n) \rangle, \\ U_T &= -\frac{1}{2} \langle f(V + \tilde{\Delta}_n) \tilde{\Delta}_n \rangle + \\ &+ \langle \Pi(V + \tilde{\Delta}_n) - \Pi(V) \rangle. \end{aligned} \quad (9.1)$$

Будем считать, что осцилляционная компонента удельного объема мала по сравнению с осредненной

$$|\tilde{\Delta}_n| \ll |V|.$$

Тогда выражения (9.1) могут быть разложены в ряды по осцилляционной компоненте

$$\begin{aligned} p &= \sum_{k=0}^{\infty} f_{2k}(V) \langle \tilde{\Delta}_n^{2k} \rangle, \\ U_T &= \mathcal{E}_T = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k+2}{k+1} f_{2k+1}(V) \langle \tilde{\Delta}_n^{2k+2} \rangle, \end{aligned} \quad (9.2)$$

где коэффициенты разложения определяются формулами

$$f_k(V) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{(-1)^k}{k!} \frac{d^k}{dV^k} f(V). \quad (9.3)$$

При получении разложений (9.2) предполагалось, что средние значения от нечетных степеней $\tilde{\Delta}_n$ малы по сравнению со средними значениями четных

¹Под стационарным понимается состояние, в котором все осредненные величины постоянны во времени и пространстве.

степеней, что должно выполняться с хорошей степенью точности для медленных процессов. Подробно разложения (9.2) получены в [10]. Введем обозначения

$$\theta \stackrel{\text{def}}{=} \langle \widetilde{\Delta}_n^2 \rangle, \quad \lambda_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\theta^k} \langle \widetilde{\Delta}_n^{2k} \rangle. \quad (9.4)$$

Очевидно, λ_k представляют собой безразмерные параметры, причем $\lambda_0 \equiv \lambda_1 \equiv 1$. С использованием обозначений (9.4) разложения (9.2) могут быть записаны в виде

$$p = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda_k f_{2k}(V) \theta^k, \quad (9.5)$$

$$U_T = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k+2}{k+1} \lambda_{k+1} f_{2k+1}(V) \theta^{k+1}.$$

Численные расчеты показывают [10], что для медленных процессов и малых θ величины λ_k можно приближенно считать константами, по крайней мере для нескольких первых значений k . Это позволяет полагать, что давление и тепловая энергия, определяемые формулами (9.5), могут быть представлены как функции двух переменных — удельного объема V и осцилляционного параметра θ .

10 Адиабатическое приближение

Рассмотрим систему уравнений движения (7.2)

$$m\rho_0 \ddot{u} = -p'_0 - p'_T, \quad \rho_0 \dot{U}_T = -p_T \dot{u}' + h'. \quad (10.1)$$

Выше получены определяющие уравнения (9.5) для давления и тепловой энергии

$$p_0 = f(V), \quad p_T = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k f_{2k}(V) \theta^k, \quad (10.2)$$

$$U_T = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k+1}{k} \lambda_k f_{2k-1}(V) \theta^k,$$

выражающие их через удельный объем V и осцилляционный параметр θ

$$p_0 = p_0(V), \quad p_T = p_T(V, \theta), \quad (10.3)$$

$$U_T = U_T(V, \theta).$$

По своему физическому смыслу параметр θ близок к температуре, хотя, строго говоря, таковой не является. Далее будем называть θ тепловым параметром. Точная макроскопическая интерпретация теплового параметра не столь важна, так как он может быть исключен из системы (10.3), что приведет к уравнениям состояния вида

$$p_0 = p_0(V), \quad p_T = p_T(V, U_T). \quad (10.4)$$

Это позволяет в качестве термодинамических переменных вместо пары V, θ использовать пару V, U_T .

Такой подход часто используется при макроскопическом описании ударных процессов.

Но вернемся к уравнениям движения (10.1). Единственная величина, для которой не получено макроскопическое определяющее уравнение — это тепловой поток h . Если бы удалось его записать в виде функции или оператора переменных V и θ , то, учитывая, что

$$V = V_0(1 + u'), \quad V_0 \stackrel{\text{def}}{=} a = 1/\rho_0, \quad (10.5)$$

после подстановки определяющих соотношений в уравнениях движения (10.1), была бы получена замкнутая система уравнений в частных производных относительно функций $u = u(x, t)$ и $\theta = \theta(x, t)$. Однако выведенное выше выражение (7.4) для теплового потока

$$h = \langle \widetilde{F}_n \widetilde{v}_{n-1} \rangle$$

не позволяет выразить его через микроскопический объем $V_n = a + \Delta_n$, а стало бы получить простую зависимость h от V и θ . Описание процессов распространения тепла очень сложно, и выходит за рамки данной работы. Далее ограничимся адиабатическим приближением, широко применяемым при описании ударных процессов. Основано оно на том, что скорость распространения тепла, как правило, значительно меньше скорости распространения макроскопических волн в упругой среде, поэтому в уравнении баланса тепловой энергии (10.1) оказывается возможным пренебречь слагаемым h' — производной от теплового потока, что эквивалентно простейшему определяющему уравнению $h \equiv \text{const}$. Таким образом, система уравнений (10.1), (10.3) и (10.5) оказывается замкнутой. Более того, в этом случае уравнение баланса тепловой энергии может быть записано в виде

$$\dot{U}_T = -p_T \dot{V} \Rightarrow \frac{dU_T}{dV} = -p_T(V, U_T). \quad (10.6)$$

Здесь использовано уравнение состояния в форме (10.4) и соотношение (10.5). Таким образом, имеем обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка для нахождения тепловой энергии как функции единственного аргумента — удельного объема: $U_T = U_T(V)$. Тогда тепловое давление определяется формулой $p_T = -U_T^*(V)$, и подстановка этого соотношения в уравнение баланса количества движения (10.1) даст следующее нелинейное дифференциальное уравнение в частных производных для перемещения $u = u(x, t)$

$$m\rho_0^2 \ddot{u} - \left(\Pi^{**}(V) + U_T^{**}(V) \right) u'' = 0, \quad V \equiv \frac{1}{\rho_0} (1 + u'). \quad (10.7)$$

Здесь и далее звездочка означает полную производную по V . В уравнении (10.7) $\Pi(V)$ и $U_T(V)$ — известные функции удельного объема V , а, следовательно, и деформации u' . При получении (10.7) использовано определяющее уравнение (7.5) для холодного давления: $p_0 = f(V) = -\Pi^*(V)$.

Нахождение уравнения состояния в форме (10.4) требует в общем случае решения системы нелинейных алгебраических уравнений (10.3), что может оказаться весьма затруднительным. Поэтому может быть полезен альтернативный путь решения, при котором в дифференциальное уравнение для тепловой энергии (10.6) подставляются непосредственно уравнения состояния (10.3), дающие параметрическую связь тепловой энергии и теплового давления. При этом тепловой параметр θ должен считаться функцией объема V , что приводит к следующему дифференциальному уравнению для $\theta(V)$:

$$\begin{aligned} A(V, \theta) \frac{d\theta}{dV} &= -B(V, \theta); \\ A &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial U_T}{\partial \theta}, \quad B \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial U_T}{\partial V} + p_T. \end{aligned} \quad (10.8)$$

После решения этого уравнения функция $U_T(V)$ может быть найдена как

$$U_T(V) = U_T(V, \theta(V)),$$

что при подстановке в (10.7) даст искомое нелинейное дифференциальное уравнение для перемещения $u(x, t)$.

Уравнение (10.7) можно переписать в более удобной для использования форме

$$\begin{aligned} m\rho_0^2 \ddot{u} + (f(V) + p_T(V))^* u'' &= 0, \\ V &\equiv \frac{1}{\rho_0} (1 + u'), \end{aligned} \quad (10.9)$$

где функция $p_T(V)$ получается подстановкой в уравнение состояния $p_T = p_T(V, U_T)$ выражения $U_T = U_T(V)$ или подстановкой в уравнение состояния $p_T = p_T(V, \theta)$ выражения $\theta = \theta(V)$. Уравнение (10.9) можно также записать в виде

$$m\rho_0 \ddot{u} + (f(V) + p_T(V))' = 0. \quad (10.10)$$

11 Первое приближение по тепловому параметру

Запишем уравнения состояния (10.2), сохраняя в разложении только линейные слагаемые по тепловому параметру θ

$$p_T = f_2(V) \theta, \quad U_T = f_1(V) \theta. \quad (11.1)$$

Здесь использовано тождество $\lambda_1 \equiv 1$. Исключение теплового параметра дает уравнение состояния

в форме (10.4)

$$\begin{aligned} p_T &= \frac{f_2(V)}{f_1(V)} U_T = \frac{1}{V} \Gamma(V) U_T, \\ \Gamma(V) &\stackrel{\text{def}}{=} V \frac{f_2(V)}{f_1(V)}. \end{aligned} \quad (11.2)$$

Это хорошо известное уравнение состояния Мигрюнайзена, где Γ — безразмерный коэффициент Грюнайзена. Полученное выражение для $\Gamma(V)$ совпадает с формулой, полученной из других соображений в [8]. Подстановка (11.2) (10.6) дает уравнение с разделяющимися переменными

$$\begin{aligned} \frac{dU_T}{dV} &= -\frac{f_2(V)}{f_1(V)} U_T \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{dU_T}{U_T} &= -\frac{1}{2} \frac{f_1^*(V)}{f_1(V)} dV \Rightarrow \\ \Rightarrow U_T &= C \sqrt{f_1(V)}, \end{aligned} \quad (11.3)$$

где C — константа интегрирования, которая может быть определена по значениям параметров системы в некотором фиксированном положении. Здесь использовано то, что, согласно определению (9.3), $f_k^* = -(k+1)f_k$, и в частности $f_1^* = -2f_2$. Таким образом, мы имеем

$$U_T(V) = C \sqrt{f_1(V)} \Rightarrow p_T(V) = C \frac{f_2(V)}{\sqrt{f_1(V)}},$$

что приводит к уравнению движения

$$m\rho_0 \ddot{u} + (f + C f_2 f_1^{-\frac{1}{2}})' = 0.$$

Вычисление производной приводит уравнение движения к виду

$$m\rho_0^2 \ddot{u} - (f_1 + C(3f_1 f_3 - f_2^2) f_1^{-\frac{3}{2}}) u'' = 0. \quad (11.4)$$

Зависимость от V в последних двух уравнениях опущена для краткости. В линейном приближении по u получаем из (11.4) линейное волновое уравнение

$$\ddot{u} - v_0^2 u'' = 0, \quad v_0^2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{m\rho_0^2} (f_1 + (3f_1 f_3 - f_2^2) f_1^{-2} U_T),$$

где v_0 — волновая скорость, константа C выражена через тепловую энергию, согласно уравнению (11.3), а величины f_k вычисляются для $V = V_0 \equiv 1/\rho_0$. Первое слагаемое в полученном выражении для v_0 дает скорость распространения звука в холодной среде, второе слагаемое описывает изменение скорости звука, вызванное тепловыми эффектами.

12 Уточнение уравнения состояния для случая сильного растяжения

Уравнение Ми-Грюнайзена (11.2) хорошо описывает состояние цепочки в условиях сжатия и слабого растяжения. Однако при сильном растяжении оно теряет смысл. Действительно, при приближении к точке разрыва цепочки коэффициент $f_1(V)$, представляющий собой жесткость цепочки, стремится к нулю, а стало быть, коэффициент Грюнайзена стремится к бесконечности. Чтобы устранить этот эффект требуется учет квадратичного слагаемого в выражении для тепловой энергии (10.2). Тогда уточненные уравнения состояния принимают вид

$$p_T = f_2(V)\theta, \quad U_T = f_1(V)\theta + \frac{3}{4}\lambda f_3(V)\theta^2. \quad (12.1)$$

Здесь обозначено $\lambda \stackrel{\text{def}}{=} \lambda_2$. В уравнении для теплового давления мы пренебрегли квадратичным слагаемым, так как линейная по θ составляющая p_T не стремится к нулю при приближении к точке разрыва. Исключение теплового параметра приводит к следующему уравнению состояния:

$$p_T = 2f_2(V) \frac{\sqrt{f_1^2(V) + 3\lambda f_3(V)U_T} - f_1(V)}{3\lambda f_3(V)}.$$

Для использования в уравнениях движения более удобна параметрическая форма (12.1). Подстановка (12.1) в (10.8) дает

$$\frac{d\theta}{dV} = \frac{f_2(V)\theta}{f_1(V) + \frac{3}{2}\lambda f_3(V)\theta}. \quad (12.2)$$

Аналогично тому, как это было сделано в уравнениях состояния (12.1), при получении (12.2) были отброшены квадратичные слагаемые в тех суммах, где линейный член не обращается в ноль в точке разрыва. Уравнение (12.2) представляет собой частный случай дифференциального уравнения Абеля второго рода [12], которое, вообще говоря, не интегрируется в квадратурах. Однако уравнение (12.2) не представляет труда для численного анализа. После решения уравнения (12.2) подстановка полученной зависимости $\theta = \theta(V)$ в уравнение состояния (12.1) дает зависимость $p_T = p_T(V)$, которая, в свою очередь, при подстановке в (10.9) или в (10.10) дает макроскопическое уравнение динамики системы в перемещениях.

Как упоминалось ранее, параметр λ в полученных уравнениях приближенно может считаться константой. Численные расчеты показывают, что при линейном взаимодействии между частицами в цепочке значение этой константы равно 3 с погрешностью не превышающей 1%. При нелинейном взаимодействии погрешность увеличивается, при этом

λ , вообще говоря, зависит от вида функции распределения скоростей частиц. Однако согласно расчетам для цепочки частиц, взаимодействующих по закону Леннарда-Джонса, при достаточно малых θ значение λ не отклоняется от 3 более чем на 13%, что позволяет считать этот параметр приближенно равным 3.

13 Второе приближение по теплово-му параметру

При достаточно высоких температурах, как при растяжении, так и при сжатии, может понадобиться учет второго приближения по теплово-му параметру. Получим полные формулы, соответствующие второму приближению (в предыдущем параграфе рассматривались упрощенные формулы для случая сильного растяжения). Уравнения состояния (10.2) при сохранении линейных и квадратичных по θ слагаемых принимают вид

$$\begin{aligned} p_T &= f_2(V)\theta + \lambda f_4(V)\theta^2, \\ U_T &= f_1(V)\theta + \frac{3}{4}\lambda f_3(V)\theta^2. \end{aligned} \quad (13.1)$$

Здесь, как и ранее, $\lambda \stackrel{\text{def}}{=} \lambda_2$. Исключение теплового параметра приводит к следующему уравнению состояния

$$p_T = \frac{4f_4}{3f_3} U_T + 2 \frac{3f_2f_3 - 4f_1f_4}{9\lambda f_3^2} \left(\sqrt{f_1^2 + 3\lambda f_3 U_T} - f_1 \right). \quad (13.2)$$

В полученном уравнении зависимость f_k от V опущена для краткости. Зависимость (13.2) довольно громоздка, поэтому для получения уравнений движения удобнее может оказаться параметрическая форма (13.1). Подстановка (13.1) в (10.8) дает

$$\frac{d\theta}{dV} = \frac{f_2(V)\theta + 2\lambda f_4(V)\theta^2}{f_1(V) + \frac{3}{2}\lambda f_3(V)\theta}. \quad (13.3)$$

Уравнение (13.3), как и (12.2), представляет собой частный случай дифференциального уравнения Абеля второго рода [12]. Аналогично тому, как это было описано в предыдущем параграфе, найденная в результате решения уравнения (13.3) зависимость $\theta = \theta(V)$ позволяет получить макроскопическое уравнение динамики системы в перемещениях.

Уравнение состояния сильно упрощается, если рассматривать систему вдали от точки разрыва. Тогда можно считать, что в (13.1) квадратичные по θ слагаемые малы по сравнению с линейными. В этом случае справедливо следующее уравнение:

$$p_T = \frac{f_2}{f_1} U_T + \lambda \frac{4f_1f_4 - 3f_2f_3}{4f_1^3} U_T^2. \quad (13.4)$$

Данное уравнение может быть получено из (13.2) разложением в ряд по U_T с сохранением линейных и квадратичных слагаемых. Можно также получить соотношение (13.4), приближенно решая систему уравнений (13.1). Разложение правой части (13.3) в ряд по θ , после отбрасывания высших степеней приводит к уравнению Бернулли относительно θ

$$\frac{d\theta}{dV} = \frac{f_2}{f_1} \theta + \lambda \frac{4f_1 f_4 - 3f_2 f_3}{2f_1^2} \theta^2.$$

В данном случае нет особой необходимости в использовании промежуточного параметра θ , так как уравнение (10.6) с учетом (13.4) дает аналогичное уравнение Бернулли относительно U_T

$$\frac{dU_T}{dV} = -\frac{f_2}{f_1} U_T - \lambda \frac{4f_1 f_4 - 3f_2 f_3}{4f_1^3} U_T^2.$$

Уравнение Бернулли заменой переменных сводится к линейному дифференциальному уравнению [12], что позволяет проинтегрировать его в квадратурах.

14 Линеаризация уравнения движения для случая малых деформаций

Рассмотрим макроскопическое уравнение движения (10.9). Положим деформации малыми: $|u'| \ll 1$. Тогда в первом приближении уравнение (10.9) превращается в линейное волновое уравнение

$$\ddot{u} - c^2 u'' = 0, \quad c^2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{f_1(V_0) - p_T^*(V_0)}{m\rho_0^2}, \quad (14.1)$$

где c — скорость распространения длинных волн (скорость звука в среде), звездочкой обозначена полная производная по удельному объему V . Примечательно, что для случая малых деформаций значение производной $p_T^*(V_0)$ может быть найдено без решения дифференциального уравнения (10.6) или (10.8). Покажем это.

Рассмотрим сначала уравнение состояния в форме $p_T = p_T(V, U_T)$. Тогда, с учетом (10.6), производная p_T^* определяется соотношением

$$\frac{dp_T}{dV} = \frac{\partial p_T}{\partial V} + \frac{\partial p_T}{\partial U_T} \frac{dU_T}{dV} = \frac{\partial p_T}{\partial V} - p_T \frac{\partial p_T}{\partial U_T}. \quad (14.2)$$

В частности, если ограничиться первым приближением по тепловому параметру, то справедливо уравнение состояния Ми-Грюнайсена (11.2), и использование (14.2) дает

$$\begin{aligned} p_T &= \frac{f_2}{f_1} U_T \Rightarrow \\ \Rightarrow p_T^* &= \left(\frac{f_2}{f_1}\right)^* U_T - \left(\frac{f_2}{f_1}\right)^2 U_T = \frac{f_2^2 - 3f_1 f_3}{f_1^2} U_T. \end{aligned} \quad (14.3)$$

Подстановка (14.3) в (14.1) приводит к следующей формуле для скорости распространения длинных волн:

$$c^2 = \frac{1}{m\rho_0^2} \left(f_1 + \frac{3f_1 f_3 - f_2^2}{f_1^2} U_T \right), \quad (14.4)$$

где f_k и U_T вычисляются для $V = V_0$ и являются константами. Они могут быть определены, например, по своему значению в начальный момент времени. Это позволяет избежать нахождения фактической зависимости $U_T = U_T(V)$. Первое слагаемое в полученном выражении для c дает скорость распространения звука в холодной среде, второе слагаемое описывает изменение скорости звука, вызванное тепловыми эффектами. Очевидно, что при достаточно малых температурах второе слагаемое будет мало, а стало быть, формула (14.4) дает положительное значение для c^2 , независимо от знака коэффициента при U_T (величина f_1 положительна вплоть до точки разрыва). Однако, если подвергнуть цепочку сильному растяжению, то по мере приближения к точке разрыва величина f_1 будет стремиться к нулю, и если сохранять значение тепловой энергии неизменным, то на каком-то этапе выражение для c^2 поменяет знак. Этот переход соответствует потере устойчивости среды при растяжении, т.е. разрыву цепочки. Действительно, в этом случае уравнение движения (14.1) перестает быть волновым, оно становится эллиптическим, а следовательно, возможны неограниченно растущие во времени решения, что и означает потерю устойчивости. Таким образом, согласно уравнению состояния (11.2), разрыв цепочки при слабом тепловом движении наступает раньше, чем разрыв холодной цепочки.

Однако, как отмечалось выше, уравнение состояния (14.1) теряет смысл вблизи точки разрыва, поэтому для строгого исследования разрыва нагретой цепочки необходимо использование уточненного уравнения состояния. В этом случае вместо уравнения $p_T = p_T(V, U_T)$ удобнее использовать параметрическую зависимость $p_T = p_T(V, \theta)$, где θ считается функцией V . Тогда производная p_T^* может быть вычислена по формуле

$$\frac{dp_T}{dV} = \frac{\partial p_T}{\partial V} + \frac{\partial p_T}{\partial \theta} \frac{d\theta}{dV}. \quad (14.5)$$

Величина $d\theta/dV$ может быть в этом уравнении заменена ее выражением из (10.8), что приводит к формуле

$$\frac{dp_T}{dV} = \frac{\partial p_T}{\partial V} - \frac{\partial p_T}{\partial \theta} \left(\frac{\partial U_T}{\partial V} + p_T \right) \left(\frac{\partial U_T}{\partial \theta} \right)^{-1}. \quad (14.6)$$

Отметим, что если в уравнении (14.2) частная производная по V вычислялась при постоянном U_T , то

в формулах (14.5), (14.6) она вычисляется при постоянном θ . Рассмотрим уточненное уравнение состояния (12.1). Подстановка $p_T = f_2\theta$ и полученного ранее выражения (13.1) для $d\theta/dV$ в формулу (14.5) дает

$$\frac{dp_T}{dV} = -3f_3\theta + \frac{f_2^2\theta}{f_1 + \frac{3}{2}\lambda f_3\theta} \approx \frac{f_2^2 - 3f_1f_3}{f_1 + \frac{3}{2}\lambda f_3\theta} \theta.$$

Подстановка полученного выражения в (14.1) приводит к следующей формуле для скорости распространения длинных волн

$$c^2 = \frac{1}{m\rho_0^2} \left(f_1 + \frac{3f_1f_3 - f_2^2}{f_1 + \frac{3}{2}\lambda f_3\theta} \theta \right). \quad (14.7)$$

Константы $f_k \equiv f_k(V_0)$ и $\theta \equiv \theta(V_0)$ определяются начальными условиями. Кроме того, тепловой параметр θ может быть выражен через тепловую энергию U_T формулой

$$\theta = 2 \frac{\sqrt{f_1^2 + 3\lambda f_3 U_T} - f_1}{3\lambda f_3}.$$

Выражение (14.7) для скорости звука в отличие от (14.4) не имеет сингулярности при приближении к точке разрыва, т.е. при стремлении f_1 к нулю.

Значение $\theta = \theta_*$, при котором c^2 , согласно формуле (14.7), обращается в нуль, т.е. наступает разрыв цепочки, равно

$$\theta_* = \frac{f_1^2}{f_2^2 - \frac{3}{2}(\lambda + 2)f_1f_3} = \frac{f_1^2}{f_2^2} + O(f_1^3). \quad (14.8)$$

Второе равенство соответствует случаю, когда f_1 мало, т.е. когда растяжение близко к критическому для холодной цепочки. Символ $O(f_1^3)$ означает величину порядка малости f_1^3 . Подстановка формулы (14.8) в уравнения состояния (12.1) дает оценки вблизи разрыва горячей цепочки

$$p_T = f_2^{-1} f_1^2 + O(f_1^3), \quad U_T = f_2^{-2} f_1^3 + O(f_1^4). \quad (14.9)$$

Таким образом, асимптотически второе слагаемое в уточненном уравнении состояния для тепловой энергии (12.1) имеет более высокий порядок малости. Т.е. первое приближение остается справедливым вплоть до точки разрыва горячей цепочки, по крайней мере формально. Так, оценка $\theta_* \approx f_2^{-2} f_1^2$ могла быть получена и из формулы (14.4), выведенной из простейших уравнений состояния (11.1). Чтобы доказать это, необходим был учет второго приближения для тепловой энергии. Из оценок (14.9) видно, что хотя поправочное слагаемое и мало по сравнению с главным, но его влияние может оказаться существенным даже для достаточно малых f_1 , так как поправка представляет собой не квадрат главного члена, а степень $3/2$ в формуле для давления и $4/3$ для тепловой энергии.

Рассмотрим критическое значение удельного объема. Вблизи точки холодного разрыва справедлива оценка

$$f_1(V) = f_1(V_1 - \xi) = 2f_2(V_1)\xi + O(\xi^2), \\ \xi \stackrel{\text{def}}{=} V_1 - V \ll V_1.$$

Здесь V_1 — значение удельного объема, соответствующее разрыву холодной цепочки. Пусть $V = V_1 - \xi$ соответствует разрыву нагретой цепочки. Тогда формулы (14.8), (14.9) могут быть записаны в виде

$$\theta_* = 4\xi^2 + O(\xi^3),$$

$$p_T = 4f_2(V_1)\xi^2 + O(\xi^3), \quad U_T = 8f_2(V_1)\xi^3 + O(\xi^4).$$

Эти формулы дают простые соотношения между удельным объемом и основными термодинамическими величинами в точке разрыва нагретой цепочки.

15 Приложения

15.1 Вывод макроскопических уравнений баланса

Для пояснения полученных результатов приведем вывод макроскопических уравнений баланса для одномерной термоупругой среды. Будем использовать материальное описание, при котором все величины являются функциями пространственной координаты x , определяющей положение частиц среды в отсчетной конфигурации.

Баланс количества движения элемента среды, которому в отсчетной конфигурации соответствует некоторый фиксированный объем V_0 , может быть записан в следующем виде

$$\frac{d}{dt} \int_{V_0} m\rho_0 v dV = \int_{\Gamma_0} \nu F d\Gamma, \quad (15.1)$$

где v — скорость частиц среды; Γ_0 — граница выделенного элемента объема в отсчетной конфигурации; F — внешняя сила, действующая на границе выделенного элемента объема в актуальной конфигурации. Здесь для аналогии используются те же термины, что и в трехмерной сплошной среде. На самом деле для одномерной среды объемом V_0 является некоторый интервал значений пространственной координаты: $x_1 < x < x_2$, а границей Γ_0 — точки x_1 и x_2 . Величина ν в (15.1) принимает значения $\nu = -1$ при $x = x_1$ и $\nu = +1$ при $x = x_2$, т.е. играет ту же роль, что и вектор нормали в трехмерном случае. Величина $m\rho_0$ в (15.1) представляет собой массовую плотность вещества (масса единицы

объема в отсчетной конфигурации). Для удобства сравнения с микроскопическими уравнениями она представлена в виде формального произведения m (массы частицы) на ρ_0 (плотность числа частиц в единице объема). Чтобы не загромождать формулы, здесь не рассматриваются объемные силы. Изменения, которые они внесут, вполне очевидны.

Переходя в (15.1) от интегрирования по границе к интегрированию по объему и пользуясь произвольностью области интегрирования получаем дифференциальную форму уравнения баланса количества движения

$$m\rho_0\dot{v} = F', \quad (15.2)$$

где точкой обозначена производная по времени t , а штрихом — по координате x . Причем отметим, что так как x от t не зависит, то нет различия между полной и частной производными по времени.

Запишем теперь баланс полной энергии элемента среды

$$\frac{d}{dt} \int_{V_0} \rho_0 E dV = \int_{\Gamma_0} \nu H d\Gamma, \quad (15.3)$$

где E — удельная полная энергия; H — поток энергии через границу выделенного элемента объема в актуальной конфигурации. Здесь по аналогии с микроскопическим описанием, рассматривается удельная энергия, приходящаяся на одну частицу среды. Удельная энергия единицы объема равна $\rho_0 E$, а удельная энергия единицы массы равна E/m . Объемный подвод энергии в уравнении (15.3) не учитывается. Дифференциальная форма уравнения (15.3) имеет вид

$$\rho_0 \dot{E} = H'.$$

Если ограничиться только механическим и тепловым подводом энергии, то поток энергии может быть представлен в виде

$$H = Fv + h,$$

где h — тепловой поток. Тогда уравнение баланса энергии принимает вид

$$\rho_0 \dot{E} = (Fv + h)'. \quad (15.4)$$

Представим полную энергию E в виде суммы кинетической K и внутренней U энергий

$$E = K + U, \quad K = \frac{1}{2} mv^2.$$

Производная по времени от кинетической энергии с использованием уравнения движения (15.2) может быть записана в виде

$$\rho_0 \dot{K} = \rho_0 mv\dot{v} = F'v. \quad (15.5)$$

Вычитая (15.5) из (15.4) получим уравнение баланса внутренней энергии

$$\rho_0 \dot{U} = Fv' + h'. \quad (15.6)$$

Введем величины, характерные для термодинамики: давление p и удельный объем V

$$p \stackrel{\text{def}}{=} -F', \quad V \stackrel{\text{def}}{=} (1 + u')/\rho_0.$$

Выражение для удельного объема следует из очевидных геометрических тождеств

$$V_0 = 1/\rho_0, \quad V/V_0 = d(x + u)/dx = 1 + u'.$$

Тогда для замыкания уравнений баланса (15.2) и (15.6) может служить уравнение состояния вида $p = p(V, U)$. К нему следует добавить определяющее уравнение для теплового потока, однако в данной работе нас в основном будут интересовать процессы, при которых теплообменом можно пренебречь (адиабатические процессы), поэтому далее положим $h \equiv 0$. В результате получим замкнутую систему уравнений для адиабатического процесса в одномерной термоупругой среде

$$\begin{aligned} m\rho_0\dot{v} + p' &= 0, & \rho_0\dot{U} + pv' &= 0; \\ p &= p(V, U), & V &= (1 + u')/\rho_0. \end{aligned} \quad (15.7)$$

Внутренняя энергия может быть разбита на холодную и тепловую составляющие

$$U = U_0(V) + U_T, \quad (15.8)$$

где холодная энергия U_0 однозначно определяется удельным объемом V . Разбиение (15.8) можно трактовать как введение новой термодинамической переменной U_T . Определим холодное и тепловое давление формулами

$$p_0 \stackrel{\text{def}}{=} -dU_0/dV, \quad p_T \stackrel{\text{def}}{=} p - p_0.$$

Тогда уравнение состояния может быть записано в форме

$$p = p_0(V) + p_T(V, U_T).$$

С использованием тепловых параметров полная система уравнений (15.7) принимает вид

$$\begin{aligned} m\rho_0\dot{v} + p'_0 + p'_T &= 0, & \rho_0\dot{U}_T + p_T v' &= 0; \\ p_0 &= p_0(V), & p_T &= p_T(V, U_T). \end{aligned}$$

Данная система уравнений может быть, как показано в параграфе 10, сведена к одному нелинейному дифференциальному уравнению волнового типа относительно $u(x, t)$

$$\ddot{u} + (\varphi(u'))' = 0 \quad \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \ddot{u} - c^2(u')u'' = 0, \quad c^2 \stackrel{\text{def}}{=} -d\varphi/du'.$$

Нахождение явного вида функции $\varphi(u')$ требует решения обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка (10.6).

15.2 Поток энергии

В параграфе 6, при выводе уравнения баланса энергии, использовалась приближенная формула (5.2) для потенциальной энергии частицы. Покажем альтернативный вывод уравнения баланса, не использующий этого приближения. Кроме того, при данном подходе будет получено точное микроскопическое уравнение баланса полной энергии частицы, не использующее осреднений.

Запишем уравнение баланса количества движения частицы (2.1)

$$m\dot{v}_n = F_{n+1} - F_n.$$

Домножение этого уравнения на v_n приводит к уравнению баланса кинетической энергии частицы

$$\dot{\mathcal{K}}_n = F_{n+1}v_n - F_nv_n, \quad \mathcal{K}_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}mv_n^2. \quad (15.9)$$

Вычислим производную от потенциальной энергии связи частиц n и $n-1$

$$\begin{aligned} \Pi_n &\stackrel{\text{def}}{=} \Pi(a + \Delta_n) \Rightarrow \\ \Rightarrow \dot{\Pi}_n &= -f(a + \Delta_n)\dot{\Delta}_n = F_nv_n - F_nv_{n-1}. \end{aligned}$$

Потенциальную энергию, приходящуюся на частицу n , определим формулой

$$\mathcal{U}_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\Pi_{n+1} + \Pi_n). \quad (15.10)$$

Дифференцирование соотношения (15.10) по времени дает уравнение баланса потенциальной энергии частицы

$$\dot{\mathcal{U}}_n = \frac{1}{2}(F_{n+1}v_{n+1} - F_{n+1}v_n + F_nv_n - F_nv_{n-1}). \quad (15.11)$$

Складывая уравнения (15.9) и (15.11), получим уравнение баланса полной энергии, приходящейся на одну частицу

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{E}}_n &= \frac{1}{2}(F_{n+1}v_{n+1} + F_{n+1}v_n - F_nv_n - F_nv_{n-1}), \\ \mathcal{E}_n &\stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{K}_n + \Pi_n, \end{aligned}$$

которое можно переписать в виде

$$\dot{\mathcal{E}}_n = \mathcal{H}_{n+1} - \mathcal{H}_n, \quad \mathcal{H}_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}F_n(v_n + v_{n-1}), \quad (15.12)$$

где величина \mathcal{H}_n имеет смысл потока энергии между частицами n и $n-1$.

Известно [13], что определение удельной потенциальной энергии и потока энергии в средах с микроструктурой допускает некоторый произвол. Так, легко показать, что следующие три определения

для потенциальной энергии частицы приведут к разным выражениям для потока энергии

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_n = \Pi_n &\Rightarrow \mathcal{H}_n = F_nv_{n-1}, \\ \mathcal{U}_n = \Pi_{n+1} &\Rightarrow \mathcal{H}_n = F_nv_n, \\ \mathcal{U}_n = \frac{1}{2}(\Pi_{n+1} + \Pi_n) &\Rightarrow \mathcal{H}_n = \frac{1}{2}F_n(v_n + v_{n-1}). \end{aligned} \quad (15.13)$$

Различие в приведенных выше определениях состоит в месте разреза связей между частицами. В данном случае, из соображений симметрии, наиболее естественным является последнее определение из (15.13), согласно которому энергия связи делится поровну между соседними частицами. Отметим однако, что при рассмотрении цепочки, состоящей из нескольких типов частиц, такого наиболее естественного разбиения может уже не оказаться.

Применим операцию осреднения к уравнению (15.12), тогда

$$\begin{aligned} \rho_0\dot{\mathcal{E}} &= \mathcal{H}', \\ \mathcal{H} &\stackrel{\text{def}}{=} \langle \mathcal{H}_n \rangle = \frac{1}{2} \langle F_n(v_n + v_{n-1}) \rangle. \end{aligned} \quad (15.14)$$

Представив в (15.14) силы и скорости в виде суммы осредненной и осцилляционной компонент, получим

$$\mathcal{H} = Fv + h, \quad h \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \langle \widetilde{F}_n(\widetilde{v}_n + \widetilde{v}_{n-1}) \rangle. \quad (15.15)$$

Сравнивая уравнения (15.14), (15.15) с уравнением баланса полной энергии в сплошной среде

$$\rho_0\dot{E} = H', \quad H = Fv + h$$

и учитывая, что $\mathcal{E} \equiv E$, получим, что \mathcal{H} в точности соответствует макроскопическому потоку энергии H , а величина h представляет собой макроскопический тепловой поток.

Формула (15.15) для теплового потока отличается от полученной ранее формулы (6.6). Различие, очевидно, состоит в том, что при выводе последней использовалось приближенное выражение для упругой энергии (5.2), соответствующее первому определению из (15.13). Выражение (15.15) для теплового потока следует считать более точным. Однако различия в большинстве случаев, видимо, будут невелики. В частности можно показать, что для гармонических волн в цепочке с линейными силами взаимодействия все три формулы из (15.13) дадут одно и то же значение теплового потока.

Автор благодарен П. А. Жилину и Д. А. Индейцеву за полезные обсуждения. Работа выполнена при поддержке гранта Е02-4.0-33 Минобразования России по фундаментальным исследованиям в области естественных и точных наук.

Литература

1. *Mescheryakov Y. I., Divakov A. K.* // ДУМАТ J. 1994. №4. P. 271–287.
2. *Krivtsov A. M.* // International Journal of Impact Engineering. 1999. Vol. 23. №1. P. 466–476.
3. *Krivtsov A. M., Meshcheryakov Y. I.* // Proceedings of SPIE. 1999. Vol. 3687. P. 205–212.
4. *Жарков В. Н., Калинин В. А.* Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М., 1968.
5. *Segletes S. B.* // J. Appl. Phys. 1990. Vol. 70. №5. P. 2489–2499.
6. *Кривцов А. М., Кривцова Н. В.* // Дальневосточный математический журнал. 2002. Т. 3. №2. С. 254–276.
7. *Блезман И. И.* Вибрационная механика. М., 1994.
8. *Ашкрофт Н., Мермин Н.* Физика твердого тела. Т. 2. М., 1979.
9. *Krivtsov A. M.* // Proceedings of the XXVIII Summer School Actual Problems in Mechanics. SPb. Russia. 2001. Vol. 1. P. 79–90.
10. *Krivtsov A. M.* // Chaos, Solitons & Fractals. 2002. Vol. 17. №1. P. 79–87.
11. *Борн М., Кунь Х.* Теория кристаллических решеток. М., 1959.
12. *Камке Э.* Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М., 1961.
13. *Кунин И. А.* Теория упругих сред с микроструктурой. М., 1975.