

Математическое моделирование переноса тепла в твердом теле при высоких температурах

© Р.З. Березгова

Институт прикладной математики и автоматизации КБНЦ РАН,
КБР, Нальчик, 360000, Россия

В статье выведено нелинейное уравнение математической модели распространения тепла в кристаллическом твердом теле с учетом ангармонизма колебаний атомов. Доказаны существование и единственность решения первой начально-краевой задачи для данного уравнения. Численно реализовано решение задачи. Вычислительный эксперимент показывает, что учет ангармонизма колебаний атомов приводит к замедлению остывания твердого тела за счет специфического характера процесса теплопроводности.

Ключевые слова: ангармонизм колебаний атомов, перенос тепла, нелинейное параболическое уравнение, высокие температуры

Введение. Изучение процессов теплопередачи играет ключевую роль в развитии науки и технологий. В настоящее время теоретическое исследование теплопередачи в значительной степени опирается на численное моделирование с применением компьютеров. Важность численного моделирования процессов теплопередачи постоянно возрастает, поскольку применение современных научно-технических достижений уже заочно подразумевает точное прогнозирование таких процессов.

Проведение натурных экспериментов по изучению теплопроводности, особенно на уровне квантовых фононных эффектов, часто оказывается труднореализуемым или вовсе невозможным. В этом случае построение и исследование адекватных математических моделей становится особенно ценным.

Хорошо известно, что коэффициент теплопроводности зависит от агрегатного состояния вещества. На его величину влияют химический состав, степень очистки, температура, давление и другие физические свойства. Оказывают влияние также условия механической и тепловой обработки, старение и износ, внешнее электромагнитное поле.

Для учета термодинамических свойств твердых тел наиболее часто применяется модель Дебая. В ее основе лежит гармоническое приближение: при выводе закона дисперсии предполагается, что потенциальная энергия взаимодействия атомов в кристалле является квадратичной функцией их смещения из положений равновесия. Од-

нако при высоких температурах это приближение перестает работать [1], что обусловлено нелинейностью межатомных сил взаимодействия. Ангармонизм колебаний атомов вызывает тепловое расширение тела, фонон-фононное взаимодействие, зависимость упругих постоянных от температуры и возрастание теплоемкости при больших температурах [1, 2].

Необходимо отметить, что отклонения от модели Дебая не обязательно связаны с высокими температурами. Причинами ангармонических эффектов могут служить различные искажения кристаллической решетки, структурный беспорядок и неоднородности химического состава в твердых телах, например, в металлах и сплавах [3]. Кроме того, учет ангармонических колебаний у стекол позволяет корректно рассчитать коэффициент теплопроводности [4]. В настоящее время поиск материалов с низкими значениями коэффициента теплопроводности имеет важное значение для разработки перспективных термоэлектрических приборов. Принято, в частности, считать, что существует взаимосвязь между ангармонизмом и низкой теплопроводностью в данных материалах [5]. В целом, согласно современным представлениям, ангармонизм колебаний атомов приводит к снижению теплопроводящих свойств твердых тел. Однако полное понимание механизмов соответствующих эффектов в сильных теплоизоляторах, к сожалению, до сих пор отсутствует. В работе [6], например, отмечается, что отступление атомной динамики от гармонического приближения зависит от дефектов и их геометрии. Учесть ангармонизм колебаний атомов можно, если воспользоваться уравнением типа Ланжевена [7].

В настоящей работе выведено уравнение математической модели распространения тепла в кристаллическом твердом теле с учетом ангармонизма колебаний атомов. Данное уравнение является нелинейным дифференциальным уравнением в частных производных параболического типа. Численно реализовано решение первой начально-краевой задачи для данного уравнения. Вычислительные эксперименты в рамках новой математической модели показывают, что ангармонизм колебаний атомов существенно сказывается на кинетике процесса переноса тепла в твердом теле и его остывании.

Вывод нелинейного уравнения теплопроводности. Рассмотрим процесс распространения тепла в кристаллическом твердом теле с учетом ангармонизма колебаний атомов. Количество тепла, проходящее через сечение ΔS за время Δt , равно:

$$k \frac{\partial u(x,t)}{\partial z} \Delta S \Delta t ,$$

где $u(x,t)$ — температура тела, k — коэффициент теплопроводности, x — координата, t — время. Количество тепла через некоторый

малый интервал расстояний Δt становится равным

$$k \frac{\partial u(x + \Delta x, t)}{\partial z} \Delta S \Delta t.$$

Следовательно, количество тепла в слое толщиной Δx есть

$$k \frac{\partial u(x + \Delta x, t)}{\partial x} \Delta S \Delta t - k \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \Delta S \Delta t \approx k \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \Delta V \Delta t, \quad (1)$$

где $\Delta V = \Delta S \Delta x$ — объем нагретого слоя.

Далее, в некотором удовлетворительном приближении требуется учесть ангармонизм колебаний атомов. В данном случае имеет место линейная зависимость удельной изобарной теплоемкости от температуры [1, 2]:

$$C_p = C_0(1 + \beta u), \quad (2)$$

где C_0 и β — положительные константы. С учетом (2) теплота в рассматриваемом слое равна

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial Q}{\partial t} \Delta V \Delta t &= \rho \left(\frac{\partial}{\partial t} \int_0^u C_p(u') du' \right) \Delta V \Delta t = \rho C_0 \frac{\partial}{\partial t} \left(u + \beta \frac{u^2}{2} \right) \Delta V \Delta t = \\ &= \rho C_0 \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \beta \frac{\partial(u^2)}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial t} \right) \Delta V \Delta t = \rho C_0 (1 + \beta u) \frac{\partial u}{\partial t} \Delta V \Delta t, \end{aligned} \quad (3)$$

где ρ — плотность вещества. Приравнявая (1) и (3), находим

$$(1 + \beta u) \frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (4)$$

где $\alpha = k / (\rho C_0)$ — коэффициент температуропроводности. Для коэффициентов в уравнении (4) без нарушения общности можно принять $\alpha = \beta = 1$. В этом легко убедиться, если сделать замены: $\beta u \rightarrow u$ и $x / \sqrt{\alpha} \rightarrow x$. При этом β и α выступают в качестве т.н. параметров подобия для температуры и координаты.

Таким образом, уравнение (4) принимает компактный вид

$$(1 + u) \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (5)$$

Здесь и далее координату, время и температуру уже можно считать безразмерными величинами. При этом решениями уравнения (5) будут являться универсальные (т.е. независимые от параметров) функции.

Уравнение (5) представляет собой нелинейное дифференциальное уравнение в частных производных параболического типа. В настоящей работе проводится исследование влияния ангармонизма колебаний атомов среды на основе численного решения первой начально-краевой задачи для уравнения (5).

Разрешимость первой начально-краевой задачи. В области $\Omega = \{(x, t) : x \in (0, L), t \in (0, T)\}$ рассмотрим первую краевую задачу для нелинейного уравнения в частных производных параболического типа:

$$(1+u)u_t - u_{xx} = 0, \quad x \in (0, L), \quad t \in (0, T), \quad (6)$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in [0, L], \quad (7)$$

$$u(0, t) = \varphi_1(t), \quad u(L, t) = \varphi_2(t), \quad t \in [0, T], \quad (8)$$

где $u_0(x)$, $\varphi_1(t)$, $\varphi_2(t)$ — заданные, достаточно гладкие функции.

Предположим, что существует константа $\delta > 0$ такая, что для решения $u(x, t)$ на $[0, L] \times [0, T]$ (где $T > 0$ произвольно) выполняется

$$1+u > \delta. \quad (9)$$

Задача. Найти решение $u(x, t)$ из класса $C^{2,1}(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$, удовлетворяющее условиям (7)-(8).

В работе [8] для уравнения $uu_x - u_{xx} = f(x, t)$ доказаны существование и единственность глобальных гладких решений первой и второй начально-краевых задач.

Теорема. Пусть $u_0(x) \in C^2[0, L]$, $\varphi_1(t), \varphi_2(t) \in C[0, \infty)$, причем выполняются условия согласования $u_0(0) = \varphi_1(0)$, $u_0(L) = \varphi_2(0)$. Тогда существует единственное решение $u(x, t)$ уравнения (6), удовлетворяющее условиям (7)-(8).

Доказательство. Для доказательства существования решения будем использовать метод последовательных приближений. Уравнение (6) перепишем в виде

$$u_t = \frac{1}{1+u} u_{xx}.$$

Задаем начальное приближение $u^{(0)}(x, t) = u_0(x)$.

Для первого приближения получаем следующее уравнение

$$u_t^{(1)} = \frac{1}{1+u^{(0)}} u_{xx}^{(1)} = \frac{1}{1+u_0} u_{xx}^{(1)},$$

которое является линейным.

Для второго приближения получаем уравнение

$$u_t^{(2)} = \frac{1}{1+u^{(1)}} u_{xx}^{(2)}.$$

Для n -го приближения решаем линейное параболическое уравнение:

$$\frac{\partial u^{(n+1)}}{\partial t} = \frac{1}{1+u^{(n)}} \frac{\partial^2 u^{(n+1)}}{\partial x^2}, \quad x \in (0, L), \quad t > 0,$$

с начальными и краевыми условиями: $u^{(n+1)}(x, 0) = u_0(x)$, $u^{(n+1)}(0, t) = \varphi_1(t)$, $u^{(n+1)}(L, t) = \varphi_2(t)$. Поскольку коэффициент $\frac{1}{1+u^{(n)}}$ ограничен ($1+u^{(n)} > \delta$), по теореме существования для линейных параболических уравнений [9, теорема 5.1, с. 112–115], каждое $u^{(n+1)}$ существует и принадлежит $C^{2,1}(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$.

Предположим, что существуют два решения u_1 и u_2 . Рассмотрим разность $w = u_1 - u_2$. Из уравнения следует:

$$(1+u_1) \frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - \frac{w}{(1+u_1)(1+u_2)} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2}.$$

Умножив на w и проинтегрировав по $[0, L]$ (с учетом $w(0, t) = w(L, t) = 0$), получаем:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^L (1+u_1) w^2 dx = - \int_0^L \left(\frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 dx + \int_0^L \left(\frac{1}{2} \frac{\partial u_1}{\partial t} - \frac{1}{(1+u_1)(1+u_2)} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} \right) w^2 dx.$$

Второй интеграл ограничен константой $C \int_0^L w^2 dx$, где C зависит от норм производных решений. Поскольку $1+u_1 \geq \delta$, имеем:

$$\frac{d}{dt} \int_0^L w^2 dx \leq \frac{C}{\delta} \int_0^L w^2 dx.$$

По неравенству Гронуолла [10, теорема 1.3.1, с. 23] и начальному условию $w(x, 0) = 0$, следует $\int_0^L w^2 dx \leq 0$, откуда $w = 0$, то есть $u_1 = u_2$, что доказывает единственность.

Рассмотрим оператор $A: v \mapsto u^{(n+1)}$ как неподвижную точку. Поскольку последовательность ограничена в $C^{2,1}$ (из-за δ), и оператор A непрерывен, теорема Шаудера [11, теорема 9.6.2, с. 456–457] га-

рантирует существование неподвижной точки. Для сходимости рассмотрим разность $w^{(n)} = u^{(n+1)} - u^{(n)}$:

$$\frac{\partial w^{(n)}}{\partial t} = \frac{1}{1+u^{(n)}} \frac{\partial^2 w^{(n)}}{\partial x^2} + \left(\frac{1}{1+u^{(n)}} - \frac{1}{1+u^{(n-1)}} \right) \frac{\partial^2 u^{(n)}}{\partial x^2}.$$

Из энергетического неравенства для $w^{(n)}$:

$$\frac{d}{dt} \int_0^L (w^{(n)})^2 dx + \int_0^L \left(\frac{\partial w^{(n)}}{\partial x} \right)^2 dx \leq K \int_0^L (w^{(n)})^2 dx + M \int_0^L (w^{(n-1)})^2 dx,$$

где K, M — константы, зависящие от δ и норм производных. Интегрируя по времени и применяя неравенство Гронуолла, получаем:

$$\|w^{(n)}\|_{L^2(0,L)}^2(t) \leq C \int_0^t \|w^{(n-1)}\|_{L^2(0,L)}^2(s) ds,$$

что дает экспоненциальную сходимость: $\|w^{(n)}\|_{L^2} \leq \exp(-\lambda t) \|w^{(0)}\|_{L^2}$, где $\lambda > 0$.

Из энергетического неравенства для решения u :

$$\frac{d}{dt} \int_0^L u^2 dx \leq \frac{C}{\delta} \int_0^L u^2 dx,$$

по неравенству Гронуолла получаем априорную оценку роста:

$$\|u(\cdot, t)\|_{L^2(0,L)} \leq \|u_0\|_{L^2(0,L)} \exp\left(\frac{Ct}{\delta}\right).$$

Условие $1+u > \delta > 0$ обеспечивает ограниченность коэффициентов, сходимость обоснована в пространствах Соболева с экспоненциальными оценками; единственность следует из энергетических неравенств и неравенства Гронуолла. Эти результаты гарантируют корректность решения в классе $C^{2,1}$.

Численное решение первой начально-краевой задачи. Рассмотрим первую начально-краевую задачу:

$$(1+u)u_t - u_{xx} = 0, \quad x \in (0, l), \quad 0 < t \leq T < \infty, \quad (10)$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad (11)$$

$$u(0, t) = \varphi_1(t), \quad u(l, t) = \varphi_2(t), \quad (12)$$

где $u_0(x)$, $\varphi_1(t)$, $\varphi_2(t)$ — заданные функции. Данная одномерная задача в нашем случае описывает распространение тепла в кристаллическом твердом теле с учетом ангармонизма колебаний атомов среды.

Построим приближенное решение задачи (10)–(12) с помощью неявной разностной схемы [12]. Для этого, как обычно, в прямоугольной области $\Omega = (0, l) \times (0, T)$ введем равномерную сетку $x_i = ih$, $i = \overline{1, N}$, и $t_j = j\tau$, $j = \overline{1, M}$, где h, τ — шаги сетки по координате x и времени t соответственно. Значения искомой функции в узлах сетки есть $u_i^j = u(x_i, t_j)$. Производные в нашем уравнении заменим разностными аналогами

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_i^j = \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\tau} + O(\tau),$$

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i^j = \frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{h^2} + O(h^2).$$

С учетом этого разностная схема задачи (10)–(12) принимает вид:

$$(1 + u_i^j) \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\tau} = \frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{h^2}, \quad (13)$$

$$u_i^0 = u_0(x_i), \quad (14)$$

$$u_0^j = \phi_1^j(t_j), \quad u_N^j = \phi_2^j(t_j). \quad (15)$$

u_i^j берутся из предыдущего слоя. Заметим, что нулевое приближение u_i^0 всякий раз рассчитывается из (14). Для определения u_i^{j+1} из (13) получаем

$$u_i^{j+1} = u_i^j + \frac{\tau}{h^2(1 + u_i^j)} (u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j).$$

Уравнение (16) с условиями (14)–(15) решается методом сеток.

На рисунках 1 и 2 представлены примеры решения задачи при следующих условиях:

$$u_0(x) = \exp\left(-\frac{2(x - x_0)^2}{R}\right), \quad u(0) = u(1) = 0, \quad (16)$$

где $x_0 = 0.5$ — положение точки с максимальной температурой, $R = 0.02$ — эффективный радиус, на котором температура уменьшается в ~ 7.4 раза. Отметим, что условия, аналогичные (17), возникают при описании лазерного нагрева, прекращающего свое действие при $t = 0$, когда фокальное пятно радиусом R имеет гауссовские распределение по интенсивности.

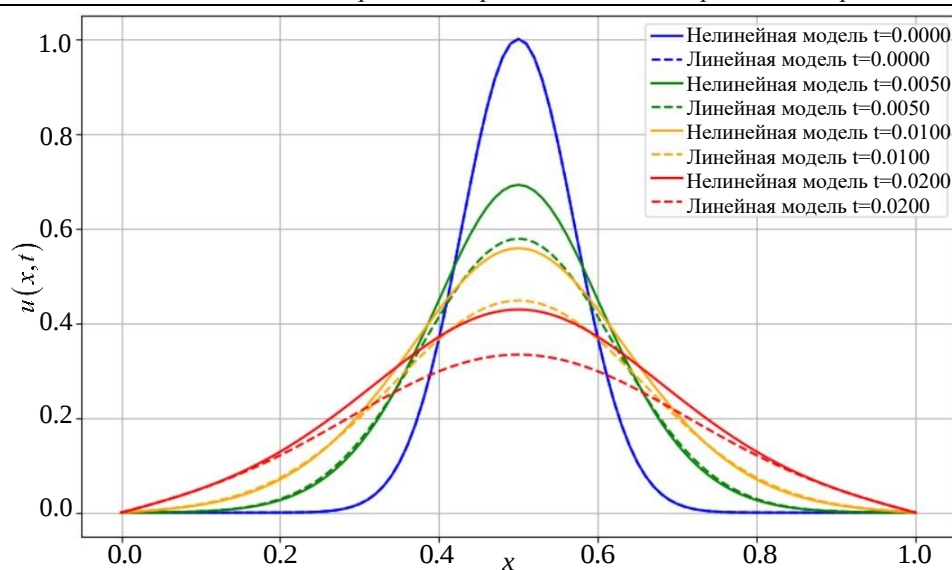


Рис. 1. Распределение температуры по пространству

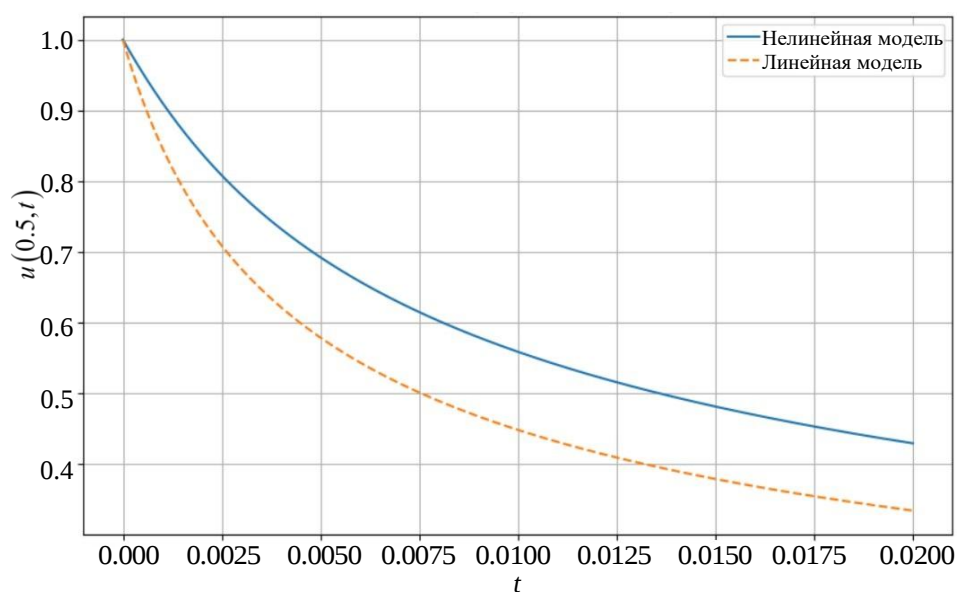


Рис. 2. Эволюция температуры в центре образц

В целях моделирования была разработана программа на языке программирования Python. Выполненные вычислительные эксперименты показывают, что учет ангармонизма колебаний атомов твердого тела приводит к замедлению процесса остывания. С физической точки зрения это означает, что теплота дополнительно запасается в образце за счет высокочастотных колебательных мод [2]. Это в свою очередь приводит к увеличению изобарной теплоемкости в соответствии с формулой (2). Данный вывод находится в полном согласии с

современными экспериментальными результатами и теоретическими представлениями [3]-[6]. Из рис. 1, 2 можно видеть, что с течением времени эффект «задержки тепла» проявляется более заметно. Как и следовало ожидать, при больших t во всех случаях наблюдается экспоненциальный закон уменьшения температуры.

Как оказалось, для изучения общего характера влияния ангармонизма колебаний атомов на процесс распространения тепла в твердом теле не требуются знания численных значений параметра β в (2), поскольку рассмотренная задача с постоянными коэффициентами сводится к универсальному уравнению (5). Если для высокотемпературных нестационарных процессов учитывать конечность скорости (инерцию) распространения тепла, то это приводит к гиперболическому уравнению теплопроводности [10]. Исследование данного случая является отдельной задачей.

Заключение. В качестве заключения сформулируем следующие основные выводы по статье:

- 1) выведено нелинейное дифференциальное уравнение в частных производных (5), которое описывает распространение тепла в твердом теле с учетом ангармонизма колебаний атомов;
- 2) доказаны существование и единственность решения первой краевой задачи для квазилинейного параболического уравнения (5) методом последовательных приближений;
- 3) проведено численное решение первой краевой задачи для уравнения (5) и показано, что процесс остывания твердого тела при наличии ангармонизма колебаний его атомов происходит с существенным замедлением.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИПМА КБНЦ РАН.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Брандт Н.Б., Чудинов С.М. *Электроны и фононы в металлах*. Москва Изд-во МГУ, 1990, 334 с.
- [2] Рехвиашвили С.Ш. Теплоемкость твердых тел фрактальной структуры с учетом ангармонизма колебаний атомов. *Журнал технической физики (ЖТФ)*, 2008, т. 78, № 12, с. 54-58.
- [3] Chao Cheng, Shangyi Ma, Shaoqing Wang. The role of phonon anharmonicity on the structural stability and phonon heat transport of CrFe-CoNiCux high-entropy alloys at finite temperatures. *Journal of Alloys and Compounds*, 2023, vol. 935, part 1, art. 168003.
- [4] Fiorentino A., Drigo E., Baroni S., Pegolo P. Unearthing the foundational role of anharmonicity in heat transport in glasses. *Physical Review B*, 2024, vol. 109, no. 22, art.224202.
- [5] Cheng Chang, Li-Dong Zhao Anharmonicity and low thermal conductivity in thermoelectrics. *Materials Today Physics*, 2018, vol. 4, pp. 50-57.
- [6] Knoop F., Purcell T.A. R., Scheffler M., Carbogno C. Anharmonicity in thermal

- insulators: An analysis from first principles. *Physical Review Letters*, 2023, vol. 130, no. 23, art.236301.
- [7] Esfarjani K. Theory of non-equilibrium heat transport in anharmonic multiprobe systems at high temperatures. *Entropy*, 2021, vol. 23, no. 12, art. 1630.
- [8] Глазатов С.Н. О разрешимости начально-краевых задач для нелинейного уравнения переменного типа. *Сибирский математический журнал*, 1998, т. 39, № 6, с. 1293-1303.
- [9] Ладыженская О. А., Солонинков В. А., Уральцева Н. Н. *Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа*. Москва, Наука, 1967, 736 с.
- [10] Hartman P. *Ordinary Differential Equations*. Boston, Birkhäuser, 1982, 612 p.
- [11] Zeidler E. *Nonlinear Functional Analysis and Its Applications. V. I: Fixed-Point Theorems*. New York, Springer, 1986, 909 p.
- [12] Самарский А.А., Вабищевич П.Н. *Вычислительная теплопередача*. Москва, Эдиториал УРСС, 2003, 784 с.

Статья поступила в редакцию 28.10.2025

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Березгова Р.З. Математическое моделирование переноса тепла в твердом теле при высоких температурах. *Математическое моделирование и численные методы*, 2026, № 2, с. 86–96.

Березгова Рита Замудиновна — стажер-исследователь отдела Теоретической и математической физики Института прикладной математики и автоматизации КБНЦ РАН. e-mail: berezgova.rita@gmail.com

Mathematical modeling of heat transfer in a solid at high temperatures

© R.Z. Berezgova

IAMA KBSC RAS, Nalchik, 360000, Russia

In the paper a nonlinear equation of the mathematical model of heat propagation in a crystalline solid body taking into account the anharmonicity of atomic vibrations is derived. The existence and uniqueness of the solution of the first initial boundary value problem for this equation are proved. The solution of the problem is numerically realised. The computational experiment shows that taking into account the anharmonicity of atomic vibrations leads to the slowing down of solid state cooling due to the specific character of the heat conduction process.

Keywords: anharmonism of atomic vibrations, heat transfer, nonlinear parabolic equation, high temperatures

REFERENCES

- [1] Brandt N.B., Chudinov S.M. *Elektrony i fonony v metallakh* [Electrons and phonons in metals]. Moscow, Moscow University Press, 1990, 334 p.

- [2] Rekhviashvili S. Sh. Heat capacity of fractal solids with regard to anharmonicism of atomic vibrations. *Technical Physics*, 2008, vol. 53, no. 12, pp. 1586-1590.
- [3] Chao Cheng, Shangyi Ma, Shaoqing Wang. The role of phonon anharmonicity on the structural stability and phonon heat transport of CrFe-CoNiCux high-entropy alloys at finite temperatures. *Journal of Alloys and Compounds*, 2023, vol. 935, part 1, art. 168003.
- [4] Fiorentino A., Drigo E., Baroni S., Pegolo P. Unearthing the foundational role of anharmonicity in heat transport in glasses. *Physical Review B*, 2024, vol. 109, no. 22, art. 224202.
- [5] Cheng Chang, Li-Dong Zhao. Anharmonicity and low thermal conductivity in thermoelectrics. *Materials Today Physics*, 2018, vol. 4, pp. 50-57.
- [6] Knoop F., Purcell T.A. R., Scheffler M., Carbogno C. Anharmonicity in thermal insulators: An analysis from first principles. *Physical Review Letters*, 2023, vol. 130, no. 23, art. 236301.
- [7] Esfarjani K. Theory of non-equilibrium heat transport in anharmonic multiprobe systems at high temperatures. *Entropy*, 2021, vol. 23, no. 12, art. 1630.
- [8] Glazatov S.N. On solvability of initial-boundary value problems for a nonlinear equation of variable type. *Siberian Mathematical Journal*, 1998, vol. 39, no. 6, pp. 1115–1124.
- [9] Ladyzhenskaya O. A., Solonnikov V.A., Uraltseva N.N. Linear and quasi-linear Equations of parabolic type. *American Mathematical Society*, 1968, 648 p.
- [10] Hartman P. *Ordinary differential equations*. Boston, Birkhäuser, 1982, 612 p.
- [11] Zeidler E. *Nonlinear functional analysis and its applications. V. I: Fixed-point theorems*. New York, Springer, 1986, 909 p.
- [12] Samarskii A.A., Vabishchevich P.N. *Vychislitel'naya teploperedacha* [Computational heat transfer]. Moscow, Editorial URSS, 2003, 784 p.

Berezgova R. Z., Research Intern, Department of Theoretical and Mathematical Physics, Institute of Applied Mathematics and Automation, Kabardino-Balkarian Scientific Center, Russian Academy of Sciences. e-mail: berezgova.rita@gmail.com