

Связанное использование методов кинетики, газовой динамики и волновой механики для описания процессов переноса

А. М. Кривцов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Институт проблем машиноведения РАН

Андрей Геннадьевич Куликовский

А.Г.Куликовский, Г.А.Любимов. Магнитная гидродинамика



1962:



2005:

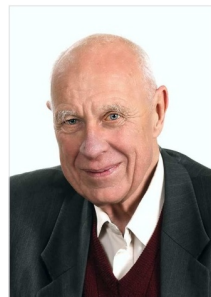
Используя введенные понятия, преобразуем уравнения движения (2.7) к следующему виду:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\operatorname{div}(\rho \mathbf{v}), \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial t} = -\operatorname{div} \hat{\mathbf{P}}, \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\operatorname{div} \mathbf{S}. \quad (2.15)$$

Здесь $\mathbf{G} = \rho \mathbf{v} + \mathbf{g}$ — плотность полного количества движения; $\hat{\mathbf{P}} = \{\pi_{ij}\} = \{\rho v_i v_j - p_{ij} - T_{ij}\}$ — тензор плотности полного потока импульса; $W = \rho \left(\varepsilon + \frac{v^2}{2} + w \right)$ — плотность полной энергии; $\mathbf{S} = \mathbf{s} + \mathbf{q} - \hat{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{v} + \rho \mathbf{v} \left(\varepsilon + \frac{v^2}{2} \right)$ — плотность полного потока энергии. При преобразовании уравнений импульсов и энергии использовано уравнение неразрывности.

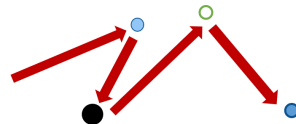


1933 – 2024

Диффузионный и баллистический перенос тепла

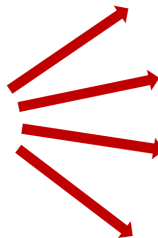
Диффузионный перенос тепла:

- Типичен для макроскопических систем
- Результат отражения от дефектов и неоднородностей
- Диффузионное распространение упругих волн

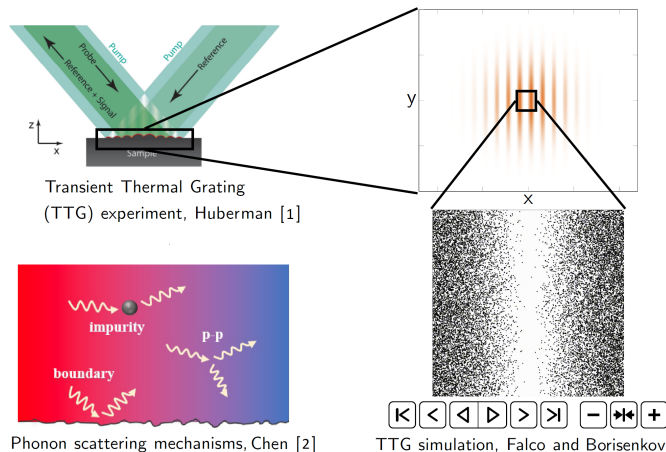


Баллистический перенос тепла:

- Реализуется в микросистемах
- Наблюдается в сверхчистых материалах
- Баллистическое распространение упругих волн



Кинетическое описание теплопереноса в твердых телах



[1] S. Huberman et al. [2019](#). Science.

[2] H. Bao, J. Chen, X. Gu & B. Cao. [2018](#). ES Energy & Environment.

Некоторые общие физические явления, демонстрирующие связь волновых и кинетических процессов

- Лучевые процессы в оптике и электродинамике (высокочастотные волновые пакеты, фотоны)
- Перенос тепла и энергии в физике твердого тела (фононы и прочие квазичастицы)
- Корпускулярно-волновой дуализм в квантовой механике (квантовые частицы и др.)
- Распространение сейсмических волн.

Кинетические, газодинамические и волновые методы в различных областях физики

	кинетика	газо/энергодинамика	волновая механика
механика	идеальный газ метод Больцмана	газодинамика	акустика сейсмика
термодинамика	баллистический теплоперенос	энергодинамика	тепловые волны
электродинамика	геометрическая оптика	энергодинамика	волновая оптика
квантовая механика	элементарные частицы	метод Маделунга теория де Бройля - Бома	метод Шрёдингера

Пример: волны в неоднородной среде

Уравнение движения (неоднородное волновое уравнение):

$$\rho \ddot{u} = \nabla \cdot (C \nabla u),$$

где u — перемещение точек среды, ρ и C — плотность и жесткость среды.

Уравнения баланса:

$$\dot{\epsilon} = -\nabla \cdot \mathbf{q}, \quad \dot{\mathbf{q}} = -\nabla \cdot \mathbf{g} + \varphi,$$

где ϵ , $\mathbf{q}$ и $\mathbf{g}$ удельная энергия, поток и суперпоток энергии:

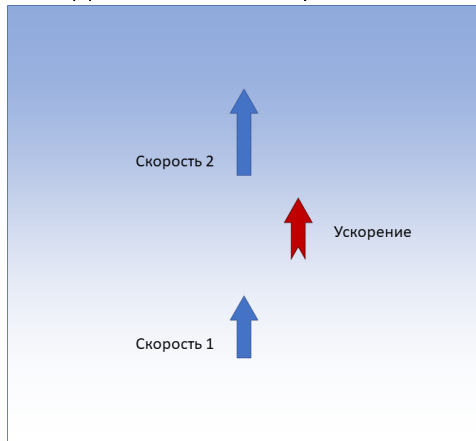
$$\epsilon = \frac{\rho}{2} \dot{u}^2 + \frac{C}{2} (\nabla u)^2, \quad \mathbf{q} = -C \dot{u} \nabla u;$$

φ — подвод потока энергии:

$$\varphi = C \left(\nabla u \nabla u - \frac{1}{2} (\nabla u)^2 \mathbf{I} \right) \cdot \nabla \left(\frac{C}{\rho} \right).$$

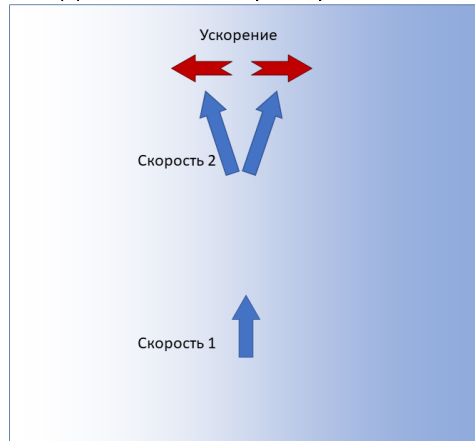
Неоднородная среда

Движение вдоль градиента



Направление ускорения очевидно

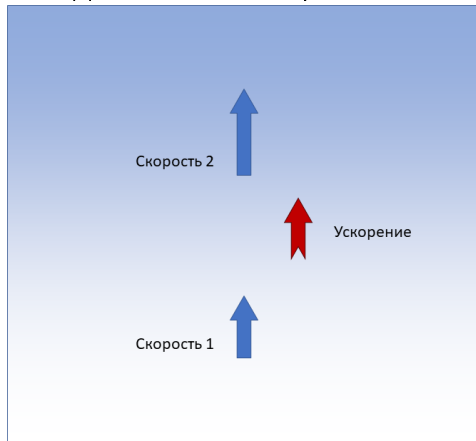
Движение поперек градиента



Вопрос — куда направлено ускорение?

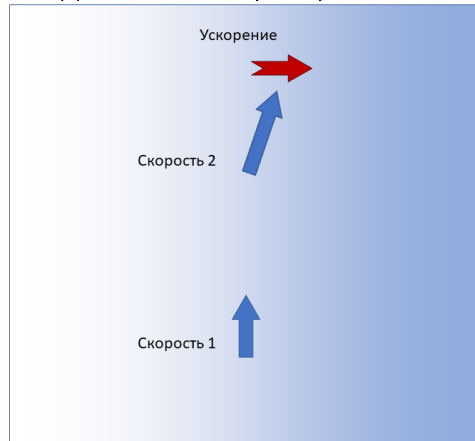
Неоднородная среда

Движение вдоль градиента



Направление ускорения очевидно

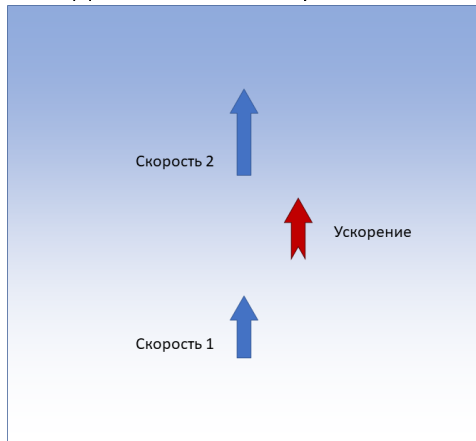
Движение поперек градиента



Аналогично направленное ускорение

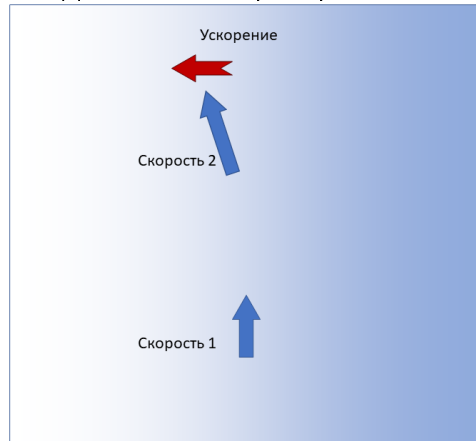
Неоднородная среда

Движение вдоль градиента



Направление ускорения очевидно

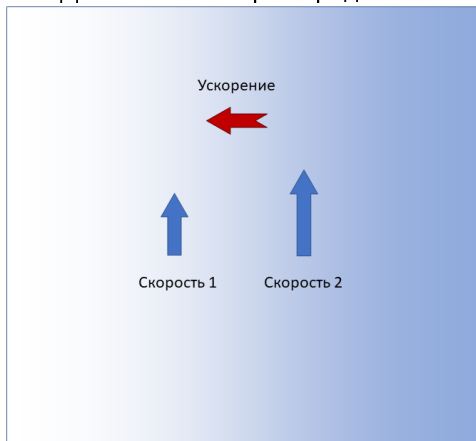
Движение поперек градиента



Правильно направленное ускорение

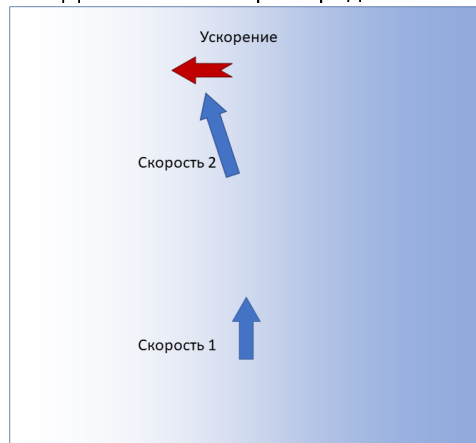
Неоднородная среда

Движение поперек градиента



Объяснение

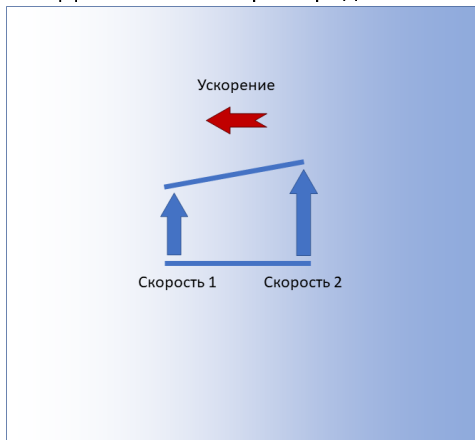
Движение поперек градиента



Правильно направленное ускорение

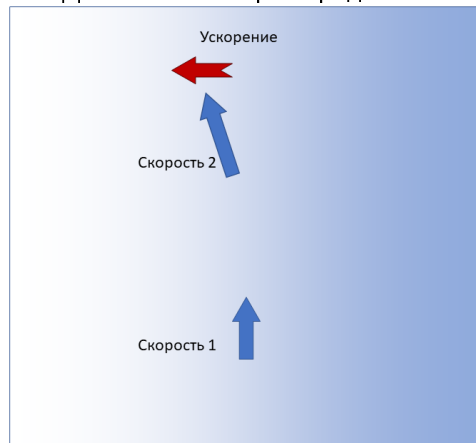
Неоднородная среда

Движение поперек градиента



Объяснение

Движение поперек градиента



Правильно направленное ускорение

Объяснение: движение возмущения

Уравнение движения возмущения

$$\dot{\mathbf{q}} = -\nabla \cdot \mathbf{g} + \varphi \quad \Rightarrow \quad E\ddot{\mathbf{r}} = \Phi, \quad E = \int \epsilon dV, \quad \dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{E} \int \mathbf{q} dV, \quad \Phi = \int \varphi dV.$$

Выражение для энергетической силы (в вириальном приближении)

$$\Phi = \frac{m}{2} (\nabla_{\parallel} - \nabla_{\perp})(c^2),$$

где

$$c = \sqrt{C/\rho}, \quad \nabla_{\parallel} = \mathbf{e} \mathbf{e} \cdot \nabla, \quad \nabla_{\perp} = \nabla - \nabla_{\parallel}, \quad \mathbf{e} = \dot{\mathbf{r}} / |\dot{\mathbf{r}}|.$$

Замкнутое дифференциальное уравнение

$$\ddot{\mathbf{r}} = (2\dot{\mathbf{r}}\dot{\mathbf{r}} - c^2\mathbf{I}) \cdot \nabla \ln c(\mathbf{r}).$$



Волновая механика Шрёдингера

Эрвин Шрёдингер 1887 – 1961.

1914: О динамике упругосвязанных точечных систем, Annalen der Physik (на немецком). Факторизация дифференциально-разностного оператора

$$\partial_t^2 - c^2 \Delta_n^2 = (\partial_t - c \Delta_n) (\partial_t + c \Delta_n)$$

дает аналитическое описание динамики цепочки Гука в функциях Бесселя.

1926: Квантование как задача о собственных значениях, часть 4, Annalen der Physik (на немецком). Факторизация дифференциального оператора

$$\partial_t^2 + b^2 \partial_x^4 = (\partial_t - ib \partial_x^2) (\partial_t + ib \partial_x^2)$$

сводит вещественное уравнение к комплексному.

t — время, n и x — положение в дискретном и континуальном описаниях, c и b — константы, i — мнимая единица, ∂_t и ∂_x — дифференциальные операторы, Δ_n — разностный оператор.

Переход от уравнения балки к уравнению Шрёдингера

Уравнение динамики балки Бернулли-Эйлера:

$$(\partial_t^2 + b^2 \partial_x^4) u = 0, \quad b = \sqrt{C/\mu}$$

Уравнение Шрёдингера:

$$(\partial_t - ib\partial_x^2) \psi = 0, \quad b = \sqrt{\hbar/(2m)}$$

Переход:

$$(\partial_t - ib\partial_x^2) \underbrace{(\partial_t + ib\partial_x^2) u}_{\psi/\lambda} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad (\partial_t - ib\partial_x^2) \psi = 0, \quad \psi = \lambda (\partial_t + ib\partial_x^2) u$$

u — прогиб балки, C — поперечная жесткость, μ — погонная плотность; ψ — волновая функция, $\hbar$ — приведенная постоянная Планка, m — масса квантовой частицы; λ — константа.

Связь волновой функции с прогибом балки

Определение волновой функции через скорость сечения и деформацию балки:

$$\psi = \lambda (\dot{u} + i b u'')$$

Определение скорости и деформации через волновую функцию:

$$\dot{u} = \frac{1}{\lambda} \operatorname{Re} \psi, \quad u'' = \frac{1}{\lambda b} \operatorname{Im} \psi$$

— скорость пропорциональна вещественной части, деформация — мнимой.

Точка — производная по времени t , штрих — производная по пространственной координате x .

Энергия и плотность вероятности

Удельная энергия балки (отнесенная к единице длины)

$$\epsilon = \frac{\mu}{2} \dot{u}^2 + \frac{C}{2} u'^2.$$

Плотность распределения вероятности положения квантовой частицы

$$\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2.$$

Связь плотности вероятности и энергии:

$$\rho = \frac{\lambda^2}{\mu} \epsilon$$

— совпадают с точностью до постоянного множителя.

Баланс энергии и плотности вероятности

Уравнение баланса энергии балки (q — поток энергии):

$$\dot{\epsilon} = -q', \quad q = C (\dot{u}u''' - \dot{u}'u'').$$

Уравнение баланса плотности вероятности (j — поток вероятности):

$$\dot{\rho} = -j', \quad j = 2b \operatorname{Im}(\psi^* \psi').$$

Связь потока вероятности и потока энергии:

$$j = \frac{\lambda^2}{\mu} q$$

— совпадают с точностью до постоянного множителя.

Таким образом, перенос энергии в балке Бернулли-Эйлера является точным аналогом переноса вероятности в волновой механике Шрёдингера*.

*S.N. Gavrilov, A.M. Krivtsov, E.V. Shishkina. Energy transport in a free Euler–Bernoulli beam in terms of Schrödinger’s wave function. 2025, Mechanics Research Communications, 144, 104382

Волновая механика → газовая динамика

Подход *энергетической динамики**: построение цепочки уравнений баланса потоков энергии (или вероятности):

$$\dot{q}_n = -q'_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$n = 0$: плотность; $n = 1$: поток; $n = 2$: суперпоток (поток потока) и т.д.

Для волновой механики Шрёдингера (формула получена совместно с И. Труновой):

$$q_n(t, x) = (ib)^n \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \right)^n \psi^*(t, x) \psi(t, y) \Big|_{y=x},$$

в частности,

$$q_0 = \psi^* \psi, \quad q_1 = 2b \operatorname{Im}(\psi^* \psi'), \quad q_2 = 2b^2 \operatorname{Re}(\psi'^* \psi' - \psi^* \psi'').$$

*А.М. Krivtsov. Dynamics of matter and energy. 2022, ZAMM, 103, e202100496.

Газ Шрёдингера (потoki)

Уравнения баланса

$$\dot{q}_0 = -q'_1, \quad \dot{q}_1 = -q'_2, \quad \dot{q}_2 = -q'_3.$$

Потоки не являются независимыми. Из необходимости выполнения волнового уравнения следует определяющее уравнение

$$q_3 = 3 \frac{q_2 q_1}{q_0} - 2 \frac{q_1^3}{q_0^2} - b^2 q_0 \left(\frac{q_1}{q_0} \right)'',$$

замыкающее систему.

Кинетическая интерпретация газодинамических переменных

Плотность, поток, суперпоток и гиперпоток (интегрирование ведется от $-\infty$ до ∞):

$$q_n = \int \nu^n f \, d\nu, \quad n \in \{0, 1, 2, 3\},$$

где $f = f(t, x, \nu)$ — плотность распределения кинетических частиц, ν — скорость кинетической частицы.

Плотность, скорость, давление

$$\rho = \int f \, d\nu, \quad v = \frac{1}{\rho} \int \nu f \, d\nu, \quad p = \int (\nu - v)^2 f \, d\nu.$$

Внутренняя энергия и тепловой поток

$$\varepsilon = \frac{1}{2\rho} \int (\nu - v)^2 f \, d\nu, \quad h = \frac{1}{2} \int (\nu - v)^3 f \, d\nu.$$

Газ Шрёдингера (газодинамические обозначения)

Уравнения баланса:

$$\dot{\rho}^* = -\rho v', \quad \rho \dot{v}^* = -p', \quad \rho \dot{\varepsilon}^* = -p v' - h'.$$

Определяющие уравнения

$$p = 2\rho\varepsilon, \quad h = -\frac{b^2}{2} \rho v''.$$

Обозначения: ρ — плотность, v — скорость, p — давление,
 ε — удельная внутренняя энергия, h — удельный тепловой поток,
звездочка — материальная производная: $\dot{\rho}^* = \dot{\rho} + v\rho'$.

Уравнение для давления соответствует идеальному одномерному одноатомному газу.
Тепловой поток пропорционален градиенту скорости деформирования элемента газовой среды.

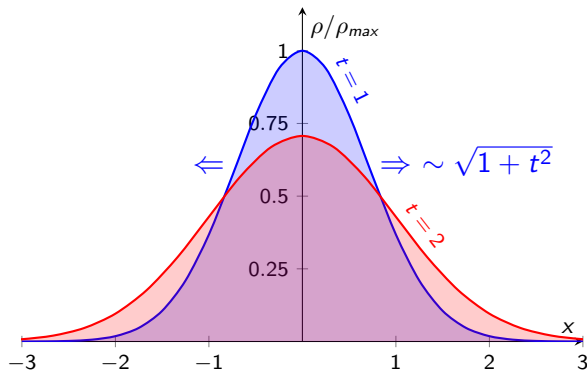
дисциплина	уравнения	пояснения
кинетическая теория	$\dot{f} = -\nu f'$	$f(t, x, \nu)$ — плотность распределения
газовая динамика	$\dot{\rho}^* = -\rho v', \rho \dot{v}^* = -p', \rho \dot{\varepsilon}^* = -2\rho \varepsilon v' - h',$ $p = 2\rho \varepsilon, \quad h = \frac{1}{2}\rho v''$	ρ — плотность, v — скорость, p — давление, ε — тепловая энергия, h — тепловой поток, функции (t, x)
квантовая механика	$\dot{\psi} = i\psi''$	$\psi(t, x)$ — волновая функция
теория стержней	$\ddot{u} = -u''''$	$u(t, x)$ — прогиб стержня

Производные: точка — по времени t , штрих — по координате x , звездочка: $\dot{\rho}^* = \dot{\rho} + \nu \rho'$ — материальная; ν — кинетическая скорость, i — мнимая единица.

дисциплина	уравнения	начальные условия	плотность
кинетическая теория	$\dot{f} = \nu f'$	$f = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{x^2}{2} - \frac{\nu^2}{2}}$	$\int_{-\infty}^{\infty} f \, d\nu$
газовая динамика	$\dot{\rho}^* = -\rho \nu', \quad \rho \dot{\nu}^* = -p',$ $\dot{p}^* = -3\rho \nu' - (\rho \nu'')'$	$\rho = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad \nu = 0,$ $p = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$	ρ
квантовая механика	$\dot{\psi} = i\psi''$	$\psi = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{4}}$	$\psi^* \psi$
теория балок	$\ddot{u} = -u''''$	$u = \sqrt[4]{32\pi} \left(\frac{x}{2} \operatorname{erf} \frac{x}{2} + \frac{e^{-\frac{x^2}{4}}}{\sqrt{\pi}} \right),$ $\dot{u} = 0$	$\frac{1}{2} (\dot{u}^2 + u'^2)$

$$\rho(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1+t^2)}} e^{-\frac{x^2}{2(1+t^2)}}$$

Изменение пространственного распределения плотности



Заключение

- Подход энергетической динамики позволяет описывать движение возмущения аналогично движению материальной точки под действием внешней силы.
- Одномерное уравнение Шрёдингера, наряду с движением квантовой частицы, описывает распространение волн в балке Бернулли-Эйлера.
- Уравнения переноса энергии и вероятности эквивалентны уравнениям газовой динамики со специфическим законом теплопроводности.
- Для четырех моделей: кинетической, газодинамической, Бернулли-Эйлера и Шрёдингера реализуется гауссово решение.
- При численном моделировании процессов переноса могут применяться модели из смежных областей механики и физики, в частности, нелинейные уравнения газовой динамики в ряде случаев могут заменяться линейными уравнениями волновой динамики.

Спасибо за внимание!

Дополнительная информация: tm.spbstu.ru/TC