

Министерство образования и науки Российской Федерации
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Институт прикладной математики и механики
Кафедра «Теоретическая механика»

Работа допущена к защите

Зав. кафедрой, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., проф.

_____ А.М. Кривцов

«___» _____ 2019 г.

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА
МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЕПЛА В СКАЛЯРНОЙ
ТРЕУГОЛЬНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ**

по направлению 01.03.03 Механика и математическое моделирование

по образовательной программе

01.03.03_01 «Механика и математическое моделирование сред с микроструктурой»

Выполнила

Студентка гр. 43604/1

А.В. Давыдова

Руководитель

доцент, к.ф.-м.н.

В.А. Кузькин

Санкт-Петербург

2019

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ПЕТРА ВЕЛИКОГО
Институт прикладной математики и механики**

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой
А.М. Кривцов
« » _____ 2019 г.

**ЗАДАНИЕ
по выполнению выпускной квалификационной работы**

студентке Давыдовой Алене Вячеславовне, 43604/1

1. Тема работы: Моделирование распространения тепла в скалярной треугольной кристаллической решетке
2. Срок сдачи студентом законченной работы: 5 июня 2019 года
3. Исходные данные по работе: Отсутствуют
4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов): Проведение моделирования тепловых процессов, происходящих при переходе к тепловому равновесию в треугольной кристаллической решетке. Исследование процесса распространения тепла в треугольной скалярной кристаллической решетке для фундаментального решения и синусоидального распределения.
5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): Отсутствует
6. Консультанты по работе: Отсутствуют
7. Дата выдачи задания:

15.01.2019

Руководитель ВКР
(подпись)

В.А. Кузькин
инициалы, фамилия

Задание принял к исполнению 15.01.2019
(дата)

Студентка
(подпись)

А.В. Давыдова
инициалы, фамилия

РЕФЕРАТ

На 33 с., 11 рисунков

ТРЕУГОЛЬНАЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА, КИНЕТИЧЕСКАЯ ТЕМПЕРАТУРА, ГАРМОНИЧЕСКИЙ КРИСТАЛЛ, СИНУСОИДАЛЬНОЕ ТЕМПЕРАТУРНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ, ФУНДАМЕНТАЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ, ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

В работе рассматриваются процессы распространения тепла, происходящие в треугольной скалярной кристаллической решетке. В начальный момент частицы имеют нулевые перемещения и случайные начальные скорости, соответствующие начальному температурному полю. Рассматривается взаимодействие частиц гармоническим потенциалом. Показано, что свойства теплопроводности треугольной решетки являются анизотропными. Получено, что распространение тепла в идеальном кристалле имеет баллистический характер на малых расстояниях. Получены экспериментальные подтверждения аналитических соотношений для баллистической теплопроводности в случае треугольной решетки.

THE ABSTRACT

33 pages, 11 pictures

TRIANGULAR CRYSTAL CELL, KINETIC TEMPERATURE, HARMONIC CRYSTAL, SYNUSOIDAL TEMPERATURE DISTRIBUTION, FUNDAMENTAL SOLUTION, NUMERICAL EXPERIMENT

The paper considers the processes of heat propagation in a triangular scalar crystal lattice. At the initial time, the particles have zero displacements and random initial velocities corresponding to the initial temperature field. The interaction of particles by a harmonic potential is considered. It is shown that the thermal conductivity properties of a triangular lattice are anisotropic. It was found that the propagation of heat in an ideal crystal has a ballistic character at short distances. Experimental confirmations of the analytical relations for the ballistic thermal conductivity in the case of a triangular lattice are obtained.

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|----|
| Введение..... | 5 |
| Глава 1. Постановка задачи..... | 7 |
| 1.1 Описание математической модели..... | 7 |
| 1.2 Связь температуры и скоростей частиц..... | 8 |
| 1.3 Начальные условия..... | 9 |
| 1.4 Разделение на быстрые и медленные процессы..... | 10 |
| Глава 2. Аналитические соотношения для треугольной решетки..... | 12 |
| 2.1 Дисперсионные соотношения..... | 12 |
| 2.2 Групповая скорость..... | 13 |
| 2.3 Основные аналитические соотношения..... | 14 |
| Глава 3. Описание численного метода..... | 15 |
| 3.1 Описание алгоритма..... | 15 |
| 3.2 Граничные условия..... | 16 |
| 3.3 Шаг интегрирования по времени..... | 17 |
| Глава 4. Быстрые процессы..... | 19 |
| 4.1 Аналитическое решение..... | 19 |
| 4.2 Численное решение..... | 19 |
| Глава 5. Процесс распространения тепла..... | 21 |
| 5.1 Фундаментальное решение..... | 21 |
| 5.1.1 Аналитический способ решения..... | 21 |
| 5.1.2 Численное моделирование..... | 22 |
| 5.2 Синусоидальное распределение..... | 25 |
| 5.2.1 Постановка задачи..... | 25 |
| 5.2.2 Аналитическое решение..... | 27 |
| 5.2.3 Численное решение..... | 27 |
| Заключение..... | 31 |
| Список использованных источников..... | 33 |

ВВЕДЕНИЕ

Кристаллами называются твёрдые тела, в которых частицы (атомы и молекулы) расположены закономерно, образуя трёхмерно-периодическую пространственную укладку — кристаллическую решётку. Помимо существования природных кристаллов (образовавшихся естественным путем), современные технологии позволяют создавать искусственные материалы с правильной микроструктурой. Внутренняя структура материала может существенно влиять на физические свойства образца: в кристаллах может наблюдаться анизотропия оптических [4], температуропроводных [7] и прочностных свойств [1].

Процесс распространения тепла на макроуровне в большинстве случаев подчиняется закону Фурье. Но такое теоретическое описание процессов распространения тепла не может быть использовано для кристаллических структур, когда размеры исследуемой области составляют порядка несколько микрон. В экспериментах [5, 2, 9, 6] было показано, что коэффициент теплопроводности вещества зависит от длины исследуемого образца, а процесс распространения тепла имеет волновой характер. Таким образом было показано, что на микроуровне нельзя говорить о коэффициенте теплопроводности как о константе вещества, и, соответственно, с помощью закона Фурье данные процессы не могут быть описаны.

Современная кремниевая микроэлектроника имеет масштабы порядка нескольких нанометров — это один из примеров систем, для моделирования процесса распространения тепла в которых необходимо учитывать их микроструктуру. Развитие этой отрасли является ключевым для создания более мощных и компактных процессоров.

Благодаря тому, что современные технологии позволяют создавать новые кристаллические структуры, которые обладают особыми свойствами, возникает необходимость теоретического описания процессов, происходящих в веществах с микроструктурой. Возможность создавать аналитический прогноз свойств кристаллической структуры крайне важна для разработки новых материалов.

Целью данной работы является численное моделирование процессов распространения тепла в треугольной кристаллической решетке для проверки аналитических соотношений, полученных в статьях [7, 8].

Задачи, выполняемые в ходе работы:

- Вывод дисперсионного соотношения и групповой скорости для треугольной решетки;
- Численное моделирование быстрых процессов (для однородного температурного поля);
- Численное моделирование фундаментального решения;
- Численное моделирование задачи с синусоидальным начальным распределением (для двух направлений);
- Визуализация аналитического решения для всех видов начальных условий, рассмотренных выше;
- Сравнение результатов численных экспериментов с аналитическими результатами;
- Анализ полученных данных.

ГЛАВА 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

1.1. ОПИСАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

В качестве объекта исследования выбрана модель плоской бесконечной кристаллической структуры, состоящая из одинаковых равносторонних треугольников. В вершинах треугольников находятся атомы. Все атомы имеют одинаковую известную массу m . Схема взаимного расположения частиц в решетке и их связей изображены на рисунке 1.

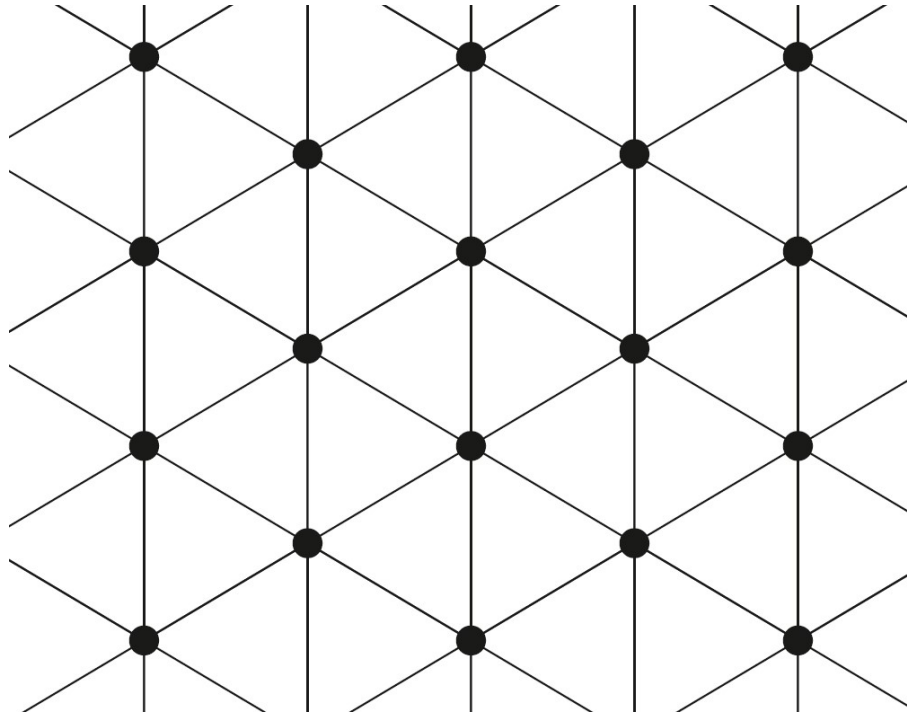


Рис. 1 Треугольная кристаллическая решетка.

Как видно из рисунка выше, каждая частица взаимодействует с шестью соседними частицами. Для идентификации каждой частицы используем вектор ее положения в отсчетной конфигурации x . Каждая частица имеет одну степень свободы и движется вдоль прямой, перпендикулярной плоскости решетки. Все связи в решетке имеют одинаковые жесткости и описываются одинаковым квадратичным потенциалом. Для каждой частицы запишем уравнение движения:

$$m\ddot{u}(x) = \sum_{\alpha=1}^6 C_{\alpha}(u(x + a_{\alpha}) - u(x)), \quad (1)$$

Где $u(x)$ – смещение частицы относительно положения равновесия; a_α – вектор, соединяющий рассматриваемую частицу с одной из шести соседних с ней частиц (индекс указывает, с какой именно); C_α – коэффициент жесткости связи.

Записав подобное соотношение (1) для каждой частицы решетки, получим систему из бесконечного количества перевязанных между собой уравнений. Для решения этой системы необходимо дополнить ее начальными условиями.

1.2. СВЯЗЬ ТЕМПЕРАТУРЫ И СКОРОСТЕЙ ЧАСТИЦ

Система уравнений движения кристаллической структуры содержит смещения и ускорения частиц. Исходя из постановки задачи, в качестве величины, которая задается в начальных условиях и получается в результате, используется температура. В связи с этим возникает необходимость связать температуру в некоторой точке решетки с кинематическими характеристиками частиц.

Согласно определению, температура является мерой средней кинетической энергии. Согласно уравнению Больцмана, температура и средняя кинетическая энергия молекул связаны как

$$\overline{E_k} = \frac{3}{2} kT. \quad (2)$$

Температура в классическом определении имеет смысл в случае стационарного или квазистационарного состояния системы. В случае распространения возмущения в кристаллической решетке предположение о квазистационарном процессе не может быть использовано, поэтому требуется ввести новую величину, назовем ее кинетической температурой:

$$T_{kin} = \frac{m}{k_b} \langle v^2(x) \rangle, \quad (3)$$

где угловыми скобками обозначается математическое ожидание. Далее везде будет подразумеваться именно кинетическая температура.

Для того, чтобы смоделировать температуру будем создавать очень большое количество кристаллических решеток (реализаций) с одинаковыми начальными условиями на температуру и со случайными начальными скоростями

частиц, такими, что если рассматривать распределение скоростей в некоторой пространственной точке по всем возможным реализациям, то математическое ожидание квадрата скорости частицы будет пропорционально кинетической температуре.

Для постановки начальных условий нужно, зная температуру в каждой точке решетки, задать начальное положение частицы и ее скорость. Примем, что начальные смещения частиц относительно положения равновесия равны нулю, а скорости заданы:

$$u_0(x) = 0; v_0(x) = v_0. \quad (4)$$

Такой вид начальных условий будет использоваться в дальнейшем во всех постановках задачи: для решения как численным методом, так и аналитически.

При таком выборе начальных условий, потенциальная энергия системы равна нулю, а кинетическая – максимальна. В последующие моменты времени происходит перераспределение механической энергии между кинетической и потенциальной. Процесс этого более подробно будет рассмотрен позже.

1.3. НАЧАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ

Как уже было сказано ранее, начальные положения всех частиц определяются нулевым смещением от положения равновесия. Проекция скорости частицы на ось, перпендикулярную плоскости решетки, является случайной величиной с равномерным распределением в интервале симметричном относительно нуля. Границы интервала определяются температурой в данной точке из следующих соображений: математическое ожидание кинетической энергии частицы по всем реализациям должно быть равно температуре в данной точке, умноженной на постоянную Больцмана [1]

$$\frac{k_b T(x)}{m} = M(v_0^2) \quad (5)$$

Далее воспользуемся формулой для вычисления математического ожидания величины $f(x)$, при том условии, что известна функция распределения величины x :

$$M(f(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \cdot \rho_x(x) dx \quad (6)$$

В данной задаче случайная величина проекции скорости имеет равномерное распределение на интервале $(-V_{max}, V_{max})$, следовательно, ее плотность распределения равна

$$\rho_v(x) = \frac{1}{2v_{max}}, v \in (-V_{max}, V_{max}); \quad (7)$$

$$\rho_v(x) = 0, v \notin (-V_{max}, V_{max}).$$

Подставим в формулу (6) плотность распределения проекции скорости (7) и получим:

$$M(v^2(x)) = \int_{-v_{max}(x)}^{v_{max}(x)} v^2 \frac{1}{2v_{max}} dv = \frac{v_{max}^2(x)}{3}. \quad (8)$$

Используя соотношение (8), выразим математическое ожидание квадрата скорости частицы через температуру. В результате получим зависимость величины интервала, в котором находится значение проекции скорости частицы в данной точке от температуры в данной точке:

$$v_{max} = \sqrt{\frac{3k_b T(x)}{m}} \quad (9)$$

Формула (9) необходима для численного моделирования процесса распространения тепла, в частности для задания начальных скоростей частицам при условии известного начального температурного поля.

1.4. РАЗДЕЛЕНИЕ НА БЫСТРЫЕ И МЕДЛЕННЫЕ ПРОЦЕССЫ

В работах [1, 7] представлено аналитическое решение задачи о распространении тепла в скалярной гармонической решетке. Автор переходит от уравнения для динамики частиц (1) к уравнениям для ковариаций скоростей частиц, чтобы отразить статистический характер кинетической температуры. Ковариация скоростей частиц, заданных радиус-векторами $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ имеет вид

$$\kappa(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle v(\mathbf{x}_1)v(\mathbf{x}_2) \rangle \quad (10)$$

Скорости двух любых разных частиц являются независимыми между собой величинами, ковариация которых равняется нулю. Принимая во внимание этот факт и соотношения (5, 10), получаем

$$\kappa(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{k_b T_0(\mathbf{x}_1)}{m} \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2), \quad (11)$$

где $\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$ – дельта-функция Дирака.

В результате алгебраических преобразований, континуализации и преобразования Фурье, автором было получено следующее уравнение:

$$\ddot{\hat{\kappa}} + 4\omega^2 \hat{\kappa} - 4\omega^2 (v_{gr} \cdot \nabla)^2 \hat{\kappa} = 0. \quad (12)$$

Его можно представить в следующем виде

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + 4\omega^2 \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - (v_{gr} \cdot \nabla)^2 \right) \hat{\kappa} = 0. \quad (13)$$

Решение уравнения (13) можно представить как сумму решений двух следующих уравнений

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + 4\omega^2 \right) \hat{\kappa} = 0 \quad (14)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - (v_{gr} \cdot \nabla)^2 \right) \hat{\kappa} = 0 \quad (15)$$

Решение первого уравнения имеет характерное время процессов меньше τ , поэтому решение первого уравнения имеет условное название температура быстрых процессов и обозначается как T_F . Это процессы, связанные с перераспределением механической энергии между кинетической и потенциальной.

Решение второго уравнения описывает пространственное перераспределение тепла. Для этого процесса характерны большие временные интервалы, поэтому решение второго уравнения условно называется медленной температурой и обозначается как T_S . Общее решение уравнения (13) записывается как

$$T = T_F + T_S. \quad (16)$$

Далее в работе будут отдельно рассматриваться быстрые и медленные процессы. Конкретный вид решений T_F, T_S , полученный аналитически в статье [7], будет представлен ниже.

ГЛАВА 2. АНАЛИТИЧЕСКИЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКИ

2.1. ДИСПЕРСИОННОЕ СООТНОШЕНИЕ

Для вывода дисперсионного соотношения уравнения движения (1). Обозначим волновой вектор за k и будем искать решение в виде:

$$u(\mathbf{x}, t) = A e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})}. \quad (17)$$

При подстановке выражения (17) в (1), при условии, что $C_\alpha = C, \alpha = 1, 2, \dots, 6$

Получаем

$$-\omega^2 e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} m = C e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} (e^{i(\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k})} + e^{i(\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k})} + e^{i(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) \cdot \mathbf{k}} + e^{-i(\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k})} + e^{-i(\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k})} + e^{-i(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) \cdot \mathbf{k}} - 6) \quad (18)$$

где $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ – базисные вектора решетки, изображенные на рисунке 2.

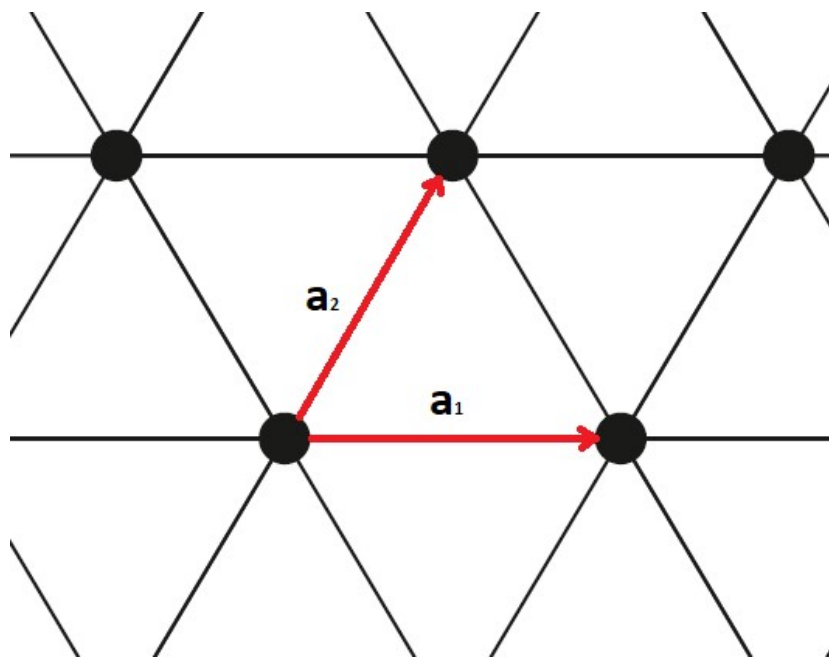


Рис. 2 Базисные вектора решетки

Упрощая выражение (18) и преобразуя суммы экспонент в косинусы, получаем:

$$\omega^2 = -\frac{C}{m} ((2 \cos(\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k}) - 2) + (2 \cos(\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k}) - 2) + (2 \cos((\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) \cdot \mathbf{k}) - 2)). \quad (19)$$

Используя известное тригонометрическое соотношение

$$\sin^2\left(\frac{x}{2}\right) = \frac{1 - \cos(x)}{2} \quad (20)$$

и введя обозначение для характерной частоты колебания системы

$$\omega^* = \sqrt{\frac{c}{m}} \quad (21)$$

получаем:

$$\omega(k) = \omega^* \sqrt{\sin^2 \frac{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k}}{2} + \sin^2 \frac{\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k}}{2} + \sin^2 \frac{(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) \cdot \mathbf{k}}{2}}. \quad (22)$$

Дисперсионное соотношение (22) является важной характеристикой решетки – оно будет неоднократно использовано в последующих разделах. Зная дисперсионное соотношение, можно получить групповую скорость распространения волн в данной решетке. Этому посвящен следующий параграф данной главы.

Для удобства дальнейших выкладок введем временной интервал, характерный для системы.

$$\tau = 2\pi\omega^*. \quad (23)$$

Будем использовать τ как масштаб для данной задачи по времени.

2.2. ГРУППОВАЯ СКОРОСТЬ

Согласно определению групповой скорости, ее можно вычислить как производную частоты по волновому вектору \mathbf{k} :

$$\mathbf{v}_{gr} = \frac{d \omega(\mathbf{k})}{d \mathbf{k}}. \quad (24)$$

Поскольку для решения любой задачи базис можно выбрать произвольно, то в данном случае для удобства будем использовать базис решетки $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$ и взаимный ему базис $(\mathbf{e}^1, \mathbf{e}^2)$, в котором распишем волновой вектор

$$\mathbf{k} = k_1 \mathbf{e}^1 + k_2 \mathbf{e}^2. \quad (25)$$

Таким образом, результат (групповая скорость) будет получен в базисе решетки. В результате взятия производной имеем:

$$\mathbf{v}_{gr} = v_1 \mathbf{a}_1 + v_2 \mathbf{a}_2 \quad (26)$$

$$v_1 = \omega^* \frac{\cos \frac{k_1}{2} \sin \frac{k_1}{2} + \cos \frac{k_1 - k_2}{2} \sin \frac{k_1 - k_2}{2}}{\sqrt{\sin^2 \frac{k_1}{2} + \sin^2 \frac{k_1 - k_2}{2} + \sin^2 \frac{k_2}{2}}}; \quad (27)$$

$$v_2 = \omega^* \frac{-\cos \frac{k_1 - k_2}{2} \sin \frac{k_1 - k_2}{2} + \cos \frac{k_2}{2} \sin \frac{k_2}{2}}{\sqrt{\sin^2 \frac{k_1}{2} + \sin^2 \frac{k_1 - k_2}{2} + \sin^2 \frac{k_2}{2}}}; \quad (28)$$

Таким образом, v_1, v_2 – координаты вектора групповой скорости в базисе решетки $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$, а k_1, k_2 – координаты волнового вектора во взаимном базисе $(\mathbf{e}^1, \mathbf{e}^2)$.

Зависимость вектора групповой скорости от волнового вектора будет использована в работе далее. Этот результат необходим непосредственно для аналитической формулы эволюции поля температур.

2.3. ОСНОВНЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ СООТНОШЕНИЯ

В статье [7] процесс распространения тепла описывается как суперпозиция быстрого и медленного процессов. Смысл этих понятий и причина их использования будут более подробно описаны в следующем разделе. В этой же статье [7] аналитически получены основные соотношения, описывающие эти процессы.

Кинетическая температура в некоторой точке решетки в любой момент времени представляется как сумма температур быстрых (T_F) и медленных (T_S) процессов

$$T = T_F + T_S. \quad (29)$$

Температура быстрых процессов вычисляется по формуле, полученной в [10]:

$$T_F(x, t) = \frac{T_0(x)}{8\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(2\omega t) dk_1 dk_2. \quad (30)$$

Аналитическая зависимость температуры медленных процессов от пространственной координаты и момента времени имеет вид:

$$T_S = \frac{1}{16\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \left(T_0(x + v_{gr}t) + T_0(x - v_{gr}t) \right) dk_1 dk_2. \quad (31)$$

В обоих случаях (30, 31) интегрирование проводится по ячейке периодичности в пространстве волновых векторов. Координаты волновых векторов k_1 и k_2 , записанные во взаимном базисе решетки (e^1, e^2) меняются в диапазоне $(-\pi, \pi)$, $\omega = \omega(k)$ – дисперсионное соотношение, полученное ранее (22), v_{gr} – вектор групповой скорости, компоненты которого вычисляются по формулам (27, 28), x – вектор положения частицы в равновесном положении, характеризующий частицу. Как видно из соотношений, расчет эволюции температурного поля является достаточно трудоемким процессом, с точки зрения вычислительных затрат.

ГЛАВА 3. ОПИСАНИЕ ЧИСЛЕННОГО МЕТОДА

3.1. ОПИСАНИЕ АЛГОРИТМА

Численное моделирование процесса распространения тепла реализовывалось на языке программирования C++ с использованием подходов объектно-ориентированного программирования.

Основные блоки программы

1. Создание трехмерного массива температур (два пространственных и одно временное измерение – в начале заполнен нулями). По времени размер массива определяется количеством моментов наблюдения. Моменты наблюдения могут разделяться любым целым количеством шагов по времени.

2. Создание массива частиц решетки, задание их начальных положений и скоростей. Скорость каждой частицы задается случайной величиной в диапазоне (9). Это начальные условия для расчета одной реализации.

3. Вычисление эволюции системы на одном шаге по времени – интегрирование уравнений методом Эйлера. Получение в результате новых положений и скоростей всех частиц.

4. Выполнение необходимого количества шагов по времени до следующего момента наблюдения (пункт 3)
5. Вычисление кинетической энергии каждой частицы в момент наблюдения и прибавление этого значения к соответствующему элементу массива температур.
6. Выполнение операций (5, 6) до достижения последнего момента наблюдения.
7. Расчет большого количества реализаций - выполнение операций (2-6). Каждый раз создаются начальные условия, соответствующие температурному полю, но в силу случайности величин начальной скорости начальные условия отличаются.
8. Вычисление температур в каждый момент наблюдения во всех пространственных точках путем осреднения кинетической энергии по реализациям с использованием соотношения (5).

3.2. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

В постановке задачи фигурирует бесконечная кристаллическая решетка. В связи с конечностью вычислительных мощностей и памяти компьютера, расчет возможно вести только для участка решетки конечных размеров. Эта проблема может быть решена различными способами для разных видов начальных условий:

- в случае ограниченности изначально нагретой области необходимо создать массив частиц такого размера, чтобы тепловое возмущение не успело дойти до края созданной области за время наблюдения. В этом случае крайние частицы могут быть закреплены, либо могут использоваться периодические граничные условия, речь о которых пойдет далее.
- В случае периодического в пространстве начального температурного поля, для наилучшей точности используются периодические граничные условия. Тем самым бесконечная область задачи разбивается на области с одинаковой геометрией решетки и одинаковыми начальными условиями по температуре. В этом

случае можно решать задачу лишь для одной ячейки периодичности – во всех остальных ячейках решение будет иметь тот же самый вид.

Внешний вид ячейки периодичности малого размера представлен на рисунке 3. Внутри синего контура находятся «уникальные частицы», которые составляют ячейку периодичности. Черным контуром на картинке обозначены частицы, которые являются копиями уникальных и хранятся в памяти компьютера для того, чтобы ни одна «уникальная» не лежала на границе массива, чтобы у нее были все 6 связей с соседними частицами. Это необходимо для удобства при интегрировании уравнений (1).

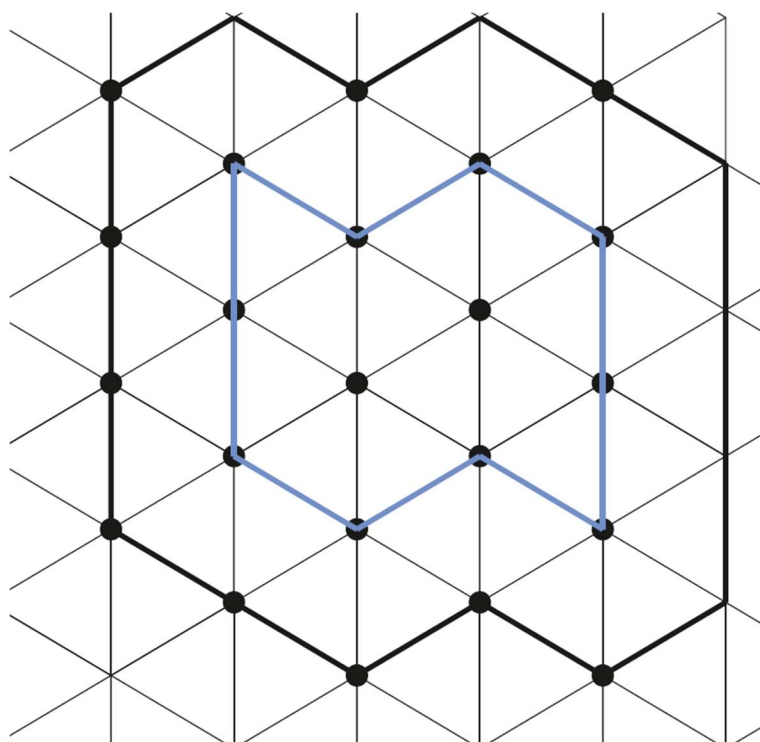


Рис. 3 Ячейка периодичности для численного интегрирования

Периодические граничные условия ставятся таким образом, что левая сторона ячейки периодичности «сшивается» с правой параллельным образом, верхняя, соответственно, с нижней. Ячейка периодичности имеет форму прямоугольника с зубчатыми краями по двум сторонам (вследствие геометрии решетки).

3.3. ШАГ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ПО ВРЕМЕНИ

Метод Верле — численный метод, используемый для интегрирования уравнений движения материальной точки. Он является алгоритмом с неявной симметричной разностной схемой.

Для того, чтобы определить оптимальную величину шага по времени, необходимо понимать, чему равен характерный период самых быстрых процессов в системе. В данной задаче наименьший период определяется быстрыми процессами, которые определяются соотношением (30). Максимальная частота процесса определяется максимальным значением $\omega(k)$, которое, согласно формуле (22) не может превышать трех.

$$\omega(k) < 3 \quad (32)$$

Из этого следует, что частота в аргументе косинуса в формуле (30) не может превышать шести, а это значит, что характерный период осцилляций T_F составляет не менее

$$T_{\text{period}} > \frac{2\pi}{2 \max_k(\omega(k))} = 1,04. \quad (33)$$

Для того, чтобы дискретно описывать функцию, не пропуская ее локальные максимумы и минимумы, необходимо, чтобы один характерный период осцилляции содержал в себе не менее 8-10 шагов по времени; их может быть больше, но сейчас целью анализа является нахождение максимально допустимого шага по времени. Итак, максимальный допустимый шаг по времени в абсолютной величине ограничен:

$$\Delta t < \frac{1,04}{10} \approx 0.1. \quad (34)$$

Относительно характерного времени для системы τ , шаг по времени ограничен

$$\Delta t < \frac{\tau}{50}. \quad (35)$$

Шаг по времени, использованный для построения решения, удовлетворяет требованиям (34, 35). Были проведены вычисления с различным шагом по времени, каждый из которых удовлетворял условиям (34, 35). Во всех случаях вид решения не изменялся, что говорит о достижении сходимости по временному шагу.

ГЛАВА 4. БЫСТРЫЕ ПРОЦЕССЫ

4.1. АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ

Для быстрых процессов в работе [10] была выведена формула (30). При однородном начальном распределении температуры

$$T_0(x) = T_0 = \text{const} \quad (36)$$

медленные процессы отсутствуют, температура медленных процессов T_S является константой (в этом можно убедиться, подставив в формулу (31) однородное начальное поле температур). В этом случае имеют место только быстрые процессы. Именно такие начальные условия и будут использоваться для построения решения T_F .

График зависимости температуры быстрых процессов от времени, полученный по формуле (30) и представленный на рисунке 4 ниже, осциллирует около нуля, то есть температура в некоторые моменты времени является отрицательной. Кинетическая температура, поскольку она является мерой средней кинетической энергии, может иметь только положительные значения. Это значит, что смысл температуры имеет только сумма $T_F + T_S$ (которая не может быть отрицательна). Зависимость температуры от времени для однородного начального температурного поля представлен на рисунке 4 красной линией на графике. Температура была нормирована на температуру решетки в нулевой момент времени. Как видно из графика, температура осциллирует около значения $0.5 T_0$ – это и есть постоянное значение температуры медленных процессов.

4.2. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ

Для моделирования быстрых процессов в решетке численно была задана одинаковая температура во всех точках пространства решетки

$$T_0(x) = \text{const} \quad (37)$$

Для расчётов были использованы периодические граничные условия, описанные в параграфе 3.2. Поле температур, полученное в результате расчета, было подвергнуто осреднению по пространству, и в результате получена зависимость

быстрой температуры T_F от времени. Эта зависимость представлена на рисунке 4 синими крестиками.

Численное и аналитическое решения представлены на одном графике для удобства сравнения.

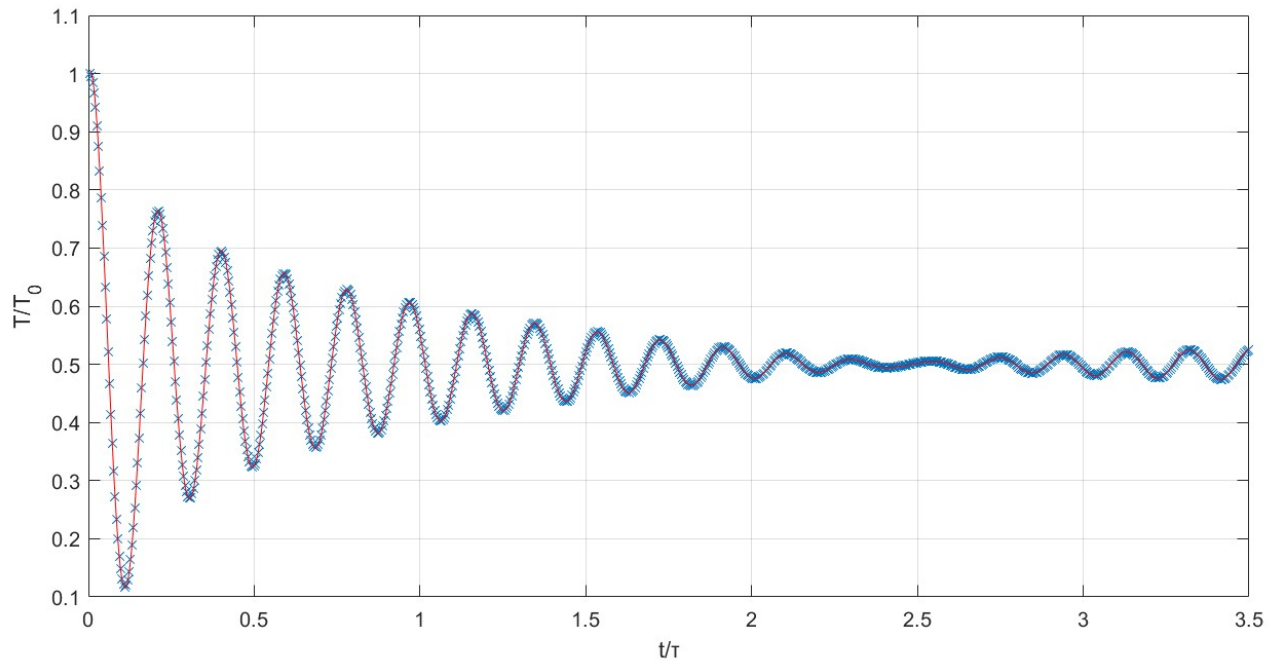


Рис. 4 Зависимость температуры от времени для однородного начального распределения

Как видно из рисунка, характерное время осцилляции быстрой температуры T_F составляет порядка 0.2τ . Колебания функции быстро затухают: на временах порядка $2.5\tau - 3\tau$ амплитуда колебаний уменьшается по сравнению с начальной в десять раз. Видно, что процесс перехода к равновесному состоянию, когда значения кинетической и потенциальной энергии приблизительно выравниваются, занимает время 3τ . Это наблюдение потребуется в дальнейшем при анализе медленных процессов. Также на графике отчётливо виден процесс биений.

ГЛАВА 5. ПРОЦЕСС РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЕПЛА

5.1. ФУНДАМЕНТАЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ

Фундаментальными решениями уравнения, согласно определению, называют такие решения, из которых можно сконструировать все остальные решения. В случае с процессом распространения тепла, фундаментальным решением является решение для случая точечного начального температурного возмущения, то есть

$$T_0(x) = A\delta(x)\delta(y). \quad (38)$$

Решения для любого начального температурного поля можно выразить через известное фундаментальное решение. Именно поэтому поиск фундаментального решения является первостепенной задачей, и начальное условие вида (38) для температурного поля выделяется среди других начальных условий.

5.1.1. Аналитический способ решения

Общая формула (31), полученная для медленных процессов в статье [7], при подстановке в нее начальных условий (38) дает:

$$T_S = \frac{1}{16\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} (\delta(r + v_{gr}t) + \delta(r - v_{gr}t)) dk_1 dk_2. \quad (39)$$

Используя свойства δ функций и заменяя переменные интегрирования $(k_1, k_2) \rightarrow (v_{grx}, v_{gry})$ – компоненты групповой скорости в декартовом базисе, получаем

$$T_S = \frac{A}{16\pi^2 t^2} \sum_j \frac{1}{|J(k_1^j, k_2^j)|} \quad (40)$$

где $J(k_1^j, k_2^j)$ – якобиан преобразования

$$J = \frac{\partial v_{grx}}{\partial k_1} \frac{\partial v_{gry}}{\partial k_2} - \frac{\partial v_{grx}}{\partial k_2} \frac{\partial v_{gry}}{\partial k_1}. \quad (41)$$

Суммирование ведется по решениям системы уравнений:

$$\begin{cases} v_{grx} = \frac{x}{t}, v_{gry} = \frac{y}{t} \\ v_{grx} = -\frac{y}{t}, v_{gry} = -\frac{x}{t} \end{cases} \quad (42)$$

Подробнее с выводом аналитических соотношений (40, 41, 42) можно ознакомиться в работе [7]. Визуализация температурного поля при фундаментальном решении представлена на рисунке 5.

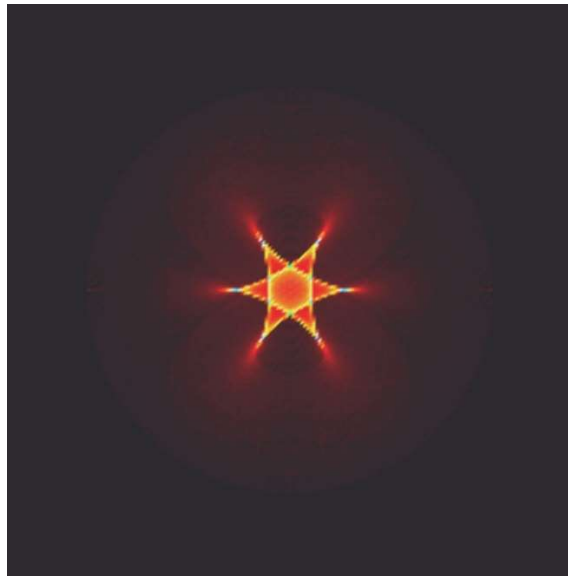


Рис.5 Визуализация аналитически полученного фундаментального решения

5.1.2. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

При подготовке численного моделирования процесса распространения тепла с начальным распределением температур вида (38) необходимо решить несколько вопросов:

- Поскольку при аналитическом решении задачи использовалась континуализация, то при численном моделировании необходимо использовать большое число частиц в расчетной области, чтобы смоделировать непрерывную среду. Это значит, что, с одной стороны, нагретая изначально область должна иметь достаточно большое количество частиц (для соблюдения условия непрерывности среды), а с другой стороны, быть много меньше масштаба расчетной

области, поскольку начальное распределение температур описывается дельта-функцией.

- Размер области расчета, необходимый для наблюдения корректного результата связан со временем, прошедшим с начала наблюдения. Тепловое возмущение должно не успеть дойти до границы расчетной области, поскольку аналитическая задача поставлена для бесконечной решетки.

Нужно определить время наблюдения, радиус изначально нагретого пятна и размеры расчетной области, чтобы были выполнены следующие условия:

- Приближенное соответствие дискретной модели в нагретой области модели непрерывной среды;
- Малость нагретого пятна в сравнении с размерами области, по которой распространилось тепло;
- Область, в которой распространилось тепло меньше расчетной области;

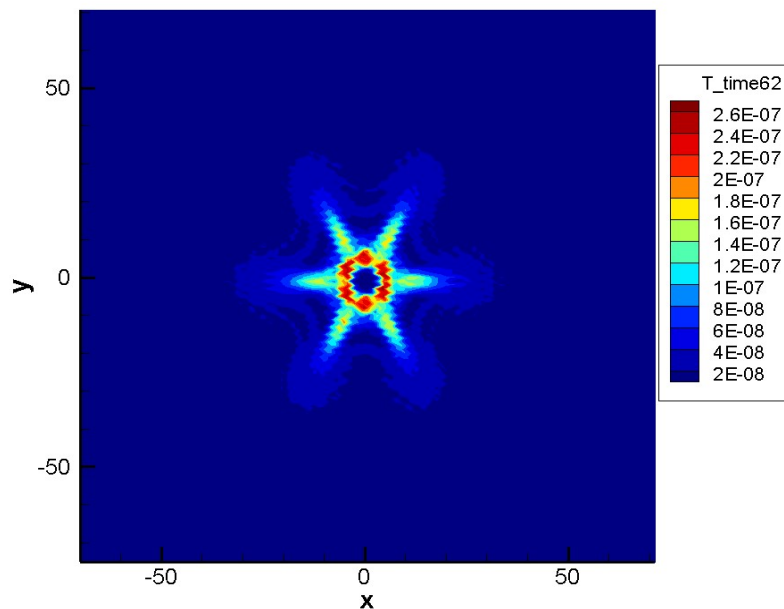


Рис. 6 Поле температур при $R_0 = 2$

Радиус изначально нагретой области должен быть не меньше $R_0 \geq 10$. Это было получено эмпирическим путем из численных экспериментов с разными радиусами нагретой области. Выше на рисунке 6 представлен результат

численного моделирования для $R_0 = 2$, $t = 10\tau$. Как видно, на картинке присутствует «рябь», что является следствием слишком малого количества частиц в области, где распространилось температурное возмущение.

Для получения корректного результата для непрерывной среды требуется получить ту же картину распределения, но на более мелкой пространственной сетке, чтобы «рябь» стала мельче. Для этого необходимо задать больший радиус изначальной нагретой области и наблюдать в течении большего времени.

Исходя из вида начальных условий, радиус области, по которой распространилось тепло должен быть как минимум на порядок больше, чем радиус нагретой области – в этом случае можно считать, что $R_0 \ll R_{area}$. Время, которое требуется фронту, чтобы достичь R_{area} можно оценить как

$$t = \frac{R_{area}}{v_{gr(max)}}. \quad (43)$$

В результате, расчеты были проведены для следующих параметров:

$$R_0 = 10;$$

$$R_{area} = 500;$$

$$t = 50 \tau;$$

Результаты численного моделирования представлены на рисунке 7.

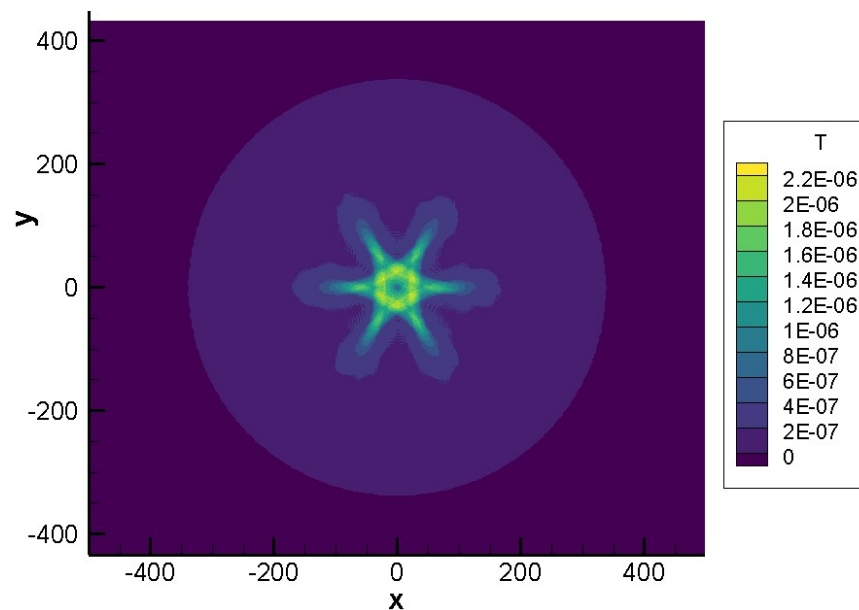


Рис. 7 Численное решение задачи с δ -видным начальным распределением температур

Как видно и на рисунке 7 есть мелкая «рябь». Это является следствием того, что численный эксперимент ставится на дискретной модели среды.

Анализируя результаты эксперимента и визуализации аналитического решения, можно видеть, что фронт волны является окружностью. При этом, по результату эксперимента очевидна анизотропия теплопроводящих свойств треугольной кристаллической решетки. Из рисунка видно, что поток энергии более интенсивный в направлении межатомных связей, а в направлении перпендикулярном связям поток энергии минимален.

В самом центре, где изначально была наиболее нагретая область, наблюдается температура ниже, чем в окружающих областях. С точки зрения классической теории теплопроводности и закона Фурье это невозможно, поскольку нарушается второе начало термодинамики. Но результат, полученный в данной работе, не противоречит классической термодинамике, так как для этой задачи было использовано понятие кинетической температуры, а закон Фурье и второе начало термодинамики оперируют с классическим понятием температуры, которое имеет смысл только для равновесных процессов.

5.2. СИНУСОИДАЛЬНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ

5.2.1. Постановка задачи

Для анализа теплопроводящих свойств решетки в некотором направлении необходимо провести эксперимент с одномерным распределением температуры вдоль исследуемого направления и проследить эволюцию этого распределения во времени. Поскольку при численном эксперименте большая точность может быть достигнута при моделировании с периодическими в пространстве начальными условиями (подробнее это описано в параграфе 3.2), то для численного моделирования можно выбрать любую периодическую функцию одного аргумента.

В данной работе в качестве периодической функции был выбран синус, поскольку синусоидальное распределение может быть описано единственным важным параметром для данной задачи – амплитудой. Именно зависимость

амплитуды синуса от времени является целью численного моделирования и аналитического решения для данного вида начальных условий.

Начальное поле температур задается соотношением

$$T_0 = T_b + \Delta T \sin \frac{2\pi x \cdot \mathbf{e}_t}{L}, \quad (44)$$

где ΔT – амплитуда температурного поля, \mathbf{e}_t – единичный вектор, задающий направление, вдоль которого начальная температура меняется по закону синуса, x – координата вдоль оси, задаваемой вектором \mathbf{e}_t , L – пространственная длина периода.

Численный эксперимент и аналитическое решение были проведены для двух случаев:

- Вектор \mathbf{e}_t направлен вдоль одного из направлений межатомных связей.
- Вектор \mathbf{e}_t направлен перпендикулярно одному из направлений межатомных связей.

Начальное поле температур, для случая, если \mathbf{e}_t направлен вдоль горизонтальной оси рисунка, схематично имеет вид, изображенный на рисунке 8.

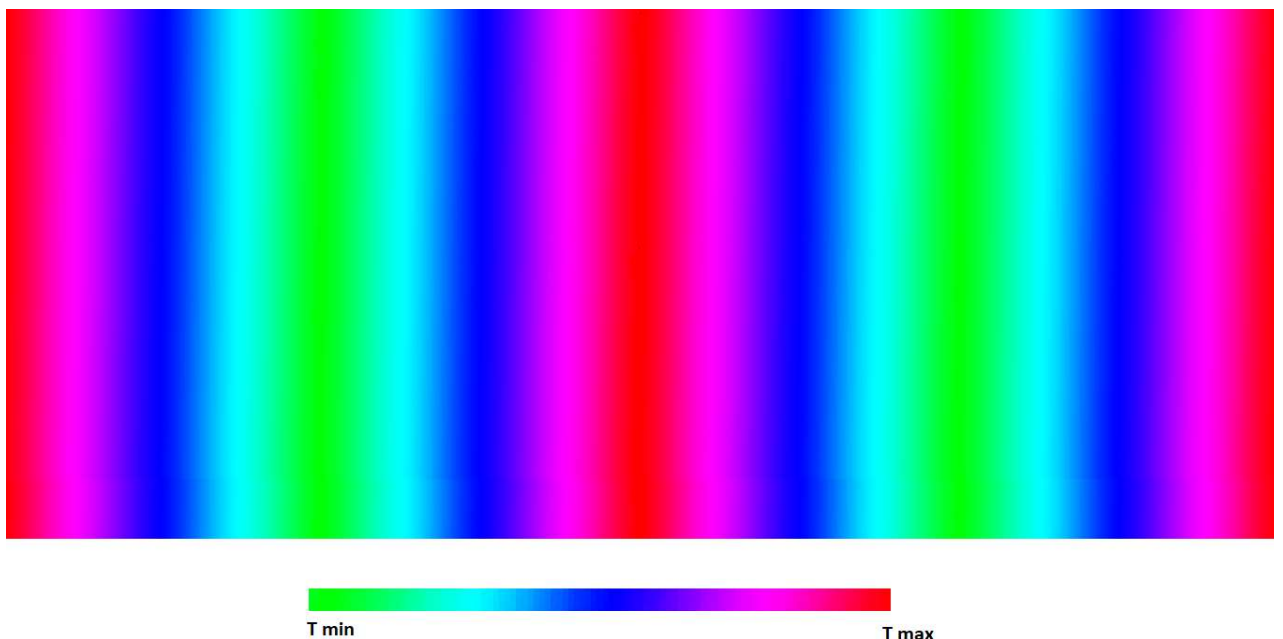


Рис. 8 Начальное температурное поле

5.2.2. Аналитическое решение

В статье [7] показано, что в случае синусоидального начального распределения, температурное распределение в любой момент времени также является синусоидальным с тем же периодом. Это значит, функция зависимости амплитуды синуса от времени дает исчерпывающую информацию об эволюции теплового поля.

В статье [8] приведена следующая формула для вычисления зависимости амплитуды температурного синуса от времени:

$$A = \frac{\Delta T}{2} \int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega t) + \cos \frac{2\pi v_t t}{L} d\mathbf{k}. \quad (45)$$

Интегрирование ведется по периоду $(-\pi, \pi)$ в двумерном пространстве волновых векторов; v_t – проекция групповой скорости на направление вектора \mathbf{e}_t .

Графики зависимости амплитуды синуса от времени для численного эксперимента и аналитики в случае $\mathbf{e}_t \parallel \mathbf{a}_1$ представлены на рисунке 10; графики зависимости амплитуды синуса от времени для численного эксперимента и аналитики в случае для случая $\mathbf{e}_t \perp \mathbf{a}_1$ представлены на рисунке 9. В следующем параграфе.

5.2.3. Численное решение

Для выполнения численного решения задачи о синусоидальном распределении были использованы периодические граничные условия. Начальное температурное поле задается соотношением (44). Амплитуда температурного синуса определяется как коэффициент ряда Фурье при синусе данной частоты:

$$A_{exp} = \frac{1}{\pi} \int_0^L T(x_t) \sin \frac{2\pi x_t}{L} dx_t. \quad (46)$$

Результаты численного эксперимента в сравнении с аналитическим решением представлены на рисунках 9 и 10 ниже. Сравнение решений для двух направлений представлено на рисунке 11.

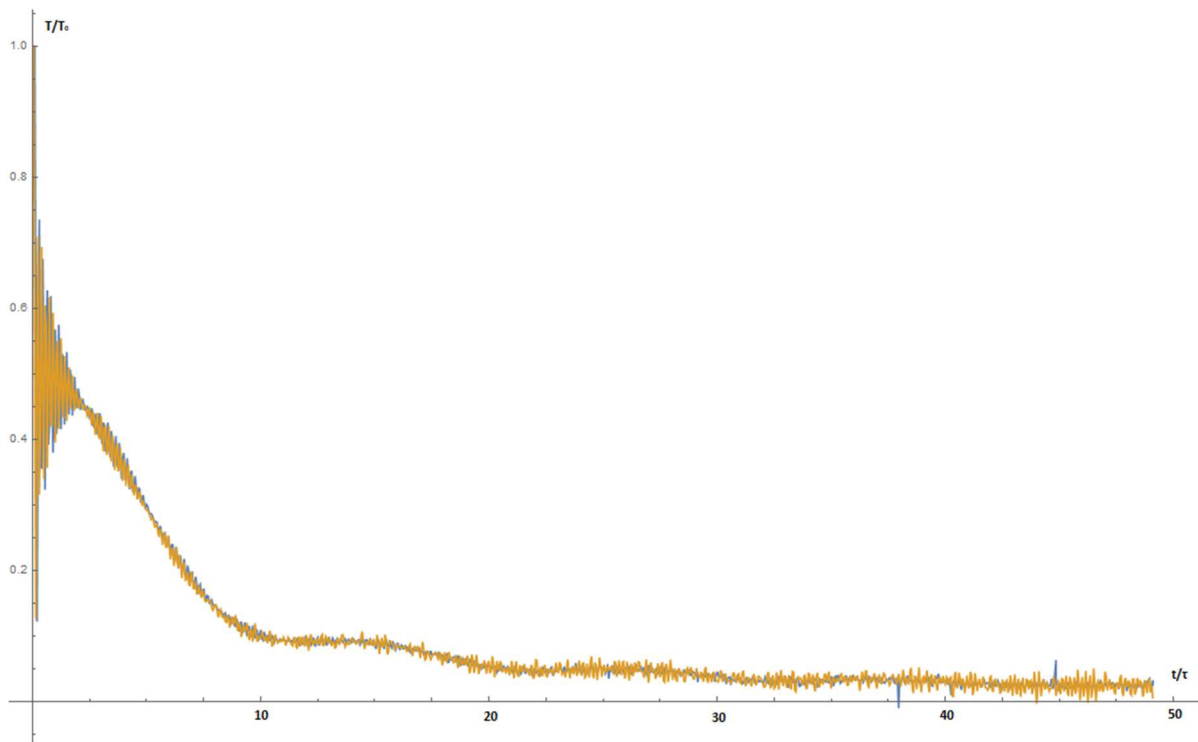


Рис. 9 Графики зависимости амплитуды синуса от времени при $\mathbf{e}_t \perp \mathbf{a}_1$ (синий – аналитическое решение, оранжевый - численное)

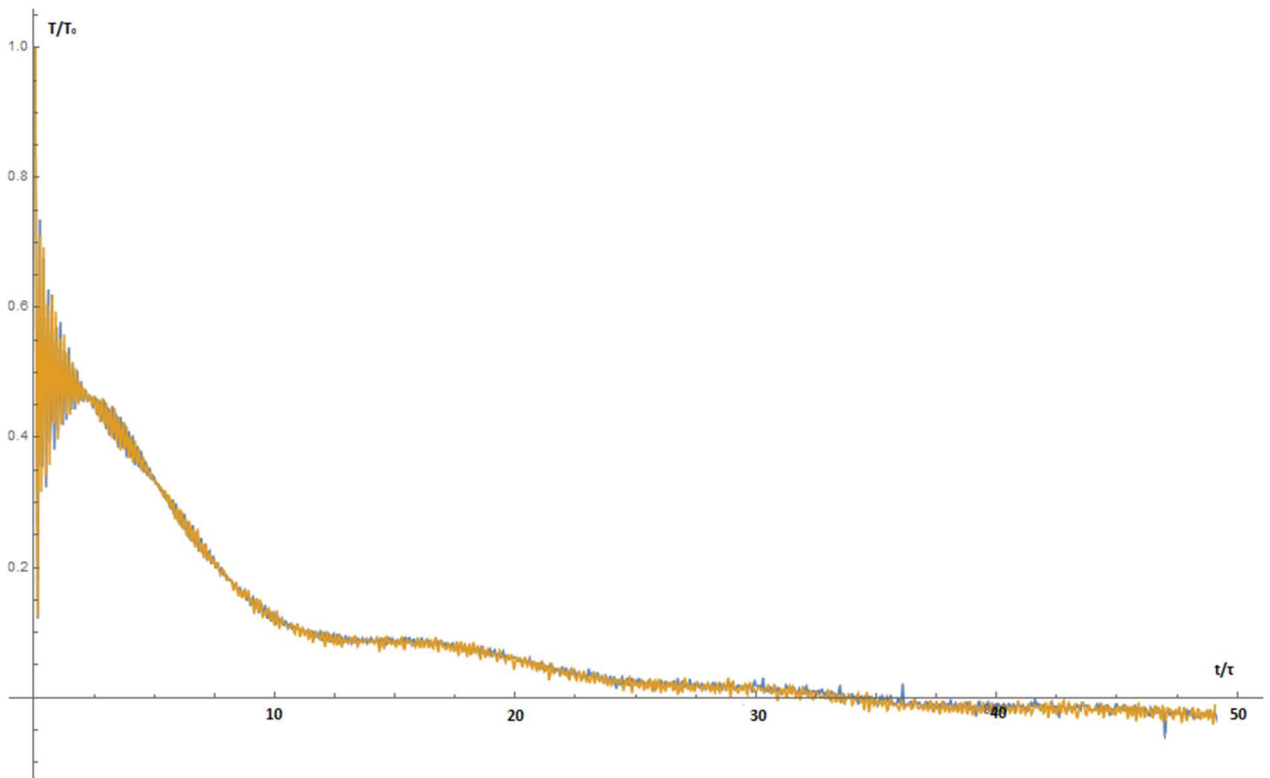


Рис. 10 Графики зависимости амплитуды синуса от времени при $\mathbf{e}_t \parallel \mathbf{a}_1$

(синий – аналитическое решение, оранжевый - численное)

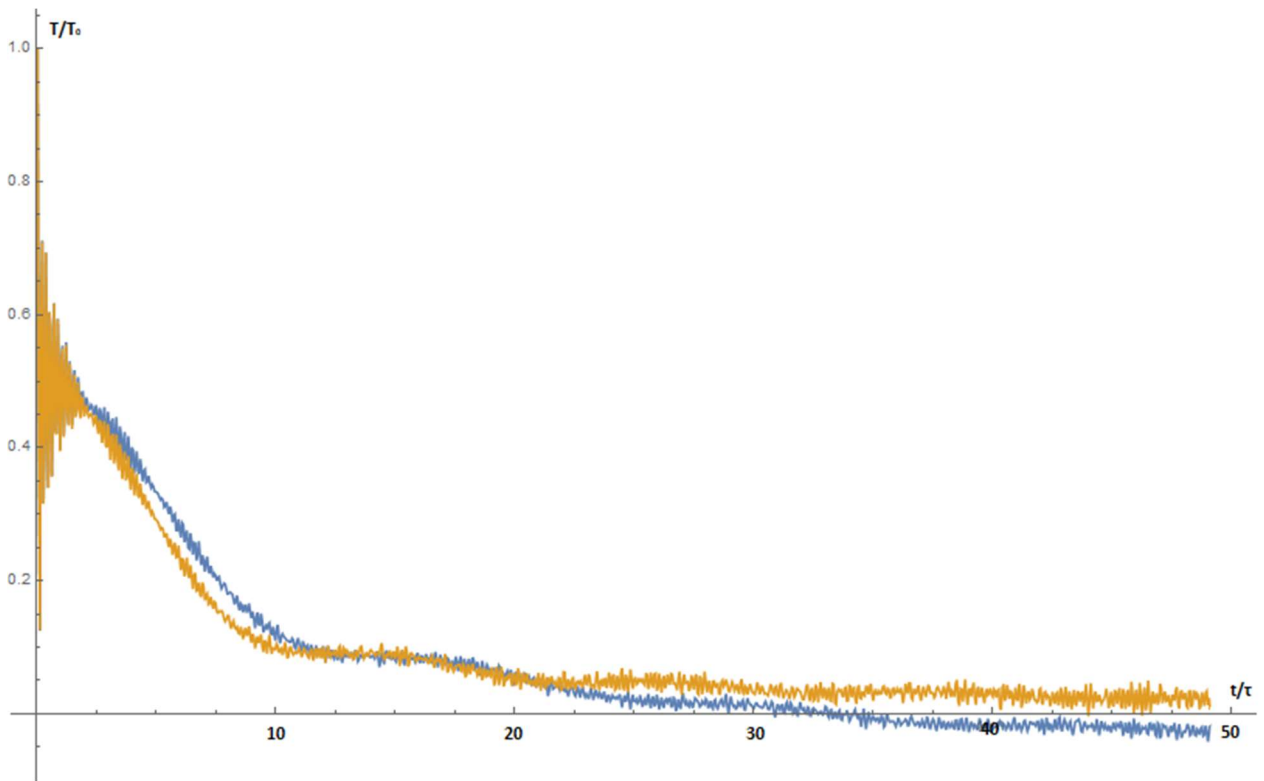


Рис 11. Сравнение зависимостей для различных направлений (синий график - $e_t \parallel a_1$, оранжевый график - $e_t \perp a_1$)

На вертикальной оси всех графиков отложена величина, нормированная на начальную амплитуду. По горизонтальной оси откладывается время, деленное на характерное время системы τ .

Как видно из всех графиков, на малых временах температура быстро осциллирует, при чем это имеет характер биений. Это вызвано высокой интенсивностью быстрых процессов в сравнении с медленными при малых временах от начала расчета. Этот факт согласуется результатами, полученными в главе 4.

Поскольку на рисунке 11 графики для различных направлений существенно отличаются, можно заключить, что треугольная решетка имеет анизотропию теплопроводящих свойств.

Как видно, графики численного решения практически совпадают с аналитическим решением, что является подтверждением правильности аналитических соотношений и реализации численного эксперимента.

В случае задания синусоидального распределения вдоль направления меж-атомных связей можно наблюдать область на графике, где амплитуда опускается в область с отрицательными значениями. Это значит, что синусоидальное распределение температуры на временах больше 35τ находится в противофазе к исходному распределению. Такой результат не мог быть получен с помощью классической теории теплопроводности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполнения работы были получены следующие результаты:

- Аналитически выведены дисперсионное соотношение и групповая скорость для треугольной кристаллической решетки.
- Было проведено численное моделирование быстрых процессов. Данные численного эксперимента были сопоставлены с аналитическими. Полученные данные демонстрируют точное соответствие между теорией и экспериментом. Это свидетельствует о корректности соотношений, полученных аналитически с использованием выбранной математической модели. Также из графиков видно, что быстрые процессы затухают на временах порядка нескольких τ , что в сравнении с характерными временами для быстрых процессов является малой величиной.
- В результате проведения численного эксперимента для медленных процессов был получен график зависимости амплитуды синусоидального распределения в зависимости от времени. Полученные данные были сопоставлены с аналитическим решением. Полученная численным методом зависимость совпадает с аналитической: при построении графиков они «накладываются» друг на друга. Это подтверждает корректность аналитического соотношения для амплитуды температурного синуса в зависимости от времени.
- Графики зависимости амплитуды синуса от времени для разных направлений существенно отличаются – это свидетельствует об анизотропии теплопроводящих свойств решетки.
- В случае синусоидального распределения температуры вдоль направления межатомных связей, график зависимости амплитуды температуры от времени уходит в отрицательную область. Это означает, что получившееся в результате перераспределения тепла синусоидальное тепловое поле находится в противофазе к исходному. Этот факт является интересным и требует дальнейшего изучения. Он может быть использован при конструировании охлаждающих систем на микроуровне.

- В результате проведения численного эксперимента для медленных процессов был получен вид фундаментального решения для задачи о распространении тепла в треугольной кристаллической решетке. Полученный результат позволяет сделать следующие выводы:

1. Максимальная групповая скорость распространения волн в треугольной решетке одинакова во всех направлениях – тепловой фронт имеет форму окружности.

2. Полученный результат противоречит закону Фурье: центральная область (изначально нагретая) имеет температуру ниже, чем окружающие точки. Это подтверждает актуальность развития математической модели, описывающей распространения тепла на микроуровне.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Кривцов А.М. Кузькин В.А. Механика дискретных сред. Переходные тепловые процессы в гармонических кристалла: учебное пособие [Книга]. - СПб : Политехн. ун-та, 2017.
2. Lepri S. Thermal transport in low dimensions: from statistical physics to nanoscale heat transfer [Book]. - [s.l.] : Springer, 2016. - Vol. 921.
3. Абдуллаев Н. А. Особенности упругих свойств слоистых кристаллов [Статья] // Физика твердого тела.. - 2006 г.. - 4 – С. 623-629 : Т. 48.
4. Феофилов П. П. Каплянский А. А. Скрытая оптическая анизотропия кубических кристаллов, содержащих локальные центры, и методы ее исследования [Статья] // Успехи физических наук. - 1962 г.. - 2 : Т. 76.
5. D.G. Cahill W.K. Ford, K.E. Goodson, G.D. Mahan, A. Majumdar, H.J. Maris, R. Nanoscale thermal transport [Article] // Journal of Applied Physics 93, 793. - 27 December 2003.
6. T.Y. Chen C.L. Chien, M. Manno, L. Wang, C. Leighton Ballistic heat transport in nanocontacts [Статья] // Physical Review B.. - 2010 г.. - 2 : Т. 81.
7. Krivtsov Vitaly A. Kuzkin Anton M. Fast and slow thermal processes in harmonic scalar [Статья] // Journal of Physics: Condensed Matter. - [б.м.] : IOP Publishing Ltd, 2017 г.. - 50 : Т. 29.
8. Kuzkin Vitaly A. Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals [Статья]. - 2019 г..
9. S. Liu X.F. Xu, R.G. Xie, G. Zhang, B.W. Li Anomalous heat conduction and anomalous diffusion in low dimensional nanoscale systems [Статья] // The European Physical Journal B,. - 2012 г.. - 10 : Т. 85.
10. Tsaplin V. A. Kuzkin V. A. Temperature oscillations in harmonic triangular lattice [Статья] // Letters on Materials. - 2018 г.. - 1 : Т. 8.