

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, д. ф.-м. н., чл.-корр. РАН

А. М. Кривцов

" _____ " _____ 2017 г.

Выпускная квалификационная работа

Тема:

**Перераспределение энергии по пространственным
направлениям в кристаллах**

Направление: 01.03.03 – Механика и математическое моделирование

Выполнил студент гр. 43604

Н. Г. Шварёв

Научный руководитель:

к. ф.-м. н., доцент В.А. Кузькин

Санкт-Петербург
2017

Содержание

1. Введение	3
2. Модель двумерного кристалла	4
2.1 Постановка задачи	4
2.2 Начальные и граничные условия	5
2.2.1 Начальные условия.....	5
2.2.2 Граничные условия	5
2.3 Параметры расчета	6
2.4 Реализация	7
2.4.1 Метод численного интегрирования.....	8
2.4.2 Пример работы программы	8
3. Результаты	9
3.1 Выравнивание температуры.....	9
3.2 Перераспределение энергии	11
3.3 Влияние количества частиц.....	12
3.4 Степень влияния нелинейности	14
3.5 Сравнение численного решения с аналитическим.....	15
3.6 Вывод формулы подобия.....	16
3.7 Выделение медленного процесса, связанного с нелинейностью	20
3.7.1 Определение формы графика медленного процесса	22
3.7.1.1 Проверка экспоненты.....	22
3.7.1.2 Проверка степенной функции	23
3.7.1.3 Проверка функции вида $\frac{1}{1+a(\frac{t}{\tau_0})^b}$	24
4. Заключение	26

1. Введение

Количественное описание неравновесных тепловых процессов в кристаллах – одна из актуальных проблем современной физики. Это связано со стремительным развитием нанотехнологий. В связи с этим большой интерес представляют процессы, происходящие в твердых телах при переходе к состоянию термодинамического равновесия. Неравновесное состояние может быть вызвано, к примеру, прохождением ударных волн или быстрым лазерным воздействием. Тогда кинетические энергии теплового движения атомов в разных направлениях могут значительно различаться. Это, в свою очередь, показывает, что кинетическая температура может проявлять тензорные свойства [1]. На фронте ударной волны, распространяющейся вдоль одной из осей, например, оси X , выполняются следующее соотношение:

$$\hat{T}_{xx} > \hat{T}_{yy}, \quad (1)$$

где $\hat{T}_{xx} = \frac{m\langle v_x^2 \rangle}{k_B}$, $\hat{T}_{yy} = \frac{m\langle v_y^2 \rangle}{k_B}$ – кинетические температуры вдоль соответствующих направлений, k_B – постоянная Больцмана.

При переходе к равновесному состоянию в кристалле реализуется два процесса:

- 1) Выравнивание кинетической и потенциальной энергий;
- 2) Перераспределение кинетической энергии по пространственным направлениям [1].

Данная работа посвящена численному описанию перераспределения кинетической энергии по пространственным направлениям в негармонических кристаллах с треугольной кристаллической решеткой.

Кристаллы – твердые тела, в которых атомы расположены закономерно, образуя периодическую пространственную укладку – кристаллическую решетку [2]. Кристаллическая решетка – множество точек (узлов) в трехмерном пространстве, для которого существует такая тройка

некомпланарных векторов, что смещение этого множества на любой из них есть тождественное преобразование [3]. Гармонический кристалл – кристаллическая решетка, состоящая из материальных точек, взаимодействующих с помощью линеаризованных (гармонических) сил, линейно зависящих от перемещения частиц [1].

В данной работе рассматриваются как одиночные реализации (расчет одного экземпляра программы), так и большое количество реализаций кристалла, различающихся только лишь случайными начальными условиями, с усреднением по сделанным реализациям. Это необходимо потому, что при описании тепловых процессов наибольший интерес представляют не случайные движения отдельных частиц, а изменение статистических характеристик. В данном случае в роли этой характеристики выступает кинетическая температура, за изменением которой и происходит наблюдение. Также в ходе работы рассматриваются разные размеры кристаллической решетки и влияние размера на результат.

2. Модель двумерного кристалла

2.1 Постановка задачи

Рассматривается треугольная кристаллическая решетка (узлы расположены в вершинах равносторонних треугольников, плотно заполняющих плоскость). Орты, задающие направление от некоторого узла кристаллической решетки к его ближайшим соседям, представляются в виде:

$$\mathbf{n}_{1,2} = \pm \mathbf{i}, \quad \mathbf{n}_{3,4,5,6} = \pm \frac{1}{2} \mathbf{i} \pm \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{j}, \quad (2)$$

где \mathbf{i}, \mathbf{j} – орты декартовой системы координат [3].

В данной работе рассматривается только треугольная кристаллическая решетка и не рассматривается квадратная, так как в квадратной не происходит перераспределение кинетической энергии по пространственным направлениям, а в треугольной – происходит [1].

Для взаимодействия между частицами используется потенциал Леннард-Джонса:

$$\Pi(r) = D \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right], \quad (3)$$

где D – энергия связи, r – расстояние между частицами, a – длина связи (расстояние, на котором обращается в нуль сила взаимодействия) [4]. В нашем случае длина связи будет совпадать с радиусом частиц.

Таким образом, сила взаимодействия, соответствующая потенциалу Леннард-Джонса, вычисляется по формуле:

$$F(r) = \frac{12D}{a} \left[- \left(\frac{a}{r} \right)^{13} + \left(\frac{a}{r} \right)^7 \right]. \quad (4)$$

2.2 Начальные и граничные условия

2.2.1 Начальные условия

Задаются начальные условия:

$$v_x \leq v_{max}, v_y = 0, u_x = 0, u_y = 0 \quad (5)$$

В начальный момент времени рассматриваются случайные начальные скорости вдоль одной оси (оси X), ограниченные некоторым варьируемым максимальным значением v_{max} , нулевые начальные скорости вдоль другой оси (оси Y) и нулевые перемещения вдоль обеих осей. Получается, частицы совершают колебания в плоскости решетки.

Таким образом, в начальный момент времени полная энергия системы равна кинетической, а потенциальная энергия равна нулю.

2.2.2 Граничные условия

Задаются периодические граничные условия Борна-Кармана:

$$\mathbf{u}_{i,j} = \mathbf{u}_{i+N_1L_1, j+N_2L_2}, \quad (6)$$

где \mathbf{u} – вектор перемещения частицы, i, j – индексы частицы, L_1, L_2 – количество частиц в модели кристалла вдоль оси X и оси Y соответственно, N_1, N_2 – целые числа [5].

2.3 Параметры расчета

В качестве единичных масштабов были взяты:

масса частицы $m = 1$;

радиус частицы $a = 1$;

жесткость связи $c = 1$.

Также использовались следующие параметры:

масштаб силы $f = \frac{12D}{a}$;

период осцилляции $\tau_o = 2\pi \sqrt{\frac{a}{6f}}$;

длинноволновая скорость $v_o = \sqrt{6fa}$;

расчетный шаг по времени $\Delta t = \frac{\tau_o}{200}$.

Расчетный шаг по времени выбирался с учетом критерия Куранта-Фридрихса-Леви [6], необходимого для устойчивости численного решения дифференциального уравнения в частных производных. В двумерной постановке условие выглядит так:

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} + \frac{\Delta y}{\Delta t} > c, \quad (7)$$

где Δx , Δy – пространственные шаги, Δt – временной шаг, c – скорость переноса. Критерий Куранта-Фридрихса-Леви означает, что частица за один шаг по времени не должна продвинуться больше, чем на один пространственный шаг, соответствующий равновесному расстоянию.

В нашем случае получается:

$$\Delta t < \frac{2a}{v_o}. \quad (8)$$

Так как количественное значение температуры будет случайным образом зависеть от начальной конфигурации, будем рассматривать обезразмеренное значение температуры:

$$T_{xx} = \frac{\hat{T}_{xx}}{\hat{T}_{xx}^o - \hat{T}_{yy}^o}; \quad (9)$$

$$T_{yy} = \frac{\hat{T}_{yy}}{\hat{T}_{xx}^o - \hat{T}_{yy}^o}, \quad (10)$$

где \hat{T}_{xx}^o и \hat{T}_{yy}^o значения в начальный момент времени \hat{T}_{xx} и \hat{T}_{yy} соответственно.

Из-за того, что температура прямо пропорциональна кинетической энергии, а в дальнейшем будет происходить рассмотрение только обезразмеренного значения температуры, то понятия температуры и кинетической энергии будут равносильны: $T_{xx} = E_x, T_{yy} = E_y$.

2.4 Реализация

Для расчетов использовалась программа, моделирующая метод молекулярной динамики, в которой учитывалось взаимодействие только ближайших соседей, написанная на языке программирования C++. В качестве инструмента визуализации работы – программа AView. Для построения графиков – Microsoft Excel 2010. Результаты работы были получены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

Метод молекулярной динамики – метод компьютерного моделирования, в котором временная эволюция системы отслеживается численным решением уравнений движения самих частиц. В классической молекулярной динамике в качестве частиц выступают атомы или молекулы, составляющие материал. Поскольку молекулярные системы, как правило, состоят из огромного числа частиц, то с определением свойств таких сложных систем аналитически могут возникнуть проблемы, а метод молекулярной динамики обходит эту проблему с помощью численных методов. Взаимодействие частиц описывается посредством потенциалов взаимодействия, основным свойством которых является отталкивание при сближении и притяжение при отдалении. В настоящее время потенциалы межатомного взаимодействия достаточно хорошо известны, что позволяет моделировать динамику молекулярных соединений с высокой степенью точности [7].

2.4.1 Метод численного интегрирования

В качестве метода численного интегрирования выступает метод Верле [8] – численный метод, используемый для интегрирования уравнений движения. Часто используется для вычисления траекторий частиц в моделях молекулярной динамики. Метод Верле более устойчив, чем более простой метод Эйлера, что является одним из ключевых условий при моделировании физических процессов.

Конечно-разностная аппроксимация для вектора скорости и радиус-вектора частицы в методе Верле выглядит следующим образом:

$$\mathbf{v}_{i+\frac{1}{2}} = \mathbf{v}_{i-\frac{1}{2}} + \frac{F(t_i)}{m} \Delta t; \quad (11)$$

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_{i-1} + \mathbf{v}_{i+\frac{1}{2}} \Delta t, \quad (12)$$

где i – некоторый момент времени, F – значение силы, m – масса частицы, Δt – расчетный шаг по времени.

2.4.2 Пример работы программы

Тестовый графический пример начальной конфигурации треугольной кристаллической решетки размером 10x10, получающийся в результате работы программы, показан на рисунке 1.

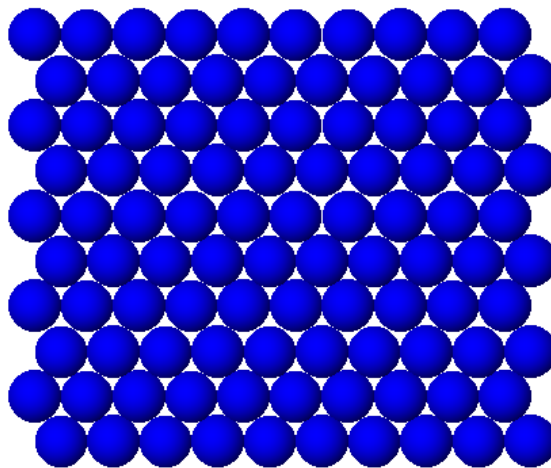


Рисунок 1. Треугольная кристаллическая решетка размером 10x10

3. Результаты

3.1 Выравнивание температуры

Для начала рассмотрим поведение кинетической температуры T_{xx} и T_{yy} на интервале в $50\tau_0$ для одиночной реализации ячейки периодичности 100×100 частиц с диапазоном начальных скоростей, не превышающим $0.1v_0$ (рисунок 2). По вертикальной оси откладывается значение обезразмеренного T , по горизонтальной – шаг по времени.

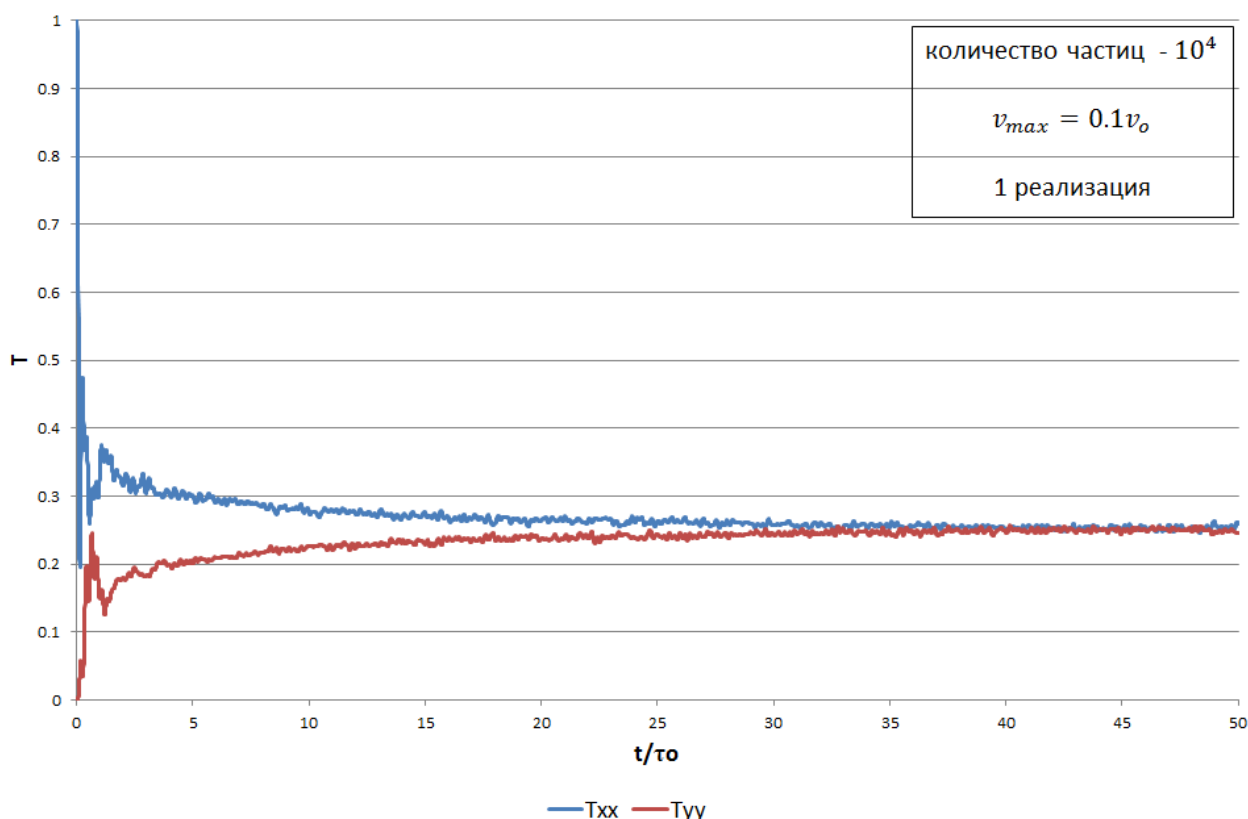


Рисунок 2. Поведение кинетической температуры

Как можно заметить, оба графика стремятся к асимптоте $T = 1/4$. Это связано с тем, что со временем при переходе к стационарному состоянию кинетическая и потенциальная энергия выравниваются, значит, половина кинетической энергии уходит в потенциальную. А при наличии нелинейности разность $T_{xx} - T_{yy}$ стремится к нулю [1], следовательно, половина от оставшейся половины уходит на равное распределение по пространственным направлениям.

Далее рассмотрим поведение графиков при проведении усреднения по 100 реализациям при тех же условиях: интервал $50\tau_o$, $v_{max} = 0.1v_o$, 10^4 частиц (рисунок 3).

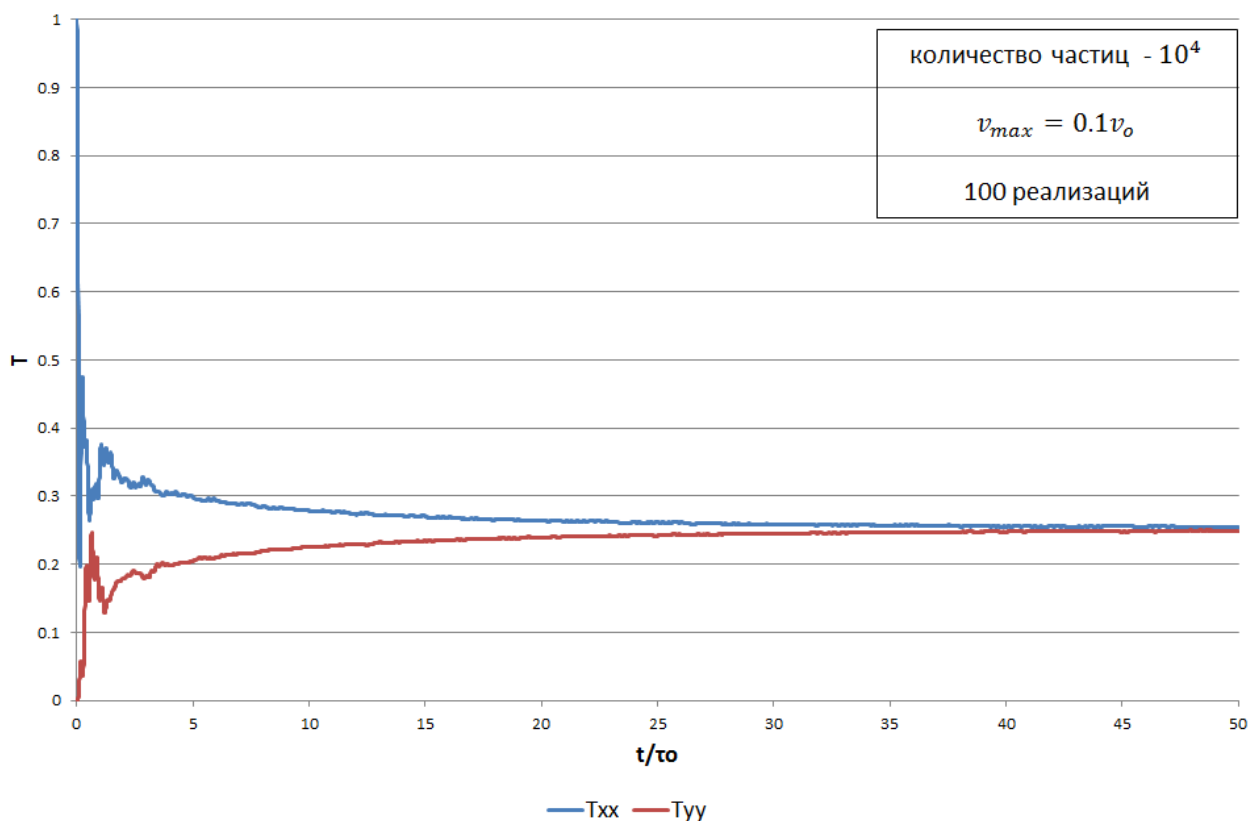


Рисунок 3. Поведение кинетической температуры при усреднении по 100 реализациям

Заметно, что общее поведение графиков осталось прежним, но они стали более гладкими из-за уменьшения влияния случайных начальных условий.

На начальном интервале в несколько периодов τ_o происходит перераспределение кинетической и потенциальной энергии, а далее – перераспределение кинетической энергии по пространственным направлениям [1].

В связи с отсутствием важной для нас информативности рассмотрим поближе диапазон вертикальной оси от 0.1 до 0.4 и наложим друг на друга полученные ранее графики для одной реализации и для усреднения по 100 реализациям на интервале $50\tau_o$, 10^4 частиц, $v_{max} = 0.1v_o$ (рисунок 4).

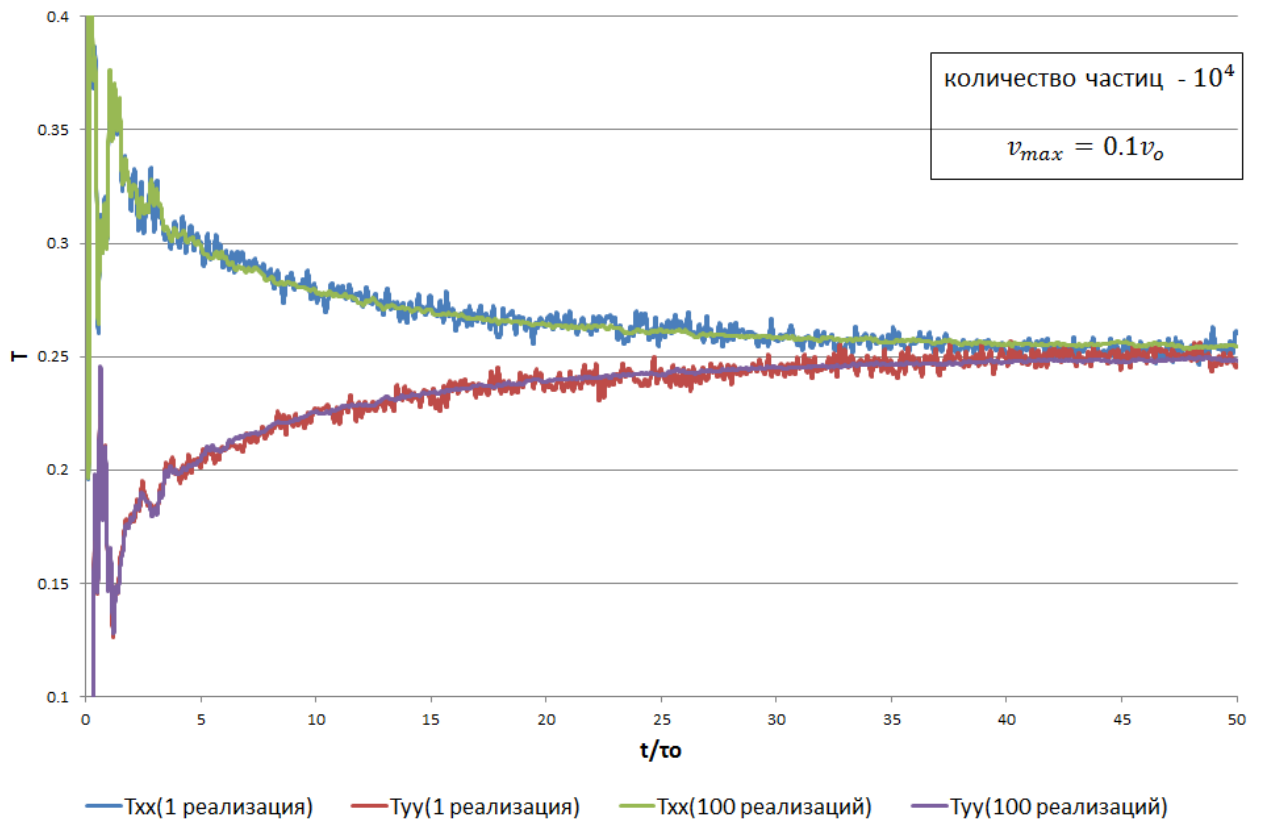


Рисунок 4. Поведение кинетической температуры для 1 и 100 реализаций

Отсюда видно, насколько важно усреднение по реализациям.

3.2 Перераспределение энергии

Далее рассмотрим разность $T_{xx} - T_{yy}$ в пределах $[0 - 0.5]$ по вертикальной оси при тех же самых исходных условиях на интервале $50\tau_0$, 10^4 частиц, $v_{max} = 0.1v_0$ для усреднения по 100 реализациям (рисунок 5).

Во всех остальных расчетах будет также рассматриваться разность $T_{xx} - T_{yy}$.

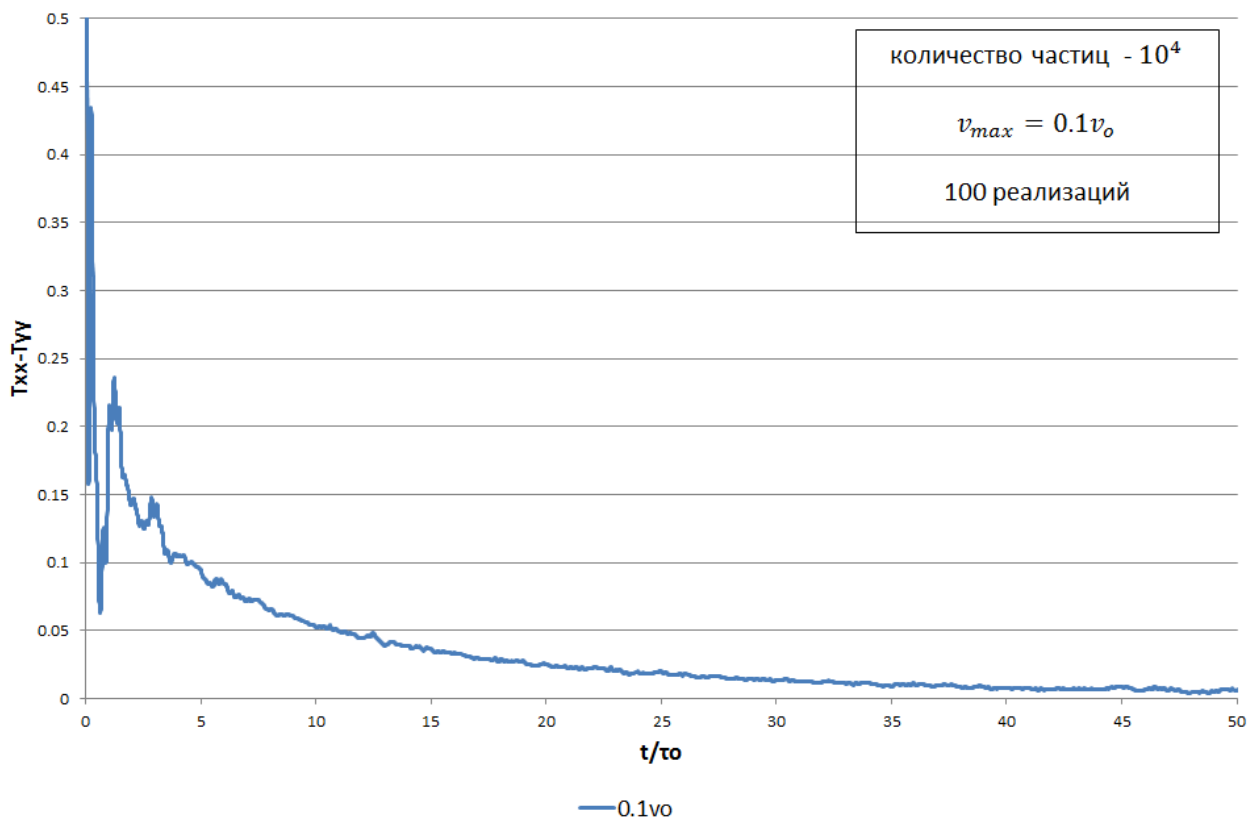


Рисунок 5. График перераспределения кинетической температуры по направлениям

Как уже говорилось ранее, при наличии нелинейности при переходе к стационарному состоянию разность $T_{xx} - T_{yy}$ стремится к нулю, что и подтверждается на этом графике.

3.3 Влияние количества частиц

Далее рассмотрим влияние количества частиц в ячейке периодичности, а также сравним усреднение по реализациям с увеличением количества частиц.

Построим 2 графика на интервале $100\tau_0$, $v_{max} = 0.01v_0$:

- 1) для одного расчета для 10^4 частиц и для одного расчета для 10^6 частиц (рисунок 6);
- 2) для усреднения по 100 расчетам для 10^4 частиц и для одного расчета для 10^6 частиц (рисунок 7).

Также, как и до этого, будем рассматривать диапазон $[0 - 0.5]$ вдоль вертикальной оси.

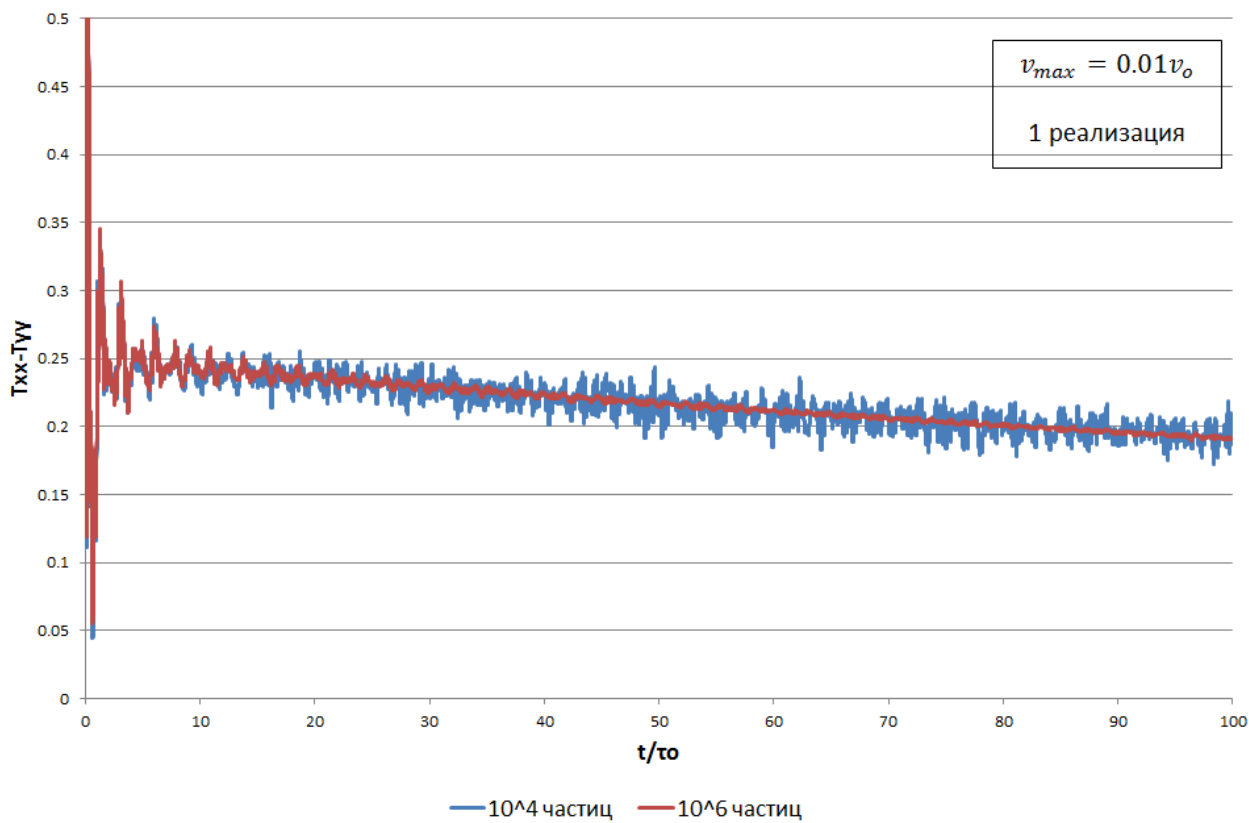


Рисунок 6. Влияние количества частиц

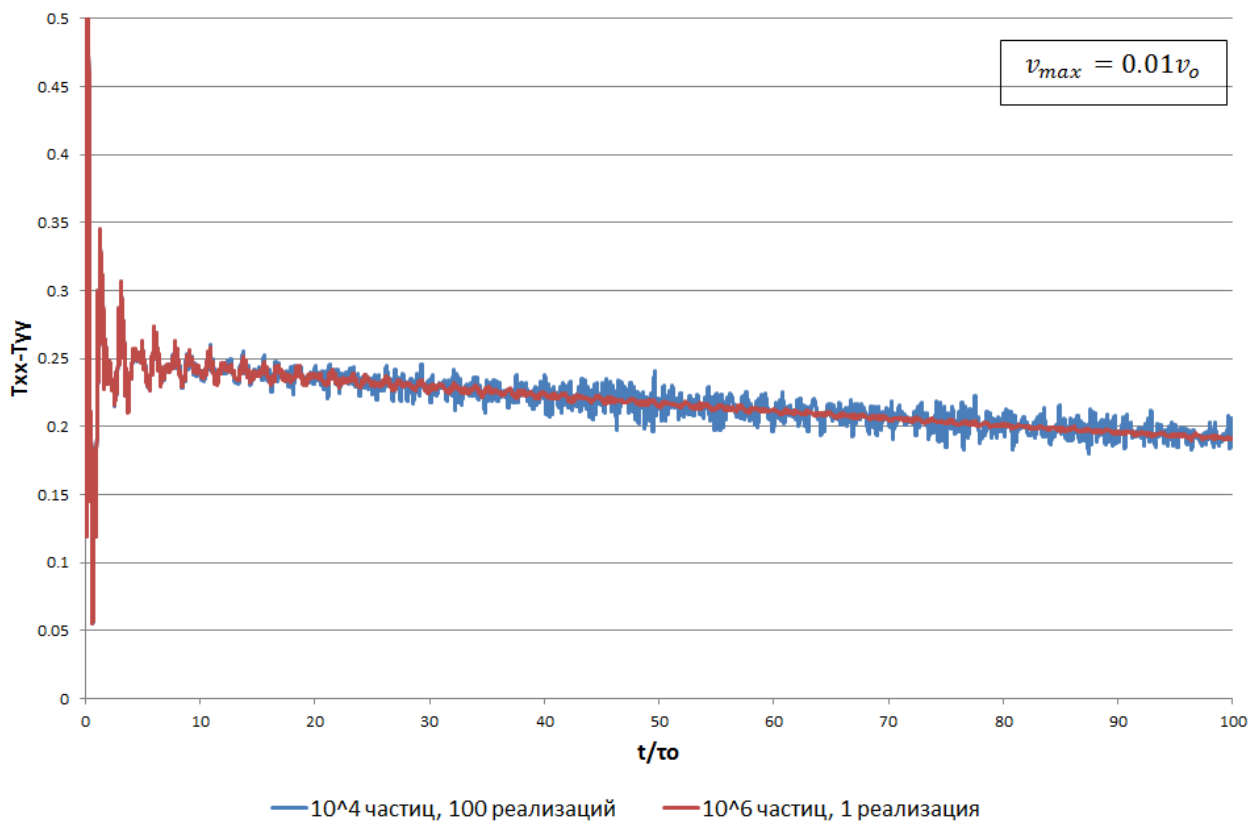


Рисунок 7. Сравнение усреднения по реализациям с увеличением количества частиц

Отталкиваясь от рисунков 6 – 7, можно сделать вывод, что увеличение количества частиц ячейки периодичности в 100 раз гораздо эффективнее, чем усреднение по 100 реализациям.

Все дальнейшие расчеты будут проводиться для ячейки периодичности размером 10^6 частиц и с усреднением по 100 реализациям.

3.4 Степень влияния нелинейности

Далее посмотрим, как, варьируя амплитуду начальных скоростей, а, следовательно, вместе с ней и температуру, можно изменять степень влияния нелинейности на поведение системы. Возьмем для расчетов $10\tau_o$, 10^6 частиц, 100 реализаций и несколько разных v_{max} ($0.01v_o$, $0.0001v_o$, $0.000001v_o$), а по вертикальной оси будем, как и прежде, рассматривать диапазон $[0 - 0.5]$ (рисунок 8).

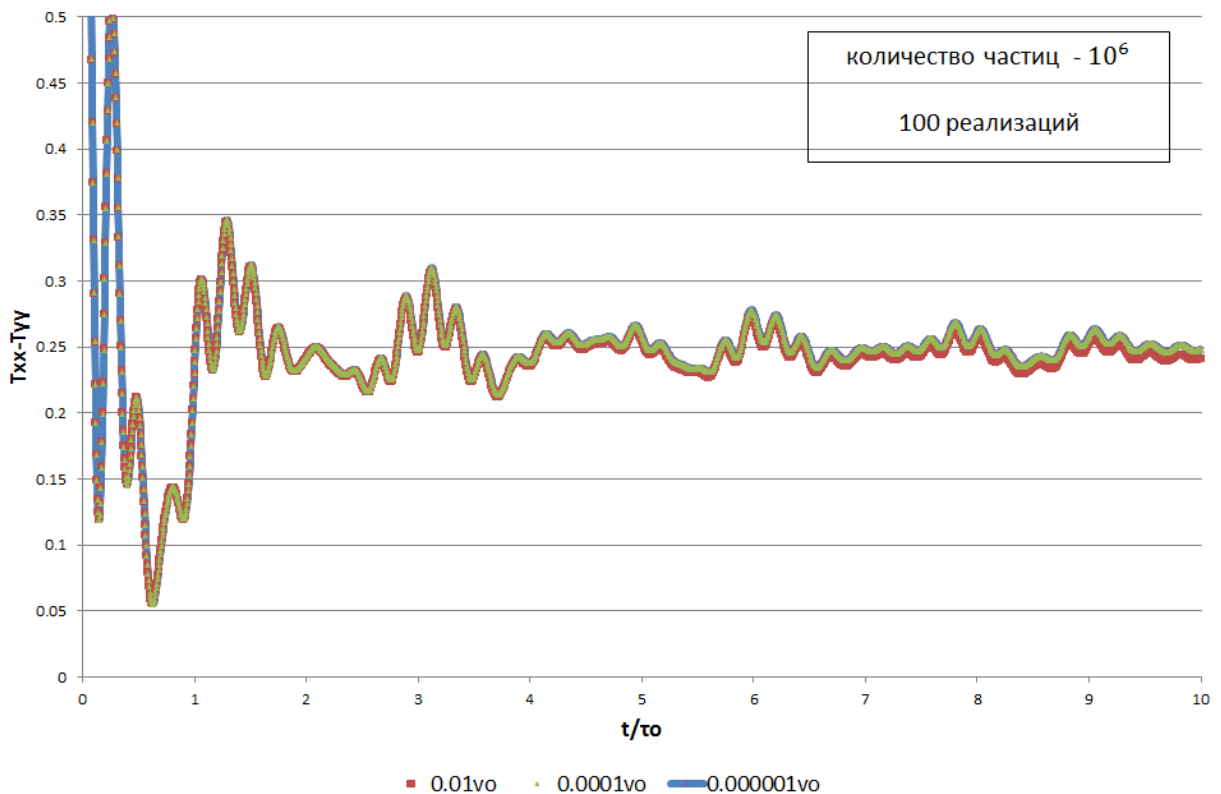


Рисунок 8. Степень влияния нелинейности

Стоит отметить, что при относительно небольших начальных скоростях различие появляется только ближе к концу графика, поэтому стоит рассмотреть больший расчетный период. Рассмотрим расчет при $100\tau_o$, 10^6 частиц, 100 реализаций и несколько разных v_{max} ($0.01v_o$, $0.0001v_o$), а

по вертикальной оси снова будем рассматривать диапазон $[0 - 0.5]$ (рисунок 9).

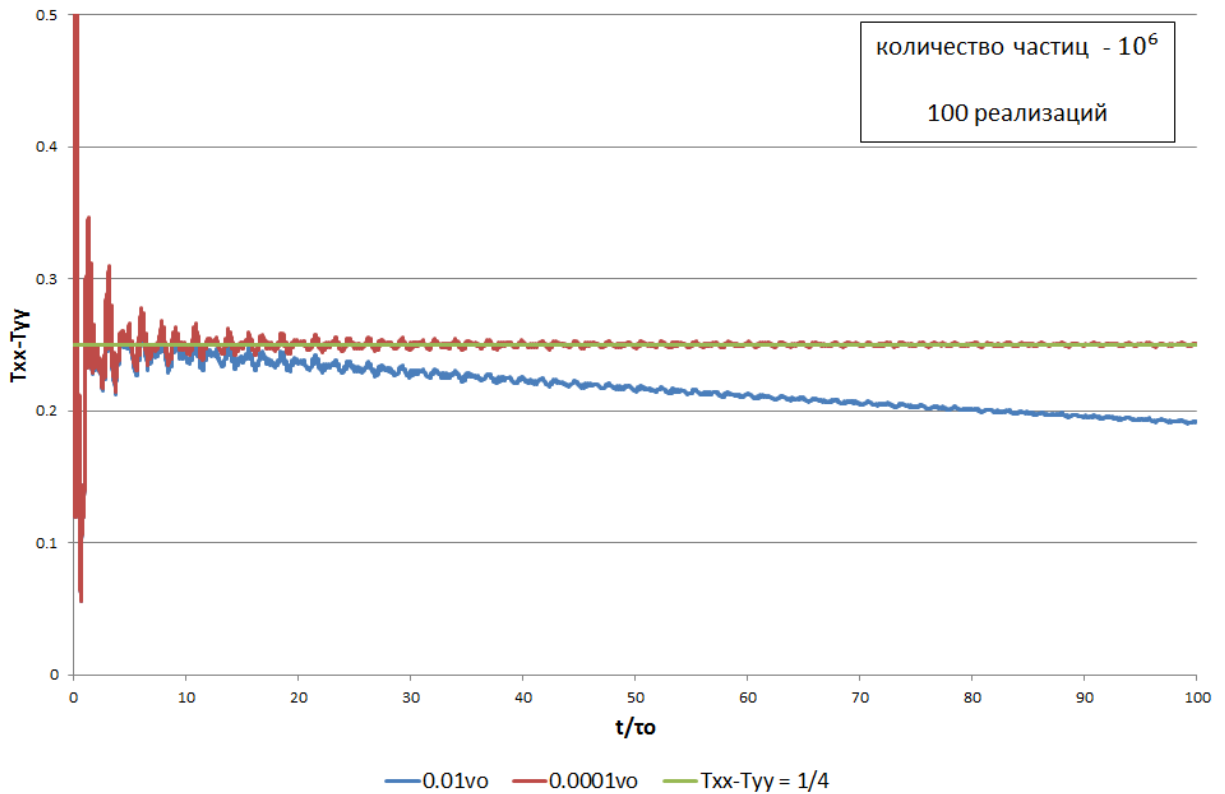


Рисунок 9. Проявление свойств гармонического кристалла

Из рисунка 9 видно, что скорость $0.0001\nu_0$ настолько мала, что переходный тепловой процесс в кристалле Леннард-Джонса с такой скоростью хорошо описывается гармонической моделью и формулой, выведенной в работе [1], при стремлении к стационарному состоянию:

$$\hat{T}_{xx} - \hat{T}_{yy} = \frac{1}{4}(\hat{T}_{xx}^o - \hat{T}_{yy}^o), \quad (13)$$

а при скорости $0.01\nu_0$ разность $T_{xx} - T_{yy}$ уменьшается в 4 раза, после чего достаточно медленно стремится к нулю.

3.5 Сравнение численного решения с аналитическим

Теперь на отрезке $[0 - 5\tau_0]$ сравним численное решение для 10^6 частиц, 100 реализаций, $\nu_{max} = 0.01\nu_0$ с аналитическим решением для гармонического кристалла, полученным выравниванием девиатора в работе [1] (рисунок 10).

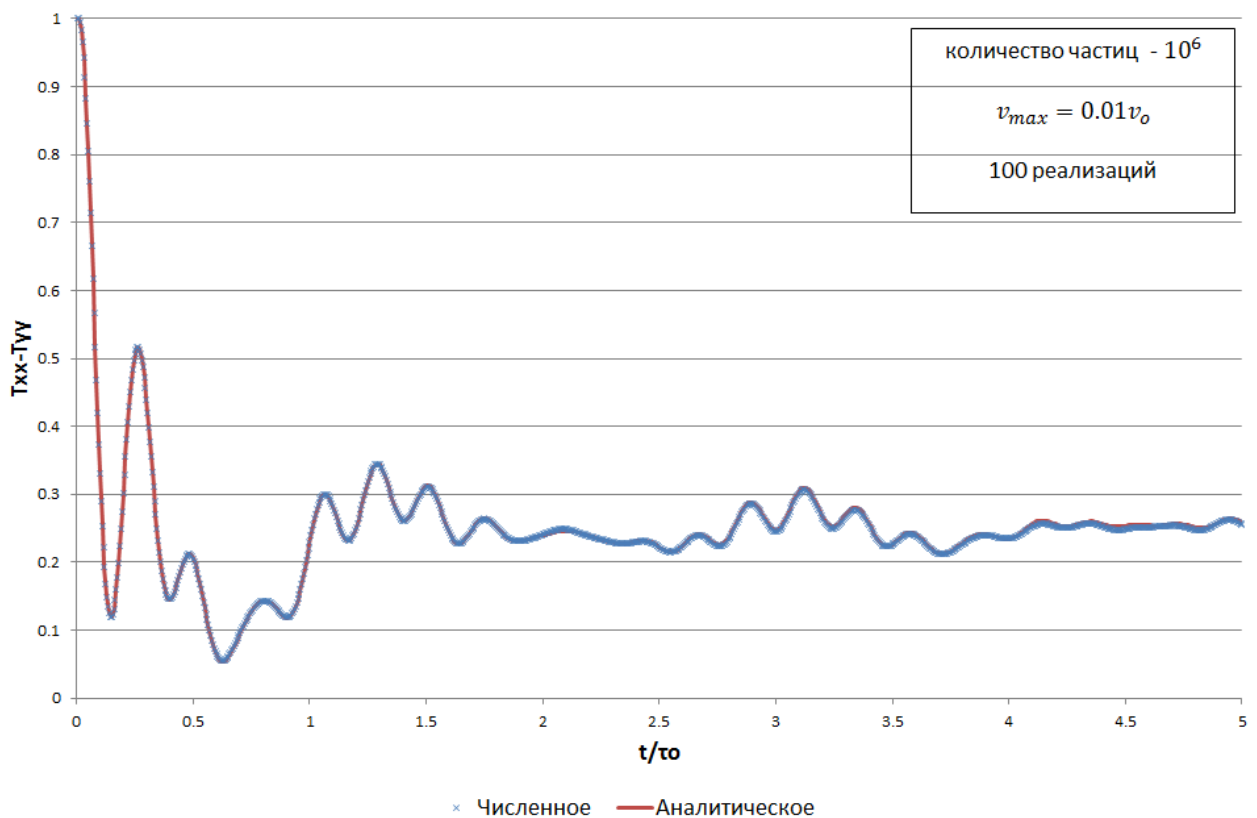


Рисунок 10. Сравнение численного и аналитического решений

Как видно, на малых временах порядка нескольких периодов τ_0 переходные тепловые процессы хорошо описываются гармонической моделью, однако на больших временах добавляется новый процесс, связанный с нелинейностью. Скорость этого процесса зависит от величины самой нелинейности. Далее попробуем определить, каким образом они зависят друг от друга.

3.6 Вывод формулы подобия

Рассмотрим несколько расчетов в диапазоне по вертикальной оси $[0 - 0.5]$, в каждом из которых общим будет $450\tau_0$, 10^6 частиц, 100 реализаций и несколько различных v_{max} :

- 1) $0.01v_0$ и растянутый вдоль горизонтальной оси в 4 раза график для $0.02v_0$ (рисунок 11);
- 2) $0.01v_0$ и растянутый вдоль горизонтальной оси в 9 раз график для $0.03v_0$ (рисунок 12);

3) $0.01v_o$ и растянутый вдоль горизонтальной оси в 16 раз график для $0.04v_o$ (рисунок 13);

4) $0.01v_o$ и растянутый вдоль горизонтальной оси в 25 раз график для $0.05v_o$ (рисунок 14);

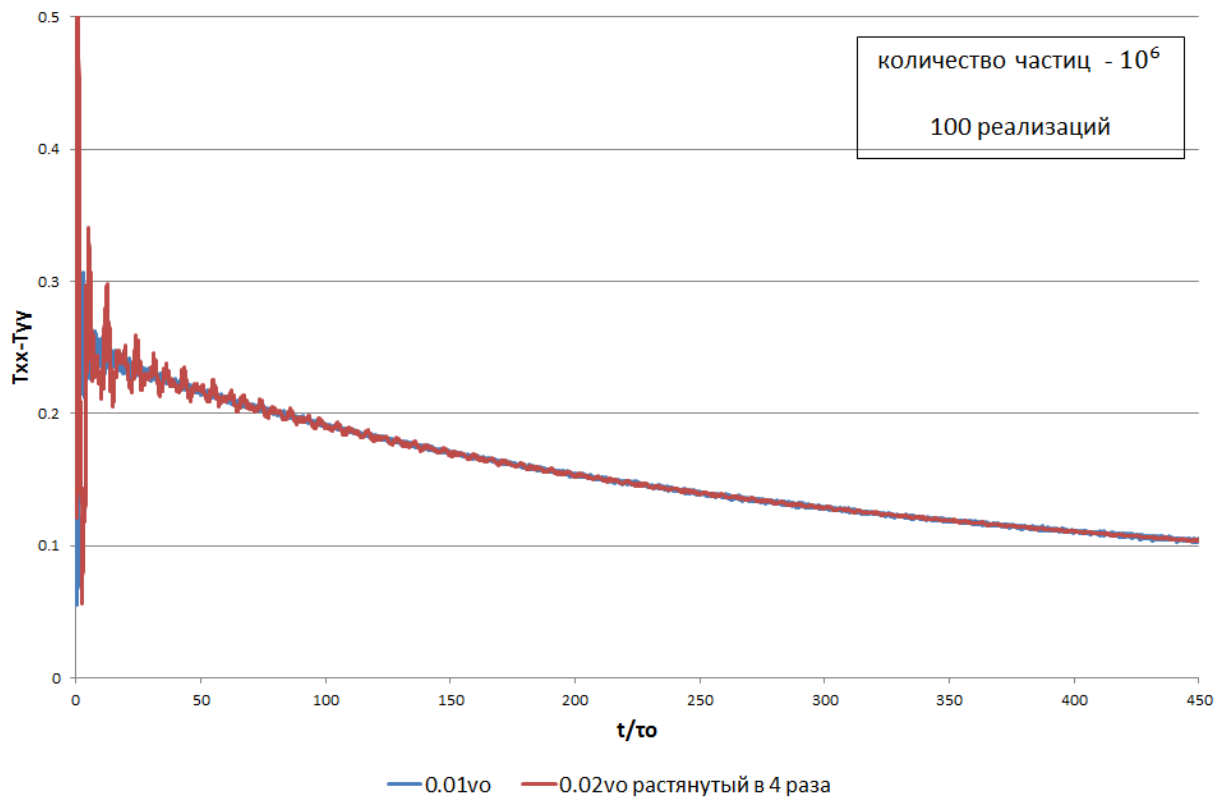


Рисунок 11. $0.01v_o$ и $0.02v_o$

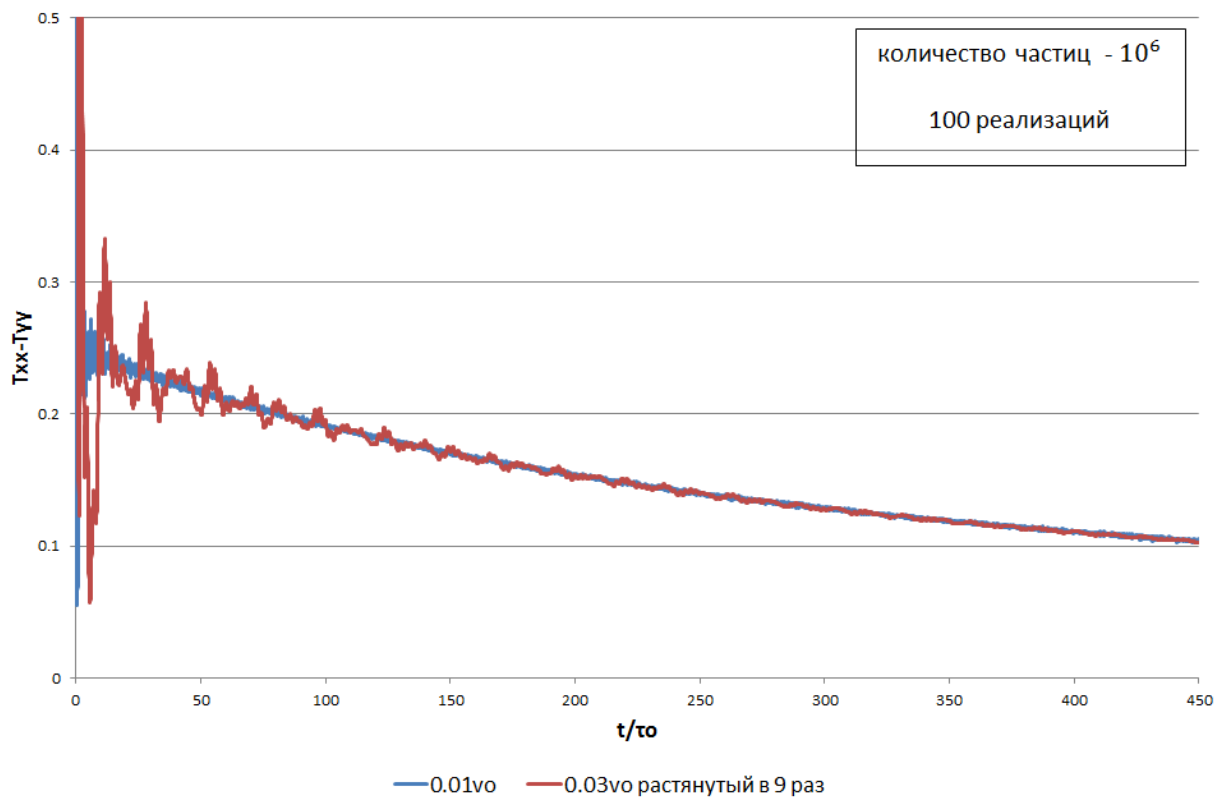


Рисунок 12. $0.01v_0$ и $0.03v_0$

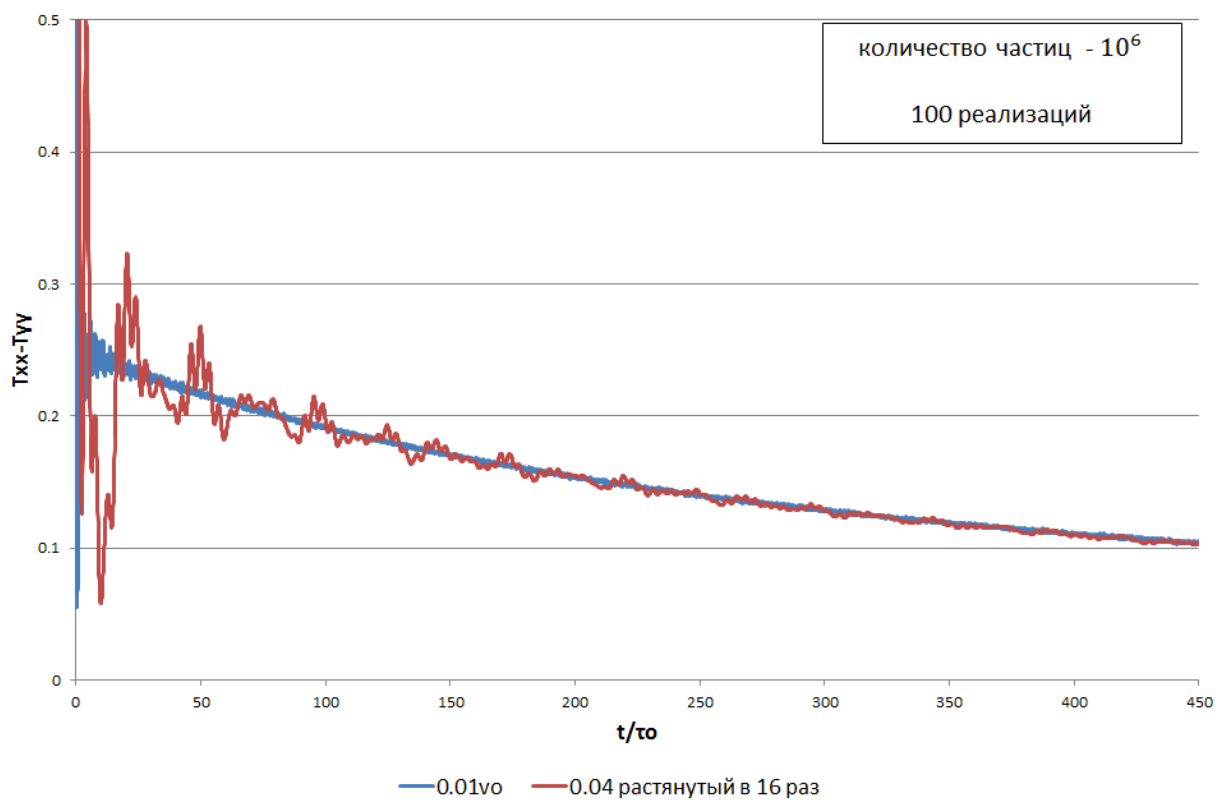


Рисунок 13. $0.01v_0$ и $0.04v_0$

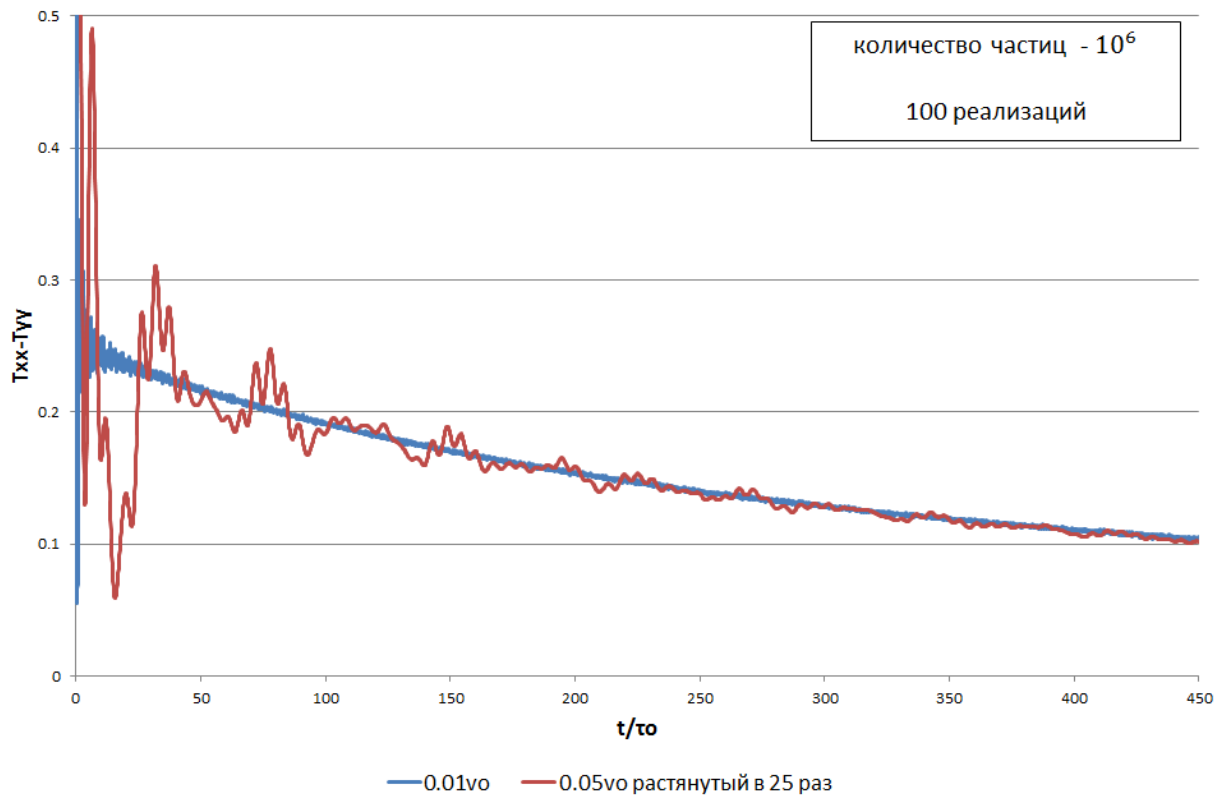


Рисунок 14. $0.01v_0$ и $0.05v_0$

Видно, что спустя некоторое время происходит практически полное совмещение графиков. Оценим это время:

$$t \geq 10\tau_0 \left(\frac{v_{max_2}}{v_{max_1}} \right)^2, \quad (14)$$

где $v_{max_2} > v_{max_1}$.

Таким образом, получаем формулу подобия для различных амплитуд начальных скоростей (15) и из формулы (14) оценку её области применимости (16):

$$\Delta T_1(t) = \Delta T_2 \left(t \cdot \left(\frac{v_{max_2}}{v_{max_1}} \right)^2 \right), \quad (15)$$

$$t \geq 10\tau_0, \quad (16)$$

где за ΔT принята разность $T_{xx} - T_{yy}$. С помощью полученной формулы (15) можно быстрее производить расчеты, оценив и увеличив начальную скорость, тем самым уменьшив необходимое время на расчет.

3.7 Выделение медленного процесса, связанного с нелинейностью

Так как малая нелинейность приводит к тому, что на быстрые процессы накладывается медленный процесс, вызванный нелинейностью, попробуем выделить этот медленный процесс.

Для удобства будем рассматривать временной интервал в $100\tau_o$, а начальную скорость по выведенной ранее формуле (15) подберем так, чтобы ΔT было как можно ближе к нулю. Поэтому пусть значение ΔT_1 для $v_{max_1} = 0.01v_o$ на шаге $t_1 = 450\tau_o$ будет совпадать со значением ΔT_2 на шаге $t_2 = 10\tau_o$, тогда по формуле (15) получим значение искомой скорости:

$$t_1 = t_2 * \left(\frac{v_{max_2}}{v_{max_1}}\right)^2 \rightarrow v_{max_2} = v_{max_1} * \sqrt{\frac{t_1}{t_2}} = 0.01v_o * \sqrt{45} \approx 0.07v_o \quad (17)$$

Построим график для $100\tau_o$, 10^6 частиц, 100 реализаций и $v_{max} = 0.07v_o$, рассмотрим диапазон $[0 - 0.5]$ вдоль вертикальной оси (рисунок 15).

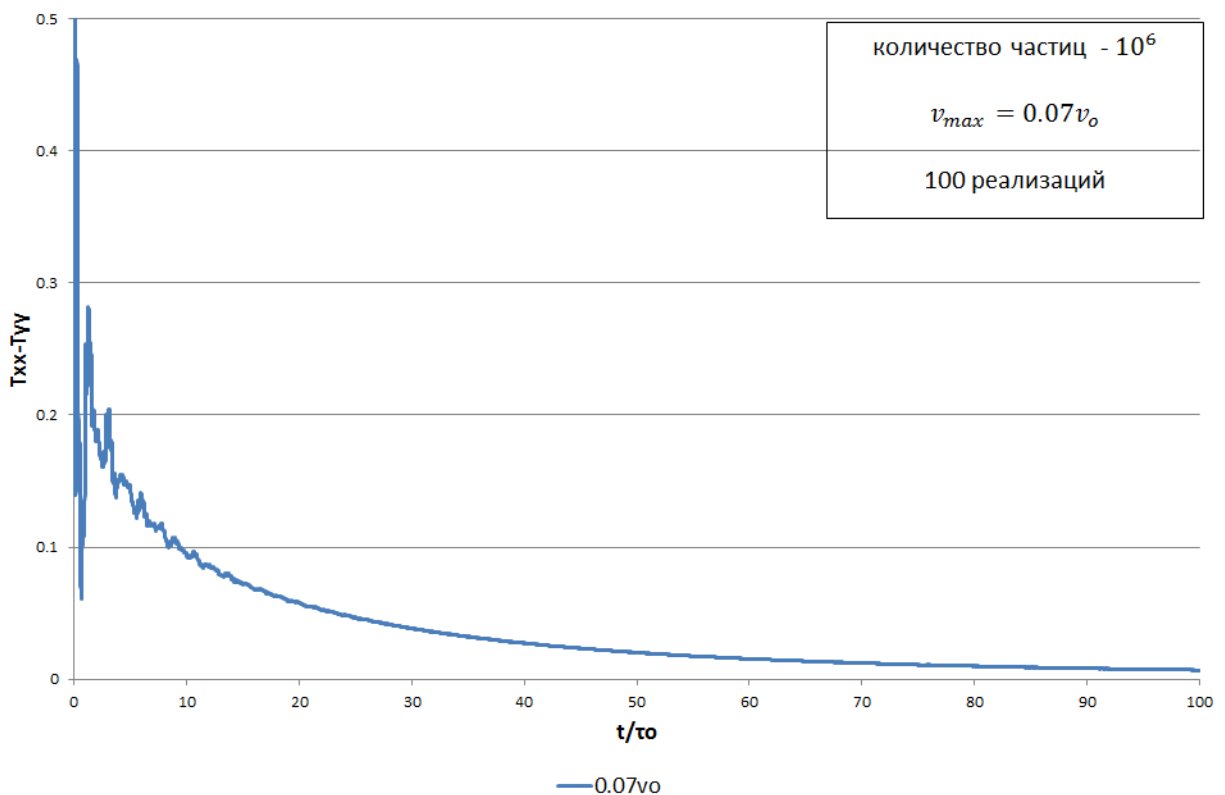


Рисунок 15. $0.07v_o$

Выдвинем предположение, что быстрый процесс, на который наложилась нелинейность, является произведением быстрого процесса и чисто медленного:

$$\Delta T_{fast\&slow} = \Delta T_{fast} * \Delta T_{slow}, \quad (18)$$

$$\begin{array}{ccc} \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ 0 & 1/4 & 0 \end{array}$$

Так как $\Delta T_{fast\&slow}$ стремится к нулю, а ΔT_{fast} – к $1/4$, тогда ΔT_{slow} должно быть равно либо нулю в случае произведения, либо $-1/4$ в случае суммы, что не физично.

$\Delta T_{fast\&slow}$ – быстрый процесс, на который наложилась нелинейность, ΔT_{fast} – быстрый процесс, ΔT_{slow} – медленный процесс, вызванный нелинейностью.

Далее на промежутке в $100\tau_0$ построим ΔT_{slow} (рисунок 16), где за $\Delta T_{fast\&slow}$ возьмем полученный ранее результат для 10^6 частиц, 100 реализаций и $v_{max} = 0.07v_0$, а за ΔT_{fast} примем результат для 10^6 частиц, 100 реализаций и $v_{max} = 0.0001v_0$, так как в нем скорость мала, что переходный тепловой процесс хорошо описывается гармонической моделью без влияния медленного процесса.

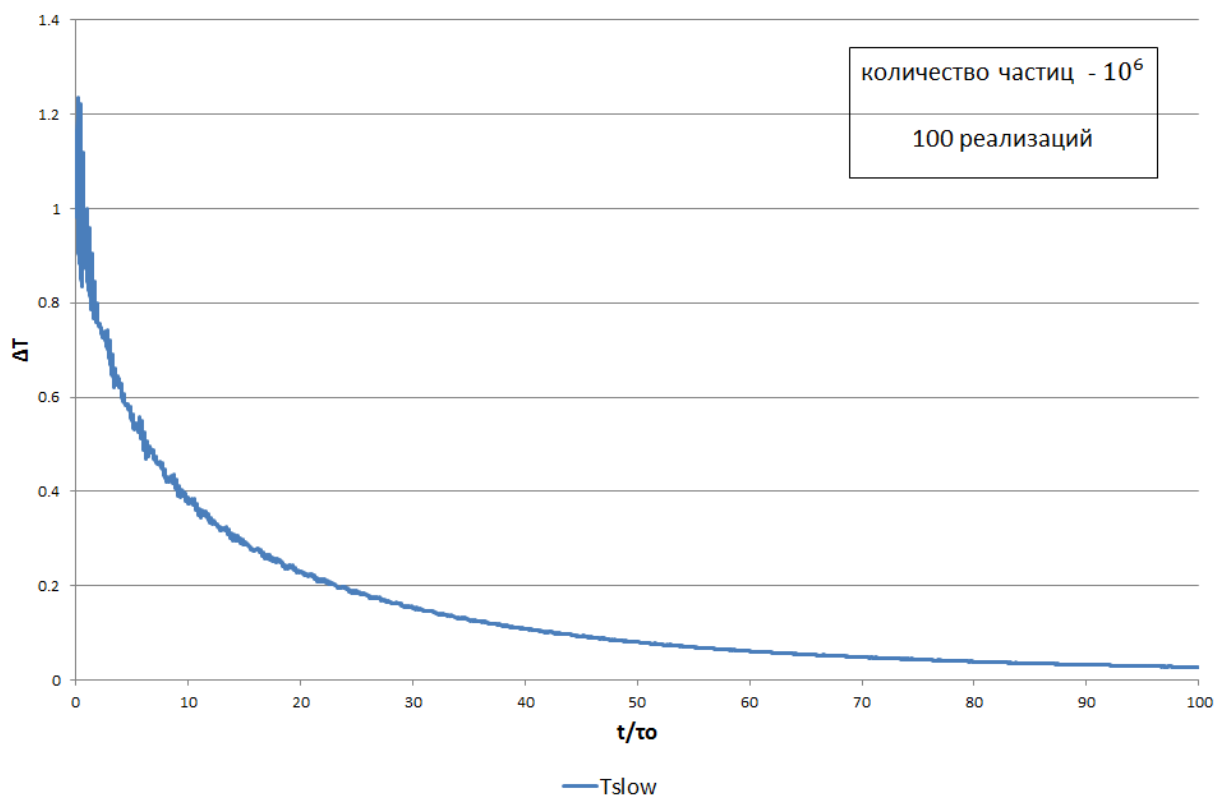


Рисунок 16. График для чисто медленного процесса

3.7.1 Определение формы графика медленного процесса

А теперь попробуем определить форму этого графика. Проверим несколько видов функций, где a и b – некоторые константы. Строить будем на интервале $[10\tau_o - 100\tau_o]$, так как в порядке первых $10\tau_o$ происходит выравнивание кинетической и потенциальной энергий [1], что нас не интересует.

3.7.1.1 Проверка экспоненты

Во-первых, рассмотрим экспоненту`

$$\Delta T_{slow} = e^{a \frac{t}{\tau_o}}, \quad (19)$$

тогда, взяв натуральный логарифм

$$\ln \Delta T_{slow} = \ln e^{a \frac{t}{\tau_o}} = a \frac{t}{\tau_o} \quad (20)$$

и построив в линейно-логарифмических осях, должны получить прямую линию (рисунок 17).

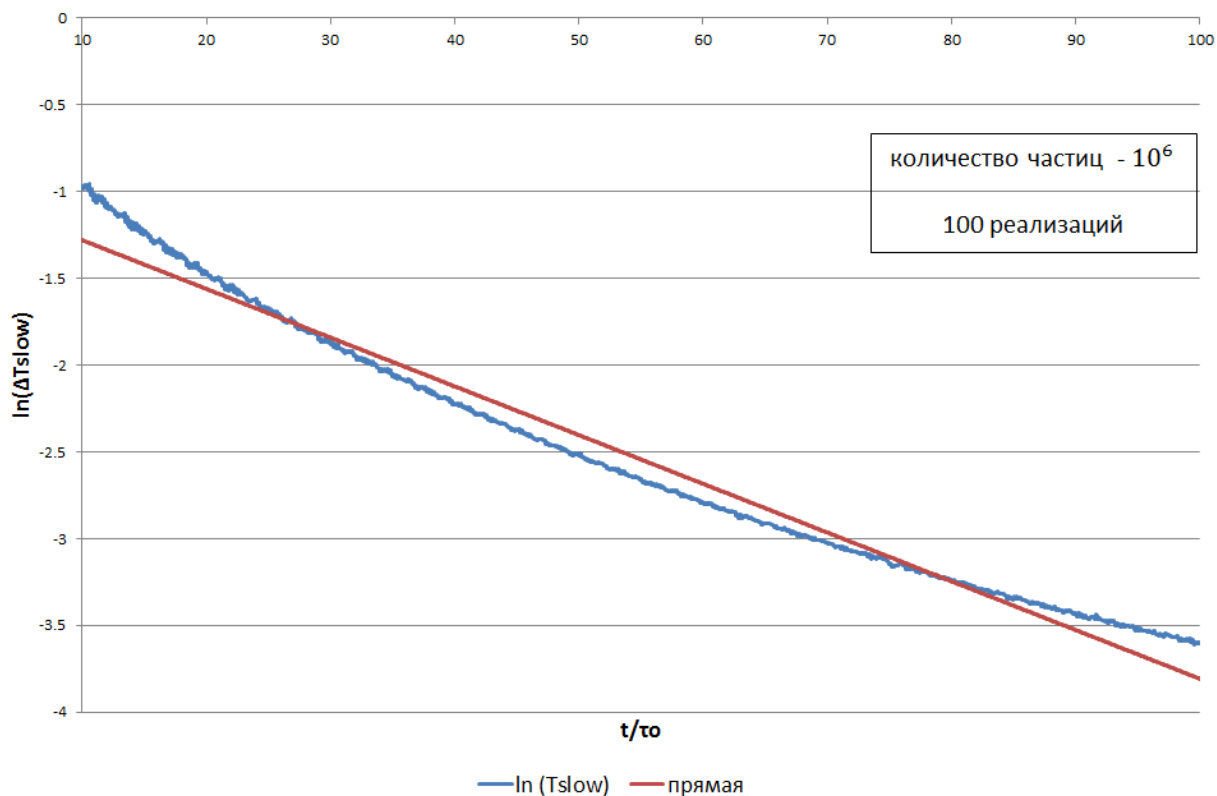


Рисунок 17. Проверка экспоненты

Как видно из рисунка 17, прямая не получается.

3.7.1.2 Проверка степенной функции

Далее рассмотрим степенную функцию

$$\Delta T_{slow} = \left(\frac{t}{\tau_0}\right)^a. \quad (21)$$

Тогда, взяв натуральный логарифм и построив в логарифмических осях, должна получиться прямая (рисунок 18).

$$\ln \Delta T_{slow} = \ln \left(\left(\frac{t}{\tau_0}\right)^a \right) = a \ln \left(\frac{t}{\tau_0}\right) \quad (22)$$

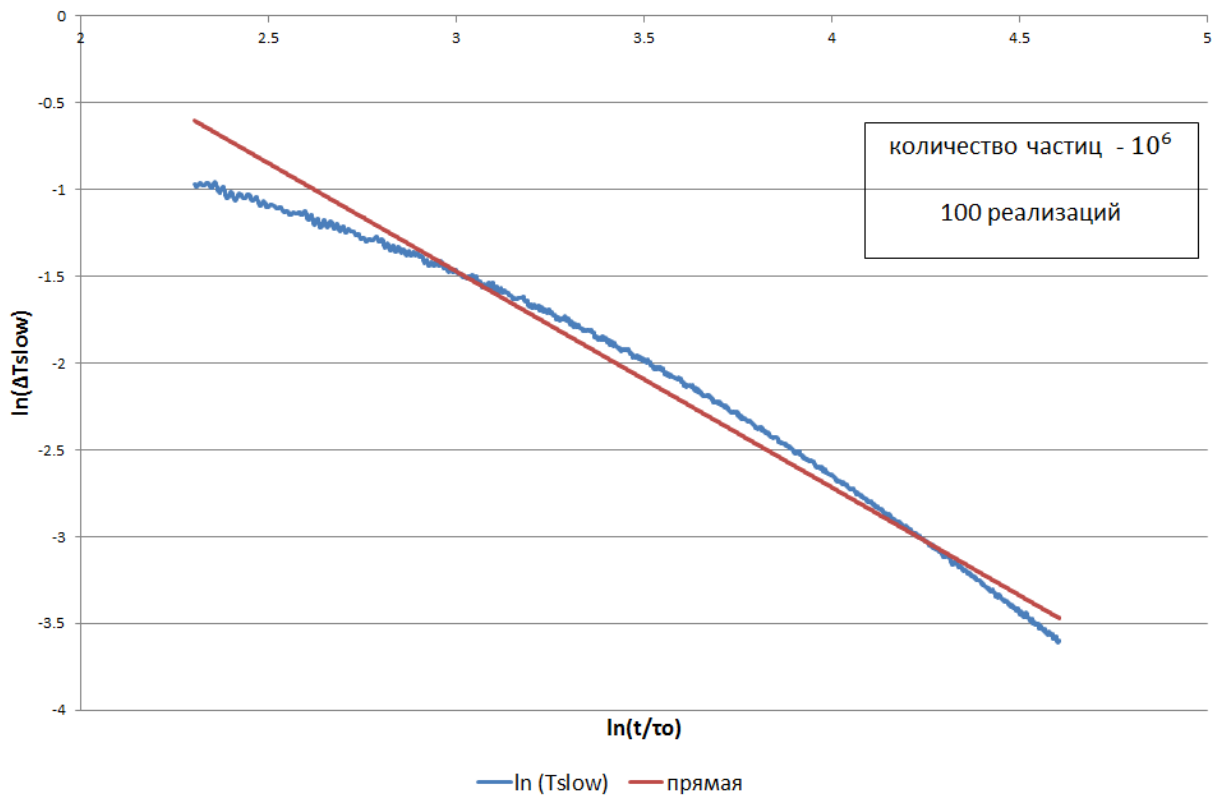


Рисунок 18. Проверка степенной функции

Таким образом, получается, что степенная функция не подходит.

3.7.1.3 Проверка функции вида $\frac{1}{1+a\left(\frac{t}{\tau_0}\right)^b}$

Далее рассмотрим функцию вида:

$$\Delta T_{slow} = \frac{1}{1+a\left(\frac{t}{\tau_0}\right)^b} \quad (23)$$

Если же выражение (23) верно, тогда:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta T_{slow}} &= 1 + a \left(\frac{t}{\tau_0}\right)^b \rightarrow \\ \rightarrow \ln \left(\frac{1}{\Delta T_{slow}} - 1\right) &= \ln a + b \ln \frac{t}{\tau_0} \end{aligned} \quad (24)$$

Уравнение свелось к линейному. Построив его, должны получить прямую (рисунок 19).

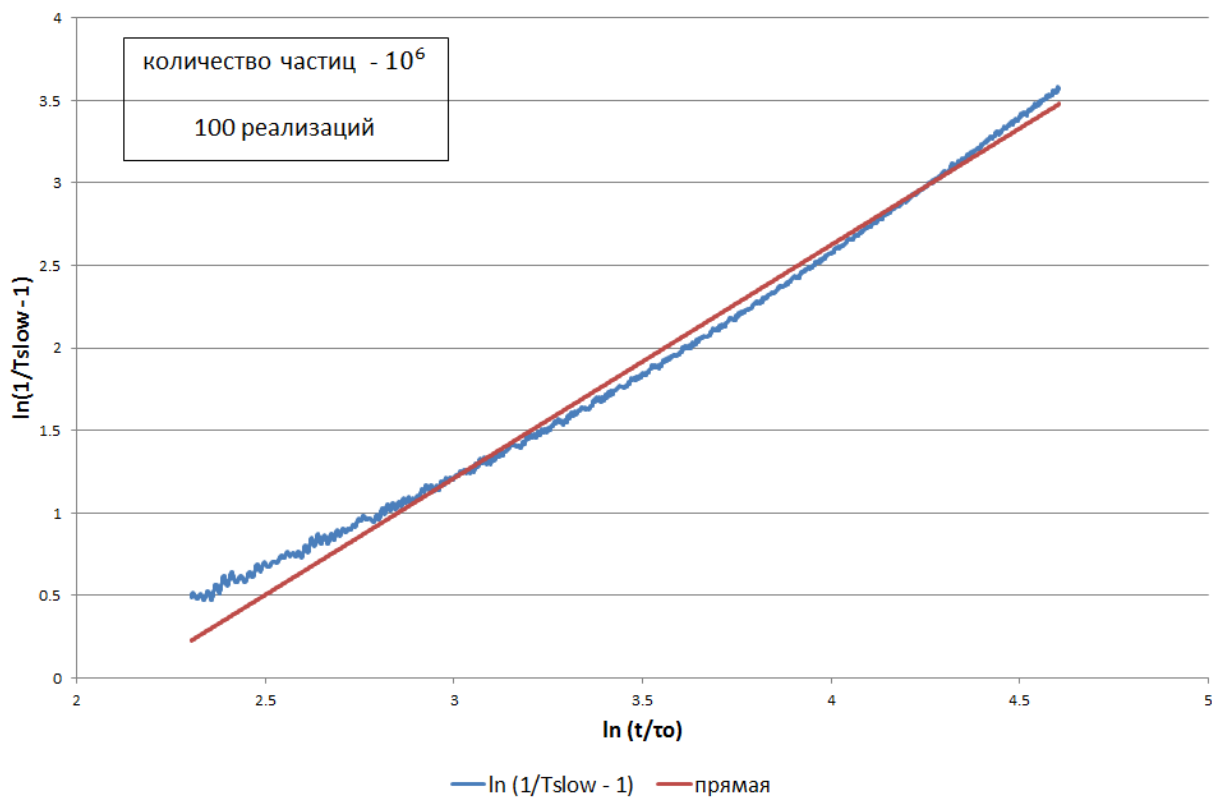


Рисунок 19. Проверка функции вида $\frac{1}{1+a\left(\frac{t}{\tau_0}\right)^b}$

Таким образом, функция вида $\frac{1}{1+a\left(\frac{t}{\tau_0}\right)^b}$ тоже не подходит.

В результате получаем, что выделенный нами медленный процесс не описывается экспонентой, степенной функцией и функцией вида $\frac{1}{1+a\left(\frac{t}{\tau_0}\right)^b}$

4. Заключение

В работе было проведено моделирование перераспределения кинетической энергии по пространственным направлениям в негармонических кристаллах с треугольной кристаллической решеткой и показано следующее:

- 1) рассмотрен процесс выравнивания температур, рассмотрено влияние количества частиц и влияние усреднения по реализациям на результаты, рассмотрена степень влияния нелинейности на поведение системы;
- 2) Экспериментально показано, что на малых временах порядка нескольких периодов осцилляции τ_0 переходные тепловые процессы хорошо описываются гармонической моделью, однако на больших временах добавляется новый процесс, связанный с нелинейностью;
- 3) Выведена формула подобия для различных амплитуд начальных скоростей и оценена область ее применимости;
- 4) Выделен медленный процесс, вызванный нелинейностью, и осуществлена попытка определить его форму, в результате которой было показано, что медленный процесс не описывается экспонентой, степенной

функцией или функцией вида $\frac{1}{1+a\left(\frac{t}{\tau_0}\right)^b}$.

Автор благодарен Е. Б. Старобинскому за полезные обсуждения.

Список литературы

1. В. А. Кузькин, А. М. Кривцов. (2016). Аналитическое описание переходных тепловых процессов в гармонических кристаллах. Физика твердого тела, том 59, вып.5, 1023-1034.
2. А. М. Прохоров. (1988). Физическая энциклопедия. В 5-ти томах. Издательство: Советская энциклопедия.
3. А. М. Кривцов. (2009). Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов. Санкт-Петербург. Издательство Политехнического университета.
4. А. М. Кривцов, Н. В. Кривцова. (2002). Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела. Дальневосточный математический журнал ДВО РАН, т.3, №2, 254-276.
5. А. М. Kosevich. (2005). The crystal lattice: Phonons, Solitons, Dislocations, Superlattices, 2nd, Revised and Updated Edition.
6. Р. Курант, К. Фридрихс, Г. Леви. (1941). О разностных уравнениях математической физики. УИН, выпуск 8, 125-160.
7. J. M. Haile. (1992). Molecular dynamics simulation. Wiley.