

УДК 539.21; 519.62

О ДИНАМИЧЕСКОМ ХАОСЕ ФАЗОВЫХ ТРАЕКТОРИЙ СИСТЕМЫ АТОМОВ КРИСТАЛЛА

В.Я. Рудяк^{1,2}, А.А. Белкин¹

¹Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет
(Сибстрин)

²Новосибирский государственный университет

В статье методом молекулярной динамики изучена устойчивость фазовых траекторий ионов кристалла NaCl относительно возмущения начальных данных. Показано, что имеет место локальная неустойчивость возмущений фазовых траекторий системы и в конфигурационном пространстве, и в пространстве скоростей. На начальной стадии малые возмущения растут экспоненциально, инкременты роста в том и другом случае одинаковы, они зависят от структуры кристалла и его температуры. С увеличением температуры инкременты роста увеличиваются. Далее рост возмущений замедляется, и они достигают «платового» значения, характерный размер которого в конфигурационном пространстве сопоставим с размером области локализации иона, а в пространстве скоростей – с его максимальной скоростью. Кроме того, установлено, что автокорреляционная функция скоростей всех ионов затухает до нуля, т. е. в системе помимо локальной неустойчивости фазовых траекторий наблюдается их перемешивание. Таким образом, в системе атомов кристаллического вещества имеет место динамический хаос.

Ключевые слова: фазовая траектория, локальная неустойчивость, перемешивание, динамический хаос, кристалл, молекулярная динамика.

DOI: 10.17212/1727-2769-2020-1-2-7-16

Введение

Метод молекулярной динамики (МД) сегодня является мощным средством моделирования самых разных физических явлений (см. [1] и цитируемую там литературу). Он с успехом используется при решении различных задач химии, биологии, медицины. Идея этого метода, сформулированная для частного случая еще в [2, 3], чрезвычайно проста и сводится к решению уравнений Ньютона (если моделируются классические системы), описывающих динамику рассматриваемой молекулярной системы. В результате получаются фазовые переменные (координаты и скорости) всех молекул системы в последовательные моменты времени. Используя затем методы неравновесной статистической механики, с помощью этой информации можно рассчитать все наблюдаемые характеристики системы (плотность, давление, температуру, коэффициенты переноса и т. п.).

Поскольку при использовании метода МД речь практически всегда идет об изучении динамики большого числа частиц, то ясно, что численное решение большого числа уравнений приводит к систематическим ошибкам. Это ошибки, связанные с округлением чисел, конечным размером ячейки моделирования, конечным числом используемых частиц, схемами интегрирования уравнений Ньютона. В результате для газов и жидкостей было установлено, что при моделировании методом МД имеет место локальная неустойчивость фазовых траекторий и

Исследование выполнено при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 19-01-00399, 20-01-00041

перемешивание [4–6]. Нередко высказывается мнение, что связано это лишь с неточностью решения системы уравнений Ньютона (см., например, [7]). И если разработать некоторый метод коррекции решения этих уравнений на каждом шаге, то получаемые фазовые траектории окажутся истинными. Это, конечно, заблуждение. Истинных траекторий нельзя получить даже для системы твердых сфер, где уравнений Ньютона вообще не приходится решать [8, 9]. Адекватные результаты МД моделирования свойств газов и жидкостей получаются лишь в результате усреднения полученных данных по большому числу независимых фазовых траекторий. Стоит заметить, что такой способ получения наблюдаемых величин является типичным и для физического эксперимента.

Наличие неустойчивости фазовых траекторий в неупорядоченных системах (газах и жидкостях) представляется достаточно естественным. Однако на практике метод МД широко применяется и для моделирования вполне упорядоченных систем: твердого тела, кристаллов и т.п. Атомы в таких системах локализованы вблизи их положения равновесия. И при МД моделировании их динамики нередко авторы не проводят усреднение полученных данных по независимым фазовым траекториям, считая, что получаемые в расчете фазовые траектории устойчивы. Насколько такой подход обоснован? Цель данной работы и состоит в изучении устойчивости фазовых траекторий атомов кристалла к начальным возмущениям.

1. Постановка задачи

Устойчивость фазовых траекторий в данной работе изучается на примере кристалла поваренной соли NaCl . Решетка этого кристалла состоит из положительных ионов натрия (малые шарики на рис. 1) и отрицательных ионов хлора. Ионы каждого типа двигаются вблизи своих положений равновесия – узлов кубической гранецентрированной решетки. Шаг этой решетки (расстояние между соседними ионами разного типа) $a = 0,564$ нм.

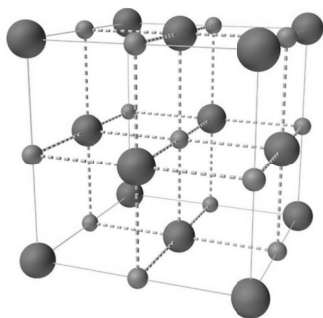


Рис. 1 – Структура кристаллической решетки хлорида натрия. Характерные размеры ионов для наглядности уменьшены

Fig. 1 – Structure of the sodium chloride crystal lattice. Characteristic ion sizes are reduced for clarity

Для МД моделирования динамики данной системы нужно задать потенциал взаимодействия между ионами. В настоящей работе использовался вариант широко распространенного потенциала погруженного атома [10] – потенциал погруженного иона (embedded ion model, EIM) [11]. В нем взаимодействие описывается двумя составляющими, одна из которых определяет парное взаимодействие двух ионов, вторая – коллективное взаимодействие иона с остальными, задаваемое так называемой функцией погружения. Потенциал EIM является многопараметрическим. МД моделирование выполнялось с помощью пакета LAMMPS, одним из достоинств которого является большое количество встроенных потенциалов взаимодействия, в том числе и набор потенциалов взаимодействия хлорида натрия [10, 11].

В начальный момент времени ионы в количестве $N = 2000$ размещались в ячейке моделирования кубической формы строго в узлах кристаллической решетки. По требуемой температуре им случайным образом задавались начальные скорости, скорость центра масс системы при этом равнялась нулю. Для моделирования объемных свойств кристалла использовались периодические граничные условия.

Динамика ионов рассматриваемого кристалла описывается системой уравнений Ньютона

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \quad \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (1)$$

где m_i , \mathbf{r}_i , \mathbf{v}_i – масса, радиус-вектор и вектор скорости i -го иона; \mathbf{F}_i – действующая на него равнодействующая сила. В результате решения уравнений (1) в последовательные моменты времени находится полный набор динамических переменных системы:

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_1(t), \mathbf{x}_2(t), \dots, \mathbf{x}_N(t) = \mathbf{r}_1(t), \mathbf{v}_1(t), \dots, \mathbf{r}_N(t), \mathbf{v}_N(t). \quad (2)$$

Постановка задачи устойчивости относительно изменения начальных условий сводится к изучению эволюции векторов (2) для двух различных начальных условий. Итак, пусть заданы начальные условия

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0, \quad (3)$$

и

$$\tilde{\mathbf{x}}(t_0) = \tilde{\mathbf{x}}_0 = \mathbf{x}_0 + \delta. \quad (4)$$

Решая уравнения (1) при начальных условиях (3) и (4), получим две фазовые траектории $\mathbf{x}(t)$ и $\tilde{\mathbf{x}}(t)$. Будем дальше считать, что начальное возмущение δ мало. Тогда фазовая траектория $\mathbf{x}(t)$ называется устойчивой по Ляпунову, если для любых t_0 и $\varepsilon > 0$ существует зависящая от t_0 и ε , но не зависящая от времени t величина δ , такая, что для всех $t > t_0$ выполняется условие

$$\lambda = |\tilde{\mathbf{x}}(t) - \mathbf{x}(t)| < \varepsilon. \quad (5)$$

Таким образом, изучение устойчивости фазовых траекторий требует систематического вычисления эволюции функции λ . Вообще говоря, можно изучать устойчивость фазовых траекторий отдельно в физическом пространстве $\lambda_r = |\tilde{\mathbf{r}}(t) - \mathbf{r}(t)|$ и в пространстве скоростей $\lambda_v = |\tilde{\mathbf{v}}(t) - \mathbf{v}(t)|$, где $\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_1(t), \dots, \mathbf{r}_N(t)$, $\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_1(t), \dots, \mathbf{v}_N(t)$. Эти функции в расчетах определяются соотношениями:

$$\lambda_r = \frac{1}{aN} \left(\sum_{\alpha=x,y,z} \sum_{i=1}^N |\tilde{\mathbf{r}}_{i\alpha}(t) - \mathbf{r}_{i\alpha}(t)|^2 \right)^{1/2}; \quad (6a)$$

$$\lambda_v = \frac{1}{cN} \left(\sum_{\alpha=x,y,z} \sum_{i=1}^N |\tilde{\mathbf{v}}_{i\alpha}(t) - \mathbf{v}_{i\alpha}(t)|^2 \right)^{1/2}. \quad (6b)$$

Здесь c – среднеквадратичная скорость, a – начальное расстояние между соседними ионами. Шаг интегрирования уравнений движения (1) в МД моделировании равнялся одной фемтосекунде.

3. Локальная неустойчивость и перемешивание

На рис. 2 приведен фрагмент полученной в результате моделирования пространственной конфигурации ионов хлорида натрия и их траектории. Температура равна 300 К. Траектории строились в последовательные моменты времени $t_k = t_0 + \Delta t$ с достаточно большим шагом Δt , сопоставимым с временем взаимодействия пары ионов. Несмотря на то что эти траектории напоминают траектории броуновских частиц, ионы локализованы в областях вблизи узлов кристаллической решетки. «Броуновский» характер траекторий каждого из ионов обусловлен его коллективным взаимодействием с окружающими соседями и нестационарностью этого взаимодействия.

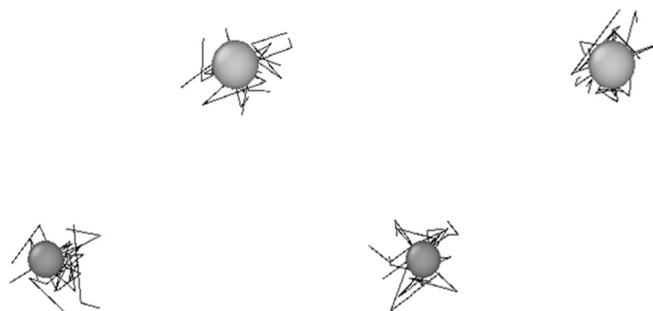


Рис. 2 – Траектории ионов натрия (малые шарики) и хлора

Fig. 2 – Trajectories of sodium ions (small balls) and chlorine

Как уже отмечалось, характер устойчивости фазовых траекторий в конфигурационном пространстве определяется эволюцией среднеквадратичного расстояния двух траекторий (6а) для ионов натрия. Эта эволюция для двух температур представлена на рис. 3, а. Здесь круглые и квадратные метки соответствуют температурам 350 и 300 К соответственно, а сплошная линия – аппроксимация функции (6а) экспонентой. Разница в массах ионов натрия и хлора невелика, поэтому график функция (6а) для ионов хлора выглядит практически так же. На начальном этапе эволюции имеет место экспоненциальный рост возмущений. Это означает, что в системе реализуется локальная неустойчивость.

Наличие неустойчивости фазовых траекторий относительно возмущений начальных данных имеет универсальный характер. Поэтому такая неустойчивость имеет место не только в конфигурационном пространстве, но и в пространстве скоростей системы. Зависимость среднеквадратичного отклонения (6б) от времени, описывающего неустойчивость в пространстве скоростей, представлена на рис. 3, б. Здесь эта функция нормирована на среднеквадратичную скорость ионов при температуре 300 К. Сплошная линия – снова аппроксимация функции (6б) экспонентой. Таким образом, и здесь на начальном участке имеет место локальная неустойчивость.

Инкременты роста возмущений, т. е. показатель экспоненты γ , как координат, так и скоростей практически одинаковы, отличия не превышают погрешности моделирования. При температуре 300 К $\gamma = 1,52 \pm 0,06$ (1/псек). Это значение определяется как структурными свойствами кристалла (средним расстоянием и законом взаимодействия между ионами), так и температурой. Естественно, с ростом температуры все процессы в системе будут ускоряться, инкременты роста возмущений увеличатся.

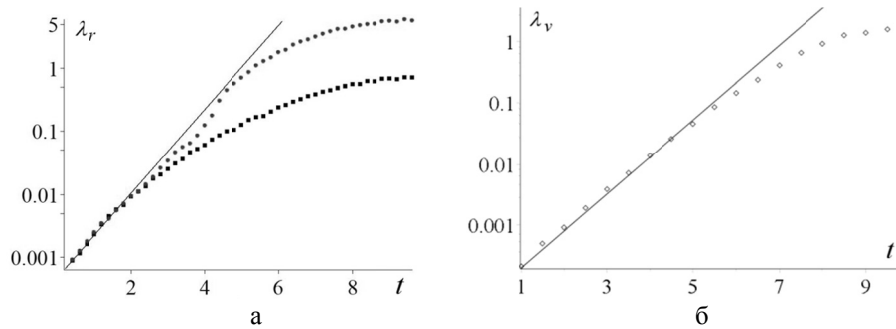


Рис. 3 – Зависимость от времени (в пикосекундах) логарифма среднего отклонения координат (а, в процентах от шага решетки) и скоростей (б) ионов натрия возмущенной системы

Fig. 3 – Time dependence (in picoseconds) of the logarithm of the average deviation of coordinates (а, as percentage of the lattice pitch) and velocities (б) of sodium ions of the perturbed system

В нелинейных динамических системах, в частности в молекулярных газах и жидкостях, имеет место динамический хаос (см., например, [4–9, 13–15]). Наличие локальной неустойчивости решений является необходимым условием, при выполнении которого возможно появление динамического хаоса в системе. Однако собственно хаотическое поведение не может быть описано с помощью локальных функционалов (6), которые являлись мерой локальной неустойчивости. Нелокальные по времени свойства хаотических процессов описываются корреляционными функциями. В простейшем случае эти функции двухвременные. Перемешивание, специфичное для хаотических процессов, обнаруживается по затуханию корреляционной функции данных величин. Типичной характеристикой перемешивания является двухвременная автокорреляционная функция скоростей (АКФС) рассматриваемой системы. В частности, например, АКФС ионов натрия определяется как

$$\chi_v(k\Delta t) = \frac{2}{N \langle \mathbf{v}_i^2 \rangle} \sum_{i=1}^{N/2} \mathbf{v}_i(t_0) \mathbf{v}_i(t_0 + k\Delta t), \quad (7)$$

где угловые скобки означают усреднение по ансамблю.

Эволюция АКФС ионов натрия (7) представлена на рис. 4. Эта функция достаточно быстро затухает, хотя затухание носит сложный характер и на последних стадиях имеет квазипериодический характер. Тем не менее само наличие затухания корреляций указывает на то, что в рассматриваемой системе помимо локальной неустойчивости имеет место и перемешивание, а значит, и динамический хаос.

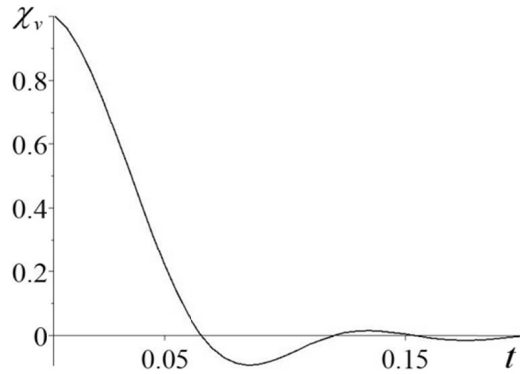


Рис. 4 – Зависимость от времени (в пикосекундах)
АКФС ионов натрия

Fig. 4. Time dependence (in picoseconds) of the velocity
autocorrelation function of sodium ions

Заключение

Таким образом, в данной работе показано, что в системе ионов кристалла NaCl так же, как и в неупорядоченных молекулярных системах, жидкостях и газах, имеет место динамический хаос. Поскольку в реальном МД моделировании всегда имеют место те или иные ошибки, то получение адекватных результатов моделирования требует систематического усреднения по независимым фазовым траекториям. Одновременно следует понимать, что ошибки в процессе такого численного моделирования вносятся практически на каждом шаге решения уравнений Ньютона. Это делает получаемые фазовые траектории принципиально необратимыми. Необратимость получаемых при этом фазовых траекторий является отражением реально наблюдаемой в природе необратимости. В этом смысле МД моделирование молекулярных систем является более адекватным, чем их описание посредством детерминированных уравнений Ньютона. Действительно, само появление динамического хаоса не означает, что эволюция динамической системы необратима. Если рассматриваемая динамическая система не возмущена, то ее фазовая траектория вполне детерминирована и обратима.

Нередко при МД моделировании вводят так называемое время обратимости или достоверности. Действительно, вблизи всякого времени t_0 можно выделить некоторый интервал τ , спустя который, если обратить время, можно вернуться в ε -окрестность начальной фазовой точки. Величина ε предсказуемо будет определяться длительностью интервала τ . Тем не менее разбегание траекторий всегда происходит экспоненциально быстро.

Теперь несколько слов о деталях. При формулировании свойств динамического хаоса математики обычно предполагают экспоненциальное затухание корреляций, что и определяет перемешивание фазовых траекторий. В физических системах экспоненциальный характер затухания корреляций является скорее экзотикой. Он реализуется лишь для разреженного газа или для так называемого газа Энскога [16]. Для плотного газа АКФС имеет две ветви: экспоненциальную ветвь и длинный степенной хвост [16, 17].

Стоит отметить, что линейная (экспоненциальная) стадия развития неустойчивости в конфигурационном и скоростном пространстве системы проходит на разных временах (рис. 3), хотя и близких. Замедление нарастания возмущений является типичным для всех систем, в том числе и для неупорядоченных

(см. [6, 8, 9]). В кристалле такое замедление кажется очень естественным, поскольку пространства конфигураций и скоростей ограничены, в первом случае подвижностью иона, а во втором – температурой кристалла. На самом деле ситуация несколько более тонкая. Она становится совершенно прозрачной, если при анализе динамики возмущений перейти в Фурье-представление. Тогда выяснится, что имеет место спектр неустойчивых возмущений, среди которых есть наиболее неустойчивое. Именно его нарастание и определяет экспоненциальный рост возмущений. Затем, когда возмущение достигает некоторой амплитуды, включаются нелинейные взаимодействия различных мод, что и приводит к замедлению нарастания возмущений.

В заключение отметим, что в данной работе изучались фазовые траектории некоторой специфической системы – кристалла NaCl. Однако ясно, что все установленные качественные закономерности не зависят от того, какое кристаллическое вещество рассматривается. Изменение типа решетки, расстояния между ионами, потенциала взаимодействия приведет лишь к количественным изменениям. Замена ионов на нейтральные атомы также непринципиальна с точки зрения особенностей неустойчивости фазовых траекторий.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Rapaport D.C.** The art of molecular dynamics simulations. – Cambridge: Cambridge University Press, 2004. – 549 p.
2. **Alder B., Wainwright T.** Studies in molecular dynamics. I. General method // The Journal of Chemical Physics. – 1959. – Vol. 31, N 2. – P. 459–466.
3. **Alder B., Wainwright T.** Studies in molecular dynamics. II. Behavior of a small number of elastic spheres // The Journal of Chemical Physics. – 1960. – Vol. 33, N 5. – P. 1439–1451.
4. **Норман Г.Э., Стегайлов В.В.** Стохастические свойства молекулярно-динамической Ленард-Джонсовской системы в равновесном и неравновесном состояниях // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2001. – Т. 119, № 5. – С. 1011–1020.
5. **Norman G.E., Stegailov V.V.** Stochastic and dynamic properties of molecular dynamics systems: simple liquids, plasma and electrolytes, polymers // Computer Physics Communications. – 2002. – Vol. 147, iss. 1–2. – P. 678–683. – DOI: 10.1016/S0010-4655(02)00376-4.
6. **Норман Г.Э., Стегайлов В.В.** Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. – 2012. – Т. 24, № 6. – С. 3–44.
7. **Komatsu N., Abe T.** Numerical irreversibility in time reversible molecular dynamics simulation // Physica D: Nonlinear Phenomena. – 2004. – Vol. 195, iss. 3–4. – P. 391–397. – DOI: 10.1016/j.physd.2004.05.004.
8. **Рудяк В.Я., Иванов Д.А.** Компьютерное моделирование динамики конечного числа взаимодействующих частиц // Доклады Академии наук высшей школы Российской Федерации. – 2003. – № 1. – С. 30–38.
9. **Рудяк В.Я., Иванов Д.А.** Динамические и стохастические свойства открытой системы конечного числа упруго взаимодействующих частиц // Труды ИГАСУ. – 2004. – Т. 7, № 3. – С. 47–58.
10. **Daw M.S., Baskes M.** Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Physical Review B. – 1984. – Vol. 29, N 12. – P. 6443–6453. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.502.57.
11. **Zhou X.W., Doty F.P.** Embedded-ion method: an analytical energy-conserving charge-transfer interatomic potential and its application to the La-Br system // Physical Review B. – 2008. – Vol. 78, N 22. – P. 224307. – DOI: 10.1103/PhysRevB.78.224307.
12. **Ляпунов А.М.** Собрание сочинений. Т. 2. – М., Л.: Изд-во АН СССР, 1956. – 481 с.
13. **Данилов А.Ю.** Лекции по нелинейной механике. – М.: Постмаркет, 2001. – 184 с.
14. **Малинецкий Г.Г., Потапов А.Б.** Современные проблемы нелинейной динамики. – М.: Эдиториал УРСС, 2000. – 336 с.
15. **Рудяк В.Я.** Механика, процессы переноса, флуктуации и необратимость. – Новосибирск: ИГАСУ, 2011. – 268 с.

16. Рудяк В.Я. Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 2. Гидромеханика. – Новосибирск: НГАСУ, 2005. – 470 с.
17. Alder B., Wainwright T. Decay of the velocity autocorrelation function // Physical Review A. – 1970. – Vol. 1, N 1. – P. 18–21.

ON THE DYNAMIC CHAOS OF PHASE TRAJECTORIES OF THE SYSTEM OF CRYSTAL ATOMS

Rudyak V.Ya.^{1,2}, Belkin A.A.¹

¹ Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering, Russia

² Novosibirsk State University, Russia

The molecular dynamics method is used to study the stability of phase trajectories of ions of a NaCl crystal to the perturbation of the initial data. It is shown that there is a local instability of perturbations of the phase trajectories of the system both in the configuration space and in the velocity space. At the initial stage, small perturbations grow exponentially, growth increments are the same in both cases, and they depend on the structure of the crystal and its temperature. With increasing the temperature, growth increments increase too. Further, the growth of perturbations slows down, and they reach a “plateau” value, the characteristic size of which in the configuration space is comparable with the size of the ion localization region, and in the velocity space with its maximum velocity. In addition, it was found that the velocity autocorrelation function of all ions decays to zero, i.e., their mixing takes place in the system in addition to the local instability of phase trajectories. Thus, a dynamic chaos takes place in the system of atoms of crystalline matter.

Keywords: phase trajectory, local instability, mixing, dynamic chaos, crystal, molecular dynamics.

DOI: 10.17212/1727-2769-2020-1-2-7-16

REFERENCES

1. Rapaport D.C. *The art of molecular dynamics simulations*. Cambridge, Cambridge University Press, 2004. 549 p.
2. Alder B., Wainwright T. Studies in molecular dynamics. I. General method. *The Journal of Chemical Physics*, 1959, vol. 31, no. 2, pp. 459–466.
3. Alder B., Wainwright T. Studies in molecular dynamics. II. Behavior of a small number of elastic spheres. *The Journal of Chemical Physics*, 1960, vol. 33, no. 5, pp. 1439–1451.
4. Norman G.E., Stegailov V.V. The stochastic properties of a molecular-dynamical Lennard-Jones system in equilibrium and nonequilibrium states. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2001, vol. 92, no. 5, pp. 879–886. DOI: 10.1134/1.1378182. Translated from *Zhurnal eksperimental'noi i teoreticheskoi fiziki*, 2001, vol. 119, no. 5, pp. 1011–1020.
5. Norman G.E., Stegailov V.V. Stochastic and dynamic properties of molecular dynamics systems: simple liquids, plasma and electrolytes, polymers. *Computer Physics Communications*, 2002, vol. 147, iss. 1–2, pp. 678–683. DOI: 10.1016/S0010-4655(02)00376-4.
6. Norman G.E., Stegailov V.V. Stochastic theory of the classical molecular dynamics method. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2013, vol. 5, iss. 4, pp. 305–333. DOI: 10.1134/S2070048213040108. Translated from *Matematicheskoe modelirovanie*, 2012, vol. 24, iss. 6, pp. 3–44.
7. Komatsu N., Abe T. Numerical irreversibility in time reversible molecular dynamics simulation. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 2004, vol. 195, iss. 3–4, pp. 391–397. DOI: 10.1016/j.physd.2004.05.004.
8. Rudyak V.Ya., Ivanov D.A. Komp'yuternoe modelirovanie dinamiki konechnogo chisla vzaimodeistvuyushchikh chastits [Computer simulation of the dynamics of a finite number of interacting particles]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii = Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2003, no. 1, pp. 30–38.
9. Rudyak V.Ya., Ivanov D.A. Dinamicheskie i stokhasticheskie svoystva otkrytoi sistemy konechnogo chisla uprugo vzaimodeistvuyushchikh chastits [Dynamic and stochastic properties of an open system of a finite number of elastically interacting particles]. *Trudy NGASU = Proceedings NSUACE*, 2004, vol. 7, no. 3, pp. 47–58.

10. Daw M.S., Baskes M. Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Physical Review B*, 1984, vol. 29, no. 12, pp. 6443–6453. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.502.57.
11. Zhou X.W., Doty F.P. Embedded-ion method: an analytical energy-conserving charge-transfer interatomic potential and its application to the La-Br system. *Physical Review B*, 2008, vol. 78, no. 22, p. 224307. DOI: 10.1103/PhysRevB.78.224307.
12. Liapunov A.M. *Sobranie sochinenii. T. 2.* [Collected works. Vol. 2]. Moscow-Leningrad: Academy of Science USSR, 1956, 481 p.
13. Danilov A.Yu. *Leksii po nelineinoi mekhanike* [Lectures on nonlinear mechanics]. Moscow, Postmarket Publ., 2001. 184 p.
14. Malinetskii G.G., Potapov A.B. *Sovremennye problemy nelineinoi dinamiki* [Modern problems of nonlinear dynamics]. Moscow, Editorial URSS Publ., 2000. 336 p.
15. Rudyak V.Ya. *Mekhanika, protsessy perenosa, fluktuatsii i neobratimost'* [Mechanics, transport processes, fluctuations and irreversibility]. Novosibirsk, NSUACE Publ., 2011. 268 p.
16. Rudyak V.Ya. *Statisticheskaya aerogidromekhanika gomogennykh i geterogennykh sred. T. 2. Gidromekhanika* [Statistical aerohydrodynamics of homogeneous and heterogeneous media. Vol. 2. Hydrodynamics]. Novosibirsk, NSUACE Publ., 2005. 470 p.
17. Alder B., Wainwright T. Decay of the velocity autocorrelation function. *Physical Review A*, 1970, vol. 1, no. 1, pp. 18–21.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Рудяк Валерий Яковлевич – родился в 1945 году, д-р физ.-мат. наук, профессор, главный научный сотрудник, кафедра теоретической механики, Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет (Сибстрин). Области научных интересов: кинетическая теория плотных и разреженных газов, неравновесная статистическая механика процессов переноса, физика и механика дисперсных жидкостей, процессы переноса в газах, жидкостях и в наножидкостях, теория ламинарно-турбулентного перехода, моделирование и изучение макро-, микро- и нанотечений ньютоновских и неньютоновских жидкостей. Опубликовано более 500 научных работ. (Адрес: 630008, Россия, г. Новосибирск, Ленинградская, 113. E-mail: valery.rudyak@mail.ru).

Rudyak Valery Yakovlevich (b. 1945) – Doctor of Sciences (Phys & Math.), professor, chief of researcher, Theoretical Mechanics Department, Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering. His research interests are currently focused on the kinetic theory of dense and rarefied gases, nonequilibrium statistical mechanics of transport processes, physics and mechanics of dispersed fluids, transport processes in gases, the liquids and nanofluids, theory of laminar-turbulent transition, modeling and study of macro-, micro- and nanoflows of Newtonian and non-Newtonian liquids. He is the author of more than 500 scientific papers. (Address: 113, Leningradskaya Street, Novosibirsk, 630008, Russian. E-mail: valery.rudyak@mail.ru).



Белкин Александр Анатольевич – родился в 1969 году, д-р физ.-мат. наук, доцент, заведующий кафедрой теоретической механики, Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет (Сибстрин). Области научных интересов: неравновесная статистическая механика процессов переноса в дисперсных жидкостях, включая наножидкости, микро- и нанотечения жидкостей, моделирование методом молекулярной динамики. Опубликовано более 100 научных работ. (Адрес: 630008, Россия, г. Новосибирск, Ленинградская, 113. E-mail: a.belkin@sibstrin.ru).

Belkin Alexandr Anatolievich (b. 1969) – Doctor of Sciences (Phys & Math.), associate professor, Head of the Theoretical Mechanics Department, Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering. His research interests are currently focused on nonequilibrium statistical mechanics of transport processes in dispersed fluids, including nanofluids, micro and nanoflows, molecular dynamics simulations. He is the author of more than 100 scientific papers. (Address: 113, Leningradskaya Street, Novosibirsk, 630008, Russian Federation. E-mail: a.belkin@sibstrin.ru).

*Статья поступила 20 марта 2020 г.
Received March 20, 2020*

To Reference:

Rudyak V.Ya., Belkin A.A. O dinamicheskom khaose fazovykh traektorii sistemy atomov kristalla [On the dynamic chaos of phase trajectories of the system of crystal atoms]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii = Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2020, no. 1–2 (46–47), pp. 6–16. DOI: 10.17212/1727-2769-2020-1-2-7-16.