



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 87 за 2017 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Иванов А.В., Хилков С.А.

Бета-аппроксимация
двухчастичной функции
распределения при
описании цепочек фазовых
осцилляторов

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Иванов А.В., Хилков С.А. Бета-аппроксимация двухчастичной функции распределения при описании цепочек фазовых осцилляторов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 87. 19 с. doi:[10.20948/prepr-2017-87](https://doi.org/10.20948/prepr-2017-87)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2017-87>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.КЕЛДЫША
Российской академии наук**

А.В. Иванов, С.А. Хилков

**Бета–аппроксимация двухчастичной
функции распределения при описании
цепочек фазовых осцилляторов**

Москва — 2017

Иванов А.В., Хилков С.А.

e-mail: aivanov@keldysh.ru, khilkov.s@gmail.com

Бета–аппроксимация двухчастичной функции распределения при описании цепочек фазовых осцилляторов

При построении цепочки Боголюбова для систем с сильным локальным взаимодействием (жидкостей, магнитных материалов) ключевой проблемой является вопрос об аппроксимации двухчастичной функции распределения — традиционное приближение мультипликативности, приводящее к теории среднего поля, зачастую дает качественно неверные результаты.

В данной работе рассмотрена находящаяся в термостате и замкнутая в кольцо цепочка фазовых осцилляторов со взаимодействием только между ближайшими соседями. На основе анализа результатов первопринципных расчетов построена аппроксимация двухчастичной функции распределения, приводящая в итоге к одночастичному уравнению Фоккера–Планка с самосогласованной интегральной силой. Результаты моделирования полученного уравнения находятся в хорошем согласии с первопринципными расчетами.

Полученные результаты могут иметь большое значение при построении самосогласованных моделей систем с сильным локальным взаимодействием и температурными флуктуациями.

Ключевые слова: модель Курамото, физическая кинетика, уравнение Фоккера–Планка, цепочка Боголюбова, двухчастичные корреляции

Anton Valeryevich Ivanov, Sergey Andreyevich Khilkov

e-mail: aivanov@keldysh.ru, khilkov.s@gmail.com

Beta–approximation of the two–particle distribution function for the chains of phase oscillators

When constructing the BBGKY hierarchy for systems with strong local interaction (liquids, magnetic materials) the key problem is the issue of approximation of the two–particle distribution function. The traditional approximation of multiplicativity that leads to the theory of the mean field often gives qualitatively incorrect results.

In this paper, we consider a ring chain of phase oscillators with interaction only between the nearest neighbors, in a thermostat. On the basis of the analysis of the results of ab initio calculations, an approximation is constructed for the two-particle distribution function. It results in the one-particle Fokker-Planck equation with a self-consistent integral force. The results of the modeling based on the resulting equation are in a good agreement with the ab initio calculations.

The obtained results may be of great importance in the construction of self-consistent models of systems with strong local interaction and temperature fluctuations.

Keywords: Kuramoto model, kinetic theory, Fokker–Planck equation, BBGKY hierarchy, two-particles correlations

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ 15-01-05052.

Содержание

1	Введение	3
2	Исходная модель	4
3	Цепочка Боголюбова	5
4	Равновесные двухчастичные функции распределения	6
5	β -аппроксимация двухчастичной функции распределения	8
6	Алгоритм вычисления степени β	11
7	Численная схема для решения уравнения Фоккера–Планка	12
8	Результаты моделирования	12
9	Заключение	18
	Список литературы	18

1. Введение

Одним из традиционных этапов получения уравнения сплошной среды является переход от системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих движение отдельных атомов, к кинетическим уравнениям на одночастичную функцию распределения, например при помощи цепочки Боголюбова [1]. При этом ключевой проблемой является способ замыкания цепочки Боголюбова — аппроксимация двухчастичной функции распределения на основе одночастичных функций. Для флюидных систем (газов и плазмы) хороших результатов удастся достичь в рамках приближения мультипликативности, фактически основанного на предположении об отсутствии корреляций между ближайшими соседями. В итоге это предположение приводит к приближению среднего (самосогласованного) поля. Однако для целого ряда физических систем, где взаимодействие между ближайшими соседями весьма значительно (например жидкостей [2] или магнитных материалов [3]), такое предположение является априори неверным и приводит к некорректным результатам.

В настоящей работе на примере цепочки фазовых осцилляторов со взаимодействием только между ближайшими соседями (частный случай модели Курамото [4–7]) построена аппроксимация двухчастичной функции распределения, приводящая в итоге к одночастичному уравнению Фоккера–Планка (УФП) [8] с самосогласованной интегральной силой. Первая (не вполне удачная) попытка построения такой аппроксимации для цепочки фазовых осцилляторов была предпринята нами в [9]. Результаты моделирования полученного в данной работе уравнения (эволюция моментов и одночастичных функций распределения, стационарные значения энергии) хорошо совпадают с результатами первопринципных расчетов в широком диапазоне температур и длин цепочек фазовых осцилляторов.

2. Исходная модель

Рассмотрим систему из N частиц (т.н. фазовых осцилляторов), состояние каждой частицы описывается углом $\varphi_i \in [-\pi : \pi)$, $1 \leq i \leq N$. Частицы выстроены в цепочку, замкнутую в кольцо, т.е.

$$\varphi_1 = \varphi_{N+1},$$

в цепочке взаимодействуют лишь ближайшие соседи. Тогда полная энергия системы записывается как

$$W = -J \sum_{i=1}^N \cos(\varphi_{i+1} - \varphi_i),$$

где J — аналог обменного интеграла.

Кроме того, на каждую частицу действует белый шум (система находится в термостате с температурой T). Уравнения движения

$$\frac{d\varphi_i}{dt} = -\gamma \frac{\partial W}{\partial \varphi_i} + \sqrt{2\gamma T} \xi(t),$$

или

$$\frac{d\varphi_i}{dt} = \gamma J \left[\sin(\varphi_{i-1} - \varphi_i) + \sin(\varphi_{i+1} - \varphi_i) \right] + \sqrt{2\gamma T} \xi(t), \quad (1)$$

где γ — коэффициент диссипации, ξ — случайный источник с гауссовым распределением, нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией.

Система уравнений (1) моделируется численно, напрямую [9], для ансамбля из $R = 10^6/N$ цепочек.

Введем N -частичную функцию распределения $f^{(N)}(\varphi_1, \dots, \varphi_N, t)$. В случае канонического ансамбля Гиббса для нее можно достаточно строго получить уравнение Фоккера–Планка [8], воспользовавшись разложением Крамерса–Мойяла и формулой Вика [10]

$$\begin{aligned} \frac{\partial f^{(N)}}{\partial t} + \gamma J \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial \varphi_i} \left(\left[\sin(\varphi_{i-1} - \varphi_i) + \sin(\varphi_{i+1} - \varphi_i) \right] f^{(N)} \right) = \\ = \gamma T \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2 f^{(N)}}{\partial \varphi_i^2}. \end{aligned} \quad (2)$$

Для такого уравнения можно записать равновесное решение

$$\begin{aligned} f_{\text{eq}}^{(N)} &= \frac{1}{Z_{\text{eq}}^{(N)}} \exp \left[\frac{J}{T} \sum_{i=1}^N \cos(\varphi_{i+1} - \varphi_i) \right], \\ Z_{\text{eq}}^{(N)} &= \int_{-\pi}^{\pi} \exp \left[\frac{J}{T} \sum_{i=1}^N \cos(\varphi_{i+1} - \varphi_i) \right] d\varphi_1 \dots d\varphi_N. \end{aligned} \quad (3)$$

3. Цепочка Боголюбова

Для упрощения N -мерного уравнения (3) используем цепочку Боголюбова [11–13]. Введем одночастичную $f_i^{(1)}$ и двухчастичную $f_{ij}^{(2)}$ функции распределения как

$$f_i^{(1)}(\varphi_i, t) = \int_{-\pi}^{\pi} f^{(N)} d\varphi_1 \dots d\varphi_{i-1} d\varphi_{i+1} \dots d\varphi_N,$$

$$f_{ij}^{(2)}(\varphi_i, \varphi_j, t) = \int_{-\pi}^{\pi} f^{(N)} d\varphi_1 \dots d\varphi_{i-1} d\varphi_{i+1} \dots d\varphi_{j-1} d\varphi_{j+1} \dots d\varphi_N.$$

Тогда, в силу периодичности по φ , произвольная функция $g(\varphi)$ очевидно $g(-\pi) = g(\pi)$, и после интегрирования (2) по $N - 1$ углу $\int_{-\pi}^{\pi} \dots d\varphi_{i-1} d\varphi_{i+1} \dots$ получаем систему из N уравнений на одночастичные функции распределения

$$\frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_i} \left[T \frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial \varphi_i} + J \int_{-\pi}^{\pi} \sin(\varphi_i - \varphi_{i-1}) f_{i-1,i}^{(2)} d\varphi_{i-1} + \right. \\ \left. + J \int_{-\pi}^{\pi} \sin(\varphi_i - \varphi_{i+1}) f_{i,i+1}^{(2)} d\varphi_{i+1} \right]. \quad (4)$$

Пусть начальные условия для всех одночастичных функций распределения одинаковы

$$f_i^{(1)}|_{t=0} = f_{\text{start}}(\varphi).$$

Тогда из соображений симметрии все уравнения системы (4) совпадают, индекс ⁽¹⁾ в дальнейшем будем опускать

$$\frac{\partial f(\varphi, t)}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[T \frac{\partial f}{\partial \varphi} + 2J \int_{-\pi}^{\pi} \sin(\varphi - \varphi') f^{(2)}(\varphi, \varphi', t) d\varphi' \right]. \quad (5)$$

Одним из ключевых вопросов является способ замыкания цепочки Боголюбова, т.е. способ аппроксимации двухчастичной функции распределения $f^{(2)}(\varphi, \varphi', t)$ на основе одночастичной функции распределения $f(\varphi, t)$.

4. Равновесные двухчастичные функции распределения

Равновесная двухчастичная функция распределения для N -частичной цепочки

$$f_{\text{eq}}^{(2:N)}(\varphi_1, \varphi_2) = \frac{1}{Z_{\text{eq}}^{(N)}} \int_{-\pi}^{\pi} f^{(N)\text{eq}} d\varphi_3 \dots d\varphi_N, \quad (6)$$

может быть вычислена на основе следующего итерационного алгоритма:

$$\begin{aligned} f_{\text{eq}}^{(2:N)}(\varphi_1, \varphi_2) &= \frac{\Phi^{(N)}(\varphi_1, \varphi_2)}{Z_{\text{eq}}^{(N)}} \exp \frac{J \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}{T}, \\ \Phi^{(N)}(\varphi_1, \varphi_2) &= \int_{-\pi}^{\pi} \Phi^{(N-1)}(\varphi_N, \varphi_2) \exp \frac{J \cos(\varphi_1 - \varphi_N)}{T} d\varphi_N, \\ \Phi^{(2)}(\varphi_1, \varphi_2) &= \exp \frac{J \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}{T}, \end{aligned}$$

на каждой итерации функция $\Phi^{(N)}(\varphi_1, \varphi_2)$ хранится на равномерной квадратной сетке, интегралы по $d\varphi$ берутся численно методом прямоугольников.

Итоговая функция $f_{\text{eq}}^{(2:N)}(\varphi_1, \varphi_2)$ в силу симметрии задачи зависит лишь от разности $\varphi_1 - \varphi_2$ и может быть с хорошей точностью аппроксимирована как

$$\begin{aligned} f_{\text{eq}}^{(2:N)}(\varphi_1, \varphi_2) &\approx \frac{1}{Z_{\Theta}^{(2)}} \exp \frac{J \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}{\Theta_{\text{eq}} T}, \quad (7) \\ Z_{\Theta}^{(2)} &= \int_{-\pi}^{\pi} \exp \frac{J \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}{\Theta_{\text{eq}} T} d\varphi_1 d\varphi_2, \end{aligned}$$

где $\Theta_{\text{eq}} = \Theta_{\text{eq}}(N, T)$, $\frac{1}{2} \leq \Theta_{\text{eq}} \leq 1$ — некоторый эффективный температурный множитель, рисунок 1.

На каждой кривой Θ_{eq} можно выделить критическую длину цепочки фазовых осцилляторов N_{cr} , начиная с которой $\Theta_{\text{eq}} \approx 1$ с доступной для проведенных вычислений точностью $5 \cdot 10^{-5}$, рисунок 2. Видно, что зависимость $N_{\text{cr}}(T)$ может быть аппроксимирована как $N_{\text{cr}} \approx 14/T$.

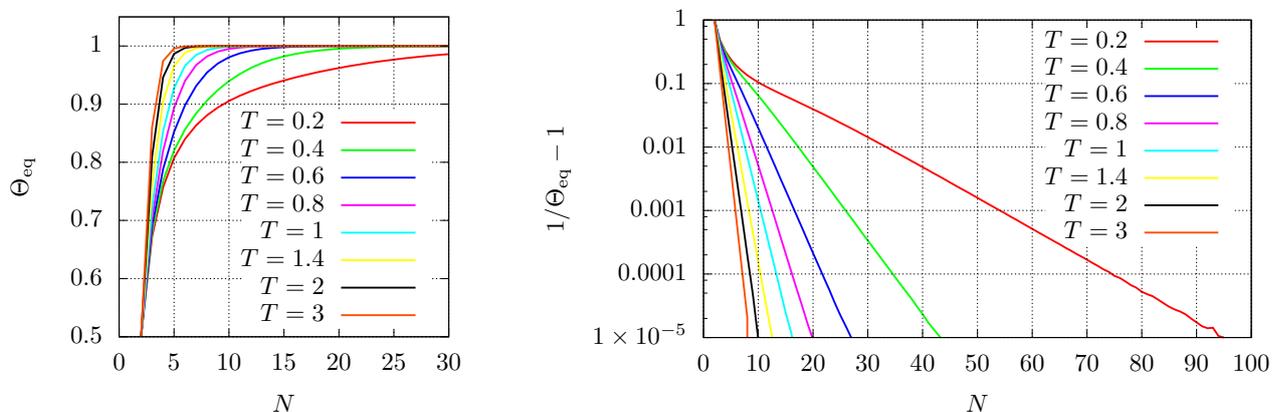


Рис. 1. Зависимость эффективного температурного множителя $\Theta_{\text{eq}}(N)$ в аппроксимации равновесной двухчастичной функции распределения (7) от длины цепочки фазовых осцилляторов N для различных значений температуры термостата T

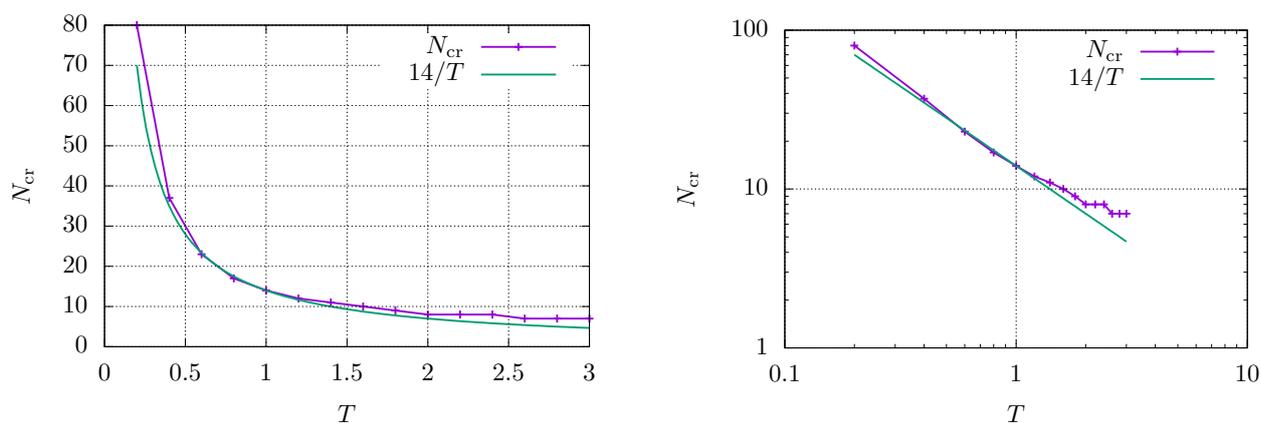


Рис. 2. Зависимость критической длины цепочки фазовых осцилляторов $N_{\text{cr}}(T)$, начиная с которой $\Theta_{\text{eq}} \approx 1$ с доступной для проведенных вычислений точностью $5 \cdot 10^{-5}$

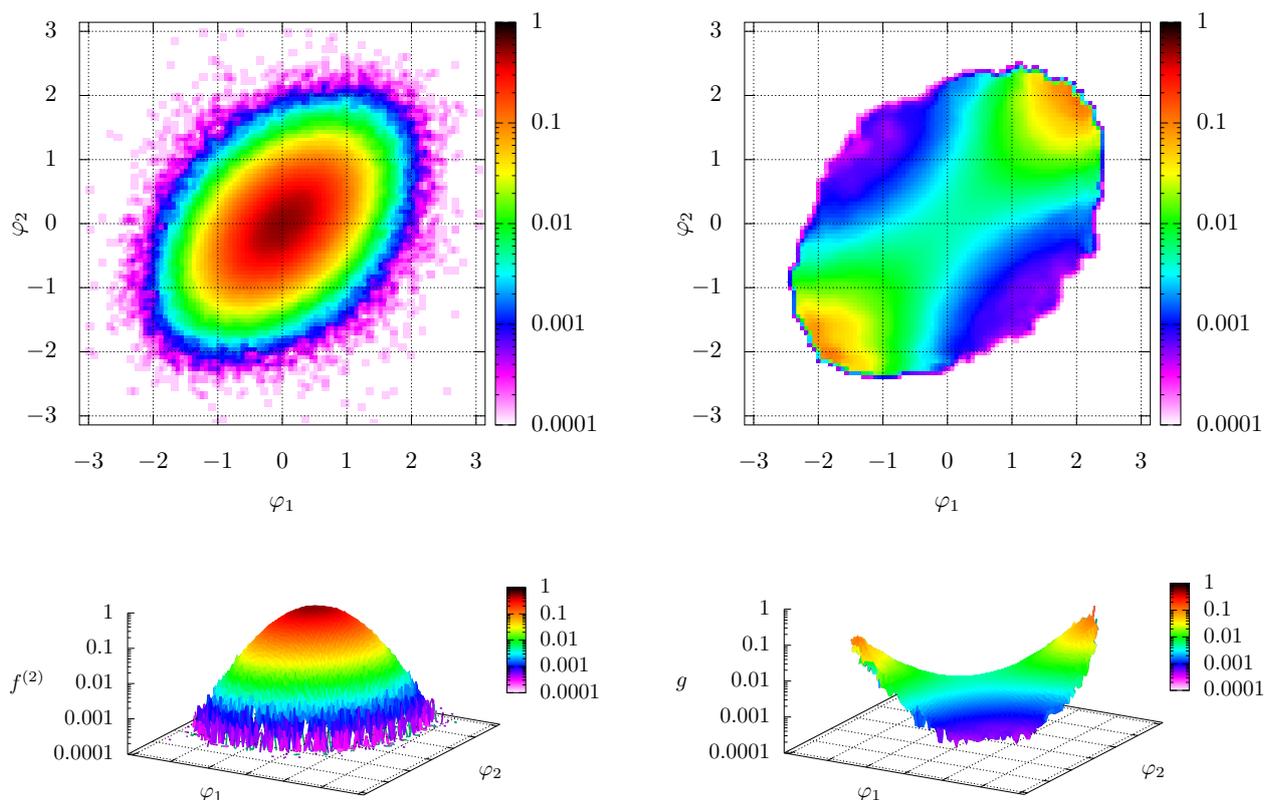


Рис. 3. Характерный вид двухчастичной функции распределения $f^{(2)}$ и отвечающей ей функции g при $N = 1024$, $T = 0.4$, в момент времени $t = 1$

5. β -аппроксимация двухчастичной функции распределения

Предположим, что двухчастичная функция распределения $f^{(2)}$ выражается через одночастичные функции распределения $f^{(1)}$ как

$$f^{(2)}(\varphi_1, \varphi_2, t) = f^{(1)}(\varphi_1, t)f^{(1)}(\varphi_2, t)g(\varphi_1, \varphi_2, t),$$

где g — некоторая неизвестная функция. Анализируя данные прямого численного моделирования для ансамбля из N -частичных цепочек фазовых осцилляторов [9], можно непосредственно получить функции $f^{(2)}$, $f^{(1)}$ и на их основе вычислить функцию g :

$$g(\varphi_1, \varphi_2, t) = \frac{f^{(2)}(\varphi_1, \varphi_2, t)}{f^{(1)}(\varphi_1, t)f^{(1)}(\varphi_2, t)}.$$

После получения функция g дополнительно обрабатывалась медианным фильтром с диаметром шаблона в семь ячеек, рисунки 3, 4.

Зависимость функции g от направления вдоль главной диагонали при неравновесной ситуации значительно влияет на эволюцию системы. В частности, наличие максимумов приводит к появлению дополнительных сил, «растягивающих» одночастичную функцию распределения и подавляющих фазовый переход.

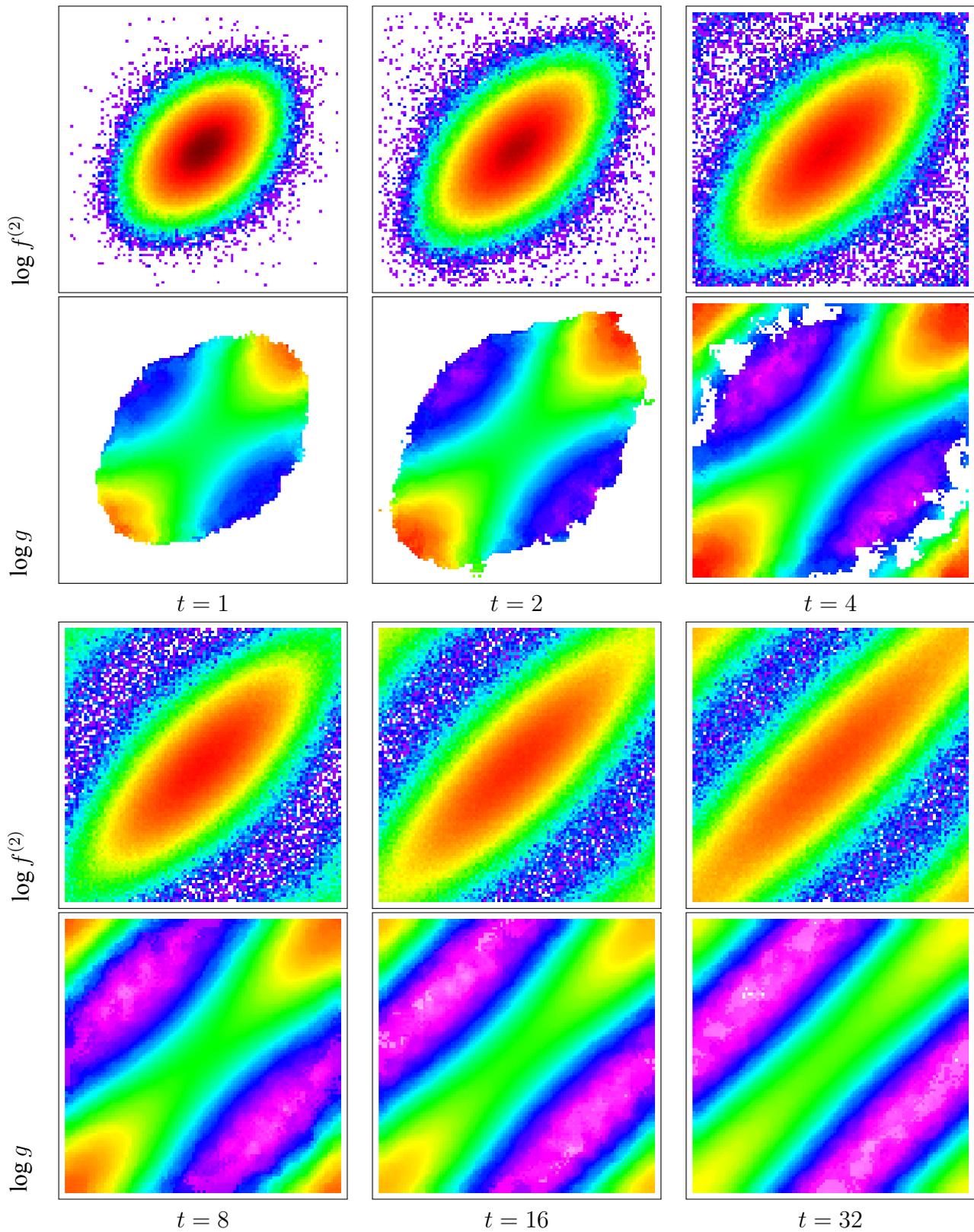


Рис. 4. Эволюция логарифма двухчастичной функции распределения $\log f^{(2)}$ и логарифма отвечающей ей функции $\log g$ при $N = 1024$, $T = 0.4$

Аналогичная ситуация может возникать и в ферромагнетиках, приводя к сдвигу температуры Кюри.

Рассмотрим условия, накладываемые на двухчастичную функцию распределения:

1. условие нормировки $\int_{-\pi}^{\pi} f^{(2)}(\varphi_1, \varphi_2, t) d\varphi_1 d\varphi_2 = 1$;
2. условие симметричности $f^{(2)}(\varphi_1, \varphi_2, t) = f^{(2)}(\varphi_2, \varphi_1, t)$;
3. асимптотика на больших временах

$$f^{(2)}(\varphi_1, \varphi_2, t) \rightarrow \frac{1}{Z_{\Theta}^{(2)}} \exp \frac{J \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}{\Theta_{\text{eq}} T};$$

4. связь с одночастичной функцией распределения

$$f^{(1)}(\varphi_1, t) = \int_{-\pi}^{\pi} f^{(2)}(\varphi_1, \varphi_2, t) d\varphi_2.$$

Для рассмотренной постановки всем этим условиям отвечает аппроксимация вида

$$f^{(2)}(\varphi_1, \varphi_2, t) \approx \frac{\left(f(\varphi_1, t)f(\varphi_2, t)\right)^{\beta}}{Z_{\beta}^{(2)}} \exp \frac{J \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}{\Theta T}, \quad (8)$$

$$Z_{\beta}^{(2)} = \int_{-\pi}^{\pi} \left(f(\varphi_1, t)f(\varphi_2, t)\right)^{\beta} \exp \frac{J \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}{\Theta T} d\varphi_1 d\varphi_2,$$

где степень β определяется из условия 4, расчеты показывают что $\frac{1}{2} < \beta < 1$:

$$\lim_{\Theta T \rightarrow 0} \beta = \frac{1}{2}, \quad \lim_{\Theta T \rightarrow \infty} \beta = 1.$$

После подстановки (8) в (5) получаем в итоге замкнутое уравнение Фоккера–Планка на одночастичную функцию распределения f

$$\frac{\partial f(\varphi, t)}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[T \frac{\partial f(\varphi, t)}{\partial \varphi} - f(\varphi, t) \mathcal{F}(\varphi, t) \right], \quad (9)$$

где \mathcal{F} — самосогласованная интегральная сила

$$\mathcal{F} = -f(\varphi, t)^{\beta-1} \frac{2J}{Z_{\beta}^{(2)}} \int_{-\pi}^{\pi} \sin(\varphi - \varphi') f(\varphi', t)^{\beta} \exp \frac{J \cos(\varphi - \varphi')}{\Theta T} d\varphi'.$$

6. Алгоритм вычисления степени β

Поскольку (8) является лишь аппроксимацией (приближенным выражением), рассмотрим более подробно метод расчета степени β . Пусть β определяется путем минимизации функционала вида

$$\begin{aligned} \varepsilon_\beta &= \int_{-\pi}^{\pi} \left[f(\varphi, t) - \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(f(\varphi, t)f(\varphi', t))^\beta}{Z_\beta^{(2)}} \exp \frac{J \cos(\varphi - \varphi')}{\Theta T} d\varphi' \right]^2 d\varphi = \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \left[f - \frac{I_0}{Z_\beta^{(2)}} \right]^2 d\varphi, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} f(\varphi, t) &\equiv f, \quad f(\varphi', t) \equiv f', \quad Z_\beta^{(2)} = \int_{-\pi}^{\pi} I_0 d\varphi, \\ I_n &\equiv \int_{-\pi}^{\pi} f^\beta f'^\beta \exp \frac{J \cos(\varphi - \varphi')}{\Theta T} \log^n (ff') d\varphi', \end{aligned}$$

что в свою очередь сводится к решению интегрального уравнения

$$\frac{d\varepsilon_\beta}{d\beta} = 0.$$

Поскольку

$$\frac{d^n I_0}{d\beta^n} = I_n, \quad \frac{d^n Z_\beta^{(2)}}{d\beta^n} = \int_{-\pi}^{\pi} I_n d\varphi \equiv Z_n,$$

получаем

$$\frac{d\varepsilon_\beta}{d\beta} = 2 \int_{-\pi}^{\pi} \left[f - \frac{I_0}{Z_0} \right] \frac{I_0 Z_1 - I_1 Z_0}{Z_0^2} d\varphi,$$

или, с учетом того что $Z_0 > 0$, уравнение на β принимает вид

$$\int_{-\pi}^{\pi} f I_0 Z_0 Z_1 - f I_1 Z_0^2 - I_0^2 Z_1 + I_0 I_1 Z_0 d\varphi = 0,$$

что дает в итоге итерационную схему для поиска β методом Ньютона

$$\beta_{k+1} = \beta_k - \left(\int_{-\pi}^{\pi} f I_0 Z_0 Z_1 - f I_1 Z_0^2 - I_0^2 Z_1 + I_0 I_1 Z_0 d\varphi \right) \times \left(\int_{-\pi}^{\pi} f I_0 Z_1^2 + \right. \\ \left. + f I_0 Z_0 Z_2 - f I_2 Z_0^2 - f I_1 Z_0 Z_1 - I_0 I_1 Z_1 - I_0^2 Z_2 + I_1^2 Z_0 + I_0 I_2 Z_0 d\varphi \right)^{-1}, \\ \beta_0 = \frac{1}{2},$$

для реализации которой на каждой итерации, зная f , необходимо рассчитать интегралы $I_{0,1,2}$ и на их основе $Z_{0,1,2}$.

7. Численная схема для решения уравнения Фоккера–Планка

Пусть f задана на равномерной сетке $\{\varphi_i\}$, $\varphi_{i+1} - \varphi_i = h$, $\{f_i\}$ значения одночастичной функции распределения в момент времени $t_i = \tau i$, значения на следующем временном слое $\{\hat{f}_i^k\}$. Тогда для решения нелинейного уравнения (9) можно построить итерационную схему

$$\frac{\hat{f}_i^k - f_i}{\tau} = \gamma T \frac{\hat{f}_{i-1}^k - 2\hat{f}_i^k + \hat{f}_{i+1}^k}{h^2} - \frac{\gamma}{2h} \left[\hat{f}_{i+1}^k \mathcal{F}_{i+1}^k - \hat{f}_{i-1}^k \mathcal{F}_{i-1}^k \right], \\ \mathcal{F}_i^k = -(\hat{f}_i^{k-1})^{\beta-1} \frac{2Jh}{Z_{\beta}^{(2)k}} \sum_j \sin(\varphi_i - \varphi_j) (\hat{f}_j^{k-1})^{\beta} \exp \frac{J \cos(\varphi_i - \varphi_j)}{\Theta T}, \\ \mathcal{F}_i^0 = \mathcal{F}_i|_{f=f_i},$$

или

$$-\frac{\gamma}{h} \left[\frac{T}{h} + \frac{\mathcal{F}_{i-1}^k}{2} \right] \hat{f}_{i-1}^k + \left[\frac{1}{\tau} + \frac{2\gamma T}{h^2} \right] \hat{f}_i^k - \frac{\gamma}{h} \left[\frac{T}{h} - \frac{\mathcal{F}_{i+1}^k}{2} \right] \hat{f}_{i+1}^k = \frac{f_i}{\tau}. \quad (10)$$

Для решения полученной СЛАУ используется циклическая прогонка [14], причем для разрешения нелинейности на каждом временном шаге, как правило, оказывается достаточно одной итерации.

Построенная численная схема реализована на языках C++ и Python для OS Linux на основе библиотеки aiwlib [15].

8. Результаты моделирования

Как было показано в [9], приближение мультипликативности

$$f^{(2)}(\varphi_i, \varphi_j, t) \approx f^{(1)}(\varphi_i, t) \cdot f^{(1)}(\varphi_j, t)$$

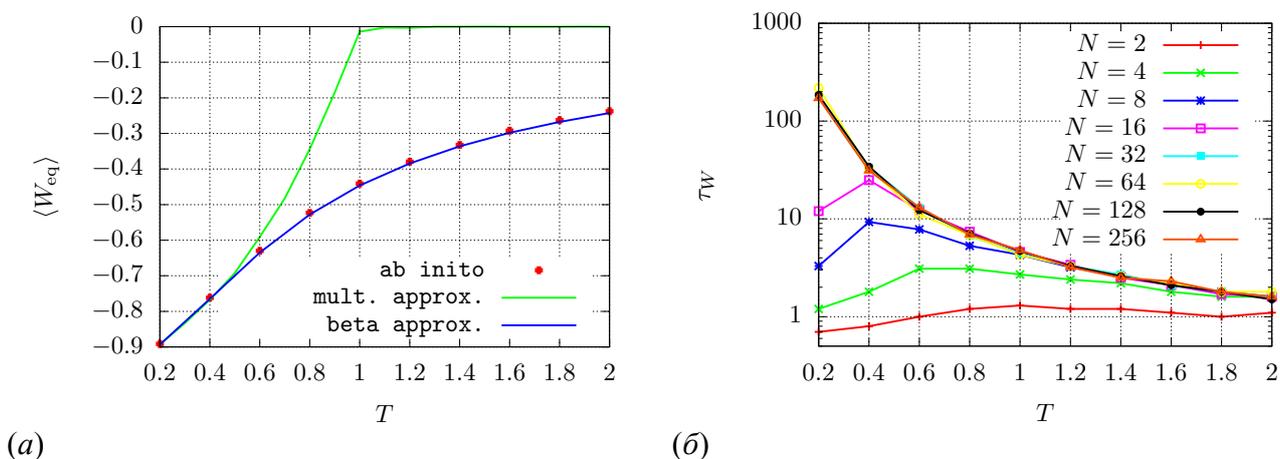


Рис. 5. Зависимость стационарного значения энергии $\langle W_{\text{eq}} \rangle$ от температуры T для системы из цепочек длины $N = 256$, полученной из первопринципных расчетов, приближения мультипликативности и β -аппроксимации (а); зависимости времени релаксации средней энергии τ_W от температуры T для цепочек разной длины N , полученные из первопринципных расчетов (б)

приводит к возникновению спонтанной поляризации при $T < 1$, так что даже стационарное решение уравнения Фоккера–Планка отличается от первопринципных расчетов. Напротив, β -аппроксимация $f^{(2)}$ и уравнение (9) не приводят к возникновению спонтанной поляризации во всем диапазоне температур, и уже по построению дают верную (совпадающую с первопринципными расчетами) энергию стационарного состояния, рисунок 5а.

При первопринципном моделировании процесс релаксации можно условно разбить на два этапа — относительно быстрый процесс установления равновесия внутри цепочки, сопровождающийся выходом энергии на стационарное значение, и медленная диффузия ансамбля цепочек вдоль главной диагонали фазового пространства $\varphi_i = \varphi_{i+1}$. На втором этапе энергия системы практически не меняется, но одночастичная функция распределения стремится к константе $1/2\pi$, а моменты $\langle \cos \varphi \rangle \rightarrow 0$, $\langle \sin \varphi \rangle \rightarrow 0$.

Продолжительность первого этапа релаксации можно оценить при помощи характерного времени релаксации для энергии τ_W (рис. 5б), которое можно определить как

$$\langle W \rangle (\tau_W) \approx \langle W \rangle_{\text{eq}} - \frac{1 + \langle W \rangle_{\text{eq}}}{10^2},$$

поскольку $W_{t=0} = -1$. При $t < \tau_W$ построенная β -аппроксимация для двухчастичной функции распределения очевидно будет совпадать с первопринципными расчетами лишь в случае некоторых специально выбранных постановок (начальных условий).

При выбранных начальных условиях, с хорошей точностью работает аппроксимация

$$\langle \cos \varphi \rangle (t) \approx C e^{-t/\tau_C}.$$

При сравнении первопринципных расчетов и результатов моделирования уравнения Фоккера–Планка (9) видно, что при малых температурах $T = 0.2$ для цепочки длины $N = 256$ уравнение Фоккера–Планка дает заниженные в несколько раз времена релаксации τ_C , рисунок 6. При повышении температуры ситуация улучшается, рисунок 7.

Одной из возможностей улучшить ситуацию при малых температурах является феноменологическое введение зависимости коэффициента $\Theta(\phi)$, где

$$\phi = \frac{\varphi_i + \varphi_j}{2}, \quad \phi \in [-\pi, \pi].$$

Поскольку на больших временах (при $f = 1/2\pi$) коэффициент Θ должен стремиться к значению Θ_{eq} отвечающему равновесной двухчастичной функции (7), а на малых временах — влиять в первую очередь на области, где существенны процессы диффузии, можно использовать аппроксимацию вида

$$\Theta_{\Delta\phi}(\phi) = \Theta_{\text{eq}} \left[1 - \lambda \frac{\partial^2 f(\phi)}{\partial \phi^2} \right],$$

где λ — некоторый феноменологический коэффициент, расчеты показывают что наилучшее совпадение с результатами первопринципных расчетов достигается при $\lambda \approx 1/2\pi$, рисунок 6, кривые 3.

Сравнение зависимостей $\tau_C(T)$ для первопринципных расчетов, результатов моделирования уравнения Фоккера–Планка (9) с $\Theta(\phi) = \Theta_{\text{eq}}$ и $\Theta(\phi) = \Theta_{\Delta\phi}(\phi)$ приведено на рисунке 8. Отсутствие точек при малых температурах и коротких цепочках для некоторых кривых связано с нехваткой точности переменных типа `double` для представления экспонент с очень большими положительными или отрицательными аргументами. Видно, что при малых температурах ($T < 1$) существует расхождение во временах релаксации τ_C , которое отчасти удается устранить введением феноменологической зависимости $\Theta(\phi) = \Theta_{\Delta\phi}(\phi)$, на больших температурах времена релаксации τ_C находятся в хорошем согласии с первопринципными расчетами.

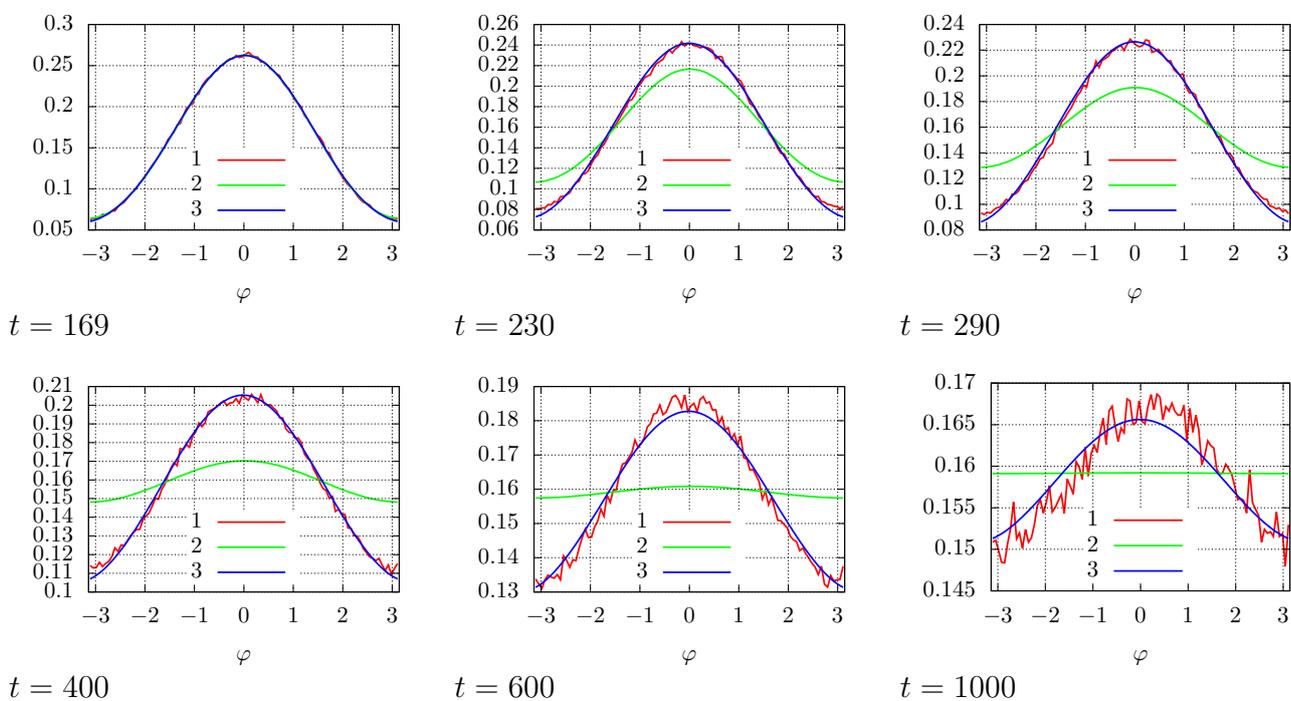
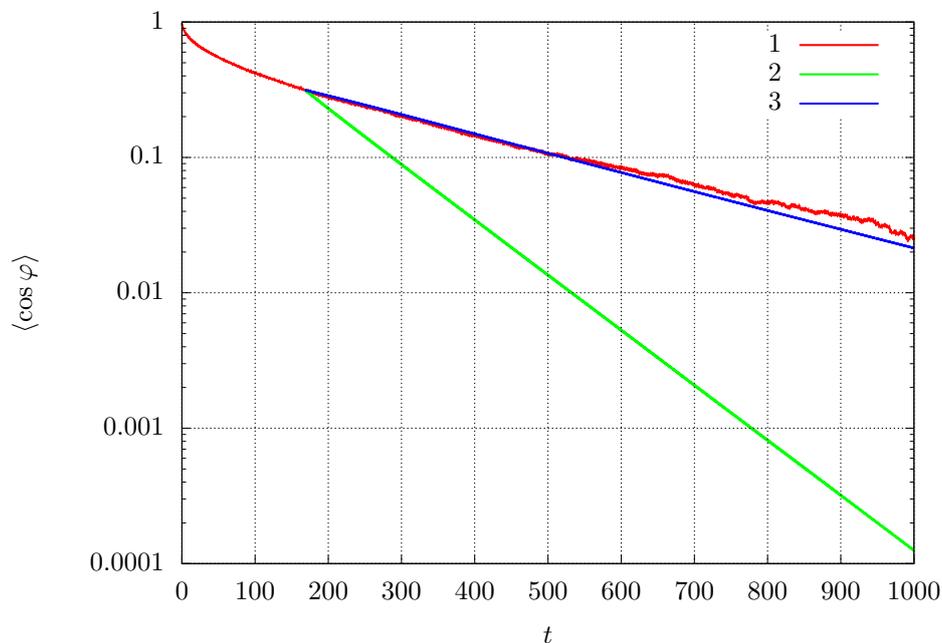


Рис. 6. Зависимости $\langle \cos \varphi \rangle (t)$ и $f(\varphi)$ при $T = 0.2$, $N = 256$ для первопринципных расчетов (кривые 1), для решения УФП при $\Theta(\phi) = \Theta_{\text{eq}}$ (кривые 2) и при $\Theta(\phi) = \Theta_{\Delta\phi}(\phi)$ (кривые 3) в различные моменты времени

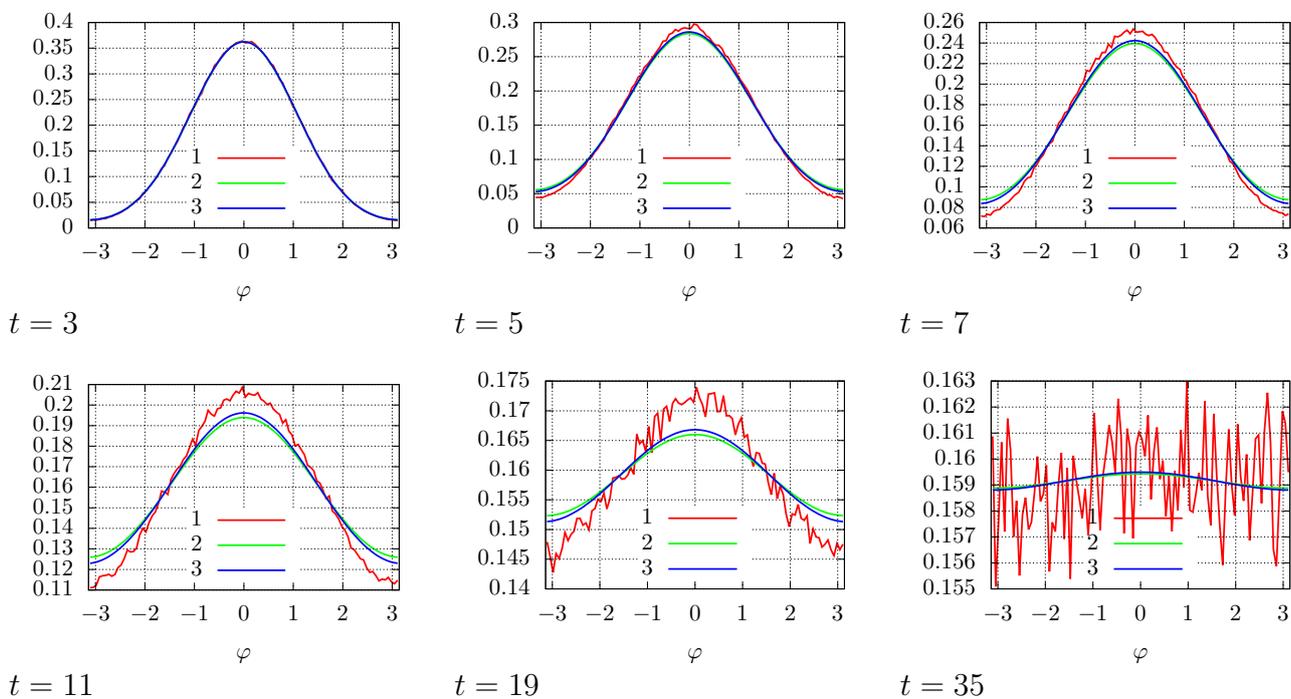
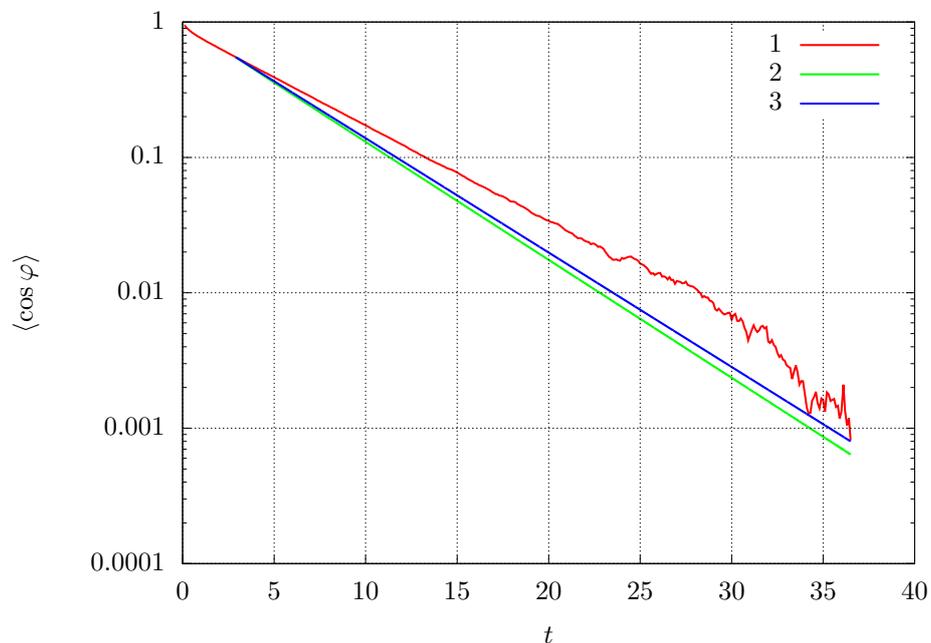
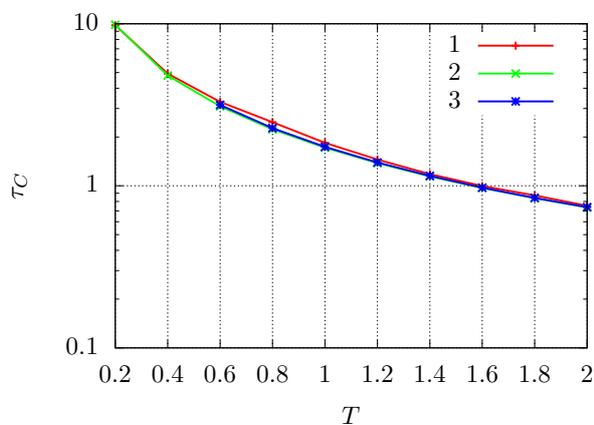
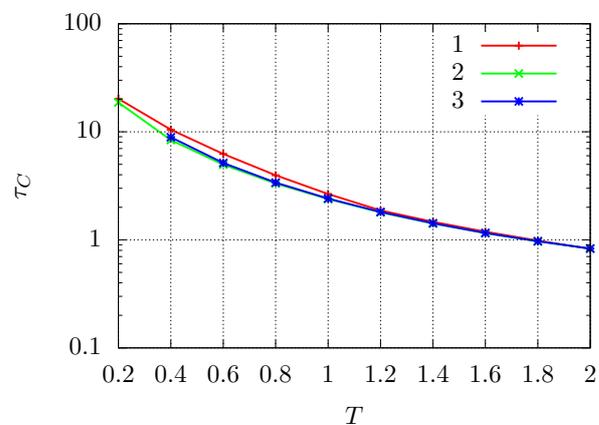


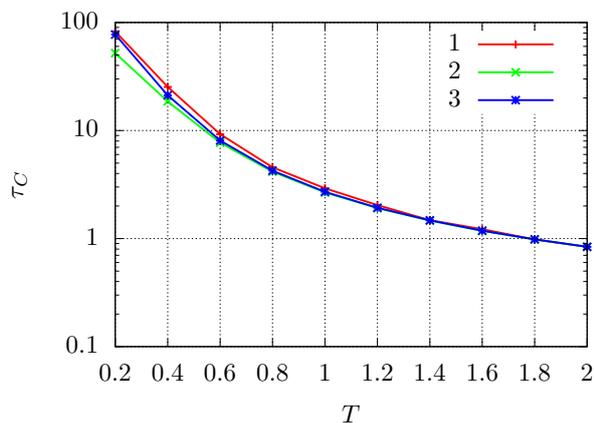
Рис. 7. Зависимости $\langle \cos \varphi \rangle (t)$ и $f(\varphi)$ при $T = 0.6$, $N = 4$ для первопринципных расчетов (кривые 1), для решения УФП при $\Theta(\phi) = \Theta_{\text{eq}}$ (кривые 2) и при $\Theta(\phi) = \Theta_{\Delta\phi}(\phi)$ (кривые 3) в различные моменты времени



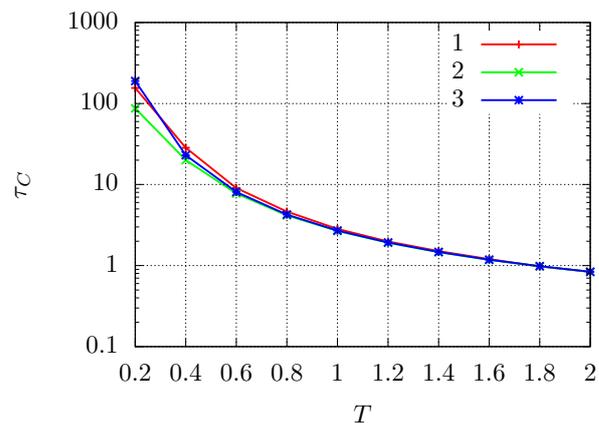
$N = 2$



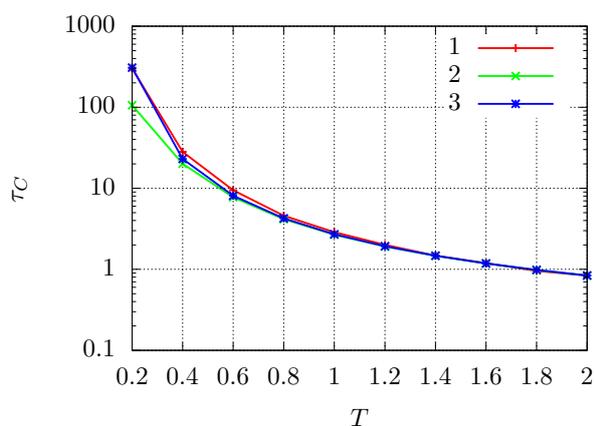
$N = 4$



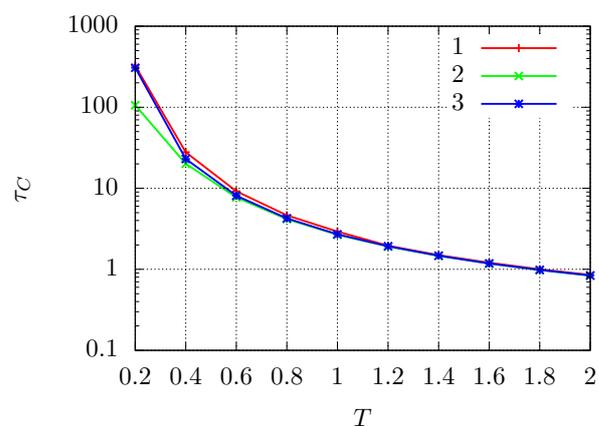
$N = 16$



$N = 32$



$N = 128$



$N = 256$

Рис. 8. Зависимости $\tau_C(T)$ для цепочек различной длины N для первопринципных расчетов (кривые 1), для решения УФП при $\Theta(\phi) = \Theta_{\text{eq}}$ (кривые 2) и при $\Theta(\phi) = \Theta_{\Delta\phi}(\phi)$ (кривые 3)

9. Заключение

Построенная бета–аппроксимация двухчастичной функции распределения приводит к самосогласованному одночастичному уравнению Фоккера–Планка. Его численное решение методом конечных разностей дает, в отличие от традиционного приближения мультипликативности, корректные значения энергии в стационарном случае (на больших временах) во всем диапазоне температур и длин цепочек фазовых осцилляторов.

Кроме того, для больших температур ($T > 1$) наблюдается хорошее совпадение эволюции решения (функции распределения) самосогласованного одночастичного уравнению Фоккера–Планка и первопринципных расчетов. Для малых температур времена релаксации, полученные из уравнения Фоккера–Планка, оказываются меньше времен релаксации, полученных из первопринципных расчетов. Это расхождение может быть значительно уменьшено за счет введения феноменологической зависимости эффективной температуры от одночастичной функции распределения.

Полученные результаты могут иметь большое значение при построении самосогласованных моделей систем с сильным локальным взаимодействием и температурными флуктуациями.

Список литературы

- [1] Ахиезер А.И., Пелетминский С.В. Методы статистической физики. Наука, 1977.
- [2] Martynov G.A. Classical Statistical Mechanics. — Springer Netherlands, 1997. — ISBN: 978-90-481-4927-8.
- [3] Хилков С.А., Иванов А.В., Зипунова Е.В. Моделирование сильно неравновесных процессов в магнетиках на основе уравнений физической кинетики. //Матем. моделирование. — 2016. — Т. 28. — С. 24–31.
Khilkov S.A., Ivanov A.V., Zipunova E.V. Numerical simulation of strongly nonequilibrium processes in magnets based on physical kinetics equations. //Mathematical Models and Computer Simulations. — 2016. — Т. 8. — № 6. — С. 703–708.
- [4] Kuramoto Y. Self-entrainment of a population of coupled non-linear oscillators. Int. Symp. on Mathematical Problems in Theoretical Physics (Lecture Notes in Physics) ed. H. Araki (Berlin: Springer) — 1975. — P.420.
- [5] Kuramoto Y. Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence. 1984, (Berlin: Springer).
- [6] Acebrón et al. The Kuramoto model: A simple paradigm for synchronization phenomena. //Rev. Mod. Phys. — 2005. — Vol. 77. — No. 1. — pp. 137–185.

- [7] Omel'chenko O. E. Coherence–incoherence patterns in a ring of non-locally coupled phase oscillators. //Nonlinearity V.26 (2013) pp. 2469–2498.
- [8] Климонтович Ю.Л. Статистическая теория открытых систем, М.:ТОО «Янус», 1995.
- [9] Иванов А.В., Хилков С.А. К вопросу о кинетическом моделировании цепочки фазовых осцилляторов. //Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. — 2016. — №130. — 20 с.
- [10] Coffey W. T., Kalmykov Yu. P., Waldron J. T. The Langevin equation: with applications to stochastic problems in physics, chemistry and electrical engineering; 2nd ed. World Scientific Series in Contemporary Chemical Physics. — Singapore: World Scientific, 2004.
- [11] Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории многих частиц в статистической физике. М.:Гостехиздат. — 1946.
- [12] Зубов В.И. Несимметризованные функции распределения и самосогласованная теория сильно ангармонических кристаллов. //Вестник РУДН, серия Физика. — 2003. — №11. — С.119–141.
- [13] Уленбек Дж., Форд Дж. Лекции по статистической механике. Мир, 1967.
- [14] Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971. — 553 с.
- [15] Иванов А.В., Хилков С.А. Библиотека aiwlib.
<https://github.com/aivn/aiwlib>