



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

Препринты ИПМ • Препринт № 130 за 2016 г.



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

Иванов А.В., Хилков С.А.

К вопросу о кинетическом
моделировании цепочки
фазовых осцилляторов

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Иванов А.В., Хилков С.А. К вопросу о кинетическом моделировании цепочки фазовых осцилляторов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 130. 20 с. doi:[10.20948/prepr-2016-130](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-130)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-130>

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

А.В. Иванов, С.А. Хилков

**К вопросу о кинетическом моделировании
цепочки фазовых осцилляторов**

Москва — 2016

Иванов А.В., Хилков С.А.

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

К вопросу о кинетическом моделировании цепочки фазовых осцилляторов

Одной из ключевых проблем физической кинетики является способ учета корреляций между сильно взаимодействующими частицами при замыкании цепочки Боголюбова. Эта проблема особенно остро встает при описании неравновесных процессов в жидкостях и конденсированных средах — в этом случае 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. Проведено сравнение между результатами прямого численного моделирования исходной задачи и результатами моделирования в различных приближениях физической кинетики. Показано, что приближение самосогласованных моментов, полученное из аппроксимации равновесной двухчастичной функции распределения, дает в некотором диапазоне температур удовлетворительные результаты как для равновесных значений энергии, так и для времен релаксации.

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

The problem of the phase oscillators chain kinetic simulation

One of the main problems of kinetic theory is the method of taking the correlations between intensively interacting particles into account on the BBGKY hierarchy truncation. This question becomes critical for the nonequilibrium processes in fluids and condensed matter. The classical multiplicative approximation which leads to the mean field approach often results in the qualitatively wrong behaviour of a system.

In this work the looped phase oscillators chain connected to the heat bath was studied. The interaction is limited to the nearest particles. Results for the direct numerical solution of the problem were compared to the outcome of simulations based on kinetic theory with different approximations. It is showed that Self-consistent moments approach provides acceptable values of the mean energy and the relaxation time for the certain interval of the temperatures.

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

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

1. Введение

В иерархии физических моделей различных явлений физическая кинетика занимает ключевое место, обеспечивая относительно строгий переход от первопринципных (гамильтоновых) систем уравнений к уравнениям сплошной среды. Традиционно уравнения физической кинетики выводятся на основе цепочки Боголюбова, при этом основной проблемой является замыкание цепочки, требующее явного выражения двухчастичной функции распределения через одночастичные функции. Простейшее приближение мультипликативности, основанное на предположении об отсутствии корреляций между ближайшими соседями и приводящее в итоге к приближению среднего (самосогласованного) поля, неадекватно описывает ситуацию в случае сильного локального взаимодействия между частицами системы, например в случае жидкостей, магнетиков и т.д.

Одним из решений является подход, развитый, в частности, в работах Мартынова для жидкостей [1], основанный на принципе ослабления многочастичных корреляций [2] и предположении о равновесном виде двухчастичных функций распределения. При проведении расчетов такое приближение имеет слишком высокую вычислительную сложность, однако сложность может быть уменьшена при разложении корреляционной функции в ряд Тейлора, что в итоге позволяет перейти к ряду самосогласованных моментов одночастичной функции распределения.

Подобный подход позволяет качественно улучшить кинетическое описание магнитных материалов [3], однако при этом учет косвенных корреляций оказывается слишком сложен из-за необходимости учета структуры кристаллической решетки.

В настоящей работе описанные приближения физической кинетики проверяются на простой модельной задаче о цепочке фазовых осцилляторов с локальным взаимодействием. Это частный случай модели Курамото [4, 5], к которой в последние десятилетия появился большой интерес с точки зрения образования различных когерентных структур [6, 7]. Приводится вывод основных уравнений физической кинетики, проводится сравнение решения исходной задачи и результатов, полученных в приближении мультипликативности и приближении самосогласованных моментов.

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 ближайšie 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.

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 [9]

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

Для такого уравнения можно записать равновесное решение

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

3. Цепочка Боголюбова

Для упрощения N -мерного уравнения (3) используем цепочку Боголюбова [10–12]. Введем одночастичную $f_i^{(1)}$ и двухчастичную 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. Результаты прямого численного моделирования

Исходная система может быть численно промоделирована напрямую на основе достаточно большого ансамбля цепочек. Мы использовали число реализаций (цепочек в ансамбле) $R = 1.024 \cdot 10^6 / N$, число частиц в цепочке $N = 2 \div 1024$, температуру $T = 0.2 \div 2J$, максимальное время моделирования $t_{\text{max}} = 200/\gamma$.

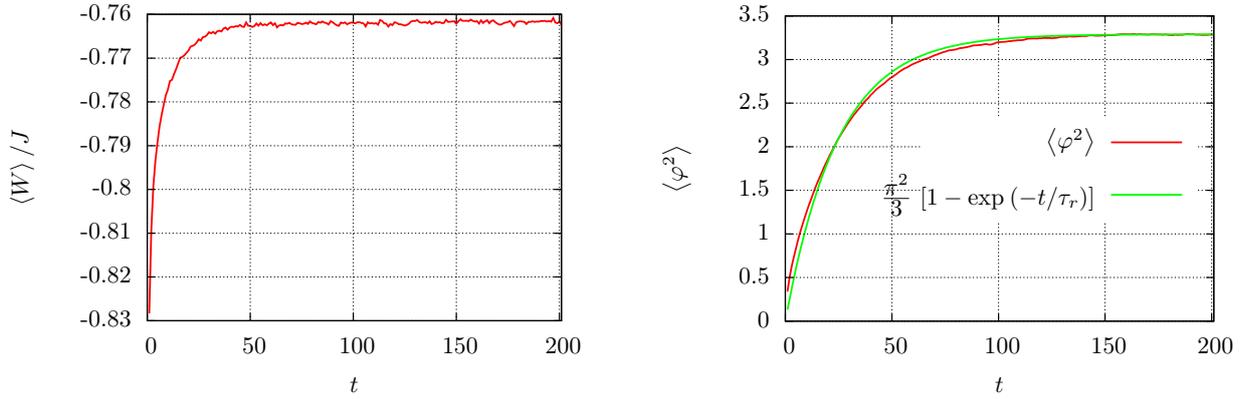


Рис. 1. Эволюция средней энергии $\langle W \rangle$ и второго момента $\langle \varphi^2 \rangle$ при прямом численном моделировании ансамбля из 1000 цепочек фазовых осцилляторов, по 1024 осциллятора в цепочке, температура $T = 0.4J$, коэффициент диссипации $\gamma = 1$, начальные условия $\varphi_i = 0 \forall i$

Для моделирования использовалось расщепление по физическим процессам, схема второго порядка точности «предиктор–корректор» для описания влияния сил и метод стохастического аналога [13, 14] для описания диффузии:

$$\begin{aligned}\varphi_i^{n+\frac{1}{2}} &= \varphi_i^n - \frac{h}{2}\gamma \frac{\partial W}{\partial \varphi_i}(\varphi_i^n), \\ \varphi_i^{n+1} &= \varphi_i^n - h\gamma \frac{\partial W}{\partial \varphi_i}(\varphi_i^{n+\frac{1}{2}}) + \sqrt{2h\gamma T}\xi,\end{aligned}$$

где φ_i^n — состояние i -го фазового осциллятора в момент времени $t = nh$, h — шаг интегрирования по времени, ξ — случайный источник с нормальным распределением, единичной дисперсией и нулевым математическим ожиданием. Для всех расчетов $\gamma = 1$, $h = 10^{-2}/\gamma$.

Моделирование, управление расчетами, анализ и визуализация результатов проводились при помощи программного комплекса созданного специально для данной задачи на языках C++-11 и Python-2.7 под OS Linux на основе библиотеки aiwlib [15].

На рис. 1 показана эволюция энергии $\langle W \rangle(t)$ и второго момента $\langle \varphi^2 \rangle(t)$. Эволюция двухчастичной функции распределения показана на рис. 2. Хорошо видно, что за время $\sim 1/\gamma$ энергия выходит практически на равновесное значение (начальная энергия $\langle W \rangle_{t=0} = -1$), но процесс релаксации на этом не заканчивается. При изучении эволюции двухчастичной функции распределения (рис. 2) хорошо заметна диффузия вдоль главной диагонали фазового пространства $\varphi_i = \varphi_j$. За счет этого процесса одночастичная функция распределения для всего ансамбля (рис. 3) релаксирует в итоге к постоянному значению $f^{(1)} = 1/2\pi$.

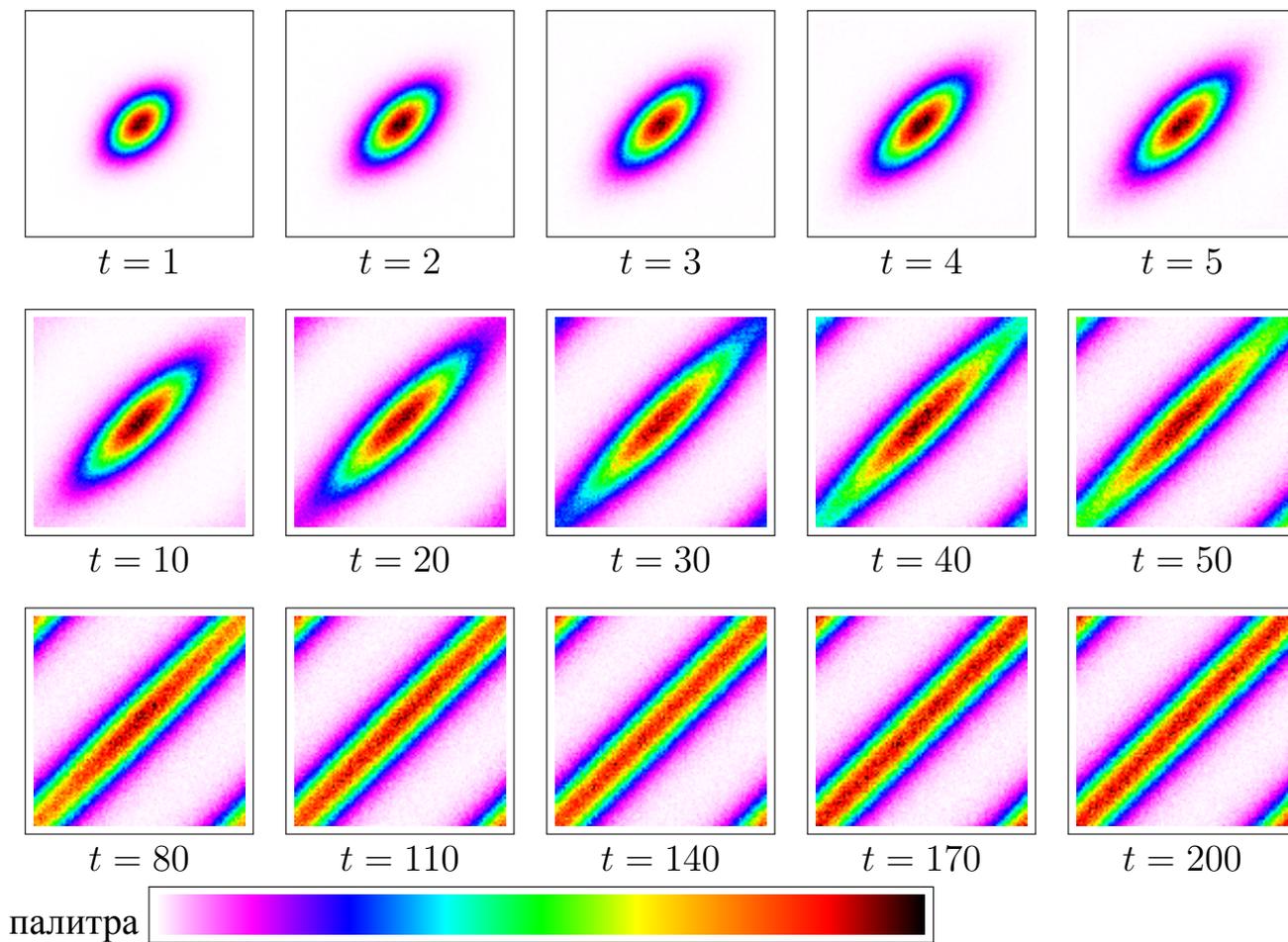


Рис. 2. Эволюция двухчастичной функции распределения $f^{(2)}(\varphi_1, \varphi_2, t)$ для той же системы, что и на рис. 1

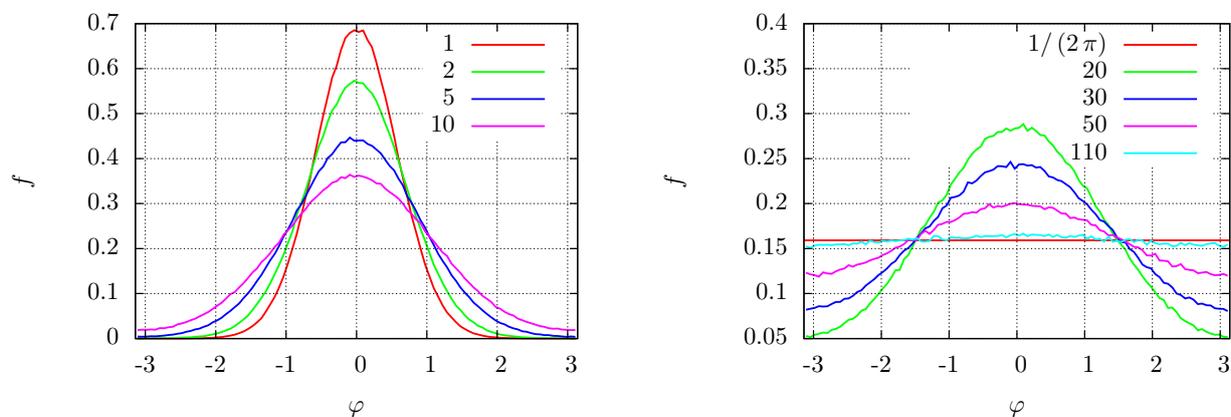


Рис. 3. Эволюция одночастичной функции распределения $f^{(1)}(\varphi, t)$ для той же системы, что и на рис. 1

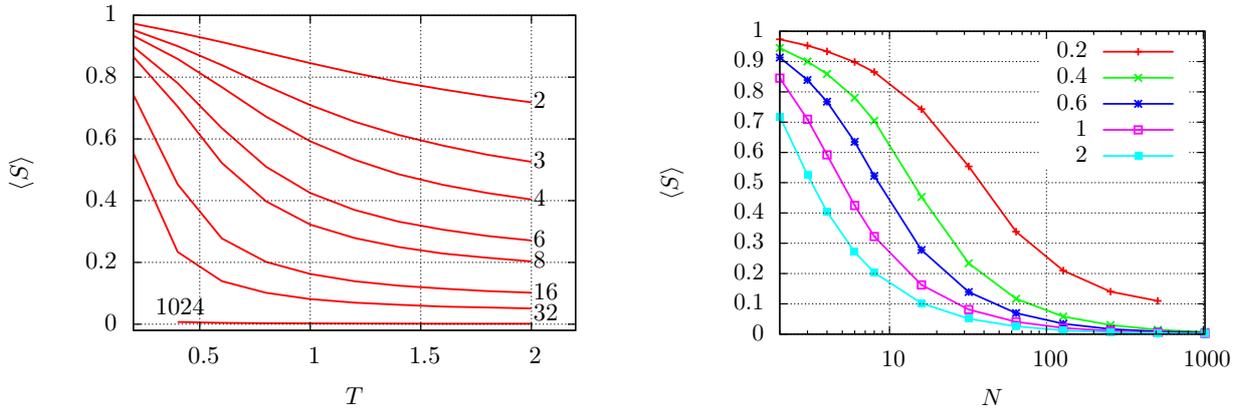


Рис. 4. Зависимость установившегося значения момента $\langle S \rangle$ от температуры и длины цепочки

Представляет большой интерес равновесное значение спонтанной «намагниченности» в цепочке. Мы можем ввести величину

$$\langle S \rangle = \frac{1}{R} \sum_{l=1}^R \left[\left(\frac{1}{R} \sum_{i=1}^R \sin \varphi_{il} \right)^2 + \left(\frac{1}{R} \sum_{i=1}^R \cos \varphi_{il} \right)^2 \right],$$

где l — номер реализации. Величина $\langle S \rangle$ нечувствительна к диффузии вдоль главной диагонали фазового пространства, равна единице для ансамбля, состоящего из цепочек с одинаковым значением φ вдоль цепочки и нулю, если φ вдоль всех цепочек распределены равномерно. Зависимость установившегося значения $\langle S \rangle(N, T)$ приведена на рис. 4. Для $N = 1024$ установившееся значение $\langle S \rangle = 0 \forall T$, т.е. для таких цепочек спонтанная «намагниченность» отсутствует.

Процесс диффузии вдоль главной диагонали фазового пространства хорошо изучать на основе эволюции второго момента $\langle \varphi^2 \rangle$, который в состоянии равновесия равен

$$\langle \varphi^2 \rangle_{\text{eq}} = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\varphi^2 d\varphi}{2\pi} = \frac{\pi^2}{3}.$$

Эволюцию второго момента можно аппроксимировать функцией (рис. 1)

$$\langle \varphi^2 \rangle \approx \frac{\pi^2}{3} \left[1 - \exp \left(-\frac{t}{\tau_r} \right) \right],$$

где τ_r — характерное время релаксации.

Зависимости времени релаксации $\tau_r(N, T)$ и установившейся средней энергии $\langle W \rangle(N, T)$ приведены на рис. 5 и 6. Хорошо видно, что для каждого значения температуры существует такая критическая длина цепочки $N_{\text{cr}}(T)$, выше которой энергия $\langle W \rangle$ и время релаксации τ_r выходят на насыщение и перестают меняться.

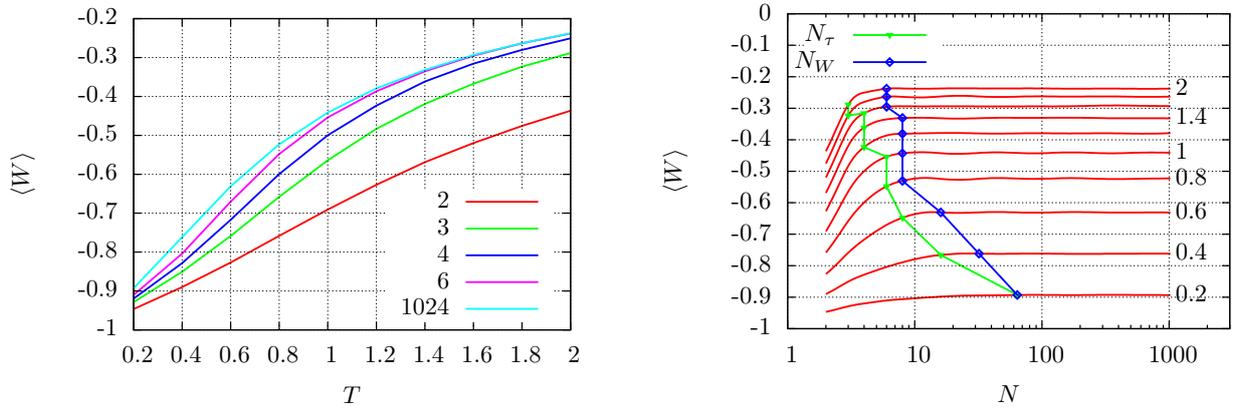


Рис. 5. Зависимость установившегося значения средней энергии $\langle W \rangle$ от температуры и длины цепочки, показаны критические длины цепочки N_W и N_τ

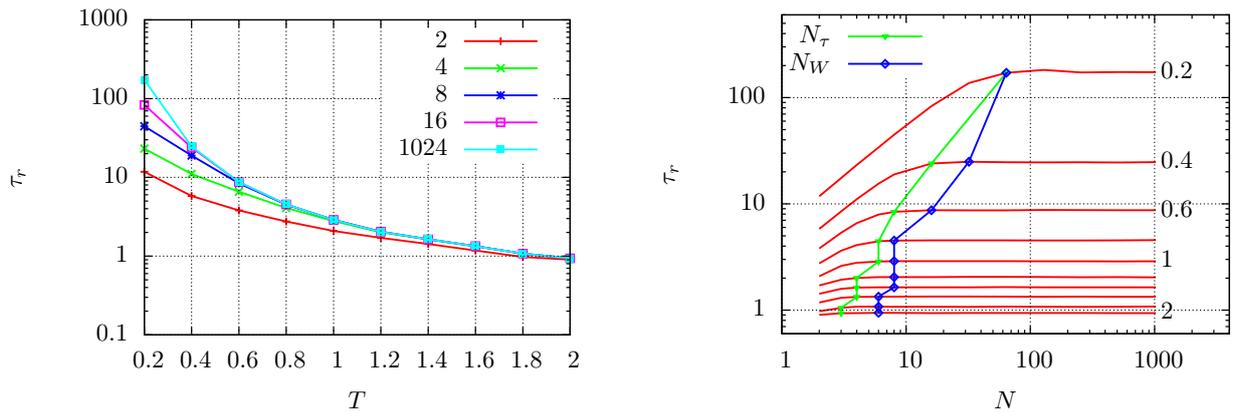


Рис. 6. Зависимость времени релаксации τ_r , полученного на основе эволюции второго момента $\langle \varphi^2 \rangle$ от температуры и длины цепочки, показаны критические длины цепочки N_W и N_τ

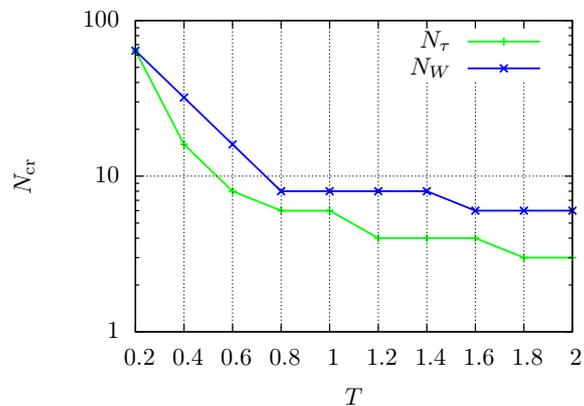


Рис. 7. Зависимость от температуры критических длин цепочки N_W и N_τ , полученных на основе энергии и времени релаксации

Критические длины, определяемые на основе энергии и времени релаксации, несколько различаются, мы будем обозначать их как N_W и N_τ соответственно, рис. 7.

Появление критической длины связано с радиусом корреляции в цепочке, на расстояниях больше которого фазовые осцилляторы можно считать независимыми, в результате цепочка оказывается условно состоящей из нескольких независимых отрезков. Радиус корреляции уменьшается по мере роста температуры.

5. Приближение мультипликативности

Для замыкания цепочки Болюбова необходимо явно выразить двухчастичную функцию распределения через одночастичные. Простейшим приближением является т.н. приближение мультипликативности, фактически означающее отсутствие корреляций между ближайшими соседями

$$f_{i,j}^{(2)}(\varphi_i, \varphi_j, t) = f_i^{(1)}(\varphi_i, t) \cdot f_j^{(1)}(\varphi_j, t).$$

Тогда уравнение (5) принимает вид

$$\frac{\partial f(\varphi, t)}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[T \frac{\partial f}{\partial \varphi} + 2J \left(\sin \varphi \langle \cos \varphi \rangle - \cos \varphi \langle \sin \varphi \rangle \right) f_i^{(1)} \right]. \quad (6)$$

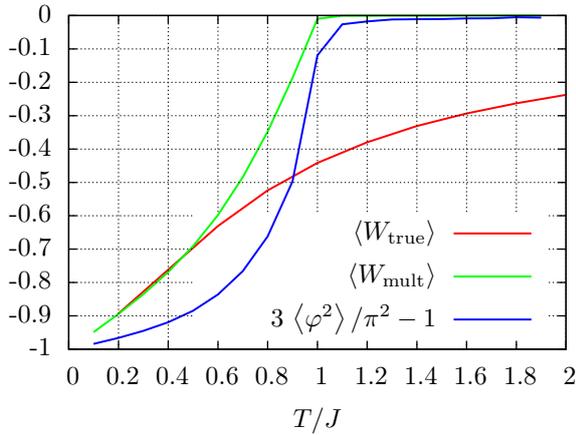
Энергия системы в расчете на одну частицу составит

$$\langle W \rangle = -J \int_{-\pi}^{\pi} \cos(\varphi - \varphi') f^{(2)} d\varphi d\varphi' = -J \left(\langle \cos \varphi \rangle^2 + \langle \sin \varphi \rangle^2 \right).$$

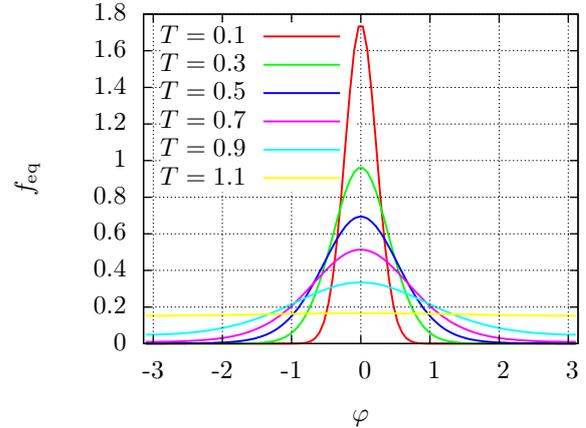
Для моделирования (6) использовался метод стохастического аналога [13, 14] и расщепление по физическим процессам. Моделирование проводилось на массиве траекторий, для каждой траектории решалось уравнение движения со случайным источником:

$$\begin{aligned} \varphi_i^{n+\frac{1}{2}} &= \varphi_i^n - h\gamma J \left[\sin \varphi_i^n \langle \cos \varphi^n \rangle - \cos \varphi_i^n \langle \sin \varphi^n \rangle \right], \\ \varphi_i^{n+1} &= \varphi_i^n - 2h\gamma J \left[\sin \varphi_i^{n+\frac{1}{2}} \left\langle \cos \varphi^{n+\frac{1}{2}} \right\rangle - \cos \varphi_i^{n+\frac{1}{2}} \left\langle \sin \varphi^{n+\frac{1}{2}} \right\rangle \right] + \sqrt{2h\gamma T} \xi, \end{aligned}$$

где φ_i^n — состояние i -й траектории в момент времени $t = nh$, h — шаг интегрирования по времени, $\langle \sin \varphi^{n+\frac{1}{2}} \rangle$ и $\langle \cos \varphi^{n+\frac{1}{2}} \rangle$ — моменты, построенные на основе массива траекторий, отвечающего моменту времени $t = nh$, ξ — случайный источник с нормальным распределением, единичной дисперсией и нулевым математическим ожиданием. Функция распределения восстанавливалась на основе массива траекторий.



(a)



(б)

Рис. 8. Зависимости от температуры T равновесной энергии $\langle W_{\text{true}} \rangle$, полученной при решении исходной задачи и равновесной энергии $\langle W_{\text{mult}} \rangle$, второго момента $\langle \varphi^2 \rangle$ (рис. а) и равновесные функции распределения f_{eq} (рис. б), полученные в приближении мультипликативности для различных температур $T/J = 0.1 \dots 1.1$. Хорошо виден фазовый переход при критической температуре $T_c \approx J$

Результаты численного моделирования уравнения (6) приведены на рисунке 8. Хорошо виден фазовый переход при температуре $T_c \approx J$, отсутствующий при моделировании исходной задачи. При температуре ниже критической в приближении мультипликативности система имеет спонтанную «намагниченность» (выраженный максимум функции распределения), при температуре выше критической спонтанная «намагниченность» исчезает, но энергия становится равной нулю.

Такое поведение качественно отличается от результатов, полученных при решении исходной задачи. Как и следовало ожидать, приближение мультипликативности в данном случае оказывается некорректным, поскольку корреляции между соседними осцилляторами играют ключевую роль. Например, в состоянии равновесия (3) все одночастичные функции равны константе $f_i^{(1)} = 1/2\pi \forall i$, однако двухчастичные функции распределения константами отнюдь не являются.

Уравнение (6) отвечает совершенно иной системе со взаимодействием типа среднее поле

$$W = -\frac{J}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \cos(\varphi_i - \varphi_j),$$

изучение которой выходит за рамки данной работы.

6. Приближение самосогласованных моментов

Согласно принципу ослабления многочастичных корреляций [2], за сравнительно небольшое время устанавливаются функциональные зависимости многочастичных функций распределения от одночастичных функций. Строгий вывод этой зависимости весьма сложен, однако можно построить некоторую аппроксимацию из общих соображений.

Во первых, из соображений симметрии задачи и размерности, искомая зависимость должна содержать лишь отношения энергии связей между частицами к температуре системы $w_{i,i+1} = -J \cos(\varphi_{i+1} - \varphi_i)/T$. Во вторых, на больших временах искомая зависимость должна соответствовать равновесной N -частичной функции распределения (3). Тогда можно предположить, что

$$f_{i,i+1}^{(2)}(\varphi_i, \varphi_{i+1}, t) \approx \frac{f_i^{(1)}(\varphi_i, t) f_{i+1}^{(1)}(\varphi_{i+1}, t) e^{J \cos(\varphi_i - \varphi_{i+1})/T}}{\int_{-\pi}^{\pi} f_i^{(1)}(\varphi_i, t) f_{i+1}^{(1)}(\varphi_{i+1}, t) e^{J \cos(\varphi_i - \varphi_{i+1})/T} d\varphi_i d\varphi_{i+1}}.$$

Такое приближение отвечает случаю при длине цепочки $N \rightarrow \infty$, однако можно рассмотреть другой предельный случай при $N = 2$, поскольку при этом между частицами действует две эквивалентные связи

$$f_{N=2}^{(2)}(\varphi_1, \varphi_2, t) \approx \frac{f_1^{(1)}(\varphi_1, t) f_2^{(1)}(\varphi_2, t) e^{2J \cos(\varphi_1 - \varphi_2)/T}}{\int_{-\pi}^{\pi} f_1^{(1)}(\varphi_1, t) f_2^{(1)}(\varphi_2, t) e^{2J \cos(\varphi_1 - \varphi_2)/T} d\varphi_1 d\varphi_2},$$

что фактически отличается от случая при $N \rightarrow \infty$ лишь уменьшенной вдвое температурой, при этом такое приближение является точным на временах $t \gg 1/\gamma$, поскольку двухчастичная система априори не требует учета косвенных корреляций.

Тогда одночастичное уравнение Фоккера–Планка (5) принимает вид

$$\frac{\partial f(\varphi, t)}{\partial t} = \gamma T \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\frac{\partial f}{\partial \varphi} - 2 \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \varphi} f \right], \quad (7)$$

где \mathcal{G} — самосогласованный потенциал, при $N \rightarrow \infty$

$$\mathcal{G} = \frac{\int_{-\pi}^{\pi} f(\varphi', t) e^{J \cos(\varphi - \varphi')/T} d\varphi'}{\int_{-\pi}^{\pi} f(\varphi, t) f(\varphi', t) e^{J \cos(\varphi - \varphi')/T} d\varphi d\varphi'}.$$

К сожалению, такая аппроксимация двухчастичной функции распределения квадратично увеличивает вычислительную сложность при численном решении

одночастичных уравнений Фоккера–Планка. Разложим экспоненту в ряд Тейлора по степеням показателя

$$e^{J \cos(\varphi - \varphi')/T} \approx \sum_{n=0}^K \frac{J^n \cos^n(\varphi - \varphi')}{n! T^n} = \sum_{n=0}^K \frac{J^n}{T^n} \sum_{l=0}^n \frac{\cos^l \varphi \cos^l \varphi' \sin^{n-l} \varphi \sin^{n-l} \varphi'}{l!(n-l)!}.$$

Введем тригонометрический момент одночастичной функции распределения f как

$$\langle s_k^l \rangle \equiv \int_{-\pi}^{\pi} f(\varphi, t) \cos^k \varphi \sin^l \varphi d\varphi.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \varphi} &= -\frac{J}{T} \cdot \frac{\int_{-\pi}^{\pi} \sin(\varphi - \varphi') f(\varphi', t) e^{J \cos(\varphi - \varphi')/T} d\varphi_i}{\int_{-\pi}^{\pi} f(\varphi, t) f(\varphi', t) e^{J \cos(\varphi - \varphi')/T} d\varphi d\varphi'} \approx \\ &\approx -\sum_{n=0}^K \frac{J^{n+1}}{T^{n+1}} \sum_{l=0}^n \frac{1}{l!(n-l)!} \left[\cos^l \varphi \sin^{n-l+1} \varphi \langle s_{l+1}^{n-l} \rangle - \right. \\ &\quad \left. - \cos^{l+1} \varphi \sin^{n-l} \varphi \langle s_l^{n-l+1} \rangle \right] / \sum_{n=0}^K \frac{J^n}{T^n} \sum_{l=0}^n \frac{\langle s_l^{n-l} \rangle^2}{l!(n-l)!}, \end{aligned}$$

энергия системы в расчете на одну частицу

$$\langle W \rangle \approx -\sum_{n=0}^K \frac{J^{n+1}}{T^n} \sum_{l=0}^n \frac{\langle s_{l+1}^{n-l} \rangle^2 + \langle s_l^{n-l+1} \rangle^2}{l!(n-l)!} / \sum_{n=0}^K \frac{J^n}{T^n} \sum_{l=0}^n \frac{\langle s_l^{n-l} \rangle^2}{l!(n-l)!}. \quad (8)$$

В случае учета одного члена разложения (при $K = 0$) описанное приближение переходит в мультипликативное.

Такая аппроксимация $f^{(2)}$ позволяет обойтись однократно рассчитываемыми на временном шаге моментами вида $\langle s_k^l \rangle$ и незначительно увеличивает вычислительную сложность алгоритма.

Рассмотрим «парамагнитный» случай $f = 1/2\pi$, отвечающий состоянию установившегося равновесия. Как известно,*

$$\int_0^{\pi/2} \sin^{\mu-1} \varphi \cos^{\nu-1} \varphi d\varphi = \frac{1}{2} B\left(\frac{\mu}{2}, \frac{\nu}{2}\right), \quad \Re\mu > 0, \quad \Re\nu > 0, \quad B(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}.$$

*Градштейн И.С., Рыжик И.М. «Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений», М.:1962, стр. 383, №3.621.5

Тогда

$$\langle \varsigma_k^l \rangle = \begin{cases} \frac{1}{\pi} B\left(\frac{k+1}{2}, \frac{l+1}{2}\right), & \text{при } k = 2n \text{ и } l = 2m; \\ 0, & \text{при } k = 2n + 1 \text{ или } l = 2m + 1. \end{cases}$$

Поскольку

$$\Gamma(n) = (n-1)!, \quad \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{(2n)!}{4^n n!} \sqrt{\pi},$$

получаем для четных k и l

$$\langle \varsigma_k^l \rangle = \frac{k! l!}{2^{l+k} (k/2)! (l/2)! ((k+l)/2)!}. \quad (9)$$

Сравнение аналитического выражения для энергии (8) с моментами вида (9) и энергии равновесного состояния, полученной при непосредственном численном решении системы (1), приведено на рис. 9 (а) для двух предельных случаев при длинах цепочки $N = 2$ и $N \rightarrow \infty$. Хорошее совпадение говорит о том, что выбранная аппроксимация двухчастичной функции распределения (7) является корректной при условии, что в состоянии равновесия решение уравнение Фоккера–Планка релаксирует к $f_{\text{eq}} = 1/2\pi$.

Необходимое число членов разложения K для обеспечения различных уровней ошибки (разницы между аналитическим и численным значениями энергии) приведено на рис. 9 (б). При уменьшении температуры число членов разложения ожидаемо растет.

Для численного моделирования (7) использовался метод стохастического аналога [13, 14] и расщепление по физическим процессам. Моделирование проводилось на массиве траекторий, для каждой траектории решалось уравнение движения со случайным источником:

$$\begin{aligned} \varphi_i^{n+\frac{1}{2}} &= \varphi_i^n - h\gamma \frac{\partial \mathcal{G}^n}{\partial \varphi}, \\ \varphi_i^{n+1} &= \varphi_i^n - 2h\gamma \frac{\partial \mathcal{G}^{n+\frac{1}{2}}}{\partial \varphi} + \sqrt{2h\gamma T} \xi, \end{aligned}$$

где φ_i^n — состояние i -той траектории в момент времени $t = nh$, h — шаг интегрирования по времени, $\frac{\partial \mathcal{G}^n}{\partial \varphi}$ — разложение в ряд производной потенциала \mathcal{G} , построенное из моментов $\langle \varsigma \rangle$, вычисленных на основе массива траекторий, отвечающих моменту времени $t = nh$, ξ — случайный источник с нормальным распределением, единичной дисперсией и нулевым математическим ожиданием. Функция распределения восстанавливалась на основе массива траекторий.

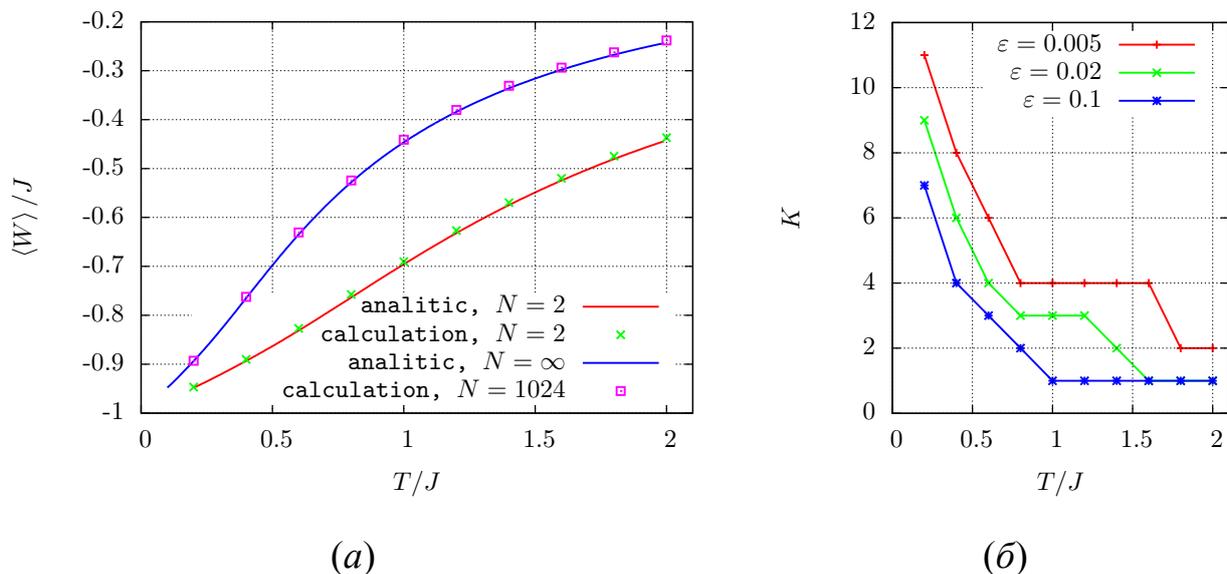


Рис. 9. Зависимость от температуры аналитического выражения для энергии $\langle W_{\text{analytic}} \rangle$ (8) с моментами вида (9) при числе членов разложения $K = 20$ и энергии равновесного состояния $\langle W_{\text{calculation}} \rangle$, полученной при непосредственном численном решении системы (1) для двух предельных случаев — систем с $N = 2$ и $N = 1024$ (рис. а); зависимость числа членов разложения K от температуры для обеспечения различных уровней ошибки $\varepsilon = |\langle W_{\text{analytic}} \rangle - \langle W_{\text{calculation}} \rangle|$ при $N = 1024$ (рис. б)

Сравнение результатов прямого численного моделирования исходной задачи и результатов моделирования уравнения Фоккера–Планка в приближении самосогласованных моментов при длинах цепочки $N = 2$ и $N \rightarrow \infty$ приведено на рис. 10 и 11. Равновесные значения энергии $\langle W \rangle (T)$ и времена релаксации $\tau_r(T)$ второго момента $\langle \varphi^2 \rangle$ хорошо совпадают во всем диапазоне температур для $N = 2$. Для длинных цепочек при критической температуре $T \approx J$ при решении уравнения Фоккера–Планка, как и в приближении мультипликативности, наблюдается фазовый переход. В отличие от приближения мультипликативности, выше температуры перехода наблюдается хорошее совпадение равновесной энергии и удовлетворительное совпадение времени релаксации $\tau_r(T)$.

На рисунке 12 приведено сравнение эволюции одночастичных функций распределения при $N = 2$ и $N \rightarrow \infty$, полученных при прямом численном моделировании исходной задачи, моделировании уравнения Фоккера–Планка, в приближении самосогласованных моментов и приближении мультипликативности, при температуре $T = 1.2J$. Видно, что приближение самосогласованных моментов обеспечивает хорошее совпадение с решением исходной задачи при $N = 2$ и качественное совпадение при $N \rightarrow \infty$, приближение мультипликативности за счет больших времен релаксации отличается от решения исходной задачи значительно сильнее.

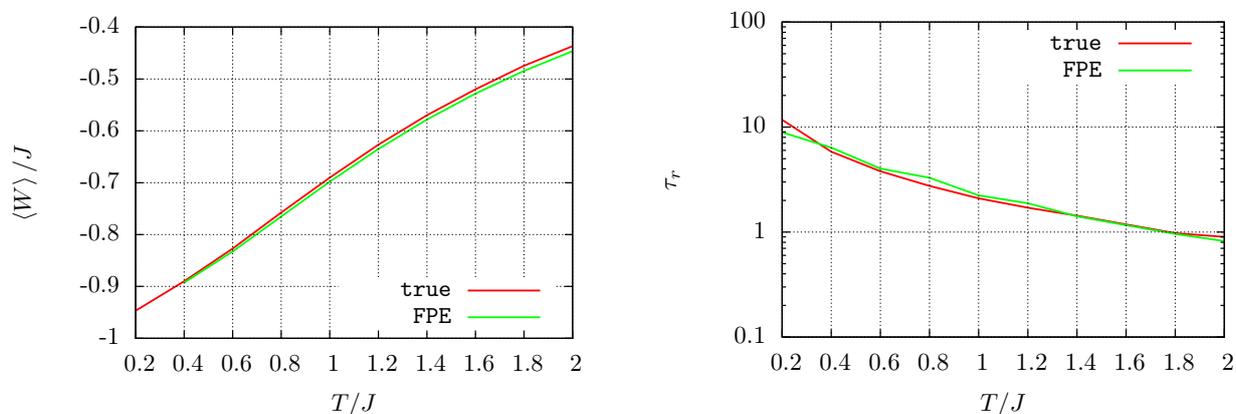


Рис. 10. Сравнение результатов прямого численного моделирования исходной задачи (true) и результатов моделирования уравнения Фоккера–Планка (FPE) в приближении самосогласованных моментов при длине цепочки $N = 2$. Равновесная энергия и время релаксации τ_r второго момента $\langle \varphi^2 \rangle$ близки во всем диапазоне температур

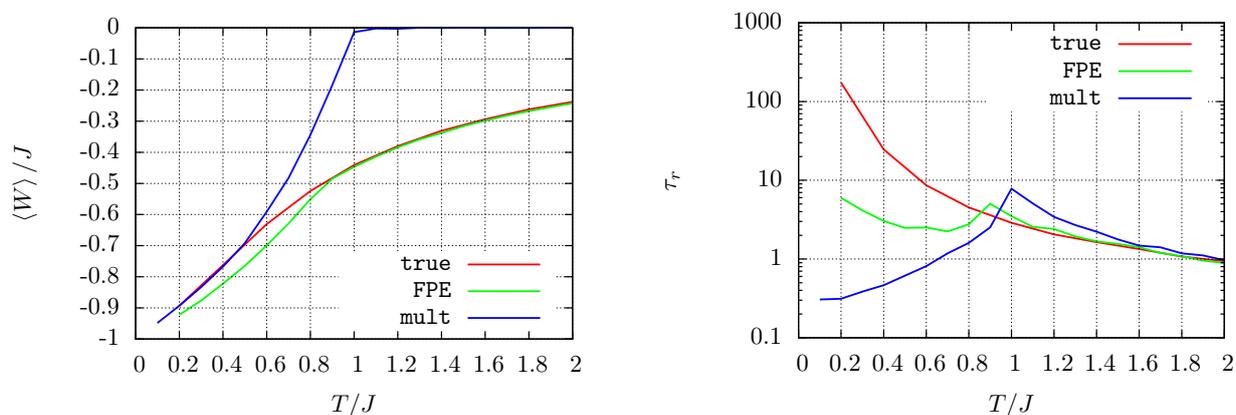


Рис. 11. Сравнение результатов прямого численного моделирования исходной задачи (true), результатов моделирования уравнения Фоккера–Планка в приближении самосогласованных моментов (FPE) и приближении мультипликативности (mult) при длине цепочки $N \rightarrow \infty$. Равновесная энергия и время релаксации τ_r второго момента $\langle \varphi^2 \rangle$ близки для приближения самосогласованных моментов при $T \geq J$, при $T < J$ расхождение связано с возникновением фазового перехода, отсутствующего в решении исходной задачи

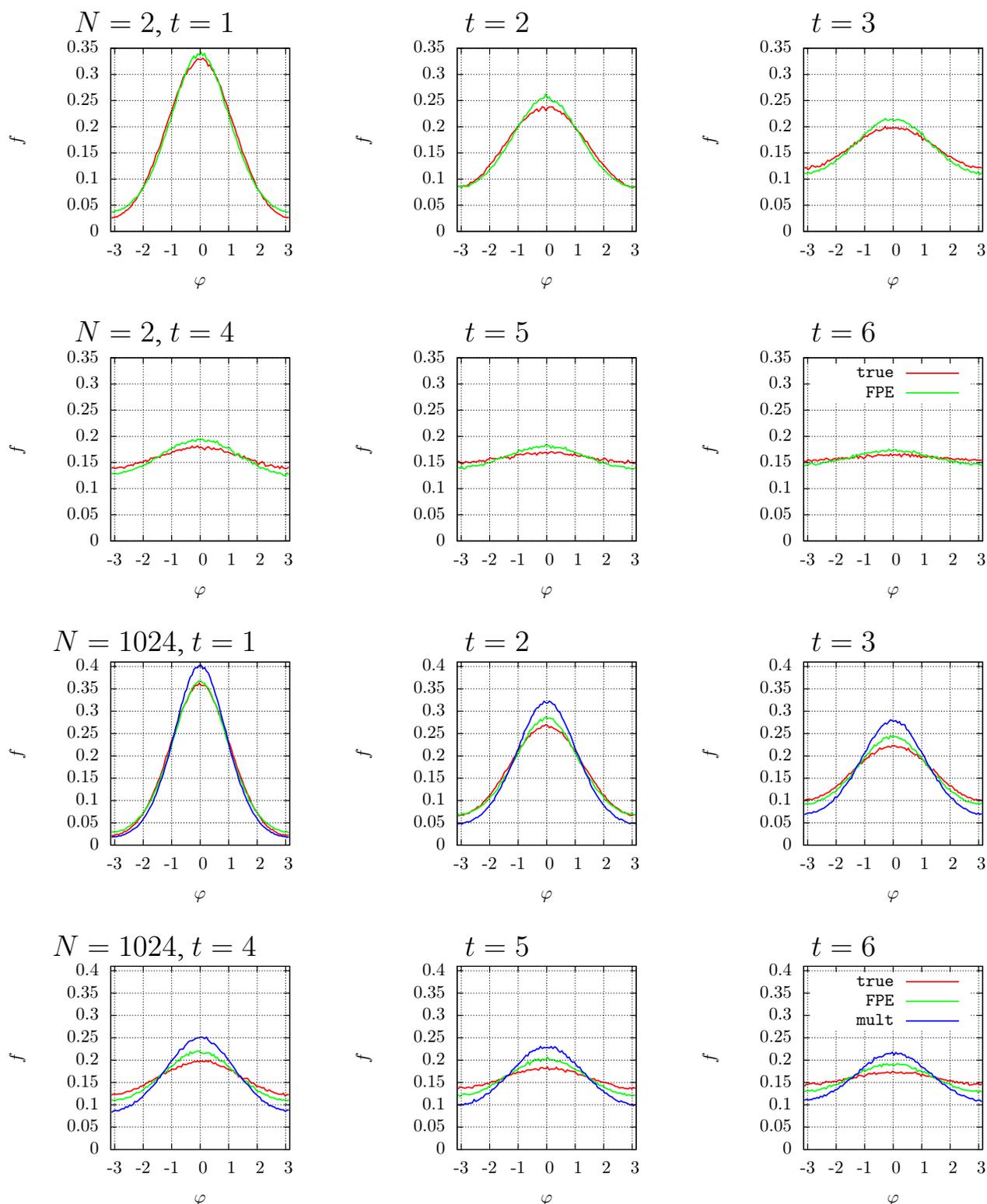


Рис. 12. Сравнение эволюции одночастичных функций распределения, полученных при прямом численном моделировании исходной задачи (true), моделировании уравнения Фоккера–Планка в приближении самосогласованных моментов (FPE) и приближении мультипликативности (mult) для 10^6 траекторий и двенадцати членов разложения, длинах цепочки $N = 2$ и $N = 1024$, температуре $T = 1.2J$

7. Заключение

При прямом моделировании исходной задачи о замкнутой в кольцо цепочке фазовых осцилляторов в термостате со взаимодействием только между ближайшими соседями удастся выделить эффекты, связанные с диффузией вдоль главной диагонали фазового пространства. Большой интерес представляет появление критической длины цепочки, выше которой наблюдается насыщение равновесной энергии и времен релаксации.

Приближение мультипликативности, традиционно применяемое для замыкания цепочки Боголюбова при кинетическом описании, дает в итоге качественно неверные результаты во всем диапазоне температур — в системе возникает фазовый переход, отсутствующий в исходной задаче, существенно отличаются равновесная энергия и времена релаксации.

Приближение самосогласованных моментов, получаемое как разложение равновесной аппроксимации двухчастичной функции в ряд Тейлора, как и ожидалось, дает хорошее согласие с решением исходной задачи в предельном случае цепочек, состоящих из двух фазовых осцилляторов. В случае длинных цепочек приближение самосогласованных моментов (как и приближение мультипликативности) приводит к возникновению фазового перехода, но при этом в области выше критической температуры наблюдается хорошее совпадение с решением исходной задачи.

Для подавления возникновения фазового перехода, как и для описания цепочек промежуточной длины $2 < N < \infty$, необходим учет косвенных корреляций между соседними фазовыми осцилляторами при построении аппроксимации двухчастичной функции распределения.

Список литературы

- [1] Martynov G. A. Classical Statistical Mechanics. — Springer Netherlands, 1997. — ISBN: 978-90-481-4927-8.
- [2] Ахиезер А.И., Пелетминский С.В. Методы статистической физики. Наука, 1977.
- [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.
- [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] O. E. Omel'chenko. 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, ТОО «Янус» М.:1995
- [9] 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.
- [10] Боголюбов, Н.Н. Проблемы динамической теории многих частиц в статистической физике. М.:1946. — Гостехиздат.
- [11] Зубов В.И. Несимметризованные функции распределения и самосогласованная теория сильно ангармонических кристаллов. Вестник РУДН, серия Физика. — 2003. — №11. — С.119–141.
- [12] Уленбек Дж., Форд Дж. Лекции по статистической механике. Мир, 1967.
- [13] Змиевская Г.И. Численные стохастические модели неравновесных процессов. //Математическое моделирование. — 1996. — Т.8. — №11. — С.3–40.
- [14] Змиевская Г.И. Стохастические аналоги неравновесных столкновительных процессов. //Физика плазмы. — 1997. — Т.23. — №4. — С.45-60.
- [15] Иванов А.В., Хилков С.А. и др. Библиотека aiwlib. <https://github.com/aivn/aiwlib>

Содержание

1	Введение	3
2	Исходная модель	3
3	Цепочка Боголюбова	4
4	Результаты прямого численного моделирования	5
5	Приближение мультипликативности	10
6	Приближение самосогласованных моментов	12
7	Заключение	18
	Список литературы	18