Письма в ЖТФ, том 20, вып. 16 26 августа 1994 г.

01

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛНОСТЬЮ ИЗОЛИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

О.И.Горский, В.А.Дзензерский, Ю.П.Кучугурный

В открытых неравновесных системах могут происходить процессы самоорганизации, приводящие к образованию динамических структур [1], что связано с обменом энергией и (или) веществом между системой и средой. Могут ли происходить аналогичные процессы в изолированных системах? Равновесным состоянием такой системы является полностью хаотическое больцмановское состояние, но в процессе перехода к нему может происходить расслоение системы на подсистемы, а взаимодействие между ними может привести к структурированию подсистем.

В настоящей работе рассматривается эволюция полностью изолированной системы (ПИС) классических взаимодейстующих частиц на основе предположения о том, что в процессе перехода к расновесному состоянию система может демонстрировать большое число типов поведения, а в полностью изолированной системе возможно стационарное состояние, отличное от больцмановского. Согласно [1,2], эволюция в полностью изолированной системе приводит к полной потере устойчивости состояния к внутренним флуктуациям с ростом энтропии, либо к увеличению устойчивости состояния к внутренним флуктуациям с уменьшением свободной энергии вплоть до минимума. Существенно, что условная вероятность описания эволюции ПИС оказывается достаточно велика, если в системе устанавливается больцмановское распределение числа частиц по полной энергии. Если в ПИС устанавливается функция распределения, отличная от больцмановской, то удается наблюдать некоторые особенности поведения системы. В [3] методом молекулярной динамики показано, что в энергоизолированной кулоновской плазме устанавливается стационарное небольцмановское состояние, в котором рекомбинационные процессы идут с очень малой скоростью по сравнению с равновесной теорией. Состояние описывается небольцмановской функцией распределения по полной энергии, что по крайней мере не противоречит нашей гипотезе. Следует отметить, что в [4] результаты [3] объясняют-

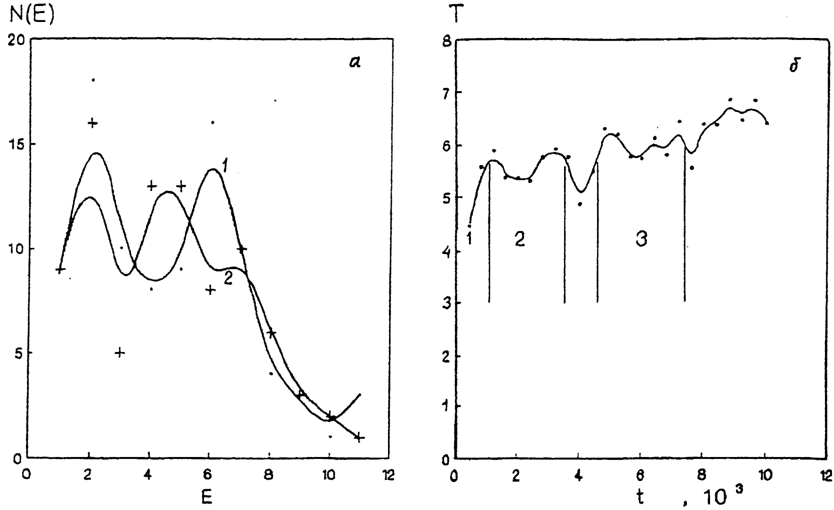

Рис. 1.
а) Квазиодномерный кластер (для случая $N_1 \cdot N_2 = 3 \cdot 33$). Зависимость функции распределения $N(E)$ от полной энергии E. Кривые *1* и *2* снимались для участка *3* с интервалом 2000 временных циклов. б) Зависимость средней кинетической энергии от времени $T(t)$. Область *1* определяется упругими связями МД частиц, области *2*, *3* характеризуются установившимся значением средней кинетической энергии и небольшими значениями флуктуаций.

ся некритическим числом частиц в системе. ПИС представляет собой систему, состоящую из N частиц, свободных от каких-либо ограничений на перемещения. В качестве нее выбирался квазиодномерный кластер, первоначально заданный в виде прямоугольной плоской решетки размером $N_1 \cdot N_2 = N$, где $N_1 \ll N_2$, со случайным расположением частиц вблизи квадратной решетки [5]; потенциальная энергия взаимодействия имеет вид (модифицированный потенциал Ленарда–Джонса):

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon\Big(A_1\,(\sigma/r_{ij})^{12} - A_2\,(\sigma/r_{ij})^{6}\Big), \qquad (1)$$

где A_1, A_2 — некоторые коэффициенты (см. далее), ε, σ — параметры, r_{ij} — расстояние между взаимодействующими частицами.

Для интегрирования уравнений движения используется алгоритм Верле, все физические величины представляются в безразмерной форме [5]. Поскольку периодические граничные условия не использовались, важно было добиться конфигурационной устойчивости. Это достигалось выбором коэффициентов A_1, A_2. При $A_1 = 5$, $A_2 = 1$ статистический разлет частиц составляет 1.5%. Начальные скорости частиц V_1 выбирались равными нулю. В такой системе устанавливается функция распределения, отличная

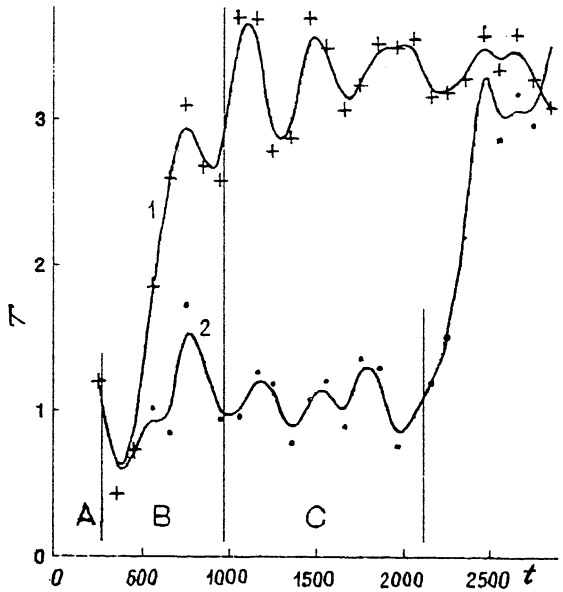

Рис. 2. Установление равновесия в системе из 8×8 частиц.

Кривая *1* снималась для квадратной решетки с малой стохастичностью вблизи узлов решетки, кривая *2* снималась в первоначально симметричной решетке (область *C* характерна для ненарушенной симметрии). Область *A* является областью быстрой релаксации и определяется упругими связями взаимодействия, область *B* является областью медленной релаксации.

от больцмановской, на достаточно больших временных промежутках при переходе в равновесное состояние (рис. 1,*a*). Особенностью такой небольцмановской системы является поведение средней кинетической энергии, приходящейся на одну частицу (рис. 1,*b*). Обычно установление равновесия в ПИС, описываемое зависимостью $T(t)$, позволяет выделить два характерных столкновительных участка: область быстрой релаксации, определяемая жесткостью взаимодействия между частицами (рис. 2, область *A*, кривая *1*) и область медленной релаксации, определяемая затуханием флуктуаций в системе (рис. 2, область *B*, кривая *1*). Усложнение поведения МД-системы и повышение ее устойчивости к внутренним флуктуациям для квазиодномерного кластера имеет достаточно простое физическое объяснение. Характерно наличие плато на кривой $T(t)$ (рис. 1,*b*), что объясняется структурированием системы внутренними силами в треугольную решетку (рис. 1,*b*, плато *2*) и стягиванием кластера под действием сил поверхностного натяжения за счет появления постоянной составляющей скорости движения частиц (рис. 1,*b*, плато *3*). Как известно, МД системы при определенных средних кинетических энергиях частиц структурируются в треугольную решетку [6]. Оказывается, что двухмерная квадратная решетка с начальными нулевыми скоростями частиц, будучи симметричной с осью симметрии вращения 4-го порядка, не структурируется в треугольную. Для того, чтобы такое структурирование имело место, необходим или достаточно большой промежуток времени, в течение которого происходит машиннофлуктуационное разрушение симметрии, или очень небольшая несимметричность начальной решетки частиц. Кроме того, средняя кинетическая энергия имеет особенность (рис. 2, кривая *2*). Эта особенность заключается в том, что до распада симметрии в системе (рис. 2, область C на кривой *2*) устанавливается средняя кинетическая энергия T, которая при машинном разрушении симметрии за время порядка максвелловского времени релаксации возрастает. Если в начальном положении частиц имела место небольшая несимметрия, то $T(t)$ устанавливается согласно кривой *1* на рис. 2. Анализ результатов в [3–4] и полученных в данной работе показывает, что стержнем дискуссии может быть: критичность числа МД частиц при интерпретации полученных результатов; предположение о необходимости внешней или начальной стохастизации; неуникальность распределения Больцмана, а, значит, превалирование синергетических принципов над статистическими.

Список литературы

[1] *Николис Г., Пригожин И.* Самоорганизация в неравновесных системах. М., 1979. 512 с.

[2] *Пригожин И.* // УФН. 1981. В. 2. С. 185.

[3] *Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковенко С.И.* // Письма в ЖТФ. 1991. Т. 17. В. 7. С. 33–37.

[4] *Жидков А.Г., Галеев Р.Х.* // Физика плазмы. 1993. Т. 19. С. 1181–1183.

[5] *Хеерман Д.В.* Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М., 1980. 175 с.

[6] *Гулд Х., Тобочник Я.* Компьютерное моделирование в физике. М., 1990. 348 с.

Поступило в Редакцию
27 мая 1994 г.