01

Моделирование ансамбля систем со взаимодействием Леннарда–Джонса

© *О.И. Горский, Ю.П. Кучугурный*

Институт транспортных систем и технологий НАН Украины, Днепропетровск

Поступило в Редакцию 15 апреля 2002 г.

В результате проведенного численного моделирования системы осцилляторов в виде квадратной $2D$ решетки со взаимодействием Леннарда–Джонса, представленной как некоторое математическое усреднение ансамбля почти одинаковых систем, показано, что удается сохранить неустойчивую конфигурацию осцилляторов в большем временнóм интервале, чем для единственной квадратной решетки. Полная энергия системы, построенной как математическое усреднение ансамбля почти одинаковых систем, сохраняется до момента потери устойчивости и не сохраняется в дальнейшем, а полная энергия каждой системы ансамбля сохраняется.

Известно, что сложное двумерное согласованное движение может наблюдаться в многочастичных системах со взаимодействием Леннарда–Джонса [1]. Сложное согласованное движение получается из специфических начальных условий с помощью специальной процедуры. Обычно специфические начальные условия игнорируются из-за практической невозможности их достижения. Структурная ячейка в таком кластере оказывается треугольной равновесной структурной ячейкой. Известно также, что сложное согласованное движение в консервативной системе может быть получено в численном моделировании взаимодействующих осцилляторов, если начальная конфигурация осцилляторов является двумерной квадратной решеткой (а не равновесной треугольной), а потенциал взаимодействия является потенциалом Леннарда–Джонса. Особенностью такой системы является тот факт, что сложное симметричное и согласованное движение можно наблюдать только небольшое время при численном моделировании (назовем это время t_{sym}). Это объясняется тем, что ошибки округления разрушают первоначальную симметрию системы, которая должна сохраняться для консервативной системы. На рис. 1 показана типичная кривая

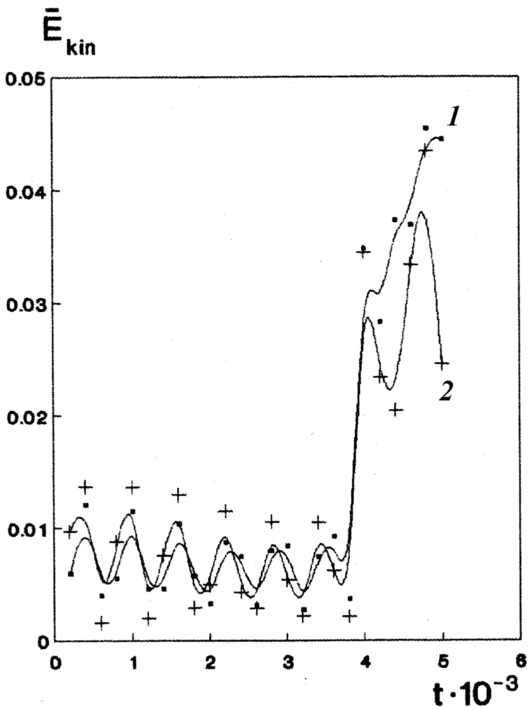

Рис. 1. Зависимость средневременной кинетической энергии на осциллятор для одной системы с шагом 0.065 (*1*) и с шагом 0.0325 (*2*).

средневременной кинетической энергии на осциллятор. Симметричная система осцилляторов в виде квадрата является неустойчивой, и расчет системы позволяет сохранить первоначальную симметрию системы не более t_{sym}. Подчеркнем, что симметрия системы начинает разрушаться раньше, но при графическом огрубленном изображении системы осцилляторов удается сохранить квадрат до времени t_{sym}. Время перехода в равновесную треугольную конфигурацию решетки t_{sym} очень слабо зависит от шага интегрирования, постоянных потенциала, периода квадратной решетки и других параметров системы. Например, для $N = 16$ осцилляторов с периодом $a = 1.49$ $t_{sym} \simeq 3800$. Если не повышать точность расчета, увеличивая число значащих цифр переменных, то система не может быть рассчитана для времен, больших t_{sym}, при шаге интегрирования 0.065 ($6.5 \cdot 10^{-16}$ s). Это время почти кратно t_{sym} при соответствующем изменении шага интегрирования (рис. 1). Здесь кривая *1* соответствует шагу интегрирования 0.065 и кривая *2* — шагу, равному 0.0325. Эти кривые построены следующим образом. Уменьшая шаг интегрирования, например, в 2 раза (по сравнению с условным базисным шагом), время расчета увеличиваем в 2 раза и данные снимаем с удвоенным интервалом по сравнению с условным базисным интервалом. Дальнейшее уменьшение шага не приводит к увеличению времени t_{sym}, а в некоторых случаях может это время даже уменьшить. Эти факты позволяют ввести одно из определений неустойчивой системы, как системы, для расчета которой необходимо беспредельно алгоритмически усложнять процедуру расчета. Исходя из этого, можно сделать вывод о том, что квадратная решетка осцилляторов со взаимодействием Леннарда–Джонса как динамическая система может наблюдаться только очень небольшое время. Остаются, однако, сомнения в окончательности такого вывода.

Во-первых. Если ошибки округления разрушают симметрию, то это может неодинаковым образом проявляться для всех квадратных решеток с близким периодом к рассчитываемой. Это означает, что если расчет проводить по ансамблю решеток с подходящим последующим усреднением, то ошибки округления могут компенсировать друг друга (по крайней мере на большем, чем t_{sym} временнóм промежутке расчета).[1]

Во-вторых. По истечении t_{sym} все квадратные решетки должны развалиться с переходом в треугольную равновесную конфигурацию. А что происходит с решеткой, рассчитываемой по ансамблю с последующим усреднением (назовем период такой решетки a_{ass})? Переходит ли a_{ass} в период треугольной решетки, как это происходит для всех решеток ансамбля? Ответы на эти вопросы неочевидны. Чтобы ответить на эти вопросы, были проведены численные расчеты для ансамбля квадратных решеток со взаимодействием типа Леннарда–Джонса.

[1] Это не противоречит одному из определений неустойчивых динамических систем, как систем, в которых предельно малые внешние возмущения уводят систему с ее фазовой траектории как угодно далеко. Расчет (см. далее) ведется не для одной системы, а для ансамбля, и отслеживается траектория не системы с данными начальными условиями, а некоторой условной системы, полученной из некоторого усреднения ансамбля систем с различными (но близкими) начальными условиями.

Постановка задачи может быть сформулирована следующим образом. Моделирование проводилось для $N = 16$ осцилляторов. Число рассчитываемых решеток в ансамбле варьировалось и составляло S. Интегрирование уравнений движения проводилось с безразмерным шагом $\Delta t = 0.05{-}0.13$, что соответствует реальному времени

$$\Delta t_{real} = \Delta t \left(\frac{m\sigma^2}{48\epsilon}\right)^{1/2}, \tag{1}$$

ϵ, σ — постоянные взаимодействия.

Безразмерная средняя кинетическая энергия на осциллятор определялась следующим образом:

$$\langle \epsilon_{kin} \rangle = \frac{1}{2 \cdot N} \sum_{i=1}^{N} \Big\langle \big(v_{xi}^2 + v_{yi}^2\big) \Big\rangle. \tag{2}$$

Компьютерное моделирование проводилось без обрезания взаимодействия неближайших соседей. Специфические начальные условия задавались следующим образом:

$$x_j = AJ, \tag{3}$$

$$y_i = AI. \tag{4}$$

Начальные условия предполагались нулевые, т. е.

$$v_{xi}(t = 0) = v_{yi}(t = 0) = 0. \tag{5}$$

Потенциал взаимодействия задавался в виде

$$V(r_{ij}) = 4\epsilon \left[A_1 \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - A_2 \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6} \right]. \tag{6}$$

Гамильтониан взаимодействия имеет вид

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i \neq j} V(r_{ij}). \tag{7}$$

Расчет колебаний для искомой решетки осцилляторов проводился с учетом всех индивидуальных движений осцилляторов в ансамбле по формуле

$$x_i = \sum_j^S r_j (x_i)_j, \tag{8}$$

$$y_i = \sum_j^S r_j (y_i)_j, \tag{9}$$

$$(v_x)_i = \sum_j^S r_j \big((v_x)_i\big)_j, \tag{10}$$

$$(v_y)_i = \sum_j^S r_j \big((v_y)_i\big)_j, \tag{11}$$

r_j — весовые характеристики для каждой решетки ансамбля.

Предполагалось, что $r_j = 1/S$, $j = 1, 2, \ldots, S$. Можно обобщить постановку для неравных r_j (см. далее).

При такой постановке динамика симметричного квадратного кластера с учетом ансамбля может не отличаться от динамики отдельного кластера по крайней мере на временно́м промежутке сохранения симметрии. Более того, такое неотличие динамики является тестовым для проверки правильности работы программы. Ансамбль квадратных симметричных решеток задавался в почти идентичном виде с небольшой вариацией периода в виде $a_i = a + 10^{-n} \cdot \epsilon$, где ϵ — случайная величина в интервале $[0, 1]$, n варьировалось в пределах от 4 до 16. Это объясняется тем, что предполагается нарушение симметрии в низших разрядах переменных. Если периоды решеток слабо отличаются, то это слабое отличие в периодах отдельных систем может привести к слабому отличию в симметричных переменных системы, построенной из ансамбля. Это предположение, конечно, может не иметь места.

Вводя в рассмотрение ансамбль, мы увеличиваем число варьируемых независимых параметров, таких как: S — число решеток в ансамбле, a_i — периоды решеток, r_j — весовые вклады.

Разрушение симметрии движения можно фиксировать визуально по графическому изображению системы осцилляторов. Несмотря на то что

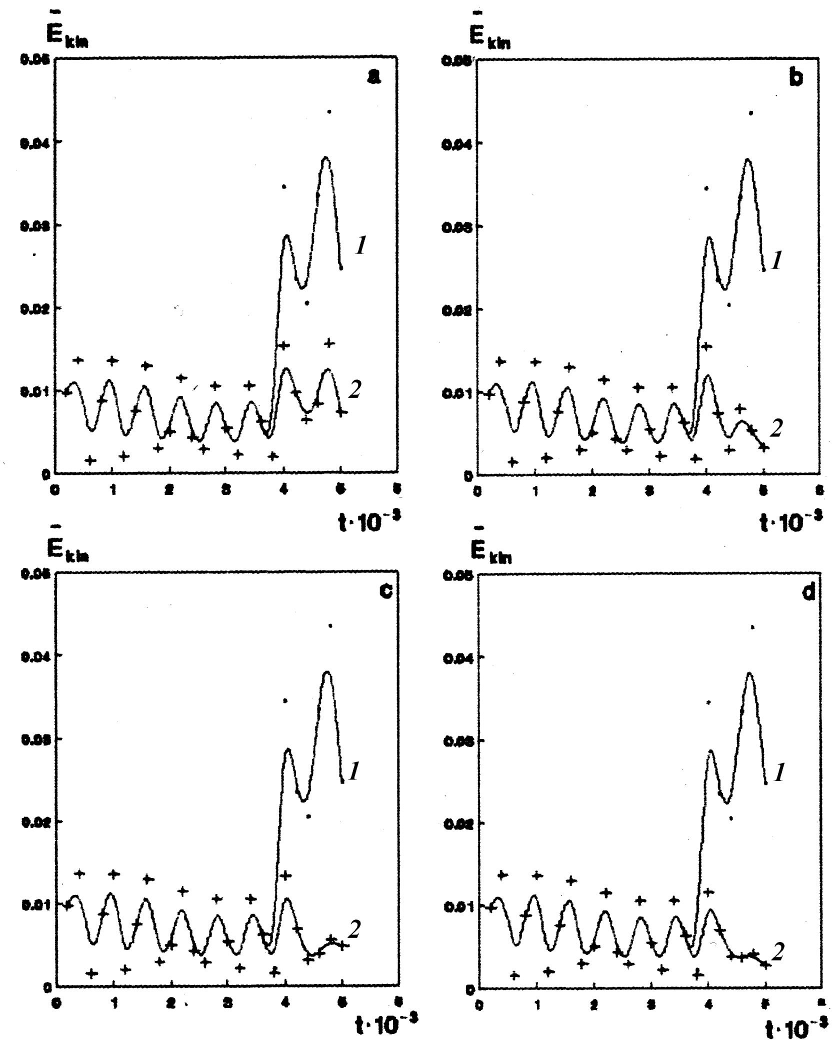

Рис. 2. Зависимость средневременной кинетической энергии на осциллятор для системы, построенной из ансамбля почти идентичных систем с различным числом S. *1* — для одной системы, *2* — для системы, построенной из ансамбля. *a* — для $S = 10$, *b* — для $S = 16$, *c* — для $S = 20$, *d* — для $S = 27$.

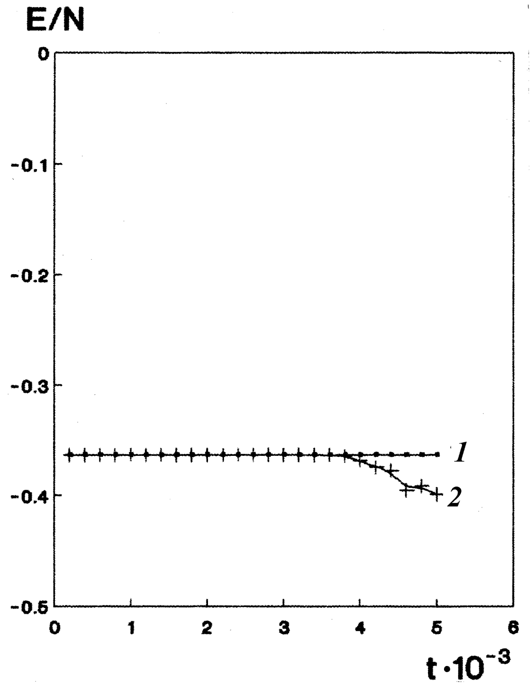

Рис. 3. Зависимость полной энергии в системе, деленной на $N = 16$ в одной системе (*1*) и в системе, построенной из ансамбля ($S = 27$, *2*).

симметрия здесь отслеживается с точностью до графического пикселя, для целей данной работы этого достаточно.

На рис. 2 показаны разрушения симметрии в системе, построенной на ансамблях с различным числом решеток. Следует сказать, что наблюдается неярко выраженная тенденция к сглаживанию колебаний, отсутствует резкий переход в точке разрушения симметрии. Это проявляется одновременно с тенденцией к сохранению квадратной решетки, построенной как некоторое среднематематическое из ансамбля. Важно отметить, что до переходной точки колебания в эталонной решетке неотличимы (с точностью до грубой зернистости графики) от колебаний в решетке, построенной на ансамбле. Как видно из рис. 2, довольно

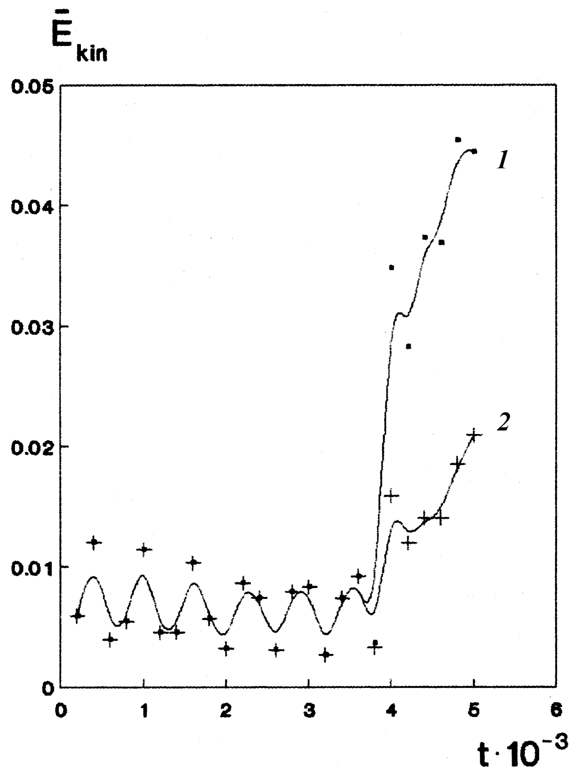

Рис. 4. Зависимость средневременной кинетической энергии в одной системе (1) и системе, построенной из ансамбля для различных r_j, при $S = 21$, $r_1 = 0.5$, $r_j = 0.025$, $j = 2, \dots, 21$ (2).

слабую тенденцию к сохранению квазипериодических колебаний, характерных для квадратной симметричной решетки осцилляторов, так же как и сохранение самой квадратной решетки, можно попытаться использовать, увеличивая число решеток в ансамбле. Этот очевидный путь, если и приведет к ожидаемому результату, может потребовать громадного увеличения времени расчета. Важно отметить, что алгоритм расчета в этом случае не изменяется. Если даже ограничиться тем, что время жизни квадратной решетки удается продлить приблизительно на четверть (и это единственный способ, известный авторам на сегодняшний день), то это оказывается существенным, так как нерассчитываемые, неустойчивые, алгоритмически сложные системы можно привязать к параметрам, которые не существуют при традиционной постановке задачи со взаимодействием Леннарда–Джонса. Следует сказать, что полная энергия системы, которая сохранялась до t_{sym} испытывает скачок в случае $S > 1$, т. е. ансамбль ведет себя после t_{sym} не как консервативная система, а иначе (при этом полная энергия в каждой системе сохраняется и каждая система ведет себя как консервативная). Получается, что потеря консервативности по истечении времени t_{sym} позволяет увеличить время сохранения квадратной неустойчивой решетки по крайней мере на четверть. На рис. 3 показано, как ведет себя полная энергия E/N. Здесь *1* соответствует полной энергии для $S = 1$, *2* — $S = 10$. Как видно из рисунка, полная энергия одной системы сохраняется, а полная энергия для системы, построенной из ансамбля, нет. Объяснение этому следует искать в суперпозиции скоростей и координат частиц. Ввиду того что после перехода каждая система вносит неодинаковый вклад в ансамбль, полная энергия и не должна сохраняться. До перехода это не проявлялось, так как симметричное движение осцилляторов с близкими координатами вносит почти одинаковый вклад в полную энергию E/N. На рис. 4 показан переход для $S = 21$ в случае $r_1 = 0.5$, $r_j = 0.025$, $j = 2, 3, \dots, 20$. Видно, что в этом случае симметрия разрушается и вклад систем, входящих в ансамбль с малым весовым множителем r_j, $j > 1$ не приводит к желаемому результату. Этот вопрос нуждается в дальнейшем изучении.

Список литературы

[1] *Горский О.И., Дзензерский В.А., Кучугурный Ю.П.* // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. В. 15. С. 49–55.