

01

”Цветовая” динамика на основе консервативной системы

© О.И. Горский, Ю.П. Кучугурный

Институт транспортных систем и технологий
(«Трансмаг») НАН Украины, Днепропетровск

Поступило в Редакцию 3 июля 2000 г.

Предложен метод двухцветовой закрашки отображения средней полной энергии осцилляторов в нелинейной цепочке на плоскость. Показано, что такое отображение имеет структуру. Делается предположение, что эта структура обусловлена динамикой консервативной системы.

Введение. Известно, что для оценки времени релаксации нелинейной цепочки N осцилляторов в гамильтоновых консервативных системах применяется метод спектральной энтропии [1]. Этот метод позволяет грубо оценить время релаксации к равновесному состоянию, характеризующемуся равномерным распределением по степеням свободы. Как отмечается в [1], время релаксации грубо оценивается в $\tau_{FRU} \sim 10^{-3}$ с в α -модели Ферми, Паста, Улама. Это означает, что равномерное распределение энергии по степеням свободы недостижимо при компьютерном моделировании. Слабая зависимость спектральной энтропии от времени и отсутствие особенностей этой зависимости позволяют лишь грубую оценку времени релаксации. Для определения характерных времен нелинейной цепочки осцилляторов в [1] предложен метод сравнения показателей Ляпунова данной системы с интегрируемой динамической системой (в [1] в качестве интегрируемой системы была выбрана нелинейная цепочка осцилляторов Тоды). ”Бифуркация” показателей Ляпунова двух систем позволяет определить время захвата (trapping time) системы в области квазипериодических колебаний. Оказалось, что время захвата незначительно и составляет $\tau_{FRU}^{(1)} \sim 4 \cdot 10^5$ циклов (10^{-9} – 10^{-10} s), что на много порядков меньше предсказываемого времени достижения системой состояния с равномерным распределением энергии по степеням свободы. Метод сравнения показателей Ляпунова позволяет предсказать время выхода системы из области квазипериодических торов, но для дальнейшего

предсказания поведения системы оказывается неприменимым. Все это вынуждает изыскивать новые методы для определения характерных времен нелинейной цепочки осцилляторов.

В настоящей работе предложен метод, который может быть назван методом закрашки. Метод основан на том, что система грубо (с некоторой точностью округления) отображается на плоскость. Отображение развернуто во времени. На каждом временном шаге отображению присваивается цвет C_1 . Если округление определяется величиной площади Δs с цветом C_1 , то по истечении некоторого времени компьютерного моделирования Δt область, на которую отображается система, оказывается с цветом C_1 . Чтобы избежать ограничения на Δt из-за грубого округления (грубой зернистости), применяется следующий прием. Через некоторое время t_1 , после того как некоторая часть области оказывается с цветом C_1 , происходит замена цвета C_1 на цвет C_2 (например, фоновый цвет) и для $t_1 < t \leq t_2$ отображение ведется с цветом C_2 (та часть области, которая была закрашена цветом C_1 , до момента времени $t \leq t_1$ остается с цветом C_1 , если за время $t_1 < t \leq t_2$ осциллятор не попал в эту область, в противном случае происходит смена цветов). По истечении времени t_2 происходит возврат цвета C_1 для последующего отображения. В дальнейшем циклы организованы аналогично. Таким способом все области, у которых грубозернистые состояния одинаково погашаются сменой цветов. В конце каждого цикла, период которого равен $t_1 + t_2$, рассчитывается число C_1^* графических пикселей с цветом C_1 , и это число называется остаточным цветом. Нас будет интересовать, как остаточный цвет C_1^* может помочь выявить характерные времена основной консервативной системы. Какое отображение на плоскость следует выбрать? В данной работе мы рассмотрели отображение полной энергии каждого осциллятора E^i на временном шаге n в себя, т.е. в E^i на $n + m$ шаге ($E_n^i \rightarrow E_{n+m}^i$). Отображение каждого из N осцилляторов проводится на одну плоскость, что позволяет составить некоторый портрет всей системы не прибегая к фазовому пространству, об особенностях колебаний в котором при полном динамическом перемешивании и равном перераспределении энергии колебаний по степеням свободы ничего не известно. В [1] предполагается, что для динамического перемешивания в фазовом пространстве в нелинейной цепочки осцилляторов необходимо, чтобы энергия была достаточно велика и начальное распределение координат и импульсов осцилляторов было случайным и близким к гауссову. Делается вывод, что если

система в начальном состоянии находится в наинизшей моде, пусть и с большой полной энергией, то равномерное распределение, вероятней всего, достигнуто не будет и энергия наинизшей моды будет перекачиваться в несколько ближайших мод и обратно, как в оригинальной работе Ферми, Паста, Улама. Основной целью настоящей работы было показать, что "цветовая" динамика на основе консервативной системы позволяет выявить некоторые особенности основной консервативной системы. Исследовалась зависимость остаточного цвета C_1^* от времени.

Описание модели и результатов. Моделировалась нелинейная цепочка Ферми, Паста, Улама с гамильтонианом взаимодействия

$$H(p, q) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2} p_i^2 + \frac{1}{2} (q_{i+1} - q_i)^2 + \frac{\alpha}{3} (q_{i+1} - q_i)^3 \right]. \quad (1)$$

Уравнения движения для цепочки осцилляторов имеют вид

$$\ddot{q}_i = q_{i-1} - 2q_i + q_{i+1} + \alpha(q_{i+1} - q_i)^2 - \alpha(q_i - q_{i-1})^2, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2)$$

Смещения граничных осцилляторов полагались равными нулю. Начальные условия для импульсов и координат выбирались случайным образом с помощью генератора случайных чисел при условии равенства нулю суммарного импульса для всех осцилляторов. Шаг интегрирования выбирался ~ 0.1 , что приблизительно соответствует 10^{-14} s для аргона. Выборка полной энергии для каждого осциллятора на n -м шаге E_n^i и на шаге $n + m$ производилась независимым циклическим счетчиком n шагов. Величины n и m варьировались. Чтобы установить независимость результатов численного моделирования от времени t_1 и t_2 , эти времена также варьировались. В конце каждого цикла с периодом $t_1 + t_2$ снимался остаточный "цвет" C_1^* . Физическое ограничение на грубую зернистость (размер пикселя) необходимо компенсировать каким-то способом. Таким образом, необходимо определить зависимость результатов моделирования от следующих параметров: времени действия "цветовых потоков" t_1, t_2 , шагов выборки n, m и некоторого масштаба S , компенсирующего конечную площадь графического пикселя. Обилие варьируемых параметров сильно усложняет анализ результатов. Особенности динамики при изменении этих параметров будут рассмотрены в другой работе. В данной работе мы ограничились тем, что зафиксировали эти параметры ($n = 500, m = 100, t_1 = t_2 = 25 \cdot 10^3$).

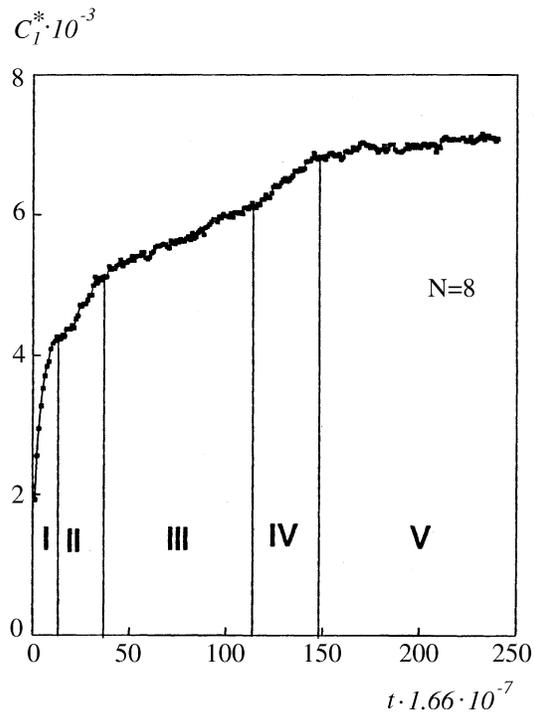


Рис. 1. Типичная зависимость остаточного "цвета" от времени.

Относительная вычислительная погрешность полной энергии системы составляла $\sim 10^{-5}$.

Типичная зависимость $C_1^*(t)$ для достаточно больших времен (по сравнению со временем захвата $\tau_{\text{FPU}}^{(1)}$) оказывается следующей (в данном случае число осцилляторов было выбрано $N = 8$, так как особенности "цветовой" динамики хорошо проявляются для наибольшего числа осцилляторов). $C_1^*(t)$ вначале растет со временем (рис. 1, область I). Эта стадия занимает время $\sim (10-20)\tau_{\text{FPU}}^{(1)}$. Далее скорость роста $C_1^*(t)$ изменяется по сравнению с первоначальной (рис. 1, область II). Через $\sim (20-40)\tau_{\text{FPU}}^{(1)}$ и в зависимости от числа осцилляторов вновь наблюдается изменение скорости роста остаточного цвета (рис. 1,

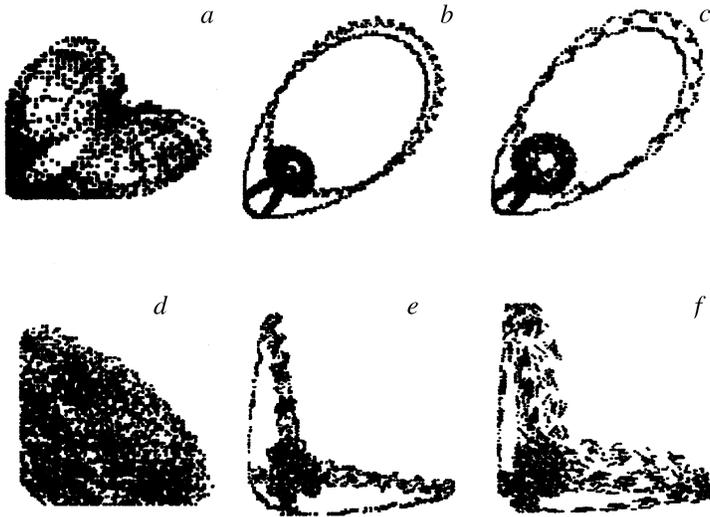


Рис. 2. Отображения $E_n^i \rightarrow E_{n+m}^i$ для $N = 4$ (a, b, c) и $N = 5$ (d, e, f).

область III). Наклон кривой $C_1^*(t)$ изменяется, что может свидетельствовать о возможных характерных временах консервативной системы из восьми нелинейных осцилляторов. В дальнейшем наклон кривой $C_1^*(t)$ опять изменяется (область IV) до выхода на плато (область V). Плато наблюдается очень долго ($\sim 100\tau_{\text{FRU}}^{(1)}$ циклов). Отображение ($E_n^i \rightarrow E_{n+m}^i$) приобретает характерную форму, которая проявляется все отчетливее по мере проведения расчета. Расчет прерывался спустя $t \sim 1.2 \cdot 10^8$ циклов.

Обсуждение результатов численного моделирования. Как показывает расчет, отображение $E_n^i \rightarrow E_{n+m}^i$ приобретает структуру. Для небольшого числа осцилляторов $N = 4$ отображение $E_n^i \rightarrow E_{n+m}^i$ показано на рис. 2 (a, b, c) для следующих случаев: a — цепочка линейных ($\alpha = 0$) осцилляторов с начальной первой модой и нулевыми начальными импульсами; b — нелинейные осцилляторы ($\alpha = 0.25$) с начальными координатами, заданными на синусоиде с наибольшим пространственным периодом (условная первая мода), и ненулевыми случайными начальными импульсами; c — нелинейные осцилляторы

($\alpha = 0.25$) без начальной условной первой моды и с ненулевыми случайными начальными импульсами. При случайном начальном распределении координат и импульсов в отсутствие условной первой моды отображение имеет также довольно сложную структуру. В сущности форма области отображения $E_n^i \rightarrow E_{n+m}^i$ сразу показывает, какое количество осцилляторов отображается, так как форма области отображения $E_n^i \rightarrow E_{n+m}^i$ сильно зависит от числа осцилляторов (см. ниже), по крайней мере для небольшого числа осцилляторов. Сильная зависимость формы области отображения от N , возможно, приводит к различной динамике на пути к перемешиванию, так как возможная локализация колебаний в области равномерного распределения энергии, скорее всего, определяется областью занятых до момента перемешивания "состояний" (в данной работе "состояние" определяется точкой отображения $E_n^i \rightarrow E_{n+m}^i$ с цветом C_1).

При изменении числа осцилляторов структура отображения изменяется. На рис. 2, *d, e, f* для сравнения при тех же условиях, что и выше для $N = 4$, показаны отображения $E_n^i \rightarrow E_{n+m}^i$ для $N = 5$. При малых значениях полной энергии осциллятора, как видно из рисунков, структура отображения может быть грубая (вблизи области отображения $E_n^i \rightarrow \sim 0$). Подобрать масштаб S , позволяющий большее разрешение, не всегда удается. Это является одним из недостатков метода. Влияние нелинейности α на структуру отображения для $N = 8$ показано на рис. 3: $\alpha = 0$ (*a*), $\alpha = 0.25$ (*b*), $\alpha = 0.35$ (*c*). Отображения на рис. 3 (*a, b, c*) получены при постоянном значении средней полной энергии на осциллятор $E = 0.428$. Как видно из рис. 3, *d* (кривая *l*), в линейном случае могут проявляться колебания, связанные с переменным "цветовым потоком". Кроме того, изменяется наклон кривой $C_1^*(t)$ и при изменении α область отображения в случае сильной нелинейности изменяется. На рис. 3, *b* задана условная мода с ненулевыми случайными начальными импульсами, на рис. 3, *c* отсутствует условная первая мода, начальные импульсы случайные, ненулевые). Важно отметить, что задание условной первой моды в начальный момент времени определяет форму отображения, которая для небольшого числа осцилляторов не будет разрушена даже после очень большого времени расчета. На рис. 4 показаны отображения для $N = 16$ в линейном случае $\alpha = 0$ (рис. 4, *a*), при $\alpha = 0.25$ (рис. 4, *b*) при начальной условной первой моде и $\alpha = 0.25$ при случайном выборе импульсов без начальной условной первой моды (рис. 4, *c*). Во всех случаях полная энергия на

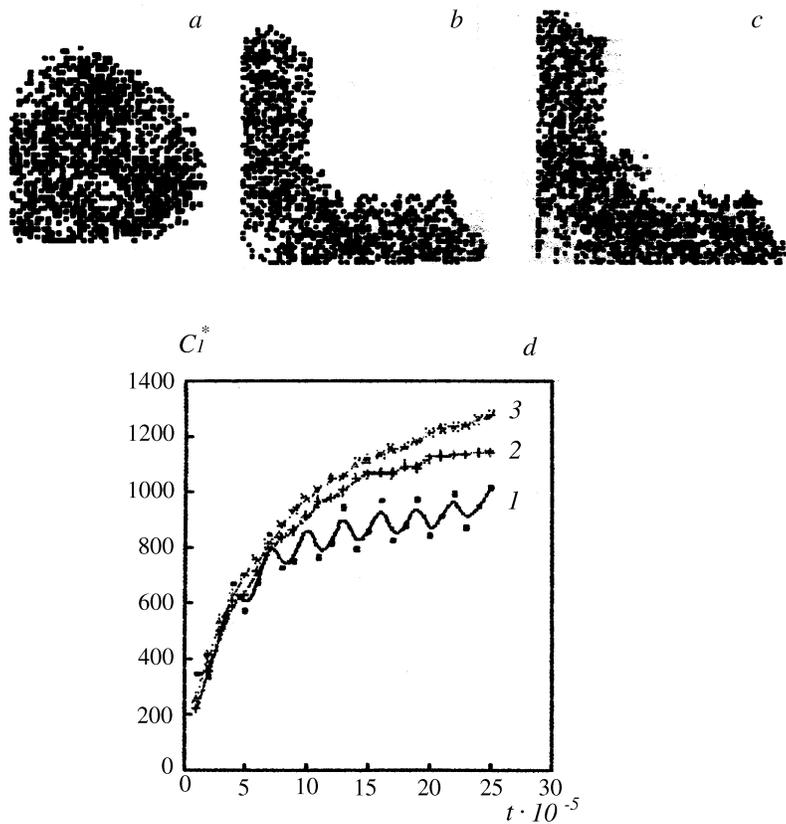


Рис. 3. Влияние нелинейности взаимодействия на структуру отображения $E_n^i \rightarrow E_{n+m}^i$ для $N = 8$.

осциллятор $E^i = 0.550$. На рис. 4, *d* показано изменение $C_1^*(t)$ для всех трех случаев (кривая 1, 2 и 3 соответственно). В рассматриваемом случае формы отображений оказываются похожи, несмотря на изменение α и начальных условий. В линейной цепочке наклон кривой $C_1^*(t)$ отличается от нелинейного случая. Случайное распределение импульсов при наличии условной первой моды (кривая 2) и при отсутствии условной первой моды (кривая 3) приводит к различному остаточному

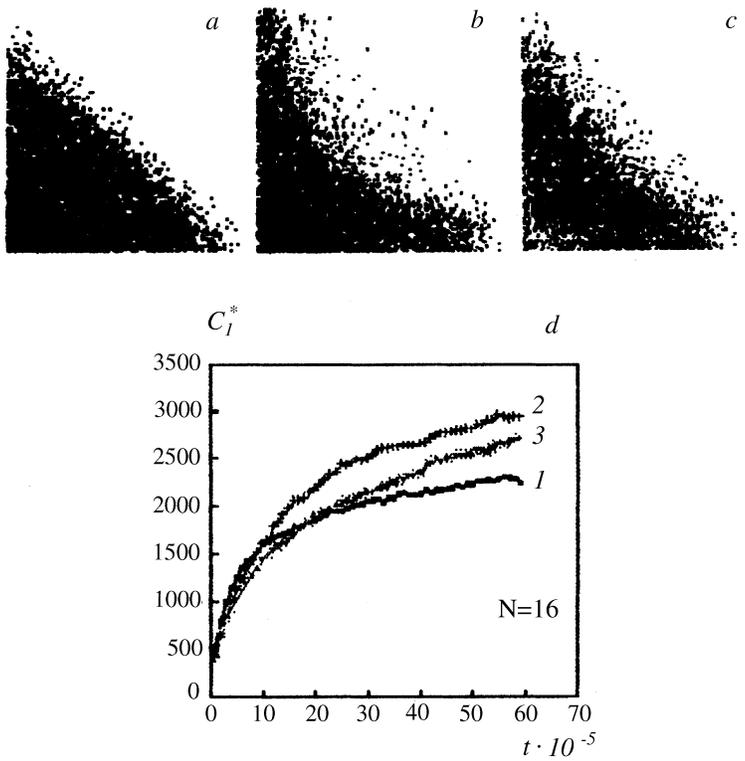


Рис. 4. Влияние нелинейности взаимодействия на структуру отображения $E_n^i \rightarrow E_{n+m}^i$ для $N = 16$.

"цвету". Исследование зависимости $C_1^*(t)$ позволяет выявить некоторое время $\tau_{\text{FRU}}^{(2)} \sim 10\tau_{\text{FRU}}^{(1)}$ для достижения первой стабилизации "цветового потока". Можно попытаться увеличить время первой стабилизации посредством изменения параметров консервативной системы, но не параметров "цветового потока". Как зависит $\tau_{\text{FRU}}^{(2)}$ от n, m, t_1, t_2, S ? Этот вопрос требует дальнейшего изучения. Фиксирование средней полной энергии на осциллятор и фиксирование n, m, t_1, t_2, S позволяет производить сравнение полученных результатов, так как в противном случае основы для сравнения нет.

Выводы. Основная сложность в проблеме динамического обоснования статистической термодинамики состоит в том, что первая мода, возникшая в консервативной системе, не может быть разрушена силами самой системы. Как показано в настоящей работе, "цветовая" динамика проявляет различные структуры отображения. Как эти структуры связаны с динамикой консервативной системы и почему фундаментальных сил недостаточно для разрушения этих структур? На данном этапе исследования ответа на эти вопросы нет. Эти структуры сильно зависят от числа осцилляторов и не разрушаются при длительном моделировании. По форме структуры отображения для небольшого числа осцилляторов можно определить это число. Область отображения как бы распадается на две области: $E^i \sim 0$ (эта область в двухцветовом отображении при расчете $C_1(t)^*$ не дает вклада в остаточный "цвет") и область с энергией, которая оказывается доступной для системы спустя очень большое расчетное время. Для более детального исследования динамики "цветового потока" можно выделить область отображения $E_n^i \rightarrow E_{n+m}^i$ с другим пространственным масштабом S . Это требует дополнительного исследования. В настоящей работе мы ограничились расчетами уравнений движения для небольшого числа частиц, так как необходимость считывания остаточного цвета в конце каждого цикла n сильно влияет на время моделирования. При увеличении числа осцилляторов N и при постоянстве площади, на которую отображается консервативная система, происходит все большее огрубление. Одной из возможных мер против этого может быть ограничение интервала для E_n^i и увеличение масштаба отображения. Конечно, при этом оказывается некий произвол в выборе интервала E_n^i , однако, если нас интересует равномерное распределение энергии по степеням свободы для осцилляторов, выбор интервала вблизи E кажется вполне разумным. В данной работе мы этого не делали.

Список литературы

- [1] Casetti L., Cerruti-Sola M., Pettini M. E-print: chao-dyn/9609017, chao-dyn@xxx.lanl.gov