

О термализации одномерных решеток.

I. Микроканонический ансамбль

Виноградов Г.А.*¹, Лахно В.Д.†²

¹Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия

²Институт математических проблем биологии РАН —
филиал Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН,
Пущино, Россия

Аннотация. При численном моделировании свойств биомакромолекул важное место занимают вопросы термализации, т.е. равнораспределения энергии по степеням свободы. И в работе рассмотрены некоторые механизмы термализации решеток: резонансы Чирикова, турбулентность волн и некоторые другие. Рассмотрена термализация в микроканоническом ансамбле, когда система изолирована от внешних воздействий и полная энергия сохраняется. Хотя микроканонические ансамбли редко используются в практических вычислениях, однако основные представления о механизмах термализации получены именно для этих систем. Основное внимание уделено рассмотрению термализации решеток с потенциалами Ферми – Паста – Улама – Цинжоу, поскольку главные усилия для понимания основ термализации были предприняты именно для решеток этого типа. Обсуждается роль солитонов и бризеров в термализации.

Ключевые слова: термализация, микроканонический ансамбль, эргодичность, решетка ФПУЦ.

ВВЕДЕНИЕ

Обширную область современной математической биологии составляет моделирование термодинамических и статистических свойств цепочечных биомакромолекул [1, 2]. И при молекулярно-динамическом (МД) моделировании различных свойств системы наибольшее распространение получили микроканонический и канонический ансамбли. В первом случае полагается, что изучаемая система изолирована от термостата и в ней сохраняется полная энергий. Во втором случае система приводится во взаимодействие с термостатом и в ней тем или иным образом (в среднем) поддерживается постоянная температура. В термодинамическом пределе, когда число частиц $N \rightarrow \infty$, оба подхода дают одинаковые результаты, однако для малого числа частиц это не обязательно так.

Преимуществом моделирования в микроканоническом ансамбле является его относительная простота и возможность осуществлять контроль за точностью вычислительных методов, следя за сохранением полной энергии. Однако у этого подхода есть и “врожденные” проблемы. Во-первых, необходимо использовать большое количество различных начальных условий с тем, чтобы, по возможности, охватить существенную часть фазового пространства. Во-вторых, при моделировании в микроканоническом ансамбле приходится решать непростые вопросы, связанные с

*gvin@deom.chph.ras.ru

†lak@impb.ru

эргодичностью.

Важным преимуществом моделирования в каноническом ансамбле является принципиальное отсутствие необходимости решать вопросы эргодичности, так как система из любого начального состояния всегда выходит на распределение Гиббса при $t \rightarrow \infty$. Действительно, если термостат в каноническом ансамбле моделировать ланжевеновскими случайными силами с трением, то из уравнения Фоккера – Планка непосредственно следует, что равновесное распределение есть в точности распределение Гиббса. И согласие результатов МД-моделирования с точными термодинамическими выражениями достигается при достижении термодинамического равновесия. Но и у этого подхода есть свои проблемы. Первая — это некоторое усложнение вычислительных схем за счет включения в правую часть уравнений Ньютона дополнительных сил, моделирующих термостат. Вторая — выбор метода для моделирования термостата и определение параметров термостата.

Проблема термализации, т.е. равномерного распределения энергии по степеням свободы, имеет долгую историю своего развития. Её начало следует отнести к формулировке Больцманом знаменитой эргодической гипотезы, утверждающей, что средние по времени значения физических величин, равны их средним статистическим значениям. Эргодическая гипотеза служит обоснованием статистической физики [3].

Важно, что постулат Больцмана устранил сложности по статистическому описанию многочастичных систем исходя из их динамической эволюции. Для этого было введено вероятностное толкование в терминах (микро)канонических ансамблей. Тем самым были устранены противоречия между детерминистическим (классическим динамическим) и вероятностным (статистическим) подходами [4].

Было также понято, что не для всех систем выполняется постулат Больцмана. Например, системы с гармоническим потенциалом взаимодействия не могут быть термализованы. Причина различия между термализуемыми и нетермализуемыми системами заключается в интегрируемости/неинтегрируемости соответствующей динамики. И под интегрируемостью классической системы понимается такое свойство конкретной модели, когда она имеет решения в замкнутом виде, как гармоническая решетка, или в виде квадратур (выражений в виде обычных интегралов) как, например, решетка Тоды с экспоненциальным потенциалом [5]. Интегрируемые системы характеризуются еще и тем свойством, что любые автокорреляционные функции имеют постоянные значения при $t \rightarrow \infty$.

Свойство интегрируемости/неинтегрируемости определяет, является ли система эргодичной или нет. Интегрируемость однозначно указывает на неэргодичность. Однако алгоритмы доказательств эргодичности для большинства моделей отсутствуют. И можно полагаться лишь на косвенные свидетельства указывающие на эргодичность/неэргодичность [6].

Следующим важным этапом в проблеме термализации классических систем было первое численное моделирование задачи о равномерном распределении энергии (термализации) в решетке со взаимодействиями между соседними частицами посредством потенциалов $U_\alpha(y) = \frac{1}{2}y^2 + \frac{\alpha}{3}y^3$ и $U_\beta(y) = \frac{1}{2}y^2 + \frac{\beta}{4}y^4$ на первой вычислительной машине MANIAC-I (y есть разность отклонений соседних частиц от их положений равновесия). Эта работа была инициирована Э. Ферми во время частых посещений лаборатории Лос Аламоса в начале 50-х годов и является продолжением его ранних интересов в этой области [7]. Результаты были опубликованы в 1955 г. в отчете Лос Аламоса [8] уже после ухода из жизни Э. Ферми в ноябре 1954 г.

Ферми был убежден, что несмотря на простоту и идеализацию, решетки с потенциалами U_α и U_β могут являться исключительно полезными моделями в

статистической механике, физике твердого тела и вычислительной физике. Так и случилось. И на долгие годы эти решетки стали “полигоном” на котором отрабатывались многочисленные идеи из области нелинейной физики, а сами эти решетки стали полезными моделями для изучения явлений переноса в физике, химии и биологии.

Численно исследовалась решетка с жесткими граничными условиями с числом частиц $N = 32$ или $N = 64$. Начальное условие – возбуждение наиболее длинноволновой моды. Ожидалось, что вследствие нелинейности энергия равномерно распределится между всеми колебательными модами. Однако неожиданно наблюдалась возвратность: после некоторого времени динамической эволюции вся энергия (с точностью лучше 3 %) вновь концентрировалась в начальной моде. Этот результат, названный “парадокс ФПУ”, противоречил представлениям того времени о том, что нелинейность потенциала должна приводить к термализации системы.

Любопытна судьба результатов, опубликованных в отчете [8]. Из-за ограниченного доступа к отчету, он был почти не известен исследователям, работающим в области нелинейной динамики и статистической физики. И только спустя 10 лет, после издания собрания научных трудов Э. Ферми [9], результаты стали известны широкому кругу исследователей. И после этого число публикаций связанных с этой тематикой росло необычайно быстро.

В честь 50-летия с даты публикации отчета вышли большие коллекции статей, подводящих итоги развития сформулированных идей за прошедший период [10, 11]. До 2005 г. модели сформулированные в отчете [8] для решеток с потенциалами U_α и U_β назывались “моделями ФПУ” по фамилиям авторов (E.Fermi, J.Pasta, S.Ulam). Однако в 2005 г. возникло предложение назвать эту проблему “проблемой ФПУЦ” учитывая тот вклад, который внесла Мэри Цинжоу (Mary Tsingou) в численное моделирование сформулированной задачи [12]. И такое название модели принято в настоящее время.

Безусловно, решетками ФПУЦ не ограничивается множество моделей с нелинейными потенциалами взаимодействия. Однако разложение почти любого нелинейного потенциала в ряд дает в качестве первых членов именно потенциалы ФПУЦ. Именно поэтому эти потенциалы приобрели такую значимость в теории термализации решеток.

α -ФПУЦ система демонстрирует сложное квазипериодическое движение, названное “ФПУЦ возвратностью” (“FPU recurrence”). Эта квазипериодичность стимулировала исследования в области интегрируемости [13] и физики солитонов [14]. Обычно полагают, что интегрируемость связана с близостью реального потенциала взаимодействия к точно интегрируемому потенциалу Toda [5]. В последнее время появились работы, в которых модель ФПУЦ рассматривается очень подробно и появились некоторые уточнения механизмов термализации (см., например, [15, 16, 17]).

В настоящей работе мы ограничимся рассмотрением проблемы термализации 1D решеток в микроканоническом ансамбле. Именно микроканонический ансамбль 1D решеток явился тем объектом, для которого получены основные теоретические результаты, пытающиеся объяснить механизмы термализации.

Для изолированных систем с конечным числом частиц иногда случается, что температура системы, определяемая различными способами (например, из средней кинетической энергии частиц, или энергии колебательных мод), не одинакова [18]. Тогда определение “термализации” применительно к изолированной системе с конечным числом частиц может быть довольно расплывчатым. Поэтому “термализацию” иногда понимают в более широком смысле, как статистическую релаксацию к стационарному распределению.

Ниже будут рассмотрены некоторые механизмы обеспечивающие термализацию нелинейных одномерных решеток.

Резонансы Чирикова

Одним из первых механизмов объясняющих термализацию стал резонансный обмен энергии между колебательными модами [19, 20]. Для понимания механизма нужно определить понятие колебательной моды для системы с произвольным потенциалом взаимодействия частиц. В некоторый момент времени систему из N частиц с массами m можно представить в виде N -мерного вектора смещения частиц от положений равновесия $\mathbf{x}(t) \equiv \{x_1(t), x_2(t), \dots, x_N(t)\}$ и N -мерного вектора скоростей $\mathbf{v}(t) \equiv \{v_1(t), v_2(t), \dots, v_N(t)\}$.

Энергия k -й колебательной моды в гармоническом приближении определяется как разложение по колебательным модам гармонической решетки:

$$E^k(t) = \frac{m}{2} \{ [\omega^k \mathbf{q}^k \mathbf{x}(t)]^2 + [\mathbf{q}^k \mathbf{v}(t)]^2 \}, \quad (1)$$

где первый и второй члены – потенциальная и кинетическая энергии, а \mathbf{q}^k и ω^k — k -й собственный вектор и частота соответствующей задачи на собственные значения в гармоническом приближении. $\mathbf{q}^k \mathbf{x}(t)$ означает скалярное произведение векторов: $\mathbf{q}^k \mathbf{x}(t) \equiv \sum_j q_j^k x_j(t)$ и j – номер узла решетки. Полную точную энергию можно вычислить, например, так: $E^{\text{exact}}(t) = \sum_j \left[\frac{m}{2} v_j^2 + U(x_j, x_{j-1}) \right]$, где $U(x_j, x_{j-1})$ – потенциал взаимодействия соседних частиц.

Полная энергии, полученная из гармонического разложения $E^{\text{harm}}(t) = \sum_k E^k(t)$ и точная энергия $E^{\text{exact}}(t)$ для нелинейных задач обычно не совпадают. Значение $\Delta E = (E^{\text{exact}} - E^{\text{harm}}) / E^{\text{exact}}$ можно считать мерой нелинейности исследуемой системы. Величина ΔE возрастает с увеличением нелинейности потенциала и температуры.

Отметим еще один результат анализа динамики решетки: получена связь температуры с частотами колебательных мод: $T \propto \sqrt[N]{\prod_{k=1}^N \omega^k}$. Т.е. температура пропорциональна среднему геометрическому частот колебательных мод.

Нормальные моды можно определить также как решение задачи на собственные значения (квадраты частот ω^2) и собственных векторов \mathbf{q} динамической матрицы (гессиана):

$$G_{i,j} = \frac{1}{m} \frac{\partial^2 U(x_i, x_j)}{\partial x_i \partial x_j}, \quad (2)$$

где $U(x_i, x_j)$ есть функционал потенциальной энергии.

Может оказаться, что частоты некоторых мод находятся в резонансе. Тогда возможен обмен энергиями между этими модами. На примере решетки с потенциалом Морзе можно явно показать, что обмен энергиями за счет резонансов между модами действительно реализуется [21]. Один конец решетки из $N = 10$ частиц жестко закреплен, второй конец свободен. Возбуждалась самая длинноволновая мода с некоторой энергией. В начальном состоянии резонанс между колебательными модами отсутствует. Затем решетка начинает адиабатически медленно растягиваться за свободный конец. Растяжение осуществлялось следующим образом: для решетки из N частиц самая левая частица имеет координату $x_1 = 0$, а координата N -й частицы меняется по закону $x_N(t) = vt$ и $v \ll 1$.

При растяжении жесткости связей в потенциале Морзе смягчаются и частоты колебаний уменьшаются (рис. 1). При очень медленном растяжении можно моделировать адиабатическое охлаждение при растяжении. Потенциалы взаимодействия между соседними частицами выбираются случайными: $U(y_j) = \xi_j [1 - \exp(y_j)]^2$ и ξ_j – случайная величина выбираемая из интервала $[0.5 - 1.5]$ и $y_i = x_i - x_{i-1}$. Наборы случайных значений $\{\xi\}$ определяются независимо для каждого образца. Случайные

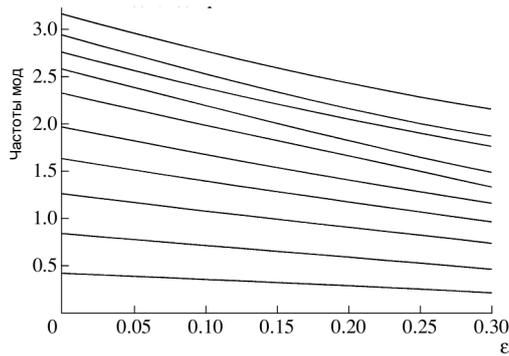


Рис. 1. Зависимость частот колебательных мод от относительного удлинения ε . $N = 10$.

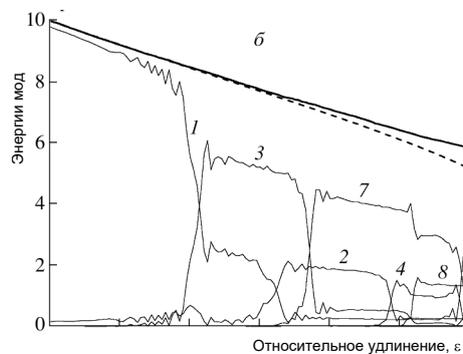


Рис. 2. Эволюция энергий мод (номера показаны цифрами) при растяжении одного образца решетки Морзе со случайными потенциалами, $N = 10$. Сплошная линия – точная полная энергия, пунктир – энергия, полученная из гармонического разложения.

потенциалы используются для того, чтобы частоты мод также были случайными. Это позволяет изучать динамику для разных образцов и набирать статистику. Можно ожидать, что для некоторых образцов при растяжении случайным образом возникнут резонансы между меняющимися частотами колебательных мод.

На рисунке 2 показано изменение энергий индивидуальных колебательных мод в зависимости от относительного удлинения ε . Отчетливо видны резонансы. Например, первый резонансный обмен энергиями происходит между первой и третьей колебательными модами, затем между третьей и седьмой модами и так далее. Подробный анализ показывает, что помимо двойных резонансов, есть тройные резонансы.

Условия выполнимости обмена энергиями за счет резонансов Чирикова облегчаются при увеличении числа частиц за счет возрастания плотности уровней в спектре частот и большей вероятности соизмеримости частот, приводящих к резонансам.

Резонансы Чирикова и их роль в термализации для модели β -ФПУЦ подробно рассмотрены в [22], а для модели α -ФПУЦ – в [23]. Для β -ФПУЦ решетки аналитически показано, что термализация решетки осуществляется за счет сложных резонансов между шестью колебательными модами [24].

Высказано также и альтернативное мнение [25], что решетки с парными нелинейными потенциалами взаимодействия частиц общего вида $V(\mathbf{q}) = \sum_{i<j} V(|q_i - q_j|)$ не эргодичны.

В эту категорию подпадают все потенциалы ФПУЦ с четными степенями θ : $V(y) = \frac{1}{2}y^2 + \frac{1}{\theta}y^\theta$.

Турбулентность волн

В проблеме термализации недавно появились новые идеи связанные с так называемой теорией турбулентности волн (wave turbulence) [26, 27]. Этот подход позволил рассмотреть многие вопросы с иной точки зрения и решить некоторые ранее нерешенные задачи.

Основы теории турбулентности волн относятся к статистической механике большого числа взаимодействующих волн (колебательных мод) в пределе слабой нелинейности. В основе подхода лежит волновое кинетическое уравнение (подробнее с теорией турбулентности волн можно ознакомиться в обзоре [28]).

Развитая теория турбулентности волн позволила дополнительно прояснить основные механизмы термализации решеток, а также объяснить степенную зависимость времени достижения полной термализации от параметров нелинейности, наблюдаемую в численных экспериментах. В динамике термализации основную роль играют резонансы. И теория позволяет естественным образом предсказать сдвиг и уширение частот колебаний обусловленных нелинейностью. Это позволяет предсказать перекрывание резонансов Чирикова, что и является основой термализации. Теория турбулентности волн позволяет также выяснить причины аномальной теплопроводности одномерных решеток.

Экспонента Ляпунова

В классической механике одним из ответов на вопрос о причинах равномерного распределения энергии является концепция локальной неустойчивости движения, приводящая к хаотической динамике, хотя сами уравнения движения вполне детерминистические.

В работе [29] изучалась модель ФПУЦ $U(y) = \frac{1}{2}y^2 + \frac{1}{\theta}y^\theta$ для $\theta = 4$ и $\theta = 6$. Использован подход, впервые предложенный А. Пуанкаре, и заключающийся в рассмотрении динамики с геометрической точки зрения. Обоснование связи между динамическим основанием статистической механики и дифференциальной геометрией Римана дано в работах [30, 31].

В работе [29] определено “время Ляпунова”, которое обратно наибольшей экспоненте Ляпунова. Время Ляпунова непосредственно связано с параметром нелинейности, который отвечает за степень неинтегрируемость системы. И показано, что известный универсальный закон термализации $t_{\text{eq}} \sim \gamma^{-2}$ (γ – некоторый параметр нелинейности) непосредственно связан со значением максимального показателя Ляпунова.

Солитоны и бризеры

Одной из важнейших проблем биофизики является выяснение механизмов самофокусировки и транспорта энергии, что и происходит, например, при фотосинтезе. Это важнейший биоэнергетический процесс очень быстрый (меньше пикосекунды) и очень эффективный (около 95 %). Биоэнергетика также требует, чтобы передача энергии происходила на большие расстояния, как это реализуется, например, при гидролизе аденозин трифосфата. В этом процессе энергия передается на сравнительно большие расстояния практически без потерь и обеспечивает последующие конформационные изменения биологических макромолекул. Эти и некоторые другие особенности переноса

энергии привели А.С. Давыдова к предположению о том, что солитоны могут отвечать за перенос энергии в биологических системах [32].

Солитоны являются решениями некоторых континуальных уравнений. Например, с помощью уравнения Кортевега–де Вриза Забуски и Крускал показали возможность рекурсии, т.е. возврата динамической системы в исходное состояние [14]. И для объяснения этого явления было сформулировано понятие “солитон”. Они также объяснили причины странного поведения модели ФПУЦ. Устойчивость солитонных решений объясняется точной интегрируемостью соответствующих уравнений.

Хотя перенос энергии посредством солитонов кажется весьма привлекательным механизмом переноса энергии в бионергетике, есть некоторые сомнения в его действительной реализуемости [33, 34].

Был предложен альтернативный и более общий принцип, который может быть применимым к широкому кругу физических, химических и биологических явлений и который связан с концепцией дискретных бризеров (ДБ).

Необходимыми условиями существования бризеров является нелинейность гамильтониана и дискретность решетки [35, 36, 37]. С. Обри (S. Aubry) назвал эти условия “антиконтинуальностью” [38]. Есть достаточные основания верить в то, что для некоторых нелинейных систем, не имеющих точного решения, тем не менее в фазовом пространстве все же существуют траектории весьма близкие к траекториям, относящимся к специальным периодическим во времени решениям – ДБ. Эти локализованные состояния могут существовать очень долгое время.

Существование бризеров объясняется следующим образом. В непрерывном случае (континуальность) для уравнения $U_{tt} - U_{xx} = 0$ спектр обычно линейный (в дисперсионной зависимости выполняется соотношение $\omega^2 \propto k^2$). Однако для аналогичного уравнения в дискретном случае $U(\ell)_{tt} - [U(\ell - 1) + U(\ell + 1) - 2U(\ell)]$, где $\ell \in \mathbb{Z}$, дисперсионное соотношение становится нелинейным: $\omega^2 = 2[1 - \cos(k)]$. Можно показать, что колебательные моды за пределами линейной части спектра не имеют значительной пространственной протяженности, т.е. локализованы.

Существование ДБ известно для многих типов потенциалов: α - и β -ФПУЦ, потенциал Клейна – Гордона и многих других. Это свойство не ограничивается какими-то исключительными интегрируемыми моделями, а является довольно общим.

Результаты численного моделирования дискретных неинтегрируемых систем показывают, что возможно существование большого числа таких решений для многих типов потенциалов.

Одной из проблем биофизики является выяснение возможных механизмов самофокусировки и транспорта энергии в биополимерах. Локализация и перенос энергии имеют жизненно важное значение в природе. Обычно подобные процессы объясняются солитонами [39].

Был предложен альтернативный, по отношению к солитонам, механизм эффективного целенаправленного переноса энергии (targeted energy transfer) с помощью бризеров [40]. Реализация этого механизма подразумевает резонансный перенос энергии.

Рассмотрим простейший случай двух связанных гармонических осцилляторов. Если частоты осцилляторов находятся в резонансе, то любое количество энергии сообщенной одному из осцилляторов начинает периодически перераспределяться между осцилляторами с частотой, пропорциональной энергии связи осцилляторов. Эта картина кардинально меняется в случае ангармонических осцилляторов из-за того, что их частоты зависят от амплитуды.

Пусть некоторая энергия сообщается одному из осцилляторов. Тогда, если начальные частоты находятся в резонансе, то небольшая часть энергии переданная другому

осциллятору нарушает условия резонанса и энергии больше не передается от одного осциллятора к другому. Однако из этого правила есть исключения, когда резонанс все же продолжает существовать и возможна полная передача энергии. Это можно осуществить тонкой настройкой нелинейной решетки таким образом, что возможно реализовать целенаправленный перенос энергии (ЦПЭ). Авторы работы [40], где подробно рассмотрены критерии реализации ЦПЭ, понимают, что в случайно выбранной решетке реализовать этот сценарий практически невозможно. Однако они предполагают, что в процессе эволюции возможна такая настройка параметров системы, что этот механизм может сыграть существенную роль в биоэнергетике.

Скорость звука в нелинейных решетках

Есть некоторые вопросы, не имеющие прямого отношения к проблемам термализации, но важные в практических применениях. Один из них – тепловое расширение. Для гармонического потенциала тепловое расширение отсутствует. Однако у решеток с нелинейными потенциалами возможно тепловое расширение.

При решении задач о динамике (решении соответствующих дифференциальных уравнений) возникает вопрос о выборе граничных условий. Есть два типа граничных условий. Первый тип – свободные граничные условия. В этом случае полная длина решетки ничем не ограничена и может меняться в соответствии с внутренней динамикой решетки. Второй тип граничных условий – циклические граничные условия или жестко закрепленные концы решетки. В этом случае полная длина решетки жестко фиксирована начальными условиями.

Для нелинейных несимметричных потенциалов (α -ФПУЦ, Морзе и некоторых других) существование теплового расширения очевидно: с увеличением температуры длина решетки *со свободными концами* также увеличивается. В этом случае потенциальная энергия взаимодействия соответствует своему минимуму. При этом сохраняется жесткость связей и поэтому скорость звука не меняется. Для решеток с циклическими граничными условиями или жестко закрепленными концами общая длина решетки остается без изменений. Тогда в этом случае нереализованное тепловое расширение приведет к возникновению внутренних напряжений связей и к увеличению эффективной жесткости связей. В связи с чем скорость звука возрастет.

Естественно ожидать, что у решеток с симметричными потенциалами теплового расширения не должно быть. Однако оказывается, что некоторые решетки с такими потенциалами все же испытывают тепловое расширение. Покажем это на примере потенциала β -ФПУЦ: $U(y) = \frac{ky^2}{2} + \frac{\beta y^4}{4}$ [41]. Обезразмерим задачу, т.е. численно положим $k = \beta = m = k_B = 1$.

Тогда потенциал β -ФПУЦ можно переписать в виде

$$U(y) = \left(1 + \frac{y^2}{2}\right) \frac{y^2}{2} \quad (3)$$

и выражение в скобках можно заменить эффективной жесткостью гармонической связи:

$$U(y) = k_{\text{eff}} \frac{y^2}{2}. \quad (4)$$

Проблема заключается в нахождении k_{eff} . Эту задачу можно решить с использованием приближения среднего поля (СП). Среднее значение потенциальной энергии есть

$$\langle U_p(y) \rangle = k_{\text{eff}} \frac{1}{2} \langle y^2 \rangle \quad (5)$$

где $\langle y^2 \rangle$ – среднее значение y^2 .

В гармоническом приближении (4) по вириальной теореме средние значения кинетической и потенциальной энергий равны: $U_p = U_k$. Для одномерных систем выполняется безразмерное равенство $U_k \equiv T/2$ и T есть безразмерная температура. Тогда

$$k_{\text{eff}} \frac{1}{2} \langle y^2 \rangle = \frac{T}{2} \quad (6)$$

Условие самосогласования в приближении СП (выражение в скобках в (3) равно k_{eff}):

$$1 + \frac{1}{2} \langle y^2 \rangle = k_{\text{eff}} \quad (7)$$

Из (3) следует, что $\langle y^2 \rangle = T/k_{\text{eff}}$ и подстановка $\langle y^2 \rangle = T/k_{\text{eff}}$ в уравнение (7) дает самосогласованное решение для k_{eff} :

$$1 + T/(2k_{\text{eff}}) = k_{\text{eff}} \quad (8)$$

с решением

$$k_{\text{eff}} = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{T}{2}} \quad (9)$$

Таким образом, эффективная (“нелинейная”) скорость звука

$$v_{\text{eff}} = \sqrt{k_{\text{eff}}} = \sqrt{\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{T}{2}}}, \quad (m = 1). \quad (10)$$

больше, чем скорость звука $v^{\text{harm}} = 1$ в гармоническом приближении. Например, выражение (10) дает значение $v_{\text{eff}} = 1.27$ для $T = 2$.

Скорость звука в решетке с потенциалом (3) можно вычислить численно, используя коррелятор общего вида $\langle \Delta x_k(t) \Delta x_{k+m}(t + \tau) \rangle$, где $\Delta x_k(t)$ – отклонение k -го узла от положения равновесия в момент времени t . Автокорреляторы подобного типа используются для нахождения корреляции между некоторым событием и его “копией” в другом месте с задержкой по времени. В практических реализациях метода можно фиксировать, например, τ и искать копию, сканируя по узлам решетки m . Можно, напротив, фиксировать m и сканировать по τ . Вместо отклонений Δx можно использовать отклонения скоростей $\Delta \dot{x}$ и использовать корреляторы скорость-скорость и координата-скорость.

Для нахождения скорости звука был использован коррелятор $\langle \Delta x_{50}(t) \Delta x_{50+m}(t + 20) \rangle$ на решетке из $N = 101$ узлов с жесткими граничными условиями при температуре термализованной решетки $T = 2$ (решетка нагревалась с помощью термостата Ланжевена; отключался термостат; система выдерживалась некоторое время до достижения термализации, что проверялось из равномерного распределения энергий; вычислялся коррелятор. Число МД траекторий 10^5 , длина траектории $t = 50$).

Определение скорости звука с помощью автокоррелятора является довольно ресурсоёмкой и длительной процедурой. Однако, это, пожалуй, единственный надежный метод определения скорости звука.

На рисунке 3 показан результат вычисления корреляционной функции. Коррелятор имеет два пика при $m = \pm 25$ и времени $t = 20$, что соответствует скорости звука $v \approx 1.25$, что очень близко к полученному выше результату $v = 1.27$ в приближении среднего поля.

На следующем рисунке показано сравнение скорости звука, вычисленной в приближении среднего поля, и вычислений коррелятора в зависимости от температуры.

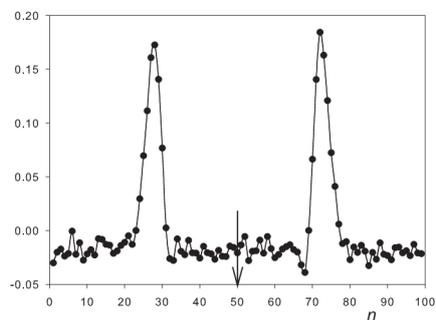


Рис. 3. Значения автокоррелятора координата-координата $\langle \Delta x_{50}(t) \Delta x_{50+m}(t+20) \rangle$ в зависимости от координаты на решетке. Решетка β -ФПУЦ, $N = 101$, $T = 2$. Стрелка указывает на координату $n = 50$.

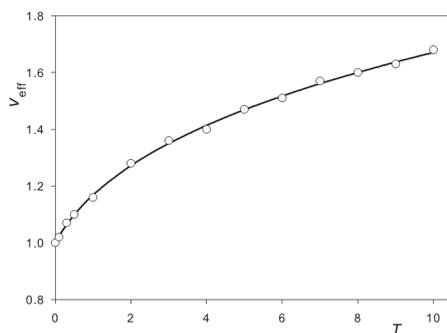


Рис. 4. Скорость звука вычисленная в приближении среднего поля (сплошная линия) и при вычислении коррелятора (кружочки) в зависимости от температуры.

Заметим, что метод СП оказывается применимым вплоть до очень высоких температур $T = 10$, хотя изначально он ориентирован на использование при малых температурах. Также отметим, что увеличение скорости звука с ростом температуры весьма значительное: скорость звука при $T = 8$ больше чем на 50 % превышает скорость звука в гармоническом приближении.

Еще более удивительно влияние граничных условий на теплопроводность одномерных решеток: коэффициент теплопроводности $\kappa \propto 1/\sqrt{N}$ для жестких граничных условий и аномальная зависимость от длины решетки $\kappa \propto \sqrt{N}$ для свободных границ [42]. Причина подобного влияния граничных условий на физически вычисляемую величину не ясна до сих пор.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье рассмотрены некоторые вопросы термализации решеток с различными потенциалами взаимодействия частиц в микроканоническом ансамбле, когда отсутствует взаимодействие с тепловым резервуаром. Такое рассмотрение проведено, поскольку именно микроканонический ансамбль дает возможность аккуратно исследовать большинство проблем термализации.

Изложение дает возможность ознакомиться с некоторыми базовыми принципами термализации.

Авторы данной работы избегали приводить сложные математические выкладки. При необходимости подробности можно найти в цитированной литературе.

В следующей работе будут рассмотрены некоторые практические вопросы термализации в каноническом ансамбле, когда система тем или иным образом приводится во взаимодействие с внешним тепловым резервуаром.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shigaev A.S., Ponomarev O.A., Lakhno V.D. Theoretical and experimental investigation of DNA open state. *Mathematical Biology and Bioinformatics*. 2018. V. 13. № S. doi: [10.17537/2018.13.t162](https://doi.org/10.17537/2018.13.t162)
2. Likhachev I.V., Shigaev A.S., Lakhno V.D. On the thermodynamics of DNA double strand in the Peyrard-Bishop-Dauxois model. *Phys. Lett. A*. 2024. V. 510. P. 129547. doi: [10.1016/j.physleta.2024.129547](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2024.129547)
3. Хинчин А.Я. *Математические основания статистической механики*. Москва: Наука, 2003.
4. Kubo R., Toda M., Hashitsume N. *Statistical Physics II: Nonequilibrium Statistical Mechanics*. New York: Springer 1985. (Springer Series in Solid–State Science, Vol. 31).
5. Toda M. *Theory of Nonlinear Lattices*. New York: Springer, 1989.
6. Likhachev V.N., Astakhova T.Yu., Vinogradov G.A. Thermodynamics and ergodicity of finite one-dimensional Toda and Morse lattices. *Phys. Lett. A*. 2006. V. 354. P. 264–270.
7. Fermi E. Dimostrazione che in generale un sistema meccanico normale è quasi ergodico. *Il Nuovo Cimento*. 1923. V. 25. P. 267–269. (In Italian)
8. Fermi E., Pasta J., Ulam S. *Los Alamos Report LA-1940*. 1955.
9. *The Collected Papers of Enrico Fermi*. Vol. II. Chicago: Chicago University Press, 1965.
10. Campbell D.K., Rosenau P., Zaslavsky G.M. Introduction: The Fermi–Pasta–Ulam problem—The first fifty years. *Chaos*. 2005. V. 15. No. 1. Article No. 015101. doi: [10.1063/1.1889345](https://doi.org/10.1063/1.1889345)
11. *The Fermi-Pasta-Ulam Problem: A Status Report*. Ed. Gallavotti G. Springer, 2008. (Lecture Notes in Physics, V. 728). 308 p. doi: [10.1007/978-3-540-72995-2](https://doi.org/10.1007/978-3-540-72995-2)

12. Dauxois T. Fermi, Pasta, Ulam and a mysterious lady. *Physics Today*. 2008. V. 61. № 1. P. 55–57.
13. Zakharov V.E., Schulman E.I. *Integrability of nonlinear systems and perturbation theory. What is integrability?* Ed. Zakharov V.E. Berlin: Springer, 1991. P. 185–250.
14. Zabusky N.J., Kruskal M.D. Interaction of “solitons” in a collisionless plasma and the recurrence of initial states. *Phys. Rev. Lett.* 1965. V. 15. № 6. P. 240–243.
15. Pace S.D., Reiss K.A., Campbell D.K. The β -Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou recurrence problem. *Chaos* 2019. V. 29. № 11. P. 113107. doi: [10.1063/1.5122972](https://doi.org/10.1063/1.5122972)
16. Pierangeli D., Flammini M., Zhang L., Marcucci G. Agranat, A.J., Grinevich P.G., Santini P.M., Conti C., DelRe E. Observation of Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou Recurrence and Its Exact Dynamics. *Phys. Rev. X*. 2018. V. 8. P. 041017. doi: [10.1103/PhysRevX.8.041017](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.8.041017)
17. Hofstrand A. Near-integrable dynamics of the Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou problem. *Phys. Rev. E*. 2024. V. 109. P. 034204. doi: [10.1103/PhysRevE.109.034204](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.109.034204)
18. Borgonovi F., Izrailev F.M. Classical statistical mechanics of a few-body interacting spin model. *Phys. Rev. E*. 2000. V. 62. P. 6475.
19. Израилев Ф.М., Чириков Б.В. *Докл. АН СССР*. 1966. Т. 166. С. 57.
20. Chirikov B.V. *Phys. Rep.* 1979. V. 52. P. 263.
21. Likhachev V.N., Astakhova T.Yu., Vinogradov G.A. The Dynamics of a One-Dimensional Disordered Morse Lattice: Cooling Caused by Adiabatic Stretching. *Russ. J. Phys. Chem. B*. 2009. V. 3. № 1. P. 140–150. doi: [10.1134/S1990793109010229](https://doi.org/10.1134/S1990793109010229)
22. Lvov Y.V. Onorato M. Double Scaling in the Relaxation Time in the β -Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou Model. *Phys. Rev. Lett.* 2018. V. 120. P. 144301. doi: [10.1103/PhysRevLett.120.144301](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.144301)
23. Onorato M., Vozella L., Proment D., Lvov Y.V. Route to thermalization in the α -Fermi-Pasta-Ulam system. *PNAS*. 2015. V. 112. № 14. P. 4208–4213. doi: [10.1073/pnas.1404397112](https://doi.org/10.1073/pnas.1404397112)
24. Benettin G., Christodoulidi H., Ponno A. The Fermi-Pasta-Ulam problem and its underlying integrable dynamics. *J. Stat. Phys.* 2013. V. 152. № 2. P. 195–212.
25. Козлов В.В. *Тепловое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре*. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002.
26. Zakharov V.E., L’vov Y.S., Falkovich G. *Kolmogorov spectra of turbulence I: Wave turbulence*. Springer Science & Business Media, 2012.
27. Galtier S. *Physics of Wave Turbulence*. Cambridge University Press, 2022.
28. Onorato M., Lvov Y.V., Dematteis G., Chibbaro S. Wave Turbulence and thermalization in one-dimensional chains. *Phys. Reports*. 2023. V. 1040. P. 1–36. doi: [10.1016/j.physrep.2023.09.006](https://doi.org/10.1016/j.physrep.2023.09.006)
29. Liu Y., He D. Analytical approach to Lyapunov time: Universal scaling and thermalization. *Phys. Rev. E*. 2021. V. 103. Article No. L040203. doi: [10.1103/PhysRevE.103.L040203](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.L040203)
30. Pettini M. *Geometry and Topology in Hamiltonian Dynamics and Statistical Mechanics*. New York: Springer, 2008.
31. Krylov N.S. *Works on the Foundations of Statistical Physics*. Princeton: Princeton University Press, 1979.
32. Давыдов А.С. *Солитоны в молекулярных системах*. Киев: Наук. думка, 1984.
33. Lomdahl P.S., Kerr W.C. *Phys. Rev. Lett.* 1985. V. 55. P. 1235.
34. Wang X.D., Brown D.W., Lindenberg K. *Phys. Rev. Lett.* 1989. V. 62. P. 1796.
35. Flach S., Willis C.R. Discrete breathers. *Phys. Reports*. 1998. V. 295. P. 181–264. doi: [10.1016/s0370-1573\(97\)00068-9](https://doi.org/10.1016/s0370-1573(97)00068-9)
36. Aubry S. Discrete Breathers: Localization and transfer of energy in discrete Hamiltonian nonlinear systems. *Physica D*. 2006. V. 216. P. 1–30. doi: [10.1016/j.physd.2005.12.020](https://doi.org/10.1016/j.physd.2005.12.020)

37. Flach S., Gorbach A.V. Discrete breathers – Advances in theory and applications. *Phys. Reports*. 2008. V. 467. P. 1–116. doi: [10.1016/j.physrep.2008.05.002](https://doi.org/10.1016/j.physrep.2008.05.002)
38. MacKay R.S., Aubry S. Discrete breathers in anharmonic models with acoustic phonons. *Nonlinearity*. 1994. V. 7. P. 1623–1643.
39. Давыдов А.С. *Солитоны в биоэнергетике*. Киев: Наук. думка, 1986.
40. Kopidakis G., Aubry S., Tsironis G.P. Targeted Energy Transfer through Discrete Breathers in Nonlinear Systems. *Phys. Rev. Lett.* 2001. V. 87. № 16. P. 165501. doi: [10.1103/PhysRevLett.87.165501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.165501)
41. Astakhova T.Yu., Likhachev V.N., Vinogradov G.A. Heat conductance in nonlinear lattices at small temperature gradients. ArXiv:1006.1779 nlin.CD
42. Lepri S., Livi R., Politi A. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices. *Phys. Reports* 2003. V. 377. P. 1–80. doi: [10.1016/S0370-1573\(02\)00558-6](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(02)00558-6)

Рукопись поступила в редакцию 13.05.2024.

Переработанный вариант поступил 12.06.2024.

Дата опубликования 08.07.2024.

Mathematical Biology and Bioinformatics

doi: [10.17537/2024.19.248](https://doi.org/10.17537/2024.19.248)

===== MATHEMATICAL MODELING =====

On The Thermalization of One-Dimensional Lattices.

I. Microcanonical Ensemble

Vinogradov G.A.¹, Lakhno V.D.²

¹*Emanuel Institute of Biochemical Physics of RAS, Moscow, Russia*

²*Institute of Mathematical Problems of Biology RAS, Keldysh Institute of Applied Mathematics of Russian Academy of Sciences, Pushchino, Russia*

Abstract. In numerical simulation of biomacromolecule, the issues of thermalization, i.e., equal distribution of energy over the degrees of freedom, occupy an important place. In this paper we consider some mechanisms of lattice thermalization: Chirikov resonances, wave turbulence and some others. We consider thermalization in a microcanonical ensemble when the system is isolated from external fields and the total energy is conserved. Although microcanonical ensembles are rarely used in practical calculations, however, the basic ideas about the thermalization mechanisms are obtained for these systems. The main attention is paid to the consideration of the lattices thermalization with Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou potentials, since the main efforts to understand the basis of thermalization have been made precisely for lattices of this type. The role of solitons and breathers in thermalization is discussed.

Key words: *thermalization, microcanonical ensemble, ergodicity, FPUT lattice.*