

PACS: 02.70, 05.20.Gg, 47.11.Mn

А.Н. Артемов

СТАТИСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ, КОНТАКТИРУЮЩИХ С ЛОГИСТИЧЕСКИМ ТЕРМОСТАТОМ

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

Статья поступила в редакцию 13 мая 2019 года

Статистические свойства динамических систем, связанных с логистическим термостатом, изучены на примере гармонического осциллятора методами кумулянтного анализа. Показано, что термодинамический ансамбль, создаваемый таким термостатом, является неканоническим и неэргодичным. Сформулированы два признака, позволяющих надежно установить неэргодичность детерминистически термостатированных динамических систем.

Ключевые слова: статистические свойства, динамические системы, термостат, кумулянтный анализ

Введение

В настоящее время методы молекулярной динамики широко используются для исследования равновесных термодинамических свойств многочастичных систем. Термостаты, т.е. уравнения движения механики, дополненные динамическими средствами контроля температуры, применяются для моделирования термодинамических ансамблей. Известны стохастические и детерминистические термостаты.

В случае стохастического термостата термодинамический ансамбль описывается стохастической системой уравнений движения Ланжевена. Этот подход в принципе позволяет создать канонический ансамбль. Однако часто он оказывается неудовлетворительным из-за медленной сходимости к состоянию равновесия.

Детерминистические термостаты представляют альтернативный способ решения проблемы. В этом случае ансамбль задается системой обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений в расширенном фазовом пространстве. Дополнительными фазовыми переменными являются один, два или больше коэффициентов псевдотрения, которые подчиняются специфическим уравнениям движения. Эти уравнения устроены таким образом, что они позволяют контролировать некоторые макроскопические параметры ансамблей.

Впервые детерминистический термостат был предложен Нозе [1]. Усовершенствованный Хувером [2], он получил известность как термостат Нозе–Хувера. Он контролирует кинетическую температуру. Неэргодичность

ансамблей, генерируемых этими термостатами, [2,3] стала стимулом для разработки других термостатов [4,5] и целых их семейств [6–10].

Статистические свойства равновесных динамических систем описываются стационарной функцией распределения (СФР), которая удовлетворяет стационарному уравнению непрерывности Лиувилля, соответствующему рассматриваемой системе. В случае стационарной динамической системы, связанной с любым детерминистическим термостатом, одним из решений уравнения непрерывности является СФР, каноническая в физическом фазовом пространстве и гауссова относительно дополнительных переменных. Но реальная функция распределения, полученная путем решения уравнений движения системы, может быть другой и, естественно, неканонической.

Еще одной проблемой является эргодичность обсуждаемых систем. Система является эргодичной, если ее вероятностная мера инвариантна, т.е. ее СФР не зависит от начальных условий. В случае термостатированных систем проверка эргодичности, как правило, сводилась к исследованию геометрических свойств решений. Наиболее распространенным является изучение заполнения фазового пространства траекторией системы. Эти методы не являются надежными, поэтому получаемые результаты оказываются противоречивыми [11–16].

В работе [17] статистические свойства детерминистически термостатированных гармонических осцилляторов на примере трех термостатов [2–4] были исследованы принципиально другим способом. Здесь был использован кумулянтный подход [18,19] для изучения свойств СФР анализируемых систем. В результате было обнаружено, что ряд кумулянтов СФР рассматриваемых систем, полученных усреднением по времени вдоль траекторий, не совпадают с кумулянтами канонических распределений, что свидетельствует о неканоничности создаваемых ансамблей. Кроме того, было показано, что эти неканонические кумулянты зависят от начальных условий, т.е. СФР ансамблей различны на разных траекториях системы, что означает неэргодичность ансамблей.

Логистический термостат [20] отличается от других сильной нелинейностью связи с системой. Авторы считают это преимуществом, улучшающим эргодические свойства термостата. Они полагают, что данный термостат успешно прошел все тесты на эргодичность.

Целью настоящей работы является исследование статистических свойств термодинамического ансамбля, который образуется на основе одномерного гармонического осциллятора, связанного с логистическим термостатом, методами кумулянтного анализа.

1. Кумулянты и вырожденные уравнения для кумулянтов

В данной работе анализируются статистические свойства детерминистической динамической системы, эволюция которой описывается уравнениями движения вида

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{g}(\mathbf{q}), \quad (1)$$

где \mathbf{q} – вектор фазовых переменных, $\mathbf{g}(\mathbf{q})$ – векторная нелинейная дифференцируемая функция.

Распределение системы в фазовом пространстве описывается функцией распределения $W(\mathbf{q}, t)$. Предполагается существование ее стационарного предела при $t \rightarrow \infty$. Характеристическая функция, которая представляет собой фурье-образ функции распределения

$$\theta(\mathbf{v}, t) = \int \exp\{i(\mathbf{v}\mathbf{q})\} W(\mathbf{q}, t) d\mathbf{q}, \quad (2)$$

является эквивалентным способом описания распределения системы. Моменты и кумулянты – это коэффициенты разложения в ряд характеристической функции и ее логарифма соответственно:

$$\begin{aligned} \theta(\mathbf{v}, t) &= \sum_{m_1 \dots m_n=0}^{\infty} \frac{\alpha(t)_{m_1 \dots m_n}^{q_1 \dots q_n}}{m_1! \dots m_n!} (iv_1)^{m_1} \dots (iv_n)^{m_n} = \\ &= \exp \left(\sum_{m_1 \dots m_n=0}^{\infty} \frac{\kappa(t)_{m_1 \dots m_n}^{q_1 \dots q_n}}{m_1! \dots m_n!} (iv_1)^{m_1} \dots (iv_n)^{m_n} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $\alpha(t)_{m_1 \dots m_n}^{q_1 \dots q_n}$ – совместные моменты, $\kappa(t)_{m_1 \dots m_n}^{q_1 \dots q_n}$ – совместные кумулянты n переменных $q_1 \dots q_n$, i – мнимая единица. Полный набор моментов и кумулянт полностью определяет функцию распределения $W(\mathbf{q}, t)$, если ряд (3) сходится при всех $\{v_i\}_{i=1}^n$.

Нужно отметить, что значения моментов и кумулянт для анализа статистических, в частности корреляционных, свойств динамических систем сильно различаются. Так, если совместный момент нескольких переменных отличен от нуля, то это не дает никакой информации относительно их статистической зависимости. Но ненулевой совместный кумулянт нескольких переменных однозначно указывает на статистическую зависимость соответствующих величин.

В дальнейшем нам понадобится понятие кумулянтных скобок [18,19]. Они представляются в виде угловых скобок с несколькими аргументами, разделенными запятыми. Если аргументами являются простые переменные, то кумулянтная скобка совпадает с соответствующим кумулянт, например $\langle q_i, q_j, q_i \rangle = \kappa_{2,1}^{q_i, q_j}$. В случае, когда один или несколько аргументов представляют функции переменных, для выражения скобки через кумулянты нужно выполнить операцию «раскрыть кумулянтные скобки» [18,19].

Кумулянтный анализ широко используется для статистического анализа стохастических дифференциальных уравнений в теории марковских процессов. Функция распределения такой системы подчиняется уравнению Фокке-

ра–Планка. Это уравнение, а также уравнения для кумулянтов определяются двумя (матричными) кинетическими коэффициентами \mathbf{K}_1 и \mathbf{K}_2 . Первый зависит от структуры динамических уравнений, второй – от случайных сил. В случае детерминистических систем, в которых случайные силы отсутствуют, уравнение Фоккера–Планка вырождается в уравнение непрерывности Лиувилля, которое определяется одним коэффициентом \mathbf{K}_1 .

Впервые кумулянтный анализ для изучения статистических свойств детерминистических систем применил В. Конторович [21]. Вырожденные уравнения для кумулянтов он получил из полной системы [18,19], устремив к нулю амплитуды случайных сил. В работе [17] приведен упрощенный вывод этих уравнений. Здесь мы не будем выводить уравнения, отсылая читателя к цитированной литературе, а просто выпишем их в окончательной форме.

Вырожденные уравнения для кумулянтов зависят от одного кинетического коэффициента $\mathbf{K}_1 = \mathbf{g}(\mathbf{q})$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle q_i \rangle &= \dot{\kappa}_1^{q_i} = \langle K_{1,i} \rangle, \\ \frac{d}{dt} \langle q_i, q_j \rangle &= \dot{\kappa}_{1,1}^{q_i, q_j} = \langle q_i, K_{1,j} \rangle + \langle q_j, K_{1,i} \rangle = 2 \left\{ \langle q_i, K_{1,j} \rangle \right\}_s, \\ \frac{d}{dt} \langle q_i, q_j, q_k \rangle &= \dot{\kappa}_{1,1,1}^{q_i, q_j, q_k} = \langle q_i, q_j, K_{1,k} \rangle + \langle q_i, q_k, K_{1,i} \rangle + \langle q_j, q_k, K_{1,i} \rangle = \\ &= 3 \left\{ \langle q_i, q_j, K_{1,k} \rangle \right\}_s, \\ \frac{d}{dt} \langle q_i, q_j, q_k, q_l \rangle &= \dot{\kappa}_{1,1,1,1}^{q_i, q_j, q_k, q_l} = 4 \left\{ \langle q_i, q_j, q_k, K_{1,l} \rangle \right\}_s, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь символ $\left\{ \dots \right\}_s$ – скобки Стратоновича, которые означают полностью симметричную сумму слагаемых, заключенных внутри. Цифра перед скобками – это число слагаемых в выражении.

Таким образом, уравнения для кумулянтов представляют собой бесконечную систему связанных уравнений. Как правило, рассматривают конечное число уравнений, полагая кумулянты высшего порядка равными нулю.

В данной статье рассмотрим только небольшое число ключевых уравнений, что позволит нам сделать качественные выводы относительно статистических свойств логистического термостата. В качестве механической системы, взаимодействующей с термостатом, примем одномерный гармонический осциллятор с трехмерным расширенным фазовым пространством. Фазовыми переменными в нем являются координата x , импульс p и коэффициент квазитрения ζ . Для упрощения вида уравнений в дальнейшем будем опускать верхние индексы кумулянтов, но при этом фиксируем порядок переменных в нижних индексах, а именно

$$\kappa_{k,l,m}^{x,p,\zeta} = \kappa_{k,l,m}. \quad (5)$$

2. Логистический термостат

Обычно детерминистические термостаты строятся на основе гамильтоновой динамики. Фазовое пространство механической системы расширяется за счет дополнительных динамических переменных, обеспечивающих ее связь с термостатом. Целью такого подхода является создание равновесных канонических термодинамических ансамблей на базе механических динамических систем.

Логистический термостат построен на основе «плотностной динамики» (density dynamics) [22]. Этот подход ориентирован на создание термодинамических ансамблей с произвольной равновесной плотностью вероятности $W(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \zeta)$ распределения системы в фазовом пространстве, здесь \mathbf{p}, \mathbf{x} и ζ – фазовые переменные в физическом и расширенном пространстве. Дифференциальные уравнения движения получаются так же, как в гамильтоновой механике, только вместо гамильтониана используется функция $\Theta(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \zeta) = -\ln(W(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \zeta))$.

Для получения логистического термостата функция распределения выбирается в виде [20]:

$$W(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \zeta) = \frac{\exp\left\{-\frac{H(\mathbf{x}, \mathbf{p})}{T}\right\}}{Z} f(\zeta), \quad (6)$$

где $H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ – гамильтониан механической системы, Z – нормировочный множитель, а в качестве функции распределения дополнительной переменной выбрана функция логистического распределения

$$f(\zeta) = \frac{1}{4Q} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\zeta}{2Q}\right), \quad (7)$$

где параметр Q называется массой термостата.

В случае одномерного гармонического осциллятора, взаимодействующего с логистическим термостатом, уравнения движения динамической системы имеют вид [20]:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{p}{m}, \\ \dot{p} &= -kx - \frac{T}{Q} p \operatorname{th}\left(\frac{\zeta}{2Q}\right), \\ \dot{\zeta} &= \frac{p^2}{m} - T. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь x, p – координата и импульс частицы, ζ – дополнительная переменная – коэффициент квазитрения, m – масса частицы, k – коэффициент упругости, T – температура термостата.

Особенностью системы (8) является то, что стационарная функция распределения

$$W(q) \propto \exp \left\{ -\frac{p^2}{2mT} - \frac{kx^2}{2T} \right\} f(\zeta) \quad (9)$$

удовлетворяет стационарному уравнению непрерывности Лиувилля. Частная функция распределения, относящаяся к физическому фазовому пространству, – гауссова и каноническая. Она полностью определяется двумя ненулевыми кумулянтами

$$\kappa_{2,0,0} = \frac{T}{k}, \quad \kappa_{0,2,0} = mT. \quad (10)$$

Распределение дополнительной переменной дается логистической функцией (7). Она задается бесконечным числом кумулянтов.

Функция (9) не единственное решение уравнения Лиувилля. Нашей целью является изучение статистических свойств равновесных термодинамических ансамблей, реализующихся в результате решения уравнений движения (8). В последующих разделах эта задача решается методами кумулянтного анализа.

3. Кумулянтные уравнения и кумулянты логистического термостата

Кинетические коэффициенты \mathbf{K}_1 определяются структурой системы уравнений (8):

$$\mathbf{K}_1 = (K_{1,x}, K_{1,p}, K_{1,\zeta}) = \left(\frac{p}{m}, -kx - \frac{T}{Q} p \operatorname{th} \left(\frac{\zeta}{2Q} \right), \frac{p^2}{m} - T \right). \quad (11)$$

Поскольку нас интересуют свойства равновесного ансамбля, будем анализировать только стационарные уравнения для кумулянтов. Слева от каждого уравнения указывается знак производной по времени от кумулянта, чтобы было понятно, из какого нестационарного уравнения получено данное выражение.

Рассмотрим простейшее уравнение

$$\dot{\kappa}_{1,0,0} : \langle K_{1,x} \rangle = \left\langle \frac{p}{m} \right\rangle = \frac{1}{m} \kappa_{0,1,0} = 0. \quad (12)$$

Из него следует, что первый кумулянт импульса равен нулю. Он равен среднему значению импульса и совпадает с аналогичным кумулянтном канонического распределения. Кумулянты, совпадающие с кумулянтами канонической функции распределения, в дальнейшем будем называть каноническими.

Следующее уравнение является более сложным:

$$\dot{\kappa}_{0,1,0} : \langle K_{1,p} \rangle = -k \langle x \rangle - \frac{T}{Q} \left\langle p \operatorname{th} \left(\frac{\zeta}{2Q} \right) \right\rangle = -k \kappa_{1,0,0} - \frac{T}{Q} \left\langle p \operatorname{th} \left(\frac{\zeta}{2Q} \right) \right\rangle = 0. \quad (13)$$

Оно связывает первый кумулянт координаты со статистическим средним функции переменных p и ζ . Полученное уравнение не позволяет непосредственно определить кумулянт $\kappa_{1,0,0}$, поскольку указанное статистическое

среднее не может быть вычислено аналитически. Однако, учитывая, что этот кумулянт представляет собой среднее значение координаты, из соображений симметрии можно понять, что он равен нулю. К тому же данное утверждение легко проверяется численно. Таким образом, кумулянт $\kappa_{1,0,0}$ тоже является каноническим. На основании аналогичных рассуждений можно заключить, что $\kappa_{0,0,1} = 0$.

Следующее уравнение определяет нетривиальный канонический кумулянт:

$$\dot{\kappa}_{0,0,1} : \langle K_{1,\zeta} \rangle = \left\langle \frac{p^2}{m} \right\rangle - T = \frac{1}{m} (\langle p, p \rangle + \langle p \rangle^2) - T = \frac{1}{m} \kappa_{0,2,0} - T = 0. \quad (14)$$

Здесь среднее от квадрата импульса выражено через кумулянты (П1) (см. приложение) и учтено, что кумулянт $\kappa_{0,1,0}$ равен нулю. В результате получаем $\kappa_{0,2,0} = mT$, что совпадает с аналогичным кумулянтом канонического распределения (10).

Счетное множество тривиальных канонических решений уравнений для кумулянтов получим, рассматривая уравнения

$$\dot{\kappa}_{n,0,0} : \left\langle \underbrace{x, \dots, x}_{n-1}, K_{1,x} \right\rangle = \left\langle \underbrace{x, \dots, x}_{n-1}, \frac{p}{m} \right\rangle = \frac{1}{m} \kappa_{n-1,1,0} = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (15)$$

Последнее уравнение, которое мы рассмотрим, является ключевым в данном исследовании. Оно связывает кумулянты $\kappa_{2,0,0}$ и $\kappa_{0,2,0}$ с кумулянтной скобкой, содержащей нелинейную функцию:

$$\dot{\kappa}_{1,1,0} : \langle p, K_{1,x} \rangle + \langle x, K_{1,p} \rangle = \frac{1}{m} \langle p, p \rangle - k \langle x, x \rangle - \frac{T}{Q} \left\langle x, p \operatorname{th} \left(\frac{\zeta}{2Q} \right) \right\rangle = 0. \quad (16)$$

Для того чтобы раскрыть такую скобку, нужно разложить функцию в ряд и раскрывать скобки в каждом слагаемом. Поскольку нас интересуют только качественные ответы, ограничимся двумя первыми членами ряда

$$\begin{aligned} & \frac{1}{m} \kappa_{0,2,0} - k \kappa_{2,0,0} - \frac{T}{2Q^2} \langle x, p \zeta \rangle + \frac{T}{24Q^4} \langle x, p \zeta^3 \rangle - \dots = \\ & = \frac{1}{m} \kappa_{0,2,0} - k \kappa_{2,0,0} - \frac{T}{2Q^2} \kappa_{1,1,1} + \frac{T}{24Q^4} \kappa_{1,1,3} - \dots = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Во второй строке использованы выражения (П2) и (П3) для кумулянтных скобок и принято во внимание, что все кумулянты первого порядка равны нулю.

Дальнейший анализ статистических свойств системы возможен только с использованием численных методов.

4. Численный подход

Численный подход подразумевает численное решение системы уравнений движения (8). Статистические средние при этом рассматриваются как средние по времени вдоль траекторий движения системы, асимптотически (при $t_{av} \rightarrow \infty$) сходящиеся к их предельным значениям:

$$\left\langle x^k p^m \zeta^n \right\rangle_t = \frac{1}{t_{av}} \int_t^{t+t_{av}} x(s)^k p(s)^m \zeta(s)^n ds \xrightarrow{t_{av} \rightarrow \infty} \left\langle x^k p^m \zeta^n \right\rangle. \quad (18)$$

Здесь t_{av} – время усреднения; $x(s)$, $p(s)$, $\zeta(s)$ – значения фазовых переменных на траектории системы в момент времени s .

Кумулянты не являются статистическими средними. Они представляют собой нелинейные комбинации статистических средних (моментов). Поэтому, чтобы вычислить кумулянт, нужно выразить его через моменты и вычислять моменты как средние по времени (в качестве примеров см. выражения (П4), (П5)).

Система уравнений (8) нелинейная. В зависимости от параметров она демонстрирует регулярное (периодическое) и хаотическое движения.

4.1. Регулярное движение

Регулярное движение системы реализуется при больших значениях массы термостата и относительно малых значениях начальных координаты x_0 и импульса p_0 . Для того чтобы определить тип движения системы, строим сечение Пуанкаре, которое представляет собой множество точек пересечения фазовой траекторией системы плоскости $\zeta = 0$. На рис. 1 приведено сечение Пуанкаре при $Q = 1$ и начальных условиях $x_0 = 0.2$ и $p_0 = 0$. На нем показаны два типа точек. В точках, находящихся между двумя горизонтальными прямыми, траектория системы пересекает плоскость $\zeta = 0$ в направлении от положительных значений переменной ζ к отрицательным. Внешние точки соответствуют противоположному направлению траектории.

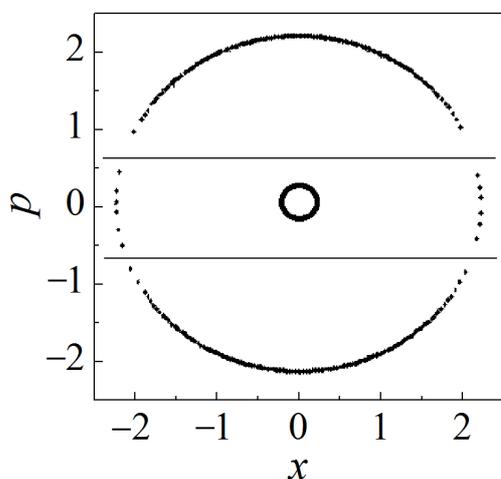


Рис. 1. Сечение Пуанкаре фазового пространства системы гармонического осциллятора, связанного с логистическим термостатом, в режиме регулярного движения

На рис. 2 приведены средние по времени $\langle x, x \rangle_t$, $\langle p, p \rangle_t$ и $\langle x, p, \zeta \rangle_t$, асимптотически сходящиеся к кумулянтам $\kappa_{2,0,0}$, $\kappa_{0,2,0}$ и $\kappa_{1,1,1}$ соответственно. Система уравнений решалась с начальными условиями $x_0 = 0$, $p_0 = 0.1$ и $\zeta_0 = 0$. Вычисляемые величины являются статистическими средними и совпадают с соответствующими моментами, поскольку все кумулянты (моменты) первого порядка равны нулю. Среднее $\langle p, p \rangle_t$ быстро сходится к значению $\kappa_{0,2,0} = mT = 0.5$, совпадающему по величине с аналогичным кумулянтном канонического распределения (10). Средние $\langle x, x \rangle_t$ и $\langle x, p, \zeta \rangle_t$ также быстро сходятся к некоторым значениям, отличающимся, однако, от величин соответствующих канонических кумулянтов $\kappa_{2,0,0} = T/k = 0.5$ (10) и $\kappa_{1,1,1} = 0$.

Таким образом, на этом рисунке показаны два разных типа средних. Первый представлен каноническим средним $\langle p, p \rangle_t$. Такие средние асимптотически сходятся к кумулянтам канонического распределения, которые явля-

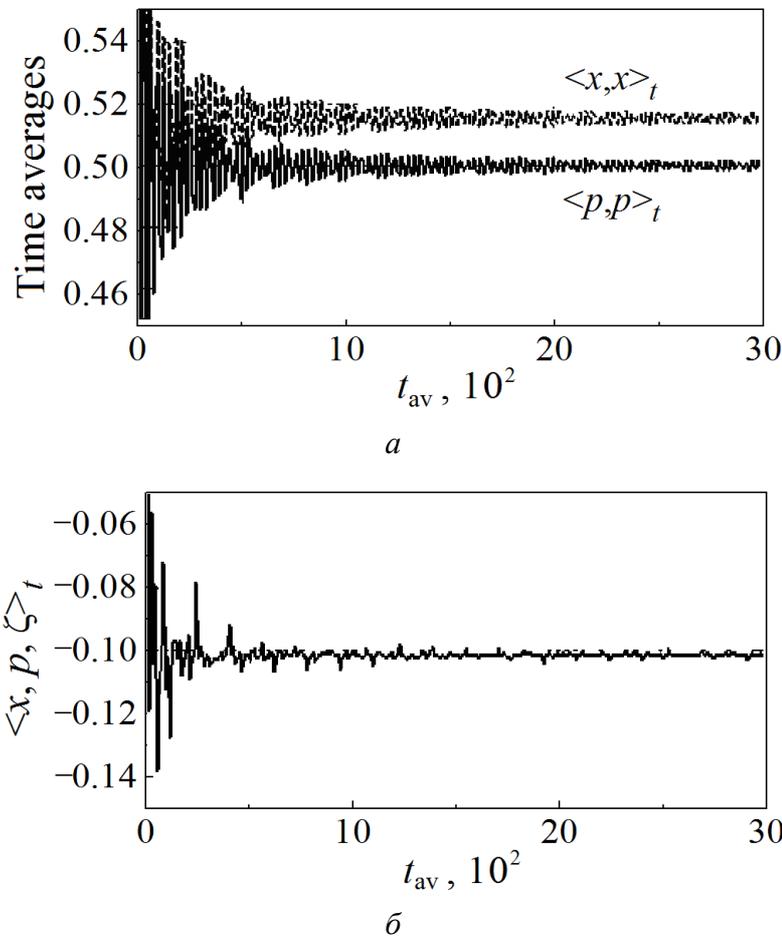


Рис. 2. Зависимости средних по времени системы гармонического осциллятора, связанного с логистическим термостатом, от времени усреднения в режиме регулярного движения

ются однозначными решениями уравнений для кумулянтов. Они зависят только от параметров системы.

Средние второго типа, кроме параметров системы, зависят и от начальных условий системы уравнений (8). Эта зависимость показана на рис. 3 на примере среднего $\langle x, p, \zeta \rangle_t$. Для получения каждой точки на графике средние по времени вычислялись с $t_{av} = 10000$.

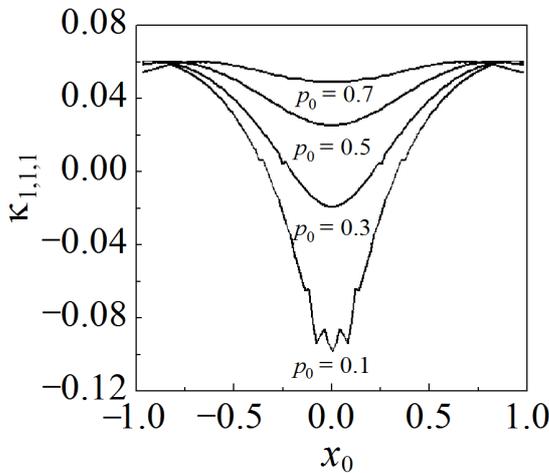


Рис. 3. Зависимость среднего по времени $\langle x, p, \zeta \rangle_t$, сходящегося к кумулянту $\kappa_{1,1,1}$, от начального значения координаты x_0 при различных значениях начального импульса p_0 и $\zeta_0 = 0$

Зависимость от начальных условий хотя бы одного кумулянта означает такую зависимость всей функции распределения. Отсюда следует, что при усреднении по времени мы имеем разные функции распределения на разных траекториях движения системы. А это является признаком неэргодичности созданного данным термостатом термодинамического ансамбля.

4.2. Хаотическое движение

Хаотический режим движения системы в большей степени соответствует идее эргодичности. Все расчеты в данном разделе проводились с массой термостата $Q = 0.1$ и начальными условиями $x_0 = 0$, $p_0 = 0.1$ и $\zeta_0 = 0$. Хаотический характер движения при этих параметрах подтверждается сечением Пуанкаре фазового пространства системы плоскостью $\zeta_0 = 0$, показанным на рис. 4. Здесь так же, как на рис. 1, горизонтальными линиями разделены точки, в которых траектория пересекает плоскость в разных направлениях.

На рис. 5 представлена зависимость временных средних $\langle x, x \rangle_t$ и $\langle p, p \rangle_t$, которые должны сходиться к кумулянтам $\kappa_{2,0,0}$ и $\kappa_{0,2,0}$, при хаотическом движении системы. Как видно из рисунка, среднее $\langle p, p \rangle_t$ очень быстро достигает своего предельного значения, совпадающего с величиной канонического кумулянта $\kappa_{0,2,0} = 0.5$ (10). Другое среднее $\langle x, x \rangle_t$ ведет себя иначе, оно не демонстрирует стремления к какому-либо пределу. В предыдущем разделе было показано, что при регулярном режиме движения системы это

среднее не сходится к своему каноническому кумулянту, а значит, зависит от начальных условий.

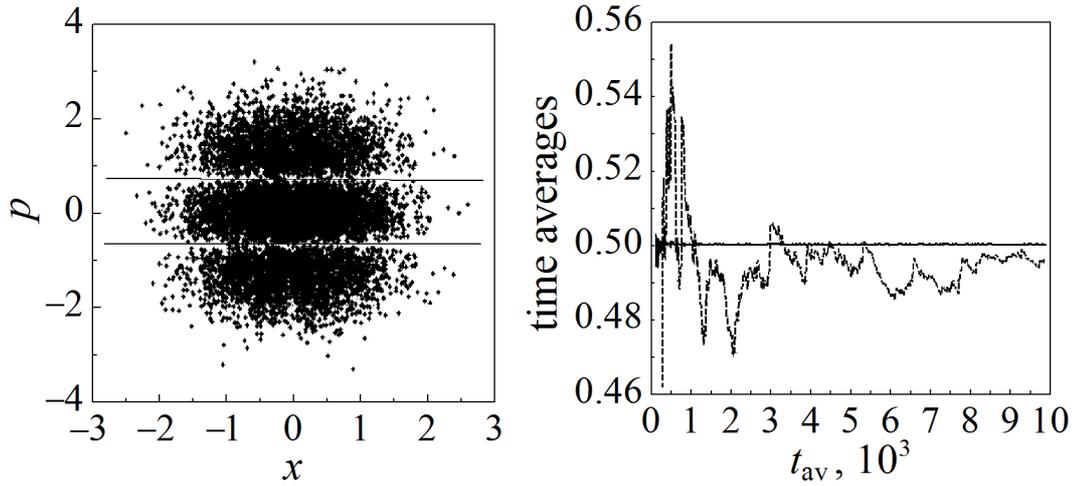


Рис. 4. Сечение Пуанкаре фазового пространства системы гармонического осциллятора, связанного с логистическим термостатом, в режиме хаотического движения

Рис. 5. Зависимость средних по времени системы гармонического осциллятора, связанного с логистическим термостатом, от времени усреднения при хаотическом движении системы: ---- — $\langle x, x \rangle_t$ — — $\langle p, p \rangle_t$

Еще одно среднее по времени, $\langle x, p, \zeta \rangle$, которое ведет себя подобным образом, приведено на рис. 6. Здесь время усреднения увеличено на порядок, однако сходимости к определенному пределу не наблюдается.

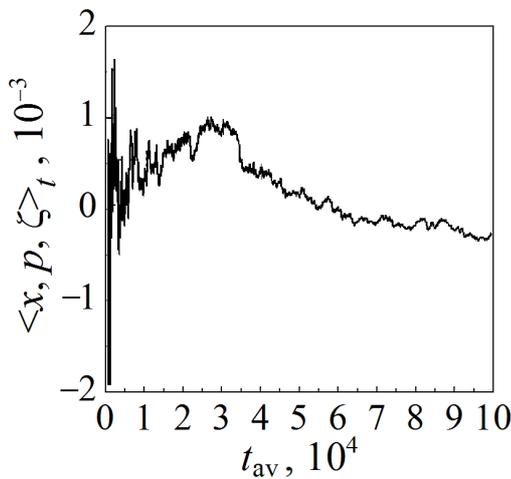


Рис. 6. Зависимость среднего по времени $\langle x, p, \zeta \rangle_t$ от времени усреднения при хаотическом движении системы

5. Признаки неэргодичности ансамбля

Установить неканоничность термодинамического ансамбля довольно легко. Для этого достаточно обнаружить хотя бы один кумулянт СФР, который отличается от такого же кумулянта канонического распределения. Решение

вопроса об эргодичности ансамбля требует более детального анализа свойств кумулянтов и средних по времени.

Поведение средних по времени, аппроксимирующих канонические и неканонические кумулянты, в системе гармонического осциллятора, связанного с логистическим термостатом, качественно согласуется с поведением таких же средних в случае других детерминистических термостатов. Причины такого поведения подробно обсуждаются в [17].

Обобщая результаты настоящей работы и работы [17], сформулируем здесь два признака неэргодичности детерминистически термостатированных систем. Эти признаки в отличие от прежних не требуют большого объема вычислений и дают надежный результат.

Первый признак заключается в следующем. В неэргодической системе определяемые численно средние по времени, аппроксимирующие канонические кумулянты, довольно быстро ($t_{av} \approx 3000 - 10000$) сходятся к своим пределам. В отличие от них средние, аппроксимирующие неканонические кумулянты, в хаотическом режиме движения «сходятся» очень медленно, вернее, они не имеют определенного предела.

Такое поведение средних связано, с одной стороны, с неустойчивостью хаотических систем относительно начальных условий. Это означает, что сколь угодно близкие в начальный момент времени траектории за конечное время экспоненциально быстро расходятся на конечное расстояние. Как результат, в произвольный момент времени сколь угодно близкими к данной траектории оказываются траектории с произвольными (не близкими) начальными условиями. При усреднении по точной траектории это не имело бы никакого значения.

Но, с другой стороны, при численном решении дифференциальных уравнений реально решается разностное уравнение, которое аппроксимирует дифференциальное с конечной точностью. Поэтому на каждом шаге по времени численное решение перескакивает с одной точной траектории на другую, близкую. Однако близкие траектории соответствуют различным начальным условиям. Таким образом, численная траектория системы состоит из множества точек, принадлежащих разным точным траекториям с разными начальными условиями. Она не является сколько-нибудь близкой ни к одной точной траектории.

Если вдоль численной траектории усредняется величина, не зависящая от начальных условий (например, канонический кумулянт), то такое среднее по времени быстро сходится к своему пределу. Если же усредняемая величина зависит от начальных условий (например, неканонический кумулянт), то такое среднее не будет сходиться к какому-либо определенному пределу. На деле это выглядит как очень медленная «сходимость».

Второй признак связан со структурой системы уравнений для кумулянтов. В подразделе 4.1 показано, что при регулярном движении системы средние по времени быстро сходятся к своим пределам. Это позволяет лег-

ко, прямыми численными расчетами определить зависимость неканонических кумулянтов от начальных условий. Как пример приведена такая зависимость кумулянта $\kappa_{1,1,1}$ (см. рис. 3). Канонические же кумулянты от начальных условий не зависят.

И те, и другие кумулянты являются решениями бесконечной системы уравнений для кумулянтов. Различие в поведении кумулянтов возникает потому, что система уравнений разбивается на две группы.

Подсистема уравнений для канонических кумулянтов хорошо определена: число неизвестных в ней равно числу уравнений. Решения этих уравнений однозначны и зависят только от параметров системы.

Система уравнений для неканонических кумулянтов является недоопределенной: число неизвестных в ней превышает число уравнений. Число решений такой системы бесконечно. Решения, кроме параметров динамической системы, могут зависеть от внешних факторов, например от начальных условий.

Поскольку режим движения динамической системы определяется главным образом ее параметрами, с уверенностью можно сказать, что все сказанное в полной мере относится и к хаотическому движению, так как структура системы уравнений не зависит от величины ее параметров. Поэтому, обнаружив зависимость кумулянта от начальных условий при регулярном движении системы, можно утверждать, что не существует такого набора параметров, при котором система является эргодичной.

Заключение

В работе методами кумулянтного анализа изучены статистические свойства системы гармонического осциллятора, взаимодействующего с логистическим термостатом. Основное внимание обращено на проблему каноничности и эргодичности создаваемого термостатом термодинамического ансамбля.

На основе анализа свойств системы уравнений для кумулянтов и средних по времени сформулированы два признака неэргодичности термостатированных систем. Они применены к результатам численного исследования системы уравнений (8).

Численное решение системы уравнений (8) показало следующее. Если система находится в режиме регулярного движения, то все временные средние быстро сходятся к своим предельным значениям (см. рис. 2). При этом установлено, что неканонические кумулянты зависят от начальных условий (рис. 3). В соответствии со вторым признаком, сформулированным в предыдущем разделе, термодинамический ансамбль, создаваемый термостатом, является неэргодичным.

В хаотическом режиме картина иная: все средние, соответствующие каноническим кумулянтам, сходятся быстро (рис. 5), в то время как средние, соответствующие неканоническим кумулянтам, «сходятся» очень медленно (рис. 5, 6). Это, на основании первого признака, тоже свидетельствует о неэргодичности ансамбля.

Неканоничность ансамбля следует из того факта, что некоторые кумулянты СФР, в частности $\kappa_{1,1,1}$ и $\kappa_{2,0,0}$, отличаются от кумулянтов канонической функции распределения. Следовательно, логистический термостат, также как другие детерминистические термостаты [17], создает неканонический и неэргодичный термодинамический ансамбль.

Эффективность предложенных способов проверки неэргодичности детерминистически термостатированных систем не ограничена одномерным гармоническим осциллятором. Указанные признаки с тем же успехом могут быть применены для выявления неэргодичности систем с большим числом измерений, систем с более сложными потенциалами и многочастичных систем.

Приложение

$$\langle p^2 \rangle = \langle p, p \rangle + \langle p \rangle^2 = \kappa_{0,2,0} - (\kappa_{0,1,0})^2, \quad (\text{П1})$$

$$\langle x, p\zeta \rangle = \kappa_{1,1,1} + \kappa_{1,1,0}\kappa_{0,0,1} + \kappa_{1,0,1}\kappa_{0,1,0}, \quad (\text{П2})$$

$$\begin{aligned} \langle x, p\zeta^3 \rangle = & \kappa_{1,1,3} + 3\kappa_{1,0,2}\kappa_{0,0,1} + \kappa_{1,0,3}\kappa_{0,1,0} + 3\kappa_{1,1,1}(\kappa_{0,0,1})^2 + 3\kappa_{1,0,2}\kappa_{0,1,0}\kappa_{0,0,1} + \\ & + \kappa_{1,1,0}(\kappa_{0,0,1})^3 + 3\kappa_{1,0,1}(\kappa_{0,0,1})^2\kappa_{0,1,0} + 3\kappa_{1,1,0}\kappa_{0,0,2}\kappa_{0,0,1} + 3\kappa_{1,0,1}\kappa_{0,1,1}\kappa_{0,0,1}, \quad (\text{П3}) \end{aligned}$$

$$\kappa_{0,2,0} = \langle p, p \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2, \quad (\text{П4})$$

$$\kappa_{1,1,1} = \langle x, p, \zeta \rangle = \langle xp\zeta \rangle - \langle x \rangle \langle p\zeta \rangle - \langle p \rangle \langle x\zeta \rangle - \langle \zeta \rangle \langle xp \rangle + 2\langle x \rangle \langle p \rangle \langle \zeta \rangle. \quad (\text{П5})$$

1. *S. Nose*, J. Chem. Phys. **81**, 511 (1984).
2. *W.G. Hoover*, Phys. Rev. **A31**, 1695 (1985).
3. *H.A. Posch, W.G. Hoover, F.J. Vesely*, Phys. Rev **A33**, 4253 (1986).
4. *P.K. Patra, B. Bhattacharya*, J. Chem. Phys. **140**, 064106 (2014).
5. *W.G. Hoover, B.L. Holian*, Phys. Lett. **A211**, 253 (1996).
6. *D. Kusnezov, A. Bulgac, W. Bauer*, Ann. Phys. **204**, 155 (1990).
7. *G.J. Martyna, M.L. Klein, M. Tuckerman*, J. Chem. Phys. **97**, 2635 (1992).
8. *H. Watanabe, H. Kobayashi*, Phys. Rev. **E75**, 040102(R) (2007).
9. *P.K. Patra, B. Bhattacharya*, J. Chem. Phys. **142**, 194103 (2015).
10. *A. Samoletov, V. Vasiev*, J. Chem. Phys. **147**, 204106 (2017).
11. *P.K. Patra, B. Bhattacharya*, Phys. Rev. **E90**, 043304 (2014).
12. *W.G. Hoover, C.G. Hoover*, CMST **20**, 87 (2014).
13. *W.G. Hoover, C.G. Hoover, D.J. Isbister*, Phys. Rev. **E63**, 026209 (2001).
14. *P.K. Patra, J.C. Sprott, W.G. Hoover, C.G. Hoover*, Mol. Phys. **113**, 2863 (2015).
15. *W.G. Hoover, C.G. Hoover*, CMST **21**, 5 (2015).
16. *W.G. Hoover, J.C. Sprott, P.K. Patra*, Phys. Lett. **A379**, 2935 (2015).
17. *A.N. Artemov*, J. Stat. Phys. **174**, 992 (2019).
18. *A.H. Малахов*, Кумулянтный анализ случайных негауссовых процессов и их преобразований, Советское радио, Москва (1978).

19. S. Primak, V. Kontorovich, V. Lyandres, Stochastic Methods and Their Applications to Communications. Stochastic Differential Equations Approach, Wiley, New York (2004).
20. D. Tapias, A. Bravetti, D.P. Sanders, CMST **23**, 11 (2017).
21. V. Kontorovich, Math. Meth. Appl. Sci. **30**, 1705 (2007).
22. I. Fukuda, H. Nakamura, Phys. Rev. **E65**, 026105 (2002).

A.N. Artemov

STATISTICAL PROPERTIES OF DYNAMICAL SYSTEMS COUPLED WITH A LOGISTIC THERMOSTAT

Statistical properties of dynamical systems coupled with a logistic thermostat are investigated by the example of a harmonic oscillator by means of cumulant analysis methods. It is shown that the thermodynamic ensemble created by such a thermostat is a non-canonical and non-ergodic one. Two indications are formulated to determine the non-ergodicity of deterministically thermostated dynamical systems reliably.

Keywords: statistical properties, dynamical systems, thermostat, cumulant analysis

Fig. 1. The Poincaré section of the phase space of the system of a harmonic oscillator coupled with a logistic thermostat in the regular motion mode

Fig. 2. Averaging time dependences of the time averages of the system of a harmonic oscillator coupled with the logistic thermostat in the regular motion mode

Fig. 3. The dependence of the time average $\langle x, p, \zeta \rangle_t$ converging to the cumulant $\kappa_{1,1,1}$ on the initial coordinate x_0 for different values of the initial momentum p_0 and $\zeta_0 = 0$

Fig. 4. The Poincaré section of the phase space of the system of a harmonic oscillator coupled with a logistic thermostat in the chaotic motion mode

Fig. 5. Averaging time dependence of the time averages of the system of a harmonic oscillator coupled with a logistic thermostat in the chaotic mode of the system motion: ---- — $\langle x, x \rangle_t$ — $\langle p, p \rangle_t$

Fig. 6. Averaging time dependence of the time average $\langle x, p, \zeta \rangle_t$ in the chaotic mode of the system motion