

## Исследование поведения системы многих частиц с взаимодействием Власова-Моэля

В дипломной работе рассматривается проблема поведения системы многих частиц в заданном, независимом от времени потенциале. Для этой цели будет использоваться функция Вигнера[1] и приближение Власова-Моэля [2]. Построение алгоритма для моделирования зависимости плотности вероятности от времени или, другими словами, решение уравнения Моэля будет главной целью дипломной работы. Были поставлены задачи построить два алгоритма, на данный момент полностью реализован только один.

Алгоритм строится на основе приближения для ускорения, которое называется аппроксимацией Власова-Моэля[2].

$$\langle v_\alpha \rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1} (\hbar/2)^{2n}}{m^{2n+1} (2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} U}{\partial x_\alpha^{2n+1}} \frac{1}{f_2} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\alpha^{2n}} \quad (1)$$

Где  $\alpha = 1, 2, 3$  - нумерует координату.

Модель для эволюции  $f_2(\vec{r}, \vec{v}, t)$  со временем строится следующим образом. На равномерную сетку в фазовом пространстве генерируются частицы с некоторым начальным распределением  $f_2(\vec{r}, \vec{v}, t_0)$ . Затем, используя приближение (1), для каждой частицы считается координата и скорость в следующий момент времени  $t = t_0 + dt$ . Частные производные высчитываются в зависимости от того, в какой клетке находится частица, по формуле конечных приращений. Полученных данных достаточно для построения распределения в следующий момент времени  $f_2(\vec{r}, \vec{v}, t_0 + dt)$ . Затем цикл повторяется. В итоге на выходе программы мы имеем эволюцию во времени для функции  $f_2(\vec{r}, \vec{v}, t)$ . Необходимо отметить, что начальное число частиц должно быть достаточно большим, чтобы обеспечить нужную гладкость функции распределения, которая необходима для подсчета производных нужных порядков. Для этой цели отлично подходит технология параллельных вычислений CUDA, так как траектории каждой частицы можно считать независимо от остальных, поместив в разделяемую память для каждого потока нужные значения функции плотности, чтобы на их основе вычислять частные производные.

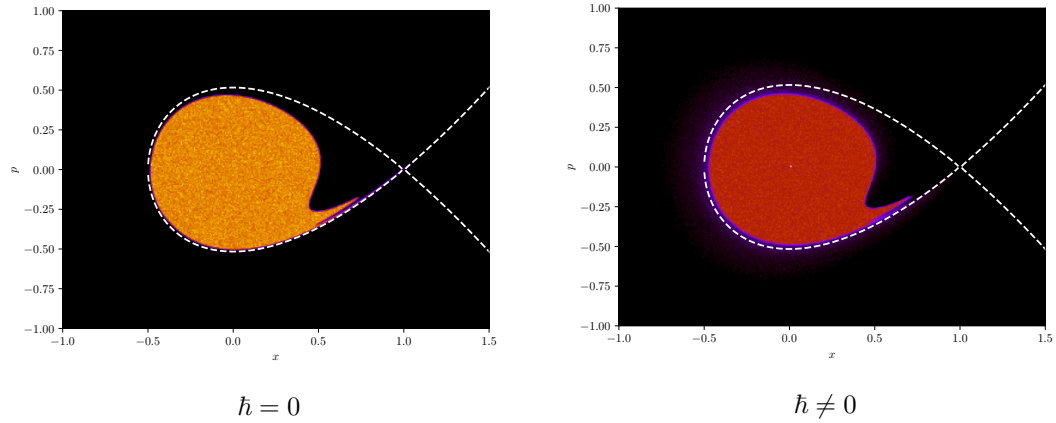


Рис. 1: Фазовый портрет частиц, количество итераций 8000. Справа квантовый случай, а слева классический. Число частиц  $4 \cdot 10^6$

С помощью построенной модели можно наблюдать квантовые эффекты, например, туннелирование через потенциальный барьер.

Результат для кубического потенциала  $U = \frac{m\omega_0^2}{2}ax^2 - \frac{1}{3}bx^3$  показан на рис.1. В начальный момент времени распределение было равномерным по окружности радиуса 0.5. Заметим, что произошло туннелирование через потенциальный барьер: в квантовом случае (правый рисунок) мы можем видеть, что достаточно большая часть частиц сумела преодолеть потенциальный барьер и вышла за пределы сепаратрисы (белая пунктирная линия), и в классическом случае (левый рисунок) туннелирование не произошло и все частицы остались внутри потенциального барьера. Заметим, что в центре потенциала, в точке  $x = 0$   $p = 0$ , имеется светлое пятно, которое возникло за счет падения частиц на центр, которое также невозможно в классическом случае, потому что энергия является интегралом движения

На рис.2 показан результат алгоритма для нормального распределения частиц ( $\sigma_x = 0.15, \sigma_p = 1.31, \mu_x = -0.3, \mu_p = 0$ ). Светлая полоса, которая отчетлива видна на нижнем рис.2 б), соответствует тому, что частицы с большей энергией свободно проходят через потенциальный барьер и внутри остаются только частицы с меньшей энергией, что хорошо видно на рис.2 г). В классическом случае, число вылетевших частиц в теории должно быть меньше, чем в квантовом. В дальнейшем планируется посчитать эту разницу.

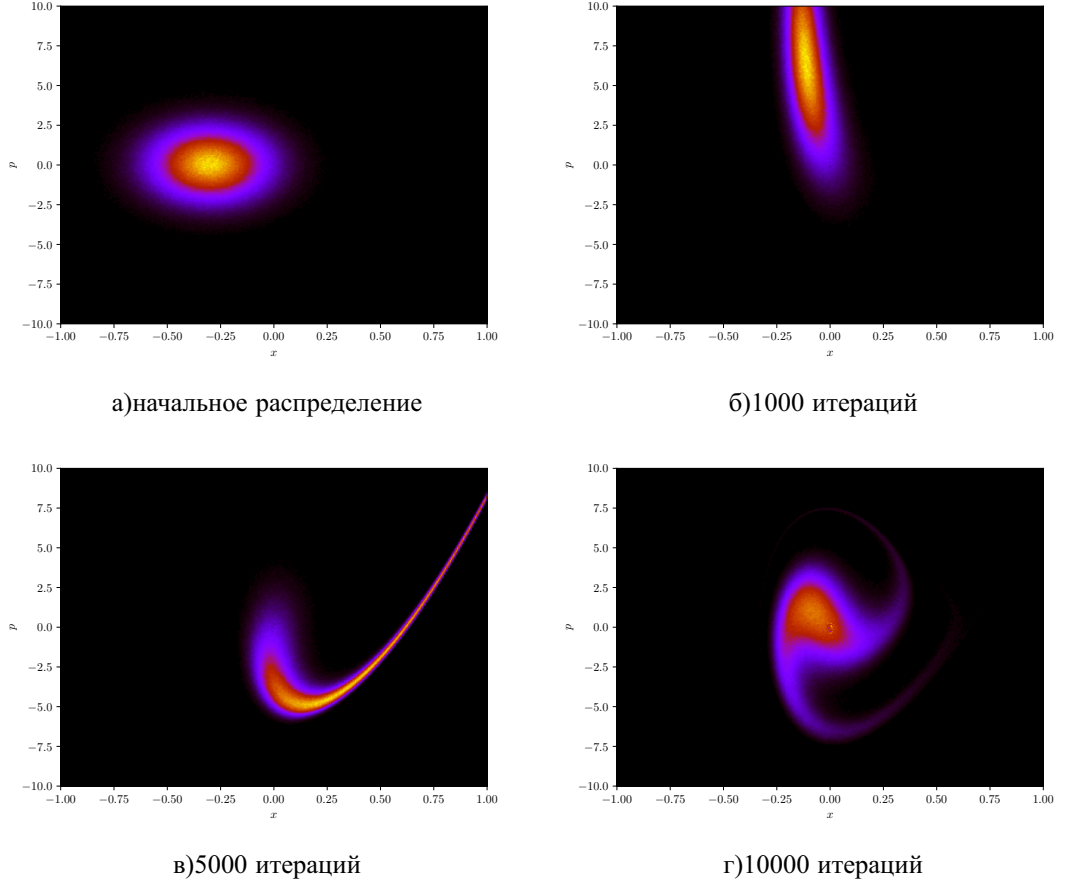


Рис. 2: Эволюция плотности вероятности системы частиц в потенциале  $U = \frac{m\omega_0^2}{2}ax^2 - \frac{1}{3}bx^3$ . Число частиц  $4 \cdot 10^6$

Также стоит упомянуть о втором алгоритме, который сейчас находится в разработке. Он частично похож на первый, в нем также используется приближение Власова-Мозля (1), но построение самой функции распределения немного иное. Функция распределения определяется следующим способом.

$$f_2(x, v) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \phi(x - x_i(t), v - v_i(t)) \quad (2)$$

Где сумма идет по всем частицам, а  $\phi(x, p) = \frac{1}{2\pi h_x h_v} \exp\left(-\frac{x^2}{2h_x^2} - \frac{v^2}{2h_v^2}\right)$  (параметры  $h_x$  и  $h_v$  задаются малыми по сравнению с характерным размером расчетной области). Другими словами, мы представляем каждую частицу не как точку в фазовом пространстве  $(x, v)$ , а как некоторое распределение с малой дисперсией, локализованное в  $(x, v)$ . Такой подход позволяет нам находить среднее

ускорение в формуле (1) точно, не используя приближение для производных.

# Литература

- [1] E.P. Wigner, On the quantum correction for thermodynamic equilibrium, Phys. Rev. 40, 749 (1932).
- [2] J.E. Moyal, Quantum mechanics as a statistical theory, Proc. Camb. Phil. Soc. 45, 99 (1949).