

СТОХАСТИЧНОСТЬ В СИСТЕМАХ С ПОТЕНЦИАЛОМ ЛЕННАРДА - ДЖОНСА ПРИ МАЛОМ ЧИСЛЕ ЧАСТИЦ

М.Н.Овчинников, В.А.Скребнев

*Казанский государственный университет
420008, Казань*

Поступила в редакцию 10 июля 1991 г.

Обнаружено стохастическое поведение в системе из трех частиц, связанных потенциалом Леннарда-Джонса. Выявлены условия разрушения инвариантных торов и возникновения расходимости фазовых траекторий.

В знаменитой статье Хенона и Хейлеса¹ впервые было показано существование стохастичности в системе из трех звезд, поведение которых описывается системой нелинейных уравнений.

Очевидный интерес представляет изучение поведения динамических систем частиц, взаимодействие между которыми описывается потенциалами, являющимися аппроксимациями реальных потенциалов межмолекулярных взаимодействий. Примером такого потенциала является потенциал Леннарда-Джонса

$$U(r) = 4\epsilon[(\sigma/r)^2 - (\sigma/r)^6]. \quad (1)$$

Возможность существования стохастичности в одномерных леннард-джонсовских системах, с числом частиц, превышающих 10, была показана в². Мы предположили, что динамический хаос должен существовать уже в системе из трех частиц с потенциалом (1). Возникновение динамического хаоса в такой системе исследовалось нами как по расхождению фазовых траекторий, так и с помощью отображений Пуанкаре.

В потенциале (1) положим $\epsilon = 1$, $\sigma = 2^{-1/6}$. Массы частиц положим равными единице ($m = 1$). Тогда функция Гамильтона рассматриваемой системы из 3 частиц запишется в виде:

$$\chi = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2)^{-1/2} + (q_2 - q_1)^{-1/2} + (q_3 - q_2)^{-1/2} - 2(q_2 - q_1)^{-6} - 2(q_3 - q_2)^{-6}. \quad (2)$$

Поведение системы (2) изучалось нами при различных значениях ее полной энергии E . Численное интегрирование уравнений проводилось методом Рунге-Кутты четвертого порядка. Шаг по времени выбирался равным $\Delta t = 10^{-3}$. Полный импульс системы был равен 0. Время наблюдения t составляло $\sim 10^4 \Delta t$.

На рис.1 показана динамика расстояний $D(t)$ между координатами системы в фазовом пространстве при различных вариантах начальных условий. Пунктиром всюду отмечен уровень начального отклонения $\delta = D(0)$ по координате p_1 . Мы видим, что при малых значениях энергии E для каждого из рассматриваемых вариантов величина $D(t)$ остается порядка $D(0)$ на временах наблюдения $t \sim 10$. С ростом значений E наблюдается расхождение траекторий. При $E = -1,19$ расхождение $D(t)$ наблюдается для всех вариантов начальных условий. Следовательно, расхождение $D(t)$ зависит от местоположения начальных точек в фазовом пространстве. Следует отметить,

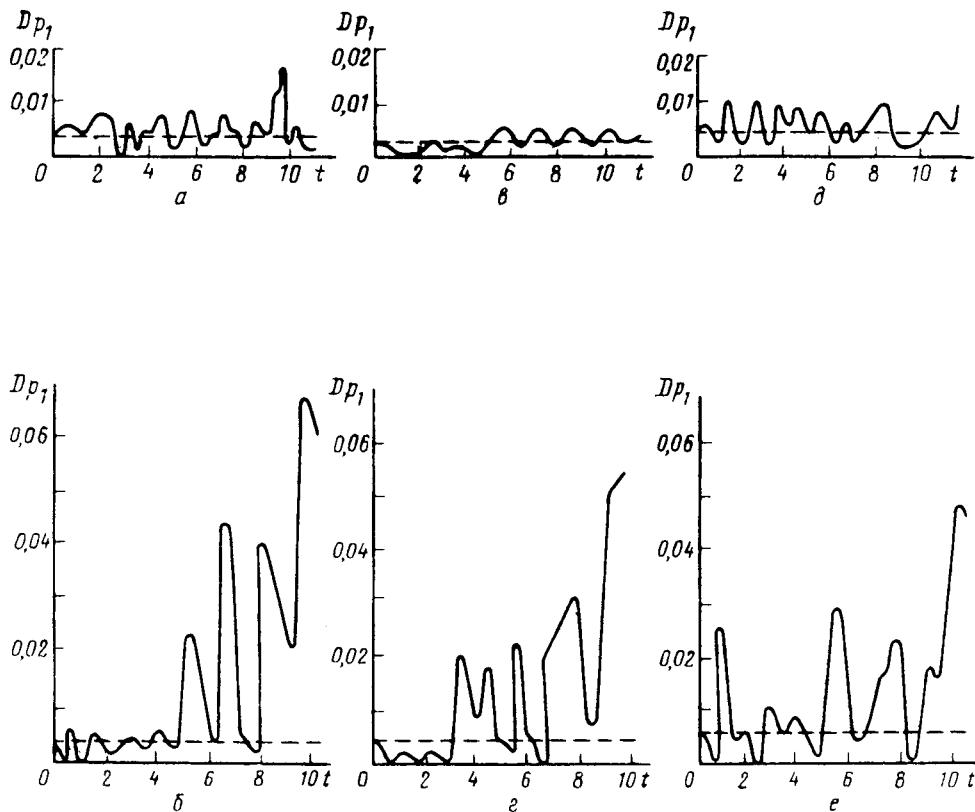


Рис. 1. Динамика $D_{p_1}(t)$ в системе из трех частиц. Значения начальных координат q_i всюду одинаковы. Вариант 1 начальных условий. Соотношение начальных импульсов частиц для траектории, от которой отсчитывается $D(0) - p_1 : p_2 : p_3 = 1 : -1 : 0$ а - $E = -1,64$; б - $E = -1,51$; вариант 2 - соотношение начальных импульсов частиц $= 1/\sqrt{3} : 1/\sqrt{3} : -2/\sqrt{3}$ в - $E = -1,84$; г - $E = -1,64$; вариант 3 - соотношение начальных импульсов частиц $= 1/\sqrt{3} : -2/\sqrt{3} : 1/\sqrt{3}$ д - $E = -1,36$ е - $E = -1,19$. Пунктиром обозначен уровень начального отклонения $D(0)$

что на начальном этапе расхождения траекторий отношение $D(t)/D(0)$ практически не зависит от величины $D(0)$. При больших t траектории быстро разбегаются в пределах допустимой области фазового пространства.

Произведем теперь в системе с гамильтонианом (2) линейное ортогональное преобразование координат и импульсов³. В результате функция Гамильтона запишется в виде

$$\chi = \frac{1}{2}(p'_1{}^2 + p'_2{}^2) + 64[(\sqrt{3}q'_1 + q'_2)^{-12} + (\sqrt{3}q'_1 - q'_2)^{-12}] - 16[(\sqrt{3}q'_1 + q'_2)^{-6} + (\sqrt{3}q'_1 - q'_2)^{-6}], \quad (3)$$

где p'_1, p'_2, q'_1, q'_2 можно рассматривать как импульсы и координаты новых частиц.

Решая систему уравнений Гамильтона, мы рассматривали совокупности точек в фазовом пространстве второй частицы, получаемые при выполнении для первой условий $q'_1 = 0, p'_1 > 0$, что соответствует отображению Пуанкаре на плоскость (q'_2, p'_2) .

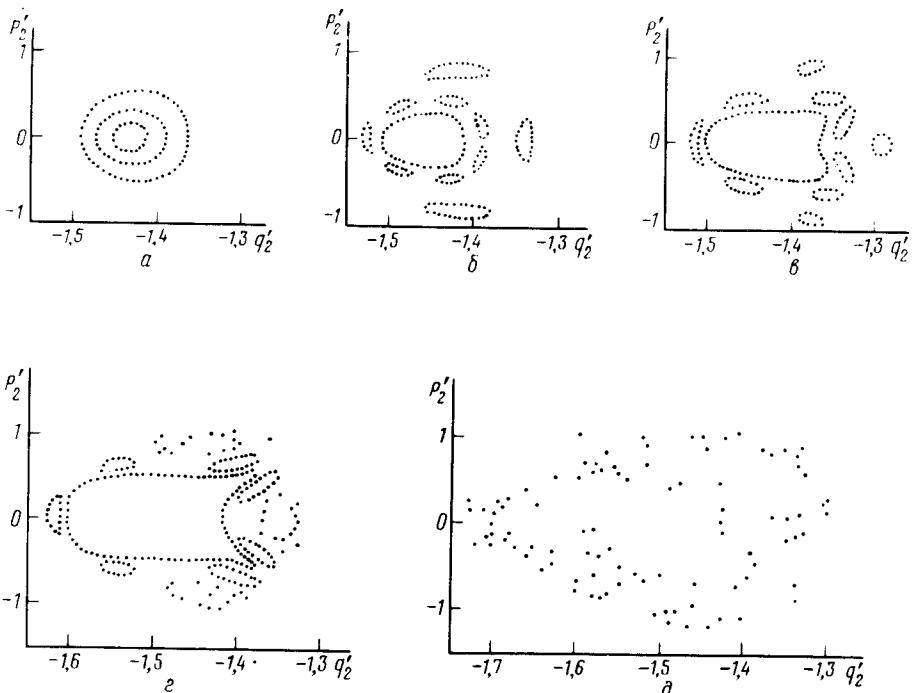


Рис. 2. Отображения Пуанкаре при различных значениях энергии для трех вариантов начальных условий. $a - E = -1,84$, $b - E = -1,64$, $c - E = -1,51$, $d - E = -1,36$, $e - E = -1,19$

Результаты исследований представлены на рис.2. Всего нами было исследовано 3 варианта начальных условий для каждого из значений E . Мы видим, что при $E = -1,84$ совокупности точек отображений Пуанкаре представляют собой замкнутые кривые. При $E = -1,64$, $E = -1,51$, $E = -1,36$ одни кривые деформируются, другие частично разрушаются. При $E = -1,19$ все кривые распадаются, т.е. торы оказываются разрушенными. Это означает, что разрушение инвариантных торов в системе с гамильтонионом (3) происходит при тех же значениях E , когда возникает расхождение траекторий (рис.1). Отметим, что непосредственные вычисления приводят в этих условиях к значениям показателей Ляпунова, большим нуля.

Мы изучили также поведение системы с гамильтонионом (3) при значениях энергии, близких к пороговому, когда происходит разрушение торов. Соответствующие отображения Пуанкаре показаны на рис.3. При $E = -1,84$ точки отображения в фазовом пространстве второй частицы равномерно заполняют сечение тора. По мере роста E точки начинают группироваться в 7 обособленных участков (рис.3б, в), а затем эти участки превращаются в 7 островков (рис.3г, д). В результате первоначальная кривая оказывается разрушенной, а при $E = -1,19$ (рис.3д) разрушенными оказываются и все островки. Отображения Пуанкаре дают, с нашей точки зрения, более наглядную картину перехода системы к стохастическому поведению. В проведенных нами вычислительных экспериментах с системами из 5 и 7 частиц были получены результаты аналогичные трехчастичной задаче. Это дает основания утверждать, что уже в системе из 3 частиц заложены основные особенности

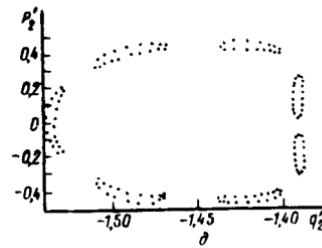
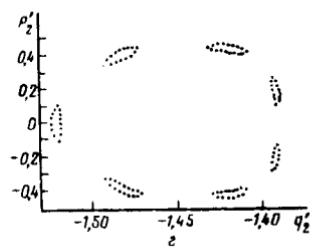
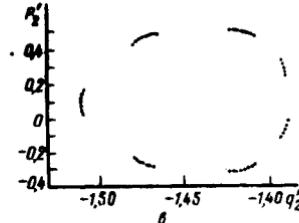
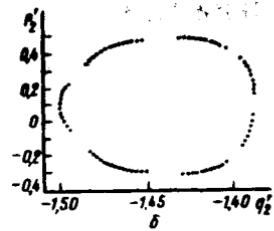
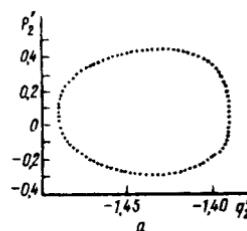


Рис. 3. Отображения Пуанкаре. Вариант 1 начальных условий. а - $E = -1,77$, б - $E = -1,73$, в - $E = -1,70$, г - $E = -1,64$, д - $E = -1,62$

стохастического поведения многочастичных систем с потенциалом Леннарда-Джонса.

1. Hénon M., Heiles C. *Astron J.*, 1964, 69, 73.

2. Casartelli M., Diana E., Galgani L., Scotti A. *Phys. Rev. A*, 1976, 13, 1921.

3. Тода М. Теория нелинейных решеток. М.: Мир, 1984.