

ЭФФЕКТИВНАЯ РАЗМЕРНОСТЬ ФАЗОВОЙ ТРАЕКТОРИИ И МОДЫ ДВИЖЕНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Белега Е.Д. , Рыбаков А.А. ,
Трубников Д.Н. , Чуличков А.И.

Аннотация. Предложен метод выделения эффективного фазового пространства и главных мод движения нелинейных систем. На примере внутренней динамики атомов в тримере аргона, получены портреты движения нелинейной системы в главных модах. Изучено влияние углового момента на эффективную размерность фазового пространства кластера. Показано, что в регулярной компоненте кинетическая энергия движения атомов в кластере сосредоточена, в основном, в двух направлениях импульсного подпространства, и движение атомов происходит с высокой точностью в плоскости.

THE EFFECTIVE DIMENSION OF A PHASE TRAJECTORY AND THE PRINCIPAL MODES OF MOTION OF DYNAMICAL SYSTEMS

Belega E.D., Rybakov A.A., Trubnikov D.N., Chulichkov A.I.

Abstract. A method for describing the behavior of a dynamical system is proposed. The method is based on the notions of the effective dimension of a phase trajectory and the principal modes. To visualize trajectory it is suggested displaying its effective-dimensional component. The method is applied to the internal dynamics of triatomic argon clusters.

Введение

Исследование эволюции нелинейных динамических систем относится к одной из фундаментальных проблем современного естествознания. Многие нелинейные системы обладают следующим свойством: их фазовая траектория в многомерном фазовом пространстве располагается в пространстве меньшего

числа координат. Метод изучения динамики таких систем, предлагаемый авторами данной работы, основан на понятии эффективной размерности фазового пространства и главных мод движения и позволяет описывать с определенной точностью эволюцию нелинейной системы несколькими координатами.

Малые кластеры атомов благородных газов служат удобными моделями для изучения поведения нелинейных динамических систем. Благодаря хорошо изученному ван-дер-ваальсовому характеру взаимодействий между атомами в кластере и небольшому числу степеней свободы модели можно детально исследовать внутреннюю динамику и выявить закономерности эволюции слабосвязанных систем.

Отметим, что кластеры атомов благородных газов уже несколько десятилетий привлекают внимание ученых. Впервые обнаруженные в сильно неравновесных условиях, а именно в сверхзвуковых струях [1], эти объекты вызвали значительный интерес в связи с решением проблемы перехода вещества от атомов или молекулярного состояния к конденсированному. Выявление закономерностей изменения физических и химических свойств при росте кластера позволяет глубже понять природу многих явлений в жидкой и твердой фазах, а также природу физико-химических явлений на поверхности, проблемы катализа, фазовых переходов. С другой стороны, атомные и молекулярные кластеры - это класс соединений, свойства которых зависят от степени агрегации (числа атомов или молекул в кластере), что может оказаться принципиальным при создании новых материалов с заданными свойствами.

Трехатомный кластер аргона, - часто исследуемый объект. Особый интерес вызывает изучение его внутренней динамики. В ходе численных экспериментов, проведенных методом молекулярной динамики, зафиксирована неустойчивость движения модели, которая проявляется в экспоненциальной расходимости двух близлежащих в фазовом пространстве траекторий [2]. Это означает стохастичность движения, возникающую, как следствие сильного взаимодействия "нормальных мод". Расщепление фазового пространства тримера аргона на области регулярного и хаотического движения наблюдается даже при энергиях, чуть

превышающих энергию нулевых колебаний [3]. Динамика кластера существенно усложняется, если принимать во внимание не только наличие первого интеграла движения модели – полной энергии, но и второго – суммарного углового момента. При фиксированной полной энергии системы была обнаружена немонотонная зависимость доли регулярных траекторий от значения суммарного углового момента [4,5]. Этот факт, с одной стороны, может быть объяснен жесткостью модели и, следовательно, сложным механизмом перераспределения энергии по внутренним степеням свободы. С другой стороны, даже трехатомный ван-дер-ваальсовый кластер имеет сложную поверхность потенциальной энергии: существует глобальный минимум, соответствующий треугольной конфигурации кластера и три седловых точки, соответствующие линейным конфигурациям кластера, различающимся перестановкой частиц [6]. Регулярные типы движения – это квазипериодические колебания атомов вблизи положений равновесия и квазижесткое вращение (при наличии углового момента).

Нетвердотельное вращение кластеров благородных газов остается недостаточно изученным, в первую очередь, из-за многомерности фазового пространства используемых для их описания моделей.

Целью данной работы является выделение эффективного размера фазового пространства, главных мод движения вращающихся Ar_3 кластеров и выявление особенностей поведения каждой из мод в зависимости от полной энергии и суммарного углового момента системы.

Метод

Для системы, состояние которой в каждый момент времени $t \in [0, T]$ описывается вектором $x(t)$ евклидова пространства R_n размерности $n > 3$, значительной проблемой является описание характерных особенностей ее фазовой траектории. Однако для ряда физических систем можно указать подпространство $R_k \subset R_n$, $k < n$, в котором, "в основном", сосредоточена фазо-

вая траектория: для любого момента времени $t \in [0, T]$ вектор $x(t)$ можно представить в виде ортогонального разложения $x(t) = x_k(t) + x_{n-k}(t)$, где $x_k(t) \in R_k$, и $x_{n-k}(t) \in R_k^\perp$ – ортогональные проекции $x(t)$ на подпространство R_k и на ортогональное к нему дополнение R_k^\perp соответственно, причем средний по времени $t \in [0, T]$ квадрат длины слагаемого $x_{n-k}(t)$ значительно меньше среднего по времени $t \in [0, T]$ квадрата длины слагаемого $x_n(t)$. Величина "добавки" $\gamma(k) = T^{-1} \int_0^T \|x_{n-k}(t)\|^2 dt$ равна средней погрешности представления движения системы в k -мерном пространстве R_k .

В работе [7] показано, что подпространства R_k , обеспечивающие минимальную погрешность $\gamma(k)$ при каждом $k = 1, \dots, n$, являются линейными оболочками первых k собственных векторов $e_m \in R_n$ оператора $S = \frac{1}{T} \int_0^T x(t)x^*(t)dt$, упорядоченных по невозрастанию соответствующих им собственных значений λ_m , $m = 1, \dots, k$. Здесь $xx^* \in (R_n \rightarrow R_n)$ – внешнее (тензорное) произведение вектора $x \in R_n$ на себя. В частности, если фазовая траектория задана в дискретные моменты времени $t_j = 1, \dots, N$, то речь идет о собственных векторах матрицы с матричными элементами $S_{i'i'} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_i(t_j)x_{i'}(t_j)$ $i, i' = 1, \dots, N$. Функция $\zeta(\varepsilon) = \min\{k | \gamma(k) \leq \varepsilon\}$ равная минимальной размерности пространства R_k , необходимой для опи-

сания динамики проекцией $x_k(t) \in R_k$ фазовой траектории $x(t) \in R_n$ системы с точностью ε , называется эффективной размерностью фазовой траектории, а проекция $(x(t), e_k) e_k \in R_n$, $t \in [0, T]$, k -й модой движения динамической системы; здесь (\cdot, \cdot) – скалярное произведение в R_n , а e_k – собственный вектор матрицы S , $\|e_k\| = 1$, $k=1, \dots, n$.

Для механических систем имеет смысл разделить фазовые переменные $x = (q, p) \in R_{2n}$ на координаты $q \in R_n$ и импульсы $p \in R_n$. В n -мерном фазовом пространстве координат R_n , описанный выше подход позволяет построить систему мод движения, обладающих следующим свойством: мода $(q(t), e_k^q) e_k^q \in R_n$ определяет изменение пространственной конфигурации системы в направлении e_k^q , в котором средний квадрат размера системы $\frac{1}{T} \int_0^T (q(t), e_k^q)^2 dt$ равен λ_k^q , где e_k^p – k -й собственный вектор оператора $S^q = \frac{1}{T} \int_0^T q(t) q^*(t) dt$, соответствующий собственному числу λ_k^q , $\lambda_1^q \geq \dots \geq \lambda_n^q$. Таким образом, в направлении $e_1^q \in R_n$ конфигурация системы в среднем по времени $t \in [0, T]$ наиболее вытянута, а в направлении e_n^q в среднем имеет наименьший размер.

Аналогично, в n -мерном фазовом пространстве импульсов R_n мода $(p(t), e_k^p) e_k^p \in R_n$ несет в себе часть средней по времени кинетической энергии системы, равную $\frac{\lambda_k^p}{\sum_{i=1}^n \lambda_i^p}$; здесь e_k^p

– k -й собственный вектор оператора $S^q = \frac{1}{T} \int_0^T q(t)q^*(t)dt$, соответствующий собственному числу $\lambda_k^q, \lambda_1^q \geq \dots \geq \lambda_n^q$.

Заметим, что для механической системы материальных точек единичной массы наборы собственных векторов $\{e_k^q\}$ и $\{e_k^p\}$

совпадают. Действительно, так как $q(t) = \sum_{k=1}^n (e_k^q, q(t))e_k^q$ и

$p(t) = \dot{q}(t)$, то $p(t) = \sum_{k=1}^n (e_k^q, \dot{q}(t))e_k^q$, таким образом наборы

$\{e_k^q\}$ и $\{e_k^p\}$ могут отличаться лишь порядком следования век-

торов, определяемым величинами $\lambda_k^q = \frac{1}{T} \int_0^T (e_k^q, q(t))^2 dt$ и

$$\lambda_k^p = \frac{1}{T} \int_0^T (e_k^p, p(t))^2 dt.$$

Если фазовая траектория, соответствующая эволюции системы, задается в дискретные моменты времени t_1, \dots, t_N , то

$X_{i,j} = x_i(t)$, $i = 1, \dots, 2n$, $j = 1, \dots, N$ называется траекторной

матрицей. В этом случае матричные элементы матрицы S^p

равны $S_{i,i'}^p = \sum_{j=1}^N X_{i+n,j} X_{i'+n,j}$, $i, i' = 1, \dots, n$, числа $\sqrt{\lambda_k^p}$,

$k = 1, \dots, n$, являются сингулярными числами блока траекторной

матрицы, составленного из матричных элементов $X_{i+n,j}$,

$i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, N$ а векторы $e_k^p, k = 1, \dots, n$ – соответ-

ствующими сингулярными векторами.

Фазовое пространство тримера аргона, рассматриваемого в системе центра масс ($n=6$), также может быть разделено на координатное и импульсное подпространства. Проекция вектора

$q(t) \in R_6$ координат системы на плоскость, содержащую первые два собственных вектора e_1^q и e_2^q матрицы S^q , в среднем по времени имеет наибольший квадрат длины (среди проекций вектора координат на любые другие двумерные плоскости). Иными словами, если представить траекторию как множество точек в координатном пространстве R_6 , то проекция этого множества на выбранную плоскость имеет наибольшие характерные размеры.

С другой стороны, плоскость, натянутая на два собственных вектора e_1^p и e_2^p матрицы S^p , отвечающих максимальным собственным значениям, содержит двумерную составляющую импульса $p \in R_6$, в среднем по времени несущую самую большую кинетическую энергию. Если точность описания динамики импульса системы охарактеризовать долей кинетической энергии, сосредоточенной в этой двумерной составляющей, то эта доля

вычисляется по формуле
$$\frac{\lambda_1^p + \lambda_2^p}{\sum_{i=1}^6 \lambda_i^p}.$$

Главные моды движения кластера, исследуемые в данной работе, – ортогональные составляющие, на которые можно разложить движение динамической системы в 6-мерном фазовом пространстве импульсов, обладающие следующими экстремальными свойствами: суперпозиция из k первых мод, $k=1, \dots, 6$, наиболее точно аппроксимирует среднюю по времени кинетическую энергию системы среди всех k -мерных составляющих фазовой траектории импульсов $p(t) \in R_6$, $t \in [0, T]$.

Математическое описание используемого здесь метода представлено в работе [7].

Физический смысл мод движения

Опишем, какое движение в трехмерном физическом пространстве соответствует каждой моде.

Напомним, что первые три координаты вектора $p(t) \in R_6$ есть координаты трехмерного импульса первого атома кластера, задающие скорость его движения в (физическом) пространстве, следующие три – координаты импульса второго атома. Координаты импульса третьего атома вычисляются из условия равенства нулю полного импульса системы.

Вектор импульса частиц кластера $p(t) \in R_6$ в каждый момент времени $t \in [0, T]$ представляется в виде разложения по модам

$$p(t) = \sum_{k=1}^6 (p(t), e_k^p) e_k^p. \quad (1)$$

Рассмотрим моду движения $(p(t), e_k^p) e_k^p$ с номером k . Коэффициент $(p(t), e_k^p)$ определяет амплитуду составляющей вектора $p_6(t)$ в направлении e_k^p в пространстве R_6 , при этом первые три координаты вектора e_k^p дает направление и величину составляющей трехмерного импульса первой частицы, отвечающей моде движения с номером k следующие три координаты – направление и величину составляющей импульса второй частицы кластера, соответствующей k -й моде движения, импульс третьей частицы вычисляется из условия равенства нулю вектора полного импульса системы (а значит, и любой ее проекции). Эти соображения позволяют визуализировать главные моды движения атомов кластера путем указания движений каждого атома, составляющие эту моду.

Заметим, что при квадратичном потенциале $U(q) = U_0 + \frac{(Q_{q,q})}{2}$, где $U_0 = const$, а Q – неотрицательно определенная симметричная матрица, определенные выше моды движения соответствуют нормальным модам колебаний [8]. Действительно, в этом случае фазовая траектория является решением линейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\dot{q} = p$$

$$\dot{p} = -Qq$$

с начальными условиями $q(0) = q_0$, $p(0) = p_0$. Это решение записывается в виде

$$q(t) = \sum_{k=1}^n \{b_k \cos \omega_k t + c_k \sin \omega_k t\} e_k,$$

$$p(t) = \dot{q}(t) = \sum_{k=1}^n \{-b_k \omega_k \sin \omega_k t + c_k \omega_k \cos \omega_k t\} e_k \quad (2)$$

где ω_k – собственные числа матрицы Q, векторы $\{e_k\}$ – соответствующие им ортонормированные собственные векторы, а константы b_1, \dots, b_n , c_1, \dots, c_n определяются из начальных условий: $b_k = (e_k, q_0)$, $c_k = (e_k, p_0)$ $k=1, \dots, n$. Анализ этой фазовой траектории описанным выше методом приводит к равенствам $e_k^p = e_k^q = e_k$, $k=1, \dots, n$, для собственных векторов, соответствующих неупорядоченным собственным числам λ_k^q и λ_k^p матриц S^q и S^p соответственно. В самом деле, матрица S^q определяется равенствами

$$S^q = \sum_{k=1}^n \left(\frac{1}{T} \int_0^T (b_k \cos \omega_k t + c_k \sin \omega_k t)^2 dt \right) e_k e_k^*$$

и имеет собственными векторами векторы e_k , соответствующие собственным

числам $\lambda_k^q = \frac{1}{T} \int_0^T (b_k \cos \omega_k t + c_k \sin \omega_k t)^2 dt$ $k=1, \dots, n$. Аналогично, матрица S^p в рассматриваемом случае определяется равенствами

$$S^p = \sum_{k=1}^n \left(\frac{1}{T} \int_0^T \omega_k^2 (-b_k \sin \omega_k t + c_k \cos \omega_k t)^2 dt \right) e_k e_k^*$$

и имеет собственными векторами векторы e_k , соответствующие

собственным числам $\lambda_k^p = \frac{\omega_k^2}{T} \int_0^T (-b_k \cos \omega_k t + c_k \sin \omega_k t)^2 dt$,

$k=1, \dots, n$. Порядок собственных чисел λ_k^q и λ_k^p , таким образом, может быть произвольным и определяется начальными условиями.

Пусть движение кластера происходит вблизи точки минимума q_0 потенциала $U(q)$, имеющего в точке q_0 непрерывную вторую производную $Q(q)$,

$$Q_{i,j}(q) = \frac{d^2 U(q)}{dq_i dq_j}, \quad i, j = 1, \dots, n \quad (3)$$

так, что при разложении его по формуле Тейлора вблизи точки равновесия можно записать

$$U(q) = U(q_0) + \frac{1}{2} (Q(q_0)(q - q_0), (q - q_0)) + o(\|q - q_0\|^2)$$

где $\lim_{z \rightarrow 0} \frac{o(z)}{z} = 0$. Тогда, если члены выше квадратичных по

q достаточно малы, то в силу теоремы Ляпунова [9], движение кластера является асимптотически устойчивым, и с течением времени решение нелинейной системы динамических уравнений с потенциалом (4) будет стремиться к решению вида (2), определяемому нормальными модами колебаний. Таким образом, при регулярном (устойчивом) движении можно надеяться на то, что полученные описанным выше методом моды $(p(t), e_k^p)$ будут повторять моды нормальных колебаний.

При движении кластера вдали от точки минимума потенциала или при хаотическом (неустойчивом) движении представление потенциала в виде (4) не является достаточно точным, и моды движения могут оказаться далекими от классических нормальных колебаний.

В работе численно исследовались как ситуации, в которых эволюция кластера близка к движению, описываемому нор-

мальными модами колебаний, так и ситуации, далекие от нормальных колебаний.

Движение кластера в выделенном подпространстве

Рис.1 Эффективная размерность координатного подпространства

Эффективные размерности ζ фазовой траектории в координатном и импульсном подпространствах трехатомного кластера аргона были определены в зависимости от относительной погрешности аппроксимации \mathcal{E} для $E=-2.5$ и двух значений углового момента: $M=0$ (см. Рис. 1а, 2а) и $M=0.8M_{\max}$ (см. Рис. 1б, 2б). (На всех графиках регулярные траектории представлены квадратиками, а хаотические - кружочками). Как видно из Рис. 1-2, полученные результаты сильно различаются для регулярной и хаотической траекторий при значениях углового момента, близких к нулю, и практически совпадают для значения углового момента $M=0.8M_{\max}$.

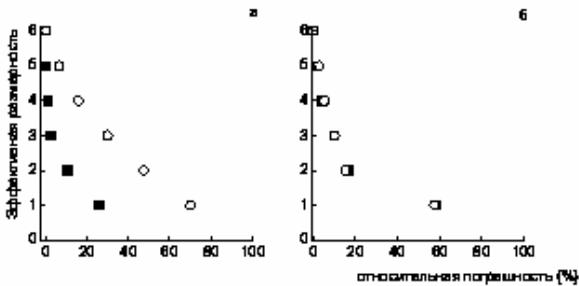
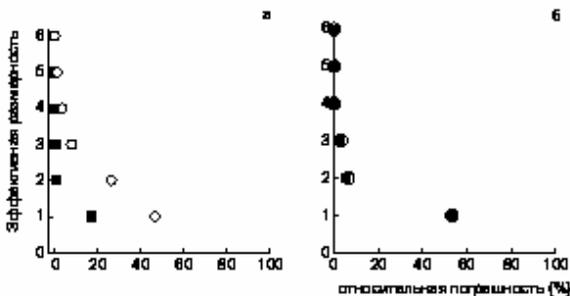


Рис. 2 Эффективная размерность импульсного подпространства



Нормальные моды кластера

Движение, близкое к нормальным колебаниям, наблюдалось в регулярной компоненте невращающегося кластера при $E = -1.5$. На Рис. 3а, слева, изображена проекция импульса $p(t) \in R_6$, $t \in [0, T]$ трехатомного кластера Ar_3 на плоскость, проходящую через векторы e_1^q и e_2^q . Первая мода, описывающая динамику импульса системы и несущая около 70% кинетической энергии кластера, состоит из движений атомов, изображенных на Рис. 3а справа вверху, вторая мода (28% кинетической энергии) изображена на Рис. 3а справа внизу. Стрелками показано направление импульса каждого атома кластера, длина стрелок пропорциональна средней величине импульса атома в данной моде. Каждый атом изображен в точке трехмерного пространства, совпадающей со средним по времени положением этого атома за время от 0 до T . Как известно [10], моды, изображенные на Рис. 3а справа, совпадают с нормальными модами колебаний линейной симметричной трехатомной молекулы с потенциалом, зависящим от квадрата расстояний от центрального атома. Этот факт может свидетельствовать о том, что рассматриваемый режим движения кластера примерно соответствует движению в окрестности минимума локально квадратичного потенциала, когда в (4) члены более высокого порядка играют малую роль.

В общем случае локально квадратичное описание потенциала взаимодействия атомов в кластере является достаточно грубым. В эволюции модели это проявляется следующим образом.

На Рис. 3б слева приведена проекция траектории $p(t) \in R_6$, $t \in [0, T]$, на плоскость, проходящую через векторы e_1^q и e_2^q невращающегося кластера (энергия $E = -2.5$, регулярная траектория).

На Рис. 3б справа вверху схематично изображено движение атомов кластера, составляющих первую моду движения, несущую 84% кинетической энергии. Она с хорошей точностью повторяет форму нормальных колебаний треугольной молекулы [10]. Вторая мода содержит 10% кинетической энергии класте-

ра. Форма движения атомом во второй моде показана на Рис. 3б справа внизу. Во второй моде регулярной компоненты движения атомов почти перпендикулярны плоскости, проходящей через средние положения частиц кластера. На Рис. 3в приведены аналогичные данные для регулярной траектории с той же энергией $E=-2.5$ и нулевым угловым моментом, отличающиеся от предыдущего примера начальными условиями. Здесь первая мода также незначительно отличается от моды нормальных колебаний молекулы треугольной конфигурации (см. Рис. 3в справа вверху). Вторая мода, изображенная на Рис. 3в справа внизу, в значительной степени асимметрична и состоит из движений, при которых один из атомов движется почти ортогонально плоскости, проходящей через средние положения частиц. Интересным является результат, полученный при изучении главных мод движения кластера при большом ($M = 0.8$) угловом моменте. Так, например, в случае треугольной конфигурации и энергии $E=-2.5$ регулярная и хаотическая компоненты первых четырех мод содержат одинаковую долю кинетической энергии и имеют одинаковые портреты движения [1]. Все же тонкости порядка или хаоса сконцентрированы в направлениях, хранящих несколько процентов кинетической энергии, а именно, в пятой и шестой модах.

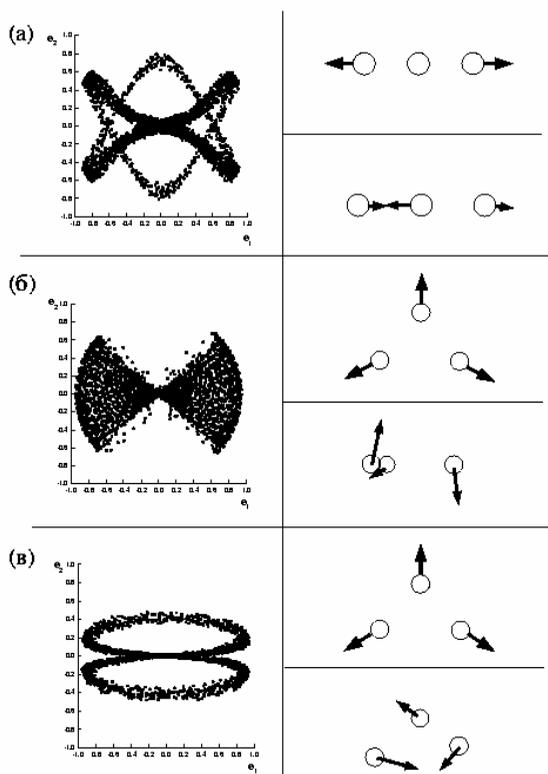


Рис.3 Главные моды движения кластера в импульсном подпространстве

Выводы

Как показали исследования внутренней динамики трехатомного кластера аргона, выделение главных мод движения позво-

ляют описать в деталях поведение хаотической и регулярной компонент нелинейных систем. В отсутствие вращения движение в регулярной компоненте с достаточно высокой точностью происходит на одной и той же плоскости, а две первые моды движения в линейной конфигурации с высокой точностью совпадают с нормальными модами колебаний жестких молекул. В случае треугольной конфигурации только первая мода кластера совпадает с нормальной. При большом угловом моменте эволюция кластера как в хаотической, так и в регулярной компоненте также может быть представлена двумя модами, однако все особенности поведения модели заключены в направлениях, содержащих несколько процентов кинетической энергии системы.

Литература

1. Milne T.A. and Green F.T. // J. Chem. Phys. 1967, v.47, pp.4095-4101.
2. Beck T.L., Leitner D.M., and Berry R.S.// J. Chem. Phys. 1988, v.89, pp.1681-1694.
3. Amitrano C. and Berry R.S. // Phys. Rev. E. 1993, v.47, pp.3158.
4. Белега Е.Д., Елютин П.В., Трубников Д.Н., Швилкина Л.Б.// Докл. АН. 1997. Т. 355. № 6. С. 750.
5. Belega E.D., Trubnikov D.N., Lohr L.L. // Phys. Rev. A. 2001. 63. 043203.
6. Berry R.S. // I.J. of Quant. Chem. 1996, v.58, pp.657-670.
7. Белега Е.Д., Рыбаков А.А., Трубников Д.Н., Чуличков А.И.// Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2002. Т. 42. № 12. С. 1909.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. // Теоретическая физика. Т.1. Механика. М.:Наука. 1988.
9. Петровский И.Г.// Лекции по теории обыкновенных дифференциальных уравнений. – М.:Наука. 1984.
10. Волькенштейн М.А., Грибов Л.А., Ельяшевич М.А., Степанов Б.И. // Колебания молекул. – М.:Наука. 1972., стр. 66.