Письма в ЖТФ, том 22, вып. 15 12 августа 1996 г.

01

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДОЛГОВРЕМЕННО НЕ РАЗРУШАЕМОЙ СЧЕТНЫМИ ШУМАМИ ДИНАМИКИ В СИСТЕМАХ С БОЛЬШИМ ЧИСЛОМ СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ

© *О.И.Горский, В.А.Дзензерский, Ю.П.Кучугурный*

Известно, что в консервативных или возмущенных слабыми случайными силами гамильтоновых динамических системах с большим числом степеней свободы по истечению некоторого времени релаксации ожидается поведение, характерное для статистических систем. Это ожидание основано на следующем. Во-первых, нелинейное взаимодействие между частицами может приводить к раскачке колебаний и их неустойчивости. Это в свою очередь влечет изменение частоты колебаний, самовозбуждение последующих неустойчивых колебаний вследствие резонансов и хаотизации движений из-за неизбежных и необратимых взаимодействий с окружающим миром (неизбежными счетными погрешностями при численном моделировании) [1,2]. Во-вторых, описываемый сценарий развития динамики в моногостепенных системах может иметь место, если в системе установлена некоторая пороговая энергия ε_c. Возможное существование пороговой энергии имеет достаточные причины для оснований. Это в первую очередь теорема КАМ, которая гарантирует сохранение неразрушаемых торов в фазовом пространстве при возмущении

$$\Delta H(J,\theta) \ll H_0(J), \tag{1}$$

где J — действие, θ — угол, $H_0(J)$ — невозмущенный гамильтониан,

$$H(J,\theta) = H_0(J) + \Delta H(J,\theta). \tag{2}$$

При достаточной энергии квазипериодические движения разрушаются, это способствует обмену колебательных мод в динамической системе. В-третьих, представляется также основательным предположение, что описываемый сценарий развития динамики может приводить к равнораспределению энергии колебаний по нормальным модам, если в системе возбуждено первоначально конечное число колебательных мод. Строго говоря, как показывают исследования, описываемый сценарий не имеет места в системах с большим числом степеней свободы [3–5]. Попытки описать поведение динамической системы с большим числом степеней свободы в упрощенном представлении на основе какого-либо характерного параметра или на основе зависимостей между характерными параметрами, вообще говоря, неудачны. Например, если пытаться описывать поведение динамической системы на основе ее полной энергии ε, то, как показывают исследования, динамический сценарий зависит от начальных условий: в случае описания на основе времени релаксации τR сценарий зависит от начальных условий, на основе характеристических показаталей Ляпунова $\lambda(\varepsilon)$ — сценарий зависит от ε_c, на основе спектральной энтропии

$$\eta(t) = \frac{S_{\max} - S(t)}{S_{\max} - S(0)}, \tag{3}$$

$$S(t) = \sum_{i=n_0}^{N/2} \omega_i(t) \ln \omega_i(t), \tag{4}$$

где

$$\omega_i(t) = \frac{\langle E_i(t) \rangle}{\sum_{m=0}^{N/2} \langle E_m(t) \rangle}, \tag{5}$$

также оказывается проблематичным, так как $\eta(t)$ отлична от нуля при $t \to \infty$; наконец, в случае пороговой энергии ε_c —сценарий может зависеть от конечного времени наблюдения за системой, хотя это время может быть и велико. Причины такой неудачи могут быть очень глубокими. G. Benettin, M. Pettini, M. Levi и другие вынуждены предположить возможность долговременных метастабильных состояний в системах с большим числом степеней свободы, возможную слабую зависимость времени метастабильности от числа степеней свободы n (возможно, термодинамический предел для таких систем не существует), возможную сильную обусловленность таких состояний начальными условиями.

Эти предположения не объясняют, почему не удается утсановить в самом общем виде условия разрушения регулярных движений или пространственно-временных корреляций (условия перемешивания) в консервативной динамической системе с большим N, а скорее, констатируют факт возможного сохранения регулярности в системах при любых статистических выборках. В динамических системах к тому же может иметь место зависимость от рассматриваемой модели, от потенциалов взаимодействия или, что еще больше усложняет анализ, возможное существование иногда сложно определяемых островков устойчивости регулярных колебаний в стохастическом море.

Можно попытаться подойти к проблеме динамического обоснования статистической термодинамики не через установление условий разрушения регулярных движений (условия A), а посредством установления условий неразрушения регулярных движений (условия B). Условия A могут оказаться не такими, как условия B. Теоретических работ, устанавливающих условия A для систем с большим числом степеней свободы, вообще говоря, мало. Критерий перекрытия резонансов $\varepsilon_c \sim \frac{\text{const}}{\bar{n}}$ [6] (где $\bar{n}$ — среднее число возбужденных мод) не получил полного подтверждения в [5] (ε_c установить не удалось). Остается возможность установления условий A при численном моделировании. При численном моделировании установление условий A трудно из-за невозможности избавиться от ошибок счетного округления. Всякий раз установление закономерностей в динамических системах может сильно зависеть от наведенных счетных погрешностей. Выходом из положения может быть нахождение динамических регулярных режимов, долговременно устойчивых и не разрушаемых счетными погрешностями (установление условий B). При определенных энергиях, обеспечивающих условие (1), существование регулярных движений (и, значит, условия B) гарантирует теорема КАМ, экспоненциально слабый обмен колебаниями

$$t \sim \exp\left(\left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}\right)^{\delta}\right) \tag{6}$$

— теорема Нехорошева и выводы в работах [2–5]. Это, конечно, не исключает полностью возможности наведенного счетными погрешностями режима.

Как показано в работе [7], неразрушаемые сложные корреляции и сложные периодические колебания могут существовать в полностью изолированных системах с относительно небольшим числом степеней свободы. Возможные нетермодинамические счетные флуктуации (на эту возможность авторам указал X.de Hemptinne) могут приводить к динамике, не имеющей физического аналога. Каких-либо запретов для существования полностью изолированных динамических систем с большим числом степеней свободы, финитным движением и сложной регулярной многомерной фазовой траекторией, насколько нам известно, нет. Динамические системы, подготовленные для численного моделирования, лишь условно можно считать полностью изолированными, поскольку только гамильтоновы теоретические модели можно назвать полностью изолированными и только в них, в частности $E = \langle E(t) \rangle = \text{const}$, фунционал Ляпунова (энропия), введенный через функцию распределения фазового потока, постоянен, а финитные фазовые траектории периодические, часто с периодом порядка времен возврата Пуанкаре.

При численном моделировании гамильтоновых систем возникают трудноразрешимые проблемы. Необходимо обосновать, что возмущения слабо влияют на исследуемую динамику и корректно выбрать характерное время τ_R, в течение которого эти возмущения можно считать слабыми, т. е. существует проблема длительного наблюдения за системой; по истечении характерного времени τ_R неясно, как следует изменить модель или начальные условия (которые уже получены в численном моделировании).[1]

И вторая проблема в связи со сказанным — это проблема корректного исследования структуры фазового пространства в условиях часто неконтролируемых счетных ошибок, особенно в связи с возможной недостижимостью некоторых точек фазового пространства из-за их алгоритмической сложности, т. е., согласно Пригожину [8], требующих несжимаемого информационного ряда для обеспечения устойчивости движения вблизи этих точек. Заметим, что даже выполнимость гамильтоновой динамики может быть установлена с определенной, но не бесконечной точностью в каждом конкретном случае. Можно сказать, что неустранимость шумов является характерной особенностью гамильтоновой динамики в компьютерном эксперименте, так как полная энергия $\langle E(t)\rangle \simeq \text{const}$ всегда. По-видимому, шумы могут играть решающую роль в разрушении и возникновении корреляций, и диссипативная динамика может проявляться уже как следствие структурной (пространственной или временно́й) организации в динамической системе вследствие ее развития посредством гамильтоновой динамики в условиях действия шумов.

Целью данной работы является установление возможности формирования динамических кластеров с долговременно неразрушаемой регулярной многомерной фазовой траекторией в условиях действия неизбежных шумов.

Математический прием для получения полностью изолированного кластера с неразрушаемой регулярной многомерной фазовой траекторией несколько отличается от описанного в [7]. Формирование кластера происходит во внешних неравновесных условиях. Эти условия задаются масштабированием через заданный интервал времени t_1 скоростей всех частиц кластера. В данном случае масштабирование скоростей всех частиц сводилось к тому, что при $t = t_1$,

---

[1] Вообще интересна проблема использования идеальных теоретических гамильтоновых систем в физике и особенно в связи с длительной эволюцией динамической системы (например, исследование поведения системы с большим периодом для гамильтоновой финитной динамики). Это непосредственно связано с проблемой динамического обоснования статистической термодинамики.

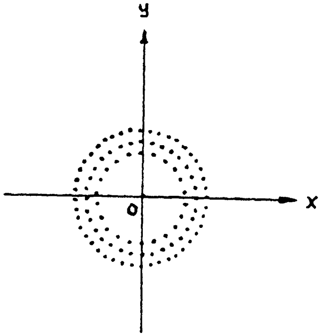

Рис. 1. Начальная конфигурация кластера.

$n, n = 1, \ldots 10, t_1 = 200$ (в безразмерных единицах) полагалось $V_{xi} = 0$, $V_{yi} = 0$, $i = 1, \ldots, N$. Через $t = 2 \cdot 10^3$ циклов ($8 \cdot 10^{-11}$ с) условие масштабирования скоростей отменялось, и далее кластер оставался подверженным только действию внутренних сил и стохастического счетного поля.

Для формирования кластера с неразрушаемой регулярной многомерной фазовой траекторией особое значение имеет первоначально задаваемая конфигурация (при $t = 0$). Следует сказать, что мы не ставили целью дать физически воспроизводимый результат, но хотели показать принципиальную возможность, которая может иметь место в консервативных или почти консервативных динамических системах. Поэтому вопрос о достижимости начальной в данной работе области или точки фазового пространства остается в стороне.

Начальная конфигурация ($t = 0$) кластера задавалась как показано на рис. 1. Координаты частиц полагались следующими: $X_i = \alpha A j \sin\left(\frac{2\pi i}{N_i}\right)$, $Y_i = A j \cos\left(\frac{2\pi i}{N_i}\right)$. Где $A = 4.53$ (в безразмерных единицах), $N_i = 22$ для $j = 4$, $i = 1, \ldots, 22$, $N_i = 32$ для $j = 5$, $i = 1, \ldots, 32$, $N_i = 44$ для $j = 6$, $i = 1, \ldots, 44$, $\alpha = 1.013$. Мы подробно привели координаты одной из первоначальных конфигураций, так как поведение кластера чрезвычайно сильно зависит от начальных условий и выбора параметров.

Использовался потенциал взаимодействия типа Леннард–Джонса:

$$J(r_{ij} = 4\varepsilon(A_1(\sigma/r_{ij})^{12} - A_2(\sigma/r_{ij})^6).$$

Постоянные в потенциале выбраны $A_1 = 4.870$, $A_2 = 1.0$.

Зависимость средней по времени кинетической энергии полностью изолированного сформированного кластера от

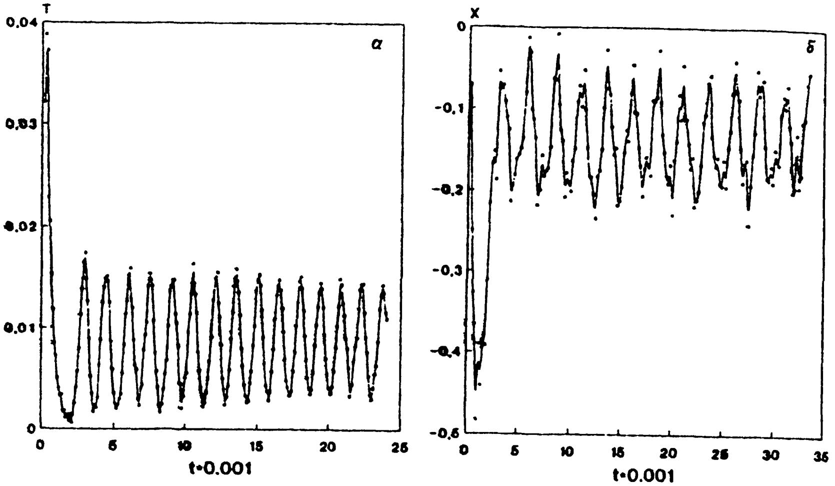

Рис. 2. *а* — зависимость средневременно́й кинетической энергии $\langle T(t)\rangle$ на частицу. Усреднение проводилось по 50 временны́м циклам. Время устойчивой регулярной динамики кластера сильно зависит от величины $\langle T(t)\rangle$; *б* — регулярные колебания одной из частиц кластера. Число частиц с подобным поведением в кластере равно четырем.

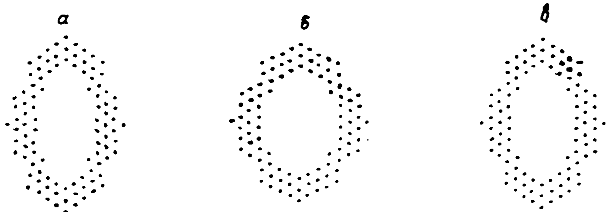

Рис. 3. Сжатие — растяжение кластера как целого объекта. Показаны последовательные стадии колебаний: *а* — максимальное сжатие, *б* — максимальное растяжение, *в* — промежуточное положение кластера при сжатии.

времени показана на рис. 2, *а*. Поведение кластера можно описать следующим образом. Движение частиц в кластере является симметричным, т. е. число групп частиц с полностью идентичным пространственно-временны́м поведением кратно не менее чем двум (рис. 2, *б*). Симметричное и периодическое по времени движение частиц проявляется в поведении кластера как целого, а именно, кластер приобретает степень свободы в виде сжатия — растяжения всего кластера как целого по одной из осей симметрии (рис. 3). В динамике кластера с близкими параметрами: $N_i = 20$ для $j = 4$, $i = 1, \ldots, 20$, $N_i = 30$ для $j = 5$, $i = 1, \ldots, 30$, $N_i = 40$

для $j = 6$, $i = 1,\ldots,40$, $\alpha = 1.0$, $A_1 = 4.870$, $A_2 = 1.0$ — может наблюдаться спонтанный поворот оси симметрии с соответствующей симметризацией движения. Динамика кластера допускает обращение времени с сохранением симметрии и степени свободы сжимания–растяжения. Энергетический интервал для существования кластеров с подобным или близким поведением $E \simeq 10^{-4}$–$2 \cdot 10^{-2}$ в безразмерных единицах. Устойчивость динамики в численном эксперименте проверялась на интервале более 10^5 циклов, что составляет более $4 \cdot 10^{-9}$ с. На этом временно́м интервале система, по-видимому, остается гамильтоновой, несмотря на влияние стохастического счетного поля. Чтобы описать поведение кластера, может понадобиться не менее $N - 1$ переменных, если рассматривать поведение кластера на молекулярном пространственно-временно́м масштабе, и только четыре переменных для описания сжатия–растяжения кластера как целого объекта при пространственном или временно́м изменении масштаба для наблюдений.

Возможность формирования такого кластера не противоречит теореме КАМ. Описанная регулярная процедура позволяет попасть в начальное состояние кластера. Динамика, приводящая к этому состоянию для $t < 0$, получается при замене $t \to -t$ в уравнениях движения. Однако подтвердить или опровергнуть заключение о консервативности динамики даже на временны́х участках, на которых имеет место временна́я обратимость движения, в условиях действия счетных неконтролируемых шумов и приблизительного выполнения закона сохранения энергии в системе может быть и не всегда возможно.

Авторы хотели бы поблагодарить X.de Hemptinne за плодотворную дискуссию.

Список литературы

[1] *De Hemptinne X.* // e-print, chao-dyn /9504002, lanl-sys@xyz. lanl. gov.
[2] *Кадомцев Б.Б.* // УФН. 1995. Т. 165. В. 8. С. 967–973.
[3] *Benettin G., Tenenbaum A.* // Phys. Rev. A. 1983. V. 28. N 5. P. 3020–3029.
[4] *Levi R., Petini M., Ruffo S., Sparpaglione M., Vulpiani A.* // Phys. Rev.A. 1983. V. 28. N 6. P. 3544–3552.
[5] *Pettini M., Landolfi M.* // Phys. Rev.A. 1990. V. 41. N 2. P. 768–783 (and references here).
[6] *Заславский Г.М.* Стохастичность динамических систем. М.: Наука, 1984. 271 с.
[7] *Горский О.И., Дзензерский В.А., Кучугурный Ю.П.* // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. В. 9. С. 1–6.
[8] *Николис Г., Пригожин И.* Познание сложного. М.: Мир, 1990. 342 с.

Поступило в Редакцию
1 апреля 1996 г.