ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2002, том 42, № 12, с. 1891–1898

УДК 519.6:531.133

ЭФФЕКТИВНАЯ РАЗМЕРНОСТЬ ФАЗОВОЙ ТРАЕКТОРИИ В ЗАДАЧЕ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ЭВОЛЮЦИИ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ[1)]

© 2002 г. **Е. Д. Белега*, А. А. Рыбаков*, Д. Н. Трубников*, А.И. Чуличков****

*(*119899 Москва, Ленинские горы, МГУ, хим. фак-т; **физ. фак-т)*
e-mail: elena@phys.chem.msu.ru

Поступила в редакцию 10.04.02 г.

Предлагается метод описания поведения динамической системы на основе понятия главных мод и эффективной размерности фазовой траектории, а также наглядный способ представления траектории путем отображения ее эффективной конечномерной составляющей. Метод применен для исследования внутренней динамики трехатомных кластеров. Библ. 12. Фиг. 3.

ВВЕДЕНИЕ

Одной из проблем нелинейной динамики является наглядное описание движения системы. Если фазовое пространство имеет большую размерность, эффективно визуализировать траекторию движения системы достаточно сложно.

Для решения этой задачи в данной работе предлагается использовать разложение движения системы в n-мерном фазовом пространстве на ортогональные составляющие (моды движения), обладающие экстремальными свойствами: суперпозиция из m мод наиболее точно аппроксимирует заданные особенности эволюции системы среди всех m-мерных составляющих фазовой траектории, $m = 1, 2, \ldots, n$. Анализ динамики мод позволяет представить эволюцию системы в целом.

Для многих встречающихся на практике динамических систем их фазовая траектория в многомерном фазовом пространстве располагается в пространстве меньшего числа координат. Например, движение частицы в центральном поле происходит в плоскости, содержащей вектор импульса и радиус-вектор частицы, для его точного описания достаточно четырехмерного подпространства, а для визуализации можно использовать две пространственные координаты, изменяющиеся со временем. Малое возмущение гамильтониана приведет к увеличению размерности подпространства, содержащего фазовую траекторию, однако в ряде случаев эволюцию системы приближенно можно представить как движение в некоторой плоскости. Отдельное рассмотрение составляющей фазовой траектории в ортогональном к этой плоскости направлении даст представление об отличии эволюции системы от движения в центральном поле. Плоскость, в которой, "в основном", сосредоточены состояния системы, можно определить как плоскость, проекция пространственных координат на которую в среднем по времени имеет наибольший квадрат длины.

Об эффективной размерности и модах движения. Поясним предлагаемый подход на примере движения материальной точки в шестимерном фазовом пространстве. Обозначим через $\mathcal{E}_n$ координатное векторное евклидово пространство, его элементами являются упорядоченные наборы из n чисел – координат соответствующего вектора. В любой фиксированный момент времени $t \in [0, T)$ вектор фазовых координат обозначим $\mathbf{q}(t) = [\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)] \in \mathcal{E}_6$, где $x(t) \in \mathcal{E}_3$ – вектор пространственных переменных, $\mathbf{p}(t) \in \mathcal{E}_3$ – вектор импульса. Для любого вектора $\mathbf{e} \in \mathcal{E}_3$, $\|\mathbf{e}\| = 1$, вектор $\mathbf{x}(t) - (\mathbf{x}(t), \mathbf{e})\,\mathbf{e}$ есть ортогональная проекция вектора $\mathbf{x}(t)$ на плоскость с нормалью $\mathbf{e}$ в трехмерном евклидовом пространстве $\mathcal{E}_3$; здесь и далее $(\cdot, \cdot)$ обозначает скалярное произведение элементов евклидова пространства. Задача выбора двумерной плоскости, в которой в основном

[1)]Работа выполнена А.И. Чуличковым при частичной финансовой поддержке РФФИ (код проекта 01-01-00210).

сосредоточены перемещения материальной точки, таким образом, сводится к выбору вектора $\mathbf{e}_0 \in \mathcal{E}_3$, доставляющего максимум квадратичному функционалу

$$\frac{1}{T}\int_0^T \|\mathbf{x}(t) - (\mathbf{x}(t), \mathbf{e})\mathbf{e}\|^2 dt, \tag{1}$$

или, что то же самое, минимум функционалу

$$\frac{1}{T}\int_0^T (\mathbf{x}(t), \mathbf{e})^2 dt. \tag{2}$$

Величина

$$H_{\mathbf{x}} = \frac{1}{T}\int_0^T (\mathbf{x}(t), \mathbf{e}_0)^2 dt$$

дает погрешность приближения пространственного движения частицы движением в плоскости с нормалью $\mathbf{e}_0$.

Другой подход состоит в том, чтобы выделить плоскость, проекция на которую вектора импульса частицы дает самую большую (в среднем по времени) кинетическую энергию. В этом случае требуется выбрать вектор $\mathbf{h}_0 \in \mathcal{E}_3$, доставляющий максимум квадратичному функционалу

$$\frac{1}{2T}\int_0^T \|\mathbf{p}(t) - (\mathbf{p}(t), \mathbf{h})\mathbf{h}\|^2 dt, \tag{3}$$

или минимум функционалу

$$\frac{1}{2T}\int_0^T (\mathbf{p}(t), \mathbf{h})^2 dt, \tag{4}$$

характеризующему погрешность аппроксимации. Величина

$$H_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2T}\int_0^T (\mathbf{p}(t), \mathbf{h}_0)^2 dt$$

дает погрешность приближения динамики точки движением в плоскости с точностью, контролируемой в терминах кинетической энергии.

Если $\mathbf{e}_0 \in \mathcal{E}_3$ и $\mathbf{h}_0 \in \mathcal{E}_3$ – векторы, на которых достигается максимум функционалов (1) и (3) соответственно, то можно утверждать, что пространственная конфигурация движения точки с точностью $H_{\mathbf{x}}$ лежит в плоскости с вектором нормали $\mathbf{e}_0$, а в плоскости с нормалью $\mathbf{h}_0 \in \mathcal{E}_3$ лежат импульсы, несущие кинетическую энергию системы, отличающейся от полной кинетической энергии системы на величину $H_{\mathbf{p}}$.

Для реализации этой идеи в общем случае многомерного фазового пространства $\mathcal{R}$ размерности n построена последовательность вложенных подпространств, обладающих следующим свойством. При заданной размерности m подпространства $\mathcal{R}_m \subset \mathcal{R}$ проекция фазового вектора на $\mathcal{R}_m$ минимизирует заданный функционал на множестве всех подпространств заданной размерности.

Если $\mathcal{R}_m$ – подпространство $\mathcal{R}$, обладающее указанным свойством, то проекция вектора $\mathbf{q}(t) \in \mathcal{R}$ на $\mathcal{R}_m$ дает приближение движения системы в пространстве меньшей размерности с погрешностью, равной величине минимизируемого функционала.

Зависимость $m(H)$ размерности пространства $\mathcal{R}_m$ от точности приближения H по аналогии с [1]–[5] назовем *эффективной размерностью* фазовой траектории. Проекции вектора $\mathbf{q}(t)$ на векторы базиса подпространства $\mathcal{R}_m$ назовем *модами движения*.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим динамическую систему, состояние которой в момент времени $t \in [0, T)$ задается вектором $\mathbf{q}(t) \in \mathcal{R}$; эволюция системы описывается фазовой траекторией $\mathbf{q}(t)$, $t \in [0, T)$. Предметом исследования является не сама фазовая траектория, а линейная функция от нее, задаваемая в каждый момент времени $t \in [0, T)$ вектором $Q\mathbf{q}(t) \in \mathcal{R}$; здесь $Q \in (\mathcal{R} \longrightarrow \mathcal{R})$ – линейный оператор, действующий из евклидова пространства $\mathcal{R}$ в $\mathcal{R}$ (в частности, в примере с механической системой оператор Q может "вырезать" из полного набора фазовых переменных только импульсы или только координаты). Будем рассматривать только такие фазовые траектории $\mathbf{q}(t)$, $t \in [0, T)$, для которых выполняется неравенство

$$\int_0^T \|Qq(t)\|^2 dt < \infty, \tag{5}$$

множество всех фазовых траекторий, для которых выполнено (5), обозначим через $\mathcal{L}_2(Q, T)$.

Пусть $\Pi_m \in (\mathcal{R} \longrightarrow \mathcal{R})$ – оператор ортогонального проецирования в $\mathcal{R}$ на m-мерное подпространство $\mathcal{R}_m \subset \mathcal{R}$. Проекцию $\Pi_m Q\mathbf{q}$ назовем m-мерной аппроксимацией вектора $Q\mathbf{q}$. Погрешность m-мерной аппроксимации фазового вектора $Q\mathbf{q} \in \mathcal{R}$ определяется вектором $Q\mathbf{q} - \Pi_m Q\mathbf{q} = (I - \Pi_m)Q\mathbf{q} \in \mathcal{R}$, величину этой погрешности оценим значением $\|(I - \Pi_m)Q\mathbf{q}\|^2$.

Задача состоит в том, чтобы выбрать такое m-мерное подпространство $\mathcal{R}_m$ в $\mathcal{R}$, проекция вектора $Q\mathbf{q}$ на которое в среднем по всем $t \in [0, T)$ дает наименьшую погрешность аппроксимации

$$\Phi(\mathbf{q}(\cdot)) = \frac{1}{T}\int_0^T \|(I - \Pi_m)Q\mathbf{q}(t)\|^2 dt \tag{6}$$

среди всех подпространств размерности не больше m.

Задачу минимизации функционала (6) назовем задачей наилучшей m-мерной аппроксимации. Ее решение – проекция $\Pi_m Q\mathbf{q}(t)$ – дает самое точное описание характеристики движения системы $Q\mathbf{q}$ с помощью m координат, минимизирующее погрешность (6).

2. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ НАИЛУЧШЕЙ m-МЕРНОЙ АППРОКСИМАЦИИ

Укажем линейное подпространство $\mathcal{R}_m \subset \mathcal{R}$, на котором достигается минимум функционала (6), и определим значение этого минимума. Так как вектор $Q\mathbf{q}(t)$, $t \in [0, T)$, задан, то минимизация (6) эквивалентна максимизации функционала

$$\Psi(\mathbf{q}(\cdot)) = \frac{1}{T}\int_0^T \|\Pi_m Q\mathbf{q}(t)\|^2 dt. \tag{7}$$

Пусть $\mathbf{e}'_1, \ldots, \mathbf{e}'_n$ – ортонормированный базис $\mathcal{R}$ и оператор Π_m является ортогональным проектором на первые m векторов этого базиса. Тогда

$$Q\mathbf{q}(t) = \sum_{k=1}^{n} (Q\mathbf{q}(t), \mathbf{e}'_k)\mathbf{e}'_k, \quad \Pi_m Q\mathbf{q}(t) = \sum_{k=1}^{m} (Q\mathbf{q}(t), \mathbf{e}'_k)\mathbf{e}'_k, \quad t \in [0, T).$$

Задача максимизации функционала (7) состоит в выборе такого ортонормированного базиса $\{\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n\} \subset \mathcal{R}$, на котором достигается точная верхняя грань:

$$\frac{1}{T}\int_0^T \sum_{k=1}^{m} (\mathbf{e}_k, Q\mathbf{q}(t))^2 dt = \sup\left\{\frac{1}{T}\int_0^T \sum_{k=1}^{m} (\mathbf{e}_k, Q\mathbf{q}(t))^2 dt \,\middle|\, \mathbf{e}_k \in \mathcal{R}, (\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_j) = \delta_{kj}, k = \overline{1, m}, j = \overline{1, m},\right\}; \tag{8}$$

здесь использовано обозначение $\delta_{kk} = 1$, $\delta_{kj} = 0$, $k \neq j$, $k, j = \overline{1, n}$.

Так как

$$\frac{1}{T}\int_0^T \sum_{k=1}^m (\mathbf{e}_k, Q\mathbf{q}(t))^2 dt = \sum_{k=1}^m \left(\left(\frac{1}{T}\int_0^T Q\mathbf{q}(t)\mathbf{q}^*(t)Q^* dt \right) \mathbf{e}_k, \mathbf{e}_k \right) \equiv \sum_{k=1}^m (S_Q \mathbf{e}_k, \mathbf{e}_k),$$

то задача поиска наилучшей m-мерной аппроксимации $Q\mathbf{q}(\cdot) \in \mathcal{L}_2(Q, T)$ запишется в виде

$$\sup\left\{ \sum_{k=1}^m (S_Q, \mathbf{e}_k, \mathbf{e}_k), \mathbf{e}_k \in \mathcal{R} \,|\, (\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_j) = \delta_{kj}, k = \overline{1, m}, j = \overline{1, m}, \right\}; \tag{9}$$

здесь

$$S_Q = \frac{1}{T}\int_0^T Q\mathbf{q}(t)\mathbf{q}^*(t)Q^* dt$$

и использовано обозначение Q^* для оператора, сопряженного с Q, и обозначение $\mathbf{zq}^* \in (\mathcal{R} \longrightarrow \mathcal{R})$ для внешнего (тензорного) произведения векторов $\mathbf{z}, \mathbf{q} \in \mathcal{R}$.

В силу определения и условия (5), оператор S_Q является линейным, ограниченным, самосопряженным и неотрицательно-определенным, а значит, в силу принципа максимума [6], решение задачи (9) достигается на его собственных векторах, отвечающих наибольшим собственным значениям.

Выпишем погрешность наилучшей аппроксимации $Q\mathbf{q}(t)$ его проекцией $\Pi_m Q\mathbf{q}(t)$, $t \in [0, T)$. Пусть $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n$ – ортонормированный базис, составленный из собственных векторов оператора $S_Q \in (\mathcal{R} \longrightarrow \mathcal{R})$, упорядоченный по невозрастанию собственных значений:

$$S_Q \mathbf{e}_k = \lambda_k^2 \mathbf{e}_k, \quad \lambda_1^2 \geq \ldots \geq \lambda_n^2.$$

Тогда, согласно (6), погрешность наилучшей аппроксимации равна

$$\gamma_Q(m) = \sum_{k=m+1}^n (S_Q \mathbf{e}_k, \mathbf{e}_k) = \sum_{k=m+1}^n \lambda_k^2 \tag{10}$$

и представляет собой средний квадрат расстояния вектора $Q\mathbf{q}(t)$ до линейной оболочки, натянутой на векторы $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_m$.

3. ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Дадим формальные определения понятий моды движения и эффективной размерности фазовой траектории в задаче аппроксимации вектора $Q\mathbf{q}(t)$, $t \in [0, T)$.

Определение 1. *Эффективной размерностью* фазовой траектории $\mathbf{q}(t)$ в задаче аппроксимации вектора $Q\mathbf{q}(t)$, $t \in [0, T)$, назовем функцию

$$\zeta_Q = \zeta_Q(\varepsilon) = \min\{k \mid 0 \leq k \leq n, \gamma_Q(k) \leq \varepsilon\},$$

определенную для $\varepsilon \in [0, \infty)$ и принимающую целочисленные значения.

Значение $\zeta_Q(\varepsilon)$ равно наименьшему числу векторов базиса, разложение вектора $Q\mathbf{q}(t)$ по которым дает среднюю по времени погрешность, не большую, чем ε.

Рассмотрим теперь вектор

$$\sum_{k=1}^m (Q\mathbf{q}(t), \mathbf{e}_k)\mathbf{e}_k,$$

аппроксимирующий вектор $Q\mathbf{q}(t)$. Он представляет собой линейную комбинацию "главных направлений" $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_m$ в фазовом пространстве $\mathcal{R}$ с коэффициентами, задающими динамику изменения этих главных составляющих вектора $Q\mathbf{q}(t)$.

Определение 2. Вектор $(Q\mathbf{q}(t), \mathbf{e}_k)\mathbf{e}_k \in \mathcal{R}$, $k = \overline{1, n}$, назовем k-й модой при аппроксимации вектора $Q\mathbf{q}(t)$.

Поведение во времени моды $(Q\mathbf{q}(t), \mathbf{e}_k)\mathbf{e}_k \in \mathcal{R}$, аппроксимирующей поведение вектора $Q\mathbf{q}(t)$ на отрезке $[0, T)$, в среднем составляет часть вектора $Q\mathbf{q}(t)$, характеризующуюся величиной

$$\eta_Q(k) = \frac{1}{T}\int_0^T (Q\mathbf{q}(t), \mathbf{e}_k)^2 dt \frac{1}{T}\int_0^T \|Q\mathbf{q}(t)\|^2 dt \Bigg)^{-1},$$

вычисляющейся через собственные значения оператора S_Q:

$$\eta_Q(k) = \lambda_k^2 \left(\sum_{j=1}^{n} \lambda_j^2 \right)^{-1}.$$

Как следует из изложенного выше, чем больше $\eta_Q(k)$, тем больше вклад k-й моды в аппроксимацию вектора $Q\mathbf{q}(t)$ на интервале $[0, T)$.

4. ДИНАМИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ С ДИСКРЕТНЫМ ВРЕМЕНЕМ

Рассмотрим ситуацию, когда динамическая система рассматривается в дискретные моменты времени $t_1, \ldots, t_N \in [0, T)$, $N \geq n$. В этом случае фазовая траектория задается в виде матрицы $\hat{q}_{ij} = g_i(t_j)$, $i = \overline{1, n}$, $j = \overline{1, N}$, размера $n \times N$, которую будем называть траекторной матрицей динамической системы и обозначать через $\hat{q} \in (\mathcal{R}_N \longrightarrow \mathcal{R})$. Если нас интересует поведение от времени вектора $Q\mathbf{q}(t_j)$, $j = \overline{1, N}$, то эта информация содержится в матрице $Q\hat{q} \in (\mathcal{R}_N \longrightarrow \mathcal{R})$.

Согласно теореме о сингулярном разложении, любая матрица вида $Q\hat{q} \in (\mathcal{R}_N \longrightarrow \mathcal{R})$ может быть записана в виде

$$\{Q\hat{q}\}_{ij} = \sum_{k=1}^{n} \lambda_k \{\mathbf{e}_k\}_i \{\mathbf{g}_k\}_j, \quad i = \overline{1, n}, \quad j = \overline{1, N},$$

где числа $\lambda_1, \ldots, \lambda_N$ и ортонормированные наборы векторов $\mathbf{e}_k \in \mathcal{R}$, $k = \overline{1, n}$, и $\mathbf{g}_k \in \mathcal{R}_N$, $k = \overline{1, n}$, представляют собой решения задач на собственные значения

$$Q\hat{q}\hat{q}^*Q^*\mathbf{e}_k = \lambda_k^2 \mathbf{e}_k, \quad \hat{q}^*Q^*Q\hat{q}\mathbf{g}_k = \lambda_k^2 \mathbf{g}_k,$$

связанные между собой соотношениями

$$Q\hat{q}\mathbf{g}_k = \lambda_k \mathbf{e}_k, \quad \hat{q}^*Q^*\mathbf{e}_k = \lambda_k \mathbf{g}_k.$$

При этом будем полагать, что $\lambda_1 \geq \ldots \geq \lambda_n \geq 0$. Числа $\lambda_1, \ldots, \lambda_N$ называются сингулярными числами матрицы $Q\hat{q}$, а набор векторов $\mathbf{e}_k \in \mathcal{R}$, $k = \overline{1, n}$, и дополненный до полной ортонормированной системы в $\mathcal{R}_N$ набор векторов $\mathbf{g}_k \in \mathcal{R}_N$, $k = \overline{1, N}$, называются сингулярными базисами евклидовых пространств $\mathcal{R}$ и $\mathcal{R}_N$ соответственно.

В рассматриваемом случае роль оператора S_Q в (9) играет матрица $Q\hat{q}\hat{q}^*Q^* \in (\mathcal{R} \longrightarrow \mathcal{R})$ и в терминах сингулярных чисел и сингулярных базисов k-й модой движения при аппроксимации $Q\mathbf{q}(t)$, $t = t_1, \ldots, t_N$, является матрица $\widehat{Q\hat{q}}_k \in (\mathcal{R}_N \longrightarrow \mathcal{R})$ с матричными элементами

$$\{\widehat{Q\hat{q}}_k\}_{ij} = \lambda_k \{\mathbf{e}_k\}_i \{\mathbf{g}_k\}_j, \quad i = \overline{1, n}, \quad j = \overline{1, N}.$$

Моду $\widehat{Q\hat{q}}_k$, $k = \overline{1, n}$, можно рассматривать как вектор $\mathbf{e}_k \in \mathcal{R}$, задающий "направление" k-й ортогональной составляющей движения вектора $Q\mathbf{q}$ в фазовом пространстве $\mathcal{R}$ с амплитудой $\lambda_k \{\mathbf{g}_k\}_j$, зависящей от времени t_j, $j = \overline{1, N}$; тем самым координаты вектора $\mathbf{g}_k \in \mathcal{R}_N$ передают динамику этой составляющей.

5. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МОД И ЭФФЕКТИВНОЙ РАЗМЕРНОСТИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИНАМИКИ ТРЕХАТОМНОГО КЛАСТЕРА

Рассмотрим внутреннюю динамику трехатомного кластера благородного газа, описываемую уравнениями движения трех материальных точек в потенциальном поле, заданном потенциалом Леннарда–Джонса [7]. При исследовании таких кластеров методами молекулярной динамики было обнаружено, что для невращающегося кластера свойства его внутреннего движения зависят от значения полной внутренней энергии и строения поверхности потенциальной энергии (см. [8]). Было также показано, что, помимо ангармоничности потенциала взаимодействия, еще одним источником хаоса является кинетическая энергия, сосредоточенная в колебательных степенях свободы [9]. В случае вращающегося кластера внутренняя динамика исследуемых систем усложняется; в частности, в трехатомных кластерах аргона было обнаружено расщепление фазового пространства на области регулярного и хаотического движений в зависимости от значений полной энергии и углового момента кластера (см. [10], [11]), причем регулярная компонента обнаруживается и при достаточно высоких значениях полной энергии кластера, чего не наблюдается в невращающихся кластерах [12]. Для понимания особенностей движения таких кластеров важна визуализация движения атомов в кластере, что оказывается достаточно сложной проблемой из-за высокой размерности фазового пространства: так, при описании внутренней динамики трехатомного кластера аргона в системе центра масс и при отсутствии его поступательного движения необходим набор из 12 координат – шесть для описания пространственных координат и шесть для описания импульсов частиц.

Кластер из трех одинаковых атомов благородного газа можно рассматривать как связанное или долгоживущее квазисвязанное состояние системы с гамильтонианом

$$H = \sum_{i=1}^{3} \frac{\mathbf{p}_i}{2m} + \sum_{i=j}^{3} U(r_{ij}), \tag{11}$$

где $r_{ij} = \|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j\|$, $\mathbf{p}_i$, $\mathbf{q}_i$ – векторы импульса и координаты i-го атома, m – его масса, $U(\cdot)$ – потенциал Леннарда–Джонса,

$$U(r_{ij}) = 4U_0\left[\left(\frac{\alpha}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\alpha}{r_{ij}}\right)^{6}\right] \tag{12}$$

с глубиной потенциальной ямы U_0 и характерной шириной α, соответствующей положению нуля потенциала. Воспользуемся естественной системой единиц, в которой масштабами служат m, U_0 и α. Тогда основное состояние кластера с энергией $E = -3$ и величиной углового момента $M = 0$ соответствует неподвижным атомам, размещенным в вершинах равностороннего треугольника с длиной стороны $\alpha' = \alpha\sqrt[6]{2}$. Движение системы в состоянии с максимальным для фиксированной энергии угловым моментом $M_{\max}$ представляет собой вращение вокруг центра симметрии равностороннего треугольника, лежащего в плоскости, перпендикулярной вектору углового момента. Схема численного интегрирования уравнений движения модели описана в [10].

Пусть интерес представляет пространственная конфигурация фазовой траектории при движении в фазовом пространстве $\mathscr{E}_{12}$. Пространственные характеристики движения содержатся в первых шести координатах $\mathbf{q} \in \mathscr{E}_6$ двенадцатимерного вектора $\mathbf{x} = [\mathbf{q}, \mathbf{p}] \in \mathscr{E}_{12}$. Формально можно ввести оператор $Q_{\mathbf{x}} \in (\mathscr{E}_{12} \longrightarrow \mathscr{E}_{12})$ ортогонального проецирования в $\mathscr{E}_{12}$ на шестимерное подпространство вида $\mathscr{R}_6 = \{[\mathbf{q}, \mathbf{0}], \mathbf{q} \in \mathscr{E}_6, \mathbf{0} \in \mathscr{E}_6\}\mathscr{E}_{12}$.

Средний по времени квадрат нормы вектора $Q_{\mathbf{q}}\mathbf{x}(t)$, $t \in [0, T)$, характеризует средний размер области пространства, где происходит движение материальной точки. В наибольшей степени эта область вытянута вдоль такого вектора из $\mathscr{E}_{12}$, проекция на который вектора $Q_{\mathbf{q}}\mathbf{x}(t)$ в среднем по времени имеет наибольший квадрат нормы. Аналогично, двумерная плоскость $\mathscr{R}_2$ в $\mathscr{E}_{12}$, проекция $Q_{\mathbf{q}}\mathbf{x}(t)$ на которую в среднем по времени имеет максимальный квадрат нормы, описывает ориентацию этой области в двух направлениях. Проекция "пространственной" части фазовой траектории $\mathbf{q}(t) \in \mathscr{E}_6$, $t \in [0, T)$, на эту плоскость дает двумерное описание шестимерного пространственного движения; точность этого приближения равна среднему квадрату нормы проекции вектора $Q_{\mathbf{q}}\mathbf{x}(t)$ на ортогональное к плоскости $\mathscr{R}_2$ дополнение в $\mathscr{E}_{12}$.

Для анализа направлений в фазовом пространстве, в которых происходят самые быстрые перемещения атомов кластера, от вектора $\mathbf{x}$ следует оставить лишь "часть", содержащую импульсы движущихся атомов. В этом случае $Q_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = [\mathbf{0}, \mathbf{p}]$, средний квадрат нормы вектора $Q_{\mathbf{p}}$ пропорционален среднему по времени значению кинетической энергии системы. Двумерная плос-

кость $\mathcal{R}_{2,p}$ в $\mathcal{E}_{12}$, проекция $Q_p\mathbf{x}(t)$ на которую в среднем по времени имеет максимальный квадрат нормы, задает два направления, в которых средняя кинетическая энергия максимальна. Проекция вектора $Q_p\mathbf{x}(t) \in \mathcal{E}_{12}$, $t \in [0, T)$, на эту плоскость дает двумерное описание шестимерной составляющей $\mathbf{p}(t)$ фазовой траектории пространства импульсов.

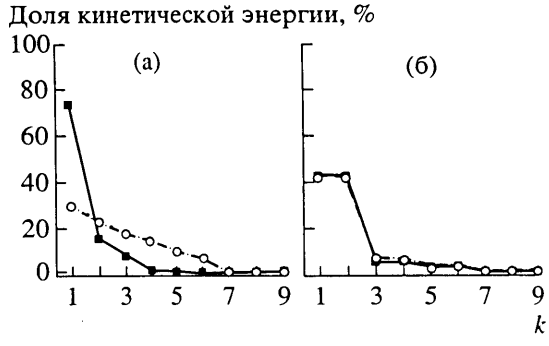
Эффективные размерности ζ фазовой траектории $Q_p\mathbf{x}(t)$ трехатомного кластера аргона были определены в зависимости от относительной погрешности аппроксимации ε для $E = -2.5$ и двух значений углового момента: $M = 0$ (см. фиг. 1а) и $M = 0.8M_{\max}$ (см. фиг. 1б). (На всех графиках регулярные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

На фиг. 2 доля кинетической энергии кластера, содержащаяся в k-й моде ($k = \overline{1, 6}$), выражена в процентах ($\lambda_k^2 / \sum_{j=1}^{6} \lambda_j^2 \times 100\%$); для (а) $E = -2.5$, $M = 0$; для (б) $E = -2.5$, $M = 0.8M_{\max}$.

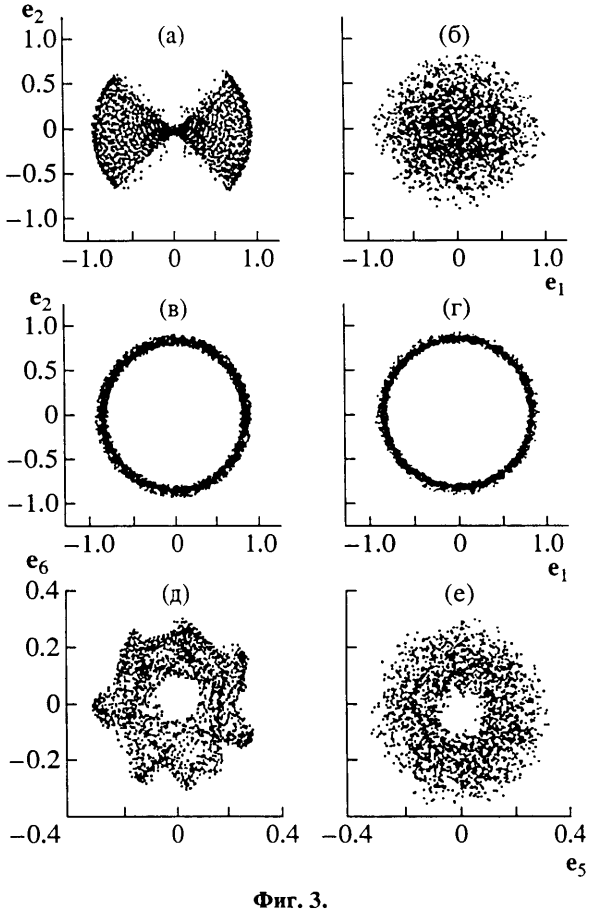
Как видно из фиг. 1, 2, в случае регулярного движения и нулевого углового момента вся кинетическая энергия с точностью 5–7% сконцентрирована в трех направлениях. Хаотическая траектория характеризуется большим числом мод, необходимых для описания кинетической энергии системы. Как для регулярной, так и для хаотической траекторий, при большом угловом моменте движение кластера в основном происходит в двумерном подпространстве. Погрешность двумерного приближения составляет 12–15%.

На фиг. 3 (а–г) отражена двумерная проекция траектории $Q_p\mathbf{x}(t)$ ($t = t_1, \ldots, t_{1000}$), представляющая собой сумму двух первых мод вектора $Q_p\mathbf{x}(t)$, $t \in [0, T)$. Следует отметить явное различие этих траекторий для регулярного и хаотического движений невращающегося кластера (фиг. 3а, 3б). При $E = -2.5$ и значениях $M = 0$ плоскость проходит через векторы $\mathbf{e}_1$ и $\mathbf{e}_2$. В случае регулярной траектории существуют области фазового пространства, недоступные для движения кластера. При больших значениях углового момента $M = 0.8M_{\max}$ картины движения в двумерных плоскостях практически не различаются (см. фиг. 3в (регулярная) и 3г (хаотическая)). Однако существенное различие видно в динамике 5-й и 6-й мод, которые вносят лишь небольшой вклад в кинетическую энергию системы (см. фиг. 3д (регулярная) и 3е (хаотическая)).

Фиг. 1.



Фиг. 2.



Фиг. 3.

ВЫВОДЫ

Предложенный способ позволяет визуализовать главные моды движения нелинейной динамической системы и тем самым исследовать особенности ее поведения в зависимости от параметров, определяющих ее движение.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бондаренко С.П., Пытьев Ю.П.* Об эффективном ранге модели линейных измерений с ошибкой // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1995. Т. 35. № 1. С. 6–23.
2. *Pyt'ev Yu.P., Pyt'ev A.Yu.* Effective Dimensionality and Data Compression // Pattern Recongnit. and Image Analys. 1997. V. 7. № 4. P. 393–406.
3. *Пытьев А.Ю., Пытьев Ю.П.* Об эффективной размерности множества измерений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1998. Т. 38. № 4. С. 682–697.
4. *Громов М.А., Сердобольская М.Л.* Об эффективном ранге конечномерных приближений бесконечномерной линейной модели измерения // Матем. моделирование. 1998. Т. 10. № 4. С. 33–45.
5. *Сердобольская М.Л.* Об эффективном ранге бесконечномерной линейной модели измерения // Вестн. МГУ. Сер 3. Физ. астрон. 2000. № 5. С. 5–8.
6. *Рисс Ф., Секефальви-Надь Б.* Лекции по функциональному анализу. М.: Изд-во иностр. лит., 1954.
7. *Aziz R.A.* Interatomic potentials for rare gasses: pure and mixed interaction // Inert Gases. Berlin: Springer, 1984. Ch. 2.
8. *Hinde R.J., Berry R.S.* Chaotic dynamics in small inert gas clusters: The influence of potential energy saddles // J. Chem. Phys. 1993. V. 99. № 4. P. 2942–2963.
9. *Jellinek J.J., Jasien P.G.* The structure of small molecules and ions // New York: Plenum Publ. Corp., 1988. P. 39–47.
10. *Belega E.D., Elyutin P.V., Trubnikov D.N., Shvilkina L.B.* Phase space structure of rotating trimers of nobel gas atoms // Physics-Doclady. 1997. V. 42. P. 750–753.
11. *Belega E.D., Trubnikov D.N., Lohr L.L.* The effect of rotation on the internal dynamics and phase space structure of rare gas trimers // Phys. Rev. A. 2001. V. 63. № 043203. P. 1–6.
12. *Berry R.S.* Many dimensional potential surfaces: what they imply and how to think about them // Internat. J. Quant. Chem.1996. V. 58. № 6. P. 657–670.