

## Эффект глобальной хаотизации в цепочке частиц

М. А. Гузев<sup>1</sup>, Ю. Г. Израильский<sup>2</sup>, К. В. Кошель<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт прикладной математики (ИПМ) ДВО РАН  
Россия, Владивосток, 690042, ул. Радио, 7  
guzev@iam.dvo.ru

<sup>2</sup>Институт автоматики и процессов управления (ИАПУ) ДВО РАН  
Россия, Владивосток, 690041, ул. Радио, 5  
izrailsk@iacp.dvo.ru

<sup>3</sup>Тихоокеанский океанологический институт (ТОИ) ДВО РАН  
Россия, Владивосток, 690041, ул. Балтийская, 43  
kvkoshel@poi.dvo.ru

*Получено 19 января 2010 г.*

Рассмотрено возникновение хаотических режимов в окрестности эллиптической точки в ячейке цепочки частиц, взаимодействующих с помощью потенциала Леннарда-Джонса. Установлен пороговый характер возникновения режима хаотизации, как по амплитуде, так и по частоте возмущения в случае одночастотного воздействия на ячейку. Предложен метод формирования глобального хаоса, основанный на использовании внешнего возмущения с конечным набором частот. Проведенный численный анализ показал, что в этом случае формирование глобального хаоса достигается при амплитудах возмущения и частотах существенно ниже соответствующих критических значений для одночастотного воздействия.

Ключевые слова: нелинейная динамика, молекулярная динамика, потенциал Леннарда-Джонса, хаотическая динамика, критерий Чирикова

**M. A. Guzev, Yu. G. Izrailsky, K. V. Koshel**  
**Global chaotization effect in particles chain**

The appearance of chaotic regimes near elliptic point in a cell of particles' chain interacting by means of Lennard-Jones potential is studied. The threshold nature of chaotization advent in the case of single-frequency cell excitation is demonstrated. A method of global chaotization based on multifrequency external excitation is proposed. The results of numerical experiments show that in this case the formation of global chaos is achieved at essentially lower values of external excitation amplitude and frequency, than in the case of single frequency excitation.

Keywords: nonlinear dynamics, molecular dynamics, Lennard-Jones potential, chaotic dynamics, Chirikov's criterion

Mathematical Subject Classification 2000: 37D45

## 1. Введение

Хорошо известно [1], что исследование проблемы возникновения хаотической динамики естественным образом привело к необходимости изучения простых моделей, в которых возникает хаос (например, нелинейный маятник с внешней возмущающей силой). Дальнейшее изучение реальных физических процессов, в которых наблюдается хаос, показало, что многие простые модели отражают основные черты его проявления, например, возникновение стохастического сепаратрисного слоя, формирование нелинейных резонансов и т. п. За хаотизацию фазового пространства ответственна гиперболическая неустойчивость, приводящая к расщеплению устойчивого и неустойчивого многообразий гиперболической точки динамической системы [2, 3]. Этот эффект получил название «сепаратрисный хаос». Также дополнительно мера хаоса в динамической системе увеличивается за счет пересечения серий нелинейных резонансов [4], приводящего к так называемому «глобальному хаосу».

Одномерные цепочки частиц также были предметом рассмотрения исследователей при изучении проблем хаотической динамики [1], поскольку некоторые задачи для них сводятся к исследованию стандартных отображений, известных для нелинейных динамических систем. С другой стороны, получаемые результаты позволяют выявить дополнительные эффекты хаотического поведения цепочек, отражающие свойство типичного поведения системы. В связи с этим следует указать работу [5]. В ней численно изучался вопрос о хаотизации волнового поля в полубесконечной цепочке связанных нелинейным потенциалом частиц. Если возникновение режима глобального хаоса при больших амплитудах воздействия является естественным эффектом, то указанный в [5] процесс постепенного развития хаотических колебаний при малых возмущениях требует объяснения. Эффект формирования режима сильной хаотической диффузии в фазовом пространстве для возмущений малой амплитуды также указан авторами работы [6].

Исследование явлений хаотизации цепочки частиц имеет также важное значение в связи с активным применением метода частиц для моделирования поведения материалов. Говоря об этом методе, мы рассматриваем частицы как материальные точки, а не как дискретные элементы, позволяющие свести уравнения механики сплошной среды к разностной системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Одним из наиболее хорошо разработанных вариантов метода частиц является метод молекулярной динамики, в классическом варианте которого в качестве частиц выступают атомы и молекулы. Поскольку к настоящему времени потенциалы межатомного взаимодействия достаточно хорошо известны, то динамика молекулярных соединений может быть смоделирована с высокой степенью точности. При этом бурное развитие вычислительной техники и наращивание ее количественных возможностей позволяет получить качественно новые результаты за счет изменения количественной сложности компьютерной модели.

Несмотря на удовлетворительное совпадение результатов компьютерного моделирования поведения материалов с наблюдаемым в эксперименте, существует проблема понимания их внутренних механизмов с точки зрения нелинейной динамики. Для одномерной системы соответствующая модельная задача сводится к исследованию движения частицы массы  $m$  в ячейке: слева частица взаимодействует с неподвижной частицей, а справа она взаимодействует с частицей, которая движется по заданному закону  $q = \xi(t)$ . Взаимодействие между частицами характеризуется потенциалом  $U(q)$ . Динамика частицы в ячейке определяется гамильтонианом

$$H = H(p, q, t) = \frac{p^2}{2m} + V(q), \quad V(q) = U(q) + U(\xi(t) - q), \quad (1.1)$$

в котором  $p$  — импульс частицы, а вид функции  $\xi(t)$  зависит от коллективного поведения частиц системы. В данной работе исследование явлений сильной хаотизации рассматривается для случая, когда  $\xi(t)$  имеет дискретный конечный спектр, а частицы взаимодействуют с помощью потенциала Леннарда-Джонса [7]. В качестве критерия хаотизации используется критерий перекрытия резонансов В. Б. Чирикова [8]. Для рассматриваемой нами системы в случае одночастотного возмущения  $\xi(t)$  установлено наличие пороговых значений амплитуды и частоты, которые определяют границу, ниже которой глобальный хаос невозможен. Для одномерной гамильтоновой системы с двухчастотным возмущением по времени показано, что выполнение критерия Чирикова при малых амплитудах возмущения может быть обеспечено за счет комбинации частот внешнего возмущения. При этом за счет выбора достаточно близких частот всегда можно увеличить степень перекрытия резонансов в нужной области фазового пространства при достаточно малых амплитудах и частотах возмущения.

## 2. Одночастотное воздействие

Проанализируем механизм возникновения глобального хаоса в окрестности эллиптической точки при одночастотном возмущении для модели (1.1). Пусть взаимодействие определяется потенциалом Леннарда-Джонса  $U(q) = U_0[(a/q)^{12} - 2(a/q)^6]$  с некоторой амплитудой  $U_0$ , а возмущение  $\xi(t)$  зададим в виде  $\xi(t) = a(2 + \varepsilon(t))$ ,  $\varepsilon(t) = \alpha_1 \cos \omega_1 t$ , где  $|\alpha_1| \ll 1$ . Состояние равновесия для  $U(q)$  достигается в эллиптической точке  $q = a$ . Выберем эту точку в качестве начала координат и перейдем к безразмерным величинам, полагая  $H \rightarrow H/U_0$ ,  $q \rightarrow q/a - 1$ ,  $t \rightarrow t/t_0$ ,  $\omega_1 \rightarrow \omega_1 t_0$ , где  $t_0 = \sqrt{ma^2/U_0}$ . Тогда гамильтониан частицы равен

$$H(p, q, t) = \frac{p^2}{2} + V(q), \quad V(q) = U(q+1) + U(1 + \varepsilon(t) - q). \quad (2.1)$$

Учитывая малость амплитуды  $\varepsilon(t)$ , выполним разложение гамильтониана (2.1) вплоть до членов первого порядка по малому параметру:

$$H(p, q, t) = H_0(p, q) - \varepsilon(t)H_1(q) + \dots, \quad H_1(q) = \frac{d}{dq}U(1 - q). \quad (2.2)$$

При исследовании динамики гамильтоновых систем обычно используют переменные действие–угол  $(I, \phi)$  [1]. Для невозмущенной системы действие сохраняется вдоль фазовой траектории и его значение определяется начальными условиями  $(p_0, q_0)$ . Если выбрать  $p_0 = 0$ , то соответствие между невозмущенным действием  $I$  и параметром  $q_0$  является однозначным. Переход к переменным действие–угол можно выполнить численно по формулам

$$I(q_0) = \frac{2}{\pi} \int_0^{q_0} p(q_0, q) dq, \quad \phi(q, q_0) = \omega \int_{q_0}^q \frac{dq}{p(q_0, q)}, \quad \omega = \frac{\pi}{2} \left( \int_0^{q_0} \frac{dq}{p(q_0, q)} \right)^{-1}, \quad (2.3)$$

где  $p(q_0, q) = \sqrt{2(V(q_0) - V(q))}$ , а в записи для  $\phi$  следует подразумевать интеграл вдоль стационарной траектории с нужным числом пройденных периодов, при этом  $p = \pm|p|$  в зависимости от направления движения. Тогда для гамильтониана  $H(p, q, t)$  получаем:

$$H(p, q, t) = H_0(I) - \frac{1}{2}\alpha_1 \sum_n H_{1n}(I) [\cos(n\phi + \phi_0 - \omega_1 t) + \cos(n\phi + \phi_0 + \omega_1 t)]. \quad (2.4)$$

Пусть выполняется условие резонанса для некоторой тройки чисел  $(n, I_{n1}, \omega_1)$ :  $n\omega(I_{n1}) = \omega_1$ . Мы не рассматриваем резонансы вида  $n\omega(I_{n1}) = m\omega_1$  (резонансы  $n : m$  при  $m > 1$ ), поскольку их вклад меньше вклада резонансов главной серии. Для анализа динамики системы

в окрестности нелинейного резонанса воспользуемся стандартным методом [1]. В соответствии с ним оставим в (2.4) только резонансную гармонику, что дает

$$H(p, q, t) = H_0(I) - \frac{1}{2}\alpha_1 H_{n1}(I) \cos(n\phi + \phi_0 - \omega_1 t). \quad (2.5)$$

Введем новую фазу  $\psi = n\phi + \phi_0 - \omega_1 t$ , тогда уравнения движения, соответствующие гамильтониану (2.5), имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}I &= -\frac{\partial H}{\partial \psi} = \frac{1}{2}\alpha_1 H_{n1}(I) \sin(\psi), \\ \frac{d}{dt}\psi &= \frac{\partial H}{\partial I} = n\omega(I) - \omega_1 - \frac{1}{2}\alpha_1 \cos(\psi) \frac{d}{dI}H_{n1}(I). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Предполагая малой величину  $J = I - I_{n1}$ , разложим  $H_0(I)$  по  $J$  вплоть до членов второго порядка включительно,  $\omega(I)$  — до членов первого порядка; при этом величину  $H_{n1}(I)$  возьмем в точке  $I_{n1}$  и, пренебрегая членом  $\sim \alpha_1$  в уравнении для фазы, перепишем (2.6) следующим образом:

$$\frac{d}{dt}J = \frac{1}{2}\alpha_1 H_{n1}(I_{n1}) \sin(\psi), \quad \frac{d}{dt}\psi = Jn \frac{d}{dI}\omega(I_{n1}).$$

Полученные уравнения соответствуют так называемому гамильтониану нелинейного маятника [1]:

$$\bar{H}(J, \psi) = n \frac{d}{dI}\omega(I_{n1}) \frac{J^2}{2} - \frac{1}{2}\alpha_1 H_{n1}(I_{n1}) \cos(\psi).$$

Ширина резонанса по действию определяется из условия

$$\frac{d}{dI}\omega(I_{n1}) \frac{J^2}{2} = \frac{1}{2}\alpha_1 H_{n1}(I_{n1}), \quad J = \sqrt{\alpha_1 H_{n1}(I_{n1}) / \frac{d}{dI}\omega(I_{n1})}.$$

По частоте она равна

$$\Delta\omega \approx \sqrt{\frac{1}{2}\alpha_1 H_{n1}(I_{n1}) \frac{d}{dI}\omega(I_{n1})}. \quad (2.7)$$

Рассмотрим инвариантные кривые для резонансных действий  $I_{n1}, I_{(n-1)1}$ . Чтобы образовать хаотическую область на плоскости  $(p, q)$ , необходимо разрушить соответствующие этим значениям действия кривые. При исследовании ряда модельных систем было замечено [1, 8], что хаотизация наступает при условии перекрытия резонансов. Если через  $\Delta\omega(\Delta I)$  обозначить соответствующую ширину резонанса, а  $\delta\omega = \omega(I_{n1}) - \omega(I_{(n-1)1})$ , ( $\delta I = I_{n1} - I_{(n-1)1}$ ) — расстояние между резонансами, то параметр  $K$ , характеризующий степень перекрытия резонансов, равен  $K = \Delta I / \delta I \approx \Delta\omega / \delta\omega$  [1, 8]. Предложенный Б. В. Чириковым критерий состоит в том, что перекрытие резонансов, приводящее к формированию хаотических областей, происходит при условии  $|K| \geq 1$ :

$$K_{n,n-1} = \frac{\Delta\omega(I_{n1}) + \Delta\omega(I_{(n-1)1})}{2(\omega(I_{n1}) - \omega(I_{(n-1)1}))} \sim 1. \quad (2.8)$$

При выполнении условия резонанса внешняя частота однозначно определяет резонансную частоту, а следовательно, и резонансное действие  $I_{n1}$ . Последнее однозначно связано с начальным положением  $q_0$  траектории, движение по которой происходит с резонансной частотой (резонансной траектории). Тогда величина  $K_{n,n-1} = K_{n,n-1}(q_0)$ , ее поведение приведено

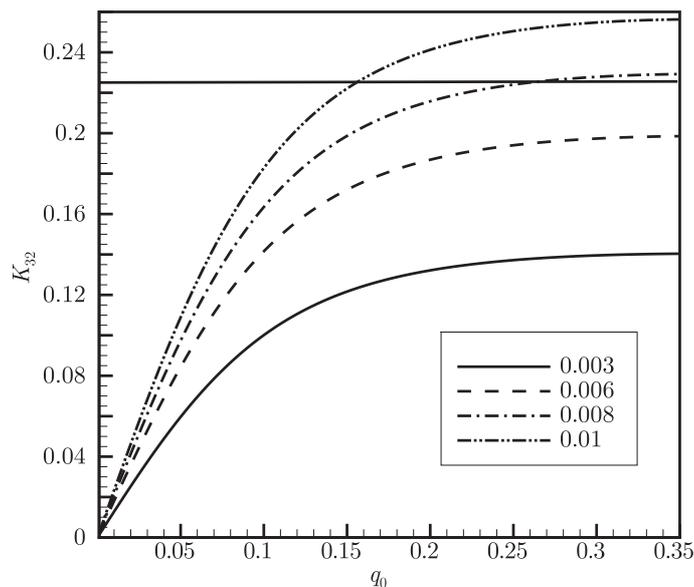


Рис. 1. Зависимости  $K_{3,2}(q_0)$  при  $\alpha_1 = 0.003, 0.006, 0.008, 0.01$ . Горизонтальная линия соответствует критическому значению критерия.

на рис. 1; при этом коэффициенты Фурье  $H_{1n}(q_0)$  рассчитывались численно:

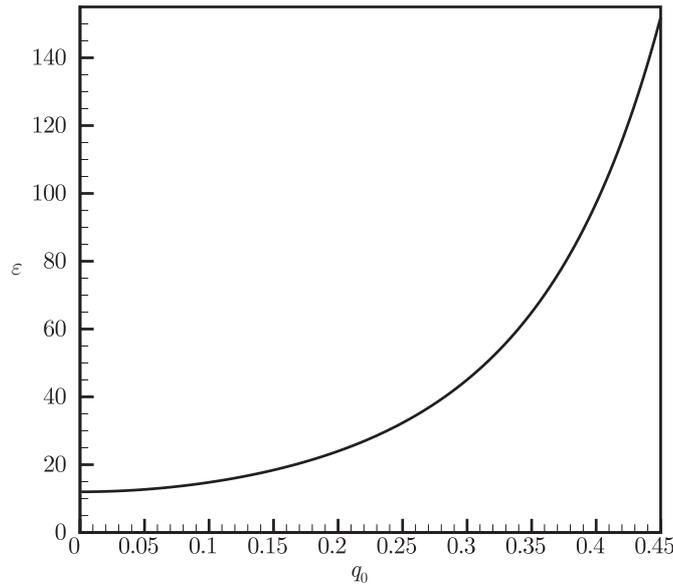
$$H_{1n}(q_0) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} U'(1-q) \cos n\phi d\phi,$$

где зависимость  $q = q(\phi)$  определяется из соотношения (2.4).

На рис. 1 показано поведение функции  $K_{3,2}(q_0)$ , определяющей перекрытие резонансов  $2 : 1$  и  $3 : 1$ , в зависимости от начального положения соответствующей резонансной траектории и нескольких значений амплитуды возмущения. Указанные зависимости вычислялись следующим образом: для выбранного значения  $q_0$  находилась частота  $\omega(q_0)$  движения частицы по замкнутой траектории, а для частот  $\omega(q_0)/2$ ,  $\omega(q_0)/3$  вычислялись ширины соответствующих резонансов и расстояние между ними по частоте. Отметим, что значения  $K_{1,2}(q_0)$  для резонансов  $1 : 1$  и  $2 : 1$  меньше соответствующих значений  $K_{3,2}(q_0)$ . Это можно объяснить следующим образом: из (2.8) видно, что  $K$  обратно пропорциональна производной частоты по действию, а производная возрастает с ростом координаты  $q_0$  (действия) с ростом частоты возмущения, т. е. с удалением от эллиптической точки. Последнее утверждение иллюстрируется на рис. 2, где приведена зависимость частоты от начального положения  $q_0$  в отсутствие возмущения.

Результаты численного анализа, представленные на рис. 1, показывают, что существует критическое значение амплитуды возмущения, при котором максимальное значение  $K$  для самых крупных резонансов  $1 : 1$ ,  $2 : 1$ ,  $3 : 1$ ,  $3 : 2$  не превосходит критического, и глобального хаоса в системе не наблюдается (тонкий сепаратрисный слой в окрестности гиперболических точек резонансов мы не учитываем). Вторым пороговым эффектом состоит в том, что глобальный хаос не наблюдается даже при амплитудах, больших критической, если частота возмущения меньше некоторой критической частоты. В этом случае не наступает перекрытие резонансов.

Влияние критического значения амплитуды и частоты возмущения на формирование глобального хаоса видно из рис. 3. На нем приведены сечения Пуанкаре при нескольких

Рис. 2. Зависимость частоты от  $q_0$  в невозмущенной системе.

значениях частоты возмущения и амплитуды  $\alpha_1 = 0.006$ , которая меньше критического значения величины, а для  $\alpha_1 = 0.008$  — больше критического значения.

Из рис. 3 видно, что при амплитуде возмущения меньше критической, крупные резонансы 2 : 1 и 3 : 1 не перекрываются и хаотизация траекторий проявляется только в узких слоях в окрестности сепаратрис нелинейных резонансов. При амплитуде возмущения больше критической глобальный хаос возможен, но не на всех частотах. На рис. 4 видно, что при амплитуде возмущения  $\alpha_1 = 0.008$  мы наблюдаем отсутствие перекрытия при низких частотах, в частности, на частоте  $\omega_1 = 70$  упомянутые резонансы все еще разделены узким барьером, хотя слабые проявления глобального хаоса, за счет перекрытия более мелких резонансов, уже начинают появляться. На частоте  $\omega_1 = 90$  уже происходит перекрытие упомянутых резонансов и, соответственно, мы наблюдаем довольно значительную полосу хаотического поведения траекторий.

Вернемся к рассмотрению указанного выше факта, что критическая амплитуда для перекрытия резонансов 1 : 1 и 2 : 1 существенно больше, чем для резонансов 2 : 1 и 3 : 1. Ширина резонансов  $\Delta\omega(I)$  в (2.8) определяется через коэффициенты Фурье согласно (2.7):  $\Delta\omega \sim \sqrt{H_{n1}(I)}$ . Выполненные численные оценки показывают, что ширина резонансов 2 : 1 и 3 : 1 меньше ширины резонанса 1 : 1, но расстояние между резонансами уменьшается с ростом номера быстрее, чем уменьшается ширина резонанса. Поскольку расстояние между резонансами по порядку величины равно  $\omega_1/(n-1) - \omega_1/n = \omega_1/n(n-1)$ , то условие (2.8) можно переписать в виде

$$K_{n,n-1} \sim (n-1)n \frac{\sqrt{H_{n1}(I)}}{\omega_1} \sim 1.$$

Это позволяет оценить поведение коэффициентов Фурье: они убывают медленнее, чем  $1/n^2(n-1)^2$ . Аналогичный эффект с учетом большого числа резонансов рассмотрен в работе [14]. Также указанная ситуация наглядно продемонстрирована на рис. 3, на котором легко выделяются соответствующие резонансные острова. На этом рисунке мы видим, что ширина резонанса 1 : 1 наибольшая, но он отстоит далеко от следующих резонансов по частоте.

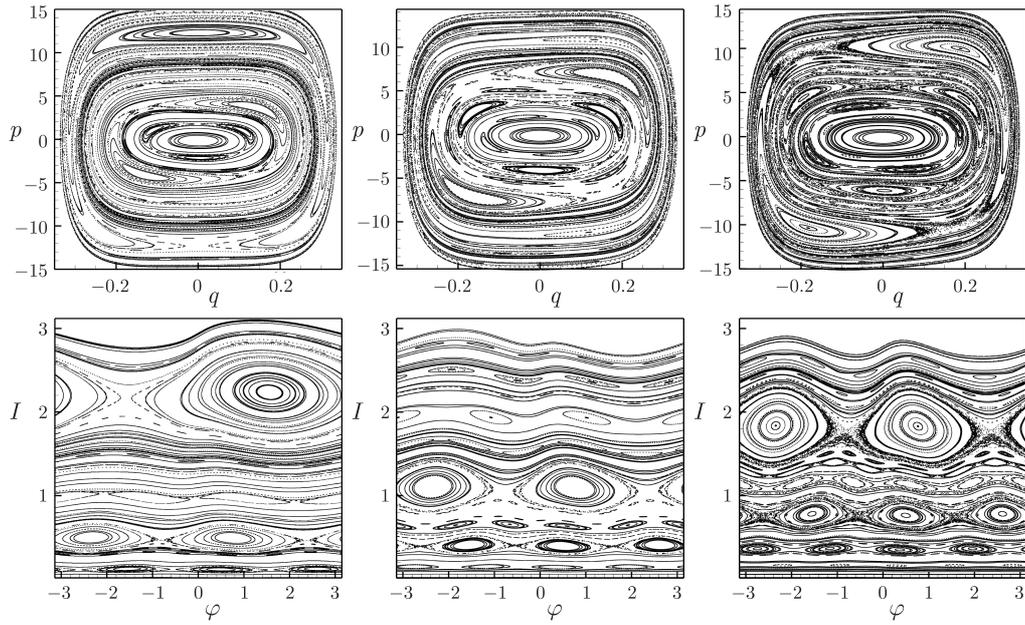


Рис. 3. Сечения Пуанкаре при  $\alpha_1 = 0.006$  в переменных  $(p, q)$  (верхний ряд) и в переменных  $(I, \phi)$  (нижний ряд). Частота возмущения  $\omega_1 = 50$  (слева),  $\omega_1 = 70$  (в центре) и  $\omega_1 = 90$  (справа).

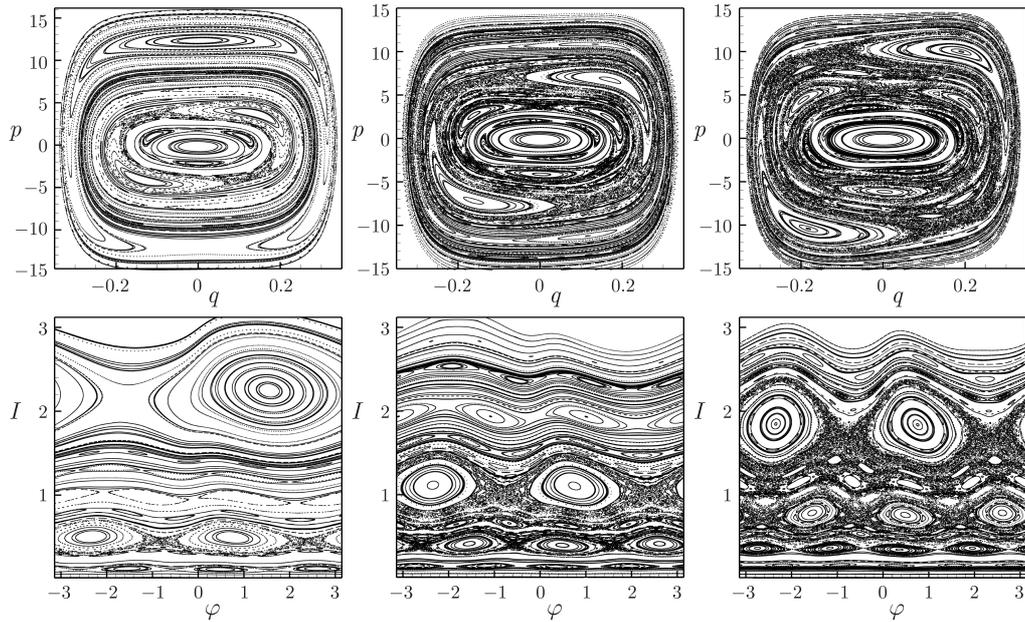


Рис. 4. Сечения Пуанкаре при  $\alpha_1 = 0.008$  в переменных  $(p, q)$  (верхний ряд) и в переменных  $(I, \phi)$  (нижний ряд). Частота возмущения  $\omega_1 = 50$  (слева),  $\omega_1 = 70$  (в центре) и  $\omega_1 = 90$  (справа).

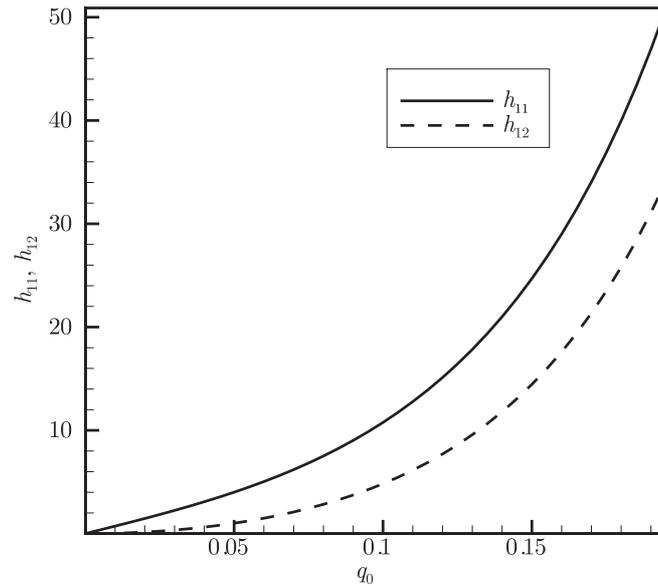


Рис. 5. Зависимость коэффициентов Фурье от начального положения траектории  $q_0$  (действия).

Обсудим подробнее порядок выбора величины параметра  $\alpha_1$ . Условие малости возмущения для гамильтониана (2.5) имеет вид  $H_0 \gg \alpha_1 H_{n1}$ . Значение невозмущенного гамильтониана  $H_0 \sim 10$ . На рис. 5 приведены зависимости коэффициентов Фурье от  $q_0$ . Рассматриваемая нами область значений  $q_0 \sim 0.2$ , для которой коэффициенты  $H_{n1} \sim 50$ , тогда  $\alpha_1 \ll 0.2$ . Рассматриваемые нами амплитуды возмущений в численных экспериментах удовлетворяют ограничению на  $\alpha_1 \ll 0.2$ .

Заметим, что полученное критическое значение критерия перекрытия несколько меньше единицы. Это объясняется наличием более мелких резонансов между теми крупными, которые учитывались при оценке степени перекрытия; для наших целей учет этих более тонких эффектов не так важен. Качественно учесть тот факт, что перекрытие наступает из-за более мелких резонансов раньше, чем достигается уровень  $K \sim 1$ , можно введением критического уровня критерия перекрытия, несколько меньшего 1. Также на рис. 3 приведены сечения Пуанкаре в переменных действие–угол. В таком представлении значительно яснее выделяются цепочки резонансных островов, регулярные барьеры между ними и расстояние между резонансами по действию. Еще один вывод, который можно сделать из анализа этих рисунков, состоит в том, что приближение нелинейного маятника дает грубую оценку ширины резонансов. Действительно, легко видеть, что сепаратрисы и фазовые портреты нелинейных резонансов довольно сильно отличаются от фазового портрета нелинейного маятника. Тем не менее, полученные оценки хорошо отражают тенденции (изменение ширины и положения нелинейных резонансов с частотой и амплитудой возмущения), а количественную неточность можно учесть в критическом значении критерия перекрытия, которое в нашем случае, с хорошей точностью, можно оценить, как 0.3.

### 3. Критерий Чирикова для двухчастотного воздействия

Укажем, как сформировать области глобального хаоса в окрестности эллиптической точки вследствие перекрытия нелинейных резонансов, используя двухчастотное воздей-

ствии. Рассмотрим движение гамильтоновой системы, которое будем описывать в переменных действие–угол  $(I, \phi)$ . Невозмущенный гамильтониан равен  $H_0(I)$ , а возмущенный гамильтониан определяется формулой  $H = H_0(I) + \alpha V(I, \phi, \omega_1 t, \omega_2 t)$ , в которой  $\omega_1, \omega_2$  — частоты возмущения,  $\alpha$  — малый параметр. Функция  $V(I, \phi, \omega_1 t, \omega_2 t)$  разлагается в тройной ряд Фурье  $V(I, \phi, \omega_1 t, \omega_2 t) = \sum_{k,l,m} V_{klm}(I) \exp i(k\phi + l\omega_1 t + m\omega_2 t)$ . Уравнения движения, соответствующие данной системе, имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial \phi} = -i\alpha \sum_{k,l,m} k V_{klm}(I) \exp i(k\phi + l\omega_1 t + m\omega_2 t), \\ \frac{d\phi}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial I} = \omega(I) + i\alpha \sum_{k,l,m} \frac{\partial V_{klm}(I)}{\partial I} \exp i(k\phi + l\omega_1 t + m\omega_2 t). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Из теории нелинейных динамических систем известно [1], что в уравнениях (3.1) возможен резонанс, если условие

$$k\omega(I) + l\omega_1 + m\omega_2 \approx 0 \quad (3.2)$$

выполнено для некоторых целых  $k, l, m$ . Дальнейшее исследование резонанса связано с анализом динамики, обусловленной выделенным из возмущения резонансным членом [1, 8]. Тройка  $k, l, m$  может быть, естественно, много. Пусть первой тройке  $(k_1, l_1, m_1)$  соответствует значение действия  $I_{10}$ , определяемое через частоту  $\omega(I)$ , а второй тройке  $(k_2, l_2, m_2)$  — значение действия  $I_{20}$ . Тогда «укороченная» система уравнений для (1.1) в окрестности резонансного действия  $I_{i0}$  ( $i = 1, 2$ ) может быть получена из универсального гамильтониана нелинейного резонанса, совпадающего с гамильтонианом нелинейного маятника, в котором величина  $\Delta I_i = I_i - I_{i0}$  играет роль импульса, а эффективная масса  $m_i = 1/\omega'(I_{i0})$  [1, 8].

Как указано в разделе 2, для образования хаотической области на плоскости  $(p, q)$  необходимо разрушить инвариантные кривые, ограничивающие соседние резонансы для действий  $I_{10}, I_{20}$ , т. е. хаотизация наступает при условии перекрытия резонансов. Обозначая через  $\Delta\omega(\Delta I)$  соответствующую ширину резонанса, а через  $\delta\omega = \omega(I_{20}) - \omega(I_{10})$  ( $\delta I = I_{20} - I_{10}$ ) — расстояние между резонансами по частоте, введем параметр  $K$ , характеризующий степень перекрытия резонансов:  $K = \Delta I / \delta I \approx \Delta\omega / \delta\omega$  [1, 8]. Перекрытие резонансов, приводящее к формированию хаотических областей, происходит при выполнении критерия Чирикова:  $|K| \sim 1$ .

Проанализируем в линейном приближении по параметру  $\delta I = I_{20} - I_{10}$  условия возможного увеличения  $|K|$ . С этой целью разложим  $\omega(I)$  в окрестности  $I_{20}$  с точностью до второго порядка по  $\delta I$  и воспользуемся соотношением (3.1), в результате получим

$$\delta I \approx \frac{1}{\omega'(I_{20})} \left[ \left( \frac{l_1}{k_1} - \frac{l_2}{k_2} \right) \omega_1 + \left( \frac{m_1}{k_1} - \frac{m_2}{k_2} \right) \omega_2 \right]. \quad (3.3)$$

Для формирования области глобального хаоса необходимо создание условий перекрытия резонансов разных порядков или одного порядка в случае многочастотных возмущений. С этой целью следует уменьшить расстояние  $|\delta I|$  между резонансами, что соответствует увеличению параметра  $|K|$ . Уменьшение величины  $|\delta I|$  между резонансами, как следует из (3.3), можно обеспечить путем подбора частот  $\omega_1, \omega_2$ , при этом для фиксированной пары наборов  $(k_i, l_i, m_i)$  минимальное значение величины  $|\delta I|$  достигается при соизмеримых частотах  $\omega_1, \omega_2$ . Ниже будет показано, что присутствие в разложении потенциала  $V(I, \phi, \omega_1 t, \omega_2 t)$  уже двух слагаемых на разных частотах приводит к радикальному увеличению степени хаотизации системы даже при малых амплитудах возмущения.

#### 4. Численный анализ для многочастотного возмущения

Напомним результат работы [5]: постепенное нарастание степени хаотизации со временем в полубесконечной цепочке при весьма малых амплитудах возмущения. Проведенные численные эксперименты показали, что указанный выше эффект имеет место и в цепочке с потенциалом Леннарда–Джонса. Возможное его объяснение связано с тем, что в цепочке имеет место спектр колебаний частиц конечной ширины. Тогда, выделив одну ячейку в цепочке, можно полагать, что на нее со стороны остальной части цепочки действует возмущение с конечным спектром. Значит, эффект хаотизации, представленный в [5], определяется многочастотным возмущением.

Рассмотрим модельный гамильтониан такого возмущения. Потенциал  $V(I, \phi, \omega_1 t, \omega_2 t)$  содержит два слагаемых, тогда возмущенный гамильтониан имеет вид

$$H = H_0(I) - \frac{1}{2}H_{n1}(I)[\alpha_1 \cos(n\phi + \phi_0 - \omega_1 t) + \alpha_2 \cos(n\phi + \phi_0 - \omega_2 t)]. \quad (4.1)$$

В этом случае мы будем иметь пары нелинейных резонансов одинакового порядка, что соответствует тройкам с  $l_2 = m_1 = 0$ , дающим минимальное расстояние между резонансами в соответствии с формулой (3.2). При значениях  $q_0$ , соответствующих резонансной траектории для одной из частот, второй осциллирующий член в гамильтониане (4.1) можно отбросить, как быстроосциллирующий, т. е. эти резонансы одного порядка можно рассматривать по отдельности. Тогда критерий перекрытия двух резонансов одного порядка, но порожденных разными гармониками возмущения  $\omega_1$  и  $\omega_2$ , можно записать в следующем виде:

$$K_{n,n}(\omega_1, \omega_2) = n \frac{\Delta\omega(I_{n1})}{\omega_2 - \omega_1} \sim 1. \quad (4.2)$$

Здесь учтено, что близко расположенные резонансы одного порядка будут иметь приблизительно одинаковую ширину, а расстояние между ними будет иметь вид  $\frac{\omega_2}{n} - \frac{\omega_1}{n}$ .

Сравним условия выполнения критерия Чирикова при одночастотном и многочастотном воздействии. Соответствующим параметром порядка является отношение функций (2.8) и (4.2), характеризующих перекрытие резонансов:

$$\frac{K_{n,n-1}(\omega_1, \omega_2)}{K_{n,n-1}(q_0(\omega_1))} \sim \Gamma = \frac{\omega_1}{(n-1)(\omega_2 - \omega_1)}. \quad (4.3)$$

При заданной амплитуде возмущения зафиксируем первую частоту  $\omega_1$ , а вторую частоту  $\omega_2$  выберем исходя из условия  $0 < \omega_2 - \omega_1 < \frac{\omega_1}{(n-1)}$ . Это позволяет величину  $\Gamma$  сделать сколь угодно больше единицы, тогда можно добиться выполнения критерия (4.2) даже при невыполнении критерия (2.8). Таким образом, можно сколько угодно увеличить степень перекрытия нелинейных резонансов, соответствующих разным частотам возмущения. Предложенный механизм снижения порога хаотизации иллюстрируется на рис. 6, где приведены зависимости (4.2).

Результаты расчетов сечений Пуанкаре при двухчастотном возмущении представлены на рис. 7. Суммарная амплитуда двух гармоник выбрана так, что она меньше критического значения амплитуда для одночастотного возмущения. Учитывая пороговый характер поведения функции  $K$  в зависимости от частоты, величина  $(\omega_1 + \omega_2)/2$  выбрана меньше 70, что соответствует критическому значению частоты для  $\alpha_1 = 0.008$  (см. рис. 4).

Расчеты для  $\omega_1 = 45$ ,  $\omega_2 = 55$  представлены в левом столбце на рис. 7. Отсюда видно, что достаточно сильно перекрываются резонансы 1 : 1, соответствующие разным частотам

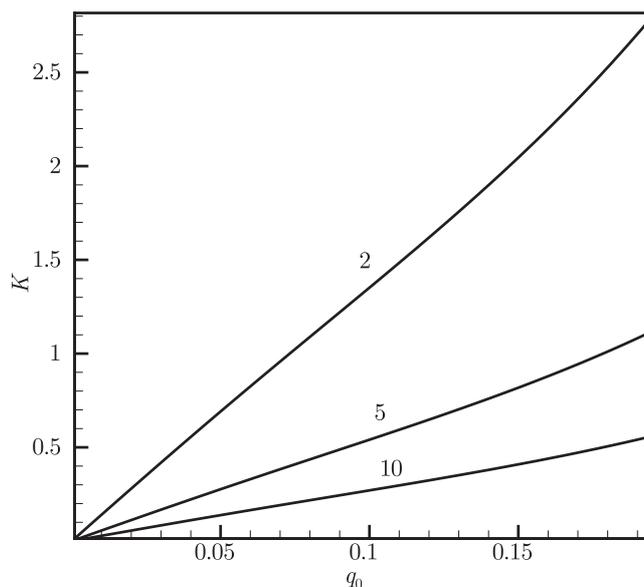


Рис. 6. Значения критерия Чирикова (4.2) при двухчастотном возмущении для следующих разностей между частотами возмущения  $\Delta\omega = \omega_2 - \omega_1 = 2, 5, 10$ .

возмущения. Тем не менее, мы выбрали столь малое возмущение, что факт существования двух резонансов, соответствующих разным частотам возмущения, надежно устанавливается и эллиптические точки двух резонансов  $1 : 1$ , каждая из которых окружена одним островом, частично разрушенным из-за перекрытия этих резонансов. Поскольку резонансы  $1 : 1$  являются самыми крупными, в соответствующей области возникает самая широкая область хаотизации.

Аналогичная ситуация наблюдается при рассмотрении резонансов  $1 : 2$ , в окрестности которых формируется вторая область хаотизации. Резонансы  $1 : 3$  не перекрываются между собой, но внешний перекрывается с внутренним резонансом  $1 : 2$ , увеличивая ширину соответствующей хаотической области.

Сравнение левого и правого столбцов рис. 7 показывает, как увеличивается степень перекрытия резонансов одного порядка при сближении частот возмущения: для левого столбца разность частот равна  $\omega_2 - \omega_1 = 55 - 45 = 10$ , а для правого она вдвое меньше  $\omega_2 - \omega_1 = 55 - 50 = 5$ . Здесь мы наблюдаем два противоположных эффекта. С одной стороны, резонансы  $1 : 1$  и  $1 : 2$  полностью разрушены и их эллиптические точки не выделяются или выражены значительно слабее, а резонансы  $1 : 3$  начали перекрываться, что привело к возникновению дополнительной области хаотизации траекторий, которая теперь отделена от области перекрытия резонансов  $1 : 2$ . С другой стороны, в силу сближения резонансов одного порядка, ширины зон хаотизации заметно уменьшились. Особенно наглядно вышеуказанные эффекты видны на рисунках, приведенных в переменных действие–угол (нижняя часть рис. 7).

Проведенные результаты показали, что двухчастотное возмущение, даже при малых амплитудах, способно приводить к радикальному увеличению степени хаотизации системы, а следовательно, и к значительным отклонениям траекторий от положения равновесия, даже если они изначально были близки к нему. Следует отметить, что практически отсутствует порог критической амплитуды возмущения и критической частоты: за счет выбора двух достаточно близких частот всегда можно увеличить степень перекрытия в нужном месте фазового пространства при достаточно маленьких амплитудах.

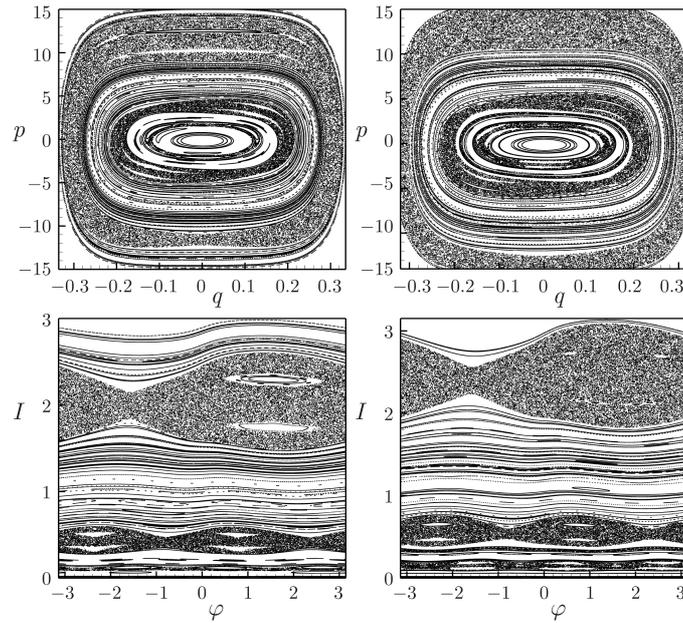


Рис. 7. Сечения Пуанкаре при двухчастотном возмущении. Слева:  $\alpha_1 = \alpha_2 = 0.002$  и  $\omega_1 = 45$ ,  $\omega_2 = 55$ ; справа:  $\alpha_1 = \alpha_2 = 0.002$  и  $\omega_1 = 50$ ,  $\omega_2 = 55$ .

Не только перекрытие резонансов одного порядка, соответствующих разным гармоникам возмущения, приводит к увеличению степени хаотизации. Можно подобрать частоты так, что резонанс, скажем,  $1 : 2$ , соответствующий одной гармонике, будет расположен между резонансами  $1 : 2$  и  $1 : 3$ , соответствующими другой гармонике. Тогда перекрытие этой пары резонансов с резонансом  $1 : 2$  приведет к хаотизации всей области фазового пространства, занятой этими тремя резонансами. Пример такой ситуации приведен на рис. 8, который одновременно иллюстрирует значительное повышение эффективности хаотизации при трехчастотном возмущении.

В левом столбце на рис. 8 третья частота возмущения подобрана так, что резонанс  $1 : 3$ , соответствующий частоте возмущения  $\omega_3/3 = 60/3 = 20$ , находится между резонансом  $1 : 3$ , соответствующим частоте  $\omega_2/3 = 50/3 = 16.7$  и резонансом  $1 : 2$ , соответствующим частоте  $\omega_1/2 = 44/2 = 22$ . Тогда резонанс на траектории, соответствующей начальному положению  $q_0(\omega_3/3 = 20)$ , перекрывается с двумя резонансами на траекториях с начальными положениями  $q_0(\omega_2/3 = 16.7)$  и  $q_0(\omega_1/2 = 22)$ , что приводит к разрушению всех этих резонансов и хаотизации соответствующей области фазового пространства.

В примере с трехчастотным возмущением мы получили три достаточно широких области хаотического поведения для суммарной амплитуды, меньше критической амплитуды для одночастотного возмущения. Однако между областями остались узкие барьеры из регулярных траекторий. Предложенный механизм управления областью хаотического поведения с помощью вложения гармоник дает очевидный метод разрушения этих барьеров: достаточно добавить в возмущение еще одну гармонику с частотой, дающей нелинейные резонансы в области барьеров. Эта ситуация продемонстрирована в правом столбце на рис. 8. Здесь при четырехчастотном возмущении получен глобальный хаос практически во всей окрестности эллиптической точки от значений  $q_0 \sim 0$  до значений  $q_0 \sim 0.3$ , что соответствует весьма существенным отклонениям от положения равновесия для потенциала

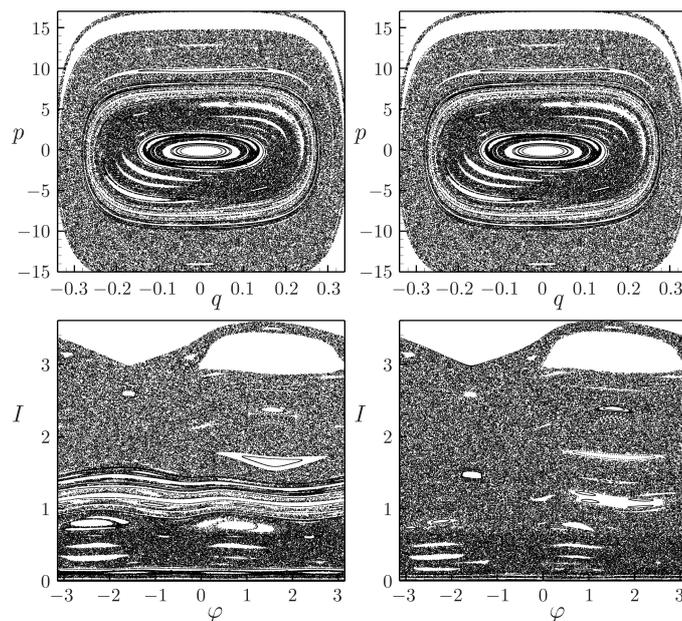


Рис. 8. Сечения Пуанкаре при трехчастном и четырехчастотном возмущении. Слева:  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 0.002$  и  $\omega_1 = 44$ ,  $\omega_2 = 50$ ,  $\omega_3 = 60$  и справа:  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = 0.002$  и  $\omega_1 = 36$ ,  $\omega_2 = 44$ ,  $\omega_3 = 50$ ,  $\omega_4 = 60$ .

Леннарда-Джонса. Существенно, что в этом случае траектория, изначально расположенная вблизи эллиптической точки, может блуждать по всей хаотической области, т. е. со временем попадать в область высоких энергий.

Остановимся на принципиальном моменте численного анализа. Мы выбирали частоты такими, чтобы период, кратный всем периодам возмущения (по которому мы считаем сечения Пуанкаре), был не слишком большим, по крайней мере, все частоты выбирались целыми. Это не принципиальное ограничение, и связано оно с представлением результатов. Очевидно, что при многочастотном возмущении сечения Пуанкаре нужно строить с наибольшим общим периодом для всех гармоник. В случае же выбора частот, для которых общая кратная частота является малой величиной, время счета очень сильно возрастает, а в случае иррационального отношения частот построение сечений Пуанкаре невозможно. Но даже при таком выборе гармоник указанные эффекты сохраняются, однако диагностировать хаотическое поведение пришлось бы более трудоемкими методами, например, вычисляя накопленные ляпуновские показатели [10].

Мы показали, что обогащение спектра нестационарного воздействия позволяет не только увеличивать степень хаотизации, но и управлять этой величиной, контролируя область фазового пространства, в которой возникает хаотизация. Поэтому предложенный механизм увеличения степени хаотизации в динамических системах можно использовать в области управления хаосом, которая бурно развивается в последние десятилетия [12]. Другая область, в которой возможно применение предложенного эффекта, связана с решением ряда задач в химическом производстве, использующих хаотическую адвекцию для повышения эффективности химических реакторов [13]. Еще раз подчеркнем, что при многочастотном нестационарном возмущении, механизм действия которого мы предложили, удастся добиться хаотических режимов при амплитудах возмущения существенно ниже критических и при существенно меньших критических частотах, чем при одночастотном воздействии.

## 5. Обсуждение результатов

Первоначально мотивацией для выполнения данной работы было желание понять механизм уширения спектра и хаотизации волн в цепочке нелинейно взаимодействующих молекул, но это привело к важной задаче теории динамических систем, связанной с выявлением механизмов хаотизации траекторий в окрестности эллиптической точки, не связанных с наличием сепаратрисы.

В случае гармонического воздействия на систему частиц, связанных потенциалом Леннарда-Джонса, было обнаружено, что наблюдается хаотическое поведение траекторий. Но это имеет место либо в окрестности экспоненциально узкого хаотического слоя сепаратрис отдельных нелинейных резонансов, либо глобально. В последнем случае для возникновения соответствующего режима требуется достаточно большая амплитуда возмущения и большая, по сравнению с частотой линейных колебаний, частота возмущения. Это означает, что при одночастотном возмущении эффект хаотизации вне окрестности сепаратрисы носит пороговый характер. Во многом это связано с большими расстояниями по частоте, а значит, по переменной действия, между крупными резонансами, возникающими в системе. Выполненный анализ показал, что в рамках модели нелинейного маятника можно качественно оценить расположение и ширины нелинейных резонансов.

Однако на основе одночастотной модели хаотизации нельзя дать ответа для задачи об уширении и хаотизации спектра колебаний частиц при малых возмущениях, поэтому необходимо перейти к многочастотной модели. С точки зрения физики, возмущенный гамильтониан является многочастотным из-за наличия спектра собственных частот в цепочке. В рамках простейшего предположения о независимом генерировании каждой гармоникой двухчастотного возмущения нелинейных резонансов показано, что перекрытие таких резонансов приводит к их разрушению и хаотизации поведения соответствующих траекторий. Указанный эффект при выборе достаточно близких частот уже не имеет порогового характера, по крайней мере, хаотизация наступает при меньших амплитудах возмущения и достаточно низких частотах. Чтобы объяснить уширение и хаотизацию в области окрестности эллиптической точки, необходимо учесть третью гармонику возмущения. Если ее выбрать так, чтобы нелинейные резонансы, порожденные этой гармоникой, оказались в области регулярных барьеров между областями хаотического поведения, порожденными первыми двумя гармониками, то наблюдается разрушение этих барьеров и происходит значительное уширение области хаотического поведения. При этом происходит хаотизация ближайшей окрестности положения равновесия. Значит, малые отклонения частицы от положения равновесия могут приводить к ее диффузии в область достаточно высоких энергий, т. е. уширение спектра при малых возмущениях может быть объяснено конечной шириной спектра линейных колебаний, играющих роль нестационарного возмущения для каждой ячейки молекул, взаимодействующих с помощью нелинейного потенциала.

Многочастотное возмущение предложено использовать для управления областью хаотизации в нелинейных динамических системах, поскольку, выбирая соответствующим образом частоты нестационарного возмущения и количество гармоник, можно создать хаотический режим в выбранной области фазового пространства и управлять эффективностью перемешивания.

Работа выполнена в рамках грантов 09-И-П17-07, 09-И-П4-04 конкурса проектов ДВО РАН, тематика которых соответствует программам фундаментальных исследований Президиума РАН и отделений РАН, грантов ДВО РАН 09-И-СО-07-002, 09-И-СУ-03-002, и частично гранта РФФИ 08-01-00581-а.

## Список литературы

- [1] Заславский Г. М., Сагдеев Р. З. Введение в нелинейную физику: От маятника до турбулентности и хаоса. М.: Наука, 1988. 368 с.
- [2] Rom-Kedar V., Leonard A., Wiggins S. An analytical study of transport, mixing and chaos in an unsteady vortical flow // J. Fluid Mech., 1990, vol. 214, pp. 347–394.
- [3] Treschev D. Width of stochastic layers in near-integrable two-dimensional symplectic maps // Phys. D, 1998, vol. 116, nos. 1–2, pp. 21–43.
- [4] Заславский Г. М. Физика хаоса в гамильтоновых системах. М.–Ижевск: Инст. компьютерн. исслед., 2004. 288 с.
- [5] Пиковский А. С. Генерация хаотических волн в нелинейной цепочке // Письма в ЖЭТФ, 1984, т. 40, вып. 6, с. 217–219.
- [6] Макаров Д. В., Улейский М. Ю. Генерация баллистического транспорта частиц при воздействии слабого переменного возмущения на периодическую гамильтонову систему // Письма в ЖЭТФ, 2006, т. 83, вып. 11, с. 614–617.
- [7] Гузев М. А., Израильский Ю. Г., Шепелов М. А., Пермяков Н. А. Структура и хаос одномерной молекулярной системы // Физика и химия стекла, 2008, т. 34, № 4, с. 518–528.
- [8] Chirikov B. V. A universal instability of many-dimensional oscillator systems // Phys. Rep., 1979, vol. 52, no. 5, pp. 264–379.
- [9] Izrail'skiy Yu. G., Koshel K. V., and Stepanov D. V. Determination of the optimal excitation frequency range in background flows // Chaos, 2008, vol. 18, no. 1, 013107, 9 p.
- [10] Кошель К. В., Пранц С. В. Хаотическая адвекция в океане // УФН, 2006, т. 176, № 11, с. 1177–1206 [Koshel K. V. and Prants S. V. Chaotic advection in the ocean // Physics-Uspekhi, 2006, vol. 49, no. 11, pp. 1151–1178].
- [11] Гудименко А. И. Динамика трех вихрей в возмущенных устойчивых равносторонней и коллинеарной конфигурациях // Нелинейная динамика, 2007, т. 3, № 4, с. 379–391.
- [12] Shinbrot T., Grebogi C., Yorke J. A., and Ott E. Using small perturbations to control chaos // Nature, 1993, vol. 363, pp. 411–417.
- [13] Tang X. Z., Boozer A. H. Design criteria of a chemical reactor based on a chaotic flow // Chaos, 1999, vol. 9, no. 1, pp. 183–194.
- [14] Koshel K. V., Sokolovskiy M. A., and Davies P. A. Chaotic advection and nonlinear resonances in an oceanic flow above submerged obstacle // Fluid Dynam. Res., 2008, vol. 40, pp. 695–736.