ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ. 2012. Том 12. № 2. С. 171–183

УДК 551.465.7
MSC2010 35B38

© М. А. Гузев[1]

Асимптотические формулы для динамических характеристик частицы в окрестности резонанса

Построены асимптотические формулы для переменных действие-угол при малых и больших энергиях частицы в окрестности нелинейного резонанса. Получена оценка погрешности приближения по параметру, связанному с энергией, и вычислены некоторые характеристики эталонного гамильтониана.

Ключевые слова: *нелинейная динамика, потенциал Леннарда — Джонса, асимптотическое поведение.*

Введение

При изучении проблем нелинейной динамики одномерные цепочки частиц были предметом рассмотрения многих исследователей. Хорошо известно [1], что в этих цепочках может возникать детерминированный хаос, дальнейшее исследование которого показало, что поведение цепочек отражает общие черты хаотической динамики, например, возникновение стохастического сепаратрисного слоя, формирование нелинейных резонансов и т.п. Для одномерной системы соответствующая модельная задача сводится к рассмотрению движения частицы массы m в ячейке: слева частица взаимодействует с неподвижной частицей, а справа она взаимодействует с частицей, которая движется по заданному закону $x_2 = \xi(t)$. Взаимодействие между частицами характеризуется потенциалом $U(q)$. Динамика частицы в ячейке определяется гамильтонианом

$$H = H(p, q, t) = \frac{p^2}{2m} + W(q), \quad W(q) = U(q/a) + U((\xi(t) - q)/a), \tag{1}$$

в котором p — импульс частицы, параметр a имеет размерность длины, а вид функции $\xi(t)$ зависит от коллективного поведения частиц системы. Исследование динамики частицы в окрестности нелинейного резонанса выполняется стандартным способом [1]: запишем гамильтониан (1) в переменных действие-угол (I, φ) и выделим в нем резонансную гармонику. Предположим, что $\xi(t) = 2a(1 + \varepsilon(t))$, $\varepsilon(t) = \alpha_1 \cos\omega_1 t$, где $|\alpha_1| \ll 1$, а условие резонанса выполняется для некоторой тройки чисел (n, I_n, ω_1): $n\omega(I_n) = \omega_1$, где $\omega(I_n)$ — частота, соответствующая резонансному действию I_n. Если ввести новую фазу $\Psi = n\varphi + \varphi_0 - \omega_1 t$ и предположить малой, по сравнению с I_n, величину $\Gamma = I - I_n$ (отклонение от значения резонансного действия), то уравнения движения для (Γ, Φ) соответствуют гамильтониану нелинейного маятника $\bar{H}(\Gamma, \Phi)$:

[1]Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, Владивосток, ул. Радио, 7. Электронная почта: guzev@iam.dvo.ru

$$\bar{H}(\Gamma,\Phi) = n\frac{d}{dI}\omega(I_n)\frac{\Gamma^2}{2} - \frac{1}{2}\alpha_1 H_n(I_n)\cos\Phi, \quad H_n = \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi \frac{d}{dq}U(2a - q(I_n,\varphi))\,\cos n\varphi, \quad (2)$$

$$\frac{d}{dt}\Gamma = -\frac{\partial \bar{H}(\Gamma,\Phi)}{\partial \Phi}, \quad \frac{d}{dt}\Phi = \frac{\partial \bar{H}(\Gamma,\Phi)}{\partial \Gamma}.$$

В (2) подразумевается, что функция $q = q(I,\varphi)$ определяется из (3). Параметры $d\omega(I_n)/dI$, $H_n(I)$ этого гамильтониана зависят от выбора потенциала взаимодействия. В данной работе показано, что в асимптотических предельных случаях, соответствующих малым и большим значениям энергии, для потенциала типа Леннарда — Джонса параметры, входящие в гамильтониан $\bar{H}(\Gamma,\Phi)$, вычисляются через локальные характеристики потенциала.

Статья организована следующим образом. В разделе 1 для малых энергий в окрестности эллиптической точки потенциала предлагается использовать полином четвертого порядка в качестве аппроксимации потенциала. Введены приближенные переменные действие-угол (J,ψ), для которых в разделе 2 доказано утверждение о погрешности аппроксимации ими точных переменных (I,φ). При больших энергиях соответствующие утверждения приведены в разделе 3. В качестве приложения полученных формул вычислены коэффициенты Фурье $H_n(I)$.

Некоторые результаты работы были представлены в [2].

1. Выбор эталонного потенциала для малых энергий и переход к приближенным переменным действие-угол

Как известно [1], переход к переменным действие-угол выполняется по формулам

$$I(E) = \frac{1}{\pi}\int_{q_2}^{q_1} p(E,q)dq, \quad \varphi = \omega t, \quad (3)$$

$$t = t(q,q_2) = \int_{q_2}^{q} \frac{dq}{p(E,q)}, \quad p(E,q) = \sqrt{2(E - W(q))}.$$

Величины q_i являются корнями уравнения

$$E = W(q_i) \quad (4)$$

и имеют смысл координат точек поворота частицы в поле потенциала $W(q)$. Первое равенство в (3) определяет $I = I(E)$, тем самым $E = E(I)$, величина $\omega = \partial E/\partial I$ — циклическая частота.

Функция $W(q)$ равна $W(q) = U(q) + U(L-q)$, где $U(q)$ является потенциалом типа Леннарда — Джонса и дается формулой

$$U(q) = U_0 V, V(q/a) = \left[\left(\frac{a}{q}\right)^{\alpha} - \frac{\alpha}{\beta}\left(\frac{a}{q}\right)^{\beta}\right], \quad (5)$$

где U_0 — амплитуда потенциала. В [2] было показано, что $W(q)$ имеет единственную критическую точку $q_0 = L/2$ при условии $L/2 < b$, где b — точка перегиба для потенциала $U(q)$. Будем полагать, что $L = 2a$ и отклонение значения энергии E от значением потенциала в точке $q_0 = a$ является малой величиной, то есть

$$\varepsilon = \left|\frac{H}{W(a)}\right| \ll 1, \quad H \equiv E - W(a) = E - 2U(a). \quad (6)$$

Это позволяет воспользоваться полиномиальной аппроксимацией для $W(q)$ в окрестности точки a, чтобы получить приближенные формулы для переменных действие-угол с некоторой точностью по ε.

Аппроксимация для $W(q)$ строится с использованием формулы Ньютона — Лейбница. С этой целью проинтегрируем в ней по частям несколько раз следующим образом:

$$U(t) = U(a) + \int_a^t dx \frac{dU(x)}{dx} = U(a) - (a-t)\left.\frac{dU(x)}{dx}\right|_{x=a} - \int_a^t dx(x-t)\frac{d^2U(x)}{dx^2}$$

и т. д. Тогда функция $W(q)$ записывается в виде

$$W(q) = 2U(a) + 2\frac{l^2}{2!}U^{(2)}(a) + 2\frac{l^4}{4!}U^{(4)}(a) + l^6R(l), \tag{7}$$

$$R(l) = \frac{2}{6!}U^{(6)}(a) + \frac{l^2}{7!}\int_0^1 dx(x-1)^7[U^{(8)}(a+xl) + U^{(8)}(a-xl)],$$

где $l = a - q$. В физических приложениях параметры α, β обычно удовлетворяют неравенствам

$$\alpha > \beta > 1. \tag{8}$$

Тогда справедливы соотношения

$$|U(a)| = U_0|1-\alpha/\beta| \sim U_0, \quad U^{(2)}(a) = \frac{U_0}{a^2}(\alpha-\beta)\alpha \sim \frac{U_0}{a^2}\alpha^2, \tag{9}$$

$$U^{(4)}(a) = \frac{U_0}{a^4}\alpha[(\alpha+1)(\alpha+2)(\alpha+3) - (\beta+1)(\beta+2)(\beta+3)] \sim \frac{U_0}{a^4}\alpha^4.$$

Пусть $\kappa = |l|/a \ll 1$, тогда в (7) получаем разложение потенциала по степеням малого параметра κ и неравенство (6) заведомо выполняется. Если в (7) оставить квадратичные слагаемые по l, то это соответствует приближению гармонического осциллятора для частицы в потенциале $W(q)$. Для гармонического осциллятора переход к переменным действие-угол хорошо известен и выписывается в элементарных функциях [1]. Однако при такой аппроксимации величина $\partial\omega/\partial I = 0$, что не позволяет провести содержательный анализ условия перекрытия резонансов. Поэтому в качестве аппроксимации для потенциала $W(q)$ следует выбрать полином четвертого порядка $W_{app}(q)$ по l, полагая

$$W_{app}(q) = 2U(a) + 2\frac{l^2}{2!}U^{(2)}(a) + 2\frac{l^4}{4!}U^{(4)}(a).$$

Введем переменные действие-угол (J, ψ):

$$J(E) = \frac{1}{\pi}\int_{Q_1}^{Q_2} p_{app}dq, \quad \psi = \Omega t_{app}, \quad t_{app} = \int_{Q_1}^{q}\frac{dq}{p_{app}}, \tag{10}$$

где функция $p_{app} = \sqrt{2(E - W_{app}(q))}$, а координаты точек Q_i определяются из уравнения

$$E = W_{app}(Q_i). \tag{11}$$

Величина $\Omega = \partial E/\partial J$ — циклическая частота, вычисляемая через действие J.

Справедливо следующее утверждение.

Утверждение 1. *Разность между приближенными переменными действие-угол* (J, ψ) *и точными переменными* (I, φ) *определяется соотношениями*

$$|I(E) - J(E)| \leq \underline{O}(\varepsilon^3), \quad |\varphi - \psi| \leq \underline{O}(\varepsilon). \tag{12}$$

2. Доказательство утверждения 1

При оценке порядков величин технически удобно ввести безразмерные величины, полагая $q \to q/a$, $W(q) \to W(q)/U_0$, $E \to E/U_0$ и $I \to I/\sqrt{U_0}a$. Тогда в этих переменных условие (6) и соотношение (7) записываются в виде

$$H = |E - W_0| \sim \varepsilon \ll 1; \tag{13}$$

$$W(s) = W_{app}(s) + s^6 R(s), \quad s = 1 - q, \tag{14}$$

$$R(s) = \frac{2V^{(6)}(1)}{6!} + \frac{s^2}{7!}\int_0^1 dx(x-1)^7[V^{(8)}(1+xs) + V^{(8)}(1-xs)],$$

$$W_{app}(s) = W_0 + W_2 s^2 + W_4 s^4, \quad W_0 = V(1), \quad W_2 = V^{(2)}(1), \quad W_4 = \frac{V^{(4)}(1)}{12}.$$

При этом выполнение требования (13) обеспечивается при

$$|s| = |1 - q| \sim \varepsilon. \tag{15}$$

Обозначим $T_i = 1 - Q_i$, $t_i = 1 - q_i$. Для потенциала W_{app} величины T_2, T_1 даются формулами

$$T_2 = -\sqrt{(-W_2 + \sqrt{W_2^2 + 4W_4 H})/2W_4} < 0, \quad T_1 = -T_2 > 0. \tag{16}$$

Тогда справедлива следующая лемма.

Лемма. *Координата q_2 расположена левее координаты Q_2, а координата q_1 расположена правее координаты Q_1, то есть $q_2 - Q_2 < 0$, $q_1 - Q_1 > 0$.*

Доказательство. Для доказательства воспользуемся условиями (4), (11): из них следует соотношение $W(q_i) = W_{app}(Q_i)$. Подставляя сюда (14), получим соотношение $W_0 + W_2 T_i^2 + W_4 T_i^4 = W_0 + W_2 t_i^2 + W_4 t_i^4 + t_i^6 R(t_i)$, из которого следует

$$T_i^2 - t_i^2 = \frac{t_i^6 R(t_i)}{[W_2 + W_4(T_i^2 + t_i^2)]}. \tag{17}$$

Величина t_i имеет одинаковый с T_i порядок малости, так как справедливо условие (15). Из-за непрерывности функции $V(t)$ знак $R(t_i)$ определяется знаком $V^{(6)}(1)$. Для потенциала типа Леннарда — Джонса значения $V^{(2)}(1) > 0$, $V^{(4)}(1) > 0$ и

$$W_2 > 0, \quad W_4 > 0. \tag{18}$$

Тогда из (17) получаем

$$T_i^2 - t_i^2 \geq 0. \tag{19}$$

Поскольку величины $T_2 < 0$, $t_2 < 0$, $T_1 > 0$, $t_1 > 0$, то отсюда и из (19) следует неравенство

$$T_1 + t_1 > 0, \quad T_1 - t_1 = q_1 - Q_1 > 0; \quad T_2 + t_2 < 0, \quad T_2 - t_2 = q_2 - Q_2 < 0, \tag{20}$$

что доказывает лемму. □

Используя лемму, запишем разность между точным $I(E)$ и приближенным действиями $J(E)$ в виде

$$I(E) - J(E) = \frac{1}{\pi}\int_{q_1}^{q_2}[p - p_{app}]dq - \frac{1}{\pi}\int_{q_2}^{Q_2} p_{app} dq - \frac{1}{\pi}\int_{Q_1}^{q_1} p_{app} dq. \tag{21}$$

Очевидно, что

$$p-p_{app}=\frac{W_{app}-W}{p+p_{app}}=-\frac{s^6R(s)}{p+p_{app}},\quad p_{app}=\sqrt{2(T_1^2-s^2)[W_2+W_4(T_1^2+s^2)]}. \tag{22}$$

Тогда

$$\left|\int_{q_1}^{q_2}[p-p_{app}]dq\right|\le\int_{t_2}^{t_1}\frac{s^6R(s)}{p_{app}}ds=T_1^6\int_{\alpha_2}^{\alpha_1}\frac{s^6R(T_1s)}{\sqrt{2(1-s^2)[W_2+W_4T_1^2(1+s^2)]}}ds, \tag{23}$$

$$\alpha_1=t_1/T_1,\quad \alpha_2=t_2/T_1.$$

Из (16) следует, что

$$T_1=\sqrt{H/W_2}(1+\underline{O}(\varepsilon))<<1 \tag{24}$$

и $R(T_1s)=2V^6(1)/6!+\underline{O}(\varepsilon)=R(0)+\underline{O}(\varepsilon)$. Условие (20) приводит к следующим неравенствам

$$-1<\alpha_2<0,\qquad 0<\alpha_1<1,$$

которые позволяют переписать (23) в виде

$$\left|\int_{q_1}^{q_2}[p-p_{app}]dq\right|\le\frac{T_1^6}{\sqrt{2W_2}}[R(0)+\underline{O}(\varepsilon)]\int_{-1}^{1}\frac{s^6}{\sqrt{(1-s^2)}}ds=$$

$$=\frac{T_1^6}{\sqrt{2W_2}}\frac{10\pi}{32}[R(0)+\underline{O}(\varepsilon)]\sim H^3=\underline{O}(\varepsilon^3).$$

При оценке оставшихся вкладов в (21) учтем, что

$$|Q_i-q_i|=|T_i-t_i|\sim\left|t_i^5\right|\sim\left|T_i^5\right|\sim H^{5/2}=\underline{O}(\varepsilon^{5/2}),\quad p_{app}\sim\sqrt{H}.$$

Это дает

$$\left|\int_{Q_2}^{q_2}p_{app}dq\right|\sim\left|\int_{q_1}^{Q_1}p_{app}dq\right|\sim\sqrt{H}|Q_i-q_i|\sim H^3\sim\underline{O}(\varepsilon^3).$$

Суммируя результаты вычислений, получаем, что все слагаемые в (21) имеют порядок $\underline{O}(\varepsilon^3)$ и справедливо первое соотношение в (12).

Теперь перейдем к доказательству второго соотношения в (12). Ясно, что $\psi-\varphi=\omega(t_{app}-t)+t_{app}(\Omega-\omega)$. Величины Ω,ω определяются через T_{app} и T по формулам

$$\Omega=\frac{\pi}{T_{app}},\quad \omega=\frac{\pi}{T},\quad T_{app}=\int_{Q_1}^{Q_2}\frac{dq}{p_{app}},\quad T=\int_{q_1}^{q_2}\frac{dq}{p}.$$

Тогда

$$\Omega-\omega=\frac{\pi(T-T_{app})}{TT_{app}},$$

$$T-T_{app}=\delta T(q_1,q_2)-\int_{q_2}^{Q_2}\frac{dq}{p_{app}}-\int_{q_1}^{Q_1}\frac{dq}{p_{app}},\quad \delta T(q_1,q_2)=\int_{q_1}^{q_2}dq\left[\frac{1}{p}-\frac{1}{p_{app}}\right]. \tag{25}$$

Представим

$$\delta T(q_1,q_2)=\delta T(q_1,1)+\delta T(1,q_2)$$

и оценим порядок величины $\delta T(q_1,1)$. Очевидно, что справедливы соотношения

$$\frac{1}{p}-\frac{1}{p_{app}}=\frac{p_{app}^2-p^2}{pp_{app}(p+p_{app})}=\frac{W(q)-W_{app}(q)}{pp_{app}(p+p_{app})}=\frac{2(1-q)^6R(1-q)}{pp_{app}(p+p_{app})}. \tag{26}$$

Поскольку значения $q \sim 1$ (15), то $R(1-q) = R(0) + \underline{O}(\varepsilon) > 0$, $\delta p = p_{app} - p > 0$. Условие (18) позволяет записать неравенство: $p_{app} > \sqrt{2(T_1^2 - (1-q)^2)W_2}$, тогда (26) принимает следующий вид:

$$\frac{1}{p} - \frac{1}{p_{app}} \leq \frac{2(1-q)^6[R(0) + \underline{O}(\varepsilon)]}{pp_{app}^2} \leq \frac{(1-q)^6[R(0) + \underline{O}(\varepsilon)]}{(T_1^2 - (1-q)^2)W_2\sqrt{p_{app}^2 - 2(1-q)^6[R(0) + \underline{O}(\varepsilon)]}} \leq$$

$$\leq \frac{(1-q)^6[R(0) + \underline{O}(\varepsilon)]}{(T_1^2 - (1-q)^2)W_2\sqrt{2(T_1^2 - (1-q)^2)W_2 - 2s^6[R(0) + \underline{O}(\varepsilon)]}}.$$

Отсюда для $\delta T(q_1, 1)$ получаем оценку:

$$\delta T(q_1, 1) \leq \frac{R(0) + \underline{O}(\varepsilon)}{\sqrt{2}W_2} \times \tag{27}$$

$$\times \int_{q_1}^{1} dq \frac{(1-q)^6}{(T_1^2 - (1-q)^2)\sqrt{(T_1^2 - (1-q)^2)W_2 - (1-q)^6[R(0) + \underline{O}(\varepsilon)]}}.$$

Полагая $1 - q = T_1 z$, получаем

$$\delta T(q_1, 1) \leq T_1^4 \frac{R(0) + \underline{O}(\varepsilon)}{\sqrt{2}W_2} \int_0^{\alpha_1} \frac{dz}{(1-z)\sqrt{(1-z)W_2 - T_1^4 z^6 [R(0) + \underline{O}(\varepsilon)]}}.$$

Переходя к переменной $r = (1-z)/\beta_1$, где параметр $\beta_1 = 1 - \alpha_1$, запишем предыдущее неравенство в виде

$$\delta T(q_1, 1) \leq T_1^4 \frac{R(0) + \underline{O}(\varepsilon)}{\sqrt{2}W_2} \frac{1}{\sqrt{\beta_1}} \times \tag{28}$$

$$\times \int_1^{1/\beta_1} \frac{dr}{r\sqrt{r(2 - \beta_1 r)W_2 - T_1^4(1 - \beta_1 r)^6[R(0) + \underline{O}(\varepsilon)]/\beta_1}}.$$

Порядок величины β_1 можно оценить, используя соотношения (13), (17), (24):

$$\beta_1 = \frac{T_1 - t_1}{T_1} = \frac{t_1^6 R(t_1)}{T_1(T_1 + t_1)[W_2 + W_4(T_1^2 + t_1^2)]} = T_1^4 \frac{R(0)}{2W_2}(1 + \underline{O}(T_1^2)) \sim \underline{O}(\varepsilon^2). \tag{29}$$

Из (28), (29) следует, что

$$\delta T(q_1, 1) \leq \frac{T_1^4}{\sqrt{\beta_1}} \frac{R(0) + \underline{O}(\varepsilon)}{\sqrt{2W_2}W_2} \int_1^{1/\beta_1} \frac{dr}{r\sqrt{r(2 - \beta_1 r) - 2(1 - \beta_1 r)^6[1 + \underline{O}(\varepsilon)]}}. \tag{30}$$

При $\beta_1 \to 0$ интеграл сходится к

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \int_1^{\infty} \frac{dr}{r\sqrt{r-1}} = \frac{\pi}{\sqrt{2}}.$$

Подставляя (29) в (30) и используя (13), (24), получаем окончательную оценку для $\delta T(q_1, 1)$:

$$\delta T(q_1, 1) = \int_{q_1}^{1} dq \left[\frac{1}{p} - \frac{1}{p_{app}}\right] \leq T_1^2 \frac{\sqrt{R(0)}(1 + \underline{O}(\varepsilon))}{W_2} \frac{\pi}{\sqrt{2}} = H \frac{\sqrt{R(0)}(1 + \underline{O}(\varepsilon))}{W_2^2} \frac{\pi}{\sqrt{2}} \sim \varepsilon. \tag{31}$$

Поступая аналогично тому, как это было сделано для $\delta T(q_1, 1)$, нетрудно показать, что оценка (31) справедлива и для $\delta T(1, q_2)$:

$$\delta T(1, q_2) = \int_1^{q_2} dq \left[\frac{1}{p} - \frac{1}{p_{app}}\right] \leq \underline{O}(\varepsilon).$$

Порядок по ε оставшихся интегралов в (25) легко вычислить

$$\int_{Q_1}^{q_1} \frac{dq}{p_{app}} < \int_{Q_1}^{q_1} \frac{dq}{\sqrt{2(T_1^2 - (1-q)^2)}} = \tag{32}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \arcsin \frac{(T_1 - t_1)(1 - T_1 t_1)}{T_1\sqrt{1-t_1^2} + t_1\sqrt{1-T_1^2}} \sim \frac{T_1 - t_1}{T_1 + t_1} \sim \beta_1 \sim \underline{O}(H^2) \sim \underline{O}(\varepsilon^2).$$

(использовано соотношение (29)). Аналогично (32), нетрудно оценить интеграл

$$\int_{q_2}^{Q_2} \frac{dq}{p_{app}} < \underline{O}(H^2) \sim \underline{O}(\varepsilon^2). \tag{33}$$

Обобщая результаты вычислений, получаем, что $\Omega - \omega \sim T - T_{app} \sim \underline{O}(\varepsilon)$. Поскольку справедливо неравенство $t - t_{app} \leq T - T_{app}$, то $t - t_{app} \sim \underline{O}(\varepsilon)$. В итоге разность между точной и приближенной фазой равна $|\varphi - \psi| \leq \underline{O}(\varepsilon)$, что окончательно доказывает второе соотношение в (12).

3. Переход к переменным действие-угол для больших энергий

Большие значения энергии E соответствуют выполнению неравенства $E/U_0 \gg 1$. В безразмерных переменных потенциал $W(q)$ записывается в виде

$$W(q) = \left(\frac{1}{q}\right)^{\alpha} - \frac{\alpha}{\beta}\left(\frac{1}{q}\right)^{\beta} + \left(\frac{1}{2-q}\right)^{\alpha} - \frac{\alpha}{\beta}\left(\frac{1}{2-q}\right)^{\beta}. \tag{34}$$

Поскольку потенциал симметричен относительно единицы, то достаточно рассмотреть его на интервале $[0, 1]$. Ясно, что для больших значений энергии E координата левой точки поворота $q_1 << 1$, тогда в окрестности этой точки ведущий вклад в (34) определяется первым слагаемым и для потенциала $W(q)$ можно записать следующее приближенное выражение

$$W_{big}(q) = \frac{1}{q^{\alpha}}, \quad q \in [0, 1]; \quad W_{big}(q) = \frac{1}{(2-q)^{\alpha}}, \quad q \in [1, 2]. \tag{35}$$

Используя симметрию потенциала $W_{big}(q)$, введем переменные действие-угол (J_{big}, ϕ) следующим образом:

$$J_{big} = \frac{2}{\pi}\int_{Q_1}^{1} p_{big}dq, \quad \phi = \Omega_{big}t_{big}, \quad \Omega_{big} = \partial E/\partial J_{big}, \quad t_{big} = \int_{Q_1}^{q} \frac{dq}{p_{big}}, \tag{36}$$

где функция $p_{big} = \sqrt{2(E - W_{big}(q))}$, а координата левой точки поворота Q_1 для потенциала $W_{big}(q)$ определяется из уравнения

$$W_{big}(Q_1) = E, \quad Q_1 = \frac{1}{E^{1/\alpha}}. \tag{37}$$

Координата правой точки поворота $Q_2 = 2 - Q_1$, величина Ω_{big} — циклическая частота, вычисляемая через действие J_{big}.

Справедливо следующее утверждение.

Утверждение 2. *Разность между приближенными переменными действие-угол J_{big}, ϕ и точными переменными I, φ определяется соотношениями*

$$|J_{big} - I| \leq \underline{O}\left(\frac{1}{E^{1/2+(1-\beta)/\alpha}}\right), |\varphi - \phi| \leq \underline{O}\left(\frac{1}{\sqrt{E^{1+(2-\beta)/\alpha}}}\right). \tag{38}$$

Доказательство. При доказательстве воспользуемся следующей леммой.

Лемма. *Координата q_1 расположена левее координаты Q_1, то есть*

$$\delta q = Q_1 - q_1 > 0. \tag{39}$$

Доказательство. Подставим (34) в (4) и учтем (35), (37). Тогда получаем следующее соотношение

$$\frac{(Q_1-\delta q)^\alpha - Q_1^\alpha}{Q_1^\alpha (Q_1-\delta q)^\alpha} = -\frac{\alpha}{\beta}\frac{1}{(Q_1-\delta q)^\beta} + \left(\frac{1}{2-Q_1+\delta q}\right)^\alpha - \frac{\alpha}{\beta}\left(\frac{1}{2-Q_1+\delta q}\right)^\beta.$$

Отсюда и из (37) следует приближенная формула для δq

$$\delta q = \frac{1}{\beta} Q_1^{\alpha-\beta+1}[1+\bar{O}(1)] = \frac{1}{\beta E^{1+(1-\beta)/\alpha}}[1+\bar{O}(1)] > 0, \tag{40}$$

что доказывает лемму. □

Рассмотрим разность между I и J_{big}:

$$\delta I = I - J_{big} = \delta I_1 + \delta I_2, \quad \delta I_1 = \frac{2}{\pi}\int_{q_1}^{Q_1} p dq, \quad \delta I_2 = \frac{2}{\pi}\int_{Q_1}^{1}[p-p_{big}]dq. \tag{41}$$

Используя (39),(40), получаем для δI_1:

$$\delta I_1 \sim (Q_1 - q_1)\sqrt{E} \sim \frac{1}{E^{1/2+(1-\beta)/\alpha}}. \tag{42}$$

Поскольку $p > p_{big}$ и $q < 1$, то

$$p - p_{big} = \frac{p^2 - p_{big}^2}{p + p_{big}} = \frac{2(W_{big} - W)}{p + p_{big}} \le \frac{W_{big} - W}{p_{big}} < \frac{2\alpha}{\beta}\frac{1}{p_{big} q^\beta}.$$

Тогда

$$\delta I_2 \le \frac{2\alpha}{\beta}\int_{Q_1}^{1} dq \frac{1}{p_{big} q^\beta} = \tag{43}$$

$$= \frac{2\alpha}{\beta}\int_{Q_1}^{1} dq \frac{1}{q^\beta\sqrt{2(E-1/q^\alpha)}} = \frac{2\alpha}{\beta}\frac{E^{\beta/\alpha}}{E^{1/\alpha}\sqrt{2E}}\int_{1/E^{1/\alpha}}^{1} dt \frac{t^{\beta-2}}{\sqrt{1-t^\alpha}}.$$

Интеграл сходится при $E \to \infty$, тогда перейдем в нем к пределу

$$\int_1^0 dt \frac{t^{\beta-2}}{\sqrt{1-t^\alpha}} = \frac{1}{\alpha}B(1+(\beta-2)/\alpha, 1/2)[1+\bar{O}(1)],$$

где $B(x,y)$ — бета-функция (эйлеров интеграл 1-го рода). Суммируя результаты вычислений, получаем, что

$$\delta I \sim \frac{1}{E^{1/2+(1-\beta)/\alpha}}.$$

Отсюда и из (41), (42) следует, что первое соотношение в (38) доказано.

Разность между фазами φ и ϕ запишем в виде

$$\varphi - \phi = (\omega - \Omega_{big})t_{big} + \omega(t - t_{big}), \quad \omega - \Omega_{big} = \frac{\pi(T_{big} - T)}{T T_{big}}, \tag{44}$$

$$T_{big} - T = 2\delta T(Q_1, 1) - \int_{q_1}^{Q_1} \frac{dq}{p} - \int_{Q_2}^{q_2} \frac{dq}{p}, \quad \delta T(Q_1, 1) = \int_{Q_1}^{1} dq \left[\frac{1}{p_{big}} - \frac{1}{p}\right]. \tag{45}$$

Рассмотрим величину $\delta T(Q_1, 1)$ и, используя (34), запишем ее в виде

$$\delta T(Q_1, 1) = \int_{Q_1}^{1} dq \frac{2(W_{big} - W)}{pp_{big}(p + p_{big})} = 2 \int_{Q_1}^{1} dq \frac{\frac{\alpha}{\beta}\left(\frac{1}{q}\right)^{\beta} + \Pi}{pp_{big}(p + p_{big})},$$

$$\Pi = -\left(\frac{1}{2-q}\right)^{\alpha} + \frac{\alpha}{\beta}\left(\frac{1}{2-q}\right)^{\beta}. \tag{46}$$

Поскольку $0 < q < 1$, то $|\Pi| < \alpha/\beta$ и

$$\delta T(Q_1, 1) \leq \frac{2\alpha}{\beta} \int_{Q_1}^{1} dq \frac{(1/q)^{\beta} + 1}{p^2 p_{big}}. \tag{47}$$

Введем переменную $r = q^{\alpha}E - 1$, тогда

$$p_{big} = \sqrt{2E}\sqrt{\frac{r}{1+r}}, p \equiv \sqrt{p_{big}^2 + 2(W_{big} - W)} = \tag{48}$$

$$= \sqrt{2E}\sqrt{\frac{r}{1+r} + \frac{\alpha}{\beta(1+r)^{\beta/\alpha}}\frac{1}{E^{1-\beta/\alpha}} + \frac{\Pi}{E}}.$$

Подставляя (48) в (47) и переходя к пределу $E \to \infty$ в интеграле, получаем

$$\delta T(Q_1, 1) \leq \frac{E^{(\beta-1)/\alpha - 3/2}}{\beta\sqrt{2}}[1 + \bar{O}(1)] \int_0^{\infty} \frac{dr(1+r)^{(1-\beta)/\alpha - 1/2}}{\sqrt{r}\left(r + \delta(1+r)^{1-\beta/\alpha}\right)}, \tag{49}$$

где $\delta = \alpha/(\beta E^{1-\beta/\alpha})$. Полагая $r = \sqrt{\delta}z$, имеем

$$\int_0^{\infty} \frac{dr(1+r)^{(1-\beta)/\alpha - 1/2}}{\sqrt{r}\left(r + \delta(1+r)^{1-\beta/\alpha}\right)} = \frac{2}{\sqrt{\delta}} \int_0^{\infty} \frac{dz(1+\sqrt{\delta}r)^{(1-\beta)/\alpha - 1/2}}{\left(z^2 + (1+\delta z)^{1-\beta/\alpha}\right)} \to \frac{2}{\sqrt{\delta}} \int_0^{\infty} \frac{dz}{(z^2+1)} = \frac{\pi}{\sqrt{\delta}}$$

при $\delta \to 0$. Отсюда и из (49) следует

$$\delta T(Q_1, 1) \leq \frac{\pi}{2\sqrt{\alpha\beta}E^{1+(2-\beta)/2\alpha}}[1 + \bar{O}(1)]. \tag{50}$$

Рассмотрим оставшиеся интегралы в (45). Используя (48), запишем

$$\int_{q_1}^{Q_1} \frac{dq}{p} = \frac{1}{E^{1/\alpha}\alpha\sqrt{2E}} \int_{r_1}^{0} dr(1+r)^{1/\alpha - 1} \Big/ \sqrt{\frac{r}{1+r} + \frac{2\alpha}{\beta(1+r)^{\beta/\alpha}}\frac{1}{E^{1-\beta/\alpha}} + \frac{2\Pi}{E}}, \tag{51}$$

где $r_1 = (q_1/Q_1)^{\alpha} - 1$. Отсюда и из (39), (40) следует, что

$$r_1 = -\frac{\alpha}{\beta E^{1-\beta/\alpha}}[1 + \bar{O}(1)] < 0, \quad |r_1| \ll 1. \tag{52}$$

Полагая $r = |r_1|z$ в (51) и переходя к пределу $|r_1| \to 0$, получаем

$$\int_{r_1}^{0} dr(1+r)^{1/\alpha - 1} \Big/ \sqrt{\frac{r}{1+r} + \frac{2\alpha}{\beta(1+r)^{\beta/\alpha}}\frac{1}{E^{1-\beta/\alpha}} + \frac{2\Pi}{E}} = \sqrt{|r_1|}[1 + \bar{O}(1)] \times \tag{53}$$

$$\times \int_{-1}^{0} \frac{dz}{\sqrt{z+1}} = \frac{\sqrt{|r_1|}}{2}[1+\bar{O}(1)].$$

Тогда из (51)–(53) имеем следующую оценку:

$$\int_{q_1}^{Q_1} \frac{dq}{p} \sim \frac{1}{E^{1+(2-\beta)/2\alpha}}. \tag{54}$$

Нетрудно показать, что

$$\int_{Q_2}^{q_2} \frac{dq}{p_{app}} \sim \frac{1}{E^{1+(2-\beta)/2\alpha}}. \tag{55}$$

Использование (50), (54), (55) в (45) дает следующую оценку

$$T_{big} - T \sim \frac{1}{E^{1+(2-\beta)/2\alpha}}. \tag{56}$$

Поскольку $t_{big} < T_{big}$, а для больших энергий величина $T_{big} \sim 1/\Omega_{big} \sim 1/\sqrt{E}$ (66), учитывая (44), имеем

$$(\omega - \Omega_{big})t_{big} \sim \frac{T_{big} - T}{T_{big}} \sim \frac{1}{\sqrt{E^{1+(2-\beta)/\alpha}}}. \tag{57}$$

Рассмотрим $(t - t_{big})$. Поскольку $|t - t_{big}| \sim |T_{big} - T|$, то

$$\omega|t - t_{big}| \sim \Omega_{big}|T - T_{big}| \sim 1/\sqrt{E^{1+(2-\beta)/\alpha}},$$

что соответствует оценке (57).

Приведем точные выражения для величин $\Omega_{big}, t_{big}(q)$ (36). Для фазы ϕ справедлива формула

$$\phi = \Omega_{big} t_{big}(q), \quad \Omega_{big} = \frac{\pi}{2t_{big}(1)}, \quad t_{big}(q) = \int_{Q_1}^{q} dx \frac{1}{\sqrt{2(E - 1/x^{\alpha})}}.$$

Выполним замену переменной в интеграле, полагая $x = Q_1/t$, в результате получим

$$t_{big}(q) = \frac{Q_1^{1+\alpha/2}}{\sqrt{2}} \left[\int_{Q_1/q}^{1} dt \frac{t^{\alpha-2}}{(1+\sqrt{1-t^{\alpha}})\sqrt{1-t^{\alpha}}} - 1 + \frac{q}{Q_1} \right]. \tag{58}$$

Учитывая условие $Q_1/q < 1$, запишем

$$\frac{1}{(1+\sqrt{1-t^{\alpha}})} = \sum_{n=0}^{\propto} (-1)^n (1-t^{\alpha})^{\frac{n}{2}}.$$

Подставим это выражение в (58) и перейдем к переменной $r = t^{\alpha}$, тогда

$$t_{big}(q) = \frac{Q_1^{1+\alpha/2}}{\sqrt{2}} \left[\sum_{n=0}^{\propto} (-1)^n \frac{1}{\alpha} \left(\int_0^1 dr r^{\frac{1}{\alpha}} (1-r)^{\frac{n-1}{2}} - \int_0^{Q_1/q} dt r^{\frac{1}{\alpha}} (1-r)^{\frac{n-1}{2}} \right) - 1 + \frac{q}{Q_1} \right].$$

Первый интеграл совпадает с полной бета-функцией $B(1 + 1/\alpha, 1 + (n-1)/2)$, а второй интеграл равен неполной бета-функции $B_{(Q_1/q)^{\alpha}}(1 + 1/\alpha, 1 + (n-1)/2)$, поскольку

$$B_z(x, y) = \int_0^z dt t^{x-1} \, (1-t)^{y-1}, \quad B(x, y) = B_1(x, y).$$

Это позволяет в окончательном виде записать

$$t_{big}(q) = \frac{Q_1^{1+\alpha/2}}{\sqrt{2}} \times$$
$$\times \left[\frac{1}{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left(B\left(1+1/\alpha, 1+\frac{n-1}{2}\right) - B_{(Q_1/q)^\alpha}\left(1+1/\alpha, 1+\frac{n-1}{2}\right)\right) - 1 + \frac{q}{Q_1}\right].$$

Следовательно,

$$\Omega_{big} = \frac{\pi Q_1^{-(1+\alpha/2)}}{\sqrt{2}\left[\frac{1}{\alpha}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\left(B\left(1+1/\alpha, 1+\frac{(n-1)}{2}\right) - B_{Q_1^\alpha}\left(1+1/\alpha, 1+\frac{(n-1)}{2}\right)\right) - 1 + \frac{1}{Q_1}\right]}. \quad (59)$$

□

4. Асимптотические формулы для коэффициентов Фурье

В безразмерных переменных при малых энергиях коэффициент Фурье H_n вычисляется через одночастичный потенциал $V(q)$ по формуле, аналогичной (2):

$$H_n = \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi V^{(1)}(2-q)\cos n\varphi, \quad (60)$$

где функция $q = q(I,\varphi)$ определяется из (3). При малых энергиях невязка при замене $q(J,\psi)$ на $q(I,\varphi)$, в силу справедливости (12), не превосходит $\underline{O}(H)$. Фаза ψ (10) и величина s (14) определяются из соотношений

$$\psi = \frac{\pi}{2}\frac{F(\Phi,k)}{K(k)}, \quad F(\Phi,k) = \int_0^\Phi \frac{d\alpha}{\sqrt{1-k^2\sin^2\alpha}}, \quad s = T_1\cos\Phi,$$

где $F(\Phi,k)$ — эллиптический интеграл 1 рода. Поскольку $k^2 \sim H \ll 1$, то

$$F(\Phi,k) = \Phi + \underline{O}(H), \quad K(k) = \frac{\pi}{2} + \underline{O}(H).$$

Это дает $\psi = \Phi + \underline{O}(H)$, тогда отсюда и из (12) следует, что $\Phi = \varphi + \underline{O}(H)$ и

$$s = T_1\cos(\varphi + \underline{O}(H)). \quad (61)$$

При малых энергиях справедлива формула для $V^{(1)}(2-q)$:

$$V^{(1)}(2-q) = V^{(2)}(1)s + V^{(3)}(1)s^2 + \underline{O}(s^3). \quad (62)$$

Комбинируя (60)–(62), получаем следующее представление для H_1, H_2 в ведущем порядке по H :

$$H_1 = \sqrt{HV^{(2)}(1)}, \quad H_2 = H\frac{V^{(3)}(1)}{4V^{(2)}(1)}.$$

Рассмотрим коэффициент Фурье H_n (60) при больших энергиях. Подставим сюда выражение (5) для $V(q)$ и перейдем в (60) к переменным (J_{big},ϕ) (36), тогда

$$H_n = \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} d\phi V^{(1)}(2 - q(J_{big},\phi))\cos n\phi =$$

$$= -\frac{2\alpha\Omega_{big}}{\pi}\int_{Q_1}^{Q_2} dq\frac{\cos n\phi(q)}{\sqrt{2(E-W_{big}(q))}}\left[\left(\frac{1}{2-q}\right)^{\alpha} - \left(\frac{1}{2-q}\right)^{\beta}\right].$$

Учитывая соотношение $Q_2 + Q_1 = 2$ и полагая $2 - q = Q_1 z$, имеем

$$H_n = -\frac{2\alpha\Omega_{big}}{\pi Q_1^{\alpha}} J_{lead}, \tag{63}$$

$$J_{lead} = \int_1^{2/Q_1-1} dq\frac{\cos n\phi(2-Q_1 z)}{z^{\alpha}\sqrt{2(E-W_{big}(2-Q_1 z))}}\left[1 - Q_1^{\alpha-\beta}\left(\frac{1}{z}\right)^{\beta-\alpha}\right].$$

При вычислении в ведущем порядке по $Q_1 \to 0$ величины J_{lead} можно заменить $\cos n\phi(2-Q_1 z) \to \cos n\phi(2) = \cos n\pi = (-1)^n$ и пренебречь вторым слагаемым в квадратных скобках, тогда

$$J_{lead} = [(-1)^n + \bar{O}(1)]\int_1^{2/Q_1-1} dz\frac{1}{z^{\alpha}\sqrt{2(E-W_{big}(2-Q_1 z))}}.$$

Используя явный вид потенциала $W_{big}(q)$ (35) и условие (37), получаем при $Q_1 \to 0$ следующее выражение:

$$J_{lead} = [(-1)^n + \bar{O}(1)]\int_1^{2/Q_1-1} dz\frac{1}{z^{\alpha}\sqrt{2[E-1/(Q_1 z)^{\alpha}]}} \to \tag{64}$$

$$\to \frac{[(-1)^n + \bar{O}(1)]}{\sqrt{2E}}\int_1^{\infty} dz\frac{1}{z^{\alpha}\sqrt{1-1/z^{\alpha}}}.$$

Поскольку

$$\int_1^{\infty} dz\frac{1}{z^{\alpha}\sqrt{1-1/z^{\alpha}}} = \int_0^1 dt\frac{t^{\alpha-2}}{\sqrt{1-t^{\alpha}}} = \frac{1}{\alpha}B(2-2/\alpha, 1/2),$$

то в результате из (37), (63), (64) следует, что

$$H_n = -\frac{2\Omega_{big}}{\pi Q_1^{\alpha}\sqrt{2E}}B(2-2/\alpha, 1/2)[1+\bar{O}(1)]. \tag{65}$$

Формулу для частоты Ω_{big} получаем из (59):

$$\Omega_{big} = \frac{\pi Q_1^{-\alpha/2}}{\sqrt{2}}[1+\bar{O}(1)] = \pi\sqrt{\frac{E}{2}}[1+\bar{O}(1)]. \tag{66}$$

В итоге формула (65) записывается в виде

$$H_n = -\frac{1}{Q_1^{\alpha}}B(2-2/\alpha, 1/2)[1+\bar{O}(1)] = -EB(2-2/\alpha, 1/2)[1+\bar{O}(1)].$$

Если параметр $\alpha \ll 1$, что часто выполняется при решении физических задач, то $B(2-2/\alpha, 1/2) \approx B(2, 1/2) = \Gamma(4)\Gamma(1/2)/\Gamma(2+1/2) = 4/3$, где $\Gamma(z)$ — гамма-функция.

5. Обсуждение результатов

Первоначально мотивацией для выполнения данной работы было желание вычислить параметры гамильтониана нелинейного маятника, характеризующего поведение частицы в окрестности резонанса. Но это привело к важной задаче теории молекулярной динамики, связанной с построением потенциалов, имеющих более простую структуру, чем потенциал типа Леннарда — Джонса, но определяющего динамику, близкую к исходной. При малых энергиях выявлено, что необходимо знать четные производные последнего в эллиптической точке вплоть до четвертого порядка включительно. При больших энергиях подходящей аппроксимацией для потенциала является его сингулярная часть, выделяемая в окрестности точки поворота. Результаты выполненного анализа можно использовать для оценки критерия В. Б. Чирикова [3]. Этот критерий характеризует степень перекрытия резонансов и его численное исследование для рассмотренной в статье задачи было выполнено в [4]. В частности, для резонанса 2:1, что соответствует учету коэффициенту Фурье H_2, численно было показано, что формулы для критерия при малых значениях энергии можно использовать для качественной оценки его поведения и в области конечных энергий.

Автор благодарен К. В. Кошелю за обсуждение вопросов по хаотической динамике.

Список литературы

[1] Г. М. Заславский, Р. З. Сагдеев, *Введение в нелинейную физику: От маятника до турбулентности и хаоса*, Наука, М., 1988, 368 с.

[2] М. А. Гузев, “Асимптотическое поведение переменных «действие-угол» для одномерной молекулярной динамики”, *Торическая топология и автоморфные функции: тезисы докладов Международной конференции* (Хабаровск, 5–10 сентября 2011 г.), ред. В. М. Бухштабер, В. А. Быковский, Изд-во Тихоокеан. гос. ун-та, Хабаровск, 2011, 140–141.

[3] B. V. Chirikov, “A universal instability of many-dimensional oscillator systems”, *Phys. Rep.*, **52**:5 (1979), 264–379.

[4] М. А. Гузев, К. В. Кошель, Ю. Г. Израильский, “Эффект глобальной хаотизации в цепочке частиц”, *Нелинейная Динамика*, **6**:2 (2010), 291–305.

Представлено в Дальневосточный математический журнал 6 июля 2012 г.

Работа выполнена частично при поддержке гранта РФФИ №11-01-12057-офи-м.

Guzev M. A. Asymptotic Formulae for Dynamic Characteristics of a Particle in the Vicinity of Resonance. Far Eastern Mathematical Journal. 2012. V. 12. № 2. P. 171–183.

ABSTRACT

Asymptotic formulae for the action-angle variables are constructed for low and high-energy particles in the vicinity of a nonlinear resonance. Estimation of the approximation accuracy with respect to the energy parameter and some characteristics of the model Hamiltonian are obtained.

Key words: *nonlinear dynamics, nonlinear resonance, Lennard — Jones potential, asymptotic behavior.*