

УДК 681.324

РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ. 2. СИСТЕМА ДВУМЕРНЫХ ТЕСТОВ

В. Е. Шемарулин, В. Н. Софронов, К. С. Мокина
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Дается описание системы тестов, сформированной авторами для верификации кодов, разработанных для решения задач молекулярной динамики. Данная система тестов представлена списком точных решений для хорошо известных, за одним исключением, потенциалов взаимодействия. Рассматривается проблема устойчивости систем с большим числом частиц. Эта проблема является весьма актуальной для кластерной динамики, но в общей постановке в настоящее время остается открытой.

Ключевые слова: молекулярная динамика, потенциал Ньютона, классический и модифицированный потенциалы Морзе, потенциал Леннарда—Джонса, задача многих тел, аналитические решения двумерных задач о движении систем материальных точек, коллинеарные решения Эйлера, *треугольные* решения Лагранжа, точки либрации и проблема их устойчивости, условие Раусса.

Введение

В настоящее время тестирование стало неотъемлемой частью разработки новых методик и комплексов программ. Очевидно, что для систематической верификации методик создаваемые системы тестов должны удовлетворять заранее сформулированным требованиям, которые диктуются особенностями используемых в этих методиках математических моделей. Общие принципы формирования систем тестов были разработаны в РФЯЦ-ВНИИЭФ применительно к кодам, ориентированным на решение задач газовой динамики и теплопроводности [1–3].

В качестве тестовых естественно выбирать задачи, обладающие свойствами, сходными со свойствами наиболее типичных задач, встречающихся в практике расчетов, и по возможности имеющие аналитические решения. Набор тестовых задач должен быть достаточно полным, чтобы их расчет позволял сделать заключение о таких важных свойствах методики, как

- консервативность;
- точность, устойчивость;
- сохранение свойств симметрии решения, в частности, одномерности и двумерности;
- безаварийность, экономичность.

Настоящая статья посвящена описанию сформированной авторами системы тестов для методик и программ, разработанных для решения задач молекулярной динамики. Данная система тестов предназначена для проверки устойчивости, точности и консервативных свойств разностных схем и представлена списком точных решений для потенциалов Ньютона, Морзе, модифицированного потенциала Морзе и потенциала Леннарда—Джонса. Ключевые тесты построены на основе решений Эйлера и Лагранжа для потенциала Ньютона. В соответствии с вышеизложенными принципами наряду с двумерными решениями представлены точные решения ряда одномерных задач.

1. Задачи о движении тел в поле сил потенциала Ньютона

В этом разделе приводятся двумерные тесты, представляющие собой решения задачи нескольких тел. Данная задача состоит в описании движения материальных точек под действием сил взаимного притяжения. Взаимодействие описывается потенциалом Ньютона.

1.1. О задаче одного тела. Задача о движении материальной точки в центральном поле (задача одного тела) легко интегрируется элементарными средствами [4, 5].

Всякое центральное поле потенциально, а его потенциальная энергия зависит только от расстояния r до центра: $U = U(r)$. Орбита точки, движущейся в центральном поле сил, является плоской, и имеет место закон сохранения кинетического момента относительно притягивающего центра. Все орбиты закручиваются вокруг центра.

Уравнение любой траектории материальной точки с массой m в полярных координатах имеет следующий вид:

$$\varphi = \int \frac{M dr}{r^2 \sqrt{2m(E - V(r))}}, \quad (1)$$

где M и E — постоянные, определяемые начальными условиями; M — кинетический момент относительно центра; E — полная энергия; $V(r)$ — эффективный потенциал, $V(r) = U(r) + \frac{M^2}{2mr^2}$, $U(r)$ — исходный потенциал центрального поля. Зависимость r от t определяется квадратурой

$$\int dt = \int \frac{dr}{\sqrt{\frac{2}{m}(E - V(r))}}.$$

Для кеплеровой задачи, т. е. в случае потенциала Ньютона $U = -k/r$, общая формула (1) для уравнения траектории приводится к виду обычного фокального уравнения конического сечения

$$r = r(\varphi) = \frac{p}{1 + e \cos \varphi}, \quad p = \frac{M^2}{mk}, \quad e = \sqrt{1 + \frac{2EM^2}{mk^2}},$$

где p — фокальный параметр кривой; e — эксцентриситет ($0 < e < 1$ для эллипса; $e = 1$ для параболы; $e > 1$ для гиперболы). Таким образом, траекториями движения частицы являются кривые второго порядка. Константы m , M и E однозначно определяют орбиту частицы. Характер орбиты определяется знаком полной энергии:

- при $E < 0$ — эллиптическая орбита;
- при $E = 0$ — параболическая орбита;
- при $E > 0$ — гиперболическая орбита.

Следует отметить замечательное свойство ньютонова потенциала, подчеркивающее его исключительность. В [4] можно найти доказательство следующего утверждения: *все ограниченные орбиты в центральном поле замкнуты только в двух случаях:*

$$U = \alpha r^2, \quad U = -\alpha r^{-1}, \quad \alpha = \text{const} \geq 0.$$

1.2. Задача двух тел. Решение задачи двух тел (материальных точек) 1 и 2 с массами m_1 и m_2 легко сводится к решению задачи одного тела (для того же потенциала) с приведенной массой m — половиной гармонического среднего масс m_1 и m_2 [4, 5]: $\frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$.

Уравнения движения точек 1 и 2 имеют вид

$$\vec{r}_1(t) = \vec{r}_c(t) - \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{r}; \quad \vec{r}_2(t) = \vec{r}_c(t) + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{r},$$

где \vec{r}_c — радиус-вектор центра масс; $\vec{r} = \vec{r}(t)$ — решение задачи о движении массы m ; \vec{r}_1 и \vec{r}_2 — радиусы-векторы первой и второй точек, $\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$.

Для ньютонова потенциала в барицентрическом случае, когда начало системы координат находится в центре масс, орбитами точек являются подобные конические сечения с фокусами в начале координат.

1.3. Задача трех тел. Задача трех тел, несмотря на более чем 200-летние усилия многих выдающихся аналитиков, не решена до сих пор.

В течение первых 150 лет усилия были направлены в сторону формального интегрирования уравнений движения ([6], с. 432). Невозможность построения общего решения задачи трех тел в этом традиционном *элементарном* смысле оказалась связанной с тем, что, как было доказано в конце 19-го века Г. Брунсом и А. Пуанкаре, ее общее решение нельзя выразить через алгебраические или однозначные трансцендентные функции координат и скоростей тел [7]. В частности, теорема Брунса (1888 г.) утверждает ([8], с. 42), что задача трех тел не имеет ни одного алгебраического интеграла, не зависящего от десяти классических интегралов — движения центра инерции, импульса, момента импульса и энергии.

После этого естественным образом стала актуальной задача о представлении решения проблемы трех тел в виде степенных рядов по переменной t . Эта задача была решена финским математиком К. Зундманом в 1912 г. Однако в 1933 г. вопрос о практической значимости рядов Зундмана был решен в отрицательном смысле французским ученым Д. Белорицким. Выяснилось, что решение Зундмана представляет лишь математический интерес и не может быть использовано для исследования вопросов практической астрономии. Слабая пригодность всеобъемлющих формул Зундмана для решения конкретных задач выражается в крайне медленной сходимости полученных рядов ([6], с. 437; [7]).

Несмотря на то, что общее решение задачи трех тел до сих пор получить не удалось, уже более двухсот лет хорошо известны два класса ее точных частных решений — конфигурации Эйлера и Лагранжа (см., например, [6, 7, 9]). В движениях каждого из этих классов точки взаимно притягиваются по закону Ньютона и движутся по подобным кеплеровым траекториям. В движениях Эйлера три точки все время находятся на одной прямой, равномерно вращающейся в фиксированной плоскости вокруг центра масс, в общем случае расстояния между точками изменяются со временем. В движениях Лагранжа три точки все время находятся в вершинах равностороннего треугольника. Треугольник равномерно вращается в фиксированной плоскости вокруг центра масс. В общем случае длина стороны треугольника изменяется со временем.

1.3.1. Коллинеарные движения Эйлера. Рассмотрим систему трех материальных точек, расположенных на одной прямой. Предполагается, что центр масс G совпадает с началом координат. Пусть точки 1, 2, 3 имеют массы m_1, m_2, m_3 и абсциссы точек в начальный момент времени $t = 0$ принимают значения

$$r_1 = x_1 < r_2 = x_2 < r_3 = x_3.$$

Обозначив угловую скорость вращения через ω , запишем условия равенства центробежных сил и сил притяжения, действующих на каждую точку, в полярной системе координат (γ — гравитационная постоянная):

$$\omega^2 r_1 = -\frac{\gamma m_2}{(r_2 - r_1)^2} - \frac{\gamma m_3}{(r_3 - r_1)^2}; \quad \omega^2 r_2 = -\frac{\gamma m_3}{(r_3 - r_2)^2} + \frac{\gamma m_1}{(r_2 - r_1)^2}; \quad \omega^2 r_3 = \frac{\gamma m_1}{(r_3 - r_1)^2} + \frac{\gamma m_2}{(r_3 - r_2)^2}. \quad (2)$$

Положим $R_1 = r_3 - r_2$; $R_2 = r_3 - r_1$; $R_3 = r_2 - r_1$; $\kappa = \frac{r_3 - r_2}{r_2 - r_1}$. Тогда в силу (2) получаем уравнение пятой степени для κ :

$$(m_1 + m_2) \kappa^5 + (3m_1 + 2m_2) \kappa^4 + (3m_1 + m_2) \kappa^3 - (m_2 + 3m_3) \kappa^2 - (2m_2 + 3m_3) \kappa - (m_2 + m_3) = 0. \quad (3)$$

В последовательности коэффициентов этого уравнения есть только одна переменная знака. Поэтому согласно теореме Декарта данное уравнение имеет единственный положительный корень [10]. При

заданных массах тел решение уравнений (2) однозначно определяется одним параметром, например R_3 (κ — положительный корень уравнения (3)):

$$r_1 = -\frac{m_2 + (\kappa + 1)m_3}{m_1 + m_2 + m_3}R_3; \quad r_2 = \frac{m_1 - \kappa m_3}{m_1 + m_2 + m_3}R_3; \quad r_3 = \frac{(\kappa + 1)m_1 + \kappa m_2}{m_1 + m_2 + m_3}R_3;$$

$$\omega^2 = \frac{\gamma}{R_3^3} \left[\frac{1}{(\kappa + 1)^3}m_1 + \frac{\kappa^2 + 1}{\kappa^2(\kappa + 1)}m_2 + \frac{1}{(\kappa + 1)^3}m_3 \right].$$

1.3.2. Треугольные движения Лагранжа. Рассмотрим систему трех материальных точек (частиц) A_1, A_2, A_3 , которые в течение всего времени движения расположены в вершинах треугольника с постоянными сторонами, равномерно вращающегося в фиксированной плоскости вокруг неподвижного центра масс G . Как и прежде, будем считать, что центр масс G системы точек совпадает с началом системы координат. Орбитами точек являются окружности.

Начальное расположение точек (в момент времени $t = 0$) в плоскости вращения изображено на рис. 1: $l_1 = \text{const}, l_2 = \text{const}, l_3 = \text{const}$ — длины сторон треугольника, образованного точками A_1, A_2, A_3 ; H — центр масс частиц A_1 и A_2 .

Пусть точки A_1, A_2, A_3 имеют массы m_1, m_2, m_3 соответственно; угловая скорость вращения $\omega = \text{const}$. Равнодействующая сил, действующих на точку A_3 со стороны точек A_1 и A_2 , всегда должна равняться центробежной силе $m_3GA_3\omega^2$ и быть направлена в центр G , поэтому должны выполняться следующие условия:

$$\frac{m_2}{l_1^2}\sin\theta_1 = \frac{m_1}{l_2^2}\sin\theta_2; \quad GA_3\omega^2 = \gamma \left(\frac{m_2}{l_1^2}\cos\theta_1 + \frac{m_1}{l_2^2}\cos\theta_2 \right). \quad (4)$$

Очевидно, что $\frac{l_1\sin\theta_1}{l_2\sin\theta_2} = \frac{A_2H}{A_1H} = \frac{m_1}{m_2}$. Поэтому из первого уравнения (4) получаем равенство $l_1 = l_2$. Аналогичное рассмотрение частицы A_2 приводит к равенству $l_1 = l_3$. Следовательно, треугольник $A_1A_2A_3$ является равносторонним: $l_1 = l_2 = l_3 = l$.

Обратимся ко второму уравнению (4). Пусть отрезок HK параллелен стороне A_1A_3 (см. рис. 1). Тогда, поскольку треугольник $A_1A_2A_3$ равносторонний,

$$HK = HA_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2}l; \quad KA_3 = A_1H = \frac{m_2}{m_1 + m_2}l.$$

Следовательно,

$$HA_3 = HK\cos\theta_2 + KA_3\cos\theta_1 = (m_1\cos\theta_2 + m_2\cos\theta_1) \frac{l}{m_1 + m_2}.$$

Поэтому в силу равенства $l_1 = l_2 = l$ второе уравнение (4) принимает вид

$$GA_3\omega^2 = \frac{\gamma(m_1 + m_2)HA_3}{l^2}. \quad (5)$$

Так как точка G является центром масс системы, имеет место соотношение

$$GA_3 = \frac{(m_1 + m_2)HA_3}{m_1 + m_2 + m_3}.$$

Отсюда и из (5) получаем выражение для угловой скорости:

$$\omega^2 = \frac{\gamma(m_1 + m_2 + m_3)}{l^3}.$$

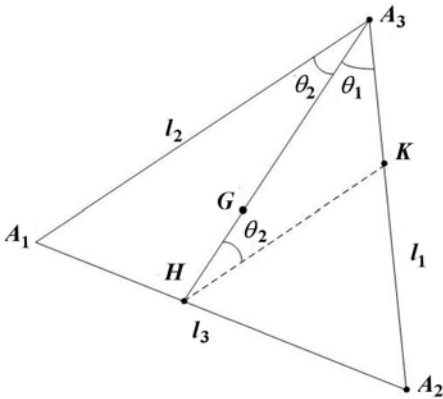


Рис. 1. Треугольное круговое движение Лагранжа, $l_1 = l_2 = l_3$. Расположение точек в начальный момент времени $t = 0$

Понятно, что к этому же выводу придем, рассмотрев две другие частицы. Это доказывает существование кругового движения частиц, расположенных в вершинах неизменного равностороннего треугольника, равномерно вращающегося в фиксированной плоскости вокруг неподвижного центра масс G . При заданных массах частиц движение однозначно определяется одним произвольным параметром — длиной l стороны треугольника. Орбиты частиц — окружности радиусами GA_i , $i = 1, 2, 3$.

1.3.3. Точки либрации и проблема их устойчивости. Важнейшей разновидностью задачи трех тел является ограниченная задача, в которой одно из тел имеет бесконечно малую массу m_3 и, следовательно, не оказывает заметного влияния на движение двух других тел с массами m_1 и m_2 . В ограниченной задаче конечные массы m_1 и m_2 движутся по кеплеровым орбитам, определяемым решением задачи двух тел.

В конфигурациях Эйлера и Лагранжа в соответствующей вращающейся системе координат масса m_3 находится в точках равновесия (покоя). В конфигурации Эйлера таких точек три — L_1, L_2, L_3 , все они находятся на прямой, проходящей через точки m_1 и m_2 . В конфигурации Лагранжа таких точек две — L_4, L_5 , они находятся в вершинах равностороннего треугольника, одной стороной которого является отрезок, соединяющий массы m_1 и m_2 . Точки L_1, L_2, L_3 называются *прямолинейными*, или коллинеарными, точки L_4, L_5 — *треугольными*, или лагранжевыми [7, 11].

Гравитационная и центробежная силы, действующие на тело, помещенное в точки L_i , $i = \overline{1, 5}$, уравновешиваются. В силу этого тело с бесконечно малой массой m_3 , помещенное в точку L_i с нулевой (во вращающейся системе координат) скоростью, останется неподвижным (в той же системе координат). Поэтому точки L_i , $i = \overline{1, 5}$, называют точками либрации, или либрационными центрами.

Схематически расположение точек либрации представлено на рис. 2, где изображена часть плоскости π_{12} , в которой расположены орбиты тел с массами m_1 и m_2 ; точки M_1 и M_2 — соответствующие положения этих тел, предполагается, что $m_1 \geq m_2$. На рисунке O — центр масс системы данных тел и в то же время — начало системы координат; при этом декартова система координат Oxy в плоскости π_{12} "жестко" связана с m_1 и m_2 , вращается вокруг центра O (во внешнем "неподвижном" пространстве R^3) и выбрана таким образом, что ось абсцисс проходит через точки M_1 и M_2 и направлена в сторону M_2 , а ось ординат направлена так, что кратчайший поворот от оси Ox к оси Oy совпадает с направлением вращения тела M_2 относительно тела M_1 ; ξ и η — координаты Нехвила [11], связанные с декартовыми прямоугольными координатами соотношениями $x = r\xi$, $y = r\eta$, где r — расстояние между точками M_1 и M_2 , определяемое формулами кеплеровского движения этих точек. Из последних соотношений следует, что координаты Нехвила точек M_1 и M_2 постоянны, откуда, в свою очередь, следует неизменность положения точек либрации L_i , $i = \overline{1, 5}$, в плоскости $O\xi\eta$. Подробности заинтересованный читатель может найти в [11].

Открытие в 1906 г. групп астероидов, движущихся в окрестности лагранжевых точек либрации системы Солнце—Юпитер (*Греки* и *Троянцы*), показало большую практическую значимость этих точек для изучения движений космических тел в Солнечной системе. В 1961 г. были открыты также *облака Кордылевского* — *тусклые облакоподобные спутники* в окрестности треугольной точки либрации L_5 системы Земля—Луна; позднее аналогичное облако было открыто около точки L_4 .

С общетеоретической точки зрения важность вопроса о точках либрации ограниченной задачи трех тел подчеркивается тем, что при решении ряда трудных принципиальных вопросов об этих точках были созданы новые качественные, аналитические

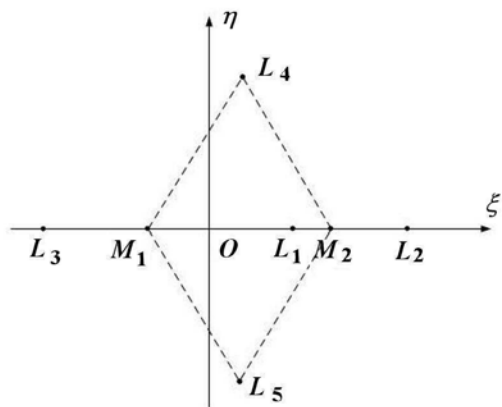


Рис. 2. Расположение точек либрации L_i , $i = \overline{1, 5}$, в плоскости π_{12} движения точек M_1 и M_2 с массами m_1 и m_2 , $m_1 \geq m_2$

и численные методы исследования сложных нелинейных гамильтоновых систем, которые применяются во многих других задачах механики и математики.

Наиболее важными вопросами небесной механики в задаче о точках либрации являются вопросы об устойчивости самих этих точек и о существовании, устойчивости и методах построения периодических и условно-периодических орбит в их окрестности. Вопросы об устойчивости точек либрации подробно исследуются в [11]. Сразу отметим, что все три прямолинейные точки либрации круговой ограниченной задачи трех тел абсолютно неустойчивы [11].

Задачу об устойчивости в линейном приближении треугольных точек либрации для неограниченной задачи трех тел в случае потенциала $U(r) \sim r^{-(n-1)}$ решил Э. Раусс: *треугольные точки либрации неустойчивы при $n > 3$, а для $n < 3$ устойчивость имеет место при выполнении неравенства*

$$3 \left(\frac{n+1}{n-3} \right)^2 < \frac{(m_1 + m_2 + m_3)^2}{m_1 m_2 + m_1 m_3 + m_2 m_3}. \quad (6)$$

Задачу об устойчивости в линейном приближении треугольных точек либрации для неограниченной пространственной задачи трех тел решил также А. Ляпунов. Результаты, полученные Э. Рауссом, следуют из результатов А. Ляпунова как частный случай [11].

Условие Э. Раусса (6) для плоской круговой ограниченной задачи трех тел и для $n = 2$ принимает вид

$$0 < \mu = \frac{m_2}{m_1 + m_2} < \frac{9 - \sqrt{69}}{18} = 0,0385208965. \quad (7)$$

Необходимое условие устойчивости (7), как оказалось, не является достаточным. Достаточные условия устойчивости были получены только после создания КАМ-теории (теории Колмогорова—Арнольда—Мозера) [7, 12, 13]: *треугольные точки либрации устойчивы при всех μ из интервала*

$$(7), \text{ за исключением двух значений } \mu_1 = \frac{15 - \sqrt{213}}{30}, \mu_2 = \frac{45 - \sqrt{1833}}{90}.$$

1.4. Задача многих тел. Гомографические решения. Конфигурации, аналогичные треугольным круговым конфигурациям Лагранжа, точнее, сохраняющие при движении форму (всегда подобные начальной конфигурации), существуют и в случае движения любого числа N материальных точек с произвольными массами. Такие конфигурации и соответствующие решения называются гомографическими [8].

Рассмотрим систему N материальных точек (частиц) A_k , которые в течение всего времени движения расположены в вершинах многоугольника постоянной формы, вращающегося в фиксированной плоскости вокруг неподвижного центра масс G . Как и прежде, будем считать, что центр масс G системы точек совпадает с началом системы координат. Как будет видно из дальнейшего, орбитами точек в гомографических конфигурациях являются кривые второго порядка — подобные эллипсы, параболы или гиперболы.

Будем обозначать координаты частиц A_k через (x_k, y_k) , а сами частицы отождествлять с точками комплексной плоскости C :

$$z_k = x_k + iy_k = \xi_k q, \quad k = 1, 2, \dots, N,$$

где ξ_k ($k = 1, 2, \dots, N$) — различные комплексные постоянные, а $q = q(t) \neq 0$ — неизвестная комплексная функция вещественной переменной t . Для расстояний между точками имеем выражение

$$r_{kl} = |z_k - z_l| = |\xi_k - \xi_l| |q|. \quad (8)$$

Запишем уравнения движения в комплексной форме:

$$\frac{d^2 z_k}{dt^2} = \sum_{l \neq k} m_l \frac{z_l - z_k}{r_{kl}^3}, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (9)$$

Подставляя (8) в (9), получаем

$$\xi_k \frac{d^2 q}{dt^2} = q |q|^{-3} \sum_{l \neq k} m_l \frac{\xi_l - \xi_k}{|\xi_l - \xi_k|^3}, \quad k = 1, 2, \dots, N.$$

Так как не все ξ_k равны нулю, то, следовательно, выполняется соотношение

$$\ddot{q} q^{1/2} \bar{q}^{3/2} = c, \quad (10)$$

где \bar{q} — величина, комплексно сопряженная с q ; c — постоянная, не зависящая от t , и справедливы равенства для векторов ξ_k

$$\xi_k c = \sum_{l \neq k} m_l \frac{\xi_l - \xi_k}{|\xi_l - \xi_k|^3}, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (11)$$

Таким образом, задача о построении гомографических решений задачи N тел сведена к решению дифференциального уравнения (10), не зависящего от N , и системы нелинейных алгебраических уравнений (11).

В случае $N = 2$ получается общее решение задачи двух тел, поскольку отрезок $A_1 A_2$ очевидным образом всегда остается подобным себе. Так как в этом случае $m_1 \xi_1 + m_2 \xi_2 = 0$, то $\xi_1 = m_2 \xi$, $\xi_2 = -m_1 \xi$ с некоторым комплексным $\xi \neq 0$, и из (11) следует, что константа $c = -(m_1 + m_2)^{-2} |\xi|^{-3}$ будет действительной и отрицательной.

Пусть решение задачи двух тел известно. Тогда $z = x + iy = q\xi$ с комплексным $\xi \neq 0$ представляет коническое сечение в плоскости $R^2(x, y)$, если $q = q(t)$ является каким-либо решением уравнения (10) с отрицательной постоянной c , причем один из фокусов этого конического сечения совпадает с началом координат.

Пусть теперь N произвольно и N различных комплексных чисел ξ_k , $k = 1, 2, \dots, N$, удовлетворяют системе уравнений (11) при $c < 0$. Тогда каждому решению уравнения (10) будет соответствовать частное решение задачи N тел. При этом каждая точка движется по коническому сечению и многоугольник, образованный этими N точками, в течение всего времени движения остается подобным себе. Если $q = q(t)$ — эллипс, то получается финитное (периодическое) решение задачи.

В случае $N = 3$ таким образом получают все обобщенные решения Лагранжа, в которых орбиты отличны от круговых. При $q = \exp(i\omega t)$ как частный случай получают круговые решения Лагранжа. Другой частный случай — решения Эйлера — получается, когда точки ξ_k , $k = 1, 2, 3$, лежат на одной прямой.

2. Задача о движении тел в поле сил потенциала Морзе

Потенциал Морзе, как и потенциал Ньютона, является центральным:

$$U_M(r) = D \left[e^{-2\beta(r-a)} - 2e^{-\beta(r-a)} \right], \quad (12)$$

где $D = \text{const} > 0$ — энергия связи частиц; $a = \text{const} > 0$ — равновесное расстояние между частицами; $\beta = \text{const} > 0$ — параметр.

Рассмотрим одномерное движение двух частиц с потенциалом взаимодействия (12). Частицы имеют равные массы: $m_1 = m_2 = m$. В момент времени $t = 0$ задана скорость разлета частиц, направленная вдоль прямой, соединяющей эти частицы. Начальное положение частиц соответствует равновесному состоянию

$$r_1 = 0,5a; \quad r_2 = -0,5a; \quad u_1 = u_0 > 0; \quad u_2 = -u_0.$$

Явный вид решения поставленной задачи проще всего получить, исходя из законов сохранения импульса и энергии:

$$m(u_1 + u_2) = 0; \quad \frac{m}{2}(u_1^2 + u_2^2) + U_M(r) = E_0 = mu_0^2 - D, \quad r = r_1 - r_2.$$

Относительная скорость частиц определяется из уравнения

$$\frac{dr}{dt} = u = u_1 - u_2 = \pm 2\sqrt{\frac{E_0 - U_M(r)}{m}}.$$

Введем новую безразмерную функцию $\varsigma = \exp(\beta(r - a))$ и безразмерную независимую переменную $\tau = 2\beta\sqrt{\frac{D}{m}}t$. В этих переменных уравнение для относительной скорости принимает следующий вид:

$$\frac{d\varsigma}{d\tau} = \pm\sqrt{(b^2 - 1)\varsigma^2 + 2\varsigma - 1}, \quad b^2 = \frac{mu_0^2}{D}, \quad \varsigma(0) = 1.$$

Решение этого уравнения легко получить в общем виде.

Возможны три сценария поведения частиц:

- 1) если начальная кинетическая энергия частиц больше размера потенциальной ямы, $b > 1$, то частицы разлетаются на бесконечность с конечной скоростью — при удалении на бесконечность скорость стремится к отличному от нуля конечному значению;
- 2) значению $b = 1$ соответствует режим разлета, при котором частицы останавливаются на бесконечности — при удалении на бесконечность скорость стремится к нулю;
- 3) при $b < 1$ частицы колеблются около положения равновесия.

Рассмотрим каждый из этих случаев.

1. $b > 1$ ($E_0 > 0$, частицы разлетаются на бесконечность).

$$\varsigma(\tau) = \frac{(Z - 1)^2 + (b^2 - 1)}{2Z(b^2 - 1)}, \quad Z = b(b + \sqrt{b^2 - 1}) \exp(\tau\sqrt{b^2 - 1});$$

$$u(t) = 2u_0 \frac{(Z^2 - b^2)\sqrt{b^2 - 1}}{b[(Z - 1)^2 + (b^2 - 1)]}; \quad r(t) = a + \frac{1}{\beta} \ln(\varsigma) = a + \frac{1}{\beta} \ln\left(\frac{(Z - 1)^2 + (b^2 - 1)}{2Z(b^2 - 1)}\right).$$

Предельная скорость разлета частиц $u(t \rightarrow \infty) = 2u_0 \frac{\sqrt{b^2 - 1}}{b}$. Траектория движения частицы на фазовой плоскости $R^2(p = mu, r)$ определяется уравнением

$$\Phi(p, r) = p - 2mu_0 \frac{(Z^2 - b^2)\sqrt{b^2 - 1}}{b[(Z - 1)^2 + (b^2 - 1)]} = 0,$$

где $Z = Z(r)$ определяется из выражения для $r = r(t)$:

$$Z = 1 + (b^2 - 1) \exp(\beta(r - a)) + \sqrt{\left[1 + (b^2 - 1) \exp(\beta(r - a))\right]^2 - b^2}.$$

2. $b = 1$ ($E_0 = 0$, частицы останавливаются на бесконечности).

$$\varsigma(\tau) = \frac{1 + (1 + \tau)^2}{2}; \quad u(t) = 4u_0 \frac{(1 + 2t\beta u_0)}{1 + (1 + 2t\beta u_0)^2}; \quad r(t) = a + \frac{1}{\beta} \ln\left(\frac{1 + (1 + 2t\beta u_0)^2}{2}\right).$$

Траектория движения частицы на фазовой плоскости $R^2(p = mu, r)$ определяется уравнением

$$\Phi(p, r) = p - 2mu_0 \frac{\sqrt{2\exp(\beta(r - a)) - 1}}{\exp(\beta(r - a))} = 0.$$

3. $b < 1$ ($E_0 < 0$, частицы колеблются около положения равновесия).

$$\zeta(\tau) = \frac{1 + b \sin(\varphi)}{1 - b^2}, \quad \varphi = \tau \sqrt{1 - b^2} - \arcsin(b);$$

$$u(t) = 2u_0 \sqrt{1 - b^2} \frac{\cos(\varphi)}{1 + b \sin(\varphi)}; \quad r(t) = a + \frac{1}{\beta} \ln(\zeta) = a + \frac{1}{\beta} \ln\left(\frac{1 + b \sin(\varphi)}{1 - b^2}\right).$$

Период колебаний $T = \frac{\pi b}{\beta u_0 \sqrt{1 - b^2}}$; амплитуда колебаний $\Delta r = \frac{1}{\beta} \ln\left(\frac{1 + b}{1 - b}\right)$; $a - \frac{1}{\beta} \ln(1 + b) < r(t) < a - \frac{1}{\beta} \ln(1 - b)$; условие отсутствия столкновения частиц: $u_0 < \sqrt{\frac{D}{m}} (\exp(\beta a) - 1)$.

Траектория движения частицы на фазовой плоскости $R^2(p = mu, r)$ замкнута и определяется уравнением

$$\Phi(p, r) = \left(\frac{bp}{2mu_0}\right)^2 + \left[1 - \exp(-\beta(r - a))\right]^2 - b^2 = 0.$$

3. Задачи о движении тел в поле сил модифицированного потенциала Морзе

Модифицированный потенциал Морзе не является центральным, так как зависит не только от расстояния между частицами, но и от полярного угла:

$$U_{M_m}(r, \varphi) = U_M(r) \theta(\varphi), \quad U_M(r) = D [e^{-2\beta(r-a)} - 2e^{-\beta(r-a)}],$$

$$\theta(\varphi) = d + b \cos^2 \varphi, \quad d, b \in R, \quad d \geq 0, \quad b > 0, \quad d + b = 1. \quad (13)$$

Над любой окружностью $r = r_0$ потенциал принимает наибольшее значение при $\varphi = 0$, $\varphi = \pi$ и наименьшее значение — при $\varphi = \pi/2$, $\varphi = 3\pi/2$. По этой причине при увеличении значения U_{M_m} форма линий уровня потенциала $U_{M_m} = \text{const}$ приближается к "восьмерке". Рис. 3, а (см. также цветную вкладку) иллюстрирует поведение модифицированного потенциала Морзе U_{M_m} в круге $\{0 \leq r \leq 2; 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$.

Рассмотрим простейшие движения материальной точки с массой m в поле сил потенциала (13).

3.1. Точки покоя модифицированного потенциала Морзе. В точках покоя отсутствуют силы, действующие на частицу: $F = -\nabla U_{M_m} = 0$. Система уравнений для нахождения координат r_S и φ_S этих точек имеет вид

$$\frac{dU_M(r)}{dr} \theta(\varphi) = 0; \quad U_M(r) \frac{d\theta(\varphi)}{d\varphi} = 0.$$

Характер решения данной системы уравнений зависит от значения параметра d :

1. В случае $d \neq 0$ существуют четыре изолированные точки покоя: две точки устойчивого равновесия — $(a, 0)$, (a, π) и две точки неустойчивого равновесия — $(a, \pi/2)$, $(a, 3\pi/2)$ (рис. 3, б; см. также цветную вкладку).
2. В случае $d = 0$ существуют две изолированные точки покоя $(a, 0)$, (a, π) и два луча покоя $(r, \pi/2)$ и $(r, 3\pi/2)$, $r > 0$. При этом $(a, 0)$ и (a, π) — точки устойчивого равновесия, а лучи $(r, \pi/2)$ и $(r, 3\pi/2)$ состоят из точек неустойчивого равновесия.

3.2. Движения вдоль лучей. Движение частицы вдоль лучей $\varphi = \varphi_0 = \text{const}$, выходящих из начала полярной системы координат, возможно только при отсутствии угловой компоненты силы, т. е. только вдоль лучей $\varphi_0 = 0$, $\varphi_0 = \pi/2$, $\varphi_0 = \pi$, $\varphi_0 = 3\pi/2$, являющихся осями симметрии потенциальной функции. Движения по лучам являются одномерными движениями под действием центральных сил потенциала Морзе $U(r) = U_M(r) \theta(\varphi_0)$, рассмотренными в разд. 2.

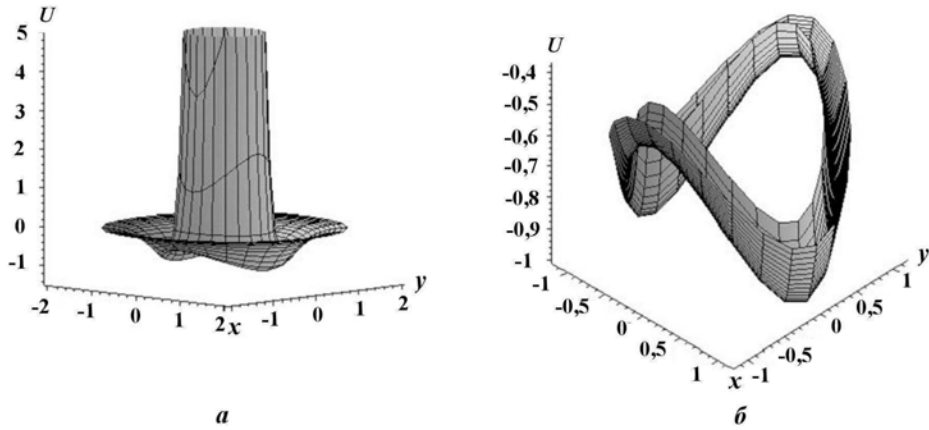


Рис. 3. Графики модифицированного потенциала Морзе ($D = 1$; $a = 1$; $\beta = 4$; $d = b = 0,5$): a — в области $\{0 \leq r \leq 2; 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$; b — в области $\{0,9 \leq r \leq 1,15; 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$, содержащей все точки покоя

3.3. Движения по окружности. Рассмотрим другой вид движения частицы — по окружности радиусом $r = r_0$, центр которой совпадает с началом полярной системы координат. В этом случае уравнения движения сводятся к алгебраическому соотношению для радиуса r_0 и дифференциальному уравнению для определения угловой координаты $\varphi = \varphi(t)$ частицы (без ограничения общности можно считать, что в начальный момент времени частица находится на полярной оси):

$$r_0 \frac{dU_M(r_0)}{dr_0} = -2U_M(r_0) > 0; \quad \left(\frac{d\varphi}{dt}\right)^2 = -\frac{2U_M(r_0)}{r_0^2} \theta(\varphi), \quad \varphi(0) = 0. \quad (14)$$

Первое уравнение системы (14) имеет два вещественных корня. При этом условию $U_M(r_0) < 0$ удовлетворяет только больший из его корней. Следовательно, при любых значениях параметров модифицированного потенциала Морзе существует единственная круговая орбита с центром в начале координат, радиус которой равен большему корню первого уравнения (14). Движение по окружности является периодическим.

В силу неравенства (14) радиус окружности $r_0 \geq a$. Отметим также, что отличительной особенностью движения по окружности является равенство нулю полной энергии частицы.

Решение дифференциального уравнения (14) может быть представлено в явном виде:

$$\varphi(t) = \begin{cases} \arcsin(\operatorname{sn}(\omega t)), & 0 \leq t \leq \frac{T}{4}; \\ \pi - \arcsin(\operatorname{sn}(\omega t)), & \frac{T}{4} \leq t \leq \frac{3T}{4}; \\ 2\pi + \arcsin(\operatorname{sn}(\omega t)), & \frac{3T}{4} \leq t \leq T. \end{cases}$$

Здесь $\operatorname{sn}z$ — эллиптическая функция Якоби (синус амплитуды z); $\omega = \pm r_0^{-1} \sqrt{-2U_M(r_0)}$, знаки "+" и "—" определяют симметричные движения в противоположных направлениях; $T = \frac{4K(\sqrt{b})}{\omega}$ —

период обращения по окружности, где $K(\sqrt{b}) = F(\pi/2, \sqrt{b}) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\psi}{\sqrt{1 - b\sin^2\psi}}$ — полный нормальный эллиптический интеграл Лежандра первого рода.

В предельном случае $b = 0$ ($d = 1$) (стандартный потенциал Морзе) справедливо равенство $\operatorname{sn}(\omega t) = \sin(\omega t)$ и движение по окружности происходит с постоянной угловой скоростью ω : $\varphi(t) = \omega t$.

Эллиптическая функция Якоби является элементарной функцией и в другом предельном случае $b = 1$ ($d = 0$): $\operatorname{sn}(\omega t) = \operatorname{th}(\omega t)$. В этом случае $\varphi(t) = \arcsin(\operatorname{th}(\omega t))$ и траектория движения, начинающаяся в точке $(r, \varphi) = (r_0, 0)$, является четвертью окружности; частица, стремясь к точкам $(r_0, \pm\pi/2)$, никогда не достигает их:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \varphi(t) = \pm \frac{\pi}{2}.$$

Следует отметить, что точки $(r_0, \pm\pi/2)$ являются точками неустойчивого равновесия для потенциала (13) (см. подразд. 3.1, п. 2), что имеет принципиальное значение при использовании данного решения в качестве теста. Очевидно, аналогичные утверждения справедливы и для части *круговой* траектории, *симметричной* рассмотренной (расположенной в левой полуплоскости $\pi/2 < \varphi < 3\pi/2$).

4. Задача о движении системы тел, взаимодействие которых описывается потенциалом Леннарда—Джонса

Потенциал Леннарда—Джонса является центральным. В классической форме он определяется следующей формулой [14]:

$$U_{LD}(r) = \frac{a}{r^6} - \frac{b}{r^{12}}, \quad a, b = \text{const}.$$

В работе [15] рассматривается потенциал типа Леннарда—Джонса

$$U(r) = u_0 \left[\frac{1}{n} \left(\frac{r_0}{r} \right)^n - \frac{1}{m} \left(\frac{r_0}{r} \right)^m \right], \quad u_0 = U_0 \frac{nm}{n-m}, \quad (15)$$

$$n, m = \text{const}, \quad U_0 = \text{const}, \quad r_0 = \text{const},$$

где $r = r_0$ — положение равновесия, и для частного случая ($n = 2, m = 1$) приводится точное решение в элементарных функциях следующей пространственной по конфигурации (одномерной по существу) задачи о движении системы семи материальных точек, взаимодействие которых описывается этим потенциалом.

Рассматривается симметричная трехмерная система из семи идентичных материальных точек, имеющих массы $m_i = m_0, i = \overline{1, 7}$. Центральная точка находится в начале координат, остальные шесть точек расположены на координатных осях — на каждой оси по две точки. В начальный момент времени $t = 0$ координаты точек, отличных от центральной, определены соотношениями $(\pm r_n, 0, 0), (0, \pm r_n, 0), (0, 0, \pm r_n)$; начальные скорости всех точек равны нулю.

Поставленная задача легко интегрируется в квадратурах при любых значениях параметров потенциала (15). Очевидно, центральная точка всегда остается неподвижной, расстояния других шести точек от начала координат в течение всего времени остаются равными друг другу, их временная динамика, как легко видеть, описывается уравнением

$$\ddot{\delta} = \frac{d^2\delta}{dt^2} = \frac{\alpha^2}{4} \left[\frac{1}{\delta^{n+1}} \left(1 + \frac{1}{2^{n+1}} + \frac{2}{(\sqrt{2})^n} \right) - \frac{1}{\delta^{m+1}} \left(1 + \frac{1}{2^{m+1}} + \frac{2}{(\sqrt{2})^m} \right) \right], \quad (16)$$

$$\frac{\alpha^2}{4} = \frac{u_0 m_0}{r_0^2}, \quad \delta = \frac{r}{r_0}.$$

Точно так же можно рассмотреть симметричные одномерную (коллинеарную) и двумерную (компланарную) системы соответственно из трех и пяти идентичных материальных точек с одинаковыми массами. Динамика коллинеарной и компланарной систем описывается уравнением, аналогичным (16), отличие заключается в коэффициентах: для коллинеарной системы они равны $a_n = 1 + \frac{1}{2^{n+1}}, b_m = 1 + \frac{1}{2^{m+1}}$, для компланарной $a_n = 1 + \frac{1}{2^{n+1}} + \frac{1}{(\sqrt{2})^n}, b_m = 1 + \frac{1}{2^{m+1}} + \frac{1}{(\sqrt{2})^m}$.

Уравнение (16) является частным случаем уравнения

$$\ddot{\delta} = a\delta^\nu - b\delta^\mu \quad (17)$$

при

$$a = \frac{\alpha^2}{4} \left(1 + \frac{1}{2^{n+1}} + \frac{2}{(\sqrt{2})^n} \right); \quad b = \frac{\alpha^2}{4} \left(1 + \frac{1}{2^{m+1}} + \frac{2}{(\sqrt{2})^m} \right); \quad \nu = -(n+1); \quad \mu = -(m+1).$$

Стандартной подстановкой $\dot{\delta} = w(\delta)$ порядок уравнения (17) понижается до первого:

$$\dot{\delta} = \frac{d\delta}{dt} = \pm \sqrt{\frac{2a}{\nu+1} \delta^{\nu+1} - \frac{2b}{\mu+1} \delta^{\mu+1} + C_1}, \quad C_1 = \text{const.} \quad (18)$$

Из (18) получается неявное представление решения уравнения (17) :

$$\int dt = \pm \int \frac{d\delta}{\sqrt{\frac{2a}{\nu+1} \delta^{\nu+1} - \frac{2b}{\mu+1} \delta^{\mu+1} + C_1}}. \quad (19)$$

Если в момент времени $t = 0$ скорость $\dot{\delta} = \dot{\delta}_0 = 0$, а положение точек $\delta = \delta_0$, то

$$C_1 = \frac{2b}{\mu+1} \delta_0^{\mu+1} - \frac{2a}{\nu+1} \delta_0^{\nu+1}. \quad (20)$$

Для рассмотренного в [15] случая $\nu+1 = -2$, $\mu+1 = -1$ и интеграл (19) принимает вид

$$\int dt = \pm \int \frac{\delta d\delta}{\sqrt{-a + 2b\delta + C_1 \delta^2}}.$$

Последний интеграл является элементарной функцией — его значение можно найти в любом справочнике (см., например, [16]).

Чтобы решить вопрос о том, для каких значений μ и ν решение (19) является элементарной функцией в случае $C_1 = 0$, воспользуемся известной теоремой.

Теорема Чебышева [16]. *Интеграл от дифференциального бинома $\int \delta^{m_1} (a_1 + b_1 \delta^{n_1})^{p_1} d\delta$, где a_1, b_1 — произвольные постоянные, m_1, n_1, p_1 — рациональные числа ($a_1 b_1 n_1 \neq 0$), может быть выражен в элементарных функциях тогда и только тогда, когда одно из чисел $p_1, \frac{m_1+1}{n_1}, \frac{m_1+1}{n_1} + p_1$ является целым.*

Подстановки, приводящие интеграл (19) при $C_1 = 0$ в перечисленных случаях к интегралам от рациональных функций, указаны в [16].

Отметим, что в силу (20) условие $C_1 = 0$ определяет начальное положение точек $\delta = \delta_0$ при нулевой начальной скорости $\dot{\delta} = \dot{\delta}_0 = 0$.

Для классического потенциала Леннарда—Джонса $n = 6$, $m = 12$ и ни одно из чисел $p_1, \frac{m_1+1}{n_1}, \frac{m_1+1}{n_1} + p_1$ не является целым. Следовательно, для этого потенциала решение поставленной задачи не может быть выражено в элементарных функциях. Нетрудно проверить также, что это решение не выражается и через эллиптические интегралы.

Отметим, что решение уравнения (17) приведено в [17].

Заключение

Можно сделать следующие выводы:

1. Сформирована система тестов для верификации кодов, предназначенных для решения задач молекулярной динамики.

2. Данная система тестов представлена списком точных решений для потенциалов Ньютона, Морзе, модифицированного потенциала Морзе и потенциала Леннарда—Джонса. Ключевые тесты построены на основе решений Эйлера и Лагранжа для потенциала Ньютона.
3. Рассмотрена проблема устойчивости движения системы трех тел. В общей постановке в настоящее время эта проблема остается открытой.

Список литературы

1. Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Делов В. И. и др. Описание системы тестов для двумерных газодинамических методик и программ. Часть 1. Требования к тестам. Тесты 1—7 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 2. С. 3—9.
2. Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Делов В. И. и др. Описание системы тестов для двумерных газодинамических методик и программ. Часть 2. Тесты 8—15. // Там же. С. 10—14.
3. Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Горев В. В. и др. Описание набора тестов для методик и программ, предназначенных для решения двумерных задач теплопроводности // Там же. 1992. Вып. 2. С. 14—20.
4. Арнольд В. И. Математические методы классической механики. М.: Наука, 1979.
5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 1. Механика. М.: Наука, 1973.
6. Субботин М. Ф. Введение в теоретическую астрономию. М.: Наука, 1968.
7. Маркеев А. П. Задача трех тел и ее точные решения // Соросовский образовательный журнал. 1999. № 9. С. 112—117.
8. Зигель К., Мозер Ю. Лекции по небесной механике. Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая механика", 2001.
9. Парс Л. А. Аналитическая динамика. М.: Наука, 1971.
10. Мишина А. П., Проскураков И. В. Высшая алгебра. Линейная алгебра, многочлены, общая алгебра. М.: Физматгиз, 1962.
11. Маркеев А. П. Точки либрации в небесной механике и космодинамике. М.: Наука, 1978.
12. Мозер Ю. Лекции о гамильтоновых системах. М.: Мир, 1973.
13. Гребеников Е. А., Козак-Сковородкина Д. Численные оценки для областей устойчивости лагранжевых решений ограниченной задачи трех тел // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 2007. Т. 47, № 9. С. 1538—1549.
14. Яворский Б. М., Детлаф А. А. Справочник по физике для инженеров и студентов вузов. М.: Наука, 1968.
15. Алейников А. Ю., Барабанов Р. А., Бутнев О. И. и др. Программа МДП-СОВЦ решения задач молекулярной динамики на параллельных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2001. Вып. 1. С. 3—13.
16. Бронштейн И. Н., Семендяев К. А. Справочник по математике для инженеров и учащихся вузов. М.: Наука, 1986.
17. Зайцев В. Ф., Полянин А. Д. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Физматлит, 2001.

Статья поступила в редакцию 09.11.10.