

Αναστάσιος Ι. Νέζης
Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Φυσικής

ΣΤΑ... ΑΔΥΤΑ ΤΟΥ ΦΑΣΙΚΟΥ ΧΩΡΟΥ

ΜΙΑ ΚΛΑΣΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΜΟΡΦΟΛΟΓΙΑΣ ΤΟΥ ΦΑΣΙΚΟΥ
ΧΩΡΟΥ ΠΑΝΩ ΣΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ T-Shaped Ar_3
(ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ)

ΗΡΑΚΛΕΙΟ 1993

Αναστάσιος Ι. Νέζης
Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Φυσικής

ΣΤΑ... ΑΔΥΤΑ ΤΟΥ ΦΑΣΙΚΟΥ ΧΩΡΟΥ

ΜΙΑ ΚΛΑΣΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΜΟΡΦΟΛΟΓΙΑΣ ΤΟΥ ΦΑΣΙΚΟΥ
ΧΩΡΟΥ ΠΑΝΩ ΣΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ T-Shaped Ar_3
(ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ)

ΗΡΑΚΛΕΙΟ 1994

Περιεχόμενα

Περιεχόμενα	2
Ευχαριστίες	3
0 ΕΙΣΑΓΩΓΗ	4
1 ΤΟ ΔΥΝΑΜΙΚΟ	4
2 ΗΜΙΠΕΡΙΟΔΙΚΕΣ ΤΡΟΧΙΕΣ	8
2.1 Οι εξισώσεις του Hamilton	8
2.2 Ολοκληρώνοντας τις εξισώσεις Hamilton	9
2.3 Ζωγραφίζοντας Τροχιές	15
3 ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΑ POINCARÉ	25
3.1 Λίγη θεωρία περί διαγραμμάτων Poincaré	25
3.2 Προσεγγίζοντας αριθμητικά τα διαγράμματα Poincaré	28
3.3 Αποτελέσματα πάνω στο μοντέλο μας	30
3.4 Περιστρεφόμενα διαγράμματα Poincaré	34
4 ΠΕΡΙΟΔΙΚΕΣ ΤΡΟΧΙΕΣ	44
4.1 Λίγη θεωρία για ένα ωραίο θέμα	44
4.1.1 Μια μελέτη στα κρίσιμα σημεία του Δυναμικού	44
4.1.2 Εντοπισμός και Εξέλιξη περιοδικών τροχιών	45
4.1.3 Ευστάθεια και Διακλάδωση περιοδικής τροχιάς	46
4.1.4 Είδη διακλαδώσεων και διαγράμματα χαρακτηριστικών	51
4.2 Περιοδικές τροχιές στο μοντέλο μας	53
4.2.1 Περιοδικές τροχιές στα Ελάχιστα	53
4.2.2 Περιοδικές τροχιές πάνω από το Σάγμα	58
4.2.3 Τροχιές που συνδέουν τα δύο πηγάδια (saddle-nodes)	65
ΕΠΙΛΟΓΟΣ	68
Παραπομπές	69
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α	70
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β	71
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ C	73

Ευχαριστίες

Από αυτή τη θέση θα ήθελα να ευχαριστήσω τον καθηγητή μου κ. Σ.Κ. Φαράντο για την εκπόνηση και επίβλεψη αυτής της εργασίας. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά την κ. Α.Φ. Προσμίτη και τον κ. Μ. Φουναργιωτάκη για τις πολύτιμες και εποικοδομητικές συμβουλές τους, καθώς και τον καθηγητή Α. Ανδριώτη.

Τέλος ευχαριστώ την μητέρα μου, Μαρία και τον φίλο μου Ν.Ν. Μαυρογιαννάκη για την διόρθωση των ορθογραφικών λαθών και ακόμα μια φορά τον καθηγητή μου για την διόρθωση τόσο τεχνική όσο κυρίως λογοτεχνική.

Τάσος Νέζης
Ιανουάριος 1994

0 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

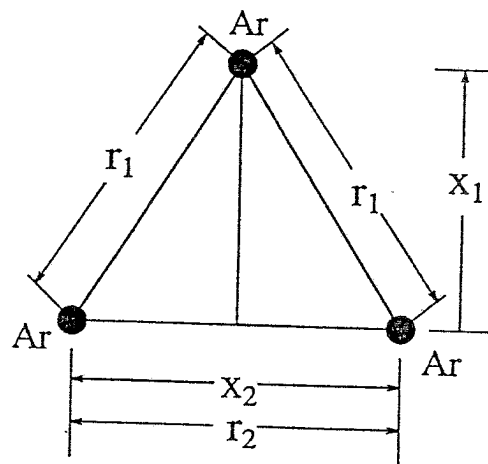
Βασικό μας -όχι έντοικο αλλά...- αντικείμενο σ' αυτή την εργασία είναι μελέτη του μορίου Ar_3 στην προσεγγιστική T-Shaped μορφή (δύο βαθμοί ελευθερίας).

Ξεκινώντας από έναν δεδομένο τύπο για το δυναμικό αλληλεπίδρασης, θα συνεχίσουμε ολοκληρώνοντας τις εξισώσεις κίνησης (*Hamilton*) και βρίσκοντας τροχιές (στον χώρο των κανονικών συντεταγμένων) για σταθερές ενέργειες. Στην συνέχεια θα μελετήσουμε τον φασικό χώρο των τροχιών αυτών, κάνοντας διαγράμματα *Poincaré* και προσπαθώντας να εντοπίσουμε περιοδικές τροχιές. Τέλος με έναν πιο συστηματικό τρόπο θα επικεντρώσουμε την προσοχή μας στις περιοδικές τροχιές, τις οποίες και θα μελετήσουμε διεξοδικότερα.

Αλλά ας τα δούμε όλα αυτά στην πράξη...

1 ΤΟ ΔΥΝΑΜΙΚΟ

Και' αρχήν ας πούμε λίγα λόγια για το ίδιο το μόριο. Όπως φαίνεται και στο σχήμα κρατάμε μόνο δύο συντεταγμένες (x_1, x_2) τις οποίες και μεταβάλουμε [1] ως εξής: $x_1 \in [-10, 10]$, $x_2 \in [4, 16]$. Οι συντεταγμένες είναι σε *bohrs* ($1\text{ bohr} = 0.52918 \text{ \AA}$). Ο χαρακτηρισμός "T-Shaped" δικαιολογείται από το σχήμα των συντεταγμένων του μορίου (ανάποδο T).



Το μόριο Ar_3 και οι συντεταγμένες του.

Η γωνία τέλος \angle (βάση-ύψος) είναι παγωμένη στις 90° πράγμα που μας εξασφαλίζει την μείωση των (δονητικών) βαθμών ελευθερίας από 3 ($3n -$

6, $n = 3$) σε 2.

Ο τύπος που δίνει το δυναμικό¹ είναι ο ακόλουθος [2]:

$$V(r_1, r_2) = 2V(r_1) + V(r_2) - V_{min} \quad (1)$$

$$V(r) = \varepsilon \left(Ae^{-ar+\beta r^2} - \begin{cases} e^{-(\frac{d}{r}-1)^2} & r < d \\ 1 & r \geq d \end{cases} \left[\frac{c_6}{r^6} + \frac{c_8}{r^8} + \frac{c_{10}}{r^{10}} \right] \right) \quad (2)$$

$$r_1 = \frac{1}{r_m} \sqrt{x_1^2 + \frac{1}{4}x_2^2}, \quad r_2 = \frac{1}{r_m} x_2 \quad \{V(r_1, r_2) \rightsquigarrow V(x_1, x_2)\}, \quad (3)$$

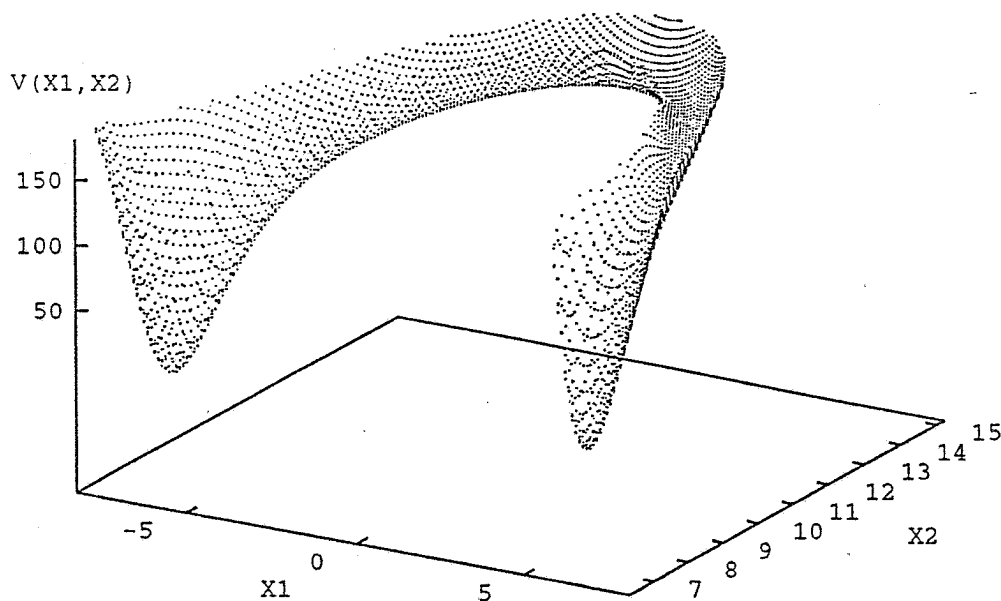
όπου οι τιμές των σταθερών δίνονται από:

A	=	2.26210716×10^5
a	=	10.77874743
β	=	-1.8122004
c_6	=	1.10785136
c_8	=	0.56072459
c_{10}	=	0.34602794
d	=	1.36
ε	=	143.224 (K)
r_m	=	7.098756333 (bohrs)
V_{min}	=	-429.62200982704179 (K)

Η μορφολογία του δυναμικού φαίνεται στο Σχήμα 1. Να πούμε εδώ ότι το δυναμικό όπως και κάθε ενέργεια (σε όλη την έκταση αυτής της εργασίας)

¹(δυναμικό=δυναμική ενεργειακή επιφάνεια) Για να βρεθεί ένας τέτοιος τύπος αυτό που γίνεται είναι το εξής (βλέπε αναφορά [3, σελ.4-5]): Χωρίζουμε το επίπεδο των συντεταγμένων (x_1, x_2) σε ένα πυκνό πλέγμα. Υποθέτουμε την προσέγγιση *Born-Oppenheimer* και στη συνέχεια λύνουμε την εξίσωση *Schrödinger* για τα ηλεκτρόνια, για κάθε σημείο του πλέγματος. Επιλέγουμε την χαμηλότερη ενέργεια των λύσεών μας και έτσι έχουμε την ολική ελάχιστη ενέργεια του μορίου (δηλαδή το δυναμικό αλληλεπίδρασης) για κάθε σημείο του πλέγματος. Το τελευταίο στάδιο (και το πιο δύσκολο) είναι να προσαρμόσουμε (fitting) αυτά τα σημεία σε κάποια συνάρτηση.

εμφανίζεται ως θερμοκρασία ($E = k_B T$) και μετριέται σε βαθμούς Kelvin (K).



Σχήμα 1. Το Δυναμικό σε τριδιάστατη αναπαράσταση.

Στην συνέχεια (Σχήμα 2.) βλέπουμε ένα γράφημα ισοϋψών καμπυλών (contours) του δυναμικού διακριτών και συνεχών. Οι διακριτές ισοϋψεις είναι σε ενέργειες [1] :

100 125 144 150 160 175 K

Το σαγματικό σημείο είναι σε 140.38 K και τα ελάχιστα σε 0.0 K μιας και το V_{min} μπήκε στην εξίσωση (1) ακριβώς για να “φέρει” στο μηδέν αυτά τα ελάχιστα. Οι συντεταγμένες των ελαχίστων είναι $(x_1, x_2) = (\pm 6.14, 7.09)$.

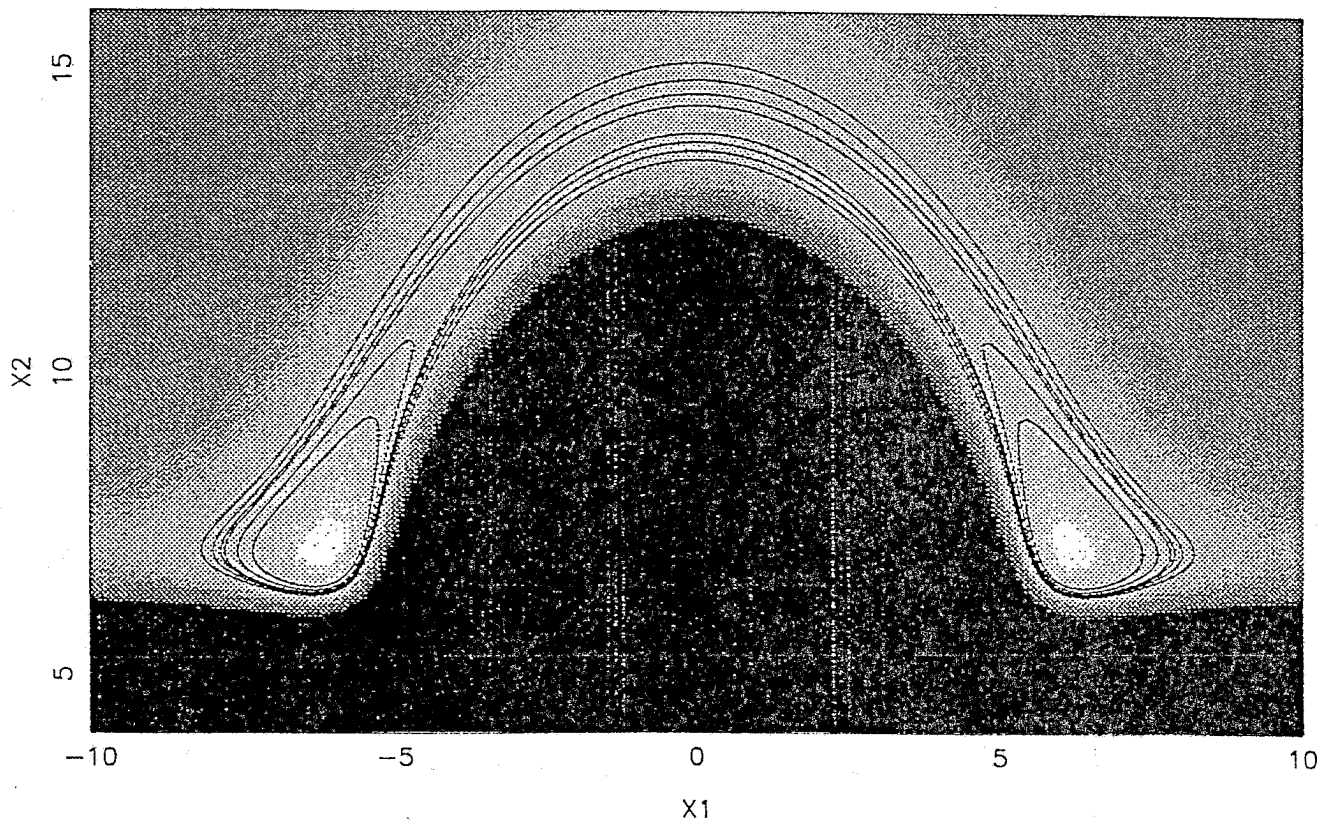
Τέλος, οφείλουμε να ξεκαθαρίσουμε πως οι δυναμικές αλληλεπίδρασης είναι του τύπου Van der Waals και φυσικά αυτό απαντά στο ερώτημα: πως το “ευγενές Αργό” φτιάχνει μόριο, και γιατί οι θερμοκρασίες είναι τόσο χαμηλές.

Επίσης οι συντεταγμένες (x_1, x_2) είναι μέρος των συντεταγμένων σκέδασης με παγωμένη την γωνία φ . Οι συντεταγμένες σκέδασης για τριατομικά μόρια είναι :

x_2 : η απόσταση δύο ατόμων,

x_1 : η απόσταση του τρίτου ατόμου από το μέσον της x_2 ,

φ : η γωνία $\angle(x_1, x_2)$.



Σχήμα 2. Το δυναμικό σε δυδιάστατη αναπαράσταση (ισοϋψείς σε ενέργειες 100,125,144,150,160,175 K).

2 ΗΜΙΠΕΡΙΟΔΙΚΕΣ ΤΡΟΧΙΕΣ

2.1 Οι εξισώσεις Hamilton

Έχοντας ένα τόσο πολύπλοκο τύπο δυναμικού και φυσικά έχοντας δύο ανεξάρτητες συντεταγμένες (x_1, x_2) είναι αρκετά δύσκολο να λύσουμε ένα 2×2 σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων (ΔΕ) 2^{ης} τάξης, δηλαδή τις εξισώσεις *Newton*:

$$m_i \ddot{x}_i = F_i = -\frac{\partial V}{\partial x_i} \quad i = 1, 2$$

Έτσι προτιμάμε να λύσουμε ένα 4×4 σύστημα ΔΕ που είναι όμως 1^{ης} τάξης. Και αυτές είναι οι εξισώσεις *Hamilton*:

$$\begin{aligned} \dot{x}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial x_i}, \end{aligned}$$

όπου H είναι η Χαμιλτονιανή (Hamiltonian) του συστήματος :

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(x_1, x_2), \quad (4)$$

όπου m_1, m_2 είναι ανηγμένες μάζες [1]: $m_1 = 2m_{Ar}^2/3m_{Ar} = 0.1539$ eH/K και $m_2 = m_{Ar}^2/2m_{Ar} = 0.1154$ eH/K².

Οι τέσσερις αυτές εξισώσεις μπορεί να είναι αριθμητικά διπλάσιες από τις εξισώσεις *Newton*, είναι όμως πρωτοτάξιες και αυτό τις κάνει πολύ πιο ευκολοδούλευτες. Αναλυτικά οι τέσσερις εξισώσεις είναι:

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_1} \quad \frac{dp_1}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_1} \quad (5)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_2} \quad \frac{dp_2}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_2}, \quad (6)$$

²H συνήθης ατομική μονάδα μάζας, το "ηλεκτρόνιο" (e), μετατρέπεται από τον παράγοντα μετατροπής της ενέργειας από *hartrees* σε *Kelvin*: $1 \text{ e hartree/K} = 173.17 \text{ amu}$.

όπου λαμβάνοντας υπόψιν τους τύπους της Χαμιλτονιανής (4) και του Δυναμικού (1),(2) και (3) έχουμε:

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{p_1}{m_1} \quad \frac{dp_1}{dt} = -2 \frac{dV(r_1)}{dr_1} \frac{x_1}{r_1} \frac{1}{r_m^2} \quad (7)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \frac{p_2}{m_2} \quad \frac{dp_2}{dt} = - \left(\frac{1}{2} \frac{dV(r_1)}{dr_1} \frac{x_2}{r_1} \frac{1}{r_m^2} + \frac{dV(r_2)}{dr_2} \frac{1}{r_m} \right) \quad (8)$$

όπου:

$$\frac{dV(r)}{dr} = \varepsilon \left(A(-\alpha + 2\beta r) e^{-\alpha r + \beta r^2} - \left\{ \begin{array}{l} [2 \frac{d}{r^2} (\frac{d}{r} - 1)] e^{-(\frac{d}{r}-1)^2} \quad r < d \\ 0 \quad r \geq d \end{array} \right\} \left[\frac{c_6}{r^6} + \frac{c_8}{r^8} + \frac{c_{10}}{r^{10}} \right] - \left\{ \begin{array}{l} e^{-(\frac{d}{r}-1)^2} \quad r < d \\ 1 \quad r \geq d \end{array} \right\} \left[6 \frac{c_6}{r^7} + 8 \frac{c_8}{r^9} + 10 \frac{c_{10}}{r^{11}} \right] \right) \quad (9)$$

Για να εξαχθούν τα παραπάνω χρησιμοποιήθηκαν τα εξής:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial p_i} &= \frac{p_i}{m_i}, \quad \frac{\partial H}{\partial x_i} = \frac{\partial V(x_1, x_2)}{\partial x_i} = 2 \frac{\partial V(r_1)}{\partial x_i} + \frac{\partial V(r_2)}{\partial x_i} \\ \frac{\partial V(r_j)}{\partial x_i} &= \frac{dV(r_j)}{dr_j} \frac{\partial r_j}{\partial x_i} \\ \frac{\partial r_1}{\partial x_1} &= \frac{2x_1/r_m}{2\sqrt{x_1^2 + x_2^2/4}} = \frac{x_1}{r_m^2 r_1}, \quad \frac{\partial r_2}{\partial x_1} = 0 \\ \frac{\partial r_1}{\partial x_2} &= \frac{2x_2/4r_m}{2\sqrt{x_1^2 + x_2^2/4}} = \frac{x_2}{4r_m^2 r_1}, \quad \frac{\partial r_2}{\partial x_2} = \frac{1}{r_m} \end{aligned}$$

Έχοντας πλέον ορίσει πλήρως ένα Πρωτοτάξιο 4×4 διαφορικό σύστημα εξισώσεων, το μόνο που μας μένει είναι να το ολοκληρώσουμε και να δούμε πως συμπεριφέρεται στον χρόνο...

2.2 Ολοκληρώνοντας τις εξισώσεις Hamilton

Στο σημείο αυτό είναι ίσως εποικοδομητικό να πούμε “τι τραβήξαμε” μέχρι να φτάσουμε στο επιθυμητό αποτέλεσμα, στην αναπαράσταση δηλαδή των τροχιών. Το βασικό ερώτημα είναι :

ΔΙΑΤΗΡΕΙΤΑΙ Η ΕΝΕΡΓΕΙΑ ΚΑΤΑ ΤΗΝ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ ;

Η απάντηση εξαρτάται από δύο παράγοντες: από το αν και κατά πόσο γράψαμε σωστά τις εξισώσεις *Hamilton* (σε τόσο πολύπλοκα συστήματα, τα μαθηματικά λάθη δεν είναι καθόλου σπάνια) και αφού σιγουρευτούμε γι' αυτό, από το πόσο ακριβής είναι ο αλγόριθμος ολοκλήρωσης που χρησιμοποιούμε. (Πόσο καλός, δηλαδή, είναι ο αλγόριθμός μας;)

Στην αρχή δοκιμάσαμε έναν απλό (τον απλούστερο ίσως) αλγόριθμο : Τον γνωστό μας αλγόριθμο *Euler*:

$$\frac{dy}{dt} = f(y) \rightarrow \frac{y^{n+1} - y^n}{dt} = f(y^n) \Rightarrow y^{n+1} = y^n + dt \cdot f(y^n)$$

που για το 4×4 σύστημά μας γίνεται :

$$\begin{aligned} x_1^{n+1} &= x_1^n + dt \cdot p_1^n / m_1 \\ x_2^{n+1} &= x_2^n + dt \cdot p_2^n / m_2 \\ p_1^{n+1} &= p_1^n + dt \cdot \left(-2 \frac{dV(r_1)}{dr_1} \right)^n \frac{x_1^n}{r_1^n} \frac{1}{r_m^2} \\ p_2^{n+1} &= p_2^n + dt \cdot \left(-\frac{1}{2} \frac{dV(r_1)}{dr_1} \right)^n \frac{x_2^n}{r_1^n} \frac{1}{r_m^2} - \left(\frac{dV(r_2)}{dr_2} \right)^n \frac{1}{r_m} \end{aligned}$$

Τα αποτελέσματα όπως φαίνονται στο Σχήμα 3 ήταν αποθαρρυντικά, και από άποψης διατήρησης της ενέργειας και από άποψης χρόνου μηχανής (CPU time).

Στη συνέχεια χρησιμοποιήσαμε έναν 4^{ης} τάξης *Runge - Kutta* αλγόριθμο:

$$\frac{dy}{dt} = f(y) \rightarrow \frac{y^{n+1} - y^n}{dt} = f(y^n) \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} k_1 &= dt \cdot f(y^n) \\ k_2 &= dt \cdot f\left(y^n + \frac{1}{2}k_1\right) \\ k_3 &= dt \cdot f\left(y^n + \frac{1}{2}k_2\right) \\ k_4 &= dt \cdot f\left(y^n + k_3\right) \end{aligned} \right\} \Rightarrow y^{n+1} = y^n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

που για το σύστημά μας γίνεται:

$$\begin{aligned} f_{x_1}(x_1, x_2, p_1, p_2) &= p_1/m_1 \\ f_{x_2}(x_1, x_2, p_1, p_2) &= p_2/m_2 \\ f_{p_1}(x_1, x_2, p_1, p_2) &= -\frac{2}{r_m^2} \frac{x_1}{r_1} \frac{dV(r_1)}{dr_1} \\ f_{p_2}(x_1, x_2, p_1, p_2) &= -\frac{1}{2r_m^2} \frac{x_2}{r_1} \frac{dV(r_1)}{dr_1} - \frac{1}{r_m} \frac{dV(r_2)}{dr_2} \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} k_1^{x_1} &= dt \cdot f_{x_1}(x_1^n, x_2^n, p_1^n, p_2^n) \\ k_1^{x_2} &= dt \cdot f_{x_2}(x_1^n, x_2^n, p_1^n, p_2^n) \\ k_1^{p_1} &= dt \cdot f_{p_1}(x_1^n, x_2^n, p_1^n, p_2^n) \\ k_1^{p_2} &= dt \cdot f_{p_2}(x_1^n, x_2^n, p_1^n, p_2^n) \\ \\ k_2^{x_1} &= dt \cdot f_{x_1}(x_1^n + \frac{1}{2}k_1^{x_1}, x_2^n, p_1^n, p_2^n) \\ k_2^{x_2} &= dt \cdot f_{x_2}(x_1^n, x_2^n + \frac{1}{2}k_1^{x_2}, p_1^n, p_2^n) \\ k_2^{p_1} &= dt \cdot f_{p_1}(x_1^n, x_2^n, p_1^n + \frac{1}{2}k_1^{p_1}, p_2^n) \\ k_2^{p_2} &= dt \cdot f_{p_2}(x_1^n, x_2^n, p_1^n, p_2^n + \frac{1}{2}k_1^{p_2}) \\ \\ k_3^{x_1} &= dt \cdot f_{x_1}(x_1^n + \frac{1}{2}k_2^{x_1}, x_2^n, p_1^n, p_2^n) \\ k_3^{x_2} &= dt \cdot f_{x_2}(x_1^n, x_2^n + \frac{1}{2}k_2^{x_2}, p_1^n, p_2^n) \\ k_3^{p_1} &= dt \cdot f_{p_1}(x_1^n, x_2^n, p_1^n + \frac{1}{2}k_2^{p_1}, p_2^n) \\ k_3^{p_2} &= dt \cdot f_{p_2}(x_1^n, x_2^n, p_1^n, p_2^n + \frac{1}{2}k_2^{p_2}) \\ \\ k_4^{x_1} &= dt \cdot f_{x_1}(x_1^n + k_3^{x_1}, x_2^n, p_1^n, p_2^n) \\ k_4^{x_2} &= dt \cdot f_{x_2}(x_1^n, x_2^n + k_3^{x_2}, p_1^n, p_2^n) \\ k_4^{p_1} &= dt \cdot f_{p_1}(x_1^n, x_2^n, p_1^n + k_3^{p_1}, p_2^n) \\ k_4^{p_2} &= dt \cdot f_{p_2}(x_1^n, x_2^n, p_1^n, p_2^n + k_3^{p_2}) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} x_1^{n+1} = x_1^n + \frac{1}{6}(k_1^{x_1} + 2k_2^{x_1} + 2k_3^{x_1} + k_4^{x_1}) \\ x_2^{n+1} = x_2^n + \frac{1}{6}(k_1^{x_2} + 2k_2^{x_2} + 2k_3^{x_2} + k_4^{x_2}) \\ p_1^{n+1} = p_1^n + \frac{1}{6}(k_1^{p_1} + 2k_2^{p_1} + 2k_3^{p_1} + k_4^{p_1}) \\ p_2^{n+1} = p_2^n + \frac{1}{6}(k_1^{p_2} + 2k_2^{p_2} + 2k_3^{p_2} + k_4^{p_2}) \end{cases}$$

Τα αποτελέσματα ήταν ακριβώς ταυτόσημα με τον *Euler*. Αυτό (που δεν θα μπορούσε να ήταν... διαβολική σύμπτωση) μας έβαλε σε υποψίες ότι οι δυο αλγόριθμοι σχετίζονταν, αν και ο *Runge - Kutta* "φημίζεται" για τα πολύ καλύτερα αποτελέσματά του. Τελικά η απάντηση ήταν απλή: όταν το δεύτερο μέλος της εξίσωσης $\dot{y} = f$ είναι ανεξάρτητο του y τότε οι αλγόριθμοι *Euler* και *Runge - Kutta* ταυτίζονται.

Η απόδειξη έχει ως εξής: $\dot{y} = f$ ανεξάρτητο του $y \Rightarrow k_1 = k_2 = k_3 = k_4 = dt \cdot f \Rightarrow y^{n+1} = y^n + \frac{1}{6}(dt \cdot f + 2dt \cdot f + 2dt \cdot f + dt \cdot f) = y^n dt \cdot f \Rightarrow y^{n+1} = y^n + f \cdot dt$ που είναι ο τύπος του αλγορίθμου του *Euler*.

Το συμπέρασμα αυτό είναι πολύ σημαντικό αφού οι εξισώσεις *Hamilton* σε διδιάστατες περιπτώσεις (σαν τη δική μας) δίνουν τέτοια (\dot{y} ανεξάρτητο του y) συστήματα ΔΕ. Έτσι έλειξε και η... υπόθεση *Runge - Kutta*.

Μετά συνεχίσαμε με έναν αλγόριθμο *Predictor - Corrector* 4^{ης} τάξης, που έχει ως εξής:

$$\frac{dy}{dt} = f(y) \rightarrow \frac{y^{n+1} - y^n}{dt} = f(y^n) \Rightarrow$$

$$\text{Predictor... } y^{n+1} = y^n + dt \frac{1}{24} [55f(y^n) - 59f(y^{n-1}) + 37f(y^{n-2}) - 9f(y^{n-3})]$$

$$\text{...Corrector } y^{n+1} = y^n + dt \frac{1}{24} [9f(y^{n+1}) + 19f(y^n) - 5f(y^{n-1}) + f(y^{n-2})]$$

που για το δικό μας σύστημα διαφορικών εξισώσεων γίνεται :

$$f_{x_1}(x_1, x_2, p_1, p_2) = p_1/m_1$$

$$f_{x_2}(x_1, x_2, p_1, p_2) = p_2/m_2$$

$$f_{p_1}(x_1, x_2, p_1, p_2) = -\frac{2}{r_m^2} \frac{x_1}{r_1} \frac{dV(r_1)}{dr_1}$$

$$f_{p_2}(x_1, x_2, p_1, p_2) = -\frac{1}{2r_m^2} \frac{x_2}{r_1} \frac{dV(r_1)}{dr_1} - \frac{1}{r_m} \frac{dV(r_2)}{dr_2}$$

Predictor...

$$x_1^{n+1} = x_1^n + dt \frac{1}{24} [55f_{x_1}^n - 59f_{x_1}^{n-1} + 37f_{x_1}^{n-2} - 9f_{x_1}^{n-3}]$$

$$x_2^{n+1} = x_2^n + dt \frac{1}{24} [55f_{x_2}^n - 59f_{x_2}^{n-1} + 37f_{x_2}^{n-2} - 9f_{x_2}^{n-3}]$$

$$p_1^{n+1} = p_1^n + dt \frac{1}{24} [55f_{p_1}^n - 59f_{p_1}^{n-1} + 37f_{p_1}^{n-2} - 9f_{p_1}^{n-3}]$$

$$p_2^{n+1} = p_2^n + dt \frac{1}{24} [55f_{p_2}^n - 59f_{p_2}^{n-1} + 37f_{p_2}^{n-2} - 9f_{p_2}^{n-3}]$$

...Corrector

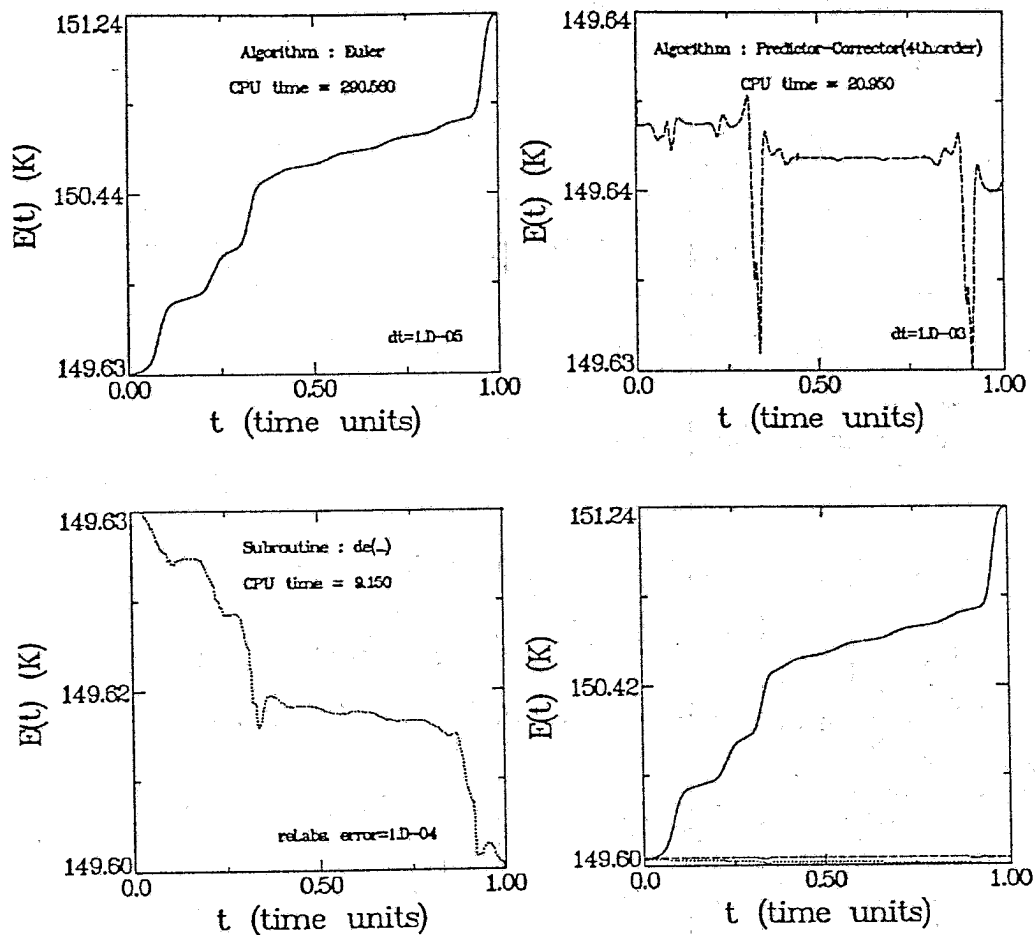
$$x_1^{n+1} = x_1^n + dt \frac{1}{24} [9f_{x_1}^{n+1} + 19f_{x_1}^n - 5f_{x_1}^{n-1} + f_{x_1}^{n-2}]$$

$$x_2^{n+1} = x_2^n + dt \frac{1}{24} [9f_{x_2}^{n+1} + 19f_{x_2}^n - 5f_{x_2}^{n-1} + f_{x_2}^{n-2}]$$

$$p_1^{n+1} = p_1^n + dt \frac{1}{24} [9f_{p_1}^{n+1} + 19f_{p_1}^n - 5f_{p_1}^{n-1} + f_{p_1}^{n-2}]$$

$$p_2^{n+1} = p_2^n + dt \frac{1}{24} [9f_{p_2}^{n+1} + 19f_{p_2}^n - 5f_{p_2}^{n-1} + f_{p_2}^{n-2}]$$

Εδώ όπως φαίνεται και στο Σχήμα 3 είχαμε αρκετά ικανοποιητικά αποτελέσματα, τα οποία όμως εξακολουθούν και δεν μας κάνουν σε ακρίβεια.

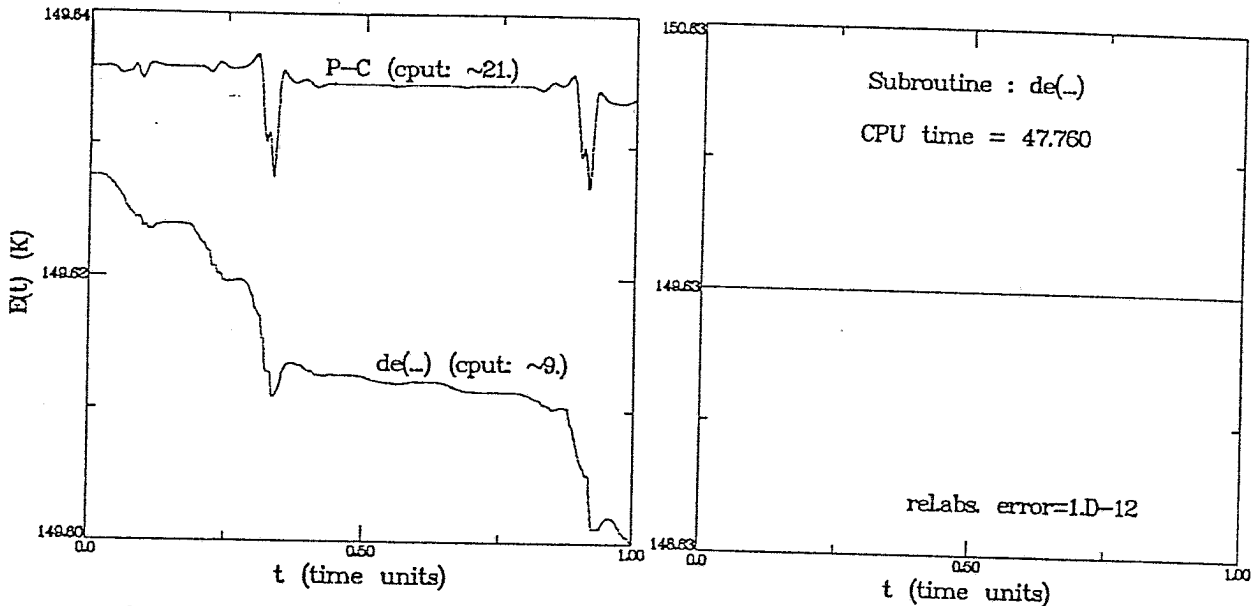


Σχήμα 3. Συγκριτικό διάγραμμα των τριών ολοκληρωτών

Τέλος χρησιμοποιήσαμε τον ολοκληρωτή $de()$, μια ρουτίνα αρκετά μεγάλη αλλά πολύ ακριβή και γρήγορη.³ Όπως φαίνεται στο Σχήμα 3, και καλύτερα στο Σχήμα 4 ο δικός μας *Predictor - Corrector* 4^{ης} Τάξης ήταν λίγο καλύτερος (αν και αργότερος από την $de()$). Όταν όμως αυξήσαμε τον "παράγοντα λάθους" (absolut, relative errors) στην $de()$ από 10^{-4} σε

³Η $de()$ είναι ένας ολοκληρωτής *Predictor - Corrector* 12^{ης} Τάξης (για να βρει ένα σημείο λαμβάνει υπόψιν του τα 12 προηγούμενα) με μεταβλητό βήμα ολοκλήρωσης (dt).

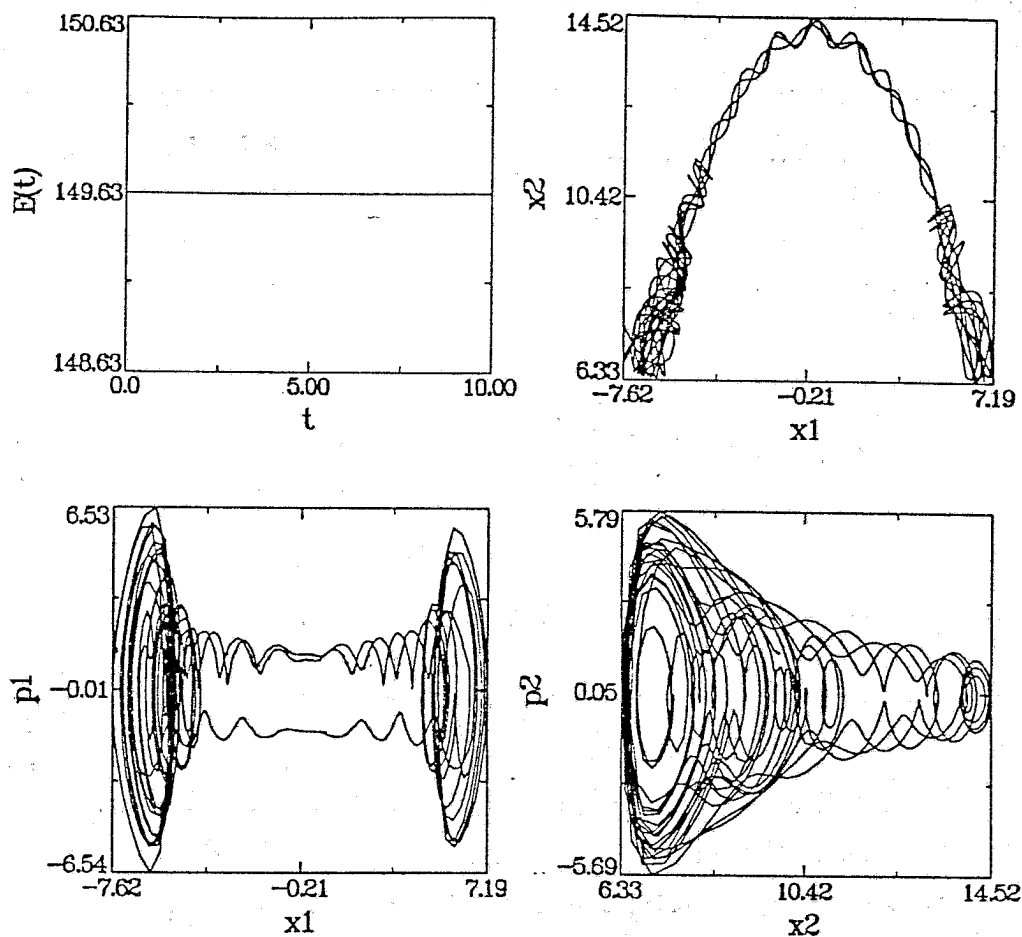
10^{-12} βρήκαμε (Σχήμα 5.) εκπληκτικά αποτελέσματα.⁴ Έτσι όλες οι ολοκληρώσεις από 'δω και μέχρι να φτάσουμε στις περιοδικές τροχιές γίνανε με την $de()$.



Σχήμα 4. Συγκριτικό διάγραμμα των Σχήμα 5. Η $de()$ με ακρίβεια 10^{-12} Predictor-Corrector 4^{ης} Τάξης και $de()$

Και για να πάρουμε μια γεύση για το τι θα ακολουθήσει, παραθέτουμε ένα σχήμα (Σχήμα 6.) με την ενέργεια ($t, E(t)$), τον χώρο των συντεταγμένων (x_1, x_2) και τους χώρους των ορμών (x_1, p_1), (x_2, p_2), για μια ολοκλήρωση 10 μονάδων χρόνου (Σύμφωνα με το σύστημα μονάδων που χρησιμοποιούμε [1] η ατομική μονάδα χρόνου είναι: $1atu = 1\hbar/K = 7.6383 ps$). Βλέπουμε στους χώρους (x_1, x_2) και (x_1, p_1) πως η τροχιά περνά από το ένα πηγάδι στο άλλο και αυτό είναι φυσικό μιας και όπως φαίνεται στο ($t, E(t)$) η ενέργεια είναι περίπου στα 150. K δηλαδή πάνω από το σαγματικό σημείο (saddle point).

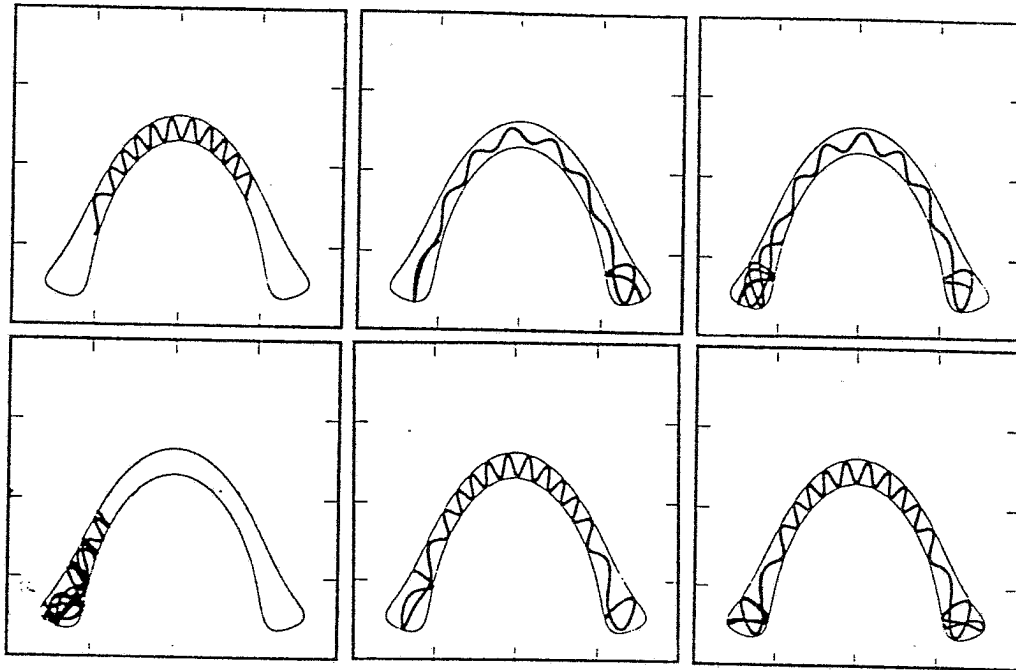
⁴Σε αυτό το σημείο ίσως είναι πρέπον να διευκρινίσουμε ότι κάθε αλγόριθμος (ακόμα και ο... ταπεινός Euler) μπορεί να γίνει "απόλυτα" ακριβής αν του μειώσουμε κατάλληλα το βήμα ολοκλήρωσης. Όσο μικρότερο βήμα τόσο ακριβέστερα αποτελέσματα, αλλά σε όλο και πιο αργό χρόνο. Έτσι αποφανθήκαμε πως χρειαζόμασταν έναν πιο sofisticé αλγόριθμο (όπως η $de()$) ώστε να δίνει καλά αποτελέσματα σε λογικά χρονικά διαστήματα.

Σχήμα 6. Αποτελέσματα ολοκλήρωσης για $E=149.63$ K

2.3 Ζωγραφίζοντας Τροχιές

Στο σημείο αυτό πρέπει να εξηγήσουμε τον όρο “τροχιά” και να καταλάβουμε καλύτερα τα σχήματα (x_1, x_2) στο Σχήμα 6 καθώς και τα επόμενα σχήματα. Λέγοντας λοιπόν “τροχιά” εννοούμε την προβολή της ταυτόχρονης μεταβολής των δύο συντεταγμένων μας (x_1, x_2) στο χρόνο, σε ένα αντίστοιχο επίπεδο. Μπορούμε να φανταστούμε μια τροχιά σαν μια πραγματική κίνηση μιας μπάλας πάνω στα τοιχώματα του δυναμικού (όπως ένα μπαλάκι

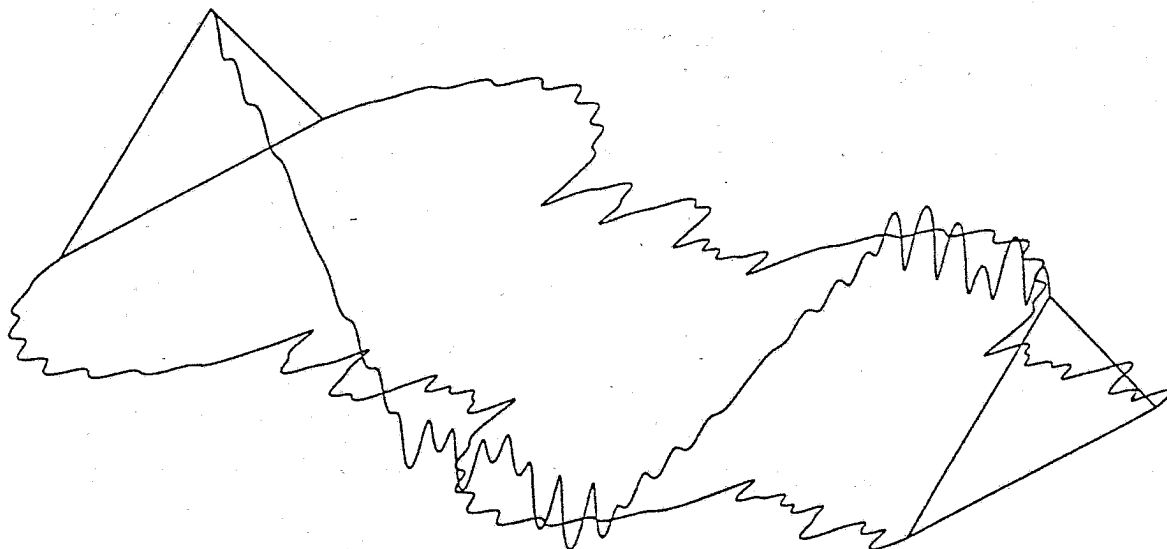
θα έκανε μια "πήγαινε-έλα" κίνηση μέσα σε μια γούβα στο χώρο). Όπως φαίνεται και στο Σχήμα 7 είναι καλό να φανταζόμαστε τις τροχιές με αυτό τον τρόπο.



Σχήμα 7. Μια τροχιά (πάνω από το σάγμα) όπως φαίνεται μέσα στα τοιχώματα του δυναμικού.

Για να μην φανταστείτε, όμως, ότι αυτές οι περιβόητες τροχιές είναι κάτι το φανταστικό και εξωπραγματικό (κάποια μαθηματική απεικόνιση χωρίς κανένα φυσικό αντίκτυπο) παραθέτουμε και το παρακάτω Σχήμα 8. Εδώ φαίνεται η τροχιά του κάθε ατόμου του Ar_3 στην διάρκεια του χρόνου, για μια ενέργεια 160. K και για 5. t.u. Οι τροχιές αυτές βγήκαν απλά μετατρέποντας τις x_1, x_2 σε y^i, z^i ($i = 1, 2, 3$), μετατρέποντας δηλαδή τις κανονικές συντεταγμένες σε πραγματικές (καρτεσιανές y, z) και προσθέτοντας φυσικά τον χρόνο⁵ σαν τρίτη μεταβλητή. Βλέπουμε, λοιπόν, τι πραγματικά κάνει το μόριο κατά την "διάρκεια μιας τροχιάς", πως ανοιγοκλείνουν τα άτομα της 'βάσης' και πως το άτομο της 'κορυφής' περνά από το ένα πηγάδι στο άλλο.

⁵ Ας μην ξεχνάμε ότι όταν ολοκληρώνουμε η μεταβλητή μας είναι ο χρόνος (δες εξισώσεις *Hamilton*) και έτσι είναι εύκολο να τον έχουμε σαν output μαζί με τις E, x_1, x_2, p_1, p_2 .

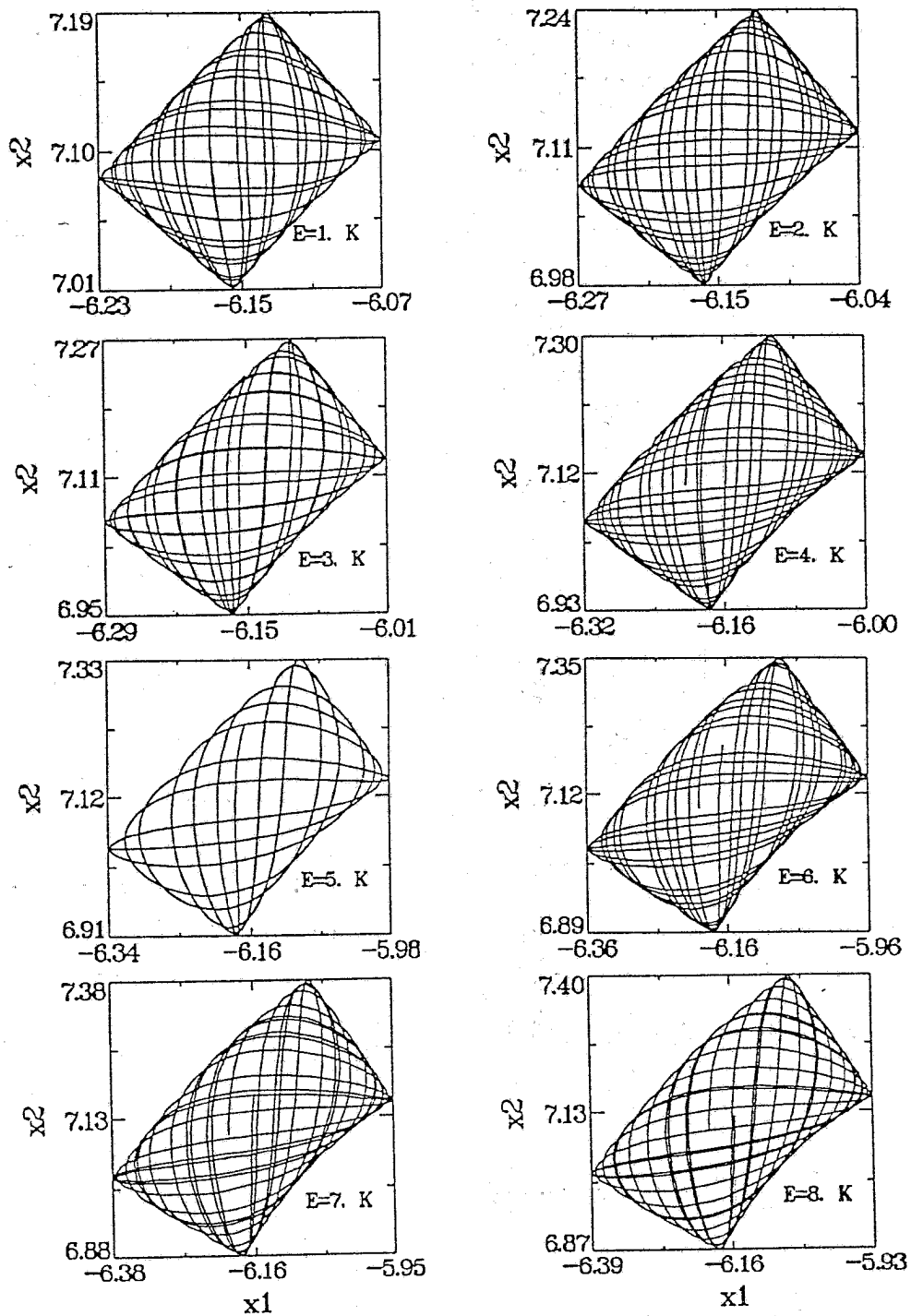


Σχήμα 8. Πραγματική κίνηση των ατόμων του μορίου. Για να καταλάβετε αυτό το σχήμα ξεκινήστε από κάθε άτομο ξεχωριστά και ακολουθήστε την τροχιά του μέχρι το τέλος. Θα διαπιστώσετε ότι η τροχιές των ατόμων της 'βάσης' είναι κατοπτρικές και και η τροχιά του ατόμου της 'κορυφής' περνά από τα θετικά στα αρνητικά και πάλι στα θετικά, δηλαδή το άτομο περνά από το δεξί πηγάδι στο αριστερό και πάλι στο δεξί.

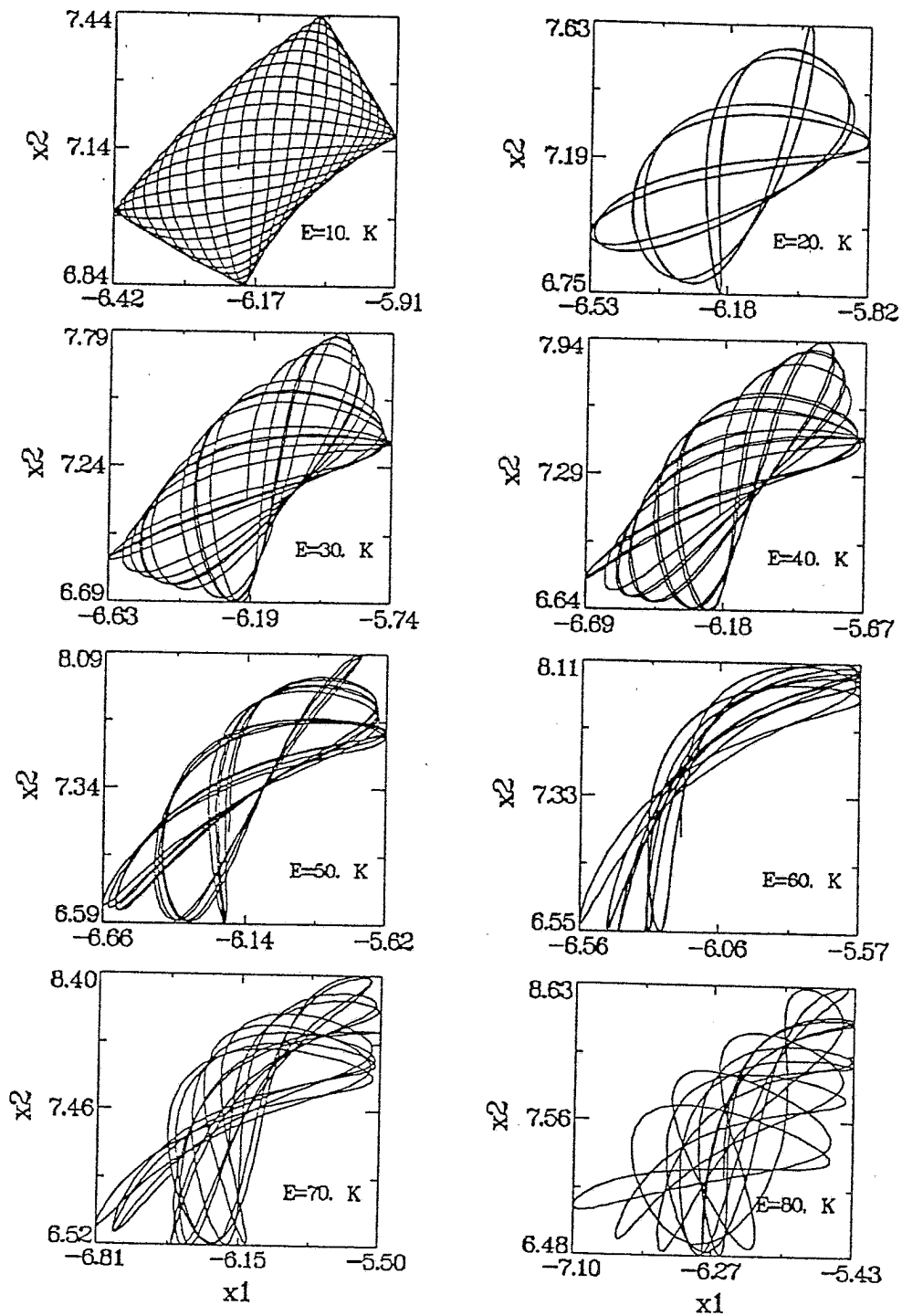
Αυτό που θα κάνουμε στη συνέχεια είναι να βρούμε τροχιές για κάποιο εύρος ενεργειών. Στα Σχήματα 9α,β,γ έχουμε τις τροχιές για $t = 2. t.u.$ και ενέργειες 1.-160. K (η ενέργεια της κάθε τροχιάς αναγράφεται στο σχήμα). Αρχικές συνθήκες είναι: $x_1 = -6.2$, $x_2 = 7.1$, $p_1 = 0.0$ και το p_2 ευρισκόμενο από την (δοσμένη και σταθερή) ενέργεια, δηλαδή:

$$p_i = \sqrt{2m_i(E - V(x_1, x_2) - p_j^2/2m_j)} \quad , \quad i = 1, j = 2 \text{ ή } i = 2, j = 1 \quad (10)$$

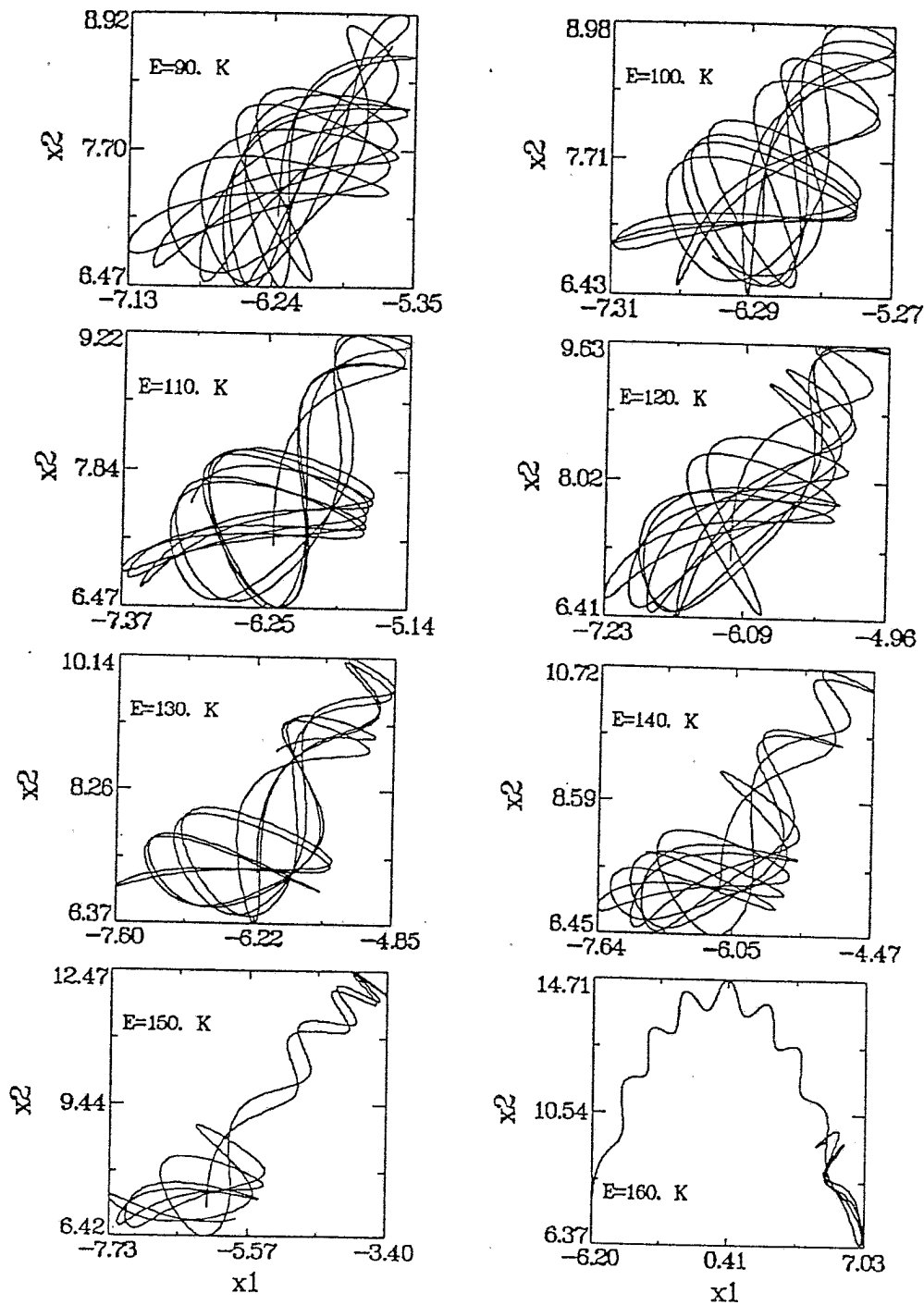
Με αυτόν τον τρόπο "ξεκινάμε" ουσιαστικά την κίνηση των ατόμων του μορίου από το σημείο ισορροπίας (περίπου) και με όλη την ενέργεια δοσμένη στον 2° βαθμό ελευθερίας (στην x_2 διεύθυνση). Βλέπουμε ότι για μικρές ενέργειες, μέχρι 50.-60. K η κίνηση είναι κανονική (ημιπεριοδική) και στην συνέχεια γίνεται χασοική. Τέλος σε μεγάλες ενέργειες (160. K), πάνω δηλαδή απ' το σάγμα, η τροχιά περνά και στο άλλο πηγάδι.



Σχήμα 9α. Ημιπεριοδικές τροχιές για ενέργειες 1,2,...,8 K
(αρχική ώθηση στη διεύθυνση x_2).



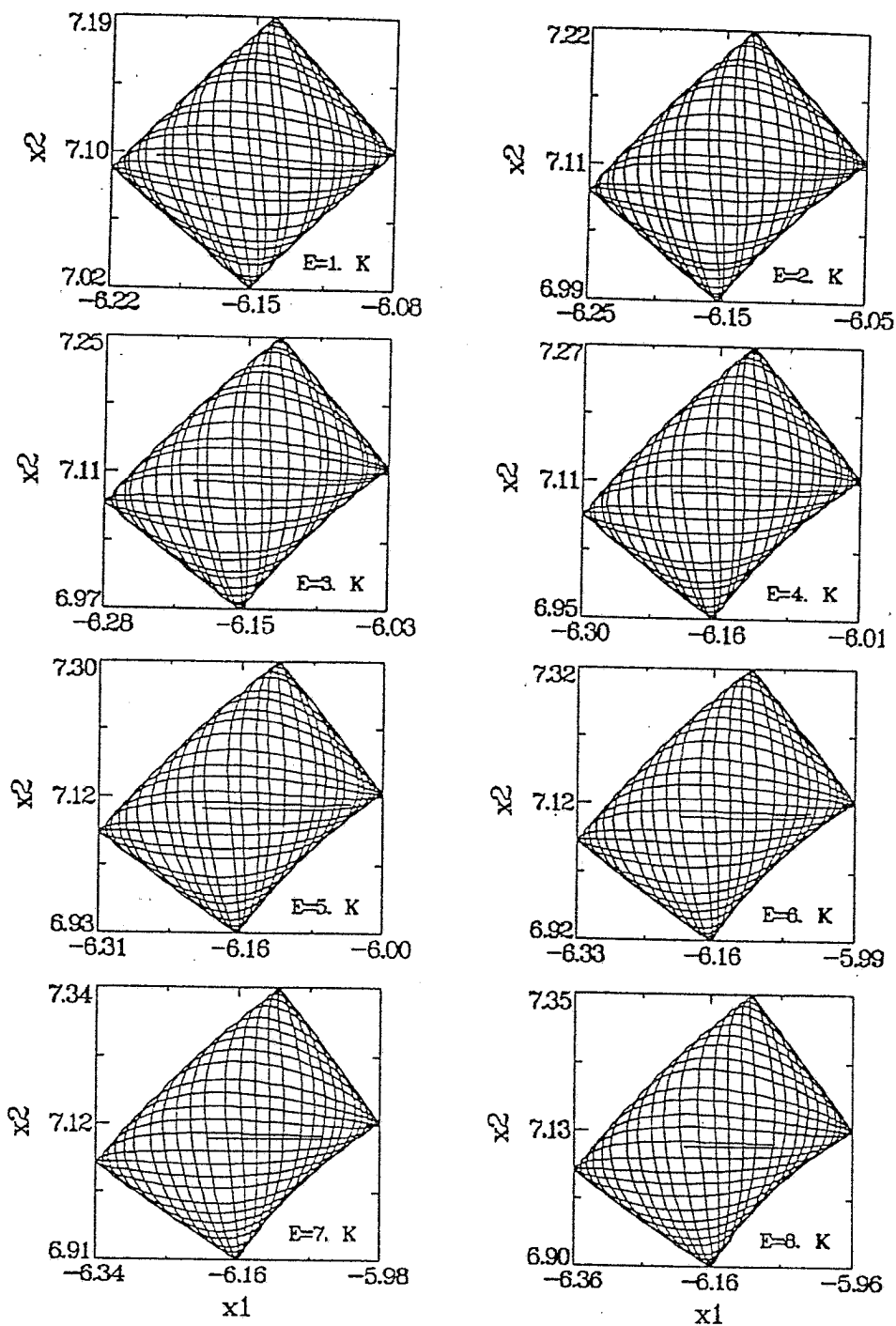
Σχήμα 9β. Ημιπεριοδικές τροχιές για ενέργειες 10,20,...,80 K
(αρχική ώθηση στη διεύθυνση x_2).



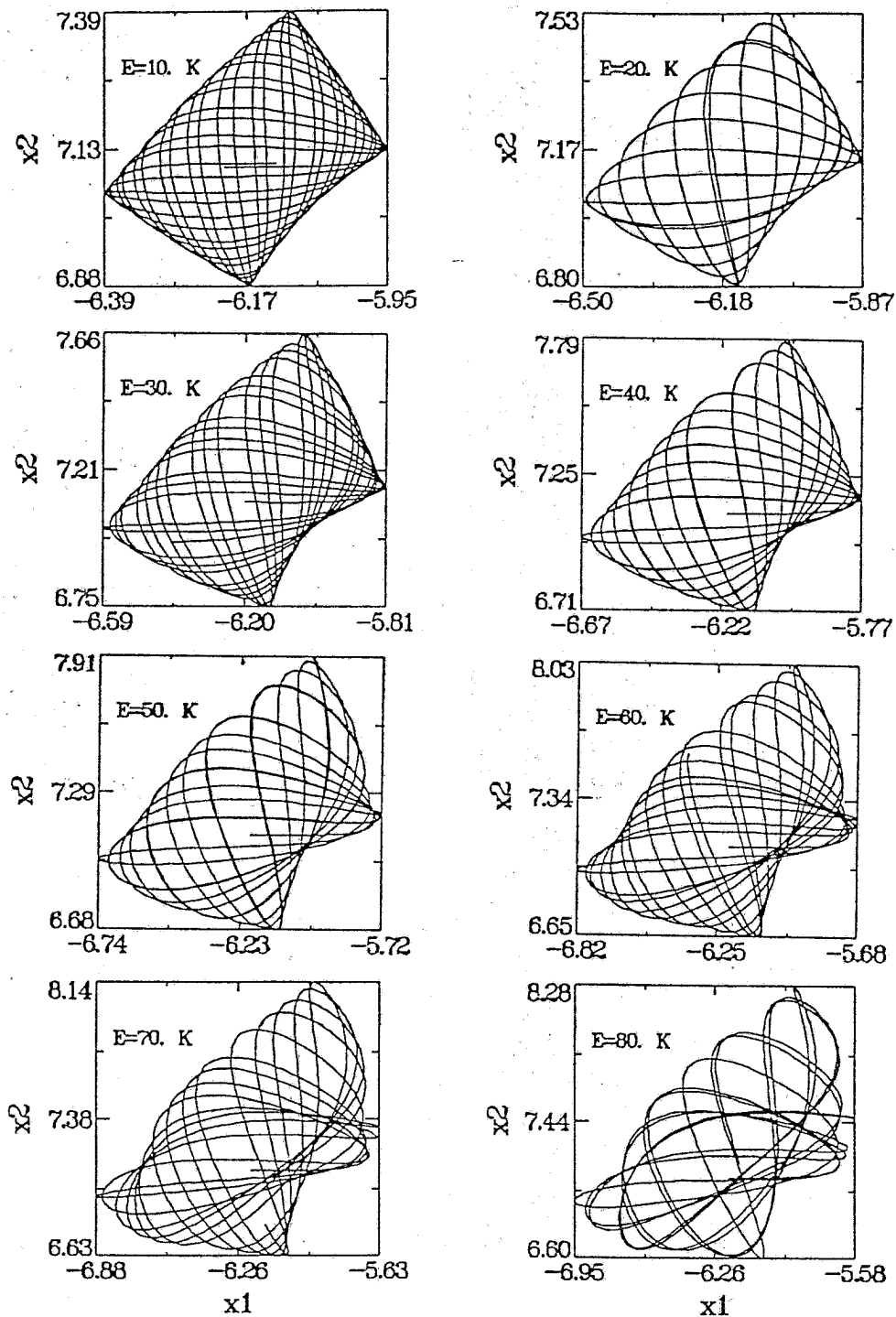
Σχήμα 9γ. Ημιπεριοδικές τροχιές για ενέργειες 90,100,...,160 K
(αρχική ώθηση στη διεύθυνση x_2).

Στη συνέχεια τα Σχήματα 10α,β,γ γίνανε με τον ίδιο ακριβώς τρόπο, με τη διαφορά ότι τώρα έχουμε $p_2 = 0.0$ και το p_1 ευρισκόμενο από την ενέργεια σύμφωνα με τον τύπο (10), δίνοντας δηλαδή όλη την ενέργεια στην x_1 διεύθυνση. Εδώ το χάος παρατηρείται μετά τα 80. Κ αλλά αυτό που σε πρώτη ματιά προκαλεί απορία είναι ότι ακόμα και σε ενέργειες πάνω από το σάγμα η τροχιά παραμένει παγιδευμένη (τουλάχιστον στη χρονική διάρκεια των 2. *t.u.*) στο ένα πηγάδι. Μια ματιά όμως πάλι στα Σχήματα 1 και 2 (και στο Σχήμα 7) που δίνουν το δυναμικό συναρτήσεων των διευθύνσεων x_1 και x_2 θα μας πείσει ότι είναι πολύ πιο εύκολο να... “σπρώξουμε το μπαλάκι” στην x_2 διεύθυνση για να περάσει το σάγμα παρά στην x_1 (που ουσιαστικά παρουσιάζεται σαν “άπειρος” τοίχος). Να πούμε τέλος ότι για τις συγκεκριμένες αρχικές συνθήκες και το συγκεκριμένο χρονικό διάστημα των 2. *t.u.* έπρεπε να φτάσουμε σε ενέργειες άνω των 525. Κ για να δούμε την τροχιά να περνά στο άλλο πηγάδι. Όπως όμως θα δούμε παρακάτω ακόμα και με 160. Κ η τροχιά περνά το σάγμα αρκεί να της δώσουμε μια... πίστωση χρόνου.

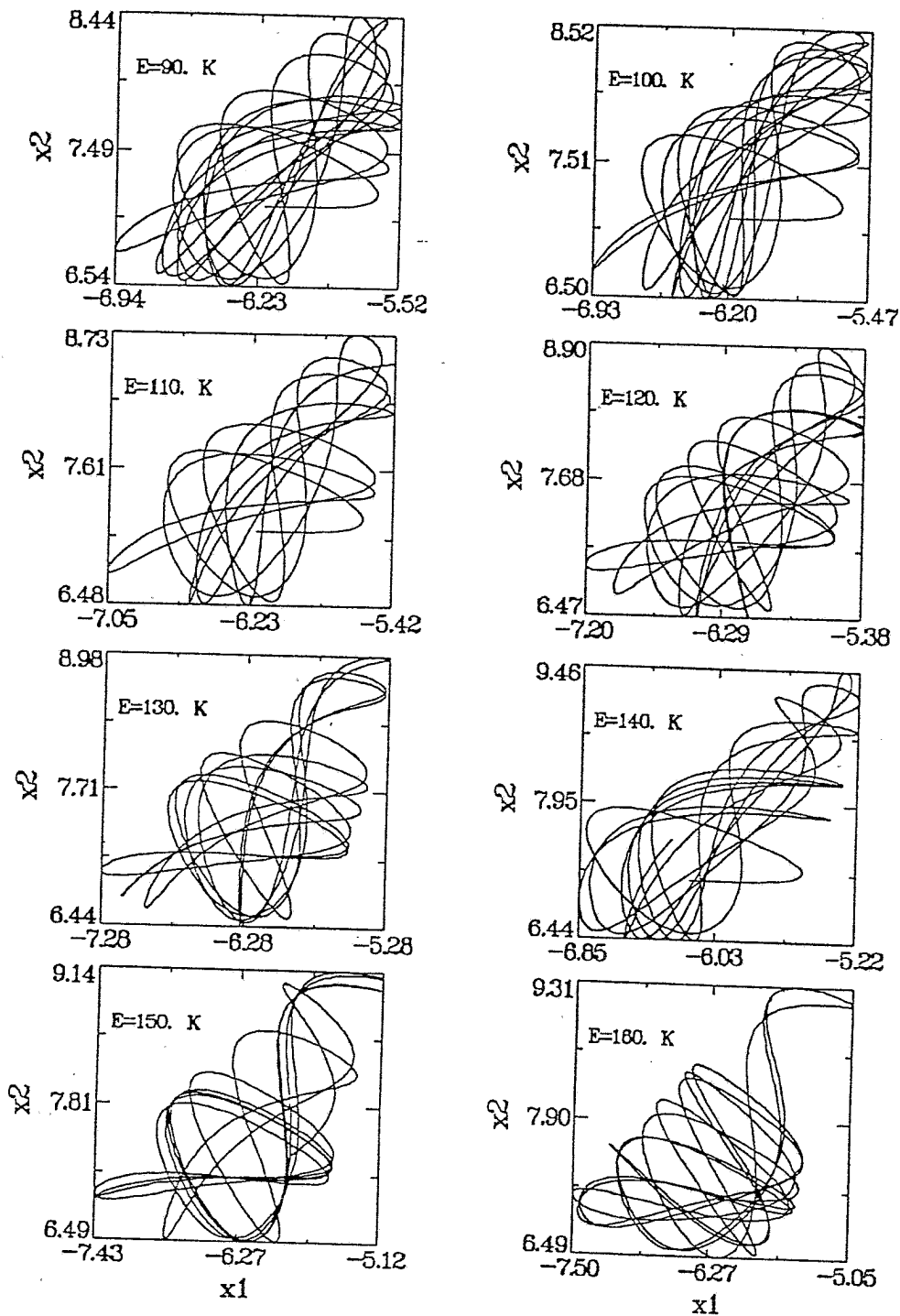
Στα διαγράμματα $E=5,20,50$ Κ των Σχημάτων 9α,β,γ (καθώς και στη συνέχεια στα διαγράμματα $E=20,40,50$ Κ των Σχημάτων 10α,β,γ) παρατηρούμε πως οι τροχιές είναι πολύ περισσότερο εντοπισμένες (όλα τα διαγράμματα είναι αποτέλεσμα ολοκλήρωσης για 2. *t.u.* και επομένως έχουν όλα την ίδια “πυκνότητα γραμμών”). Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι ο λόγος των χαρακτηριστικών συχνοτήτων ταλάντωσης (στις δύο διευθύνσεις x_1 και x_2) είναι κοντά σε ένα λόγο ακεραίων αριθμών και αυτό συνεισβάλλει για συντονισμό. Θα δούμε στη συνέχεια ότι όταν αυτό γίνεται, έχουμε δηλαδή $\frac{\omega_1}{\omega_2} = \frac{n}{m}$, τότε έχουμε περιοδική τροχιά. Οι τροχιές λοιπόν αυτές είναι “κοντά” σε αντίστοιχες περιοδικές, της ίδιας μορφολογίας.



Σχήμα 10α. Ημπεριοδικές τροχιές για ενέργειες 1,2,...,8 K (αρχική ώθηση στην διεύθυνση x_1).



Σχήμα 10β. Ημιπεριοδικές τροχιές για ενέργειες 10,20,...,80 K
(αρχική ώθηση στην διεύθυνση x_1).



Σχήμα 10γ. Ημιπεριοδικές τροχιές για ενέργειες 90,100,...,160 K
(αρχική ώθηση στην διεύθυνση x_1).

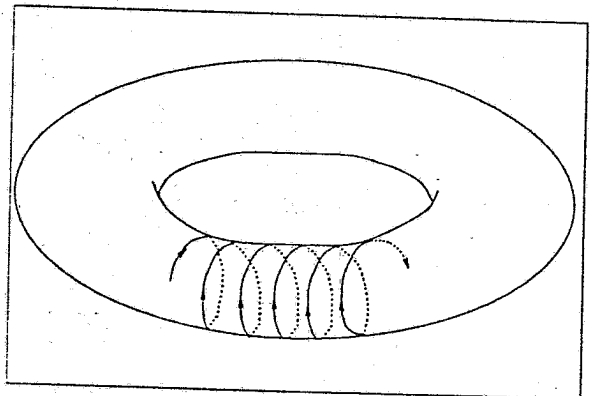
3 ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΑ POINCARÉ

3.1 Λίγη θεωρία περί διαγραμμάτων Poincaré

Εισερχόμαστε εδώ σε μια πιο ουσιαστική φάση της δουλειάς αυτής. Στη συνέχεια περιγράφουμε μια διαδικασία με την οποία μας δίδεται η δυνατότητα να προχωρήσουμε μερικά βήματα ακόμα προς τον τελικό μας στόχο, τον εντοπισμό, δηλαδή, του πιο ενδιαφέροντος “κομματιού” του φασικού χώρου, των περιοδικών τροχιών.

Αποδεικνύεται ότι σε ένα σύστημα N -βαθμών ελευθερίας μια τροχιά περιορίζεται (αν το σύστημα είναι ολοκληρώσιμο) σε ένα N -διάστατο χώρο [3, σελ. 17-19]. Με έναν κανονικό μετασχηματισμό μπορούμε να περάσουμε σε μεταβλητές δράσης-γωνίας [4] και έχειδειχτεί ότι τότε η τροχιά κινείται πάνω σε ένα N -διάστατο torus (σαμπρέλα).

Έτσι στην δικιά μας περίπτωση η τροχιά κινείται σε ένα διδιάστατο torus είναι δηλαδή σαν το διπλανό σχήμα. Αν η τροχιά είναι περιοδική κινείται πάνω στο torus και μετά από ορισμένες περιστροφές κλείνει στον εαυτό της. Αν είναι ημιπεριοδική δεν κλείνει ποτέ στον εαυτό της και σταδιακά καλύπτει όλη την

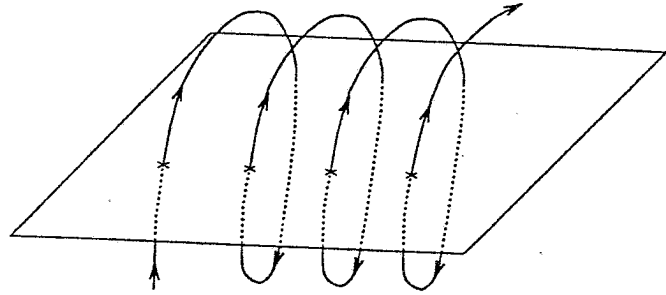


επιφάνεια του torus. Αν τέλος είναι χαοτική, τότε δεν κινείται πάνω σε torus αλλά καλύπτει όλον τον (ενεργειακά) διαθέσιμο χώρο.⁶

Από το τέλος του περασμένου αιώνα (εδώ και... πολλά χρόνια δηλαδή) ο Poincaré κατάλαβε ότι δεν ήταν ανάγκη να παρακολουθούμε την τρο-

⁶ Δύο έννοιες που είναι σχετικές με αυτά που συζητάμε τώρα είναι :
 εργοδικότητα πάνω σε torus (ημιπεριοδική τροχιά) : η τροχιά καλύπτει σταδιακά όλη την επιφάνεια του torus,
 εργοδικότητα πάνω σε ενεργειακή επιφάνεια (χαοτική τροχιά) : η τροχιά καλύπτει σταδιακά όλο τον χώρο που περικλείεται από την ενεργειακή επιφάνεια, την επιφάνεια δηλαδή που οριοθετεί την μέγιστη ενέργεια.

χιά σε όλο το μήκος της και σε όλη την χρονική της διάρκεια, αλλά μόνο σε τακτά χρονικά διαστήματα. Έτσι σκέφτηκε να... κόψει κάθετα ένα torus και να παρακολουθεί το ίχνος που αφήνει η τροχιά κάθε φορά που περνά από το σταθερό επίπεδο τομής. Η... γέννηση της επιφάνειας τομής *Poincaré* (*Poincaré Surface of Section*) ήταν πλέον γεγονός! Ένα βασικό χαρακτηριστικό της διαδικασίας αυτής είναι ότι παίρνουμε μόνο τα σημεία εκείνα που προέρχονται από την τροχιά, όταν αυτή κόβει το επίπεδο κατά μια συγκεκριμένη και προκαθορισμένη φορά.

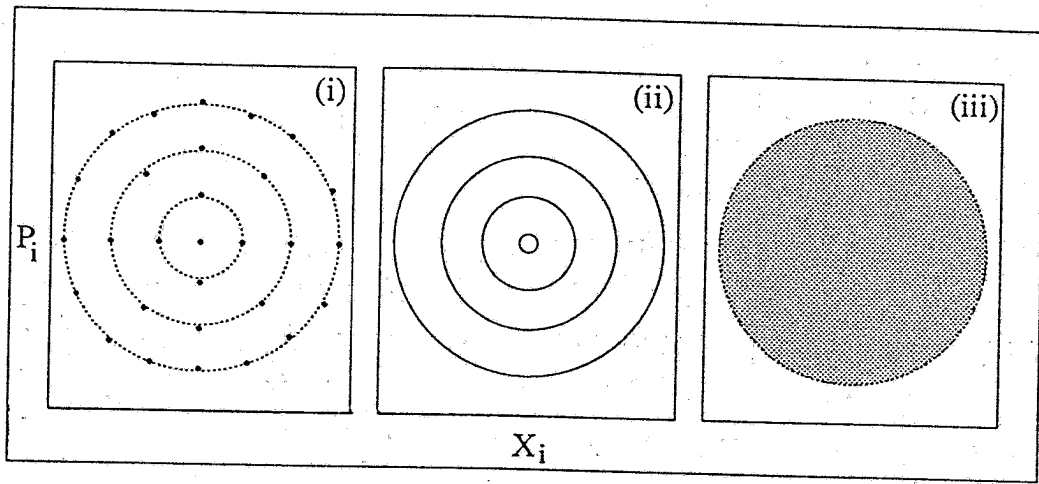


Έτσι έχουμε περιορίσει τις διαστάσεις μας κατά μία (αφού το σταθερό επίπεδο είναι ουσιαστικά μελέτη της τροχιάς μόνο όταν μια της συντεταγμένη παίρνει συγκεκριμένη τιμή) και τις ορμές μας κατά μία (αφού μπορούμε να λύσουμε την εξίσωση $H = E = \text{σταθ.} = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(x_1, x_2)$ ως προς κάποιο από τα δύο p_i και να το καθορίσουμε (Εξ. (10)) πλήρως από την σταθερή ενέργεια).

Για να μην δημιουργηθεί καμιά σύγχυση πρέπει να τονίσουμε εδώ ότι για να πάρουμε μια τομή *Poincaré* δεν επεμβαίνουμε στην διαδικασία της ολοκλήρωσης παγώνοντας μια συντεταγμένη και το πρόσημο της συζυγούς ορμής (το να διαλέξουμε μια συγκεκριμένη φορά "κοπής" της επιφάνειας τομής ισοδυναμεί μαθηματικά με το να διαλέξουμε ένα καθορισμένο πρόσημο για την ορμή της). Αυτό που κάνουμε είναι να ολοκληρώνουμε κανονικά τις εξισώσεις μας και απλά να δεχόμαστε σαν outputs μόνο τα σημεία x_i, p_i για τα οποία τα αντίστοιχα x_j, p_j ικανοποιούν τα χαρακτηριστικά μιας τομής *Poincaré* ($x_j = \text{σταθερό}, p_j = \text{σταθερό}$ πρόσημο, όπου i, j είναι $i = 1, j = 2$ ή $i = 2, j = 1$). Ζωγραφίζοντας τώρα τα x_i, p_i έχουμε μια τομή που μπορεί να μοιάζει σαν μια από αυτές του Σχήματος 11.

Ας εξηγήσουμε λίγο το Σχήμα 11 : (i) Είπαμε ότι μια περιοδική τροχιά κινείται πάνω στην επιφάνεια του torus και μετά από συγκεκριμένο χρονικό διάστημα (μιας περιόδου) κλείνει στον εαυτό της. Έτσι στην τομή θα

παρουσιάζονται ορισμένα σημεία, που θα είναι πάντα τα ίδια, και αρκεί να ολοκληρώσουμε για μια και μοναδική περίοδο για να πάρουμε την μέγιστη πληροφορία από μια τέτοια τομή, μιας και στην συνέχεια τα καινούρια σημεία θα πέφτουν πάντα πάνω στα παλιά. (ii) Μια ημιπεριοδική τροχιά δεν κλίνει στον εαυτό της και μετά από άπειρο χρόνο καλύπτει όλο το torus.



Σχήμα 11. (i) Περιοδικές Τροχιές, (ii) Ημιπεριοδικές Τροχιές, (iii) Χαστικές Τροχιές.

Έτσι μια τομή θα είναι ουσιαστικά μια τομή του ίδιου του torus, δηλαδή (στην πιο απλή του μορφή) ένας κύκλος. Χρειάζεται άπειρος χρόνος για να πάρουμε την μέγιστη πληροφορία -δηλαδή έναν πραγματικά πλήρη κύκλο, αλλά στην πραγματικότητα σε ακριβώς περιορισμένο χρονικό διάστημα έχουμε αρκετή πληροφορία ώστε να θεωρούμαστε ικανοποιημένοι. (iii) Τέλος μια χαστική τροχιά διαγράφει όλη την ενεργειακή επιφάνεια και έτσι η τομή θα μας δώσει την μορφολογία αυτής της επιφάνειας (συνήθως είναι σαν... αυγό). Και εδώ θέλουμε θεωρητικά άπειρο χρόνο αλλά με κάπως μεγάλο χρονικό διάστημα είμαστε ικανοποιημένοι.

Όσον αφορά τους χρόνους, ενδεικτικά αναφέρουμε πως στους υπολογισμούς που θα δείτε παρακάτω όσον αφορά τις ημιπεριοδικές τροχιές χρησιμοποιήσαμε το πολύ μέχρι 2000 σημεία (μέχρι 1000 τις περισσότερες φορές ήταν αρκετά), ενώ για τις χαστικές χρειαστήκαμε από 5000 έως 25000 ση-

μεία. Και φυσικά ο χρόνος ολοκλήρωσης σχετίζεται, όπως αντιλαμβάνεστε, άμεσα με τον αριθμό των σημείων που ζητάμε να απεικονίσουμε.

3.2 Προσεγγίζοντας αριθμητικά τα διαγράμματα Poincaré

Φτάσαμε λοιπόν ένα βήμα πριν ζητήσουμε από τον υπολογιστή να μας κάνει όλη αυτή τη δουλειά. Και το ερώτημα που τίθεται τώρα είναι τι ακριβώς πρέπει να του ζητήσουμε να μας κάνει.

Θα έλεγε κανείς εύλογα πως θα του πούμε να μας ζωγραφίσει τα x_i, p_i όταν $x_j =$ κάποια σταθερή τιμή και $p_j >$ ή < 0 (κλασική διάδα συνθηκών είναι $x_j = x_j^{\text{ισορροπίας}}$ και $p_j > 0$). Σε μια αριθμητική όμως ολοκλήρωση η πιθανότητα να γίνει μια ποσότητα ίση με μια άλλη είναι πρακτικά μηδέν. Και εδώ υπεισέρχεται η έννοια της ανοχής (tolerance). Ζητάμε, δηλαδή, αντί για $x_j = x_j^0$ να είναι $x_j = x_j^0 \pm \Delta x$ (με άλλα λόγια: $x_j^0 - \Delta x \leq x_j \leq x_j^0 + \Delta x$) και το Δx είναι η ανοχή. Με αυτό τον τρόπο μετατρέπουμε ουσιαστικά την επιφάνεια τομής σε “όγκο τομής” αφού δεχόμαστε σαν “επιφάνεια” όλες τις επιφάνειες που είναι μέσα στην περιοχή $[x_j^0 - \Delta x, x_j^0 + \Delta x]$. Αν όμως διαλέξουμε το Δx πολύ-πολύ μικρό τότε κανένα πρόβλημα.

Μια ακόμα πιο έξυπνη ιδέα είναι να ζητήσουμε να μας γράψει τα x_i, p_i όταν το $p_j >$ ή < 0 . και το x_j έχει περάσει το επίπεδο. Αυτό μαθηματικά ορίζεται σαν:

$$(x_j - x_j^0)^{\text{πριν}} \times (x_j - x_j^0)^{\text{μετά}} \leq 0. \quad (11)$$

Αυτός ο τρόπος είναι πολύ πιο σίγουρος από το $x_j^0 \pm \Delta x$ και βέβαια δίνει πάντα σημείο στην τομή όταν η τροχιά την περάσει (με το $\pm \Delta x$ υπήρχε περίπτωση αν το βήμα ολοκλήρωσης ήταν αρκετά μεγάλο η τροχιά να περάσει την επιφάνεια τομής χωρίς να βρεθεί κάποια στιγμή μέσα στον “όγκο τομής” για να πάρουμε το σημείο που θέλουμε).

Ωραία... , βρήκαμε έναν επαρκή τρόπο να ορίσουμε τις συνθήκες τομής και να παίρνουμε, κάθε φορά που περνά η τροχιά από την επιφάνεια, ένα σημείο. Τελειώσαμε; Όχι βέβαια. Ένα μεγάλο ερώτημα που τίθεται τώρα, είναι το εξής: πως εμείς θα ορίσουμε ακριβώς την επιφάνεια τομής; και το

θέλουμε αυτό γιατί δεν φτάνει μόνο να περνά η τροχιά από την επιφάνεια x_j^0 αλλά να παίρνουμε σαν outputs εκείνα τα x_i, p_i τα οποία αντιστοιχούν ακριβώς στο x_j^0 και όχι σε κάποιο παραπλήσιό του. Αυτό δεν ικανοποιείται, όπως καταλαβαίνετε, με την συνθήκη (11) αφού μπορεί να ικανοποιείται η συνθήκη αλλά το “μετά” σημείο να είναι αρκετά μακριά από το x_j^0 , έτσι που τα αντίστοιχα x_i, p_i να μην είναι αυτά που θέλουμε.

Κοντολογείς, αυτό που κάνουμε είναι το εξής: μόλις ικανοποιηθεί η συνθήκη (11) παίρνουμε τα $x_j^{\text{μετά}}$ και $p_j^{\text{μετά}}$ καθώς και τα αντίστοιχα x_i, p_i και θεωρώντας τα ως αρχικές συνθήκες ολοκληρώνουμε μια φορά προς τα πίσω μέχρι το x_j^0 και έτσι έχουμε ακριβώς τα $x_{i,j}, p_{i,j}$ που αντιστοιχούν στο x_j^0 . Πως όμως ολοκληρώνουμε προς τα πίσω για να πέσουμε ακριβώς στο x_j^0 , αφού δεν ξέρουμε την χρονική διαφορά $x_j^{\text{μετά}} - x_j^0$; Εδώ απαντάμε με τη μέθοδο του Henon [5]. Έχουμε τις τέσσερις εξισώσεις *Hamilton* (που τις γράφουμε ως εξής):

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= f_1 \\ \dot{x}_2 &= f_2 \\ \dot{p}_1 &= f_3 \\ \dot{p}_2 &= f_4 \end{aligned}, \quad \text{όπου } f_i = f_i(x_1, x_2, p_1, p_2),$$

διαιρούμε όλες με την εξίσωση η οποία περιέχει την χρονική παράγωγο της μεταβλητής που θέλουμε για τομή *Poincaré* (έστω εδώ την x_2):

$$\frac{\dot{x}_1}{\dot{x}_2} = \frac{dx_1}{dx_2} = \frac{f_1}{f_2} \quad (12)$$

$$1 = 1 \quad (13)$$

$$\frac{\dot{p}_1}{\dot{x}_2} = \frac{dp_1}{dx_2} = \frac{f_3}{f_2} \quad (14)$$

$$\frac{\dot{p}_2}{\dot{x}_2} = \frac{dp_2}{dx_2} = \frac{f_4}{f_2} \quad (15)$$

Μπορούμε να κρατήσουμε και την εξίσωση $\dot{x}_2 = f_2$ ανεστραμμένη σαν τέταρτη εξίσωση δηλαδή:

$$\frac{dt}{dx_2} = \frac{1}{f_2} \quad (16)$$

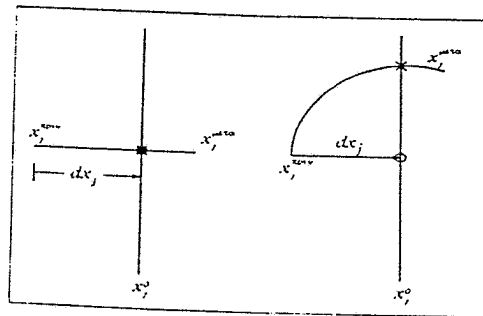
Ολοκληρώνουμε τώρα τις (12),(14),(15),(16) από $x_j^{\text{μετά}}$ μέχρι x_j^0 και έχουμε έτσι τα τελικά μας σημεία να είναι αυτά που “πέφτουν” ακριβώς πάνω στο *Poincaré* επίπεδο. Με αυτόν τον απλό και γρήγορο τρόπο αποποιούμαστε την άγνοιά μας για την χρονική διαφορά μεταξύ $x_j^{\text{μετά}}$ και x_j^0 και εκμεταλλευόμαστε στο έπακρο αυτό που πραγματικά ξέρουμε... την απόσταση δηλαδή μεταξύ $x_j^{\text{μετά}}$ και x_j^0 .

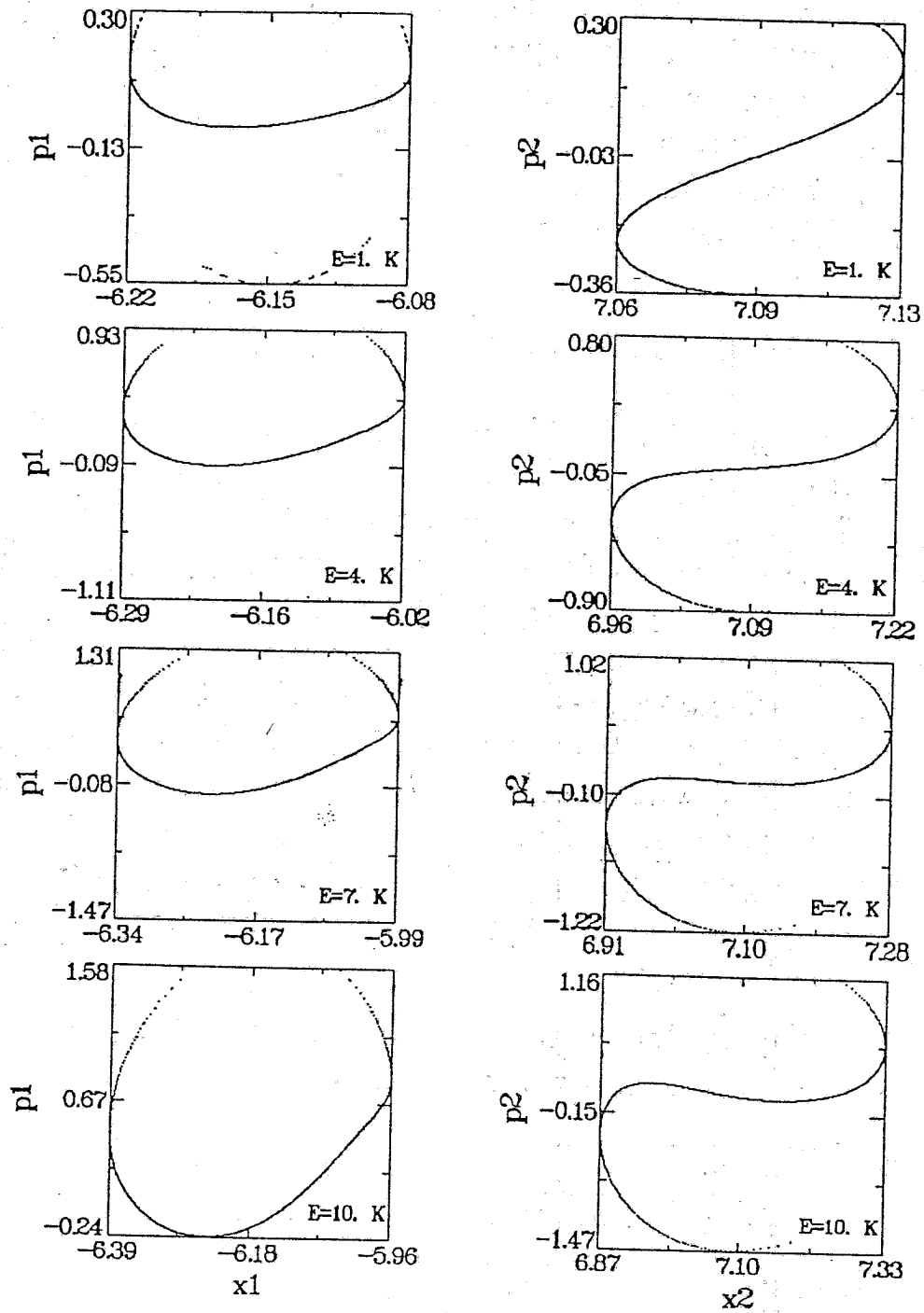
3.3 Αποτελέσματα πάνω στο μοντέλο μας

Και αφού περιγράψαμε τη μέθοδο που χρησιμοποιήσαμε ας παραθέσουμε τώρα κάποια γραφήματα διαγραμμάτων *Poincaré* για το σύστημά μας. Στα Σχήματα 12 α,β,γ βλέπουμε για διάφορες ενέργειες κανονικές περιοχές (tori) και χαοτικές περιοχές. Οι αρχικές συνθήκες για τις τροχίες αυτές (των οποίων τα... ίχνη βλέπουμε εδώ) είναι $x_1 = -7.1, x_2 = 6.2, p_2 = 0$. και το p_1 ευρισκόμενο από την ενέργεια (τύπος (10)). Στη δεξιά μεριά έχουμε απεικονίσεις (x_1, p_1) με συνθήκες $(x_2 = 6.2, p_2 > 0)$ και στην αριστερή (x_2, p_2) με συνθήκες $(x_1 = 7.1, p_1 > 0)$. Παρατηρήστε ότι ως σταθερό επίπεδο παίρνουμε κάθε φορά αυτό που περνά (περίπου) από το σημείο ισορροποίας και αυτό για εύλογους λόγους (ξεκινώντας την τροχία από τη θέση ισορροποίας -και αν η κίνηση είναι δέσμια (δεν έχουμε αρκετή ενέργεια ώστε να “σπάσει” το μόριο) -τότε η τροχία του μορίου πάντα θα περνά απ’ αυτό το σημείο).

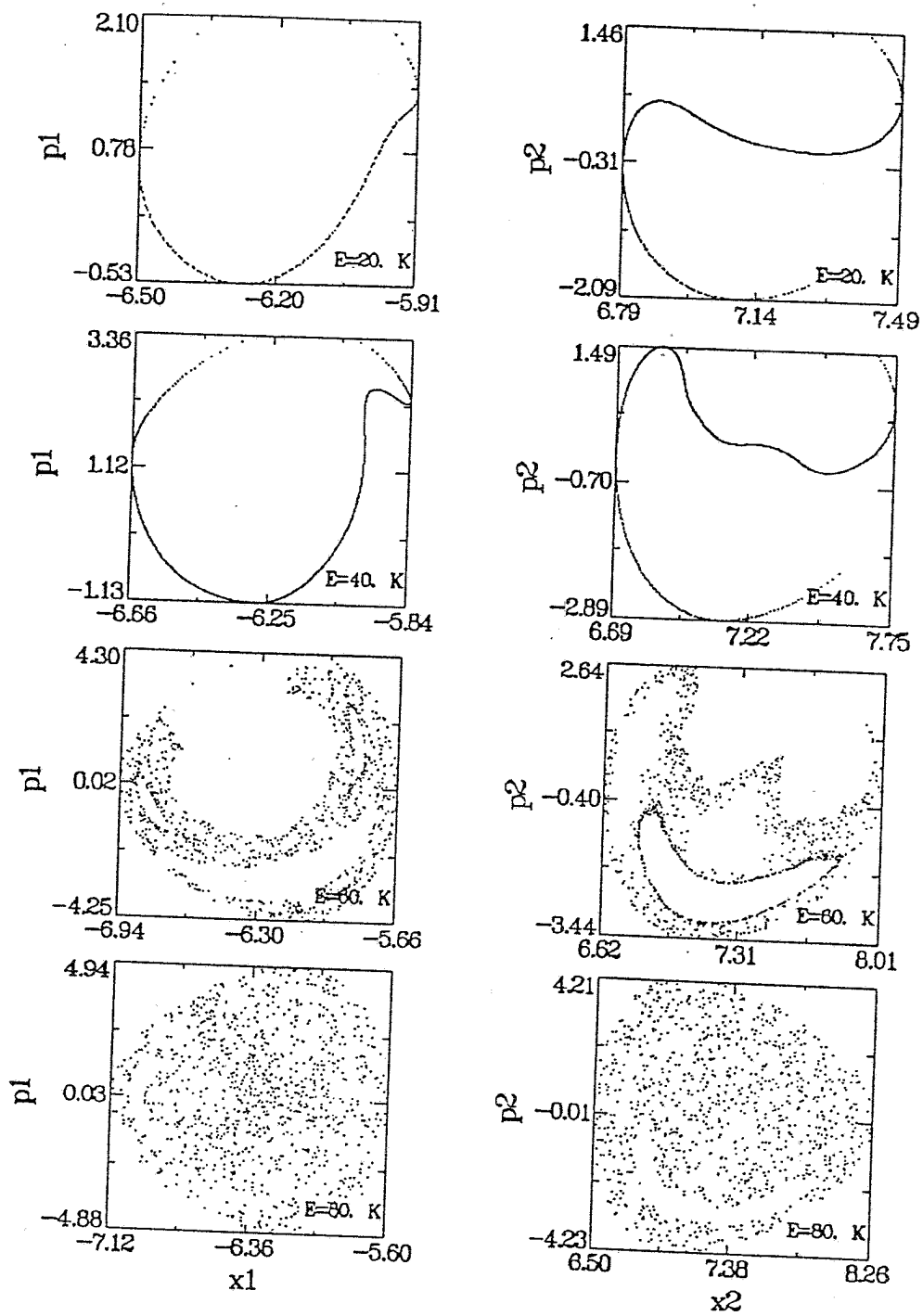
Μερικές παρατηρήσεις: μέχρι τα 40.-50. Κ η κίνηση είναι κανονική (tori) και από τα 100. Κ και πάνω έχουμε χαοτική κίνηση. Ανάμεσα στα

⁷ μια άλλη μέθοδος που κάνει την ίδια δουλειά είναι η γραμμική προσέγγιση: από την εξίσωση $\frac{dx_j}{dt} = f_j$ παίρνουμε $dt = dx_j \frac{1}{f_j}$ και αν πάρουμε σαν $dx_j = x_j^0 - x_j^{\text{πριν}}$ τότε βρίσκουμε ένα dt που αν το θέσουμε σαν ολικό χρόνο ολοκλήρωσης με ένα βήμα και αρχικές συνθήκες $(x_{i,j}, p_{i,j})^{\text{πριν}}$ πέφτουμε ακριβώς πάνω στο x_j^0 *Poincaré* επίπεδο. Το κακό μ’ αυτή την μέθοδο είναι το... ονομά της. Είναι δηλαδή ότι είναι γραμμική. Με άλλα λόγια πρέπει το τμήμα $(x_j^{\text{πριν}}, x_j^{\text{μετά}})$ και το επίπεδο x_j^0 να είναι κάθετα, αλλιώς η προσέγγιση πέφτει δίπλα στο σημείο που θέλουμε και όχι πάνω του.

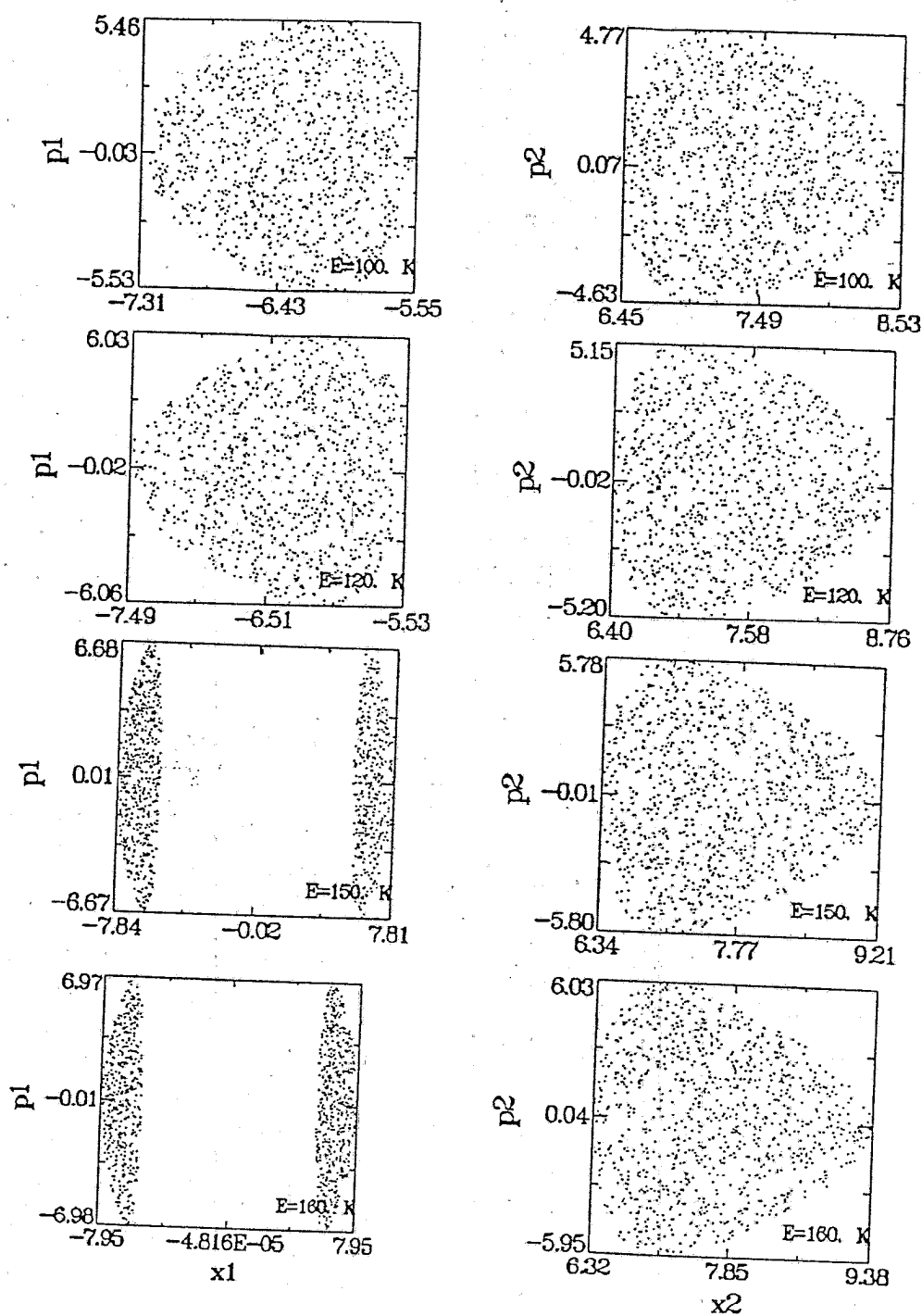




Σχήμα 11α. Διαγράμματα Poincaré για χαμηλές ενέργειες.



Σχήμα 11β. Διαγράμματα Poincaré για μεσαίες ενέργειες.



Σχήμα 11γ. Διαγράμματα Poincaré για μεγάλες ενέργειες.

50. και τα 100. Κ (περίπου) η κίνηση είναι χαοτική, έχοντας όμως και μερικές κανονικές περιοχές. Βλέπουμε δηλαδή στα διαγράμματα “σκόρπια” σημεία που όμως σε ορισμένες περιοχές “αφήνουν” κενές νησίδες. Αυτό δείχνει πως στην ίδια ενέργεια έχουμε (ανάλογα με τις αρχικές συνθήκες) χαοτικές και κανονικές κινήσεις. Αν δηλαδή διαλέξουμε αρχικές συνθήκες μέσα στις κενές νησίδες $(x_i, p_i, x_j^0$ και p_j από τον τύπο (10)) τότε θα δούμε ίχνη κανονικών κινήσεων, δηλαδή τορί. Αυτό θα γίνει στην συνέχεια, όπου και θα δούμε πως μπορεί κανείς να “γεμίσει” ένα *Poincaré* διάγραμμα με κανονικές και χαοτικές περιοχές. Τέλος βλέπουμε πως σε ενέργειες πάνω από το σάγμα (στα διαγράμματα 150., 160. Κ) η τροχιά περνά (και αφήνει ίχνη) και στα δύο πηγάδια, αλλά αυτό φαίνεται μόνο στα (x_1, p_1) διαγράμματα αφού μόνο εκεί το επίπεδο τομής ($x_2^0 = 6.2$) είναι τέτοιο ώστε να μας επιτρέπει να δούμε κάτι τέτοιο. Αντίθετα, στα (x_2, p_2) διαγράμματα το σταθερό επίπεδο x_1^0 είναι τοποθετημένο μόνο στο ‘αριστερό’ πηγάδι ($x_1^0 = -7.1$) και έτσι βλέπουμε ένα ίχνος.

3.4 Περιστρεφόμενα διαγράμματα Poincaré

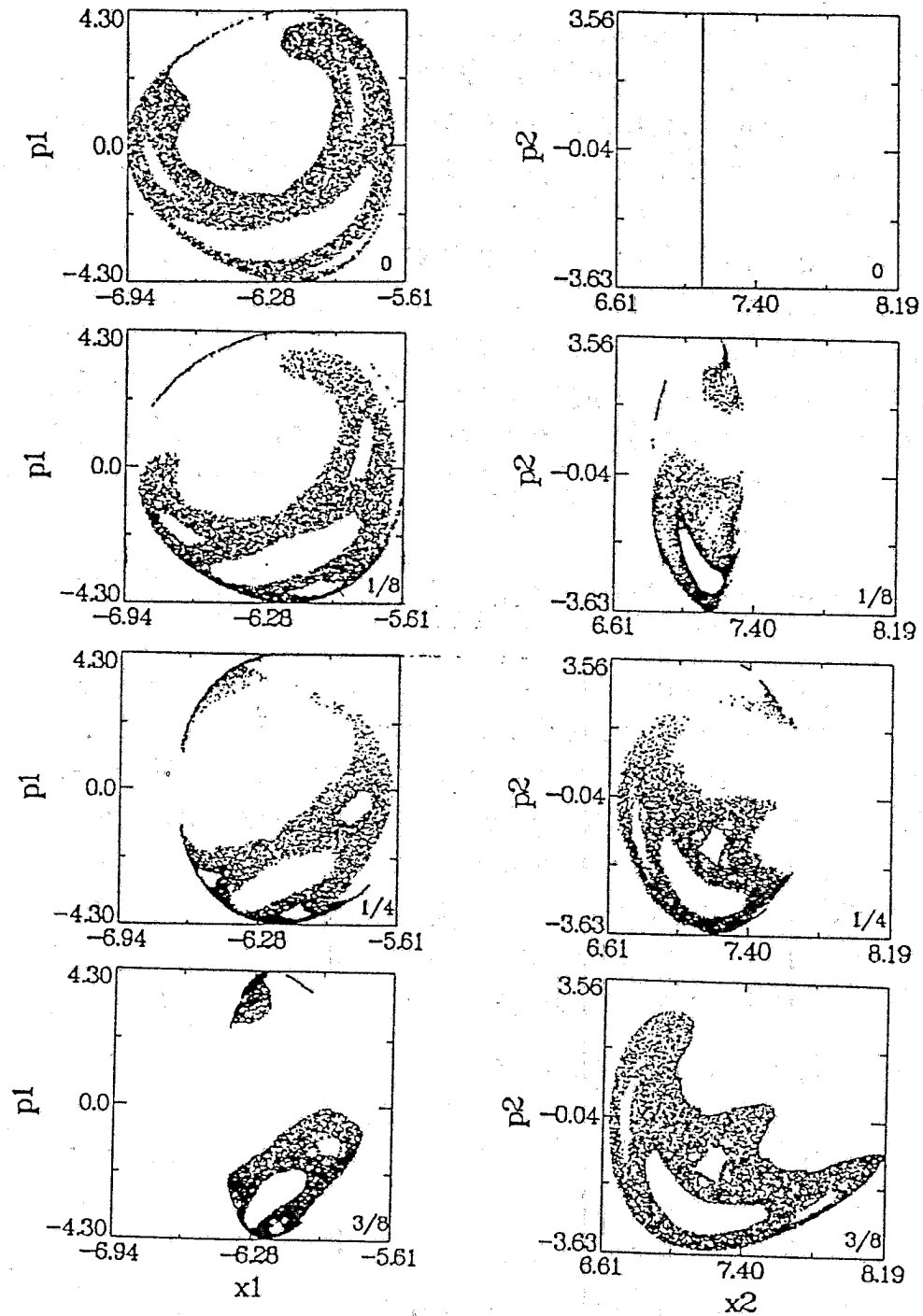
Ένα πρόβλημα που κληθήκαμε να αντιμετωπίσουμε στη συνέχεια ήταν να... γεμίσουμε ορισμένα διαγράμματα που παρουσίαζαν ενδιαφέρον. Και ως τέτοια χαρακτηρίζονται αυτά που παρουσιάζουν τάξη και χάος, όπως τα E=60. Κ στο Σχήμα 11β. Αυτό όμως που μας κίνησε την περιέργεια ήταν πόσο θα άλλαζε η εικόνα του γραφήματος αν αντί να κρατάμε σταθερό ένα επίπεδο, το περιστρέφαμε. Αν δηλαδή με κάποιο τρόπο, που θα περιγράψουμε στη συνέχεια, περιστρέφαμε το επίπεδό μας, ως προς το κέντρο του μέχρι 180° ώστε να καλύψουμε όλο τον χώρο που καταλαμβάνει η τροχιά.

Και αυτό κάναμε! Πήραμε το διάγραμμα E=60. Κ του Σχήματος 11β και αντί να έχουμε $x_1 =$ σταθερό ή $x_2 =$ σταθερό φτιάξαμε έναν γραμμικό συνδυασμό τους. Η εξίσωση του επιπέδου (γραμμικού συνδυασμού των x_1, x_2) βγαίνει ως εξής :

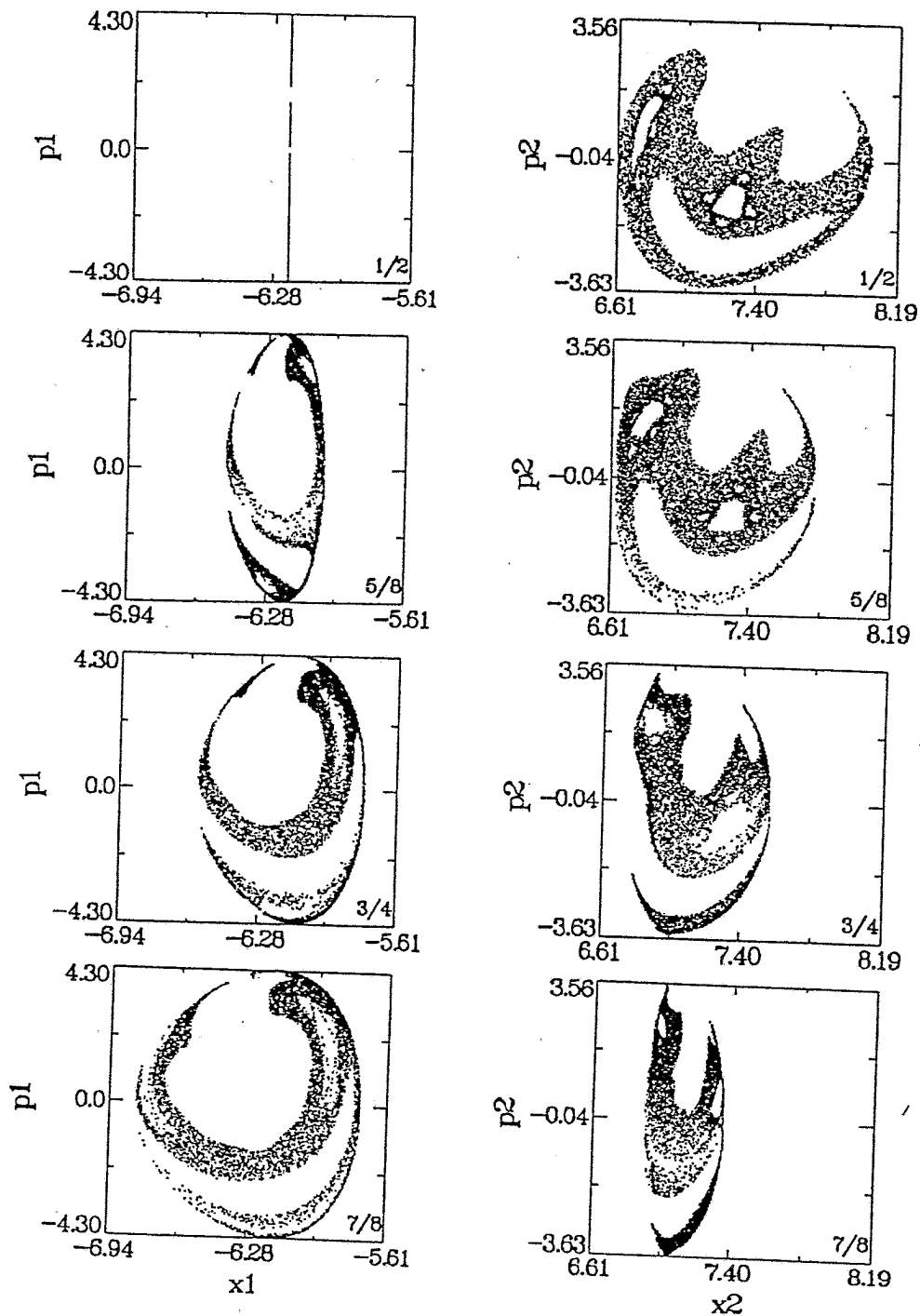
Θεωρώντας τα όρια του γραφήματος E=60. Κ του Σχήματος 10β

$$x_1^i = -6.82, \quad x_1^f = -5.68, \quad x_2^i = 6.65, \quad x_2^f = 8.03$$

3 ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΑ POINCARÉ



Σχήμα 12α. Στροφές του αυτού διαγράμματος Poincaré ($E=60$. K).



Σχήμα 12β. Στροφές του αυτού διαγράμματος Poincaré ($E=60$. K).

βρίσκουμε το κέντρο του, που είναι

$$x_1^m = x_1^i + \frac{1}{2}(x_1^f - x_1^i) = -6.25$$

$$x_2^m = x_2^i + \frac{1}{2}(x_2^f - x_2^i) = 7.34$$

Η εξίσωση του σταθερού επιπέδου τομής, το οποίο περνά από το κέντρο του γραφήματος είναι $x_2 = \alpha x_1 + \beta$ όπου τα α, β είναι:

$$\alpha = \tan \theta, \quad \theta \in [0^\circ, 180^\circ]$$

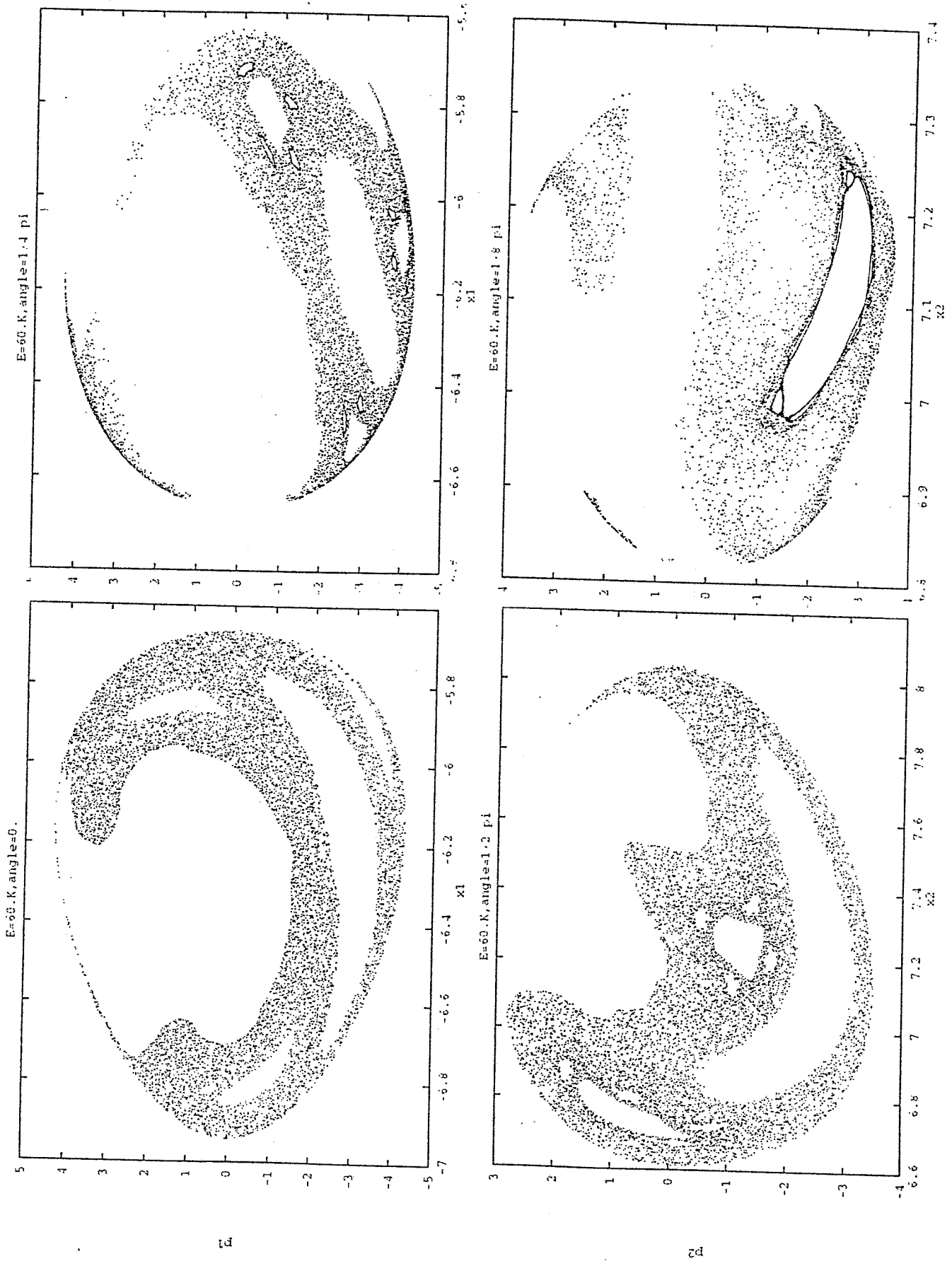
$$x_2^m = \alpha x_1^m + \beta \Rightarrow \beta = -\alpha x_1^m + x_2^m$$

όπου θ η γωνία στροφής η οποία καθορίζεται κατά βούληση. Έτσι αν $x_5 = x_2 - \alpha x_1 - \beta$ τότε η συνθήκη τομής του σταθερού επιπέδου θα είναι $x_5^{\text{πριν}} \times x_5^{\text{μετά}} < 0$ και ο παράγοντας με τον οποίο θα διαιρέσουμε τις τέσσερις εξισώσεις του Hamilton ($\dot{x}_i = f_i, \quad i = 1, 4$) για τη μέθοδο του Henon θα είναι τώρα :

$$\dot{x}_5 = \dot{x}_2 - \alpha \dot{x}_1 = f_2 - \alpha f_1$$

Κάνοντας όλα αυτά και κρατώντας κάθε φορά μια ορμή θετική ($p_1 > 0$ για διάγραμμα (x_2, p_2) και $p_2 > 0$ για (x_1, p_1)) καταλήγουμε στα παρακάτω Σχήματα 12α,β. Βλέπουμε πόσο αλλάζει η εικόνα ανάλογα με τη γωνία (η οποία αναγράφεται κάτω δεξιά του κάθε γραφήματος σαν κλάσμα του π). Επειδή έχουμε κρατήσει τα όρια των γραφημάτων σταθερά, δεν βλέπουμε πολλές αλλαγές, τουλάχιστον όσον αφορά την πληροφορία -την οποία και επιδιώκουμε με αυτή την τεχνική. Αν όμως αφήσουμε τα γραφήματα να "απλωθούν" σε όλη την έκταση του πλαισίου τότε βλέπουμε πόσο δραματικά αλλάζει η πληροφορία. Το Σχήμα 13 το οποίο είναι $(x_1, p_1, \theta = 0, \frac{\pi}{4})$ και $(x_2, p_2, \theta = \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{8})$ δείχνουν πραγματικά αυτή τη διαφορά.

Τέλος διαλέγοντας τις... καλύτερες γωνίες, που κατά τη γνώμη μας ήταν $\theta = 0$ για (x_1, p_1) και $\theta = 3\pi/8$ για (x_2, p_2) προσπαθήσαμε να γεμίσουμε όσο ήταν δυνατό αυτά τα δύο γραφήματα. Η ιδέα ήταν να πάρουμε αρχικές συνθήκες μέσα σε περιοχές κανονικότητας και να ξανακάνουμε *Poincaré*. Αυτό που είδαμε (και που φαίνεται στα Σχήματα 14 και 15) ήταν



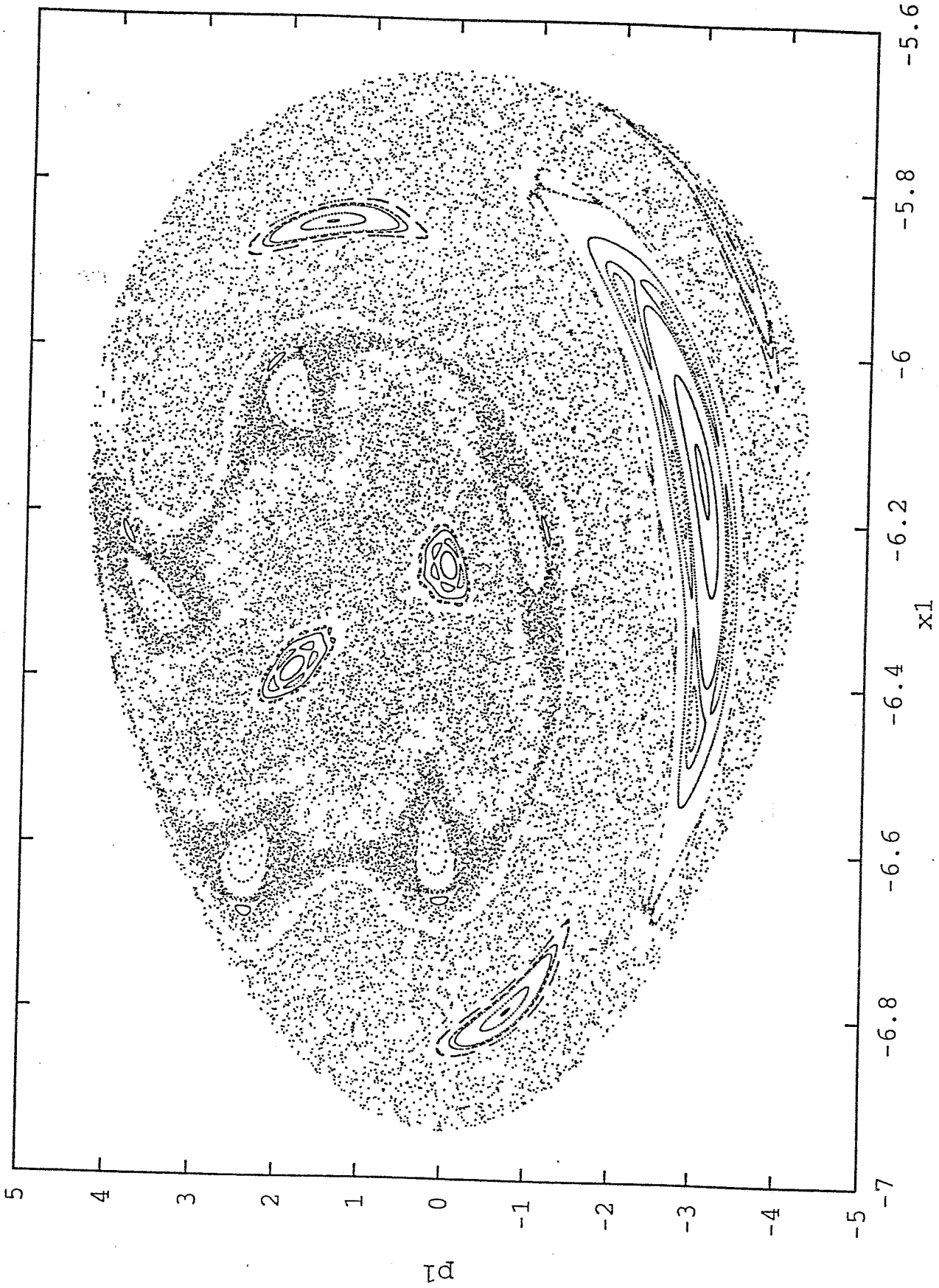
Σχήμα 13. Διαφοροποιήσεις γραμμών των Poincaré ανάλογα με τη γωνία στροφής των

συνεχόμενων κινήσεων

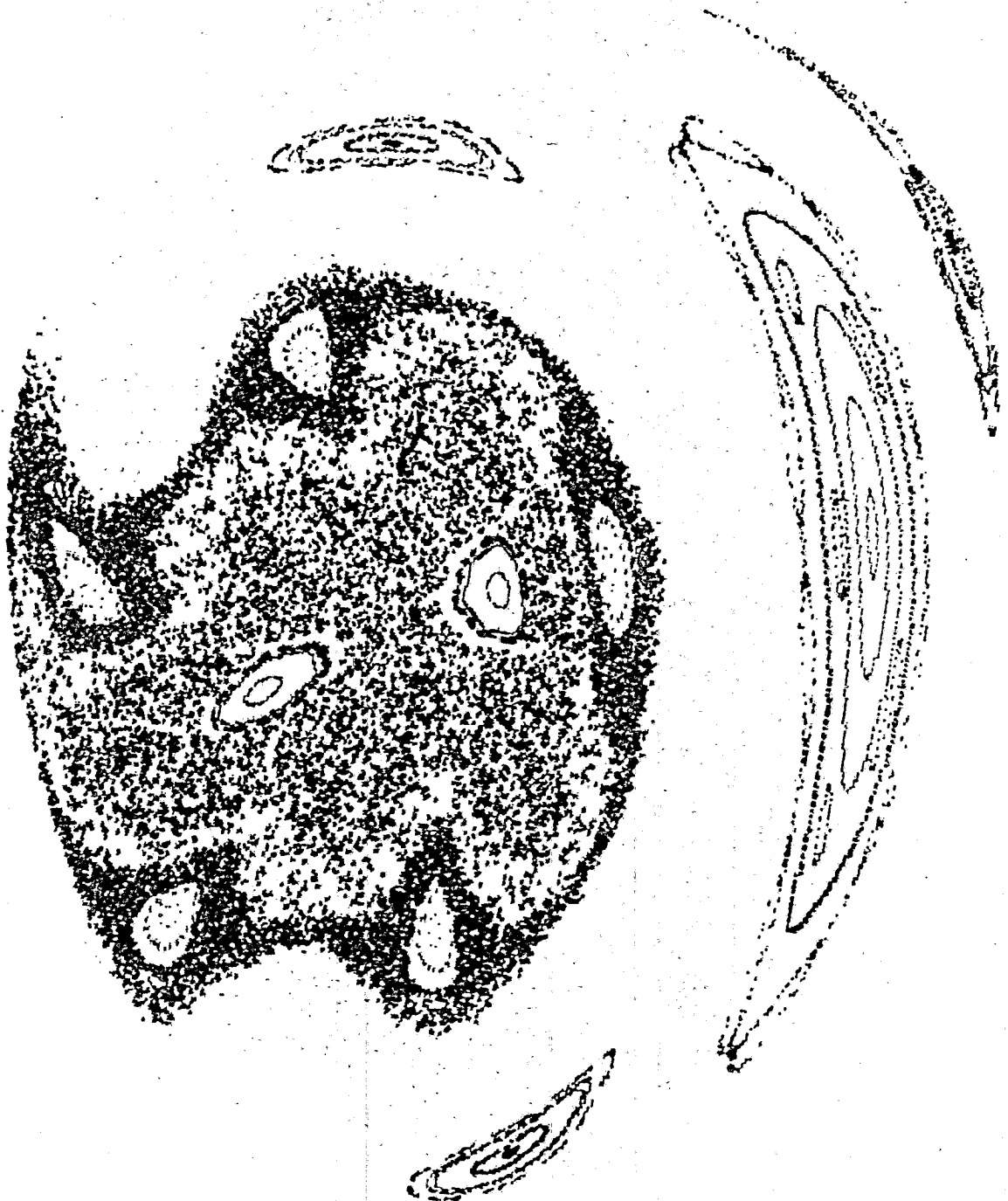
κανονικές και χαοτικές τροχιές. Η βασική παρατήρηση ήταν ότι υπάρχουν δύο μεγάλες χαοτικές περιοχές οι οποίες περιέχουν μέσα τους διάφορες κανονικότητες, και οι οποίες δεν επικοινωνούν μεταξύ τους. Αργότερα αποδείχτηκε ότι αντιστοιχούν στη συμμετρική και αντισυμμετρική κίνηση του μορίου, που είναι οι δύο βασικές δονήσεις του μορίου που ξεκινούν από μηδενική ενέργεια και συνεχίζονται μέχρι τη διάσπασή του. Βλέπουμε μια βασική τροχιά (μεγάλη νησίδα) στη μια περιοχή, με μια τριπλή γύρω της και μια τετραπλή γύρω απ' την τριπλή. Στην άλλη χαοτική περιοχή βλέπουμε μια διπλή με δύο πενταπλές γύρω της.

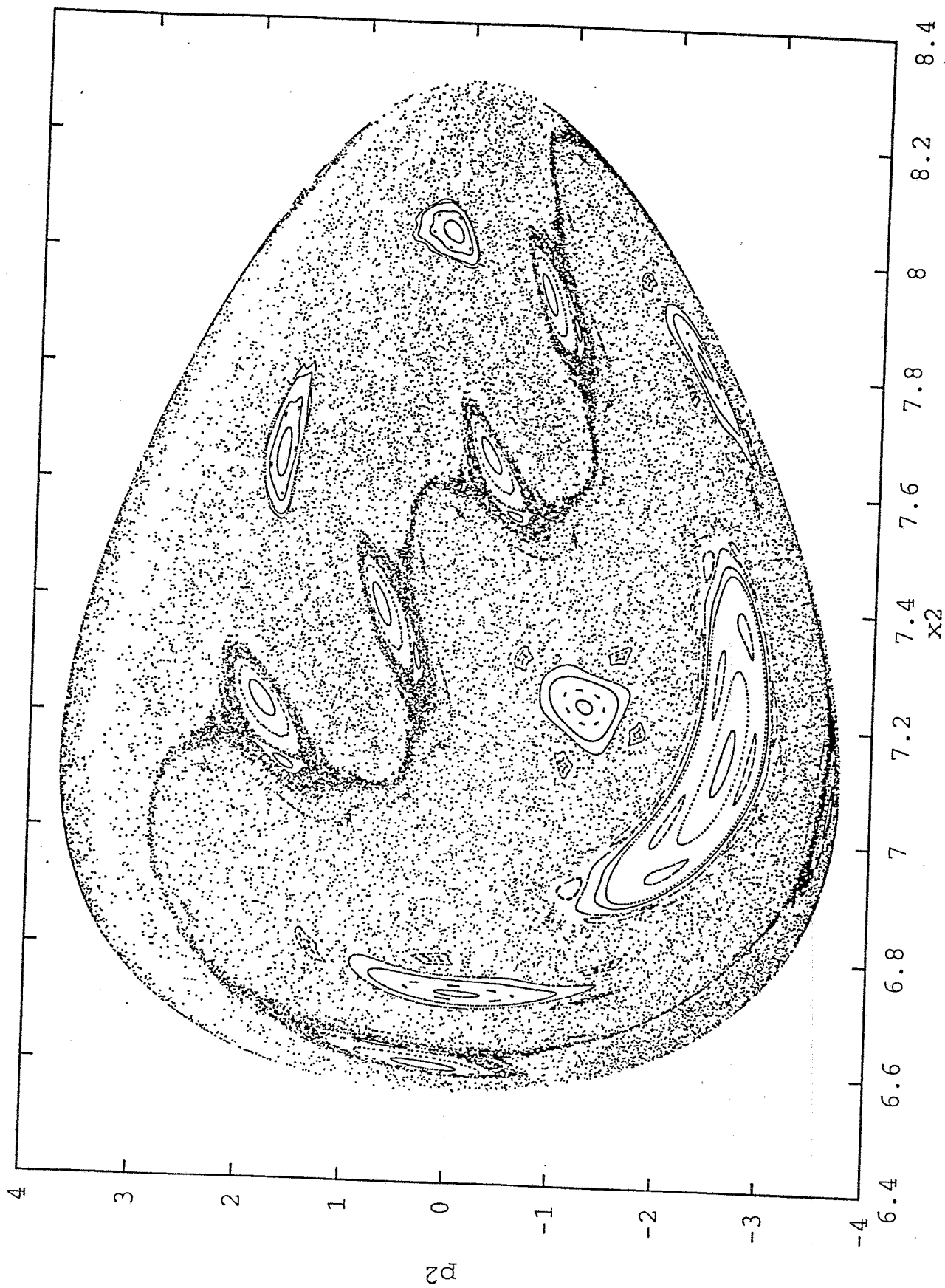
Θα επανέλθουμε σε αυτά τα γραφήματα όταν θα μιλήσουμε για περιοδικές τροχιές όπου και θα τα κατανοήσουμε αρκετά καλύτερα. Προς το παρόν ας αρκεστούμε να πούμε ότι έχουν *artistic applications*. Για του λόγου το αληθές τα παραθέτουμε και σε έγχρωμη μορφή όπου φαίνονται καθαρά όλες οι διαφορετικές οικογένειες. Μια ματιά στο εξώφυλλο και οπισθόφυλλο θα σας πείσει ακόμα περισσότερο. Παραθέτουμε επίσης και τον πίνακα των αρχικών συνθηκών για τις τροχιές των Σχημάτων 14 και 15, όπου χρησιμοποιώντας την εξίσωση $x_2 = ax_1 + \beta$ και την εξίσωση (10) για $E=60$. Κ βρίσκουμε τις άλλες δύο συνθήκες για το κάθε σχήμα.

Σχήμα 14		Σχήμα 15	
x_1	p_1	x_2	p_2
-6.400	-3.000	7.000	-2.000
-6.200	-3.000	7.200	-3.000
-6.000	-2.200	7.500	-2.500
-6.150	-3.000	7.000	-2.200
-6.300	-3.000	7.100	-2.500
-6.350	-3.000	6.900	-1.400
-6.000	-2.000	6.900	-1.100
-6.200	0.000	7.150	-1.400
-5.830	1.000	7.200	-1.500
-6.800	-1.000	7.200	-1.250
-6.820	-0.500	7.233	-1.170
-6.800	-0.750	7.300	-0.650
-6.700	-1.500	7.135	-1.050
-6.250	0.200	7.135	-1.000
-6.350	1.500	7.400	1.000
-6.400	2.000	7.600	-0.500
-6.350	1.400	7.500	-0.750
-6.660	0.100	7.550	-0.600
-6.620	2.300	7.200	1.800
-6.300	3.400	8.000	0.000
-6.070	4.030	8.050	0.250
		7.800	1.500
		7.725	1.600
		7.750	1.500

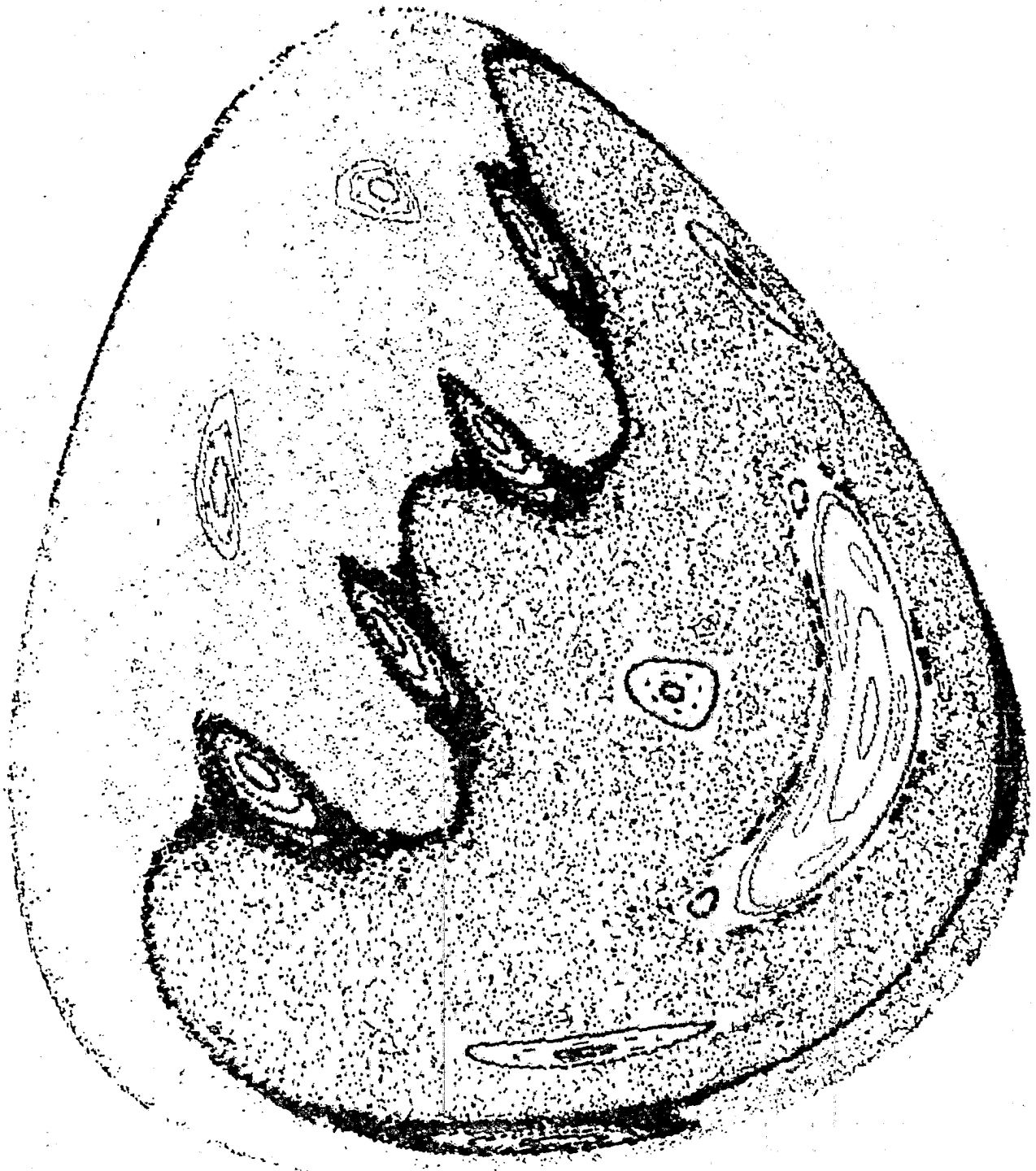


Σχήμα 14. Επιφάνεια τομής Poincaré (x_1, p_1) για $E=60$. K και $\theta = 0$.





Σχήμα 15. Εμφάνεται τομή Poincaré (x_2, p_2) για $E=60$. K και $\theta = 3\pi/8$.



4 ΠΕΡΙΟΔΙΚΕΣ ΤΡΟΧΙΕΣ

4.1 Λίγη θεωρία για ένα ωραίο θέμα

Φτάσαμε αοίως στο τελευταίο μέρος αυτής της εργασίας. Και επειδή το τελευταίο είναι πάντα και το καλύτερο (τουλάχιστον είναι το πιο ενδιαφέρον) θα κάνουμε μια μικρή θεωρητική εισαγωγή⁸ πάνω στο θέμα, πριν παραθέσουμε τα αποτελέσματα που μας έδωσε το μοντέλο μας.

4.1.1 Μια μελέτη στα κρίσιμα σημεία του Δυναμικού

Η αρχή κάθε δυναμικού μοντέλου είναι όπως έχουμε ξαναπεί το δυναμικό. Αυτό είναι που μας καθορίζει όλη την μορφολογία και τις εκάστοτε ιδιότητες του φασικού μας χώρου. Λογικό είναι λοιπόν, ψάχνοντας για περιοδικές τροχιές (ΠΤ) να ξεκινήσουμε από το δυναμικό. Το θεώρημα των Weinstein-Moser (W-M) έρχεται να επιτίνει αυτή τη σκέψη λέγοντας ότι από κάθε ελάχιστο του δυναμικού ξεκινάνε τουλάχιστον N διαφορετικές ΠΤ (όπου N ο αριθμός των βαθμών ελευθερίας του συστήματος).

Πως βρίσκουμε τώρα τα ελάχιστα του δυναμικού; Ένας απλός, σίγουρος και δοκιμασμένος τρόπος είναι ένας αλγόριθμος ελαχιστοποίησης (π.χ. Newton-Raphson). Θεωρώντας τις ταχύτητες μηδέν στο κρίσιμο σημείο έχουμε:

$$\nabla H(\vec{x}) = 0$$

όπου :

$$\vec{x} = (x_1, x_2, p_1, p_2) \quad \text{και} \quad H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(x_1, x_2),$$

αν ικανοποιείται αυτή η σχέση για κάθε x_i τότε έχουμε ακρότατο (ελάχιστο, σάγμα ή μέγιστο).

⁸ Όλη την θεωρία που παραθέτουμε εδώ βρίσκεται εκτενέστερα στις αναφορές [6, §2.] [7] καθώς και στο άρθρο [8].

Για να αποφανθούμε αν το κρίσιμο σημείο είναι ελάχιστο ή σάγμα μπορούμε επίσης να εξετάσουμε τις ιδιοτιμές της Hessian στο κρίσιμο σημείο (που είναι ουσιαστικά μια φορμαλιστική συστηματοποίηση των παραπάνω). Η Hessian μήτρα ορίζεται ως η δεύτερη παράγωγος της Χαμιλιτονιανής:

$$Hessian = \partial^2 H = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 H}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \frac{\partial^2 H}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 H}{\partial x_2^2} \end{pmatrix}$$

Έτσι αν λ_i ($i = 1 - N$) οι ιδιοτιμές της Hessian τότε έχουμε:

- ελάχιστο όταν λ_i : συζυγείς μιγαδικοί (για κάθε $i = 1 - N$)
- σάγμα όταν λ_i : πραγματικοί (για ορισμένα i)

Αφού βρούμε το κρίσιμο σημείο (ελάχιστο ή σάγμα) μπορούμε να βρούμε την κανονική του περίοδο θεωρώντας το γραμμικοποιημένο πρόβλημα (βλέπε ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α). Οι ΠΤ για τις οποίες μιλάει το θεώρημα Weinstein-Moser θα έχουν περιόδους κοντά σ'αυτές του γραμμικοποιημένου προβλήματος.

4.1.2 Εντοπισμός και Εξέλιξη περιόδων τροχιών

Βρήκαμε τώρα τα ελάχιστα του δυναμικού, τις περιόδους του και είμαστε έτοιμοι να εντοπίσουμε τις πρώτες μας περιοδικές τροχιές. Κατ' αρχήν ας πούμε ότι μια ΠΤ ικανοποιεί την συνθήκη:

$$\vec{x}(t+T) = \vec{x}(t), \quad \vec{x} = (x_1, \dots, x_N, p_1, \dots, p_N), \quad T : \text{περίοδος}$$

Οι αρχικές συνθήκες της ΠΤ θα είναι:

$$x_i = x_i^0 + \alpha \Delta x_i,$$

όπου

x_i^0 : οι συντεταγμένες του σημείου ισορροπείας

Δx_i : ένα από τα N ιδιοανύσματα της Hessian
 α : ένας συντελεστής της τάξης του $10^{-2} - 10^{-5}$

Για κάθε διαφορετικό ιδιοάνυσμα της Hessian έχουμε και διαφορετικές αρχικές συνθήκες για τις N διαφορετικές ΠΤ που αναφέρει το θεώρημα W-M, κάθε μια με την περίοδο από το γραμμικοποιημένο πρόβλημα (η περίοδος βρίσκεται επίσης και σαν $T_i = \lambda_i/2\pi$ όπου λ_i η ιδιοτιμή της Hessian που αντιστοιχεί στο ιδιοάνυσμα Δx_i).

Έχοντας τώρα τις αρχικές συνθήκες, για να εντοπίσουμε ακριβώς την ΠΤ, ελαχιστοποιούμε (πάλι με μια μέθοδο Newton-Raphson) την συνάρτηση :

$$f(\vec{x}) = \vec{x}(T) - \vec{x}(0) \quad T : \text{περίοδος}$$

Εξέλιξη μιας ΠΤ, τώρα, είναι η διαδικασία με την οποία βλέπουμε πως μεταβάλλεται η μορφολογία και τα χαρακτηριστικά της σχετικά με την ενέργεια. Αυτό γίνεται αυξάνοντας (ή μειώνοντας) λίγο την ολική ενέργεια ή την περίοδό της. Στην πρώτη περίπτωση (ενέργεια) αυτό μεταφράζεται με αναπροσαρμογή κάποιας ορμής (κρατώντας όλες τις αρχικές συνθήκες σταθερές, αλλάζουμε την ενέργεια και αναπροσαρμόζουμε μια ορμή, σύμφωνα με τον τύπο (10)). Ανάλογα με το ποιά ταλάντωση θέλουμε (stretching, bending, ...) επιλέγουμε και την κατάλληλη ορμή. Στη δεύτερη περίπτωση (περίοδος) απλά αλλάζουμε λίγο την περίοδο και οι αρχικές συνθήκες αναπροσαρμόζονται αφού ελαχιστοποιήσουμε (όπως και στην περίπτωση αλλαγής της ενέργειας) την συνάρτηση:

$$f(\vec{x}) = \vec{x}(T) - \vec{x}(0) .$$

4.1.3 Ευστάθεια και Διακλάδωση περιοδικής τροχιάς

Για να εξετάσουμε τώρα την ευστάθεια μιας ΠΤ, εξετάζουμε ουσιαστικά τι κάνουν οι γειτονικές της τροχιές. Αν δηλαδή μια κοντινή τροχιά, παραμένει για άπειρο χρόνο στη γειτονιά της ΠΤ (τότε η ΠΤ χαρακτηρίζεται σταθερή) ή αν αποκλείνει από τη γειτονιά (τότε η ΠΤ χαρακτηρίζεται ασταθής).

Ένας συστηματικός τρόπος για να βρούμε την ευστάθεια μιας ΠΤ, είναι να εξετάσουμε τις ιδιοτιμές της μονόδρομης μήτρας. Πως ορίζεται όμως, αυτή η μονόδρομη μήτρα;

Έστω $(q_i^0, p_i^0 \quad i = 1 - N)$ οι αρχικές συνθήκες μιας ΠΤ με περίοδο T . Οι εξισώσεις Hamilton ($i = 1 - N$) γράφονται :

$$\frac{dq_i^0(t)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i^0}$$

$$\frac{dp_i^0(t)}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i^0}$$

Παίρνοντας τις διαφορές $\Delta q = q_i - q_i^0$, $\Delta p = p_i - p_i^0$, όπου (q_i, p_i) μια γειτονική τροχιά, γράφουμε τις εξισώσεις διαφορών ($i = 1 - N$) :

$$\frac{d}{dt}[q_i(t) - q_i^0(t)] = \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i^0}$$

$$\frac{d}{dt}[p_i(t) - p_i^0(t)] = -\frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial H}{\partial q_i^0},$$

γραμμικοποιώντας το παραπάνω σύστημα (παίρνοντας δηλαδή ανάπτυγμα Taylor των δεξιών μελών και κρατώντας μόνο γραμμικούς όρους ως προς $\Delta q, \Delta p$) έχουμε τις εξισώσεις μεταβολών ($i = 1 - N$) :

$$\frac{d}{dt}[q_i(t) - q_i^0(t)] = \sum_{j=1}^N \left[\frac{\partial^2 H}{\partial q_j^0 \partial p_i^0} (q_j - q_j^0) + \frac{\partial^2 H}{\partial p_j^0 \partial p_i^0} (p_j - p_j^0) \right]$$

$$\frac{d}{dt}[p_i(t) - p_i^0(t)] = -\sum_{j=1}^N \left[\frac{\partial^2 H}{\partial q_j^0 \partial q_i^0} (q_j - q_j^0) + \frac{\partial^2 H}{\partial p_j^0 \partial q_i^0} (p_j - p_j^0) \right],$$

τις οποίες μπορούμε να γράψουμε σε πύο συμπαγή μορφή ως εξής :

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = A(t)\vec{x}(t), \quad (17)$$

(οι δεύτερες παράγωγοι της Χαμιλιτονιανής είναι υπολογισμένες στο "σημείο" $q_i^0(t), p_i^0(t)$). Το σύστημα (17) είναι ένα σύστημα γραμμικών διαφορικών εξισώσεων που έχει λύσεις της μορφής :

$$x_i(t) \sim e^{\lambda_i t}$$

όπου λ_i οι ιδιοτιμές της μήτρας A :

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial q_j^0 \partial p_i^0} & \frac{\partial^2 H}{\partial p_j^0 \partial p_i^0} \\ -\frac{\partial^2 H}{\partial q_j^0 \partial q_i^0} & -\frac{\partial^2 H}{\partial p_j^0 \partial q_i^0} \end{pmatrix}$$

Το σύστημα $\ddot{\vec{x}} = A\vec{x}$ είναι όπως είπαμε ένα $2N \times 2N$ γραμμικό διαφορικό σύστημα, και έχει $2N$ γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις $\vec{\Phi}_i$ ($i = 1 - 2N$). Τα διανύσματα στήλης $\vec{\Phi}_i$ φτιάχνουν τη θεμελιώδη μήτρα (fundamental matrix) :

$$\Phi \equiv (\vec{\Phi}_1 \vec{\Phi}_2 \dots \vec{\Phi}_{2N})$$

Αφού κάθε $\vec{\Phi}_i$ είναι λύση της $\ddot{\vec{x}} = A\vec{x}$ και όλη η Φ την ικανοποιεί :

$$\dot{\Phi} = A\Phi$$

και ολοκληρώνοντας την παραπάνω με αρχικές συνθήκες :

$$\Phi(0) = I_{2N} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

για χρόνο t παίρνουμε την $\Phi(t)$ που ονομάζεται *matrizant*. Για τις ΠΤ και για χρόνο ολοκλήρωσης T η *matrizant* ονομάζεται *μονόδρομη μήτρα* (monodromy matrix) :

$$M \equiv \Phi(T)$$

Αναλυτικότερα, για να βρούμε τη μονόδρομη μήτρα, εργαζόμαστε ως εξής:

λύνω το σύστημα :

$$\begin{cases} \dot{\vec{q}} = \vec{f}(\vec{q}) & (\text{εξ. Hamilton}) \\ \dot{\Phi} = A\Phi & (\text{εξ. μεταβολών}), \end{cases}$$

όπου $A = \partial \vec{f} / \partial \vec{x}$ η Ιακωβιανή (Jacobian) του προβλήματος (για το δικό μας μοντέλο βλέπε ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β). Ειδικότερα ολοκληρώνουμε για

μια περίοδο T το σύστημα :

$$\begin{pmatrix} \dot{\vec{q}} \\ \dot{\vec{\Phi}}_1 \\ \vdots \\ \dot{\vec{\Phi}}_{2N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{f}(q) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & A & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

όπου :

$$\tilde{f}(q) = \begin{pmatrix} f_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & f_{2N} \end{pmatrix}$$

με αρχικές συνθήκες :

$$\vec{q}(0) = \vec{q}_0 \quad (\text{αρχ. συνθ. ΠΤ})$$

$$\vec{\Phi}(0) = (\vec{\Phi}_1(0) \vec{\Phi}_2(0) \cdots \vec{\Phi}_{2N}(0)) = I_{2N}$$

και παίρνω τη μονόδρομη μήτρα ως :

$$M = (\vec{\Phi}_1(T) \vec{\Phi}_2(T) \cdots \vec{\Phi}_{2N}(T))$$

Μερικές χρήσιμες ιδιότητες της μονόδρομης μήτρας είναι:

- $M(nT) = M(T)M((n-1)T) = (M(T))^n$
- Εάν η μονόδρομη μήτρα έχει μια ιδιοτιμή μονάδα τότε οι εξισώσεις μεταβολών έχουν περιοδική λύση (και το αντίστροφο).
- Για κάθε σταθερά κίνησης η M έχει επίσης μια ιδιοτιμή μονάδα.
 - ο Από τα δύο παραπάνω φαίνεται ότι σε χαμιλτονιανά διατηρήσιμα συστήματα έχουμε δύο ιδιοτιμές της M ίσες με τη μονάδα, μια μονάδα για περιοδικές λύσεις και άλλη μια για την ολική ενέργεια που είναι σταθερά κίνησης (στο σύστημά μας με $N = 2$ (δύο βαθμοί ελευθερίας) η M είναι 4×4 ($2N \times 2N$) και έχοντας δύο ιδιοτιμές μονάδες, παίρνουμε πληροφορία μονάχα από τις άλλες δύο).

- σε χαμιλτονιανά διατηρήσιμα συστήματα ισχύει το θεώρημα του Liouville

$$\det(M(T)) = 1$$

- η M ικανοποιεί την συμπλεκτική αρχή :

$$MJM^T = J$$

- μιγαδικές ιδιοτιμές έρχονται σε ζευγάρια :

$$\lambda, \lambda^* \quad (\lambda = a + \beta i, \quad \lambda^* = a - \beta i),$$

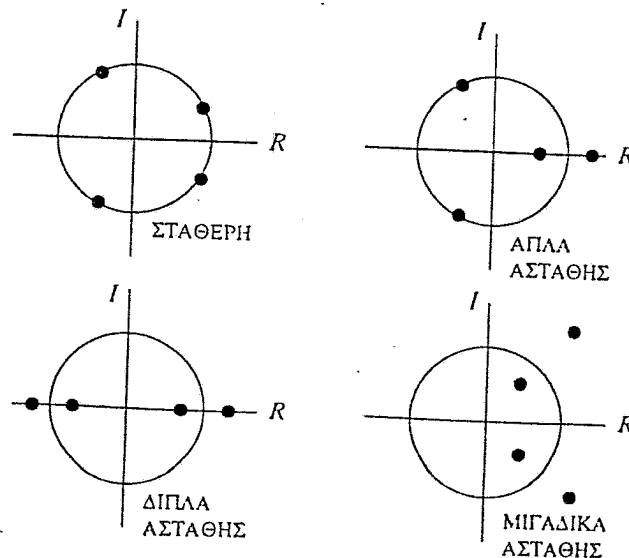
- πραγματικές ιδιοτιμές έρχονται σε ζευγάρια :

$$\lambda, \lambda^{-1} \quad (\lambda = a, \quad \lambda^{-1} = 1/a)$$

Ισχύει επίσης ότι η μετατόπιση από την περιοδική τροχιά ύστερα από μια περίοδο T , $\vec{x}(T)$ αν η αρχική μετατόπιση είναι $\vec{x}(0)$ είναι :

$$\vec{x}(T) = M(T)\vec{x}(0) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_{2N} \end{pmatrix} \vec{x}(0)$$

Τώρα όσον αφορά την ευστάθεια μιας ΠΤ ανάλογα με τις ιδιοτιμές της M , αυτή φαίνεται στο παρακάτω διάγραμμα, το οποίο είναι για ένα σύστημα 3 βαθμών ελευθερίας (οι δύο μονάδες ιδιοτιμές δεν δείχνονται) :



Ο κύκλος του διαγράμματος είναι ο μοναδιαίος κύκλος στο μιγαδικό επίπεδο.

Βλέπουμε λοιπόν ότι στο διδιάστατο σύστημά μας θα έχουμε ευστάθεια ή απλή αστάθεια, αφού για διπλή και μιγαδική αστάθεια απαιτείται τουλάχιστον άλλο ένα ζευγάρι ιδιοτιμών (δηλαδή άλλος ένας βαθμός ελευθερίας).

Μπορούμε τώρα να εκφράσουμε μια ιδιοτιμή λ ως εξής :

$$\lambda = e^{aT} \rightarrow a = \frac{1}{T} \ln \lambda$$

όπου a είναι ο χαρακτηριστικός εκθέτης (characteristic exponent). Έτσι για ευστάθεια πρέπει ο a να είναι φανταστικός και μπορεί να θεωρηθεί σαν η συχνότητα περιστροφής, μιας γειτονικής ως προς την περιοδική, τροχιάς.

$$a = i\sigma$$

αν $\frac{T}{2\pi/\sigma} = \frac{m}{n}$ (m, n ακέραιοι) τότε στη γειτονιά της ΠΤ υπάρχει μια άλλη με περίοδο $T' = nT$

αν $\lambda = 1 \Rightarrow a = 0 \rightsquigarrow T' = T$

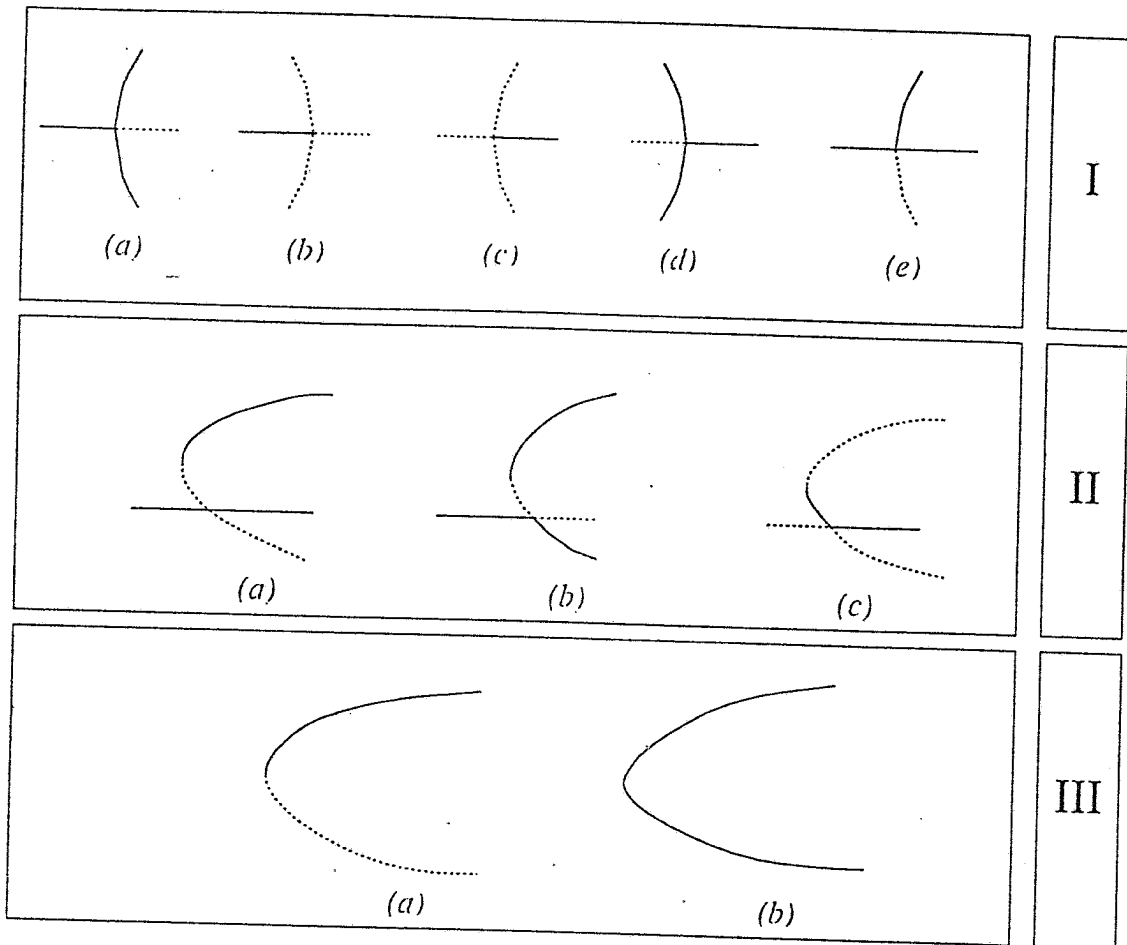
αν $\lambda = -1 \Rightarrow a = \frac{i\pi}{T} \rightsquigarrow T' = 2T$

Αν τέλος υπάρχει εκφυλισμός των ιδιοανυσμάτων της M (υπάρχουν δηλαδή διαφορετικές ιδιοτιμές με ίδια ιδιοανύσματα) τότε η τροχιά είναι ασταθής και μια γειτονική της αποκλίνει όχι εκθετικά (όπως συνήθως γίνεται με την αστάθεια) αλλά σαν μια δύναμη του χρόνου t .

4.1.4 Είδη διακλαδώσεων και διαγράμματα χαρακτηριστικών

Η εξέλιξη μιας ΠΤ και οι διακλαδώσεις της (bifurcations) μπορούν να αναπαρασταθούν σε διαγράμματα (E, q) όπου q μια απ' όλες τις συντεταγμένες ή ορμές. Τα είδη των διακλαδώσεων μιας τροχιάς φαίνονται στο παρακάτω σχήμα⁹:

⁹Περισσότερες πληροφορίες θα βρείτε στην αναφορά [3, σελ. 46-52]



Είδη διακλαδώσεων: I. Διακλαδώσεις δικράνου (Pitchfork), II. Transcritical Διακλαδώσεις, IIIa. Διακλάδωση Saddle-Node, IIIb. Διακλάδωση Hopf

Παρατηρήστε ότι σε όλες τις διακλαδώσεις κοντά στο σημείο διακλάδωσης ο αριθμός των σταθερών κλάδων (συνεχής γραμμή) μείον τον αριθμό των ασταθών κλάδων (διάστικτη γραμμή) είναι ίδιος πριν και μετά το σημείο αυτό (δείκτης Poincaré).

Στις διακλαδώσεις δικράνου (Pitchfork) έχουμε αλλαγή της σταθερότητας σε αστάθεια (ή και το αντίθετο) και γέννηση μιας άλλης ΠΤ ίδιας ή διπλάσιας περιόδου ανάλογα με το λ ($\lambda = 1 \Rightarrow T' = T$, $\lambda = -1 \Rightarrow T' = 2T$). Στην τελευταία περίπτωση διακλαδώσεως δικράνου (Ie) έχουμε "πέραςμα" των ιδιοτιμών από τέτοια νόμμερα ώστε να ισχύει: $T\sigma/2\pi =$

m/n ($\sigma = a/i$) $\rightsquigarrow T' = nT$ και διακλάδωση ενός σταθερού και ενός ασταθούς T' -κλάδου. Δεν μπορεί να συμβεί το ίδιο αν ο μητρικός κλάδος είναι ασταθής.

Οι Transcritical διακλαδώσεις είναι πιο σπάνιες και σαν την *IIa* συμβαίνουν σε περιπτώσεις τριπλασιασμού ή τετραπλασιασμού περιόδου. Μάλιστα σε περιπτώσεις τριπλασιασμού οι Mayer και Hall [9, σελ. 209] ισχυρίζονται ότι συμβαίνει πάντα transcritical διακλάδωση.

Οι διακλαδώσεις Saddle-Node (saddle-node bifurcations, bifurcations out of nowhere, tangent bifurcations, irregular bifurcations) είναι οι πιο δύσκολες στον εντοπισμό και εξέλιξη και παρατηρούντε πάντα πάνω από σαγματικά σημεία (αλλά και μέσα σε πηγάδια). Συνήθως είναι οι ΠΤ που πηγαινουν από το ένα πηγάδι στο άλλο και χαρακτηρίζονται από εκφυλισμό των ιδιοανυσμάτων στο σημείο διακλάδωσης.

Τέλος οι διακλαδώσεις τύπου Hopf είναι αυτές που προβλέπει το θεώρημα W-M και παρατηρούνται σε κάθε σημείο ισορροπίας ενός χαμιλιτονιανού συστήματος (μόνο εδώ δεν ισχύει ο δείκτης Poincaré).

Αυτή λοιπόν η θεωρία για τις ιδιοτιμές της μονόδρομης μήτρας μας επιτρέπει να γνωρίζουμε την ευστάθεια μιας τροχιάς, και επιπλέον μας βοηθά να εντοπίσουμε θυγατρικές τροχιές ακολουθώντας τα κατάλληλα, κάθε φορά, ιδιοανύσματα της M .

4.2 Περιοδικές Τροχιές στο Μοντέλο μας

4.2.1 Περιοδικές Τροχιές στα Ελάχιστα

Όπως μας λέει το θεώρημα W-M δύο ΠΤ βγαίνουν από κάθε ελάχιστο (δύο βαθμοί ελευθρίας). Τις βρίσκουμε ακολουθώντας τα ιδιοανύσματα της Hessian όπως είπαμε στην §4.1.2 και είναι οι MA και MB. Η MA είναι η συμμετρική κίνηση του μορίου και η MB η αντισυμμετρική. Βλέπουμε ότι και οι δύο γίνονται ασταθείς με ιδιοτιμές στο -1 και άρα βγαίνουν δύο νέες, διπλάσιας περιόδου, τροχιές : (MA3A, MA3B), (MB2A, MB2B).

Μόνο στις διπλής περιόδου τροχιές κρατάμε και τους δύο κλάδους στο διάγραμμα χαρακτηριστικών (σύμβαση). Το ουμαντικό εδώ είναι ότι σε $E=60$. Κ μόνο η MB υπάρχει ως σταθερή, ενώ η MA έχει γίνει ασταθής και στη θέση της υπάρχουν οι δύο κλάδοι MA3A, MA3B. Έτσι εξηγούνται και τα διαγράμματα των Σχημάτων 14 και 15 που δίνουν τη μια περιοχή με μια μεγάλη βασική νησίδα (τορι γύρω απ' την MB) και την άλλη περιοχή με δύο βασικές μεγάλες νησίδες (τορι γύρω απ' τις MA3A και MA3B). Οι δύο νέες, διπλασίας περιόδου, τροχιές (MA3A,B και MB2A,B) γίνονται αστάθεις στο -1 ενώ η MB2A,B γίνεται ευσταθής πάλι στο -1 και ξανά ασταθής στο $+1$. Μέσα σ' αυτή τη δεύτερη περιοχή ευσταθείας οι ιδιοτιμές ξεκινάνε από το -1 και πηγαίνουν στο $+1$, ακολουθώντας βέβαια μια πορεία πάνω στον μοναδιαίο κύκλο. Αυτό σημαίνει πώς αυτή η μικρή περιοχή είναι περιοχή γέννησης ΠΤ κάθε δυνατής πολλαπλότητας.

Με βάση τα Σχήματα 14 και 15 προσπαθήσαμε και βρήκαμε την τριπλή γύρω απ' την MB που είναι η MB1A και MB1B. Ο σταθερός κλάδος (MB1A) γίνεται ασταθής στο -1 ενώ λίγο πριν τα 60. Κ οι ιδιοτιμές πάνε στο $\pm i$ που σημαίνει τη γέννηση μιας νέας ΠΤ, τετραπλής περιόδου (ως προς την MB $4 \times 3 = 12$ πλής περιόδου) η οποία φαίνεται μόνο στο Σχήμα 15 (τάσσερα τορι γύρω από κάθε ένα από τα τρία MB1A). Στο Σχήμα 14 δεν σχεδιάστηκε για λόγους ευκρίνειας.

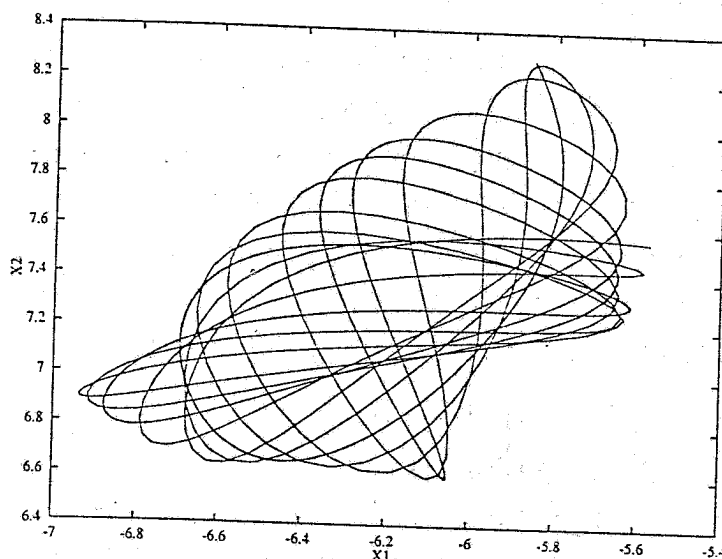
Στο Σχήμα 14 βλέπουμε δύο πενταπλές γύρω από την κύρια (διπλή MA3A,B) οι οποίες μοιάζανε να είναι η μία διακλάδωση της άλλης. Τελικά παρατηρώντας καλύτερα την εξέλιξη των ιδιοτιμών της MA είδαμε ότι περνάνε¹⁰ δύο φορές από τις 144° ($\lambda = 0.809 \pm i0.587$) που είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του 72° ($360^\circ/5 = 72^\circ$). Έτσι έχουμε δύο πενταπλές που πρέπει να είναι σταθερές μέχρι $E=60$. Κ και η μια να έχει γεννηθεί πολύ πριν από την άλλη (όσο απομακρινόμαστε από το σημείο γέννησης τόσο μικραίνουν τα τορι). Πράγματι βρήκαμε αυτές τις τροχιές που είναι οι MA1A,B και MA2A,B. Να πούμε τέλος ότι η MA1A γίνεται ασταθής στο $+1$ και μαζί με την MA2A δεν μπορούσαμε να τις συνεχίσουμε πάνω από 62. Κ (μάλιστα η MA2A μέχρι την ενέργεια αυτή έμεινε σταθερή).

¹⁰ Όταν λέμε ότι η ιδιοτιμή λ περνά από μια γωνία φ εννοούμε: $\cos \varphi = \text{Re}(\lambda)$, $\sin \varphi = \text{Im}(\lambda)$.

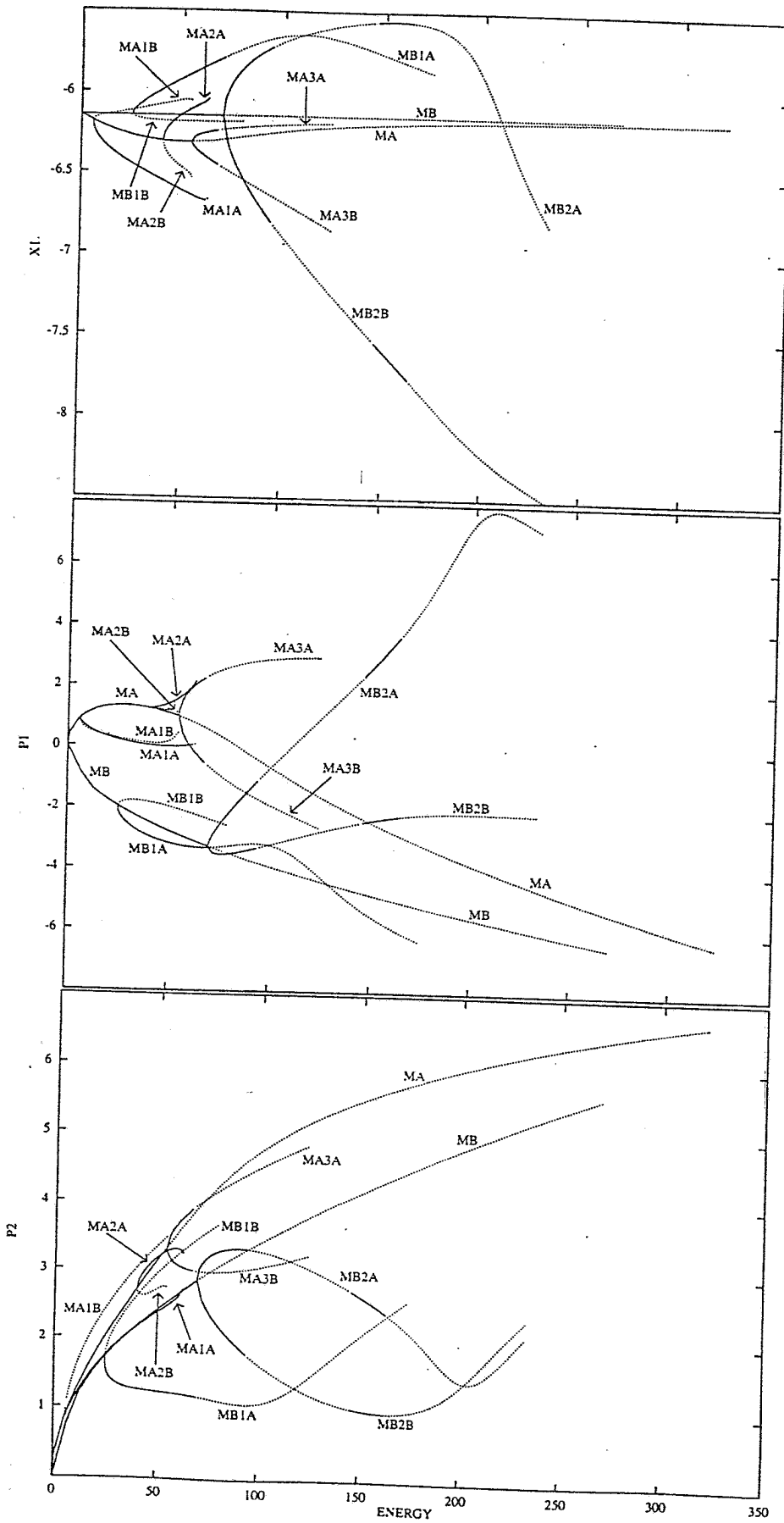
Αυτό πιθανόν να συμβαίνει γιατί πάνω από κάποια ενέργεια (πιθανόν πάνω από τα 62. K) σπάει η διαχωριστικότητα συμμετρικής και αντισυμμετρικής κίνησης. Αυτό φαίνεται καλύτερα και στα Σχήματα 11β,γ όπου από κάποια ενέργεια και μετά η χαοτική περιοχή της αντισυμμετρικής κίνησης απλώνεται σε όλο τον ενεργειακά διαθέσιμο χώρο.

Τέλος αν παρατηρήσεται καλύτερα στο Σχήμα 14, ανάμεσα στις δύο κύριες χαοτικές κινήσεις υπάρχει μια μεγάλης τάξης ΠΤ (23 tori) την οποία και βρήκαμε (MA23) και την δείχνουμε στο παρακάτω σχήμα μαζί με τις αρχικές της συνθήκες :

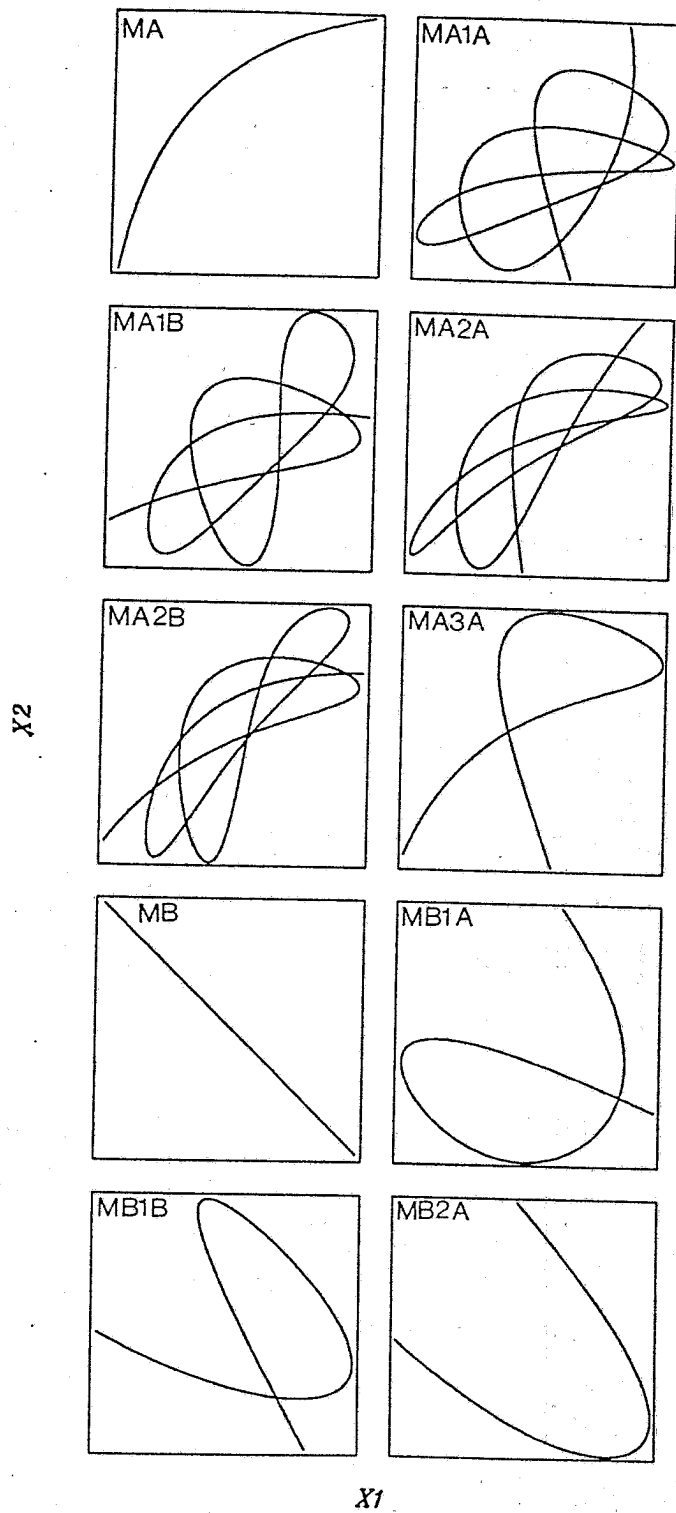
$$\begin{aligned} E &= 59.991074 \\ x_1 &= -6.074440 \\ x_2 &= 7.098756 \\ p_1 &= 4.034094 \\ p_2 &= 1.190781 \\ T &= 4.147930 \\ \alpha &= -0.936948 \end{aligned}$$



Στη συνέχεια παραθέτουμε τα διαγράμματα χαρακτηριστικών (E, x_1) , (E, p_1) , (E, p_2) για σταθερό επίπεδο Poincaré $x_2 = 7.098756$, τις μορφολογίες κάθε τροχιάς σε (x_1, x_2) καθώς και τον πίνακα με τις αρχικές συνθήκες κάθε μιας. Το α είναι το πραγματικό (μέγιστο) μέρος μιας ιδιοτιμής λ . Η άλλη ιδιοτιμή μπορεί να βρεθεί σαν α^{-1} ($\lambda = \alpha$ και $1/\alpha$) για ασταθείς τροχιές ($|\alpha| > 1$) ή σαν λ^* για ευσταθείς τροχιές ($|\alpha| < 1$) όπου το μιγαδικό μέρος θα βρίσκεται από την σχέση $\text{ind}(\lambda) = 1$ ($\lambda = \alpha \pm i\sqrt{1 - \alpha^2}$). Για περισσότερες πληροφορίες πάνω στη μορφολογία των τροχιών στον φασικό χώρο βλέπε ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ C.



Σχήμα 16α. Διαγράμματα χαρακτηριστικών για ΠΤ μέσα στα πηγάδια.



Σχήμα 16β. Διαγράμματα ΠΤ μέσα στα ηγάρδια.

	E	x_1	x_2	p_1	p_2	T	a
MA	50.116230	-6.309626	7.098756	1.078470	3.126966	0.186940	-0.933570
MA1A	50.419165	-6.612516	7.098756	-0.010102	2.371454	0.916699	0.720793
MA1B	50.312531	-6.052701	7.098756	0.178858	3.347085	0.916699	1.454165
MA2A	50.449700	-6.135833	7.098756	1.427767	3.179559	0.920699	0.796344
MA2B	50.455270	-6.474176	7.098756	1.154846	2.712181	0.922899	1.781136
MA3A	90.003781	-6.210229	7.098756	-1.555663	4.337122	0.404299	-10.963566
MA3B	90.003781	-6.611462	7.098756	2.796343	2.986502	0.404300	-10.963566
MB	50.167765	-6.147670	7.098756	-2.778294	2.406404	0.123466	-0.760551
MB1A	50.716977	-5.914656	7.098756	-3.188054	1.224632	0.386000	0.279013
MB1B	50.341211	-6.184684	7.098756	-1.981353	2.936394	0.377500	2.525288
MB2A	90.729446	-5.748707	7.098756	-1.334611	3.309712	0.273400	-0.764309
MB2B	90.729446	-6.743342	7.098756	-3.369513	1.859606	0.273400	-0.764309

4.2.2 Περιοδικές Τροχιές πάνω από το Σάγμα

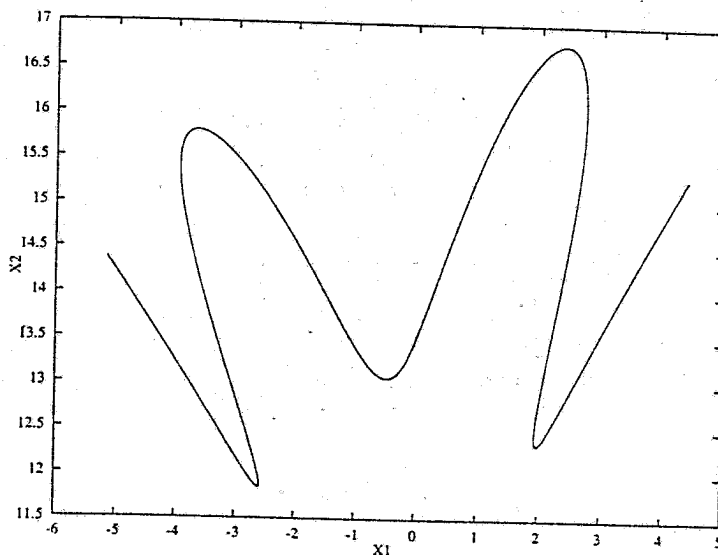
Οι Dumond και Jain [1] είχαν βρει κανονικές περιοχές (tori) για την τροχιά που υπάρχει πάνω από σάγμα. Είναι εύκολο να καταλάβουμε ότι υπάρχει μια μονοδιάστατη ΠΤ πάνω στο σάγμα κατά την σταθερή του διεύθυνση. Επίσης εύκολο είναι να αντιληφθούμε ότι αυτή θα είναι εξ-ορισμού ασταθής αφού μία από τις δύο διευθύνσεις οδηγεί αμέσως στα πηγάδια. Το παράξενο είναι να γίνεται, αυτή η εξ-ορισμού ασταθής τροχιά, σταθερή μετά από λίγο, όπως βρήκαν οι Dumond και Jain.

Αυτό όμως πράγματι συμβαίνει και μάλιστα η περιοχή σταθερότητας εκτινεται για περισσότερο από 230. K (τροχιά S). Στο σημείο που γίνεται σταθερή ($\lambda = +1$) ξεπετάγεται μια τροχιά ίδιας περιόδου (S1A,B) που λόγω συμμετρίας του δυναμικού υπάρχει εκατέρωθεν της S (τροχιές αυτού του τύπου είναι αυτές που "φράσουν" την επικοινωνία μεταξύ των πηγαιδιών). Όταν η S ξαναγίνεται ασταθής ($\lambda = -1$) ξεπατάγεται μια διπλασίας περιόδου τροχιά (S4A,B).

Ενδιάμεσα βρίσκουμε μια εξαπλής περιόδου (S2A,B) της οποίας ο σταθερός κλάδος γίνεται ασταθής στο +1. Τότε ξεπετάγεται μια τροχιά (S2A1A)

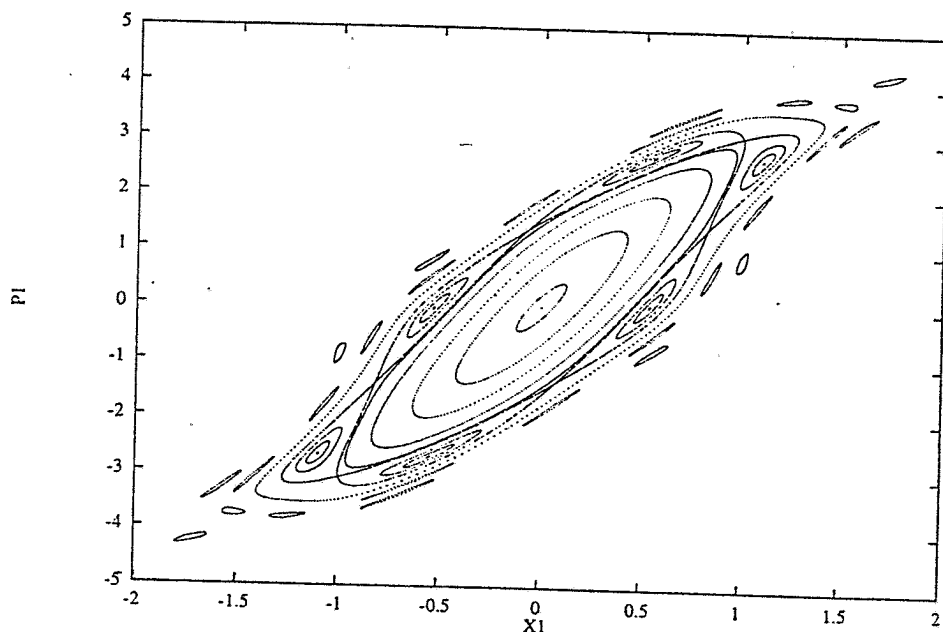
της οποίας οι αρχικές συνθήκες και το σχήμα δείχνονται παρακάτω. Λόγω συμμετρίας του δυναμικού θα υπάρχει και η συμμετρική της ως προς $x_1 = 0$ ($x_1 \rightarrow -x_1, p_1 \rightarrow -p_1$).

$$\begin{aligned} E &= 310.811538 \\ x_1 &= 2.389694 \\ x_2 &= 14.186500 \\ p_1 &= 2.001460 \\ p_2 &= 5.549818 \\ T &= 1.733199 \\ \alpha &= -2.792460 \end{aligned}$$



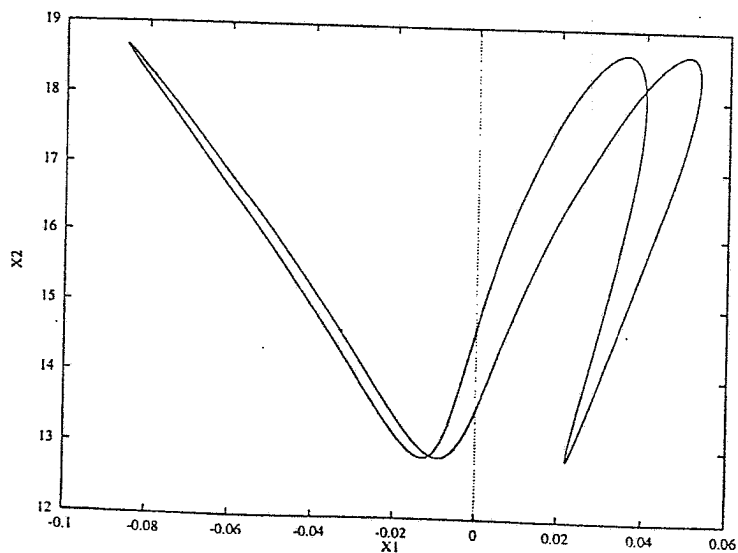
Το ενδιαφέρον τώρα εντοπίζεται στις τριπλής περιόδου τροχιές S3A,B,C,D. Στο σημείο γέννησης υπήρχαν πολλές τροχιές διαφόρων (παραπλήσιων) περιόδων και αυτό μας μπέρδευε αρκετά στην αρχή. Έχοντας βρει τις S3A,C οι οποίες ήταν σταθερές και σε (x_1, x_2) διαφέρανε μόνο στην φορά διαγραφής (στην πραγματικότητα, σε άλλες προβολές δηλαδή, διαφέρανε όπως φαίνεται και στο ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ C) και τις S3B,D οι οποίες ήταν ασταθής, και λόγω συμμετρίας του δυναμικού η ύπαρξη της μιας υπαγόρευε και την ύπαρξη της άλλης, είχαμε αρκετά προβλήματα στο να ξεκαθαρίσουμε ποιά ήταν ποιά. Δεν ξέραμε δηλαδή αν πήγαιναν κατά ζευγάρια (σταθερός και ασταθής κλάδος $\times 2$) ή αν μας λείπανε ακόμα τέσσερεις κλάδοι, συμπληρωματικοί των S3A-D. Τελικά το πρόβλημα μας το έλεισε ένα διάγραμμα Poincaré. Παίρνοντας σαν αρχικές συνθήκες αυτές των S3B,D βρήκαμε τρεις νησίδες για κάθε μια (λόγω αριθμητικής αστάθειας) που μέσα τους υπήρχαν τα tori των S3A,C. Το σχήμα αυτό φαίνεται παρακάτω. Δείχνονται επίσης τα tori της S (μεγάλα διαγώνια tori) καθώς και τα tori μιας 10πλής και μιας 16πλής απ' έξω. Παραθέτουμε επίσης το ίδιο σχήμα

σε έγχρωμη έκδοση όπου και φαίνονται καθαρά οι τρεις και τρεις νησίδες (seperatrices) των S3B,D και τα tori των S3A,C και της βασικής S.

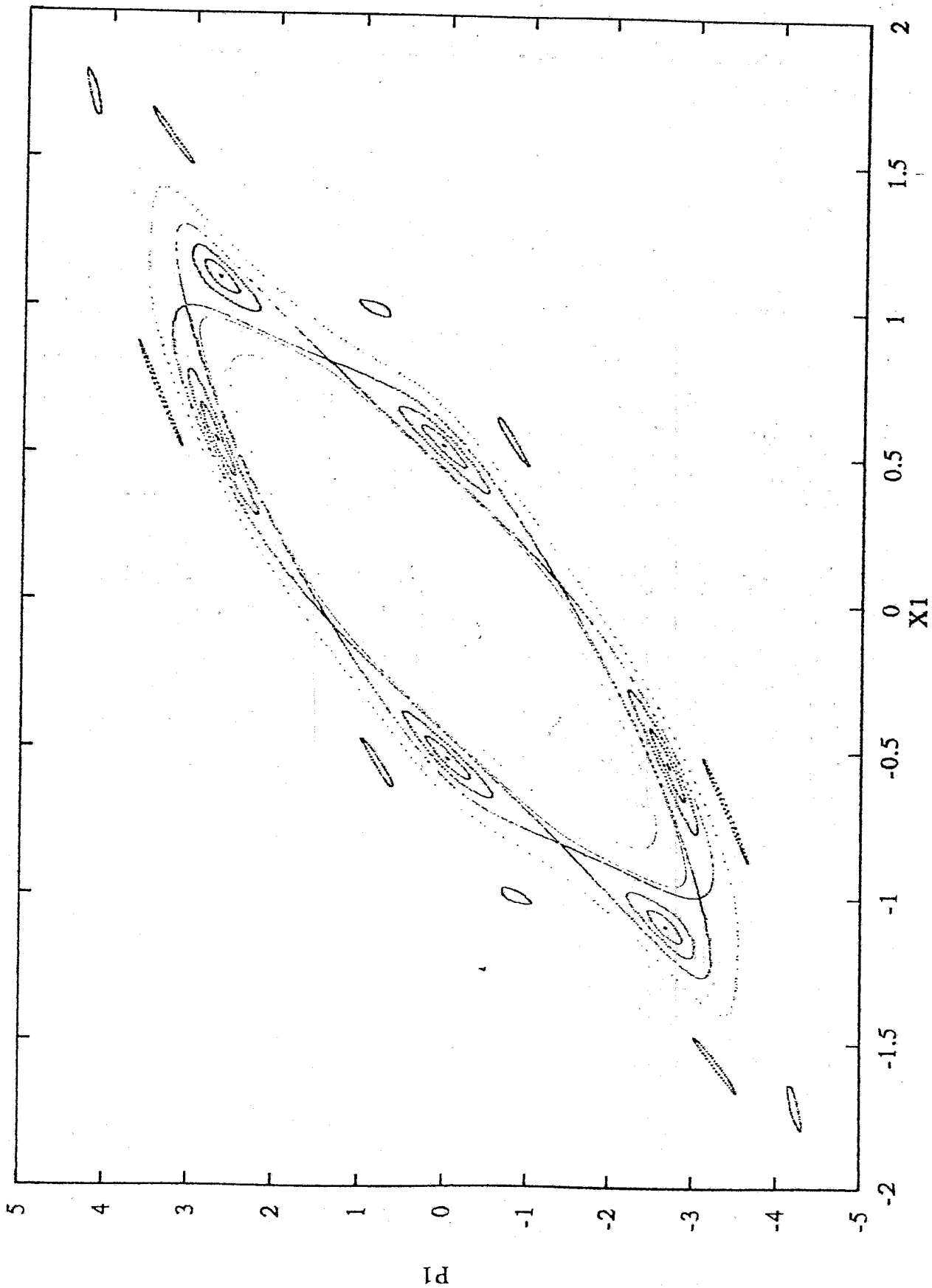


Έτσι καταλάβαμε ότι έχουμε να κάνουμε με ένα σημείο που λόγω συμμετρίας του δυναμικού γεννά όχι μία αλλά δύο ΠΤ τριπλής περιόδου. Να πούμε τέλος ότι οι S3A,C γίνονται ασταθής στο -1 , και ότι βρήκαμε μία ακόμη τροχιά (S3E) κοντά στο σημείο γέννησης, η οποία έχει φυσικά και την κατοπτρική της (ως προς $x_1 = 0$) και την οποία δεν μπορέσαμε να συνεχίσουμε λόγω μεγάλης αστάθειας. Σχήμα και αρχικές συνθήκες της S3E δείχνονται παρακάτω :

$$\begin{aligned} E &= 345.317898 \\ x_1 &= 0.030804 \\ x_2 &= 14.186500 \\ p_1 &= 0.058101 \\ p_2 &= 6.877365 \\ T &= 1.215780 \\ \alpha &= 0.999996 \end{aligned}$$



4 ΠΕΡΙΟΔΙΚΕΣ ΤΡΟΧΙΕΣ



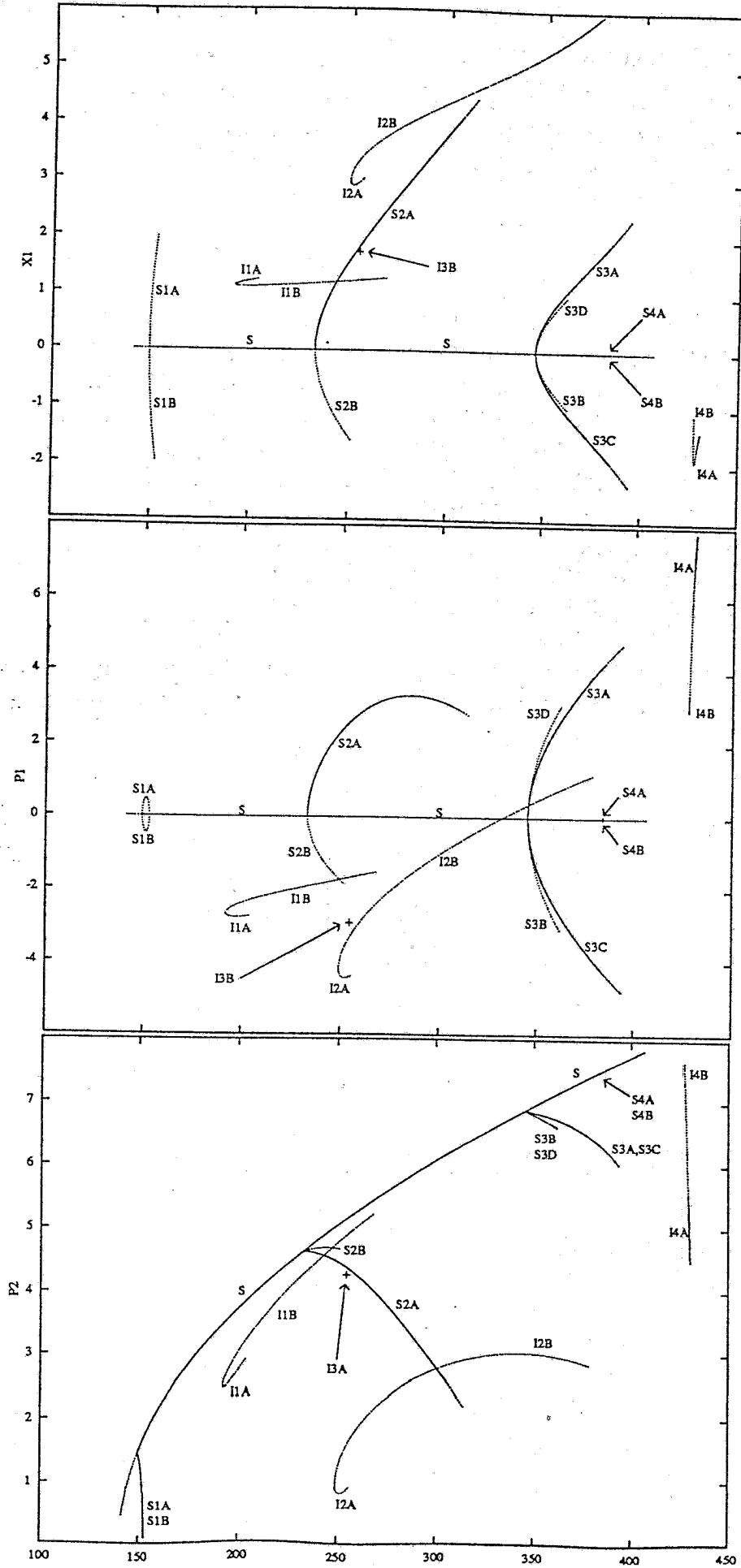
Στην συνέχεια παραθέτουμε τις αναπαραστάσεις των τροχιών αυτών σε (x_1, x_2) τον πίνακα των αρχικών συνθηκών και τα διαγράμματα χαρακτηριστικών (E, x_1) , (E, p_1) (E, p_2) (για σταθερό επίπεδο $x_2 = 14.1865$). Τα τελευταία περιλαμβάνουν και τις χαρακτηριστικές των saddle-nodes για τις οποίες θα μιλήσουμε αμέσως μετά.

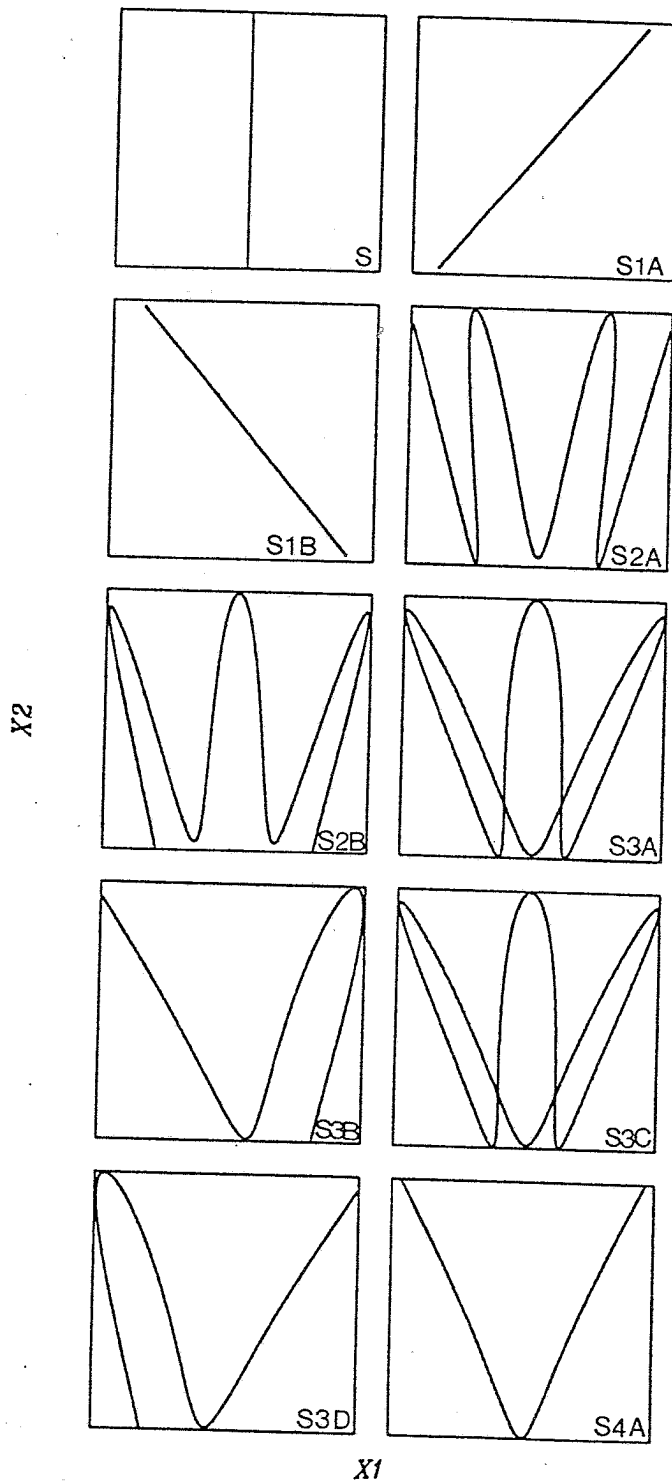
	E	x_1	x_2	p_1	p_2	T	α
S	355.193020	0.000000	14.186500	0.000000	7.041294	0.436900	-0.618740
S1A	150.009681	0.884718	14.186500	0.351702	1.417406	0.398700	1.271292
S1B	150.009681	-0.884718	14.186500	-0.351702	1.417406	0.398700	1.271292
S2A	240.391374	1.007793	14.186500	1.566077	4.586023	1.493700	0.987384
S2B	240.559217	-1.006265	14.186500	-1.187946	4.674673	1.494700	1.175233
S3A	355.056362	0.811452	14.186500	2.029015	6.810171	1.289199	0.977896
S3B	355.054526	-0.727657	14.186500	-2.353375	6.733869	1.290099	1.228331
S3C	355.056362	-0.811452	14.186500	-2.029015	6.810171	1.289199	0.977896
S3D	355.054526	0.727657	14.186500	2.353375	6.733869	1.290099	1.228331
S4A	384.132047	0.012382	14.186500	0.063627	7.500394	1.187799	0.999201
S4B	384.132047	-0.012382	14.186500	-0.063627	7.500394	1.187800	0.999200

Οι αρχικές συνθήκες για το προηγούμενο διάγραμμα Poincaré είναι $E = 362.021344$, $PSS : x_2 = 14.1865$, $p_2 = f(E, x_1, x_2, p_1)$ και :

x_1	p_1
-0.8	-1.5
-0.8	-2.0
0.6	2.0
0.4	1.0
0.0	0.2
-1.0	-1.5
-1.02	-2.0
-0.5	1.0
-1.4	-3.4
1.1	2.7
1.2	3.0
1.05	2.6
-1.6	-3.0
0.0	0.0
-1.1	-2.8
-1.1	-2.7
-1.1	-2.69

Σχήμα 17α. Διαγράμματα χαρακτηριστικών για ΠΤ πάνω από το σ_0 για και για saddle-nodes.





Σχήμα 17β. Διαγράμματα ΠΤ πάνω από το σύστημα.

4.2.3 Τροχιές που συνδέουν τα δύο πηγάδια (saddle-nodes)

Είναι γνωστό ότι στα περισσότερα δυναμικά μοντέλα (κυρίως στις πολλές διαστάσεις) ο εντοπισμός και η εξέλιξη ΠΤ περιστρεφόμενου τύπου είναι μάλλον δύσκολη υπόθεση. Στην δική μας όμως περίπτωση, και χάριν σε ένα υπολογιστικό πακέτο για δυναμικά συστήματα (dstool) βρήκαμε τέσσερεις διαφορετικές περιστρεφόμενες τροχιές. Κάθε μία είναι αντιπροσωπευτική και προμηνύει την ύπαρξη ολόκληρων οικογενειών ίδιου τύπου.

Κατά (ιστορική) σειρά είναι :

I2A,B Πιστεύουμε ότι σαν και αυτή θα υπάρχουν αρκετές (τουλάχιστον με εφικτές περιόδους και οι οποίες θα χωρίζονται σε δύο κατηγορίες, ανάλογα με τον αριθμό των κόμβων (άρτιες και περιπύες). Να πούμε επίσης πως κάποια στιγμή (περίπου $E \sim 313.514 - 313.600$ K) οι ιδιοτιμές στον ασταθή κλάδο (I2B) περνάνε από τα θετικά στα αρνητικά του πραγματικού άξονα και αυτό σημαίνει ότι υπάρχει μια περιοχή σταθερότητας (αφού οι ιδιοτιμές πρέπει υποχρεωτικά να ακολουθήσουν πορεία πάνω στον μοναδιαίο κύκλο) η οποία γεννά ΠΤ κάθε δυνατής πολλαπλότητας.

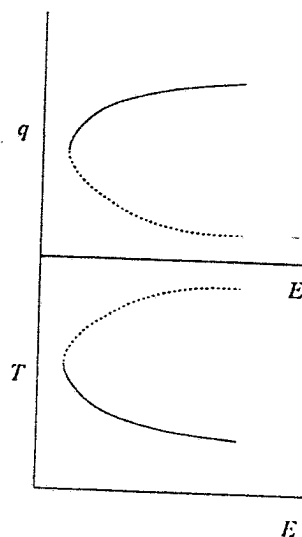
I1A,B Είναι οι πιο απλές από τις saddle-nodes (χωρίς κόμβους) και δεν παρουσίασαν μεγάλη δυσκολία στην εξέλιξη. Αξιοσημείωτο είναι ότι στον ασταθή κλάδο (I1B) παρουσιάζεται μια μικρή περιοχή ευστάθειας ($E \sim 255.800 - 257.850$ K), όπου οι ιδιοτιμές ξεκινάνε από το +1 πάνε μέχρι το -1 και ξαναγυρίζουν και βγαίνουν στο +1. Αυτό σημαίνει ότι η περιοχή αυτή μπορεί να γεννήσει κάθε δυνατής πολλαπλότητας ΠΤ δύο φορές. Τέλος ο σταθερός κλάδος (I1A) γίνεται ασταθής στο +1.

I3A,B Άλλη μια κατηγορία η οποία είναι απλή (χωρίς κόμβους) η οποία όμως χτυπά μέσα στα πηγάδια του δυναμικού με κάπως πιο πολύπλοκο τρόπο από τις I1A,B. Την τροχιά αυτή δεν μπορέσαμε να την εξελίξουμε καθόλου, γιατί στο σημείο στο οποίο εντοπίστηκε είχε αστάθεια περίπου 13,000. Πιστεύουμε τέλος ότι θα υπάρχουν παρόμοιου τύπου

τροχιές που θα έχουν και κόμβους (ένας συνδυασμός I2 και I3).

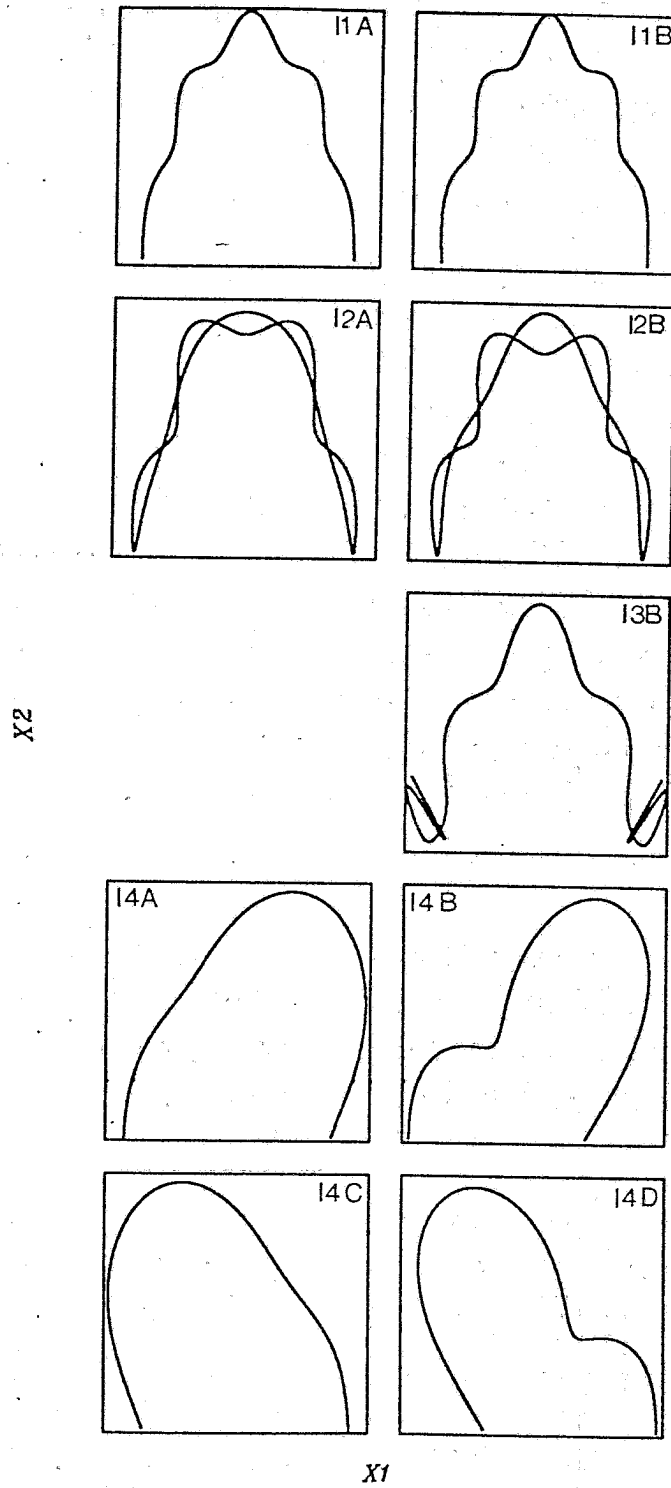
I4A,B,C,D Τέλος βρήκαμε και ασύμμετρες τροχιές (ως προς $x_1 = 0$) που λόγω συμμετρίας του δυναμικού υπάρχουν κατά (κατοπτρικά) ζεύγη. Παρατηρήθηκαν πάρα πολύ ψηλά (430. K) και παρουσίασαν ιδιαίτερη δυσκολία στην εξέλιξη. Ο σταθερός κλάδος (I4A,C) γίνεται ασταθής στο -1 και ξανά σταθερός στο -1 .

Μια ενδιαφέρουσα παρατήρηση για όλες τις τροχιές περισεφόμενου τύπου που εξελίξαμε είναι ότι ο σταθερός κλάδος παρουσίαζε μείωση της περιόδου με αύξηση της ενέργειας ενώ ο ασταθής αύξηση της περιόδου με την ενέργεια. Παρουσιάζεται δηλαδή μια εικόνα όπως στο διπλανό σχήμα. Να πούμε εδώ ότι όλες οι τροχιές που παρατηρήσαμε ως τώρα (εκτός των S1A,B \ /) παρουσίαζαν ταυτόχρονη αύξηση (ή μείωση) περιόδου και ενέργειας για σταθερούς και ασταθείς κλάδους.



Στη συνέχεια παραθέτουμε τον πίνακα αρχικών συνθηκών και τις αναπαραστάσεις των saddle-nodes στον χώρο των θέσεων. Όπως πάντα για περισσότερες πληροφορίες, όσον αφορά τις μορφολογίες των τροχιών αυτών στον φασικό χώρο, βλέπε ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ C.

	E	x_1	x_2	p_1	p_2	T	α
I1A	192.557996	-1.147537	14.186500	2.731487	2.466677	1.548220	-0.985970
I1B	194.143570	1.118703	14.186500	-2.565726	2.672989	1.604629	0.588618 $\times 10^2$
I2A	255.184832	2.997235	14.186500	-4.411452	0.874535	1.163199	-9.614324
I2B	255.087869	-1.699774	14.186500	-5.507814	1.431645	1.235299	0.409570 $\times 10^2$
I3B	254.602533	1.734120	14.186500	-2.937019	4.253000	2.369550	0.132884 $\times 10^5$
I4A	430.002365	7.186733	14.186500	-2.044194	3.040661	1.208299	-0.818486
I4B	427.603359	10.648308	14.186500	0.654135	1.546986	4.057799	3.924245
I4C	430.002365	-7.186733	14.186500	2.044194	3.040661	1.208299	-0.818486
I4D	427.603359	-10.648308	14.186500	-0.654135	1.546986	4.057799	3.924245



Σχήμα 18. Διαγράμματα περιστρεφόμενων ΠΤ (saddle-nodes).

ΕΠΙΛΟΓΟΣ

Οφείλουμε, τώρα που φτάσαμε στο τέλος, μερικές εξηγήσεις στον αναγνώστη. Και πρώτα απ' όλα σε τι αποσκοπούσε όλη αυτή η εργασία και τι οφέλη είχαμε πραγματοποιώντας την.

Σκοπός λοιπόν ήταν η εισαγωγή μας σε θέματα Χημικής Δυναμικής και σε τρόπους (θεωρητικούς και υπολογιστικούς) επίλυσης προβλημάτων τέτοιας υφής. Τι αποκομήσαμε; Μα φυσικά εμπειρίες. Εμπειρίες πάνω στο αντικείμενο, εμπειρίες πάνω στην πρακτική εφαρμογή διαφόρων θεωριών, εμπειρίες πάνω στην ίδια την έρευνα.

Και λίγα λόγια για τον τίτλο. Αντίθετα με τα κοινώς γενόμενα, και επειδή ήταν η πρώτη μου (ερευνητική) δουλειά, πρώτα έφτιαξα το εξώφυλλο και "οκαρφίστηκα" τον τίτλο και μετά άρχισα να την γράφω. Η συγγραφή άρχισε περίπου στα μισά της ερευνητικής διαδικασίας και έτσι ο τίτλος αντικατόπτριζε απόλυτα την εικόνα του 'φασικού χώρου' μέσα μου, εκείνη την εποχή. Ήταν τόσες πολλές, και άγνωστες μέχρι τότε, οι έννοιες που με βομβάρδιζαν καθημερινά που πραγματικά δεν νόμιζα ότι θα έβλεπα ποτέ φως στην άλλη άκρη του... φασικού τούνελ.

Τώρα όμως; Τώρα που φτάσαμε στο τέλος και οι έννοιες έχουν πλέον ξεδιαλύνει; Τώρα που η ουσία του θέματος έχει κατασταλάξει σαν... αχνιστός γαλλικός καφές; Ε!, τώρα είναι που ο τίτλος γίνεται ακόμη πιο επιτακτικός. Γιατί; γιατί τώρα βλέπω πως όλα αυτά που διαβάσατε δεν είναι παρά η μία σελίδα του τόμου "Φασικός Χώρος". Είναι τόσες πολλές οι δυνατότητες που ανοίγονται μπροστά μας που θα θέλαμε ακόμα τόσες σελίδες μόνο και μόνο για τα περιεχόμενα. Όνειρο μιας ζωής; Ίσως...

Ήταν τελικά τόσο προφητικός ο τίτλος (την εποχή που επινοήθηκε) που μόνο τα λόγια του συγγραφέα μπορούν να τον πλαισιώσουν:

*...δεν δημιουργεί μέσα μας έναν καινούριο κόσμο,
αλλά ένα καινούριο χάος...*

Παραπομπές

- [1] *R.S.Dumond & S.Jain*, J.Chem.Phys.**97**,1227(1992)
- [2] *R.A.Aziz & M.J.Slaman*, Mol.Phys.**58**,679(1986)
- [3] *Μ.Φουναργιωτάκης*: “Μελέτη της Χημικής Δυναμικής μέσω περιοδικών τροχιών” (Διδακτορική Διατριβή, Παν/μιο Κρήτης - Τμήμα Χημείας, 1989)
- [4] *Α.Ι.Νέζης*: “Αναπαραστάσεις στον Φασικό Χώρο” (Παν/μιο Κρήτης - Τμήμα Φυσικής, 1993)
- [5] *M.Henon*, Physica **5D**,412(1982)
- [6] *S.C.Farantos*: ‘Spectroscopy and Dynamics of Vibrationally excited molecules: a phase space structure analysis’, “*Chaotic Dynamics: Theory and Practice*” Edt. T.Bountis, Plenum Press, NY 1992
- [7] *S.C.Farantos*: ‘Chemical Dynamics: a periodic orbits approach’, “*Time-Dependent Quantum Molecular Dynamics*” Edt. J.Broeckhove & L.Lathouwers, Plenum Press, NY 1992
- [8] *Ι.Δ.Χατζηδημητρίου*: ‘Συντονισμός και Αστάθεια σε Δυναμικά Συστήματα’, “*Τάξη και Χάος - ΙΙ*”, Επιμ. Τ.Μπούνης & Σ.Πνευματικός, Εκδ. Πνευματικού, Αθήνα 1989
- [9] *K.R.Mayer & G.R.Hall*: ‘Introduction to Hamiltonian Dynamical Systems and N-Body Problem’, Springer-Verlag Edt. 1992 (“*Applied Mathematical Sciences*” vol.90)

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α

Το Γραμμικοποιημένο Πρόβλημα

Υποθέτουμε ότι στον “πάτο” το δυναμικό είναι παραβολοειδούς μορφής. Είναι δηλαδή της μορφής :

$$V(x, y) = \frac{1}{2}k_x x^2 + \frac{1}{2}k_y y^2$$

Έτσι κάνουμε τα εξής : Κρατώντας το $y = 0$ ζωγραφίζω το $V(x, y)$ ως προς x . Η πιθανή του μορφή θα είναι κάτι σαν παραβολή κοντά στον “πάτο”. Αν τώρα ζωγραφίσω το $V(x, y)$ ως προς x^2 πρέπει να πάρω μια ευθεία της οποίας η κλίση θα μας δώσει το $\frac{1}{2}k_x$. Αν α η κλίση της “ευθείας” $V = \alpha(x^2) + \beta$ τότε :

$$\frac{1}{2}k_x = \alpha \Rightarrow k_x = 2\alpha$$

Αν τώρα η μάζα που αντιστοιχεί στην x συντεταγμένη είναι m_x τότε :

$$\omega_x = \sqrt{\frac{k_x}{m_x}},$$

και η x -περίοδος είναι :

$$T_x = \frac{2\pi}{\omega_x} = 2\pi \sqrt{\frac{m_x}{k_x}},$$

και με όμοιο τρόπο :

$$T_y = 2\pi \sqrt{\frac{m_y}{k_y}}$$

Τα T_x, T_y είναι οι κανονικές περίοδοι γιατί βρέθηκαν βάσει των κανονικών συντεταγμένων x, y .

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β

Η Ιακωβιανή του προβλήματος

Αν γράψουμε τις εξισώσεις του Hamilton στην μορφή :

$$f_1 = \frac{dx_1}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_1} = \frac{p_1}{m_1}$$

$$f_2 = \frac{dx_2}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_2} = \frac{p_2}{m_2}$$

$$f_3 = \frac{dp_1}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_1} = -2 \frac{dV(r_1)}{dr_1} \frac{x_1}{r_1} \frac{1}{r_m^2}$$

$$f_4 = \frac{dp_2}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_2} = -\frac{1}{2} \frac{dV(r_1)}{dr_1} \frac{x_2}{r_1} \frac{1}{r_m^2} - \frac{dV(r_2)}{dr_2} \frac{1}{r_m}$$

τότε η Ιακωβιανή (Jacobian) του προβλήματος ορίζεται σαν :

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_1}{\partial p_1} & \frac{\partial f_1}{\partial p_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial p_1} & \frac{\partial f_2}{\partial p_2} \\ \frac{\partial f_3}{\partial x_1} & \frac{\partial f_3}{\partial x_2} & \frac{\partial f_3}{\partial p_1} & \frac{\partial f_3}{\partial p_2} \\ \frac{\partial f_4}{\partial x_1} & \frac{\partial f_4}{\partial x_2} & \frac{\partial f_4}{\partial p_1} & \frac{\partial f_4}{\partial p_2} \end{pmatrix}$$

Όπως φαίνεται από τις εξισώσεις του Hamilton ισχύουν τα εξής :

$$J_{11} = J_{12} = J_{14} = J_{21} = J_{22} = J_{23} = J_{33} = J_{34} = J_{43} = J_{44} = 0$$

$$J_{13} = \frac{1}{m_1}, \quad J_{24} = \frac{1}{m_2}$$

και για τα $J_{31}, J_{32}, J_{41}, J_{42}$ έχουμε :

$$J_{31} = \frac{\partial f_3}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(-2 \frac{dV(r_1)}{dr_1} \frac{x_1}{r_1} \frac{1}{r_m^2} \right) = -\frac{2}{r_1^2 r_m^4} \left[x_1^2 \frac{d^2 V(r_1)}{dr_1^2} + (r_m^2 r_1 - \frac{x_1^2}{r_1}) \frac{dV(r_1)}{dr_1} \right]$$

$$J_{32} = \frac{\partial f_3}{\partial x_2} = \frac{\partial}{\partial x_2} \left(-2 \frac{dV(r_1)}{dr_1} \frac{x_1}{r_1} \frac{1}{r_m^2} \right) = -\frac{1}{2} \frac{1}{r_m^4} \frac{x_1 x_2}{r_1^2} \left[\frac{d^2 V(r_1)}{dr_1^2} - \frac{1}{r_1} \frac{dV(r_1)}{dr_1} \right]$$

$$J_{41} = \frac{\partial f_4}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(-\frac{1}{2} \frac{dV(r_1)}{dr_1} \frac{x_2}{r_1} \frac{1}{r_m^2} - \frac{dV(r_2)}{dr_2} \frac{1}{r_m} \right) = -\frac{1}{2} \frac{1}{r_m^4} \frac{x_1 x_2}{r_1^2} \left[\frac{d^2 V(r_1)}{dr_1^2} - \frac{1}{r_1} \frac{dV(r_1)}{dr_1} \right]$$

$$J_{42} = \frac{\partial f_4}{\partial x_2} = \frac{\partial}{\partial x_2} \left(-\frac{1}{2} \frac{dV(r_1)}{dr_1} \frac{x_2}{r_1} \frac{1}{r_m^2} - \frac{dV(r_2)}{dr_2} \frac{1}{r_m} \right) = -\frac{1}{8} \frac{1}{r_m^4} \frac{1}{r_1^2} \left[x_2^2 \frac{d^2 V(r_1)}{dr_1^2} + (4r_m^2 r_1 - \frac{x_2^2}{r_1}) \frac{dV(r_1)}{dr_1} \right] - \frac{1}{r_m^2} \frac{d^2 V(r_2)}{dr_2^2}$$

Τέλος η πρώτη παράγωγος του δυναμικού δίνεται από την σχέση (9) και η δεύτερη από την σχέση :

$$\begin{aligned} \frac{d^2 V(r)}{dr^2} &= \varepsilon A e^{-ar + \beta r^2} [(-ar + \beta r^2)^2 + 2\beta] - \\ &- \varepsilon \left\{ \begin{array}{l} e^{-(\frac{d}{r}-1)^2} \left\{ [2\frac{d}{r^2}(\frac{d}{r}-1)]^2 + 2\frac{d}{r^3}(2-3\frac{d}{r}) \right\} , r < d \\ 0 , r \geq d \end{array} \right\} \left[\frac{c_6}{r^6} + \frac{c_8}{r^8} + \frac{c_{10}}{r^{10}} \right] + \\ &+ 2\varepsilon \left\{ \begin{array}{l} e^{-(\frac{d}{r}-1)^2} [2\frac{d}{r^2}(\frac{d}{r}-1)] , r < d \\ 0 , r \geq d \end{array} \right\} \left[6\frac{c_6}{r^7} + 8\frac{c_8}{r^9} + 10\frac{c_{10}}{r^{11}} \right] - \\ &- \varepsilon \left\{ \begin{array}{l} e^{-(\frac{d}{r}-1)^2} , r < d \\ 1 , r \geq d \end{array} \right\} \left[42\frac{c_6}{r^8} + 72\frac{c_8}{r^{10}} + 110\frac{c_{10}}{r^{12}} \right] \end{aligned}$$