### МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение

### высшего образования

# «САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиофизики и нелинейной динамики

Волновые явления в двумерной решетке консервативных и активных частиц

## АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

по направлению 03.04.03 Радиофизика студента 2 курса физического факультета Степина Игоря Алексеевича

Научный руководитель

доцент, к.ф.-м.н.

\_\_\_\_\_ К.С.Сергеев

Зав. кафедрой

д.ф.-м.н., профессор

В.С. Анищенко

Саратов 2020

#### Введение

За нелинейных годы исследований динамики процессов сформировалось несколько научных направлений. Одним из них является изучение частиц связанных нелинейными силами. Задачи динамики подобного рода берут начало с пионерской работы Ферми, Паста, Улама и Цингу [1]. В последние годы публикуется большое количество работ [2-13] по исследованию моделей частиц, способных на самостоятельное движение. Модели такого рода носят общее название «активное вещество». Парциальные элементы активного вещества способны извлекать энергию из окружающей среды и трансформировать ее в кинетическую энергию направленного движения.

Системы взаимодействующих элементов можно условно разделить на два класса: неупорядоченные и пространственно-упорядоченные.

Если в таких системах парциальными элементами являются активные частицы, то динамика таких ансамблей заметно усложняется. Существует так называемые модели активных броуновских частиц (АБЧ) – это такие модели «активного вещества», в которых движение частиц происходит не только в результате преобразования энергии окружающей среды в кинетическую, но и за счет флуктуации. Динамика модели АБЧ более разобрана по сравнению с динамикой консервативных броуновских частиц.

Консервативные частицы отличаются от активных «подводом» энергии у последних, который может осуществляться различными способами. Приток энергии в уравнениях движения можно описать, как силу отрицательного трения в направлении движения. Для этого вводится нелинейное трение. Типичным примером модели с нелинейным трением является модель Рэлея с параболическим коэффициентом отрицательного трения.

Также модели ансамблей связанных частиц различаются характером взаимодействия. Один из способов связи элементов ансамбля основан на

2

механизме выравнивания направлений движения частиц через общее поле скоростей. Эта идея взаимодействия получила развитие и в других моделях так называемых «самодвижущихся» частиц.

Перспективным направлением исследования является взаимодействие пассивных или активных элементов друг с другом или с некоторой активной средой, или ванной. Для изучения процессов в таких системах используется моделирование больших ансамблей из множества компонентов, связанных друг с другом.

Важным направлением исследований является изучение реакции активного вещества на внешнее воздействие. Эти эффекты могут быть изучены в рамках простых моделей двумерных решеток точечных частиц, например, на модели частиц связанных потенциалом взаимодействия Морзе. Как было показано в [2] двумерная плотно упакованная консервативная решетка Морзе поддерживает распространение локализованных солитонов (краудионов), распространяющихся в плотно упакованном ряду частиц. Они возбуждаются начальным возмущением одной частицы в направлении вдоль ряда. Установившийся в результате такого возмущения режим зависит от начальной скорости частицы.

В настоящей работе исследуется формирование солитонов и краудионов в плотноупакованной двумерной решетке точечных частиц, связанных потенциальными силами Морзе. Решетка состоит, в основном, из консервативных частиц, а активные частицы с трением Рэлея добавлены в качестве примесей.

Актуальность выбранной темы подтверждается большим количеством публикаций по схожим тематикам. Существует большое количество работ, в которых исследуются солитоноподобные возбуждения в полностью консервативных либо полностью активных решетках, однако подобные «комбинированные» модели изучены в меньшей степени. Исследования

3

процессов формирования и распространения нелинейных волн, проведенные в рамках дипломной работы, представляют собой классичесткую задачу нелинейной динамики как раздела радиофизики.

Научная и практическая значимость результатов подтверждается возможностью их применения в задачах, связанных с транспортом зарядов, при разработке метаматериалов, а также в качестве базы для дальнейших исследований процессов распространения нелинейных волн в активных дискретных системах.

Полученные результаты находятся в качественном согласовании с результатами исследований других коллективов, представленных в научной литературе, что доказывает их достоверность.

4

#### Практическая часть

В настоящей работе рассмотрена комбинационная модель консервативных и активных частиц с трением Рэлея [14]  $\gamma(\vartheta) = -\mu \left(1 - \frac{\vartheta^2}{\vartheta_0^2}\right)$ , связь между которыми обеспечивается силами, соответствующими потенциалу Морзе  $U(r) = D(e^{-2br} - 2e^{-br})$  и консервативных частиц двумерная плоскость, на которой равномерно распределены частицы образующие треугольную решетку, динамика каждой частицы определяется уравнением:

$$\frac{\ddot{\vec{q}_i} - \mu_i \left(1 - \frac{\dot{\vec{q}_i^2}}{\vartheta_0^2}\right) \dot{\vec{q}_i} = \sum_{\left|\vec{q_i^k}\right| < R} \frac{\vec{q_i^k}}{\left|\vec{q_i^k}\right|} \left| \left(e^{\left(b\sigma - \left|\vec{q_i^k}\right|\right)} - e^{2\left(b\sigma - \left|\vec{q_i^k}\right|\right)}\right) \frac{1}{1 + e^{\frac{\left|\vec{q_i^k}\right|/b - d}{2\nu}}} - e^{\frac{1}{2\nu}}\right| \right| = \frac{1}{1 + e^{\frac{\left|\vec{q_i^k}\right|}{2\nu}}} - e^{\frac{1}{2\nu}} \left| \left(e^{\left(b\sigma - \left|\vec{q_i^k}\right|\right)}\right) - e^{\frac{1}{2\nu}}\right| = \frac{1}{2\nu} \left| e^{\frac{1}{2\nu}} - e^{\frac{1}{2\nu}} \right| = \frac{$$

12be2bo-qik-2ebo-qik2veqikb-d2veqikb-d2v

Здесь  $\vec{q_i} = b(\vec{r_i} - \vec{r_{i0}})$  безразмерное перемещение і-й частицы с координатами  $\vec{r_i}$  из своего положения равновесия в  $\vec{r_{i0}}$ ,  $\vec{q_i} = \frac{\omega M}{b} \vec{\vartheta_i}$  – безразмерная скорость,  $\left| \vec{q_i^k} \right|$  - безразмерное расстояние между і-й и k-й частицами и  $\frac{\vec{q_i^k}}{|\vec{q_i^k}|}$  является единичным вектором, направленным от і-й частицы к k-й. Коэффициент  $\mu_i$  равен нулю для консервативных частиц и больше нуля для активных. Параметр  $\vartheta_0$  соответствует стационарному значению скорости: отдельная частица в стационарном состоянии будет двигаться в направлении, определенном начальными условиями, со скоростью  $\vartheta_0$ .

Основным методом исследования в рамках дипломной работы было численное моделирование системы уравнений (1) методом Рунге-Куты 4-го порядка точности с шагом интегрирования 0.0005. Программа написана на языке C++ и является совместной разработкой с научным руководителем.

Для визуализации анализа результатов моделирования применялось программное обеспечение Ovito. Данная программа позволяет графически представлять решетку связанных осцилляторов и отображает цветом их скорость (см. рис.1.), что позволяет исследовать поведение солитонов и краудионов, которые образуются при заданных условиях.



Рис.1. Распространение солитоноподобных волн в комбинированной модели активных и консервативных частиц.

Исследовалось поведение солитонов и краудионов при разных начальных условиях при разной концентрации распределения в пространстве активных частиц с разными параметрами решеток.

На рис.2 показано движение солитона а) при стационарной скорости  $\vartheta_0 = 1$ , б) при стационарной скорости  $\vartheta_0 = 3$ . Начальной скорости не хватает для возбуждения краудиона, возбуждается только низкоэнергетический солитон, его энергия настолько мала, что даже с учётом подкачки активными частицами энергии не достаточно, чтобы просуществовать дольше нескольких соударений. А начиная с начальной скорости  $\vartheta = 10$  и выше уже можно возбудить краудион, причём такой, который будет получать энергию при правильном расположении активных частиц.



Рис.2. Поведение солитона при начальной скорости  $\vartheta_0=5$ . а) стационарная скорость  $\vartheta = 1$ , б) стационарная скорость  $\vartheta = 3$ .Цвет указывает скорость по оси х.

При дальнейшем увеличении стационарной скорости мы можем наблюдать рис.3 а) начало движение солитона, б) движение солитона, в) солитон превратился в краудион, г) краудион, распространяющийся на значительные расстояния (порядка десятков  $\sigma$ ).



Рис.3. Трансформация солитона в краудион.

При дальнейшем увеличении  $\vartheta$  подкачивается слишком много энергии, это приводит к разрушению решётки и образованию неупорядоченного ансамбля. В ходе работы были исследованы различные варианты распространения активных частиц в консервативной решетке (см. рис. 4, 8, 10, 12, 14). Для каждой конфигурации были построены семейства зависимостей длины пробега краудиона от начальной скорости при различных значениях стационарной скорости (рис. 5, 7, 9, 11, 13, 15).



Рис.4. Комбинированная модель активных (красные) [7; 4], [7; 13], и консервативных (синие) частиц, размер решетки 12х24.



Рис.5. Семейство зависимостей длины пробега солитона от начальной скорости.

Из анализа проведенных зависимостей видно, что наибольшая длина пробега обеспечивается при конфигурации, представленной на рисунке 5, при этом пик длины пробега соответствует значения параметров  $\vartheta = 11, \vartheta_0 = 10$ .

Далее был исследован вопрос о влиянии включений активных частиц на процессы распространения М-, N-краудионов. Методика исследований аналогична изображенной в предыдущем разделе: формируются консервативные двумерное решетки с различными пространственными расположением активных частиц. Для каждого расположения исследуются длины пробега краудионов различной конфигурации (рис. 16, 18) и строятся зависимости длины пробега от начального импульса частиц при разных значениях стационарной скорости.



Рис.6. Комбинированная модель активных (красные) [7; 4], [7; 12], [7;20] и консервативных (синие) частиц, зелёным частицы с начальной скоростью [7; 1], [7; 2], [7; 3], размер решетки 12х24.



Рис.7. Семейство зависимостей длины пробега солитона от начальной скорости.

Было установлено, что наибольшая длина пробега обеспечивается при конфигурации представленной на рисунке 7, при этом пик длины пробега соответствует значениям параметров  $\vartheta = 12$ ,  $\vartheta_0 = 5$ .

Далее был исследован вопрос о влиянии включений групп активных распространения М-, N-краудионов. частиц на процессы Методика исследований изображенной аналогична В предыдущем разделе: формируются консервативные двумерное решетки различными с пространственными расположением активных частиц. Для каждого исследуются длины пробега краудионов различной расположения конфигурации (рис. 20, 22, 24, 26) и строятся зависимости длины пробега от начального импульса частиц при разных значениях стационарной скорости.



Рис.8. Комбинированная модель активных (красные) [6; 4], [7; 4], [8; 4], [6; 12], [7; 12], [8; 12], [6; 20], [7; 20], [8; 20] и консервативных (синие) частиц, зелёным частицы с начальной скоростью [7; 1], [7; 2], [7; 3], размер решетки 12х24.



Рис.9. Семейство зависимостей длины пробега солитона от начальной скорости.

Было установлено, что наибольшая длина пробега обеспечивается при конфигурации представленной на рисунке 9, при этом пик длины пробега соответствует значениям параметров  $\vartheta = 10, \vartheta_0 = 5$ .

#### Заключение

В настоящей работе исследовано поведение солитонов и краудионов при разных начальных условиях, при разной концентрации распределения в пространстве активных частиц, при разной количестве частиц с заданной начальной скоростью и при разных параметрах. Было обнаружено, что добавление активных частиц в консервативную решетку приводит к увеличению длин пробега краудиона, а увеличение количества частиц приводит к расширению диапазона, в котором при разных параметрах длина пробега была получена в случае, отображенном на рис. 7, при  $\vartheta_0 = 5$ .

Список используемой литературы

- Studies of Nonlinear Problems / Fermi, E.; Pasta, J.; Ulam, S. // LosAlamosNationalLaboratory. — 1955.
- Dissipative solitons and crowdions in triangular lattice of active particles
   / A.P. Chetverikov, S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova, K.S. Sergeev //
   Journal of Micromechanics and Molecular Physics 2018.
- The mechanics and statics of active matter / Ramaswamy, S. // Annu. Rev. Condens. Matter Phys. — 2010.
- Hydrodynamics of soft active matter / Marchetti, M. C., J.F. Joanny, S. Ramaswamy, T.B. Liverpool, J.Prost, M. Rao, R.A. Simha // Rev. Mod. Phys. 2013.
- Active particles in complex and crowded environments / Clemens Bechinger, Roberto Di Leonardo, Hartmut Löwen, Charles Reichhardt, Giorgio Volpe, Giovanni Volpe // Reviewsofmodernphysics— 2016.— Vol 88.
- Stochastic thermodynamics of active Brownian particles / C. Ganguly and D. Chaudhuri // Phys. Rev. E 88. — 2013.
- 7. Active Brownian particles: Entropy production and fluctuation response /
  D. Chaudhuri // Phys.Rev. E 90. 2014.
- Towards a statistical mechanical theory of active fluids / U. M. B. Marconi, C. Maggi // Soft Matter 11. — 2015.
- Additivity, density fluctuations, and nonequilibrium thermodynamics for active Brownian particles / S. Chakraborti, S. Mishra, P. Pradhan // Phys. Rev. E 93. — 2016.
- 10.Stochastic thermodynamics for active matter / T. Speck // EPL 114. —

2016.

- 11.Stochastic thermodynamics with reservoirs: Sheared and active colloidal particles / T. Speck // arXiv:1707.05289. 2017.
- 12.Entropy production of active particles and for particles in active baths / InstitutfürTheoretischePhysik, Universit<sup>--</sup> at Stuttgart— 2017.
- 13.Hydrodynamics of Suspensions of Passive and Active Rigid Particles: A
  Rigid Multiblob Approach / Florencio Balboa Usabiaga,
  BakytzhanKallemov, Blaise Delmotte, Amneet Pal Singh Bhalla, Boyce
  E. Griffith, Aleksandar Donev— 2017.
- 14. Нелинейная динамика / Сергеев, Четвериков. 2018