МИНОБРНАУКИ РОССИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиофизики и нелинейной динамики

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ В ДВУМЕРНОМ АНСАМБЛЕ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ АКТИВНЫХ ЧАСТИЦ

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студентки 4 курса 4032 группы
направления 03.03.03 Радиофизика
Института физики
Утаровой Адемы Жаскайратовны

Научный руководитель
к.ф.-м.н., доцент ____________________ К.С. Сергеев

Зав. кафедрой радиофизики
и нелинейной динамики,
д.ф.-м.н., доцент ____________________ Г.И. Стрелкова

Саратов 2022 г.

Введение. Настоящая бакалаврская работа посвящена изучению формирования кластеров в двумерном ансамбле взаимодействующих активных частиц и исследованию их свойств при изменении управляющих параметров.

Актуальным направлением в изучении нелинейной динамики является исследование поведения ансамблей множества элементов, взаимодействие которых происходит посредством связи различного характера. Их свойства зависят как от самих свойств элементов ансамблей, так и от характера связей между ними. На сегодняшний день данной тематике посвящено большое количество научных работ.

Большой интерес вызывают задачи, которые связаны с моделированием систем, таких как ансамбли или решетки, из множества движущихся в пространстве элементов, взаимодействующих друг с другом, а также находящихся под действием случайных сил. Наиболее простой системой такого типа являются ансамбли точечных частиц, взаимодействующих между собой при помощи потенциальных сил и находящихся под влиянием внешней среды подобно броуновским частицам.

Целью бакалаврской работы является установление закономерностей формирования кластеров в двумерном ансамбле взаимодействующих активных частиц.

Для достижения цели, были поставлены следующие **задачи**:

1. Исследовать изменения поведения взаимодействующих активных частиц при изменении управляющих параметров.
2. Визуализация двумерной решетки частиц при помощи программного обеспечения OVITO.
3. Анализ динамики двумерной решетки активных частиц.
4. Анализ литературы по данной тематике.

Благодарность. Автор выражает благодарность научному руководителю К.С. Сергееву за постановку задач, помощь при выполнении работы и анализе результатов, а также Г.И. Стрелковой за ценные рекомендации.

Структура и объем работы. Бакалаврская работа состоит из введения, двух глав, заключения и списка используемых источников, включающего 29 наименований. Работа изложена на 39 листах машинописного текста, содержит 20 рисунков.

Основное содержание работы.

Во введении обоснована актуальность выбранной темы исследования, формулируются цель и задачи, проводится обзор по теме исследования в имеющейся научной литературе результатов, описывается структура работы и отмечается их практическая и научная значимость.

Первая глава состоит из трех подразделов. В *первом подразделе* рассматриваются основные понятия теории солитонов. Долгое время уединенная волна не играла особую роль в математической структуре нелинейной волновой теории. Э. Ферми, Дж. Паста и С. Улам решили провести эксперимент с помощью компьютерного моделирования на одномерной решетке. Они исследовали динамическое поведение цепи с нелинейными взаимодействиями между атомами. Но система не приблизилась к энергетическому равновесию, энергия не распространялась по всем нормальным режимам и периодически возвращалась к первоначально возбужденному режиму. Результаты вызвали большой интерес и начались повторные исследования. В результате численного моделирования было обнаружено, что в системе могут распространяться устойчивые импульсные волны, моделируемые уравнением Кортевега -- де Вриза (КдВ). Волны, которые проходят сквозь друг друга и сохраняют форму и скорость после столкновения, были названы солитонами. Единственным результатом взаимодействия солитонов может быть определенный фазовый сдвиг. Солитоны имеют способность сохранять свою форму без изменений во вовремя распространения. Другой необычной характеристикой солитонов является возможность сохранения скорости и формы при взаимном прохождении.

Второй подраздел посвящен исследованию кластеров в одномерном ансамбле взаимодействующих частиц. При изменении параметров плотности ансамблей частиц, величины диссипации и интенсивности внешней силы, можно изучить поведение подобных ансамблей при различных условиях. Исследуется процесс разрушения решетки при помощи потенциалов Морзе, Леннарда-Джонса и Тоды. Для анализа свойств ансамблей применяются макроскопические и микроскопические характеристики. К макроскопическим относят усредненные потенциальная, кинетическая и полная энергии,удельная теплоемкость, энтропия, давление. К микроскопическим характеристикам относят динамический структурный фактор, функцию вероятности возбуждения кластера, различные спектральные характеристики.

Также было рассмотрено поведение кластеров в ансамблях Морзе. В ходе анализа потенциала Морзе получаем, что при уменьшении плотности частиц ниже критического значения, минимум на середине расстояния становится максимумом, вследствие чего появляются два минимума на расстоянии σ от каждой частицы [1-4]. Частицы становятся неустойчивыми и система переходит в кластерное состояние. Основываясь на расчеты функции *P(l)*, можно рассмотреть в системе три “фазовых” состояния: “газовое”, “жидкое”, “кристаллическое”. При некоторых значениях температуры происходит переход одного состояния в другое, имеющее значение температур фазовых переходов: “кипение” - T_{LG} и “плавление” - T_{SL}.

Зависимость температуры от энтропии системы, характеризуется как процесс распада одного (упорядоченного) кластера на несколько, менее упорядоченных.Энтропия позволяет характеризовать степень понижения упорядоченности системы с повышением температуры.

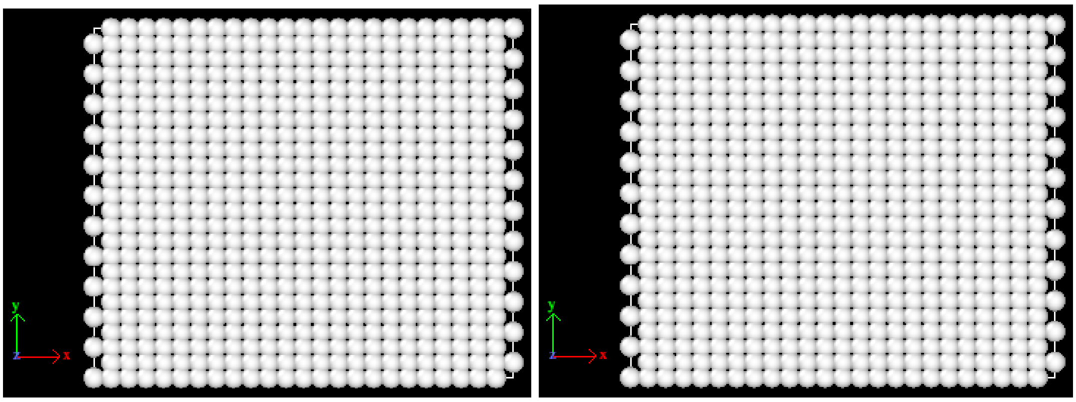
В *третьем подразделе* рассматривается уравнение динамики и метастабильные состояния двумерной решетки. Уравнение динамики i-той частицы в безразмерных переменных будет иметь следующий вид:

$$\ddot{\vec{q}}_i - \mu\left(1 - \frac{|\dot{\vec{q}}_i|^2}{v_0^2}\right)\dot{\vec{q}}_i = \\ = \sum_{|\vec{q}_i^k|<R} \frac{\vec{q}_i^k}{|\vec{q}_i^k|}\left[\left(e^{b\sigma-|\vec{q}_i^k|} - e^{2(b\sigma-|\vec{q}_i^k|)}\right)\cdot\frac{1}{1+e^{\frac{|\vec{q}_i^k|/b-d}{2\nu}}} - \frac{1}{2b}\frac{e^{2(b\sigma-|\vec{q}_i^k|)}-2e^{b\sigma-|\vec{q}_i^k|}}{2\nu\left(e^{\frac{|\vec{q}_i^k|/b-d}{2\nu}}+1\right)^2}\cdot e^{\frac{|\vec{q}_i^k|/b-d}{2\nu}}\right] \quad (1)$$

где $\vec{q_i} = b\vec{r_i}$ -безразмерное смещение i-той частицы с координатой $\bar{r}_i$ из положения равновесия в движущейся ячейки моделирования $\bar{r}_{i0}$, $\dot{\vec{q}}_i = \frac{\omega_M}{b}\vec{v}_i$ -безразмерная скорость $\mu = \tilde{\mu}\omega_M/b$ -безразмерный коэффициент отрицательного трения, $|\vec{q}_i^k|$ -безразмерное расстояние между i-той и k-той частицами, $\frac{\vec{q}_i^k}{|\vec{q}_i^k|}$ -единичный вектор,указывающий направление от i-той к k-той частице, b-коэффициент жесткости потенциала, σ-равновесное расстояние между частицами, d и ν-параметры “сглаживающего” коэффициента потенциала.

Метастабильные моды можно возбуждать посредством выбора начальных условий для частиц в решетке, которые представляют собой процесс перехода от начального состояния к стационарному. При исчезновении одних метастабильных мод зарождаются следующие, и в результате в системе все время существуют метастабильные возбуждения. Плоская солитоноподобная волна является наиболее долгоживущей метастабильной модой, которая является суперпозицией одинаковых диссипативных метастабильных солитонов [5,6]. В [7] рассматриваются возмущения, которые являются метастабильными состояниями, от начального пространственного распределения которого зависит время жизни. Солитоны достигают равномерного распределения с течением длительного времени, так как они ударяются друг о друга и стремятся удалиться. Отсюда следует что метастабильное состояние сначала переходит в другое метастабильное состояние с большим временем жизни. Одной из разновидностей метастабильных состояний также являются плоские солитоноподобные волны, у которых фронт расположен параллельно одной из кристаллографических осей, а направление распространения формирует прямой угол с этой осью. Данные солитоны имеют малое время жизни из-за более выраженной поперечной модуляционной неустойчивости.В двумерной решетке, помимо плоских солитоноподобных волн, существуют солитоны с фронтом конечной ширины, время жизни которых линейно зависит от ширины фронта.

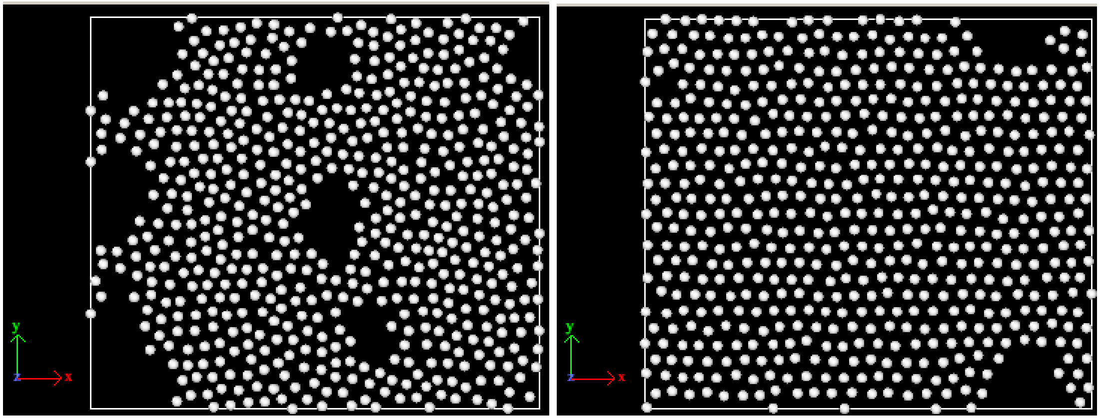
Вторая глава состоит из трех подразделов, в которых приведены результаты практического исследования по теме бакалаврской работы. Моделировалась треугольная решетка на двумерной плоскости с периодическими граничными условиями, состоящая из 24х24 активных частиц. При расчетах были использованы значения параметров: $b \in [2; 5]$; $\mu = 1$; $\sigma \in [0.5; 2]$. Значения оставшихся параметров системы аналогичны представленным в [7]. Результаты численного счета визуализировались при помощи свободного программного обеспечения OVITO. *Первый подраздел* посвящен исследованию формирования кластеров при начальных параметрах скорости всех частиц равной нулю. Как показано на рисунке 1 изначально частицы не движутся , а рэлеевское трение на них не действует из-за нулевой скорости.



а б

Рисунок 1. Пространственные распределения плотности частиц в решетке 24×24 при $\sigma = 0.5$, $\upsilon_0 = 0$, b=3 *(а)*, b=5 *(б)*.

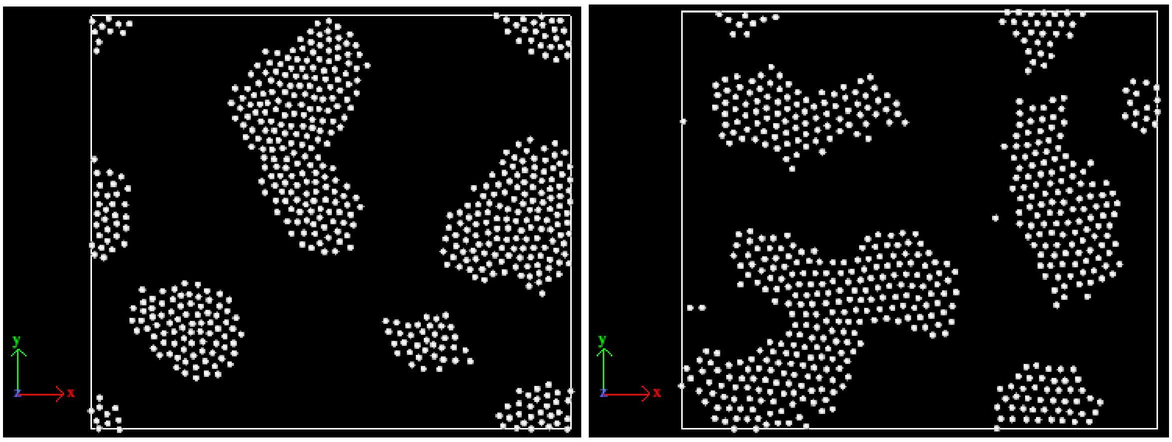
Однако в решетке присутствуют шумы, возникающие из погрешности округления, которые приводят к тому, что происходит своего рода нагрев данной решетки. По сути это малый по интенсивности шумом, от которого невозможно избавиться. И уже при небольшом увеличении параметра σ больше *1*, порядка десятитысячных, в решетке образовываются разрывы (рисунок 2).



а б

Рисунок 2. Пространственные распределения плотности частиц в решетке 24×24 при $\sigma = 1.0625$, $\upsilon_0 = 0$, b=3 *(а)*, b=5 *(б)*.

При достижении параметра σ значения 1.75, решетка распадается на множество кластеров (рисунок 3) и при дальнейшем увеличении σ, исследуемая решетка распадается на еще большее количество кластеров.



а б

Рисунок 3. Пространственные распределения плотности частиц в решетке 24×24 при $\sigma = 1.75$, $\upsilon_0 = 0$, b=3 *(а)*, b=5 *(б)*.

По итогу был проведен анализ формирования разрывов и кластеров в решетке с нелинейным трением, который зависел от варьирования плотности частиц. В большей степени на изменения в решетке влияет параметр σ, тогда как параметр b никак не меняет внешнего вида нашей решетки. В этом и заключается принципиальное отличие исследуемой решетки от обычных консервативных.

Во втором подразделе исследуются поведение частиц на образование разрывов в решетке при заданной начальной ненулевой скорости, а именно $\upsilon_0 = 1$. Если задать единичную скорость, то состояние скорости частиц будет устойчивым. На рисунках 4 и 5 показаны результаты эксперимента.

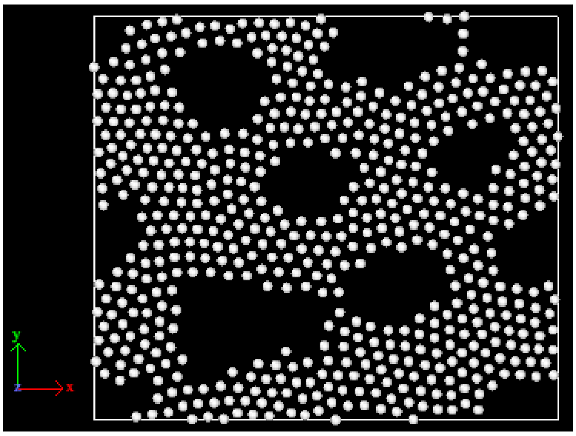


Рисунок 4. Порог образования разрывов в решетке с заданной начальной скоростью $\upsilon_0 = 1$ при b=3, σ=*1.125*

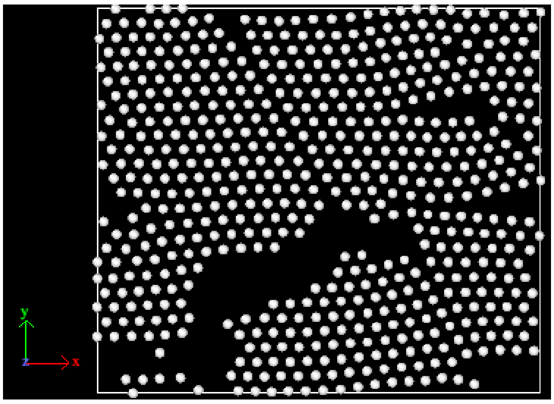
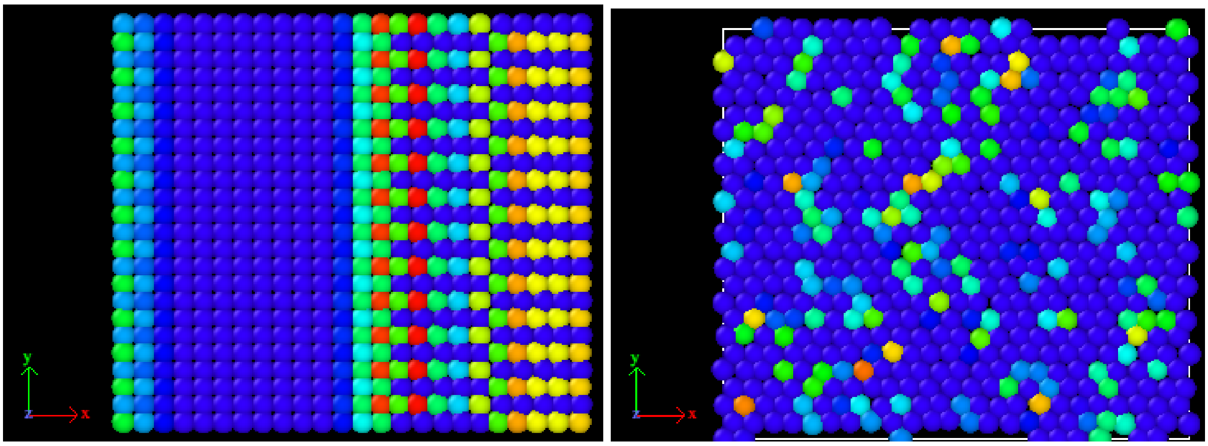


Рисунок 5. Порог образования разрывов в решетке с заданной начальной скоростью $\upsilon_0 = 1$ при b=5, σ=*1.09375*

При нулевых начальных скоростях до образования разрывов, граница по плотности составляет σ=*1.0625*, а при единичных скоростях граница по плотности в среднем составляет σ=*1.125*. Таким образом было установлено, что в стационарных состояниях при ненулевой скорости (в режиме трансляции), решетка более устойчива.

Третий подраздел посвящен исследованию формирования солитонов в двумерной решетке активных частиц при возмущении скорости. Из рисунка 6 видно, что при $\sigma < 1$ плоский солитон имеет ограниченное время жизни, так как частицы находятся близко друг к другу, а не в минимумах потенциала взаимодействия. Поэтому солитон не может распространяться бесконечно долго и разрушается за несколько десятков межсайтовых расстояний.



а б

Рисунок 6. Пространственные распределения плотности частиц в решетке 24×24 с заданной скоростью при σ=0.5*,* b=3, характеристика системы при начальном запуске *(а)*, характеристика системы спустя 100 единиц безразмерного времени *(б)*.

При σ=1 солитон, как известно из [7], является стационарным и движется неограниченно долго по решетке (рисунок 7).

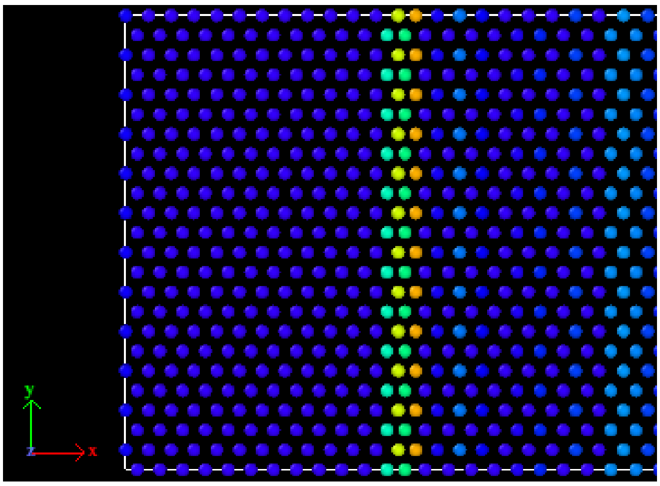
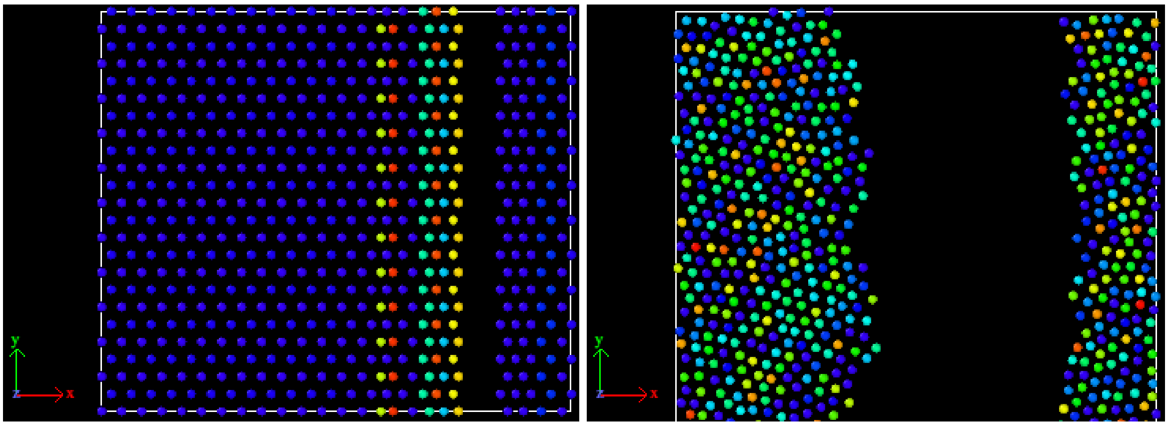


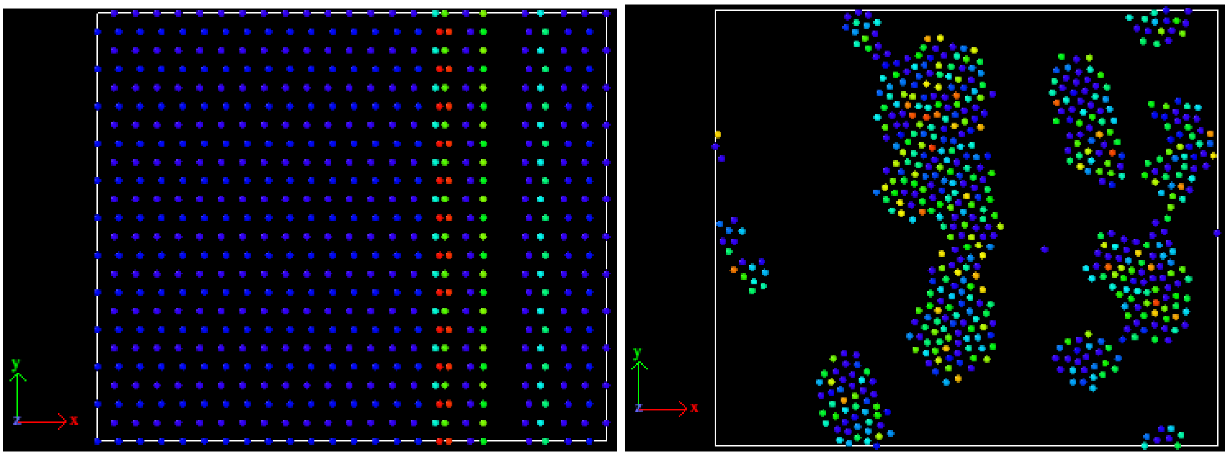
Рисунок 7. Пространственные распределения плотности частиц в решетке с 24×24 заданной скоростью при σ=1*,* b=3.

Если параметр σ увеличить еще, то есть немного «растянуть» решетку, то солитоны приводят к формированию разрывов в решетке с самого старта. Тем самым солитон влияет на саму форму кластеров и они получаются преимущественно прямоугольными. Данные результаты представлены на рисунках 8 и 9.



а б

Рисунок 8. Пространственные распределения плотности частиц в решетке 24×24 с заданной скоростью при σ=1.25*,* b=3, характеристика системы при начальном запуске *(а)*, характеристика системы спустя 100 единиц безразмерного времени *(б)*.



а б

Рисунок 9. Пространственные распределения плотности частиц в решетке 24×24 с заданной скоростью при σ=1.75*,* b=3, характеристика системы при начальном запуске *(а)*, характеристика системы спустя 100 единиц безразмерного времени *(б)*.

Также стоит отметить, что при увеличении параметра σ, как и в пункте 2.1, решетка делиться на все большее количество кластеров.

В **заключении** подводятся итоги выпускной квалификационной работы, изгаляются основные результаты. В ходе выполнения выпускной работы были проведены серии экспериментов по исследованию динамики кластеров в двумерной решетке при различных значениях параметров, а также формирование и поведение солитонов при возмущении скорости .

В основе работы лежат экспериментальные и теоретические исследования процессов образования кластеров и формирования солитонов при различных условиях.

Важно отметить, что уменьшение плотности вызывает образование разрывов и кластеров. На граничное значение параметра σ, начиная с которого возникают разрывы, сильно влияют начальные условия. Наличие солитонов приводит к тому что эта граница еще сдвигается в сторону меньших значений параметра σ, а параметр *b*, как выяснилось, практически не влияет.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Dunkel J., Ebeling W., Erdman II. Thermodynamics and transport in an active Morse ring chain // Eur. Phys. J. 2001. V. B24. P. 511-524.

2. Dunkel J., Ebeling W., Erdman U., Makarov V.A. Coherent motions and clusters in a dissipative Morse ring chain // Intern. J. Bif. and Chaos. 2002. V. 12, № 11. P. 2359-2377.

3. Chetverikov A., Dunkel J. Phase behavior and collective excitations of the Morse ring chain // Eur. Phys. J. 2003. V. B35. P. 239-253.

4. Chetverikov A., Ebeling W., Velarde M.G. Thermodynamic and phase transitions in dissipative and active Morse chain // Eur. Phys. J. 2005. V. 44. P. 509-519.

5. Сергеев, К.С. Метастабильные возбуждения в цепочке Морзе–Рэлея / К.С. Сергеев, А.П. Четвериков // Нелинейная динамика. — 2016. — Т. 2, №3. — стр. 341–353.

6. Stationary modes and localized metastable states in triangular lattice of active particles / K.S. Sergeev, S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova, A.P. Chetverikov //144 Russian Journal of Nonlinear Dynamics. — 2018. — Vol. 14, no. 2. — Pp. 195-207

7. Сергеев, К.С. Колебательные и волновые явления в упорядоченных и неупорядоченных ансамблях взаимодействующих частиц: дис. канд. физ. наук: 01.04.03. - Саратов , 2018. - 147 с.