

# Локализованные нелинейные волны в двумерной решетке активных частиц

Сергеев К.С.

Четвериков А.П.

VIII Международная научная конференция  
"КОМПЬЮТЕРНЫЕ НАУКИ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ"  
памяти А.М.Богомолова

Саратов, 2018

# Цели и задачи

- Систематизировать основные стационарные моды и метастабильные локализованные состояния активной решетки
- Определить интервалы значений параметров решетки, при которых реализуются те или иные режимы

# Модель решетки активных частиц

Уравнение динамики  $i$ -той частицы в безразмерном виде:

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

Трение Рэлея:

$$\gamma(\vec{v}_i) = \tilde{\mu} \left(1 - \frac{|\vec{v}_i|^2}{v_0^2}\right)$$

Модифицированный потенциал Морзе:

$$U(z) = D(e^{-2b(z-\sigma)} - 2e^{-b(z-\sigma)}) \frac{1}{1 + e^{(z-d)/2\nu}}$$

Используемые обозначения:

$\vec{q}_i = b\vec{r}_i$  — безразмерная координата

$\dot{\vec{q}}_i = \frac{\omega_M}{b} \vec{v}_i$  — безразмерная скорость

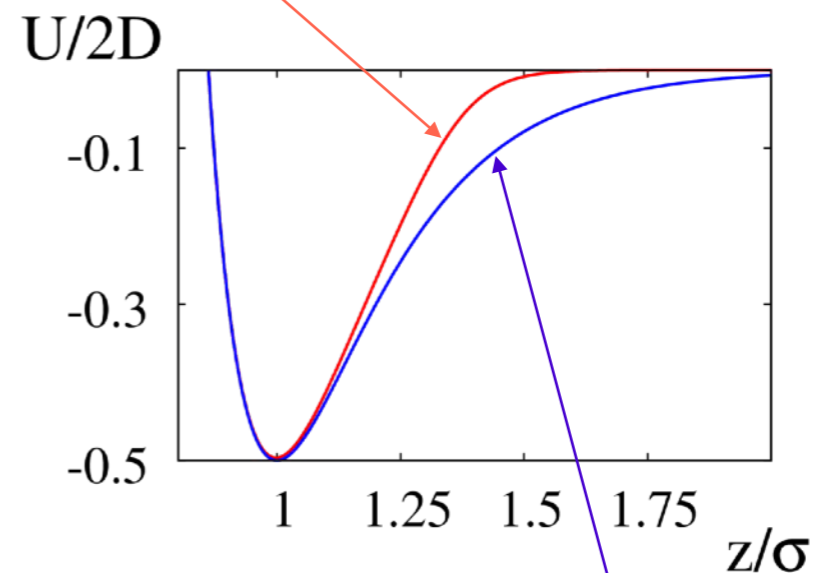
$\mu = \tilde{\mu} \omega_M / b$  — коэффициент отрицательного трения

$\omega_M = \sqrt{2Db^2/m}$  — частота линейных колебаний частицы

за счет связи

$b\sigma$  — жесткость потенциала

$\vec{q}_i^k / |\vec{q}_i^k|$  — единичный вектор, указывающий направление от  $i$ -той частицы к  $k$ -той



$$U(z) = D(e^{-2b(z-\sigma)} - 2e^{-b(z-\sigma)})$$

Традиционная форма потенциала Морзе

# Модель решетки активных частиц

Уравнение динамики  $i$ -той частицы в безразмерном виде:

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

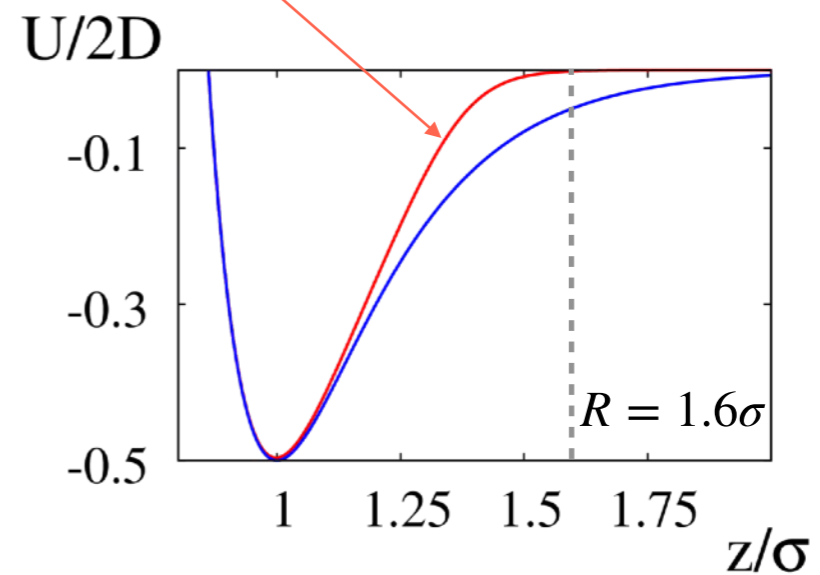
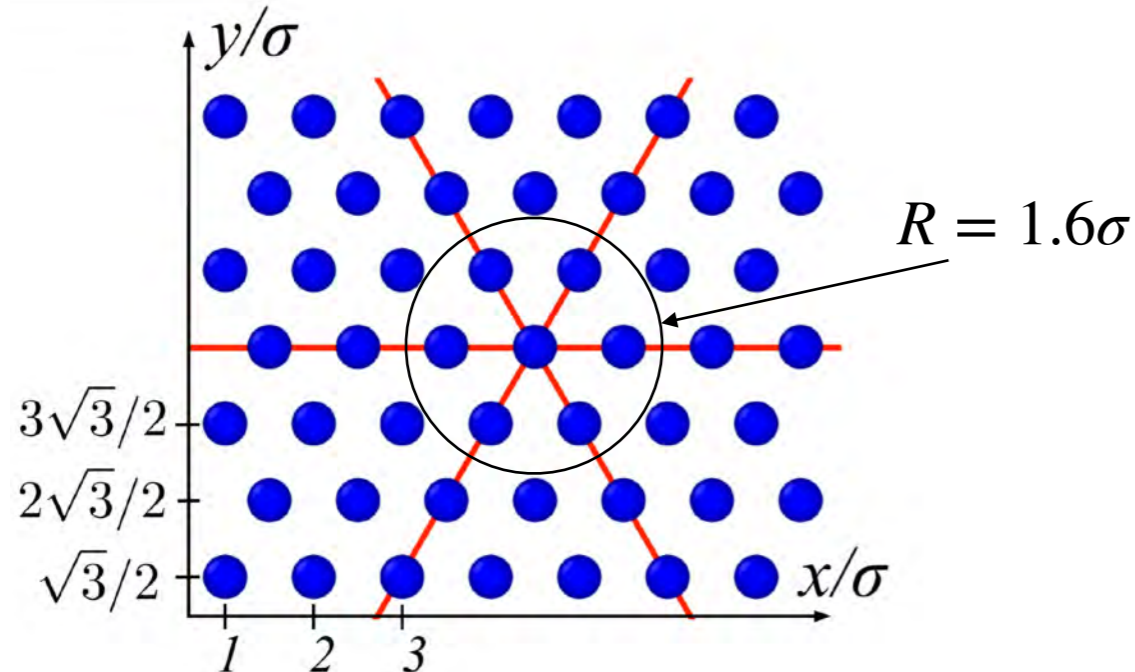
Трение Рэлея:

$$\gamma(\vec{v}_i) = \tilde{\mu} \left(1 - \frac{|\vec{v}_i|^2}{v_0^2}\right)$$

Модифицированный потенциал Морзе:

$$U(z) = D(e^{-2b(z-\sigma)} - 2e^{-b(z-\sigma)}) \frac{1}{1 + e^{(z-d)/2\nu}}$$

Решетка с треугольной симметрией



Параметры  
потенциала

$b\sigma = 5$   
 $d = 1.35\sigma$   
 $\nu = 0.035\sigma$

# Стационарные моды треугольной решетки

**Трансляционная мода** — основное стационарное состояние решетки, её аттрактор в пространстве скоростей

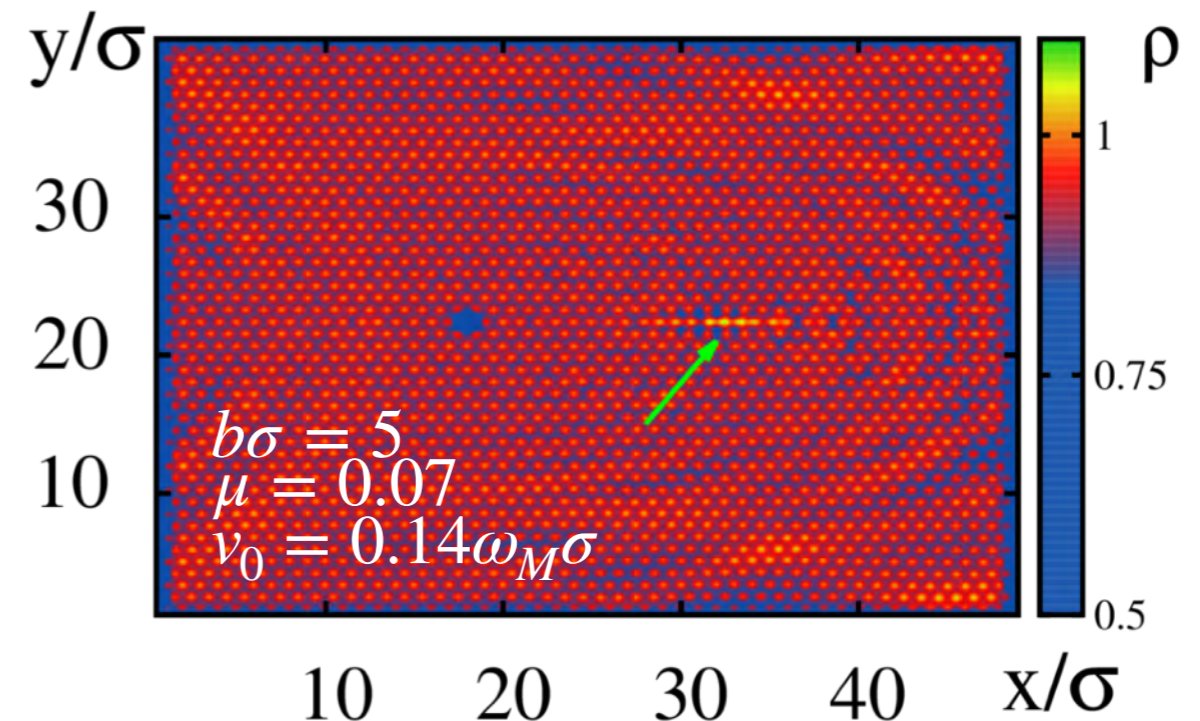
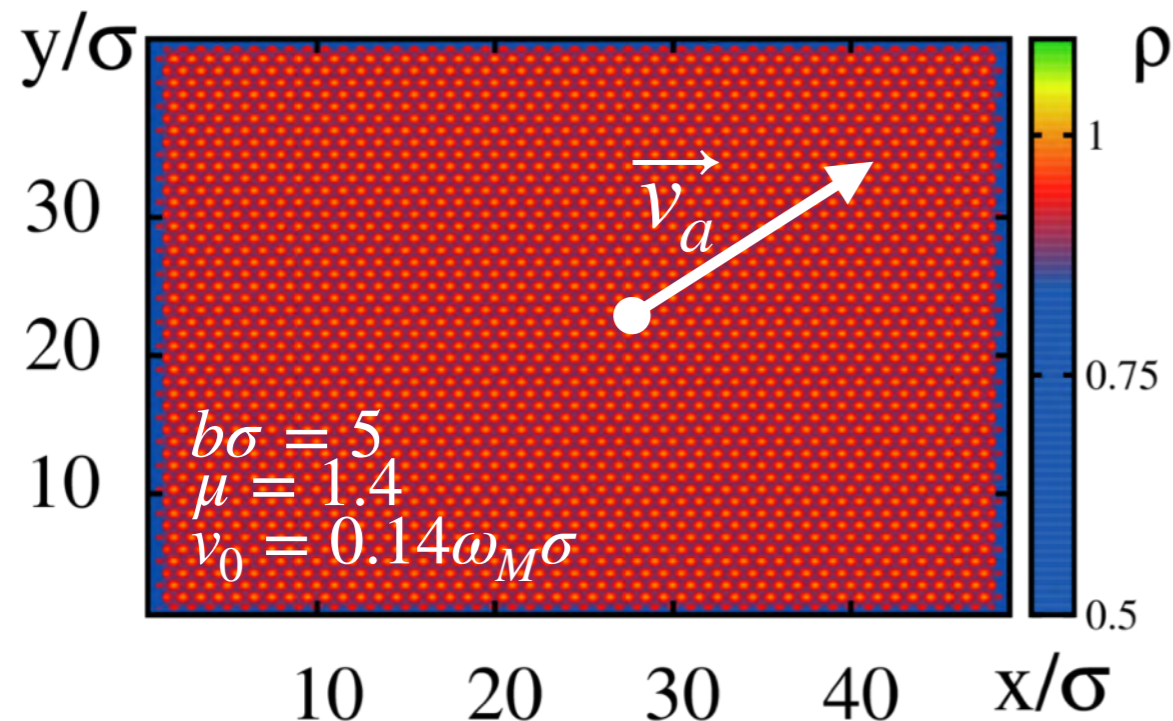
Гауссово распределение плотности частиц:

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_{|\vec{r}-\vec{r}_i| < 1.6\sigma} \exp\left(-\frac{(\vec{r}-\vec{r}_i)^2}{2\lambda^2}\right)$$

$\vec{v}_a$  — средняя по ансамблю скорость

$\vec{v}_a$  может быть ориентирована произвольно в зависимости от начальных условий

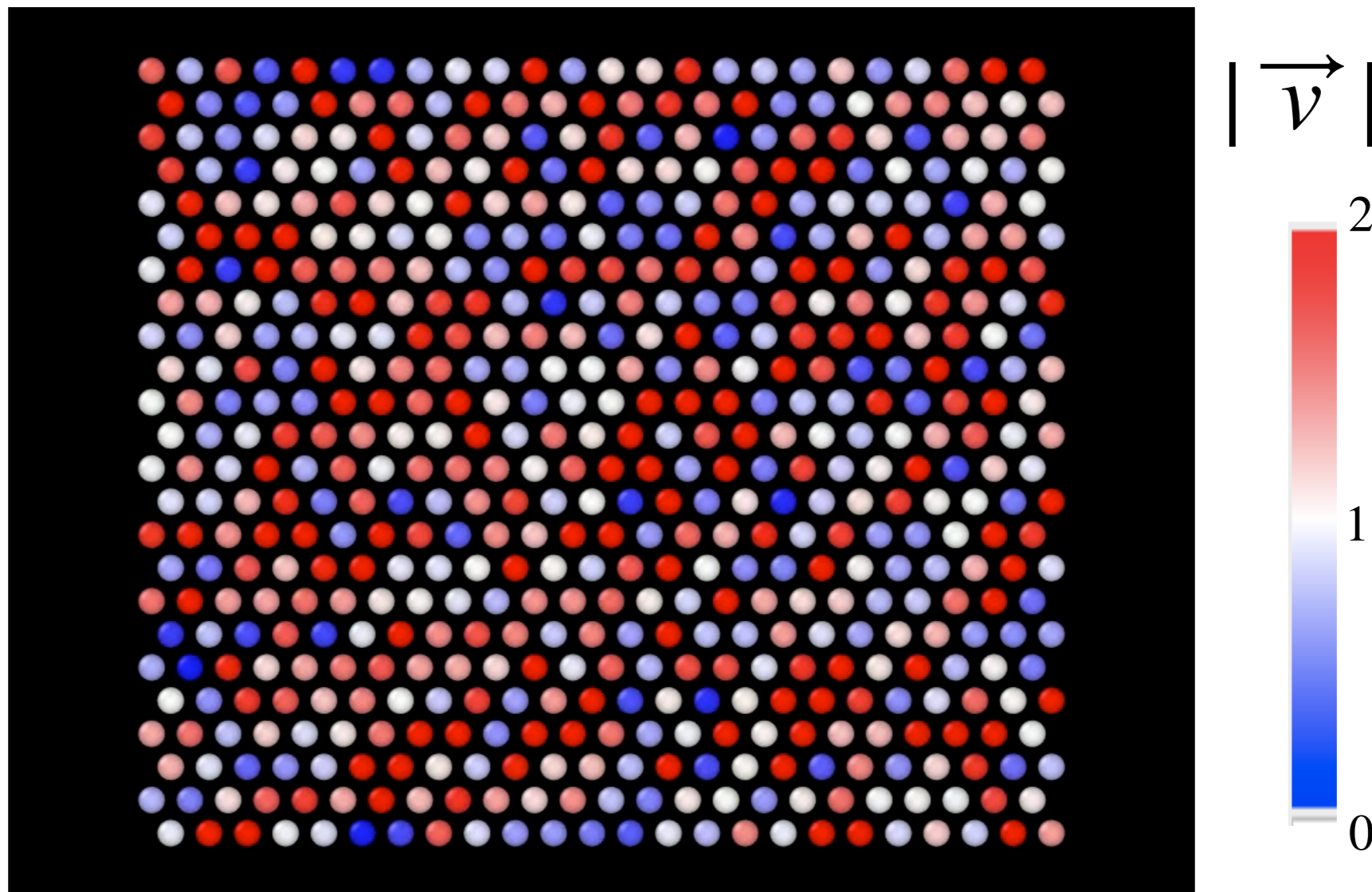
$$|\vec{v}_a| = v_0$$



# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

При старте со случайных начальных условий наблюдаются хаотические колебания частиц

$$b\sigma = 5$$
$$\mu = 1.4$$
$$v_0 = 0.14\omega_M\sigma$$

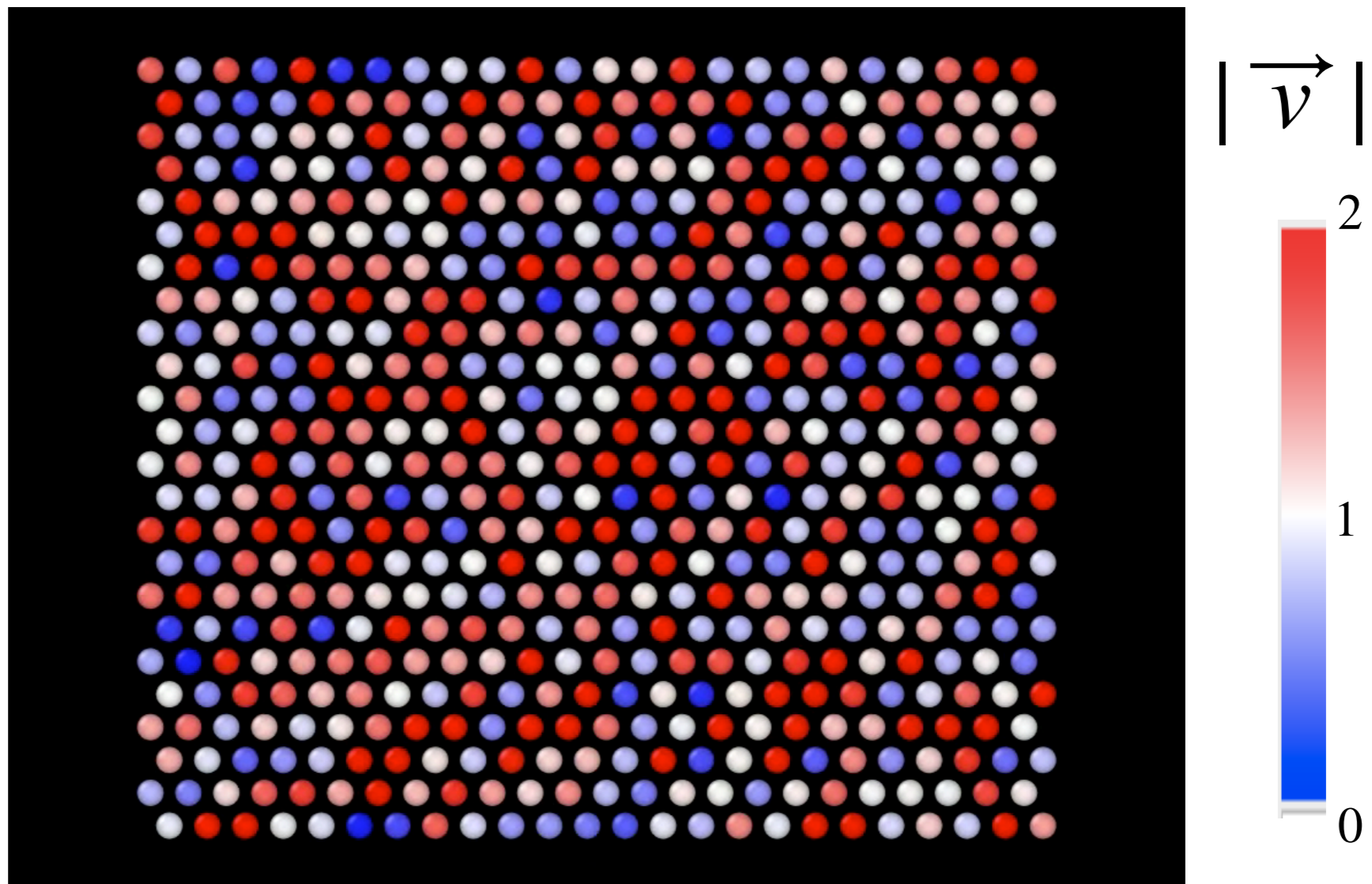


Характерные времена жизни  $\tau_{max} \approx 10^5 / \omega_M$

# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

При старте со случайных начальных условий наблюдаются хаотические колебания частиц

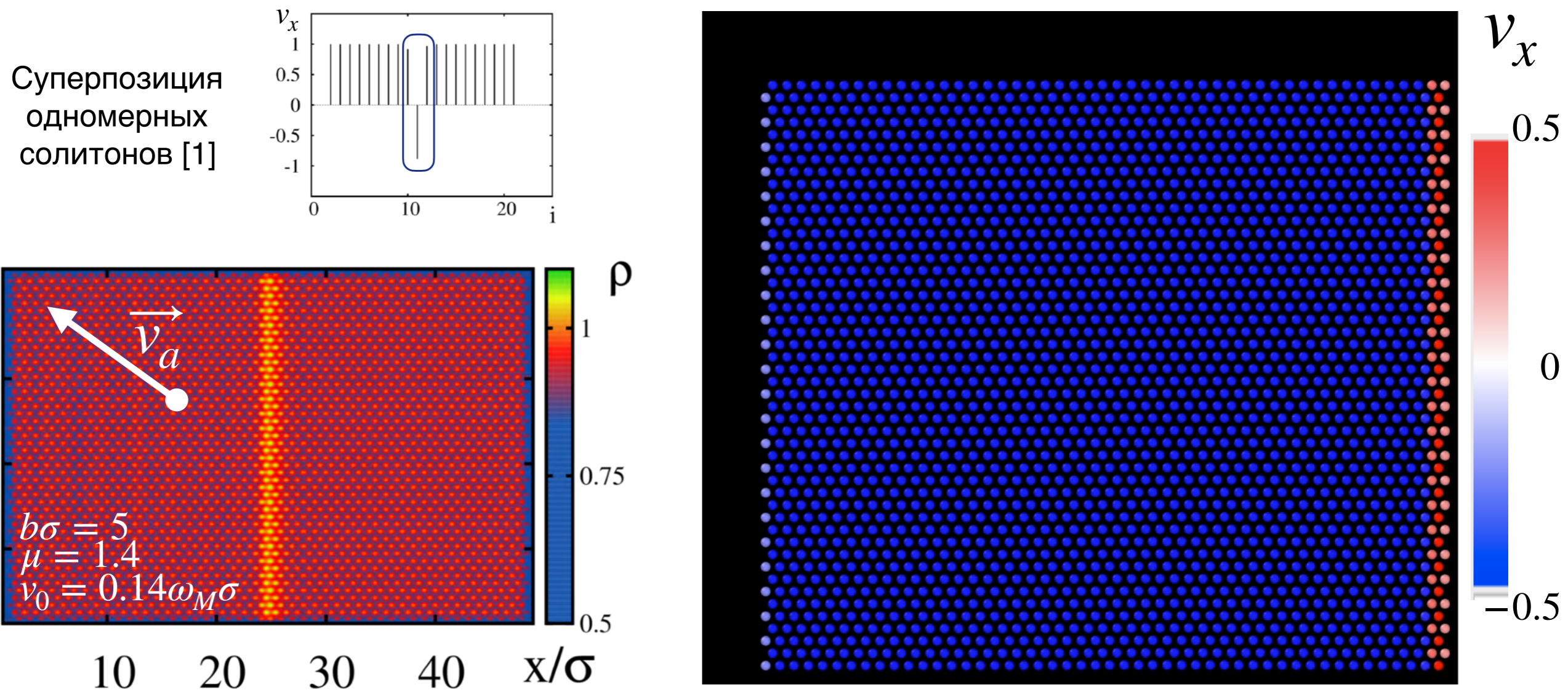
$$b\sigma = 5$$
$$\mu = 1.4$$
$$v_0 = 0.14\omega_M\sigma$$



Характерные времена жизни  $\tau_{max} \approx 10^5 / \omega_M$

# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

Плоская солитоноподобная волна является наиболее «долгоживущим» метастабильным состоянием решетки

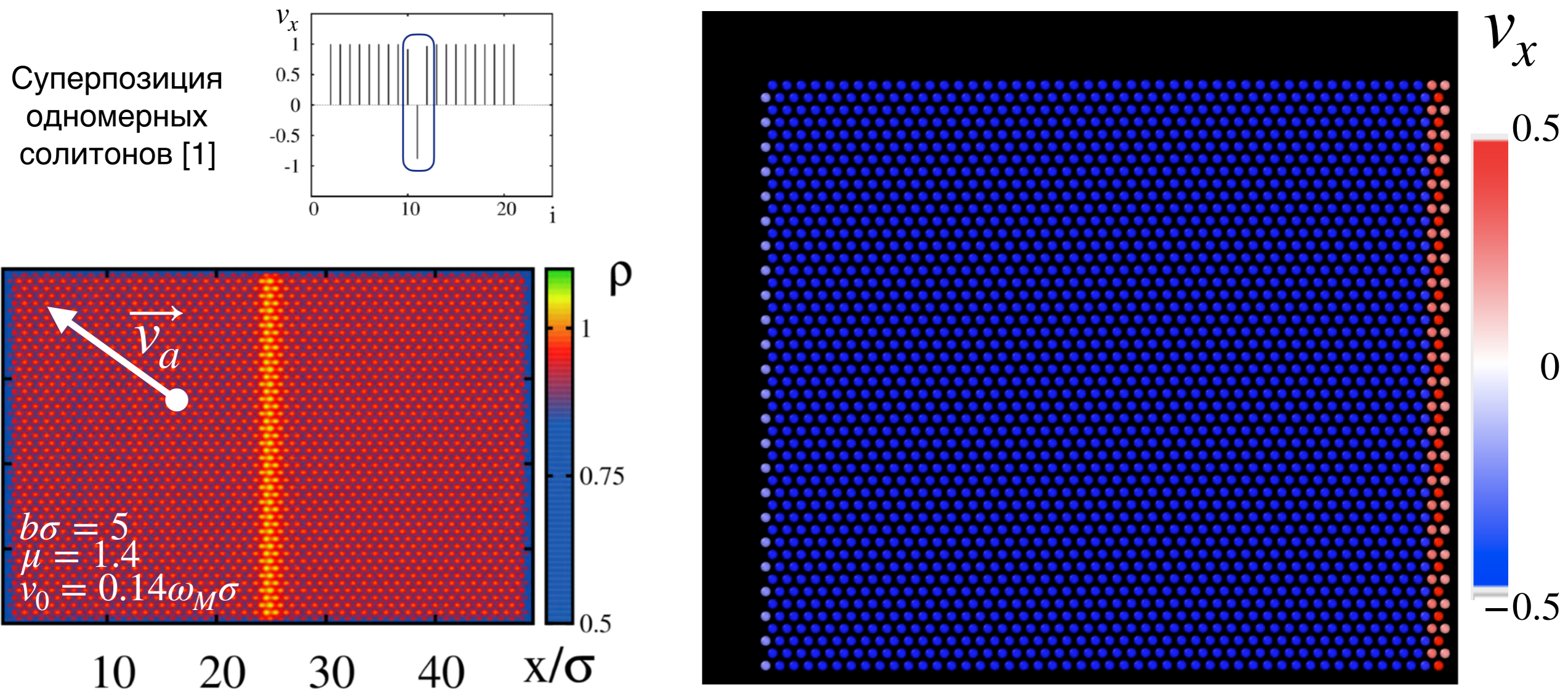


Характерные времена жизни  $\tau_{max} \approx 10^4 / \omega_M$



# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

Плоская солитоноподобная волна является наиболее «долгоживущим» метастабильным состоянием решетки

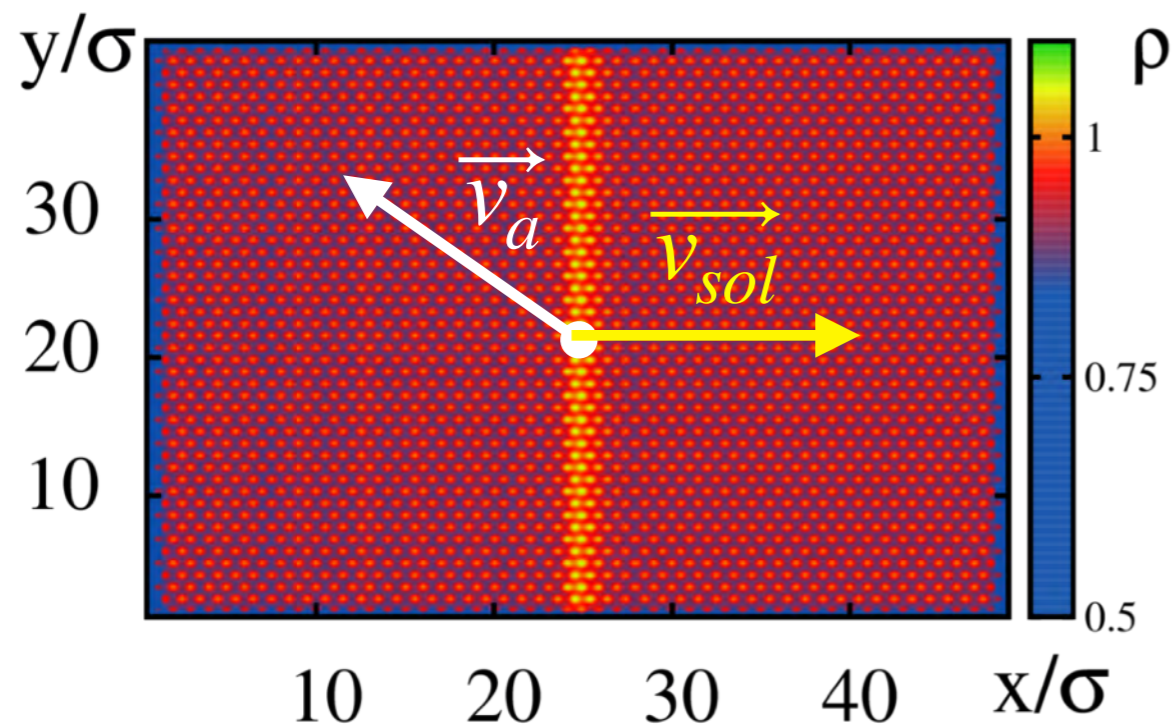


Характерные времена жизни  $\tau_{max} \approx 10^4 / \omega_M$

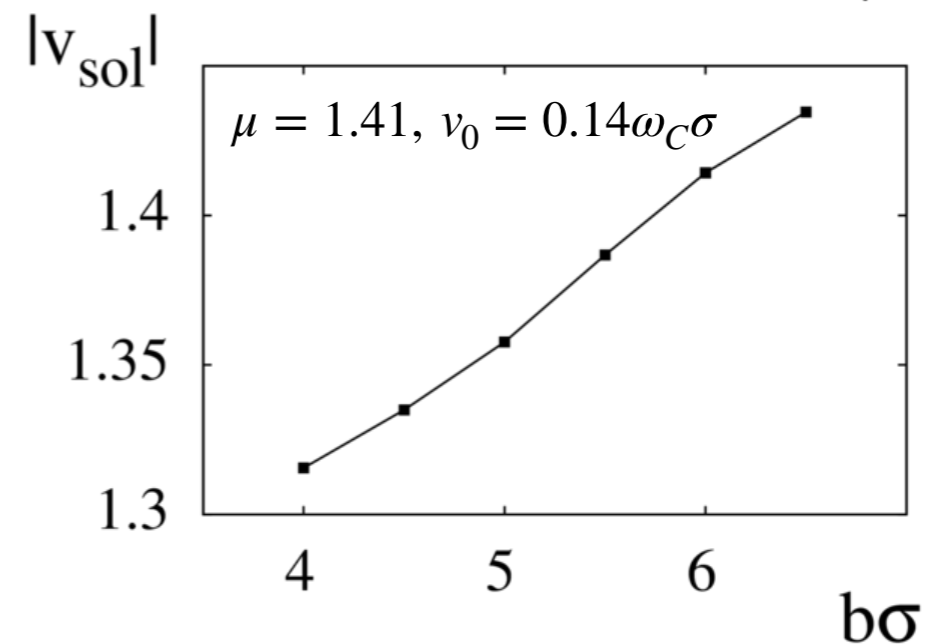
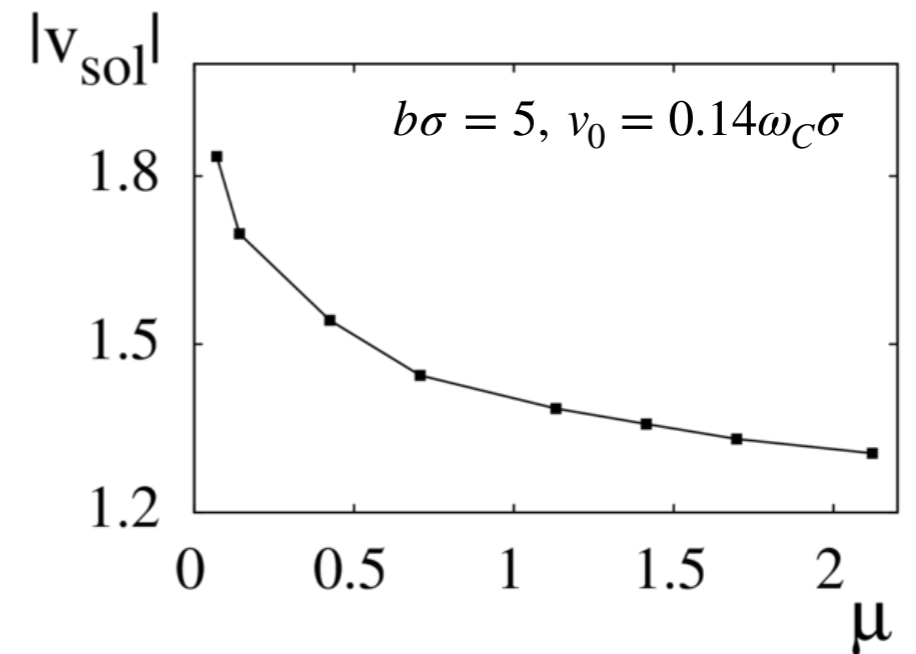
# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

Скорость плоских солитоноподобных волн не зависит от начальных условий

$$\gamma(\vec{v}_i) = \tilde{\mu} \left(1 - \frac{|\vec{v}_i|^2}{v_0^2}\right)$$

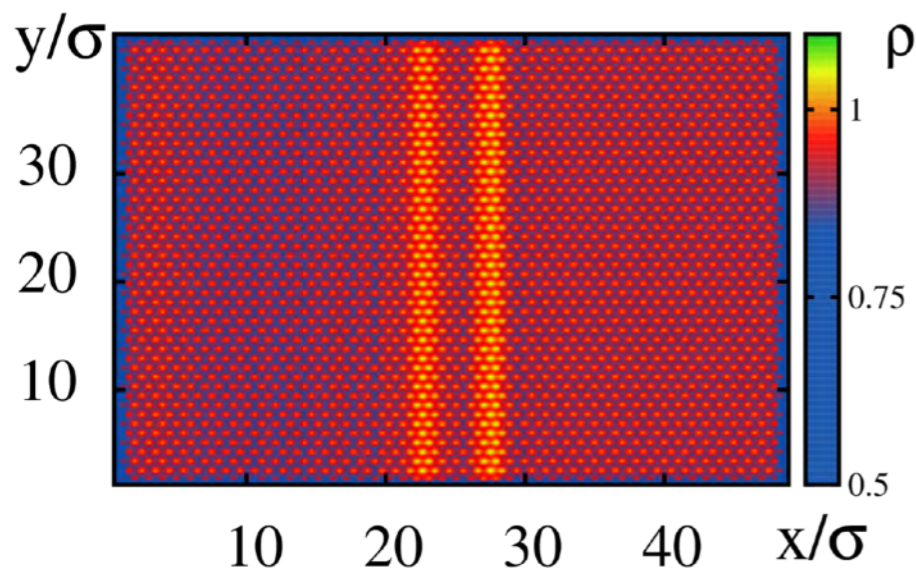


$$\vec{v}_{sol}^{lab} = \vec{v}_{sol} + \vec{v}_a$$

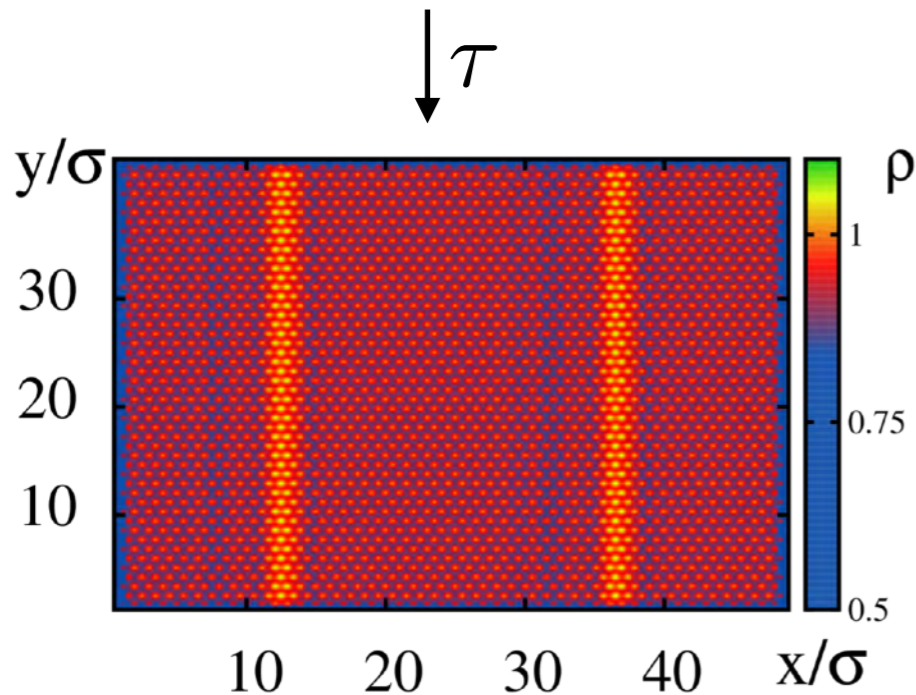
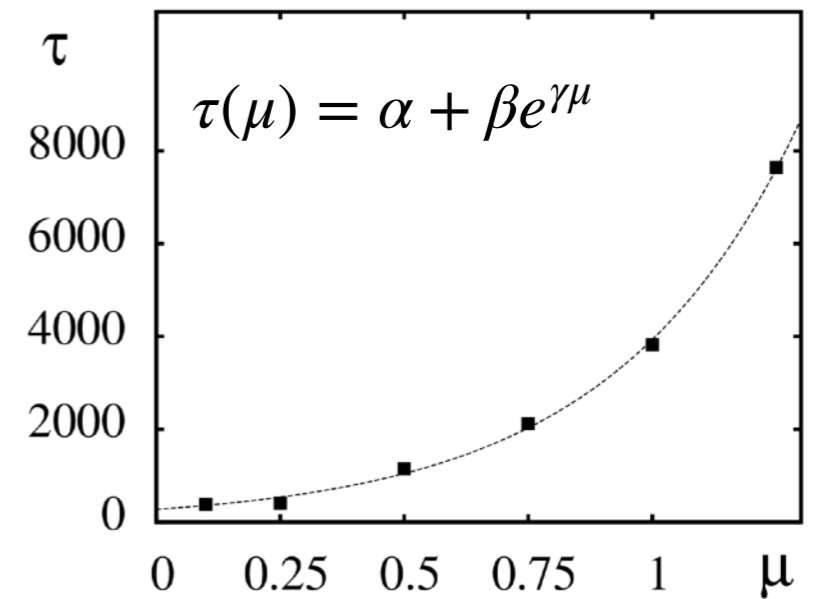


# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

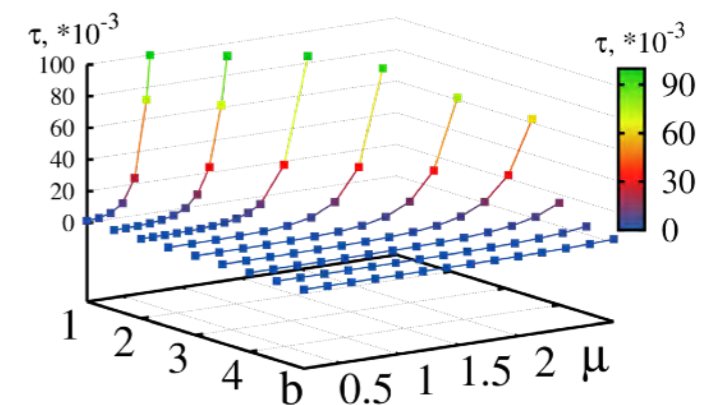
Максимальное количество плоских солитонов определяется размерами решетки.



Неравномерно распределенные солитоны являются **метастабильным состоянием**, а длительность переходного процесса экспоненциально зависит от параметра  $\mu$ .



В [1] были получены аналогичные результаты для **одномерной** цепочки Морзе-Рэля



$$\tau(b, \mu = 1, N) = 1000 \exp(-3.2b + 4.7\mu + 0.285N - 2.6)$$

# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

В качестве метода количественной идентификации различных метастабильных состояний разумно использовать **структурный динамический фактор (СДФ)**

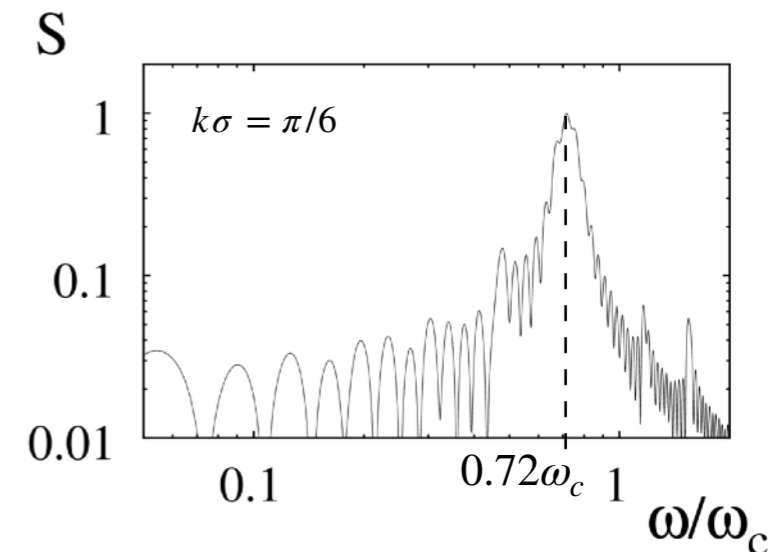
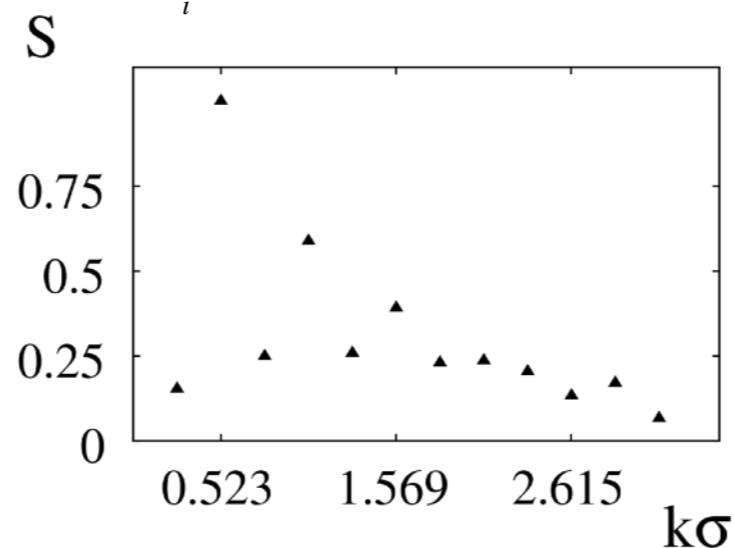
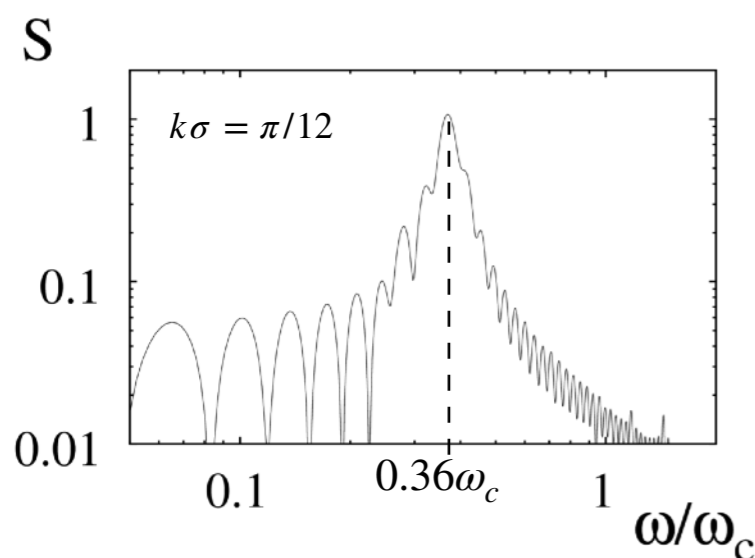
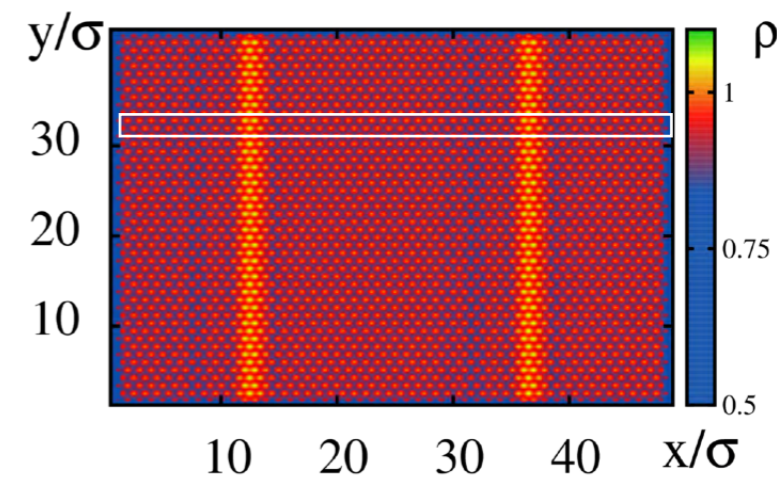
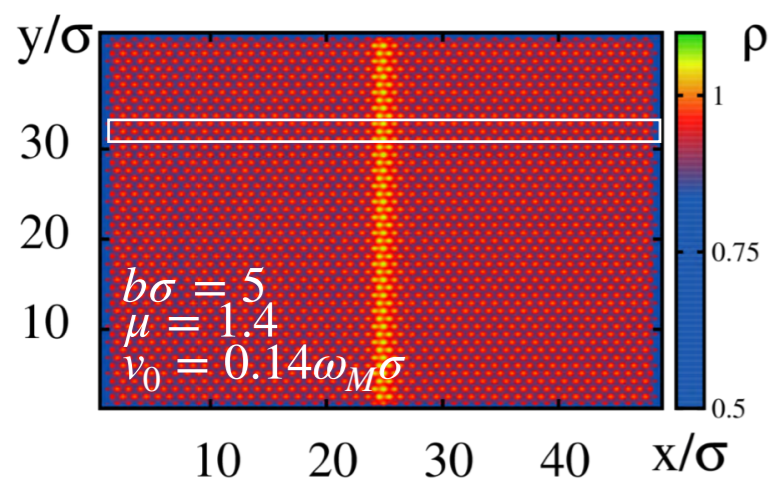
СДФ рассчитывается по формуле

$$S(\omega, k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{j\omega\tau} \langle \rho_{1d}(k, \tau) \rho_{1d}(-k, 0) \rangle d\tau$$

где  $\omega$  и  $k\sigma$  - частота и волновое число, соответствующие направлению распространения волны.  
Функция плотности и ее пространственное преобразование Фурье:

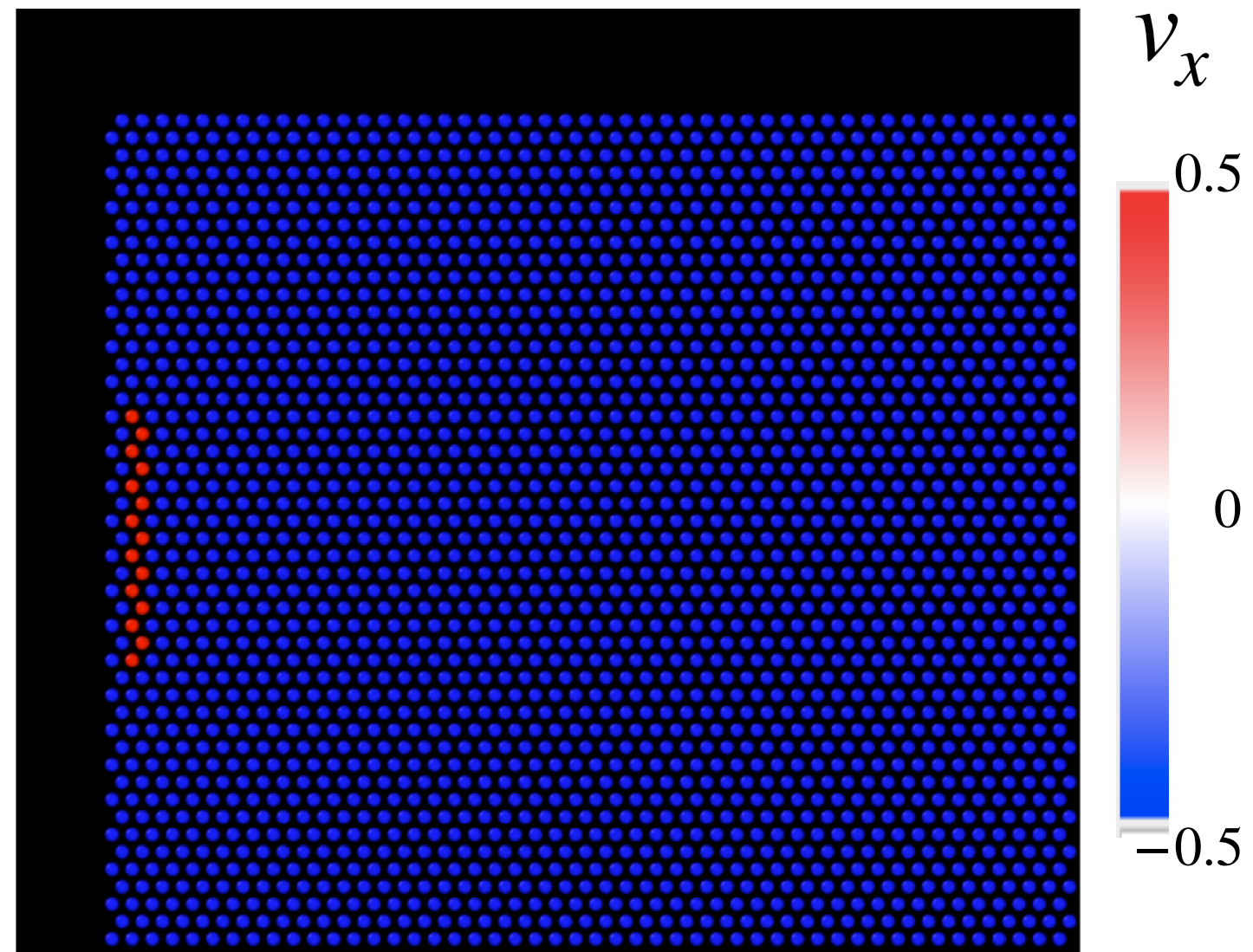
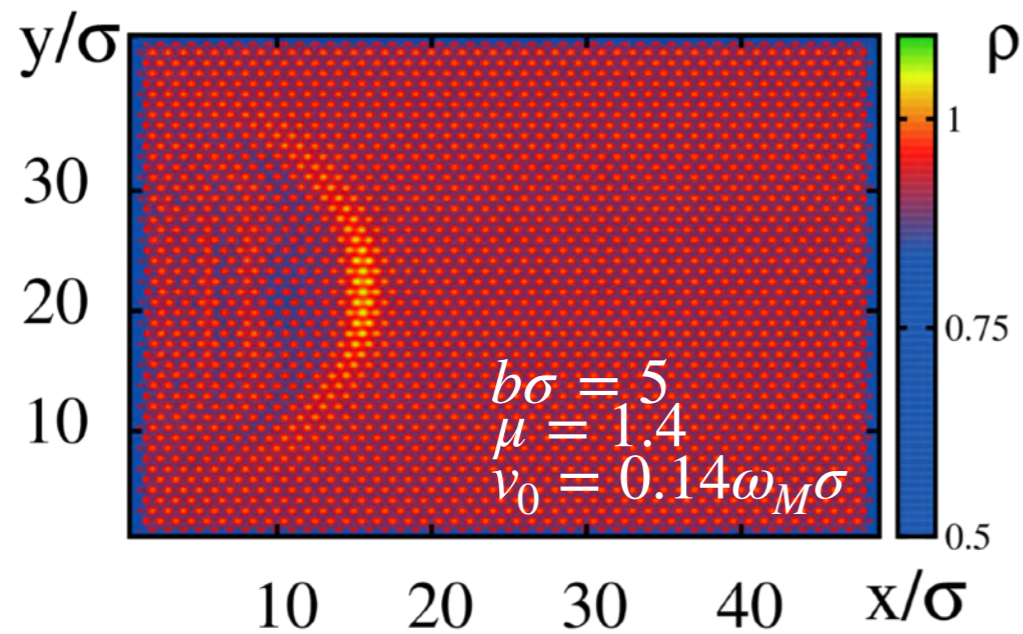
$$\rho_{1d}(x, \tau) = \sum_i \delta(x - x_i(\tau))$$

$$\rho_{1d}(k, \tau) = \sum_i e^{-jkx_i(\tau)}$$

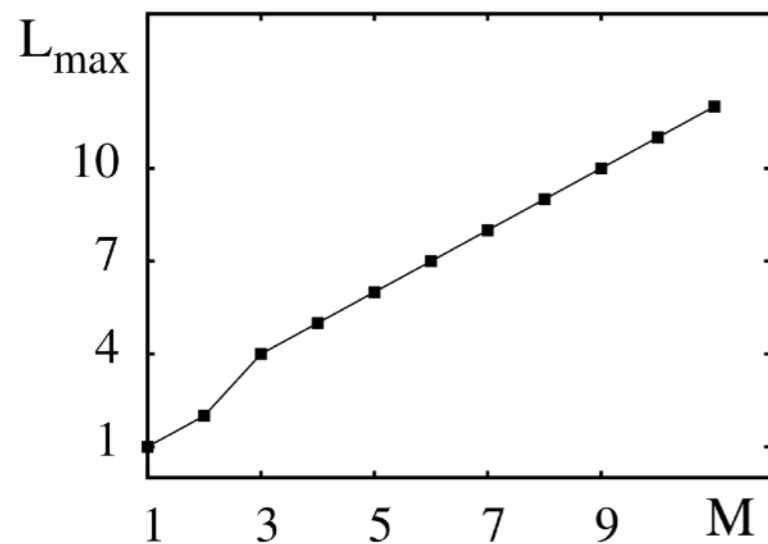


# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

## Подковообразные солитоны ( $M$ -солитоны)



Длина пробега подковообразного солитона линейно зависит от ширины фронта

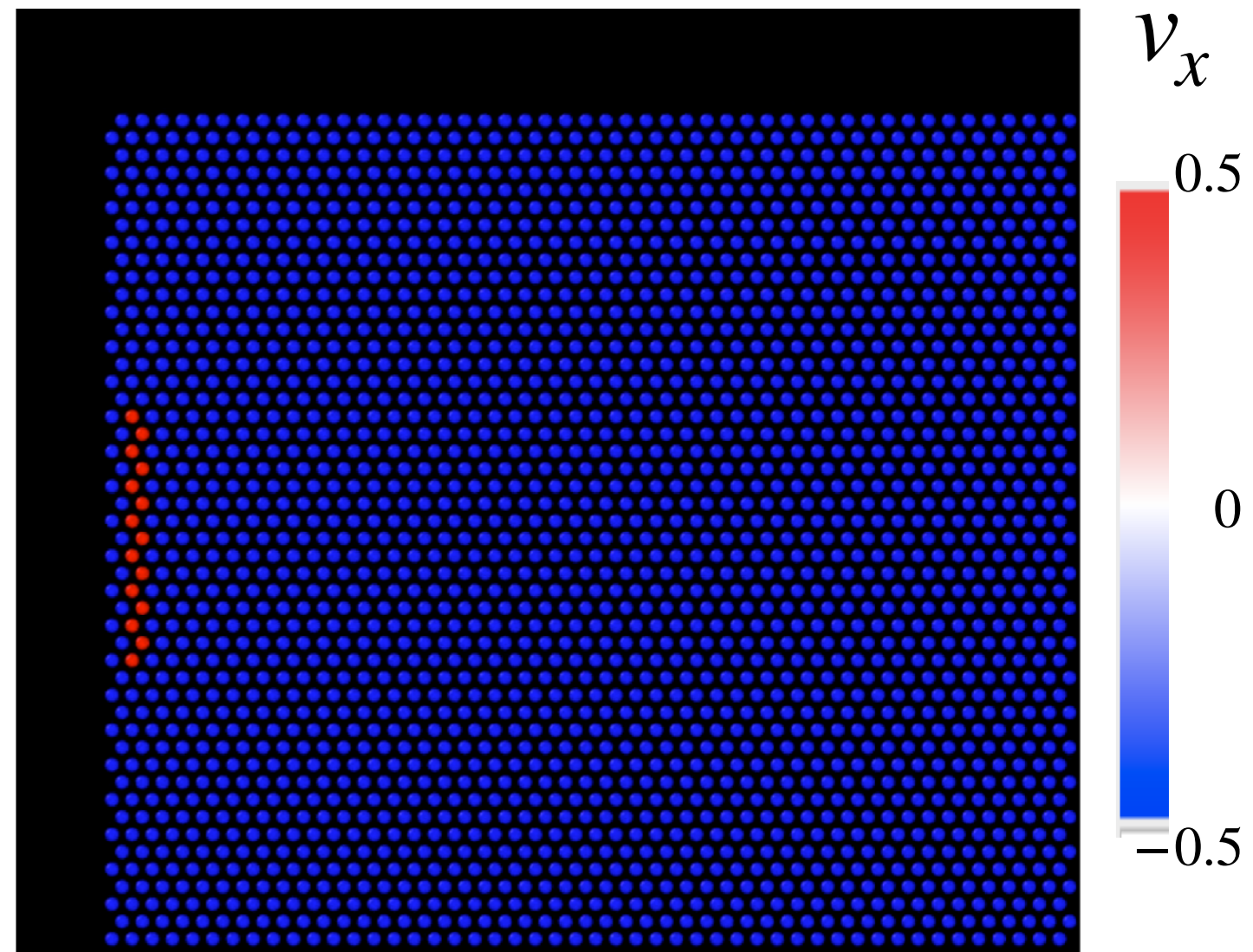
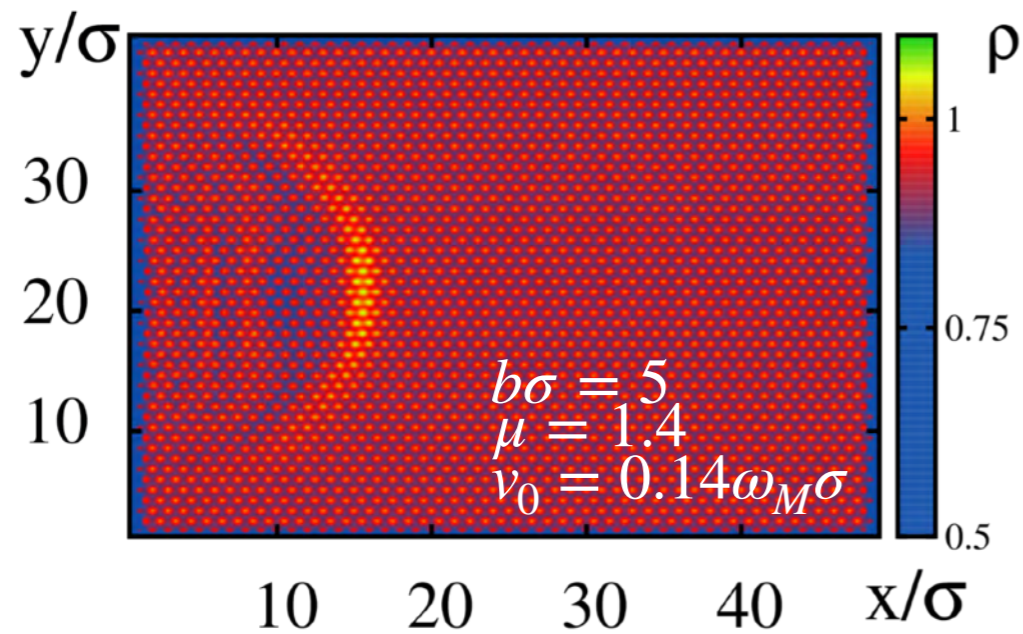


Характерные времена жизни

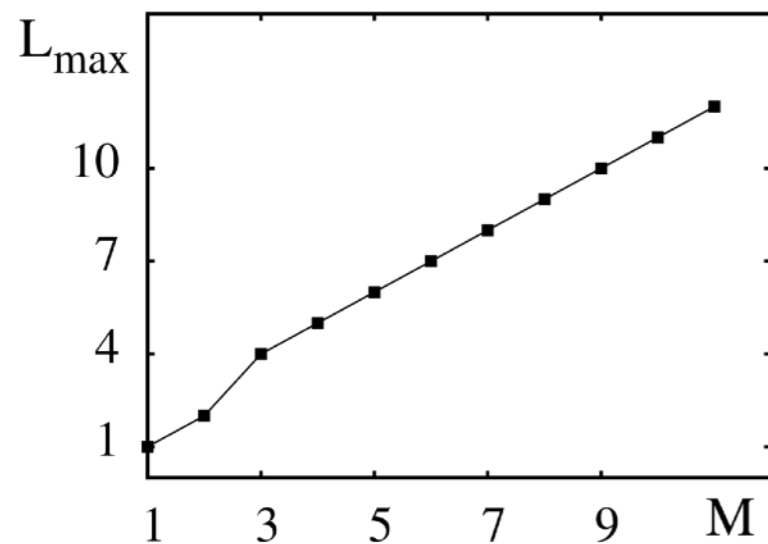
$$\tau_{max} \approx 10^2 / \omega_M$$

# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

## Подковообразные солитоны ( $M$ -солитоны)



Длина пробега подковообразного солитона линейно зависит от ширины фронта

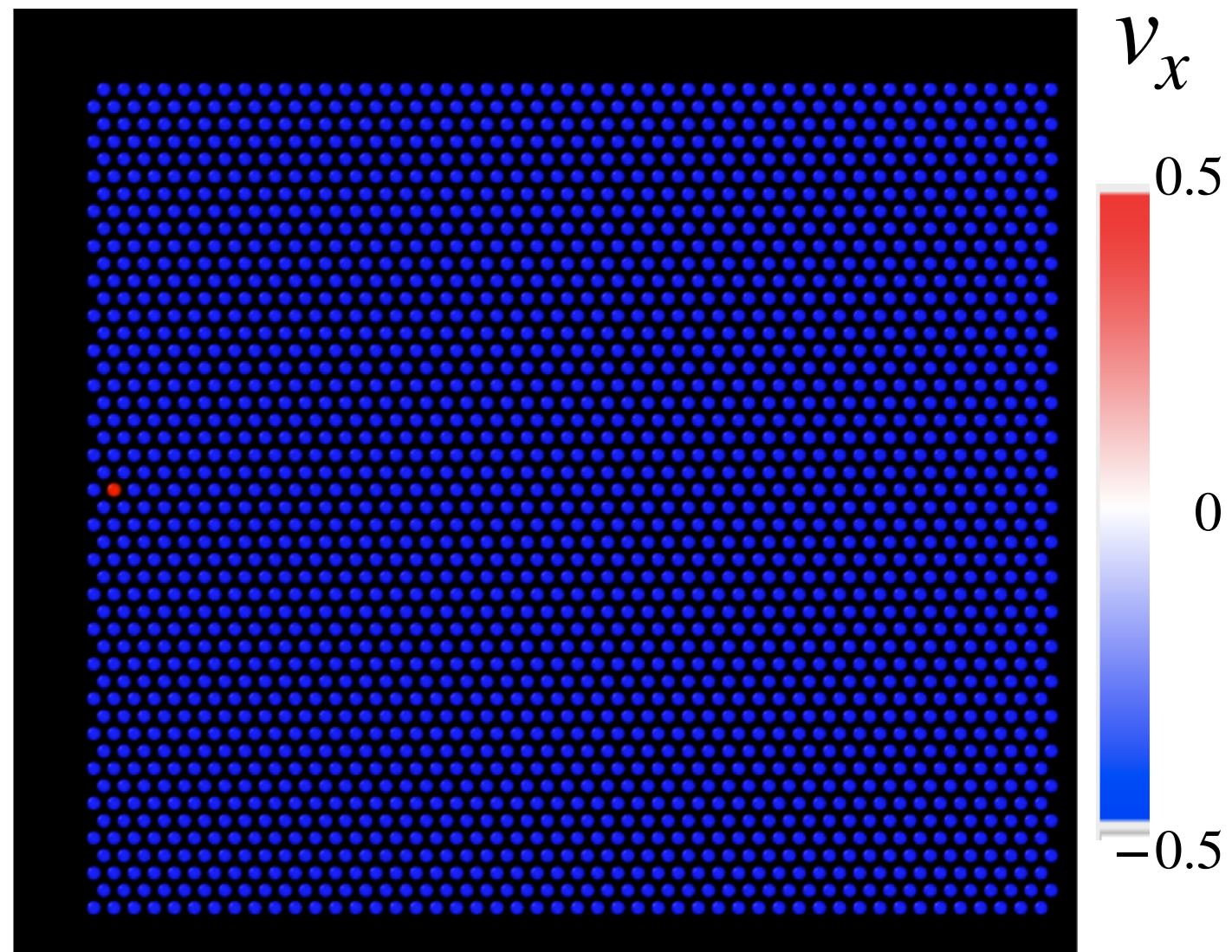
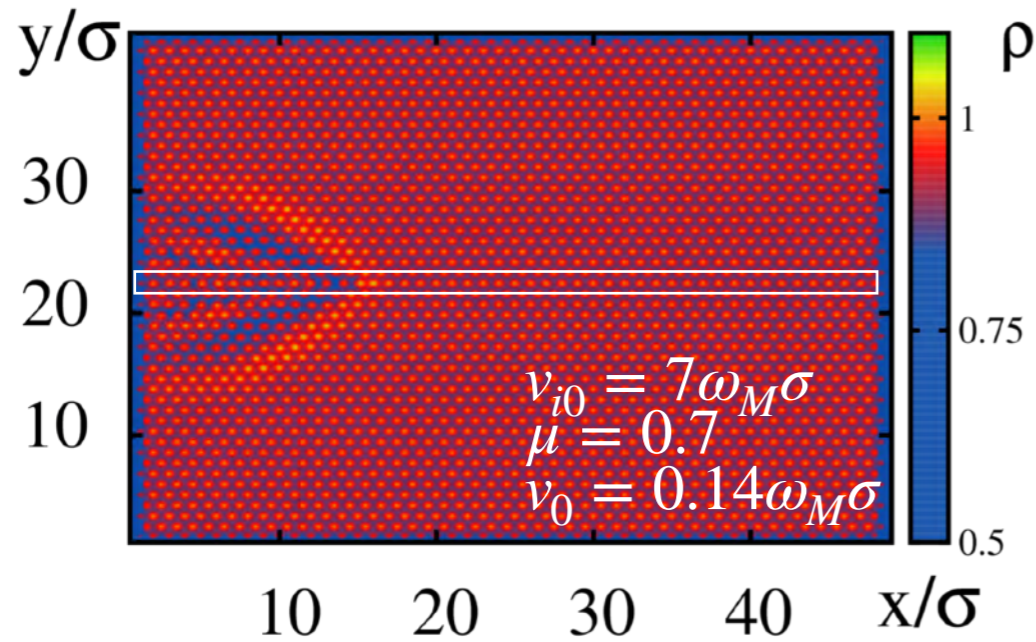


Характерные времена жизни

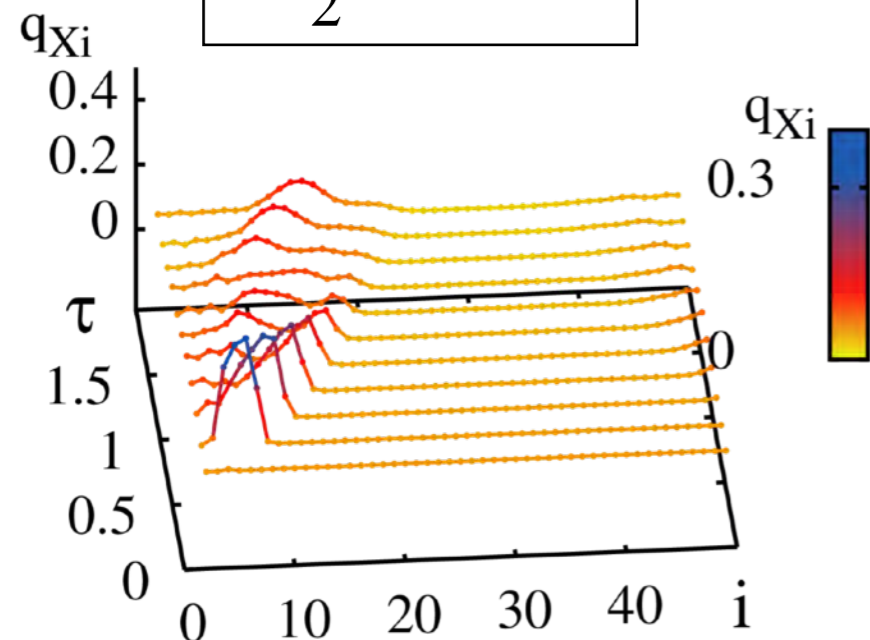
$$\tau_{max} \approx 10^2 / \omega_M$$

# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

Квазиодномерные **СОЛИТОНЫ**



$$\frac{mv_0^2}{2} < \Delta U_{PN}$$

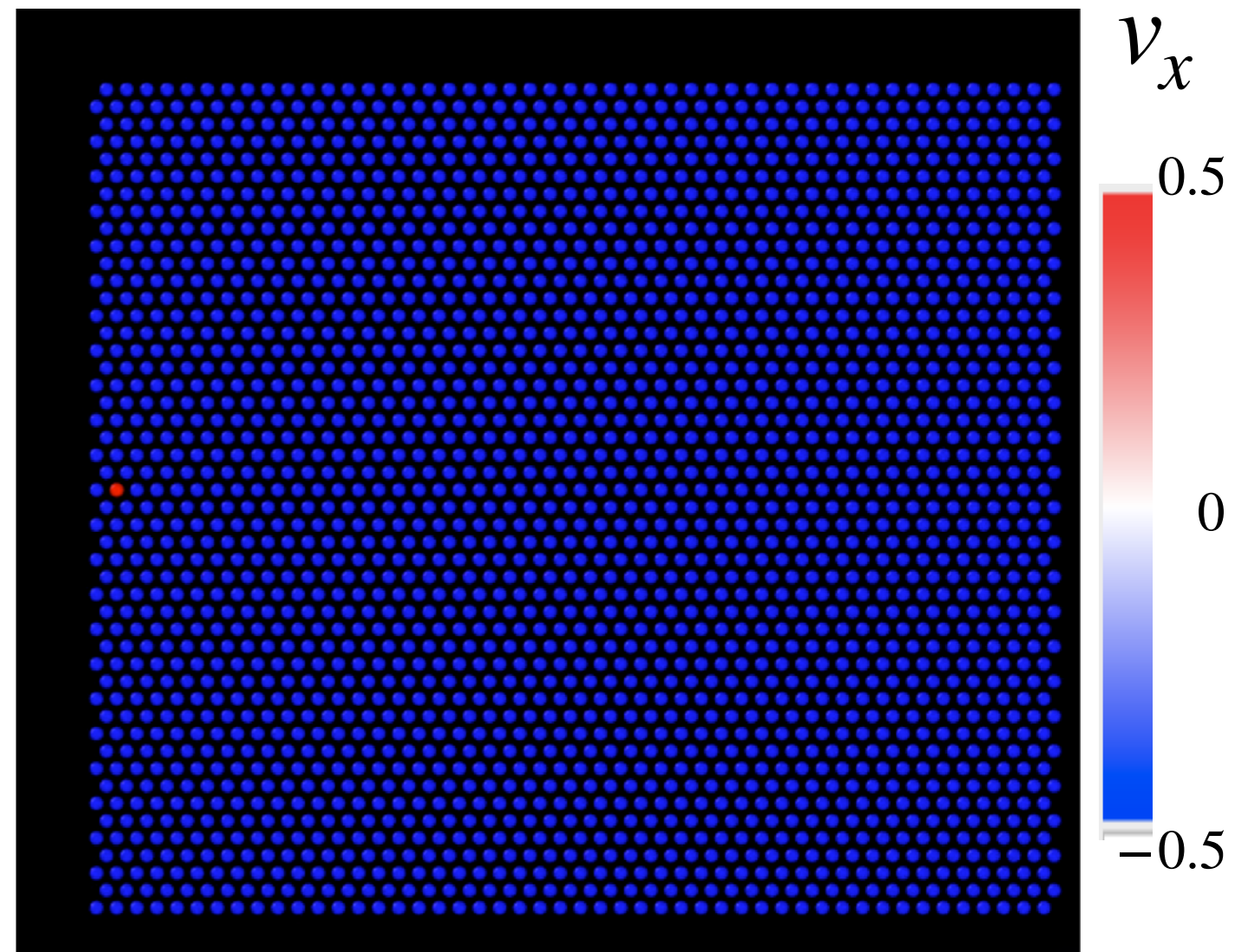
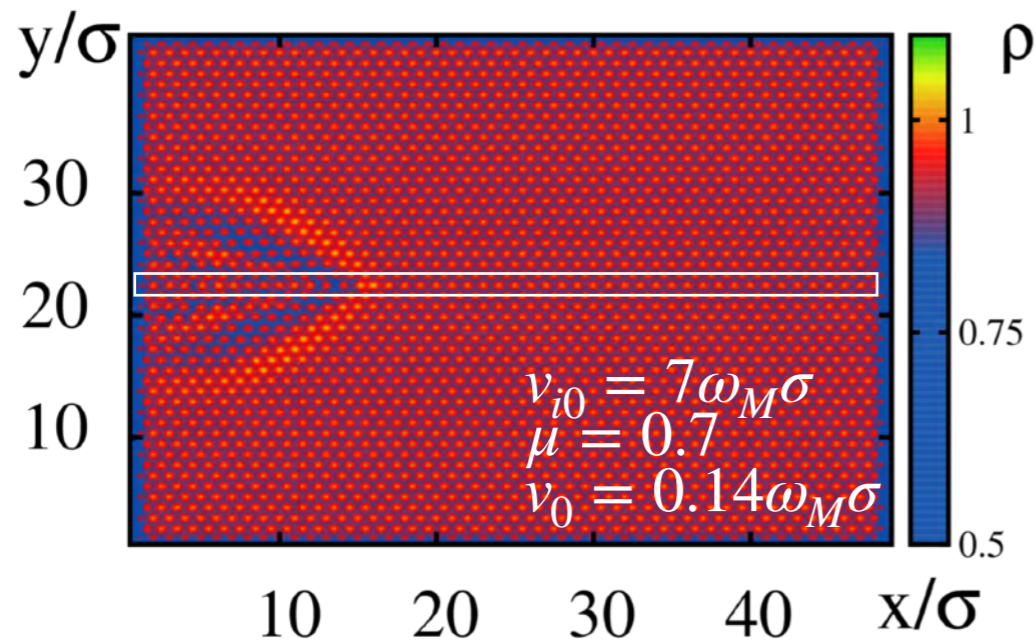


Характерные времена жизни

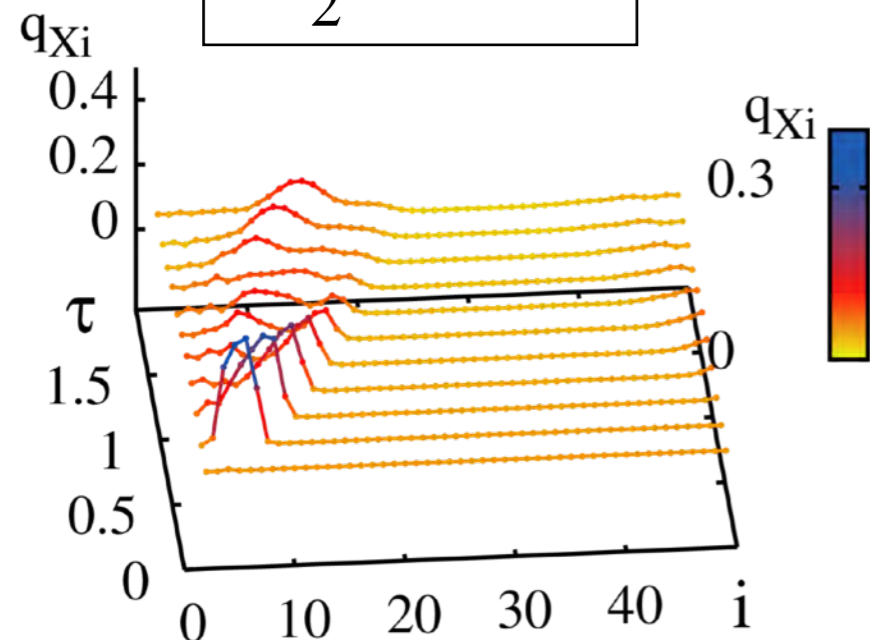
$$\tau_{max} \approx 10^1 / \omega_M$$

# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

Квазиодномерные **СОЛИТОНЫ**



$$\frac{mv_0^2}{2} < \Delta U_{PN}$$



Характерные времена жизни

$$\tau_{max} \approx 10^1 / \omega_M$$



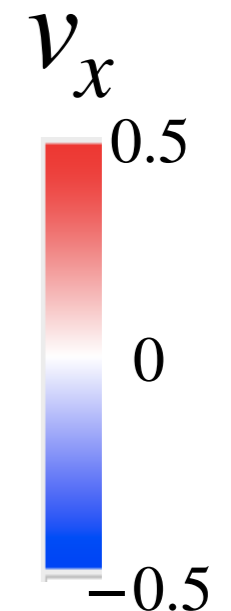
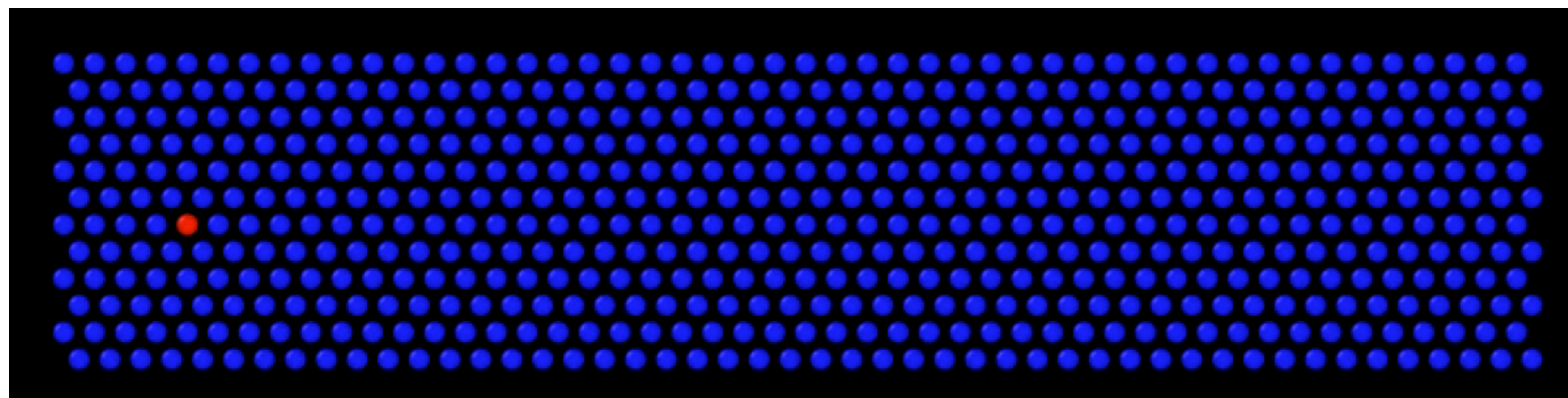
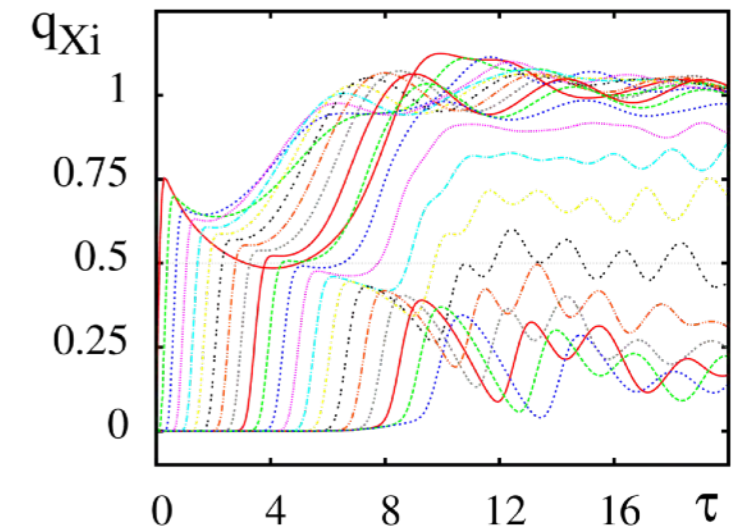
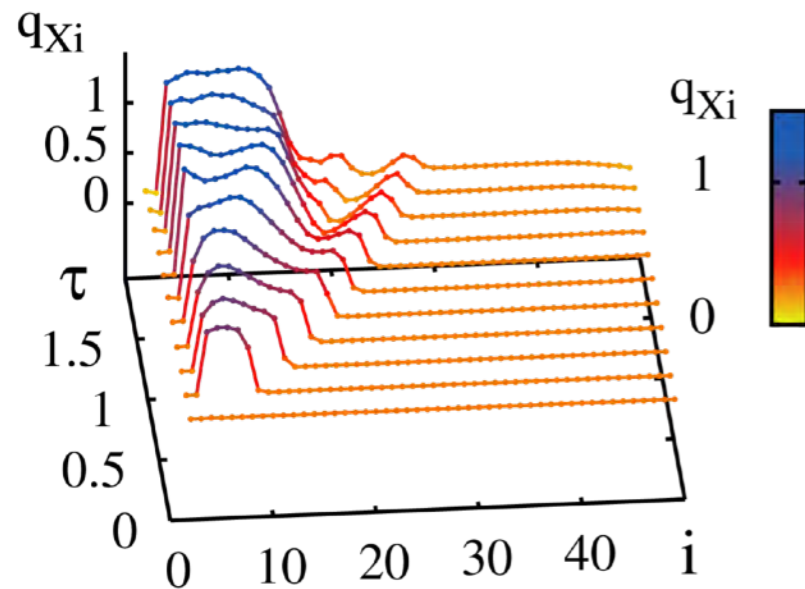
# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

Формирование **краудионов** при асимптотических значениях параметров

$$v_{i0} \approx 7\omega_M\sigma, \mu = 0.07, v_0 = 0.56\omega_M\sigma$$

«Активность» решетки  
мала, краудион  
возбуждается  
практически как в  
консервативной решетке  
при достаточно большой  
начальной энергии  
частицы

$$\frac{mv_{i0}^2}{2} > \Delta U_{PN}$$



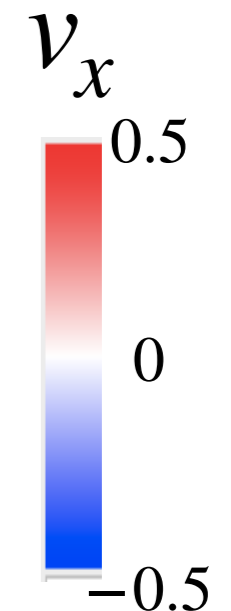
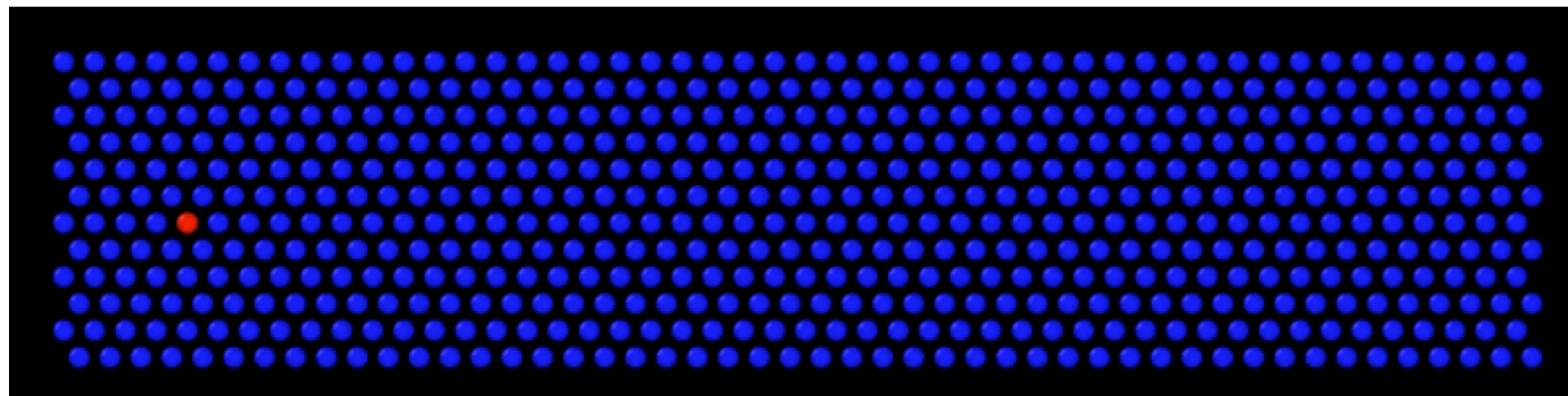
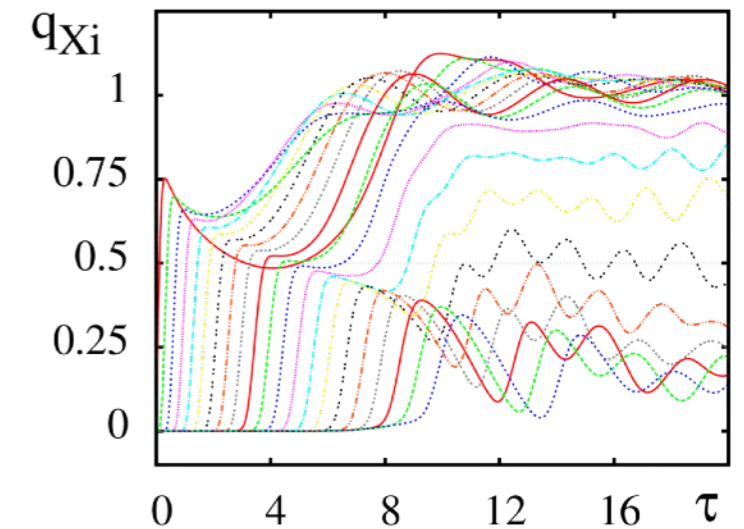
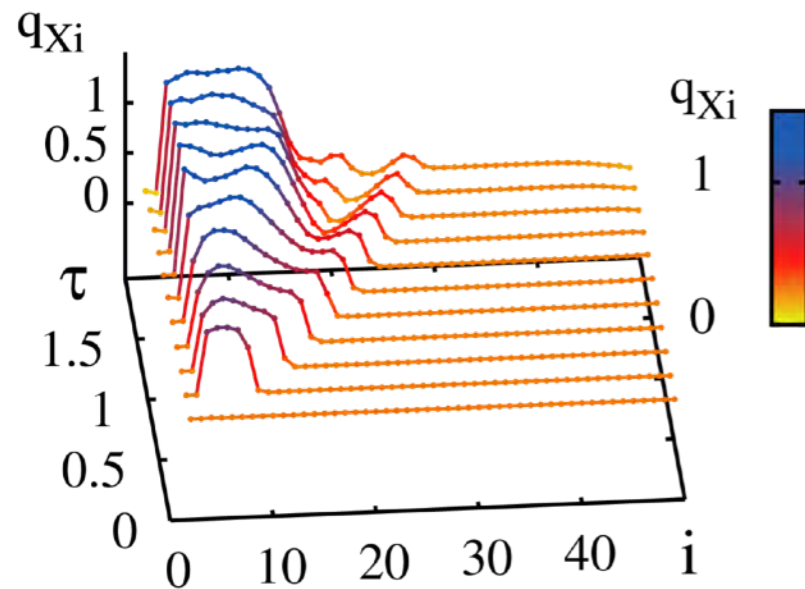
# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

Формирование **краудионов** при асимптотических значениях параметров

$$v_{i0} \approx 7\omega_M\sigma, \mu = 0.07, v_0 = 0.56\omega_M\sigma$$

«Активность» решетки  
мала, краудион  
возбуждается  
практически как в  
консервативной решетке  
при достаточно большой  
начальной энергии  
частицы

$$\frac{mv_{i0}^2}{2} > \Delta U_{PN}$$

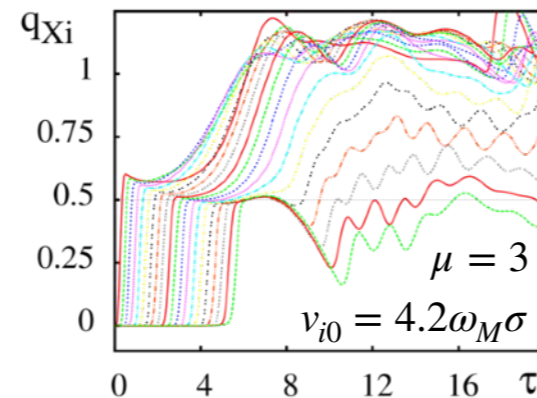


# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

Формирование **краудионов** при асимптотических значениях параметров

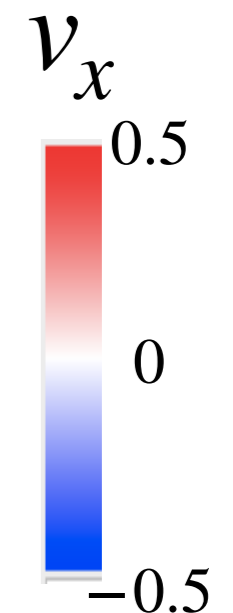
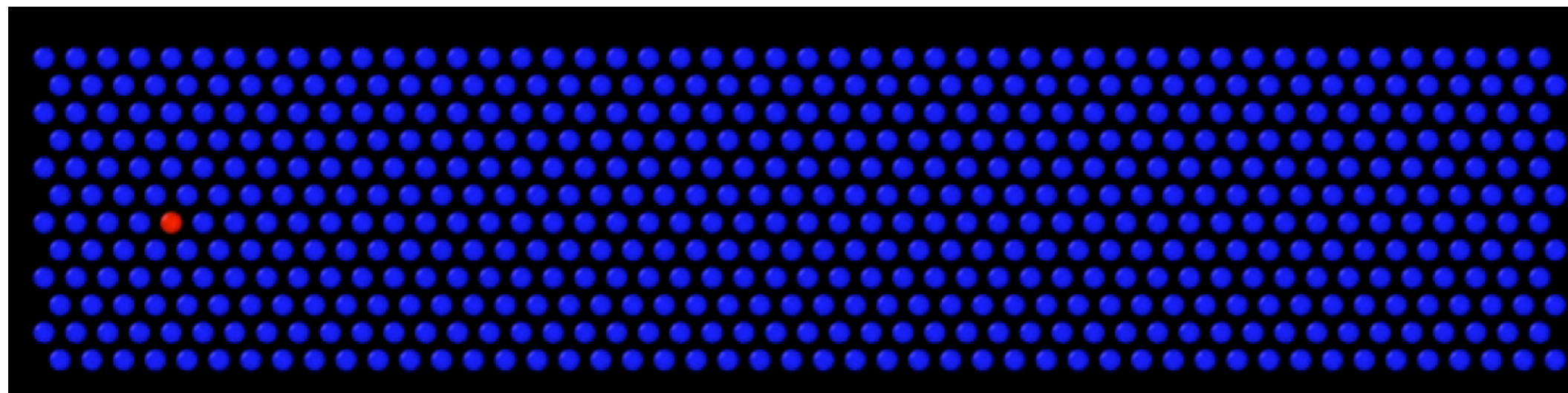
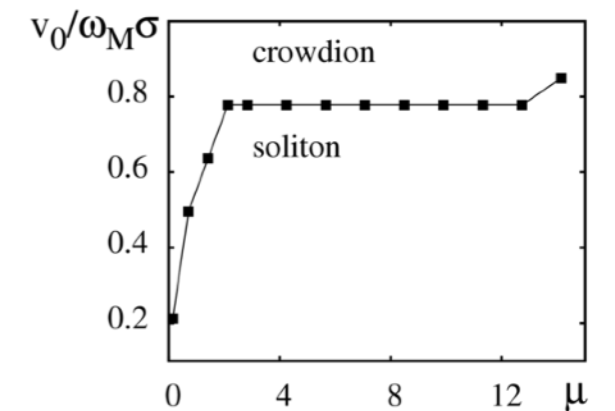
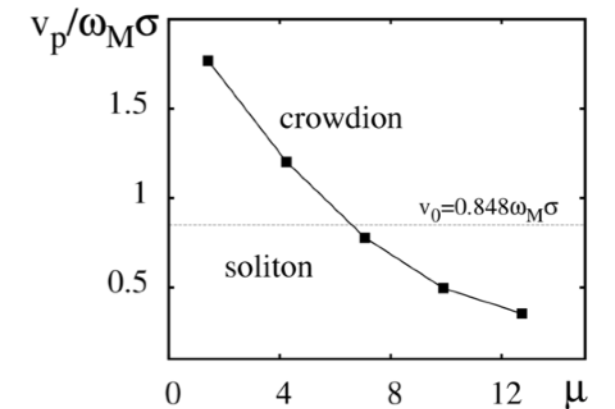
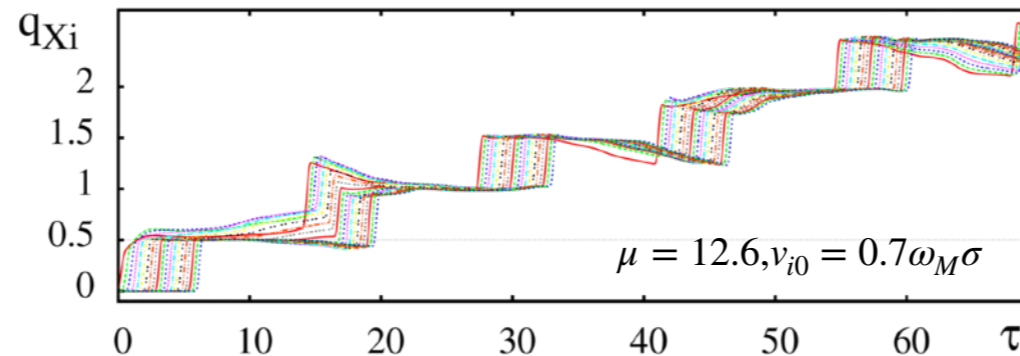
$$v_0 = 0.84\omega_M\sigma$$

Когда стационарное значение кинетической энергии велико, краудионы возбуждаются в широком диапазоне начальных скоростей возмущаемых частиц



$$\frac{mv_0^2}{2} > \Delta U_{PN}$$

$$\tau_{max} \rightarrow \infty$$

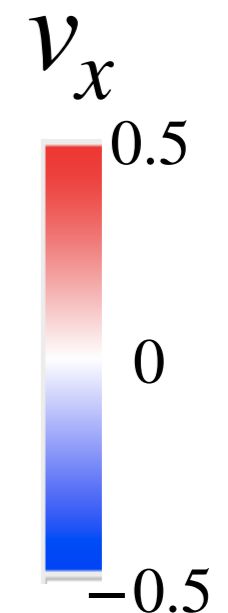
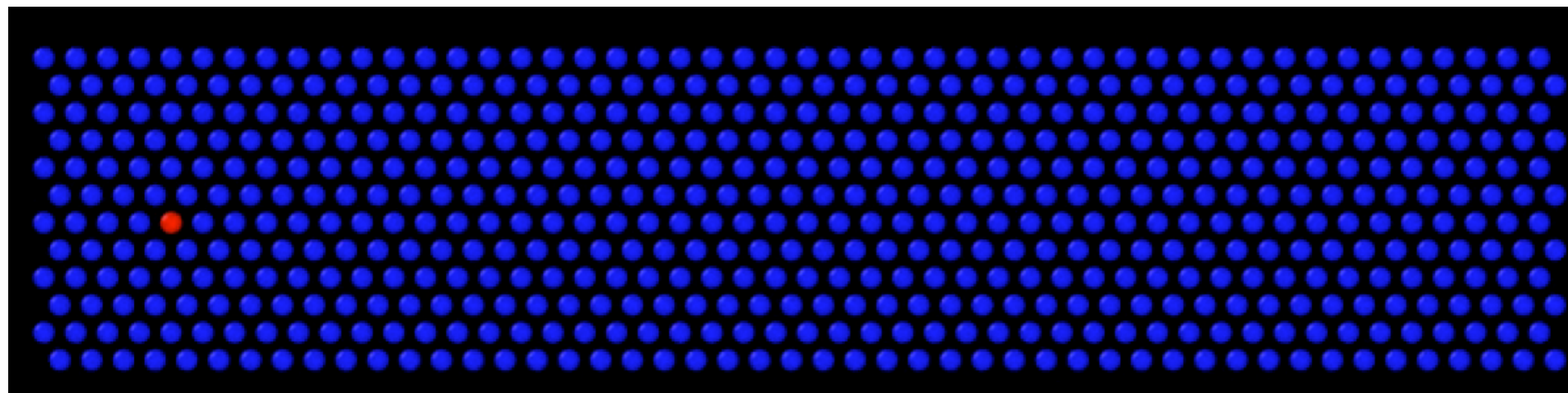
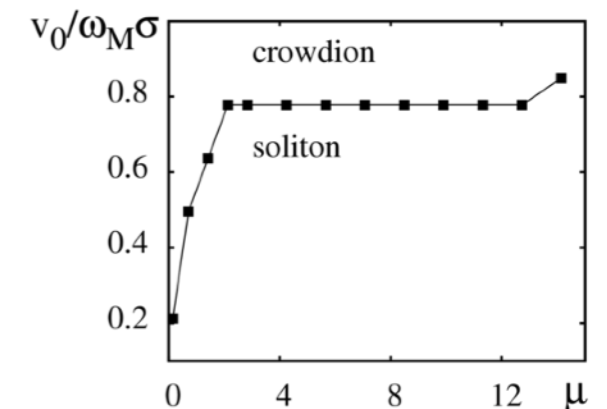
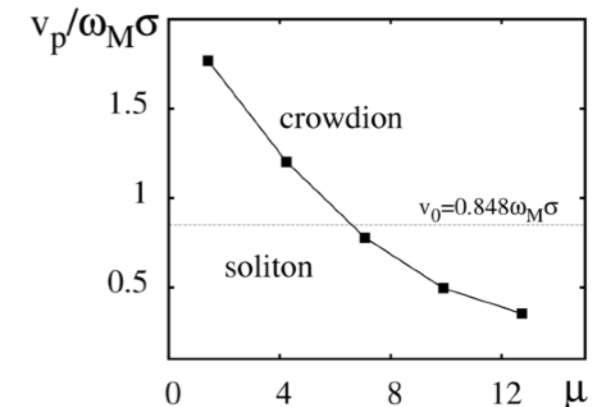
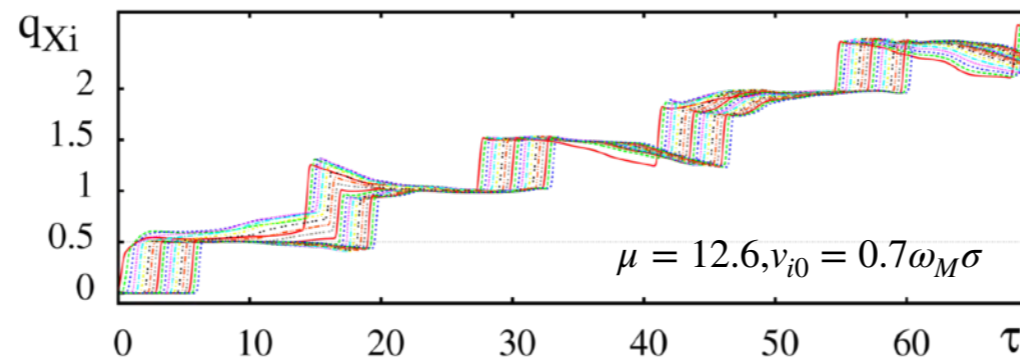
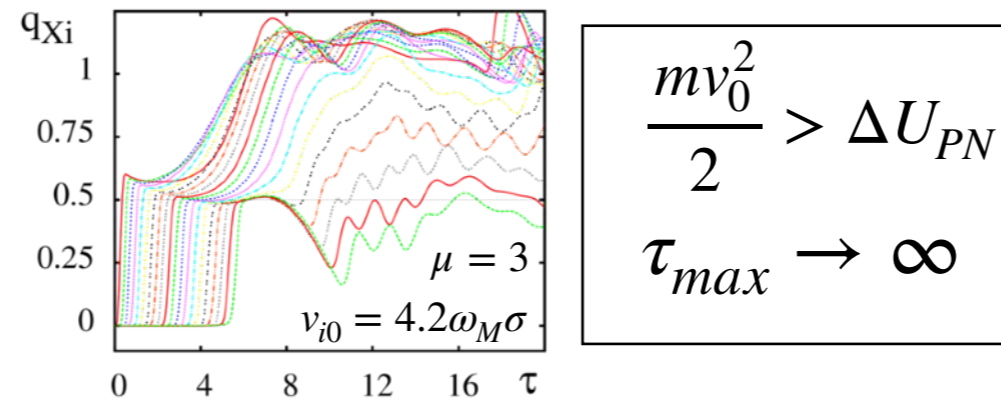


# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

Формирование краудионов при асимптотических значениях параметров

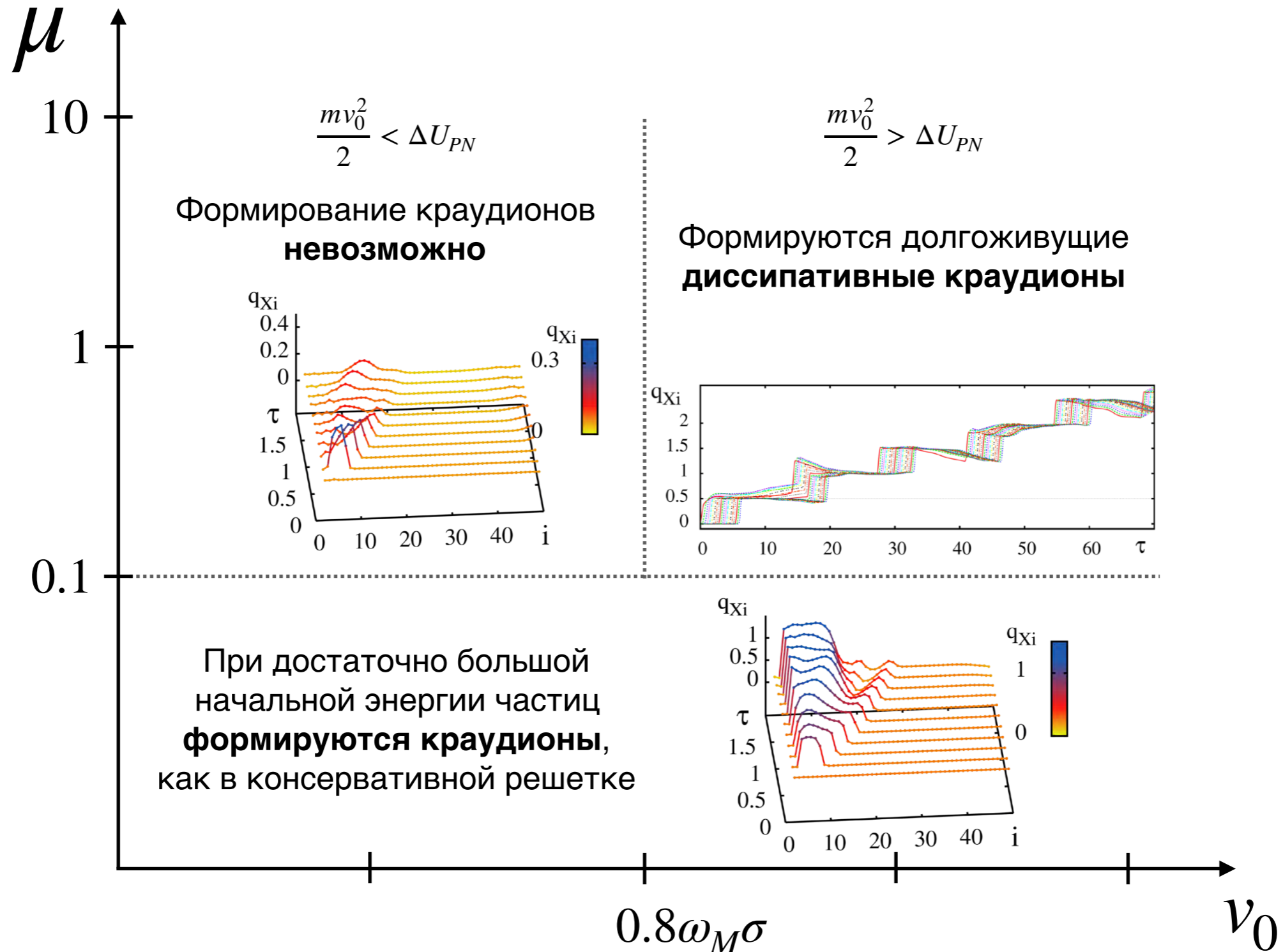
$$v_0 = 0.84\omega_M\sigma$$

Когда стационарное значение кинетической энергии велико, краудионы возбуждаются в широком диапазоне начальных скоростей возмущаемых частиц



# Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

Формирование **краудионов** при асимптотических значениях параметров



# Заключение

- В решетке активных частиц с треугольной симметрией набор стационарных мод (аттракторов) представлен трансляционными модами как с равномерным распределением частиц в пространстве, так и трансляционными модами с дефектами.
- При старте со стохастических начальных условий наблюдаются затухающие хаотические колебания, которые можно отнести к метастабильным состояниям.
- В треугольной решетке возможно возбуждение нескольких типов метастабильных состояний, трансформирующихся со временем в стационарные моды: одиночных плоских солитонов, состояний с несколькими равномерно распределенными плоскими солитонами, подковообразных  $M$ -солитонов и квазиодномерных солитонов.
- Плоские солитоны в случае, когда они неравномерно распределены по решетке, трансформируются либо непосредственно в трансляционную моду, либо сначала в метастабильное состояние с равномерным распределением солитонов по ячейке моделирования, которое далее переходит в стационарную трансляционную моду.
- Формирование локализованных метастабильных возбуждений – диссипативных краудионов возможно в определенных диапазонах параметров. Краудионы в активных решетках обладают большим временем жизни по сравнению с консервативными.

# Заключение

- В решетке активных частиц с треугольной симметрией набор стационарных мод (аттракторов) представлен трансляционными модами как с равномерным распределением частиц в пространстве, так и трансляционными модами с дефектами.
- При старте со стохастических начальных условий наблюдаются затухающие хаотические колебания, которые можно отнести к метастабильным состояниям.
- В треугольной решетке возможно возбуждение нескольких типов метастабильных состояний, трансформирующихся со временем в стационарные моды: одиночных плоских солитонов, состояний с несколькими равномерно распределенными плоскими солитонами, подковообразных  $M$ -солитонов и квазиодномерных солитонов.
- Плоские солитоны в случае, когда они неравномерно распределены по решетке, трансформируются либо непосредственно в трансляционную моду, либо сначала в метастабильное состояние с равномерным распределением солитонов по ячейке моделирования, которое далее переходит в стационарную трансляционную моду.
- Формирование локализованных метастабильных возбуждений – диссипативных краудионов возможно в определенных диапазонах параметров. Краудионы в активных решетках обладают большим временем жизни по сравнению с консервативными.

## Спасибо за внимание!