

01;03
©1995

СЛОЖНОЕ ОПИСАНИЕ В ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ ПРИ САМООРГАНИЗАЦИИ

О.И.Горский, В.А.Дзензерский, Ю.П.Кучугурный

Известно, что процессы самоорганизации в динамических системах связаны с неустойчивостью к внешним воздействиям системных субъектов и их коллективным упорядочением. При такой форме самоорганизации может происходить сокращение описательных параметров. Наблюдения в [1] показывают, что динамическая эволюция является сложным, многоэтапным, немонотонным релаксационным процессом со сменой динамических режимов, обусловленной несбалансированностью внутренних сил. Этапами эволюции динамической системы могут быть уже известные динамические режимы: режим с корреляциями [2], режим со слабыми корреляциями [2], режимы с упорядочением (например, режим образования треугольной решетки в молекулярно-динамической системе), режимы с перемешиванием [3]. Причин, по которым число описательных динамических параметров всегда можно уменьшить в процессе эволюции динамической системы и ее самоорганизации, нет.

В данной работе на основе молекулярно-динамического (МД) моделирования системы частиц с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса приводится описание динамического режима с упорядочением движения частиц. Упорядочение состоит в том, что кроме коллективных колеба-

тельных мод каждая частица имеет собственную колебательную моду с индивидуальной амплитудно-частотной характеристикой. Описание модели приведено в [1]. Рассматривались два типа МД системы: 1 — кластер в неравновесных условиях и 2 — полностью изолированный кластер.

Способ получения неравновесного кластера и полностью изолированного кластера (т. е. системы МД частиц без ограничений на движение) следующий. Формирование кластеров происходит во внешних неравновесных условиях. Внешние неравновесные условия задаются в виде растяжения или сжатия в определенный фиксированный момент времени скорости выбранных заранее частиц. На одну группу частиц накладывается условие сжатия одной из составляющих скорости с постоянным по знаку и величине коэффициентом сжатия $\alpha < 1$, на другую группу частиц — условие растяжения этой же составляющей скорости с постоянным по знаку и величине коэффициентом растяжения $\beta \geq 1$. Через достаточно продолжительное время (обычно $t > 10^5$ счетных циклов, что в реальном временном масштабе составляет 10^{-11} с) формируется кластер, в котором наблюдается разнообразие периодических движений. Для кластера в неравновесных условиях растяжение-сжатие скорости не отменяется в процессе моделирования. Для полностью изолированного кластера растяжение-сжатие скорости частиц в определенный момент времени отменяется и далее кластер находится в стохастическом счетном поле, обусловленном погрешностями вычислений. Полностью изолированный кластер устойчив к машинным флуктуациям, и достигнутое состояние кластера при числе счетных циклов $t = 10^6$ не нарушается. В рассматриваемом случае общее число частиц N первоначально расположены случайным образом вблизи узлов квадратной решетки с параметрами аргона. Граничные частицы с искусственно растягиваемыми или сжимаемыми скоростями показаны на рис. 1, на вставке, знаком “,”. Растяжению и сжатию циклически, с периодом 100 временных шагов подвергались составляющие скорости V_{xi} при $\alpha = 0.3$, $\beta = 1.06$. Коэффициенты растяжения-сжатия скорости подбирались опытным путем. Энергетический интервал для формирования подобных кластеров нами не устанавливался. На рис. 1, а показана зависимость средней кинетической энергии, приходящейся на одну частицу $T(t)$ в интервале времени $5 \cdot 10^4 \leq t \leq 5.6 \cdot 10^4$ счетных циклов ($N = 5 \cdot 5$), а на рис. 1, б-г составляющие скорости V_{yi} произвольно выбранных частиц (отмечены на вставке цифрами 1-3) для неравновесного кластера в том же интервале времени. В описываемом режиме стационарное состояние в системе не достигнуто. Зависимость $T(t)$, $V_i(t)$ ($i = 1, \dots, N$),

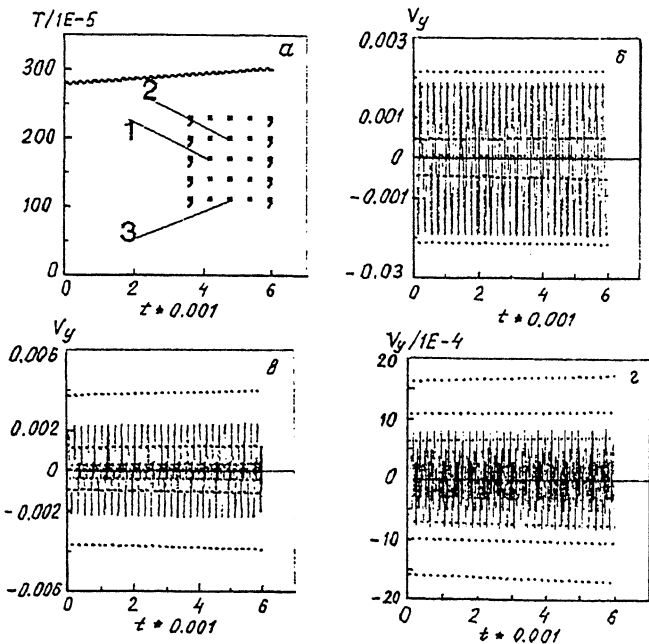


Рис. 1. Неравновесный кластер (25 частиц). Средняя кинетическая энергия $T(t)$ на одну частицу (а). Характеристики снимались в интервале $5 \cdot 10^4 < t < 5.6 \cdot 10^4$. Колебательные моды отдельных частиц в том же временном интервале (б-г). Коллективные колебательные моды не видны на этом временном интервале.

вообще говоря, в испытаниях меняется непредсказуемым образом. Стационарное состояние не удалось получить ни в одном испытании спустя $t = 10^6$ циклов (рис. 2, а). На рис. 2, б, в показана зависимость $V_{yi}(t)$ для произвольно выбранных частиц в интервале $t \leq 10^6$. Амплитудные характеристики колебательных мод значительно меньше изменения $V_{yi}(t)$ и на рис. 2, б, в не видны. На рис. 3, а показаны зависимости средней кинетической энергии, приходящейся на одну частицу $T(t)$ для полностью изолированного кластера ($N = 3 \cdot 3$). Переход от неравновесного состояния к полностью изолированному происходит в "free system" области. Как и в случае неравновесного кластера, наблюдается разнообразие индивидуальных движений частиц (рис. 3, б, в). Кроме того, частицы участвуют в коллективных движе-

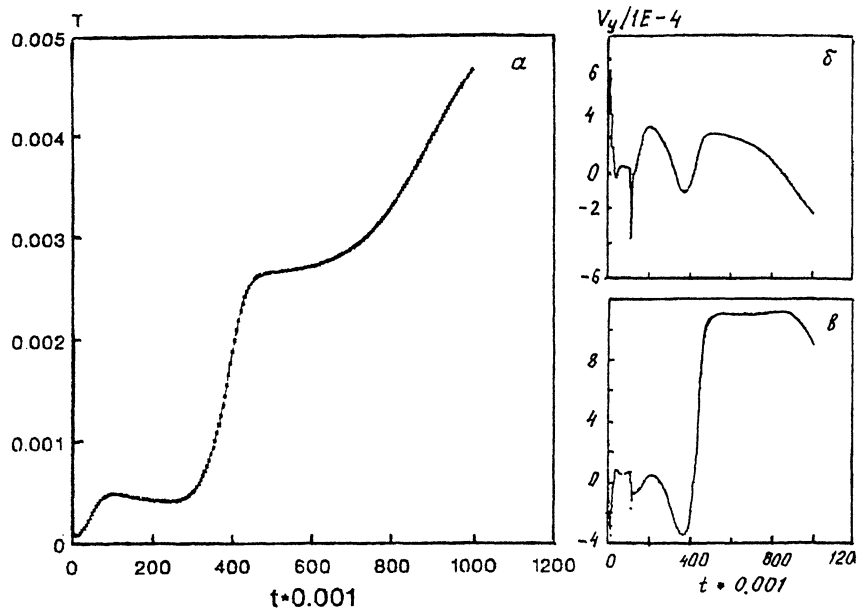


Рис. 2. Неравновесный кластер (25 частиц). Зависимость $T(t)$ на большом ($t = 10^6$) временном интервале (а). Скорости отдельных частиц на этом же интервале времени (б, в). Индивидуальные колебательные моды не видны на выбранном для наблюдений временном интервале.

ях, как-то: совместные синхронные колебания, вращения, волны сжатия, разрежения, вращения кластера как целого и т. д. Классификации колебаний мы не проводили. Важно подчеркнуть, что такие коллективные движения и индивидуальный набор амплитудно-частотных характеристик периодических колебаний каждой частицы при изменении пространственно-временного масштаба для наблюдений могут быть не замечены. Уменьшение числа описательных параметров в данном случае может означать потерю информации о регулярных движениях в системе. Исследования в [1] и в настоящей работе показывают, что несмешиваемость и сложная структура фазового пространства могут являться характерными свойствами МД систем. Если рассмотреть ситуацию в МД системах, то можно заметить, что организо-

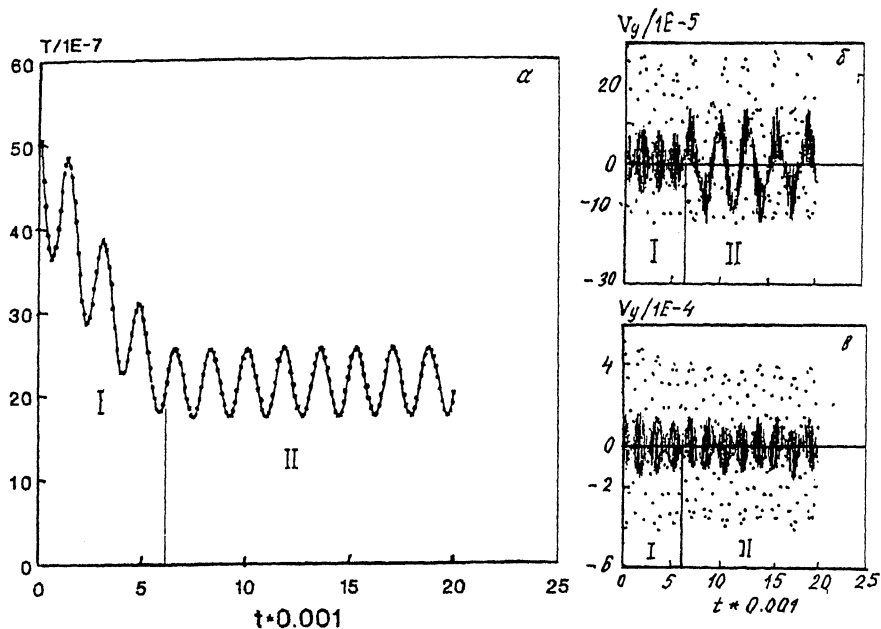


Рис. 3. Полностью изолированная система (9 частиц). Характеристики снимались для $t = 2 \cdot 10^4$ циклов. Для полностью изолированного кластера устойчивый динамический режим с индивидуально-периодическими и коллективными движениями частиц в системе с высокой вероятностью получается для небольшого числа частиц. I — область "unfree system", II — область "free system".

вать перемешивание в фазовом пространстве ничуть не проще, чем организовать сложный набор периодических движений. В том и в другом случае требуется конфигурационная устойчивость кластера, чего можно добиться введением границ или ограничений на движение, установлением взаимодействий на границах, выбором энергетических условий. И если установление индивидуально-периодических движений частиц в кластере можно назвать самоорганизацией, то почему нельзя сделать этого в отношении перемешивания? Энергетические интервалы динамического режима с перемешиванием и рассматриваемого режима, конечно, могут при этом не пересекаться. Как показывают исследования, выбор или отказ от ограничений на перемещения, выбор или отказ от первоначальной стохастичности в ско-

ростях частиц и выбор высоко- или низкоэнтропийной первоначальной конфигурации системы приводит к наблюдаемым физическим или, что не исключено, счетным явлениям в МД системах.

Список литературы

- [1] Горский О.И., Дзензерский В.А., Кучугурный Ю.П. // Письма в ЖТФ. 1994. Т. 16. В. 20, с.
- [2] Benettin G., Tenenbaum A. // Phys. Rev. A. 1983. V. 28. N 5. P. 3020-3029.
- [3] Benettin G., Vecchio G., Tenenbaum A. // Phys. Rev. A. 1980. V. 22. N 4. P. 1709-1719.

ОФТП "Трансмаг"
АН Украины

Поступило в Редакцию
27 января 1995 г.