

ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный
университет имени Н.Г. Чернышевского»

На правах рукописи



СЕРГЕЕВ Константин Сергеевич

**КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ И ВОЛНОВЫЕ ЯВЛЕНИЯ В
УПОРЯДОЧЕННЫХ И НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ
АНСАМБЛЯХ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ**

01.04.03 – «Радиофизика»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук,
профессор, ЧЕТВЕРИКОВ А.П.

Саратов – 2018

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	5
Глава 1. ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ВОЛНЫ В ЦЕПОЧКЕ АКТИВНЫХ ЧАСТИЦ	21
1.1 Введение	21
1.2 Модель и уравнения динамики цепочки	26
1.3 Механизм возникновения диссипативных солитонов	27
1.4 Формирование солитонных кластеров	32
1.5 Динамика солитонов в цепочке с периодическими граничными условиями	38
1.6 Расчет структурного динамического фактора для идентификации мод цепочки	42
1.7 Диссипативные солитоны при нелокальной связи	45
1.7.1 Стационарные и метастабильные состояния	47
1.7.2 Механизм установления стационарных состояний при нелокальной связи	48
1.8 Влияние шума на динамику солитонов	51
1.8.1 Переключения мод под действием шума	52
1.8.2 Связь преимущественного направления переходов между модами с интенсивностью шума	54
1.9 Сопоставление динамики цепочки частиц и цепочки осцилляторов Рэлея	59
1.10 Выводы по первой главе	67

Глава 2. ДИССИПАТИВНЫЕ СОЛИТОНЫ И МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ДВУМЕРНОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ АКТИВНЫХ ЧАСТИЦ	69
2.1 Введение	69
2.2 Модель и уравнения динамики двумерной решетки	70
2.3 Стационарные моды треугольной решетки с периодическими граничными условиями. Определение характеристик стационарных мод.	73
2.4 Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки	75
2.5 Формирование краудионов при асимптотических значениях параметров	84
2.6 Выводы по второй главе	91
Глава 3. ДИНАМИКА ДВУМЕРНОГО НЕУПОРЯДОЧЕННОГО АНСАМБЛЯ НЕВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ, ЭВОЛЮЦИОНИРУЮЩИХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ОБЩЕГО ПОЛЯ	93
3.1 Введение	93
3.2 Описание и уравнения модели	94
3.3 Индуцированный шумом переход между стационарными состояниями ансамбля	100
3.4 Эволюция распределения скорости частиц ансамбля	105
3.5 Влияние аддитивного шума на характеристики стационарных состояний ансамбля	111
3.6 Выводы по третьей главе	113
Глава 4. ВОЗБУЖДЕНИЕ МОБИЛЬНЫХ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В ЦЕПОЧКАХ ЧАСТИЦ НА ПРИМЕРЕ МОЛЕКУЛЫ ДНК	115
4.1 Введение	115

4.2	Математическая модель Пейрарда-Бишопа-Доксуа (ПБД) для анализа нелинейных возмущений в ДНК	116
4.3	Возбуждение мобильных бризеров в ДНК за счет возмущения скорости нескольких смежных частиц	120
4.4	Возбуждение мобильных бризеров в ДНК за счет смещения нескольких смежных частиц	125
4.5	Выводы по четвертой главе	127
ЗАКЛЮЧЕНИЕ		129
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ		133

ВВЕДЕНИЕ

Одно из актуальных направлений современной нелинейной динамики — исследование поведения ансамблей множества элементов, взаимодействующих посредством связи различного характера. Природа парциальных элементов, составляющих ансамбль, и связей между ними может в значительной степени различаться. Большое количество работ в этой области посвящено изучению динамики ансамблей осцилляторов (см., например, [1–11]). Не меньший интерес вызывают задачи, связанные с моделированием больших систем (ансамблей или решеток) из множества движущихся в пространстве элементов (в частности, частиц или атомов), которые тем или иным образом взаимодействуют друг с другом и могут находиться под действием случайных сил. Простейшим примером задач подобного рода может являться, например, исследование поведения ансамбля броуновских частиц.

С позиций теории колебаний, поведение броуновских частиц можно рассматривать как динамику неупорядоченного находящегося под действием стохастических сил ансамбля консервативных элементов, взаимодействие между которыми сводится к жестким соударениям. Задачи такого рода в большей степени характерны для статистической физики, поскольку подобные ансамбли как правило не способны демонстрировать колебательную и волновую динамику.

Однако системы из точечных масс, связанных упругими силами (линейными либо нелинейными), способны поддерживать распространение различных волн. Так, даже простейшая система в виде одномерной цепочки из идентичных масс, связанных линейными пружинками, уже демонстрирует распространение волн с дисперсией, обусловленной пространственным масштабом цепочки. Такие системы представляют собой упорядоченные ансамбли (т.е. цепочки и ре-

шетки) взаимодействующих частиц и позволяют выяснить, например, основные особенности тепловых колебаний атомов кристаллической решетки.

Таким образом, моделирование динамики цепочек и решеток частиц играет важную роль в исследованиях поведения молекул и кристаллических решеток на микро- и макроуровне. В подобных задачах обычно рассматриваются ансамбли из консервативных частиц, связанных нелинейными потенциальными силами. Топология связи и профиль потенциала могут значительно различаться в зависимости от конкретной задачи, однако для выявления наиболее общих закономерностей поведения часто используются потенциалы Морзе [12], Тоды [13] и Леннарда-Джонса [14].

В рамках теории колебаний и волн подобные ансамбли можно рассматривать как цепочки либо решетки консервативных неосциллирующих элементов с характерными пространственными и временными масштабами, определяемыми связью между элементами. Интерес к подобным задачам был во многом инициирован известной работой Э. Ферми, Дж. Паста и С. Улама [15], в которой рассматривались особенности динамики плотной одномерной цепочки точечных консервативных частиц, связанных посредством нелинейных сил.

Поскольку получить точные аналитические решения даже для одномерной нелинейной решетки в большинстве случаев не представляется возможным, основным методом исследования является численный эксперимент. В настоящее время цепочки и решетки частиц активно изучаются в разных аспектах, о чем свидетельствует большое количество публикаций (см., например, [16–35]).

Динамика ансамблей заметно обогащается и усложняется, если парциальными элементами являются не консервативные, а так называемые активные частицы, в которых энергия окружающей среды трансформируется в кинетическую энергию направленного движения. Под термином «активные» подразумевается, что отдельные элементы таких систем способны получать энергию из окружающей среды и преобразовывать ее в кинетическую энергию. Примеры таких систем рассмотрены во множестве работ, например [17–32, 36–44]. Подоб-

ные модели описывают целый класс физических систем с общим названием «активное вещество» (active matter), которые активно изучаются теоретически и экспериментально [41, 42, 45–52].

Существует большое количество различных моделей активных систем с разными механизмами конвертации энергии и взаимодействия между элементами. Они демонстрируют ряд новых особенностей динамики, которые не наблюдаются в консервативных системах, например формирование разного рода паттернов [46, 47, 52, 53].

Существуют модели активного вещества, в которых движение происходит не только в результате преобразования энергии окружающей среды в кинетическую, но и за счет флуктуаций. Подобные модели принято называть моделями активных броуновских частиц (АБЧ) [45, 54], и их динамика более разнообразна по сравнению с динамикой традиционных броуновских частиц. Исследования динамики АБЧ значительно расширяют классическую физическую задачу изучения поведения броуновской частицы под действием случайных сил.

Ключевым моментом, отличающим консервативные частицы от активных, является «подвод» энергии у последних, который может осуществляться различными способами. Пусть, например, каждая частица представляет собой сферу с характерными размерами порядка нескольких микрон, с одной стороны покрытую катализатором [52]. Этот катализатор способствует протеканию химических реакций с компонентами окружающей среды, сопровождающихся активным выделением газа. В соответствии с законом сохранения импульса, частица начинает двигаться в направлении стороны, не покрытой катализатором [52, 55].

Приток энергии в уравнениях движения можно описать как силу отрицательного трения в направлении движения. Для этого вводится нелинейное трение $\gamma(\vec{r}, \vec{v})$ как функция, в общем случае зависящая от скорости и координаты частицы. В фазовом пространстве \vec{r}, \vec{v} есть области, внутри которых $\gamma(\vec{r}, \vec{v}) < 0$. В результате появляются новые особенности динамики, нереализуемые в ансам-

блях консервативных частиц, например, необычные диффузионные свойства и формирование предельных циклов. Стационарные распределения скорости на двумерной плоскости $p(v_x, v_y)$ для активных частиц, как правило, имеют форму аксиально-симметричного кратера [45].

Иногда используются модели, в которых трение зависит только от координаты, но не от скорости: $\gamma(\vec{r}, \vec{v}) \equiv \gamma(\vec{r})$. В таком случае области пространства, в которых $\gamma(\vec{r}, \vec{v}) < 0$, являются своего рода «энергетическими центрами (пятнами)». Динамика ансамблей с такими центрами энергетической накачки является сложной и обсуждалась, например, в [56].

Типичным примером модели с нелинейным трением является модель Рэлея с параболическим коэффициентом отрицательного трения [57]

$$\gamma(\vec{r}, \vec{v}) = \beta(\vec{v}^2 - v_0^2). \quad (1)$$

Цепочки и решетки с нелинейной диссипацией в форме Рэлея рассмотрены в Главах 1 и 2 настоящей работы. В некоторых работах по моделированию динамики активных частиц [45] используется модель отрицательного трения Шинбайна-Грулера [58, 59]

$$-\gamma(\vec{v})\vec{v} = -\gamma_0(s - v_0)\vec{e}_v, \quad (2)$$

представляющая собой линеаризованную и упрощенную модель трения Рэлея. В этих моделях трение становится отрицательным при скоростях, меньших заданного значения (частица получает энергию из среды), и положительным при движении со скоростью, больше заданной. При этом направление движения не играет роли. Иногда используются модели отрицательного трения, описывающие некое внутреннее хранилище энергии (см., например, [60]).

Кроме типа диссипации, модели ансамблей связанных частиц различаются характером взаимодействия. В простейшем случае консервативных броуновских частиц взаимодействие сводится к их упругим соударениям. Однако в моделях активных броуновских частиц могут реализоваться и иные способы связи элементов ансамбля.

Один из таких способов основан на механизме выравнивания направлений движения частиц через общее поле скоростей. Такой подход применялся, например, в модели Викчека [61] и был значительно развит в дальнейшем [45, 62–65]. В моделях, подобных модели Викчека, каждый элемент характеризуется координатой на двумерной плоскости \vec{r}_i и ориентацией вектора скорости φ (последняя величина связана с единичным вектором направления движения $\vec{e}_{h,i}(t)$). Величина скорости элементов при этом остается постоянной. Динамика i -го элемента определяется уравнениями

$$\begin{aligned}\dot{\varphi}_i &= \frac{1}{s_0}(F_{i,\varphi} + \sqrt{2D_\varphi}\xi_\varphi); \\ \dot{\vec{r}}_i &= s_0\vec{e}_{h_i}(t) = s_0 \begin{pmatrix} \cos \varphi_i(t) \\ \sin \varphi_i(t) \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (3)$$

Здесь $F_{i,\varphi}$ – сила, влияющая на направление скорости. Эта сила действует со стороны поля скоростей и стремится выровнять скорость i -того элемента в направлении средней скорости всего ансамбля (или некоторой его части). При этом, поле скоростей частиц может рассчитываться как по всем элементам ансамбля (так называемое глобальное взаимодействие), так и по элементам из некоторой заданной окрестности i -того элемента.

Идея взаимодействия посредством общего поля скоростей получила развитие и в других моделях так называемых «самодвижущихся» частиц [66, 67]. При этом усложняется структура силы $F_{i,\varphi}$, в которую могут быть дополнительно включены, например, слагаемые для близкодействующего отталкивания частиц (для предотвращения их столкновений и пересечений)

$$\vec{f}_r = -\frac{\mu_r}{N_r} \sum_{j=1}^N \hat{r}_{ji} \Theta(l_r - r_{ji}), \quad (4)$$

а так же разные типы взаимодействия для приближающихся

$$\mathbf{f}_m = \frac{1}{N_m(t)} \sum_{j=1}^N \mu_a |\tilde{v}_{ji}| \hat{\mathbf{r}}_{ji} \Theta(l_s - r_{ji}) \Theta(r_{ji} - l_r) \Theta(\tilde{v}_{ji}) \quad (5)$$

и удаляющихся частиц

$$\mathbf{f}_a = \frac{1}{N_a(t)} \sum_{j=1}^N \mu_a |\tilde{v}_{ji}| \hat{\mathbf{r}}_{ji} \Theta(l_s - r_{ji}) \Theta(r_{ji} - l_r) \Theta(-\tilde{v}_{ji}). \quad (6)$$

В приведенных выше формулах $\Theta(r)$ – функции Хевисайда, определяющие попадание частиц в круги радиуса l_r отталкивания и l_s притяжения, r_{ij} – расстояние между i -той и j -той частицами, а \tilde{v}_{ji} – их относительная скорость. Параметр $\mu_{m,a}$ определяет силу взаимодействия. Каждая сила, соответственно, нормируется на количество взаимодействующих частиц $N_{r,m,a}$.

Одним из преимуществ моделей с выравниванием скорости является возможность применить для их описания подходы, известные из гидродинамики, как это сделано, например, в [54, 68, 69]. Однако, гидродинамическое описание динамики ансамблей хорошо работает, как известно, в приближении бесконечно большого числа элементов. Про динамику же малых ансамблей известно гораздо меньше. В Главе 3 настоящей диссертационной работы произведено сравнение данных, полученных в рамках гидродинамического описания, с результатами численного моделирования для малого ансамбля с взаимодействием через выравнивание скоростей.

Большую часть моделей с взаимодействием через выравнивание скоростей можно отнести к неплотным неупорядоченным ансамблям частиц. Для упорядоченных ансамблей (решеток) в большей степени характерно взаимодействие посредством потенциальных сил различной природы. В простейшем случае в качестве таких связей могут выступать линейные силы упругости [41, 42, 44]. Сила, действующая на i -тую частицу, может иметь вид [41]

$$\vec{F}_i = \sum_{j \in S_i} -k \left(\frac{|\vec{r}_{ij}| - l_{ij}}{l_{ij}} \right) \frac{\vec{r}_{ij}}{|\vec{r}_{ij}|}, \quad (7)$$

где $|\vec{r}_{ij}|$ – расстояние между i -той и j -той частицами, l_{ij} – равновесная длина связи, а k – коэффициент упругости. Множество S_i содержит все частицы, которые взаимодействуют с i -той, и не меняется с течением времени, то есть связи

фиксированы. При этом частицы формируют упорядоченную решетку (цепочку). Такие модели часто называют активными мембранами [41, 42, 44, 49, 50, 52] либо активными пленками. В отличие от моделей, подобных модели Викчека [61], состояние каждой ее частицы зависит только от ее координаты относительно соседей, но не зависит от взаимной ориентации их скоростей. Кроме того, в модели активных мембран как правило подразумевается взаимодействие с определенным набором соседей, т.е. фиксированные связи.

Предположение о линейном характере сил упругости упрощает анализ модели, поскольку поведение различных возмущений в консервативных линейных решетках и цепочках хорошо изучено. Однако изучение динамики активных решеток, элементы которых связаны нелинейными силами, представляет большой интерес, поскольку даже консервативные нелинейные решетки демонстрируют богатую колебательную и волновую динамику.

Известно, что в решетках консервативных частиц, связанных нелинейными потенциальными силами, обнаружено большое количество распределенных и локализованных нелинейных возбуждений. Примерам таких возбуждений являются дискретные солитоны и бризеры, изучавшиеся во множестве работ [30–35, 70–76].

В качестве нелинейных сил, связывающих элементы решетки, в моделях часто рассматриваются силы потенциала Морзе [12]

$$U(z) = D(e^{-2b(z-\sigma)} - 2e^{-b(z-\sigma)}), \quad (8)$$

где D , b и σ – параметры потенциала, а z – расстояние между элементами; потенциала Тоды [13]

$$U(z) = ue^z + v, \quad (9)$$

где u и v – параметры потенциала, потенциала Леннарда-Джонса [14]

$$U(z) = \epsilon_0 \left(\frac{1}{x^{12}} - \frac{2}{x^6} \right), \quad (10)$$

где ϵ_0 – глубина потенциальной ямы, и других. Перечисленные потенциалы имеют различные достоинства и недостатки, рассмотрение которых выходит за рамки введения; следует, однако, отметить, что потенциалы Леннарда-Джонса и Морзе с ямой конечной глубины моделируют потенциалы межатомных взаимодействий с гораздо большей точностью, чем, например, параболический потенциал и потенциал Тоды.

Так, в частности, в известной математической модели ДНК Пейрарда-Бишопа-Доксуа [77] используется потенциал Морзе для описания связи консервативных частиц внутри нуклеотида и модифицированный параболический потенциал для описания стэкингового взаимодействия. Таким образом, для исследования нелинейных возмущений сложный природный объект – молекулу ДНК – можно рассматривать как упорядоченную цепочку консервативных нелинейных частиц, взаимодействующих посредством нелинейных потенциальных сил. В таком объекте возбуждается много типов колебаний и волн, но больший интерес представляют те из них, которые потенциально можно использовать для транспорта заряженных частиц вдоль ДНК [78–81]. Эта задача рассмотрена в Главе 4.

Исследования отмеченных выше проблем продолжают интенсивно развиваться, показателем чего является большое количество работ в этой области науки, изданных за последние годы. Поэтому задачи настоящей диссертационной работы, посвященной изучению колебательных и волновых явлений в решетках и ансамблях активных и консервативных взаимодействующих частиц, принадлежат к самым **актуальным проблемам** современной радиофизики, нелинейной динамики и теории колебаний и волн.

Целью данной работы является исследование свойств упорядоченных и неупорядоченных ансамблей активных и консервативных частиц, связанных потенциальными нелинейными силами, включая изучение локализованных возбуждений, таких как диссипативные дискретные солитоны, мобильные дис-

кретные бризеры, диссипативные дискретные бризеры, и анализ динамики метастабильных возбуждений с различным временем жизни.

Для достижения поставленных целей в рамках диссертационной работы решаются следующие **основные задачи**:

1. Исследование влияния степени неравновесности активных частиц на коллективную динамику одномерной цепочки с нелинейной потенциальной связью между частицами.
2. Определение стационарных мод и метастабильных возбуждений в двумерной решетке активных частиц; сопоставление полученных результатов с данными для консервативной решетки.
3. Изучение особенностей динамики малого неупорядоченного ансамбля активных частиц с взаимодействием через выравнивание скорости.
4. Исследование мобильных дискретных бризеров в цепочках частиц с двумя характерными временными масштабами на примере молекулы ДНК

Основным методом исследований является численное моделирование, включающее численное решение уравнений динамики активных и консервативных частиц с последующим анализом полученных данных при помощи программ, разработанных автором.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы.

Во введении обосновывается актуальность выбранной темы диссертации, проводится краткий обзор имеющихся в научной литературе результатов по теме проводимого исследования, определяются цели и задачи исследования, формулируются положения, выносимые на защиту.

В первой главе проводится исследование динамики одномерной цепочки активных частиц, связанных потенциальными силами Морзе. Описываются основные типы нелинейных возбуждений (диссипативные солитоны), исследуется

механизм их возникновения из случайных начальных возмущений. Подробно рассматривается процесс перехода от произвольных начальных возмущений к стационарным модам. Изучается влияние нелокальной связи на динамику цепочки, а также возникновение новых типов стационарных состояний при нелокальной связи. Производится сравнение динамики цепочки активных частиц с динамикой цепочки осцилляторов. Рассчитывается структурный динамический фактор для идентификации стационарных мод (в том числе в присутствии шума). Исследуется влияние шумового воздействия на цепочку; в частности, изучается механизм переключения мод под воздействием шума.

Во второй главе исследуется двумерная плотноупакованная решетка активных частиц, связанных посредством потенциальных сил Морзе. Классифицируются локализованные метастабильные состояния и изучаются их свойства, в том числе устойчивость к шуму. Исследуется реакция активной решетки на внешнее локализованное воздействие при различных значениях параметров, а так же формирование и поведение таких локализованных возбуждений, как диссипативные краудины.

В третьей главе изучаются особенности динамики неупорядоченного ансамбля частиц, взаимодействие которых обеспечивается механизмом выравнивания скоростей. Определяются границы применимости методов гидродинамического описания к малым ансамблям. Изучаются индуцированные шумом переходы и соответствующие им стохастические бифуркации, заключающиеся в разрушении одного стационарного распределения скорости частиц и формировании нового распределения иной конфигурации. Исследуется явление бистабильности в малых ансамблях и влияние шума на существование области бистабильности в пространстве параметров.

Четвертая глава посвящена исследованию динамики мобильных дискретных бризеров в молекуле ДНК, в контексте возможности применения их для переноса заряженных частиц. В частности, обосновывается выбор начальных условий, обеспечивающих формирование дискретных мобильных бризеров.

В **заключении** сформулированы основные выводы и результаты диссертационной работы.

Материал диссертационной работы изложен на 147 страницах, содержит 58 иллюстраций и список цитируемой литературы из 116 наименований.

Научная новизна результатов диссертационной работы определяется следующим:

1. Впервые показано, что в цепочках активных частиц, связанных нелинейными потенциальными силами, состояние с неравномерным пространственным распределением диссипативных солитонов является метастабильным и соответствует длительному переходному процессу к стационарному состоянию-аттрактору с равномерным пространственным распределением солитонов. Установлено, что длительность метастабильной стадии экспоненциально растет с увеличением числа частиц в цепочке.
2. Установлено, что в цепочке активных частиц с нелокальной связью, осуществляемой посредством нелинейных потенциальных сил, существуют стационарные состояния нового типа, пространственные распределения которых содержат равномерно распределенные кластеры из нескольких солитонов.
3. Впервые показано, как в цепочке активных частиц, связанных нелинейными потенциальными силами, управлять преимущественным направлением переключения между модами посредством изменения интенсивности шумового воздействия.
4. Установлено, что в цепочках осцилляторов Рэлея (линейных осцилляторов с нелинейным трением) возможно возбуждение стационарных состояний, пространственное распределение которых включает локализованные структуры с характерным масштабом, отличающимся от пространственного масштаба возбуждения за пределами локализованной структуры.

5. Впервые определены основные типы метастабильных возбуждений в двумерной треугольной решетке активных частиц, связанных потенциальными силами. Впервые найдены условия, необходимые для возбуждения и распространения краудионов в двумерных решетках активных частиц. Показано, что время жизни и длина пробега краудионов в решетках активных частиц значительно выше, чем в консервативных решетках.
6. Впервые обнаружено, что в пространстве параметров малых ($N < 100$) ансамблей активных частиц, взаимодействующих через общее поле скоростей, существуют области бимодальности, в которых в стационарном распределении скорости частиц ансамбля существуют два различных значения скорости, реализующиеся с наибольшей вероятностью.
7. Впервые показано, как за счет выбора начальных возмущений координат и скоростей в группе нуклеотидных пар эффективно возбудить мобильный бризер с заданным направлением движения.

Достоверность научных выводов работы подтверждается воспроизводимостью результатов численных экспериментов, выполненных в рамках разных подходов, а так же сопоставлением полученных результатов с данными, известными из литературных источников, и данными аналитических решений.

На защиту выносятся следующие положения:

1. В одномерных цепочках активных частиц, связанных нелинейными потенциальными силами, пространственные моды, возникающие из стохастических начальных возмущений, имеют вид неравномерно распределенных по длине цепочки диссипативных солитонов и являются метастабильными состояниями с временем жизни, экспоненциально растущим с числом частиц в цепочке. Стационарные состояния (аттракторы) цепочек с периодическими граничными условиями, в которые трансформируются со временем метастабильные моды, имеют вид диссипативных кноидальных волн с рав-

номерным распределением диссипативных солитонов по длине цепочки. В аналогичной цепочке с нелокальной связью возможно также установление стационарных мод, в пространственном распределении которых присутствуют равномерно распределенные кластеры из нескольких солитонов.

2. Под воздействием шума в цепочке активных частиц возможно переключение мод, причем преимущественное направление переключений определяется интенсивностью шума.
3. В двумерных плотноупакованных решетках активных частиц реализуются локализованные метастабильные состояния в виде солитоноподобных волн различной конфигурации, трансформирующихся со временем в состояние с полной синхронизацией движения частиц (трансляционную моду). В пространстве параметров существуют области, в которых решетка активных частиц обладает способностью восстанавливать свою структуру после локализованного внешнего воздействия, а также области, в которых локализованное внешнее воздействие ведет к возникновению метастабильного локализованного возбуждения – диссипативного краудрона.
4. Для малых неупорядоченных ансамблей активных частиц, взаимодействующих через общее поле скоростей, в пространстве параметров существуют области бистабильности, границы которых связаны с исчезновением одного стационарного распределения скорости частиц и возникновением распределения другой конфигурации. Внутри областей бистабильности устанавливается одно из двух возможных стационарных состояний с разными вероятностными распределениями скорости. Воздействие аддитивного шума приводит к смене режима бистабильности на режим бимодальности, в котором реализуются с наибольшей вероятностью два значения скорости частиц.

5. Для возбуждения в молекуле ДНК устойчивых мобильных дискретных бризеров достаточно обеспечить начальное возмущение скоростей или координат нескольких нуклеотидных пар вблизи одного из закрепленных концов молекулы в равновесном состоянии.

Научная и практическая значимость диссертационной работы состоит в том, что полученные научные результаты расширяют современные представления теории колебаний и волн о динамике ансамблей активных неосциллирующих элементов.

Изложенные в настоящей работе результаты могут найти применение при решении задач, связанных с транспортом заряженных частиц в молекулярных решетках, а также задач, связанных с разработкой метаматериалов.

Полученные данные позволяют провести параллели между динамикой цепочек неосциллирующих частиц и динамикой цепочек осцилляторов.

Проведенные исследования влияния шумового воздействия на ансамбли активных неосциллирующих элементов вносят определенный вклад в статистическую радиофизику, а обнаруженные индуцированные шумом эффекты могут быть применены при разработке основанных на использовании источников шума методов управления неравновесными многомерными системами.

Разработанное программное обеспечение может быть применено для анализа колебательных и волновых процессов в молекулярных решетках.

Материалы диссертации частично используются в курсах лекций по теории колебаний и волн.

В диссертационную работу включены материалы исследований, проведенных автором в рамках выполнения работ по гранту РФФИ №15-02-02288, международному гранту Немецкого Физического Общества DFG SFB-911 и грантам РФФИ № 16-12-10175 и №16-11-10163.

Апробация работы. Основные результаты научных исследований были представлены на 12 международных конференциях:

1. Международная конференция “Nonlinear Dynamics of Deterministic and Stochastic systems: Unraveling Complexity”, 19–21 мая 2014, Саратов, Т.Е. Vadivasova, К.С. Sergeev “Noise induced transition in a small ensemble of active Brownian particles”
2. Международная конференция “Saratov Fall Meeting”, 23–26 сентября 2014, Саратов, К.С. Sergeev, А.Р. Chetverikov “Behaviour of ensemble of active Brownian particles under influence of active and passive noise”
3. Международная конференция “Dynamics, Bifurcations and Chaos”, 20–24 июля 2015, Нижний Новгород, К.С. Sergeev, Т.Е. Vadivasova “Dynamics of ensemble of active Brownian particles interacting via Morse potential forces”
4. Международная конференция “Saratov Fall Meeting”, 21–25 сентября 2015, Саратов, К.С. Sergeev, А.Р. Chetverikov “Dissipative solitons in ensemble of active Brownian particles interacting via Morse potential forces”
5. Международная конференция “International conference on Control of Complex systems and Networks”, 4–8 сентября 2016, Германия, Херингсдорф, К.С. Sergeev, А.Р. Chetverikov “Noise influence on steady states and metastable modes in a nonlinear chain of interacting non-oscillating elements”
6. Международная конференция “Saratov Fall Meeting”, 27–30 сентября 2016, Саратов, К.С. Sergeev, А.Р. Chetverikov “Metastable modes in Morse-Rayleigh chain”
7. Международная конференция «Математическая биология и биоинформатика», 16-21 октября 2016, Пущино, Лахно В.Д., Сергеев К.С., Четвериков А.П. «Транспорт заряда мобильными бризерами в молекуле ДНК, возмущенной начальными смещениями нуклеотидных пар»

8. Международная конференция “Saratov Fall Meeting”, 25–30 сентября 2017, Саратов, K.S. Sergeev, A.P. Chetverikov “Structure formation in chain of nonlocal coupled active elements”
9. Международная конференция “Saratov Fall Meeting”, 25–30 сентября 2017, Саратов, K.S. Sergeev, A.P. Chetverikov “Spatial structures formation in two-dimensional ensemble of active particles”
10. V Российская конференция «Метастабильные состояния и флуктуационные явления» 17-19 октября 2017, Екатеринбург, Четвериков А.П., Сергеев К.С. «Динамика метастабильных состояний в ансамбле взаимодействующих активных частиц, эволюционирующих под влиянием шума»
11. Научная школа «Нелинейные волны – 2018», 26 февраля – 4 марта 2018, Нижний Новгород, Сергеев К.С., Четвериков А.П. «Плоские солитоны в двумерной решетке активных частиц»
12. Международная конференция «Компьютерные науки и информационные технологии», 2–3 июля 2018, Саратов, Сергеев К.С., Четвериков А.П. «Локализованные нелинейные волны в двумерной решетке активных частиц»

Личный вклад автора заключается в выполнении всего объема численного моделирования, обработке и анализе полученных результатов. Все численные эксперименты проводились при помощи программного обеспечения, разработанного автором. Также автор принимал активное участие в постановке задач.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 12 печатных изданиях: 7 статьях в журналах, рекомендованных ВАК [82–88] и 5 работах в сборниках тезисов конференций [89–93].

Глава 1. ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ВОЛНЫ В ЦЕПОЧКЕ АКТИВНЫХ ЧАСТИЦ

1.1 Введение

К настоящему времени сформировалось множество научных направлений, посвященных различным аспектам исследования динамики нелинейных цепочек [94–98]. Одно из таких направлений – изучение динамики цепочек активных частиц (см. например [45, 53, 56, 58, 68, 99]).

Как было сказано выше, термин «активные частицы» подразумевает способность частиц тем или иным образом извлекать энергию из среды и трансформировать ее в кинетическую энергию движения. Не вдаваясь в подробности технической реализации, следует отметить, что при построении математической модели приток энергии разумно описывать в виде знакопеременного нелинейного трения.

Рассмотрение наиболее известных моделей отрицательного трения начнем с параболического коэффициента отрицательного трения, примененного в теории звука Рэлея и Гельмгольца [57]:

$$\gamma(\vec{r}, \vec{v}) = -\alpha + \beta \vec{v}^2 = \alpha \left(\frac{|\vec{v}^2|}{v_0^2} - 1 \right) = \beta (\vec{v}^2 - v_0^2). \quad (1.1)$$

Эта модель часто встречается в ранних работах по динамике броуновских частиц [58, 100]. При значении скорости $v_0^2 = \frac{\alpha}{\beta}$ трение равно нулю. При меньших скоростях $\vec{v}^2 < v_0^2$ трение становится отрицательным, то есть частица получает кинетическую энергию из среды. Движение с большими скоростями $\vec{v}^2 > v_0^2$ тормозится. В отсутствие внешних воздействий направление движения задается начальными условиями, но при наблюдении в течение длительного времени

можно зафиксировать любое направление скорости, что сказывается на форме стационарного распределения скорости, которое, например, для двумерных ансамблей имеет вид аксиально симметричного кратера.

Другая стандартная модель нелинейного трения была разработана Шинбайном и Грулером [58, 59]. Изначально она формулировалась как линеаризованная и упрощенная модель трения Рэлея-Гельмгольца

$$-\gamma(\vec{v})\vec{v} = -\gamma_0(s - v_0)\vec{e}_v, \quad (1.2)$$

где $s = |\vec{v}|$ – модуль скорости частицы, а $\vec{e}_v = \frac{\vec{v}}{s}$ – единичный вектор, указывающий направление скорости. Как и в модели Рэлея-Гельмгольца, трение Шинбайна-Грулера ускоряет медленные частицы и замедляет быстрые. Главный недостаток упрощенной модели – обращение трения в бесконечность при нулевой скорости частицы. С другой стороны, при больших скоростях функция (1.2) сводится к трению Стокса, что можно отнести к преимуществам модели.

Существуют и более экзотические модели отрицательного трения, например, модель с внутренним хранилищем энергии [60]. В рамках этой модели нелинейное трение задается как

$$\gamma(\vec{v}^2) = \gamma_0 - \frac{dq}{c + d\vec{v}^2} \approx -\alpha + \beta\vec{v}^2 + \dots, \quad (1.3)$$

где c, d, q – положительные константы, характеризующие изменение энергии во внутреннем хранилище и конвертацию этой внутренней энергии в кинетическую. Зависимость (1.3) имеет нуль при $\vec{v} = 0$ и еще два нуля, определяемых выражениями

$$v_0 = \frac{d}{c}\zeta; \quad \zeta = \frac{dq}{c\gamma_0} - 1. \quad (1.4)$$

При $\zeta > 0$ существует конечное и действительное значение скорости v_0 . При этом, когда $|\vec{v}| < v_0$, диссипация отрицательна, то есть частица получает энергию.

Таким образом, можно выделить общее свойство различных моделей нелинейного трения: под его влиянием медленные частицы ускоряются, а быст-

рые замедляются. Вследствие этого свойства динамика цепочек и решеток активных частиц значительно обогащается по сравнению с динамикой решеток консервативных частиц.

Так, стационарные моды (аттракторы) цепочки активных частиц, связанных нелинейными потенциальными силами, с периодическими граничными условиями выглядят как кноидальные волны с равномерным пространственным распределением максимумов скоростей и плотности частиц. В случае, когда ширина максимумов распределений плотности значительно меньше расстояния между ними, возбужденные моды можно рассматривать как упорядоченный ансамбль автосолитонов [101] или диссипативных (дискретных) солитонов [102]. Разные моды имеют разную среднюю скорость и разное количество максимумов плотности частиц на длине цепочки. В цепочке из N частиц общее количество мод составляет $N+1$, в том числе пара мод, соответствующих движению цепочки как целого в том или другом направлении. Возбуждение каждой из $N+1$ мод осуществляется соответствующим выбором начальных условий [18, 19, 22].

Так, например, общее число мод в ансамбле из десяти частиц равно 11, из которых выделяется так называемая оптическая (рисунок 1.1 б). В ней направление скорости пяти частиц противоположно направлению скорости остальных пяти частиц, поэтому будем обозначать ее как моду $(5,5)$. Колебания соседних частиц в ней противофазны, а средняя скорость равна нулю. Остальные моды трактуются как движение всего ансамбля «влево» или «вправо» с разной средней скоростью. Так, мода $(9,1)$ (рисунок 1.1 а) соответствует случаю, когда девять частиц движется в положительном направлении («вправо»), а одна - в отрицательном («влево»). Средняя скорость при этом $\langle v \rangle = 0.8v_0$, где v_0 - стационарное значение скорости изолированной частицы (см. ниже). Симметричная ей мода $(1,9)$ имеет среднюю скорость $\langle v \rangle = -0.8v_0$ (рисунок 1.1 в). В дальнейшем под обозначением (k,l) будем подразумевать пару мод (k,l) и (l,k) в силу их симметрии.

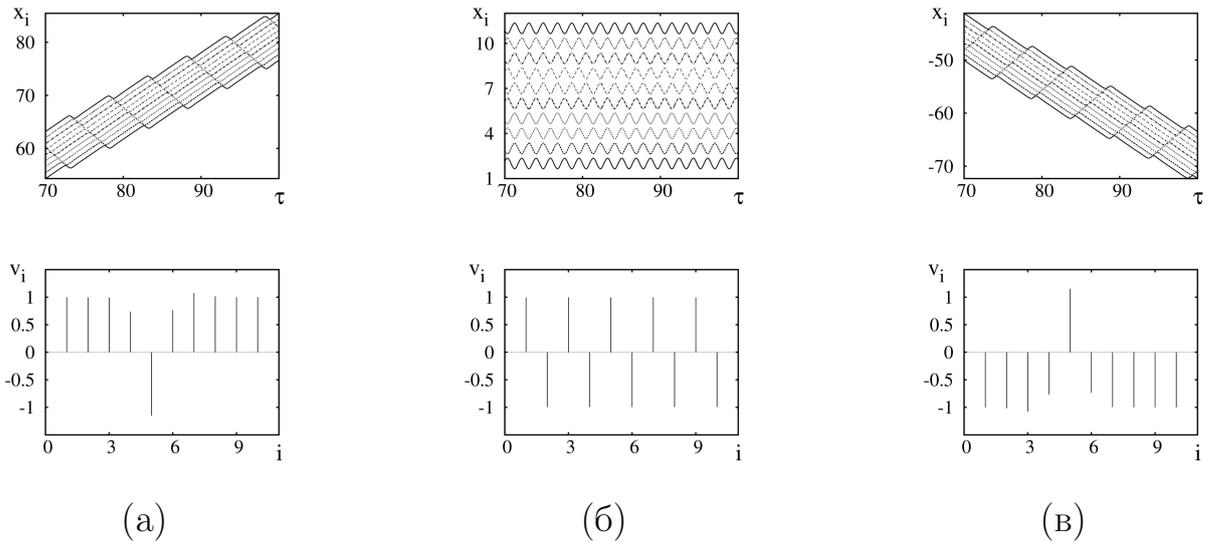


Рисунок 1.1. Верхний ряд: траектории частиц, иллюстрирующие моды $(9, 1)$ (а), $(5, 5)$ (б) и $(1, 9)$ (в). Нижний ряд: соответствующие распределения скорости частиц в момент времени $\tau = 100$.

Аналогичными свойствами обладает и цепочка Морзе-Рэлея [84], где силы взаимодействия между частицами задаются потенциалом Морзе (рисунок 1.2), который при небольших смещениях частиц подобен потенциалу Тоды [17, 21, 23–29]. Однако было обнаружено, что если задаются случайные начальные возмущения скоростей частиц или их отклонения от положения равновесия, то в результате короткого переходного процесса возникает мода с неравномерным распределением максимумов плотности частиц, похожим на распределение частиц в мультисолитонной моде консервативной цепочки [94]. Такое состояние является метастабильным и соответствует длительному переходному процессу, приводящему к установлению одной из стационарных мод. В силу длительности существования таких состояний они могут влиять на макроскопические характеристики системы и играть существенную роль в процессах транспорта энергии и заряженных частиц вдоль цепочки.

Кроме того, в цепочке с нелокальной связью, когда каждый элемент связан не только с ближайшими «соседями», но и с «соседними к соседним» эле-

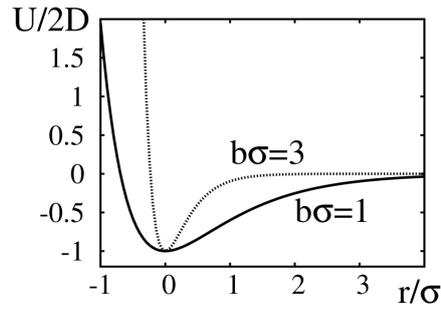


Рисунок 1.2. Профиль потенциала Морзе $U(r)$ при различных значениях параметра $b\sigma$.

ментами, существуют новые стационарные моды с неравномерным пространственным распределением максимумов плотности.

Цепочку Морзе-Рэля можно рассматривать не только как упорядоченный одномерный ансамбль частиц [45, 98], но и как асимптотическую цепочку для цепочки связанных осцилляторов Рэля [57], когда их частота стремится к нулю. При переходе к ненулевой частоте задача сводится к задаче о динамике ансамбля связанных осцилляторов Рэля. Особенностью такой цепочки является наличие двух характерных частот, одна из которых соответствует частоте осцилляторов Рэля, а другая – частоте колебаний за счет сил связи.

В настоящей Главе рассматриваются свойства метастабильных состояний при локальной и нелокальной связях между активными частицами, механизмы их возникновения, оцениваются времена жизни, а так же исследуется влияние шума на стационарные состояния и статистику индуцированных шумом переключений между модами. Также изучается динамика ансамбля осцилляторов Рэля и проводится сопоставление характеристик колебаний в цепочке активных частиц Рэля и в цепочке осцилляторов Рэля.

1.2 Модель и уравнения динамики цепочки

В качестве модели активных броуновских частиц рассмотрим одномерную цепочку точечных масс (частиц), связанных потенциальными силами с соседними частицами и обладающих нелинейным трением [84]. Пусть динамика изолированной частицы описывается уравнением движения

$$m\ddot{x} - \gamma_0\left(1 - \frac{\dot{x}^2}{v_0^2}\right)\dot{x} = 0, \quad (1.5)$$

в котором m – масса частицы, γ_0 – линейный коэффициент отрицательного трения, v_0 определяет значение стационарной скорости.

Слагаемое $\gamma(\dot{x}) = -\gamma_0\left(1 - \frac{\dot{x}^2}{v_0^2}\right)$ представляет собой нелинейный знакпеременный коэффициент трения в форме Рэля. Нетрудно видеть, что при положительных значениях γ_0 и малых значениях \dot{x} скорость частицы нарастает. С ростом величины \dot{x} начинает действовать нелинейное ограничение, в результате чего скорость достигает со временем одного из двух стационарных значений $\pm v_0$. Пусть в качестве сил связи выступают нелинейные силы потенциала Морзе

$$U(r) = D(e^{-2br} - 2e^{-br}). \quad (1.6)$$

Тогда ансамбль частиц образует равновесную цепочку, динамика элементов которой будет описываться уравнениями движения:

$$m\frac{dv_i}{dt} = -m\gamma_0\left(1 - \frac{\dot{x}_i^2}{v_0^2}\right) - 2Db(e^{-b((x_i-x_{i+1})-\sigma)} - e^{-2b((x_i-x_{i+1})-\sigma)}) + 2Db(e^{-b((x_{i-1}-x_i)-\sigma)} - e^{-2b((x_{i-1}-x_i)-\sigma)}), \quad (1.7)$$

где v_i – скорость i -той частицы, x_i – ее координата, m – масса частицы. После замены координат на относительные смещения частиц и перехода к безразмерным переменным уравнение (1.7) принимает вид:

$$\ddot{q}_i - \mu\left(1 - \frac{\dot{q}_i^2}{v^2}\right)\dot{q}_i = (1 - e^{q_i - q_{i+1}})e^{q_i - q_{i+1}} - (1 - e^{q_{i-1} - q_i})e^{q_{i-1} - q_i}. \quad (1.8)$$

Здесь D – глубина потенциальной ямы Морзе (потенциал имеет значение $-D$ при $r = 0$), b – коэффициент жесткости потенциальных сил, $q_i = b(x_i - i\sigma)$ – безразмерное смещение i -той частицы от ее равновесного положения в невозмущенной цепочке $x_{i0} = i\sigma$ (т.е. безразмерная координата), σ – равновесное расстояние между соседними частицами, точками обозначено дифференцирование по безразмерному времени $\tau = \omega_M t$, $\omega_M = \sqrt{\frac{2Db^2}{m}}$ – частота линейных колебаний частиц цепочки за счет связи вблизи положений равновесия, $v = v_0 b / \omega_M$ – стационарное значение скорости частиц, $\mu = \gamma_0 / m \omega_M$ – безразмерный коэффициент трения. Предполагается, что уравнения удовлетворяют периодическим граничным условиям: $q_{N+1} = q_1, v_{N+1} = v_1$, где $v_i = \frac{dq_i}{d\tau}$. В качестве начальных условий используется либо заданный набор начальных значений скоростей частиц $v_i(t = 0) = v_{i0}$ при, для простоты, $q_i(t = 0) = 0$, чтобы возбудить необходимую стационарную моду, либо значения $v_i(t = 0) = v_{s0} \xi_i$ задаются случайным образом (здесь v_{s0} – величина начальных возмущений скорости, а ξ_i – случайная величина с нормальным распределением), чтобы имитировать старт со случайных возмущений (например, в «нагретой» цепочке). Анализируется модель, для которой $v_0 = 1$. Уравнения решаются численно методом Рунге-Кутты четвертого порядка.

1.3 Механизм возникновения диссипативных солитонов

Как уже отмечалось выше, стационарными модами цепочки активных частиц являются кноидальные волны, которые также могут рассматриваться как суперпозиция диссипативных солитонов [18–20, 27].

Исследуем механизм возникновения диссипативных солитонов в равновесной цепочке, скорости частиц которой в начальный момент времени каким-либо образом возмущены. Пусть все элементы ансамбля движутся в одну сторону со скоростью $v_{i0} = 1$ (условно назовём это движением вправо), а одна частица с

индексом l обладает скоростью той же величины, но направленной противоположно, $v_{l0} = -1$.

Тогда частицы с индексами l и $l - 1$ будут сближаться, и в результате произойдёт обмен импульсами между l -той и $l - 1$ -й частицами. После этого l -тая частица будет двигаться со скоростью $v \approx v_0$, а $l - 1$ -я, соответственно, со скоростью $v \approx -v_0$. Таким образом, возмущение скорости будет передаваться от частицы к частице и распространяться влево. Такое локализованное возмущение будем классифицировать как диссипативный солитон [18, 84], условно локализованный на трех частицах – той, которая в данный момент движется в направлении, противоположном направлению движения соседних частиц, и двух соседних, скорость которых в некоторой степени возмущена.

В цепочке с большим количеством частиц могут формироваться несколько солитонов. Так, на рисунке 1.3 а представлены траектории частиц $x_i(\tau)$ и распределения скорости v_i в фиксированные моменты времени для случая, когда из случайных начальных возмущений зарождаются два солитона. Эти солитоны можно рассматривать как квазичастицы, которые ведут себя как заряженные частицы с одинаковым знаком, т.е. стремятся удалиться друг от друга с течением времени. Поэтому в цепочке с периодическими граничными условиями они со временем формируют стационарное состояние-аттрактор с равномерным распределением солитонов по длине цепочки (кноидальную волну). На рисунке 1.3 б показаны характеристики той же системы спустя 500 единиц безразмерного времени. Видно, что солитоны равномерно распределены по цепочке.

Механизм возникновения солитонов из случайных начальных возмущений требует более подробного изучения. Очевидно, что солитоны зарождаются на частицах, получивших большой начальный импульс. В таком случае при старте со случайных начальных возмущений следовало бы ожидать, что солитоны распределятся по цепочке в определенной степени равномерно. Однако, численные исследования показывают, что солитоны зарождаются группами.

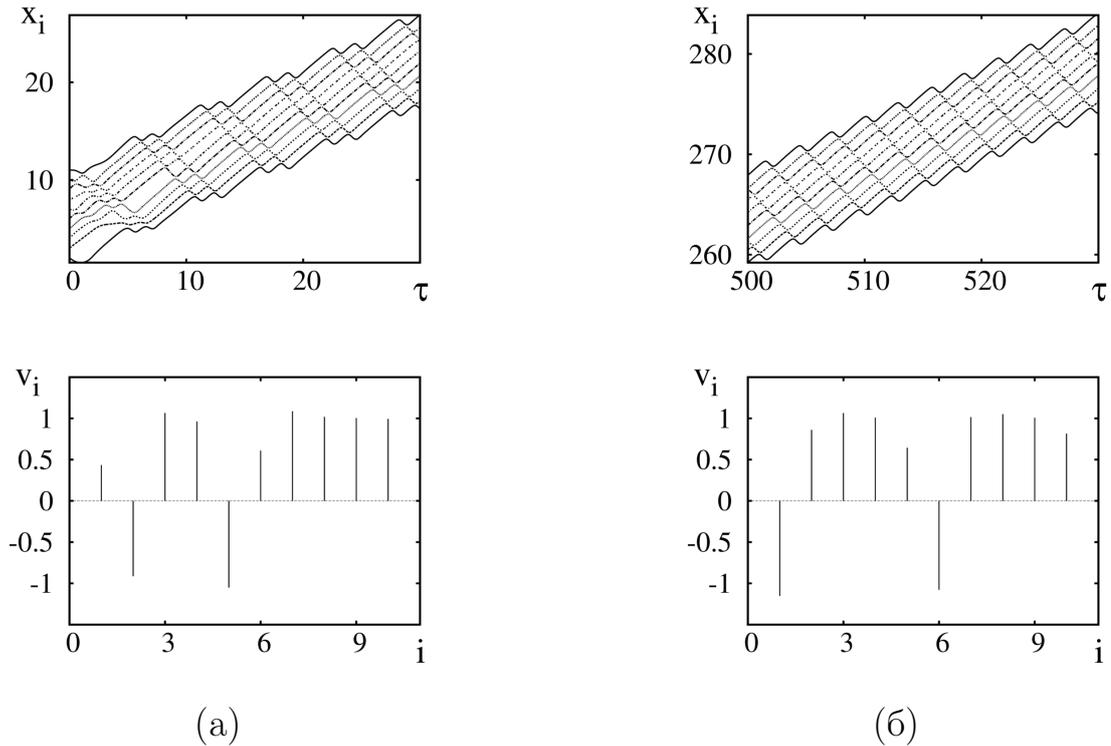


Рисунок 1.3. Верхний ряд: траектории частиц, иллюстрирующие два солитона. На фрагменте (а) показано формирование двух солитонов в начальный период времени (солитоны расположены близко). На фрагменте (б) представлен фрагмент траекторий в состоянии, когда солитоны равномерно распределены по цепочке и образуют кноидальную волну. Нижний ряд: соответствующие распределения скорости частиц в цепочке в момент времени $\tau = 30$ (а) и $\tau = 530$ (б).

Чтобы понять, почему так происходит, разумно смоделировать простейшие начальные условия для зарождения солитона. Пусть смещения q_i и начальные скорости v_i всех частиц, за исключением одной (с индексом 16), равны нулю. Скорость этой частицы зададим отличной от нуля: $v_l = v_0$, выбор направления скорости не принципиален в виду симметрии цепочки (рисунок 1.4 а, $v_{16} = -1$). Рассмотрим поведение ансамбля при сильной связи ($b\sigma = 5$) и относительно слабом трении ($\mu = 1$).

Как видно из (1.5), состояние частицы с нулевой скоростью, $v_i = 0$, является неустойчивым: малое возмущение выводит частицу из этого состояния.

Под влиянием нелинейного трения скорость частицы стремится достичь значения $v_i = \pm v_0$. За счет потенциального взаимодействия возмущение скорости передается соседним частицам и они так же выходят из состояния равновесия. На рисунке 1.4 б показано распределение скорости частиц при $\tau = 0.1$. Видно, что скорости двух частиц, ближайших к первоначально возмущенной частице, теперь также отличаются от нуля; при этом скорость 15-й частицы больше, чем 17-й, поскольку упругость нелинейного потенциала Морзе «на сжатие» сильнее, чем «на растяжение».

Далее 16-я частица «отталкивается» от 15-й и меняет направление скорости на противоположное (рисунок 1.4 в). При этом возмущение продолжает распространяться по цепочке. За счет упругих соударений частицы отталкиваются друг от друга, и направления их скоростей чередуются (рисунок 1.4 г).

Частицы с чередующимися направлениями скорости формируют кластер, по структуре похожий на фрагмент оптической моды [84] (рисунок 1.4 г,д). По истечении некоторого времени переходные процессы заканчиваются, фрагменты оптической моды распадаются на отдельные солитоны и устанавливается распределение, показанное на рисунке 1.4 е.

В зависимости от жесткости потенциала $b\sigma$ и коэффициента трения μ из описанных выше начальных условий возбуждается различное количество солитонов. Идентифицировать количество солитонов можно по средней скорости ансамбля, руководствуясь приближенной формулой

$$\langle v \rangle \approx \pm \frac{N - 2k}{N}, \quad (1.9)$$

где N - количество частиц в ансамбле, k - количество солитонов.

На рисунке 1.5 а, б приведены зависимости средней скорости $\langle v \rangle$ от управляющих параметров. Видно (рисунок 1.5 а), что при малой «жесткости» потенциала $b\sigma$ средняя скорость близка к единице. Это следует трактовать, как малое количество солитонов ($|\langle v \rangle| \approx 1$), либо как их отсутствие ($|\langle v \rangle| = 1$).

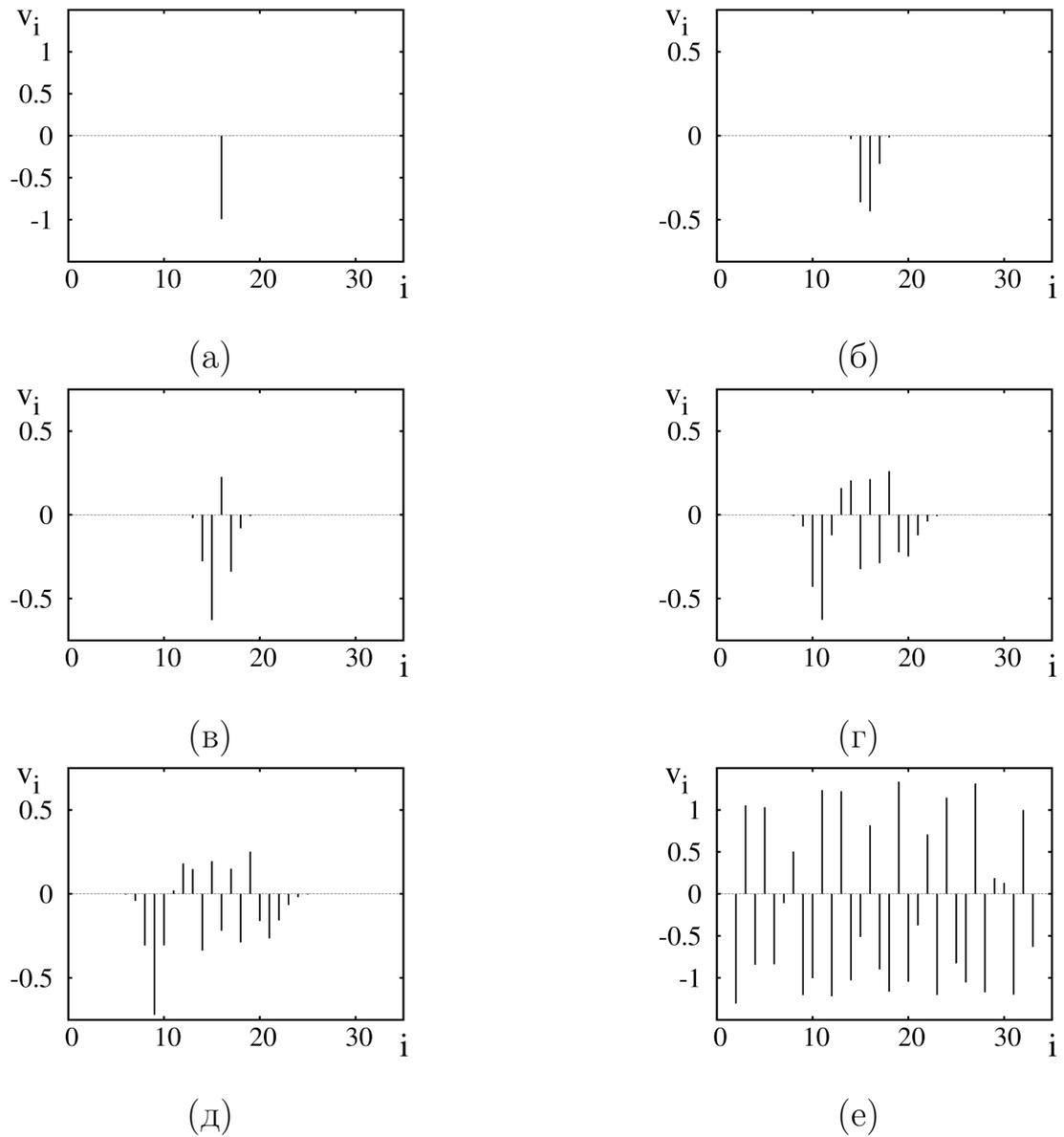


Рисунок 1.4. Распределения скорости частиц в цепочке в моменты времени $\tau = 0$ (а), 0.1 (б), 0.2 (в), 0.7 (г), 0.9 (д), 10 (е). $N = 32, b\sigma = 5, \mu = 1$.

При слабом взаимодействии частицы отталкиваются недостаточно сильно для того, чтобы изменить направление скорости на противоположное. Изначально возмущенная частица инициирует трансляционное движение цепочки, не возбуждая при этом солитонов. В результате большая часть частиц движется в одном направлении.

При увеличении жесткости потенциала все больше частиц при взаимодействии меняют направление скорости на противоположное. При этом возбуждаются солитоны, что уменьшает среднюю скорость ансамбля.

Зависимость средней скорости от параметра μ (рисунок 1.5 б) имеет иной характер. С ростом μ средняя скорость увеличивается, поскольку влияние потенциального взаимодействия становится слабым по сравнению с влиянием трения. Поэтому большинство частиц не изменяют свою скорость при взаимодействии с соседними частицами, а моды с большим количеством солитонов уступают место трансляционной моде (движению всей цепочки «как целого» в одном направлении).

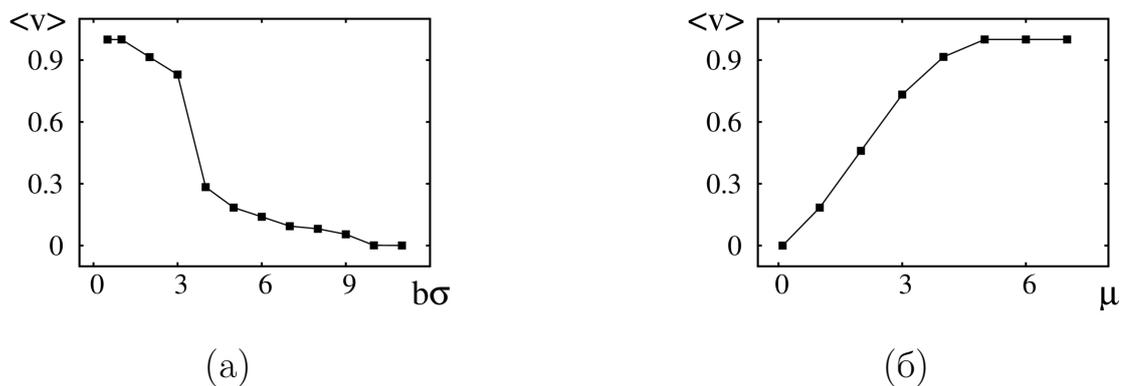


Рисунок 1.5. (а) Зависимость модуля средней скорости от параметра $b\sigma$ при $\mu = 1, N = 32$; (б) Зависимость модуля средней скорости от параметра μ при $b\sigma = 5, N = 32$.

1.4 Формирование солитонных кластеров

Важной проблемой исследования динамики цепочки активных частиц является определение статистики возбуждения кластеров различной длины в реальных условиях, например, при ненулевой температуре. Такие условия можно в определенной степени имитировать, задавая частицам случайные начальные возмущения. Под случайными начальными возмущениями подразумевается состояние, при котором, для простоты, частицы находятся в положении равновесия $q_i(t = 0) = 0$, а их скорости являются случайными величинами с нормаль-

ным распределением $v_{i0} = v_{s0}\xi_i(t)$. Здесь параметр v_{s0} характеризует величину начального возмущения.

При некоторых реализациях случайных начальных возмущений в цепочке формируются отдельные солитоны и кластеры нескольких близко расположенных солитонов. Принципиальным является вопрос о связи значений параметров и количества солитонов, вовлеченных в кластер.

Для изучения статистики формирования кластеров рассматривались 1024 различные реализации начальных возмущений, по которым строилось распределение вероятностей формирования кластеров P_K , где K - количество солитонов, образующих кластер (рисунок 1.6). Величина $3K$ может быть названа длиной солитонного кластера, поскольку каждый солитон локализован на трех частицах.

В рамках численного эксперимента размер кластера определяется из геометрических соображений: будем считать, что солитоны образуют кластер, если расстояние между их ядрами составляет две частицы. Таким образом, двухсолитонный кластер локализован на шести частицах, трехсолитонный – на девяти, и так далее. Этот факт накладывает некоторые ограничения на размеры ансамбля, поскольку в малых ансамблях существование крупных кластеров невозможно.

Как показали численные эксперименты, если количество частиц в ансамбле менее 30, форма распределения вероятностей кластеров зависит от размера ансамблей. Если же в ансамбль входит более 30 частиц, изменение количества частиц в ансамбле не влияет на статистику распределения кластеров. Функции распределения для ансамблей из 50 и 80 частиц совпадают количественно. Поэтому для дальнейших исследований был выбран ансамбль из 80 частиц (соответствующее распределение вероятности возбуждения кластеров различной длины приведено на рисунок 1.6 б), чтобы исключить влияние размеров ансамбля на статистику.

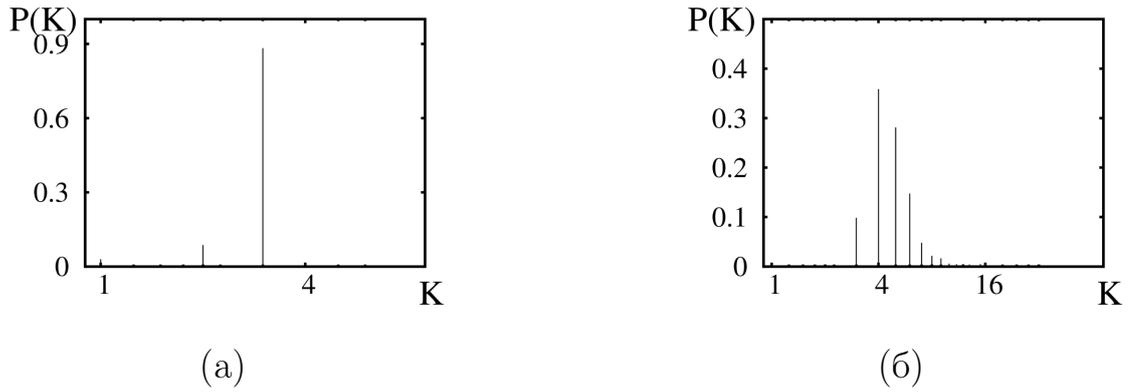


Рисунок 1.6. Функция распределения вероятности возбуждения кластеров различной длины K в цепочке с $N = 10$ (а) и $N = 80$ (б). Значения параметров: $b\sigma = 5, \mu = 1, v_{s0} = 10$.

В дополнение к функции распределения вероятностей формирования кластеров, важно определить влияние параметров на наиболее вероятный размер кластера. Зависимости наиболее вероятного размера кластера от различных параметров приведены на рисунке 1.7.

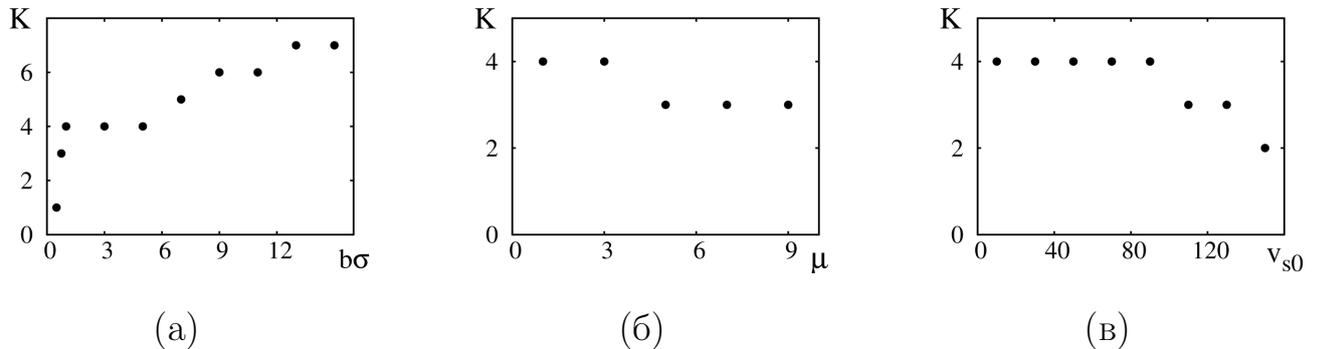


Рисунок 1.7. Зависимость наиболее вероятного размера кластеров K от управляющих параметров: (а) от параметра $b\sigma$ при $\mu = 1; v_{s0} = 10$; (б) от параметра μ при $b\sigma = 5; v_{s0} = 10$; (в) от уровня v_{s0} при $b\sigma = 5; \mu = 1$.

Как следует из полученных результатов, в большинстве случаев наиболее вероятно возникновение кластера из 4-5 солитонов.

Увеличение «жесткости» потенциала $b\sigma$ приводит к увеличению характерного размера кластера (рисунок 1.7 а). Предположим, что одна из частиц получает начальный импульс, много больший, чем импульс остальных частиц

цепочки. Поскольку она связана с соседними частицами, их скорости также возмущаются. Очевидно, что чем больше жесткость потенциала, тем быстрее и на большее расстояние распространится возмущение. Таким образом, одна возмущенная частица формирует солитон и возбуждает в своей окрестности другие солитоны, причем их количество будет тем больше, чем сильнее взаимодействуют частицы.

Величина отрицательного трения μ также оказывает влияние на характерный размер кластера (рисунок 1.7 б). Сильное трение демпфирует частицы и препятствует изменению их скорости, следовательно, для формирования солитона требуется больший начальный импульс. Поэтому с ростом параметра μ наиболее вероятный размер кластера уменьшается.

Величина начальных возмущений скорости v_{s0} также оказывает влияние на характерный размер кластера (рисунок 1.7 в). Результаты моделирования показали, что с ростом величины начальных возмущений происходит уменьшение характерного размера кластеров. Начальные возмущения большой интенсивности препятствуют возбуждению солитонов в окрестности частицы, имеющей большой начальный импульс, подобно шумовому воздействию. Следовательно, чем выше v_{s0} , тем меньше наиболее вероятный размер кластеров.

Однако наиболее вероятным событием при старте со случайных начальных возмущений является формирование фрагментов оптической моды [84]. Для анализа их эволюции рассмотрим ансамбль из 100 частиц с параметрами $b\sigma = 5$, $\mu = 1$ и выберем такие начальные условия, чтобы частицы с номерами с 82 по 98 образовали фрагмент оптической моды.

На рисунке 1.8 а представлена пространственно-временная диаграмма, иллюстрирующая эволюцию фрагмента оптической моды. В начальный момент времени $\tau = 0$ в этом фрагменте скорости частиц по модулю близки к 1, а по направлению чередуются. Видно, что практически сразу фрагмент оптической моды начинает распадаться (рисунок 1.9; показаны распределения скорости частиц по ансамблю в различные моменты времени).

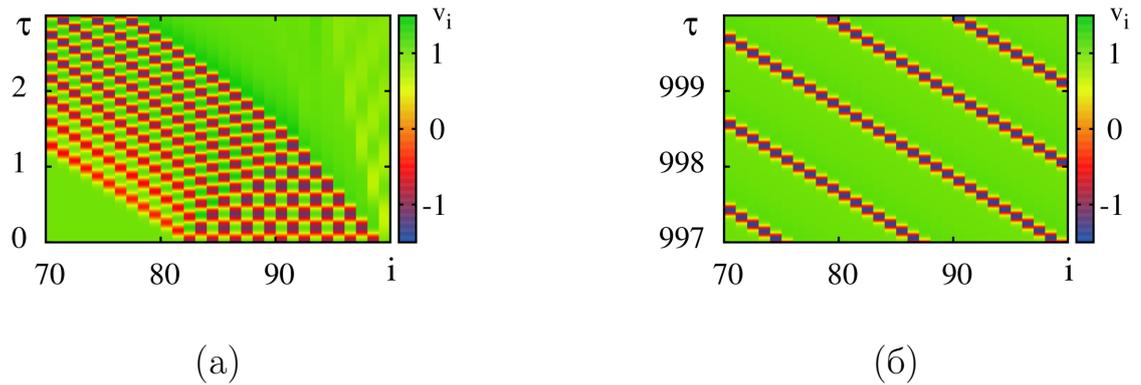


Рисунок 1.8. Диаграмма, иллюстрирующая эволюцию во времени скоростей частиц, образующих фрагмент оптической моды. По горизонтальной оси отложен номер частицы, а цветом показано значение скорости. (а) фрагмент цепочки на этапе разрушения оптической моды; (б) тот же фрагмент по прошествии примерно 150 безразмерных единиц времени.

По прошествии интервала времени порядка 0.1 от фрагмента отделяется солитон, находящийся в его «головной» части (рисунок 1.9 б). Частица с отрицательной скоростью, отделенная от фрагмента оптической моды двумя частицами с положительной скоростью, является ядром отделившегося диссипативного солитона (который условно считается локализованным на этой частице и двух соседних).

После этого от оставшейся части фрагмента опять отделяется солитон, и этот процесс повторяется, пока фрагмент не превратится полностью в солитонный кластер, то есть в долгоживущий ансамбль близко расположенных диссипативных солитонов. Под термином «солитонный кластер» подразумевается состояние, в котором солитоны расположены рядом друг с другом, т.е. когда центры солитонов разделены двумя частицами, имеющими другое направление скорости. Время жизни кластера значительно больше времени жизни фрагмента оптической моды (рисунок 1.10 а, б) и зависит от параметров системы.

На рисунке 1.10 а приведена зависимость характерного времени отделения первого и девятого солитона от оптической моды, локализованной на 18

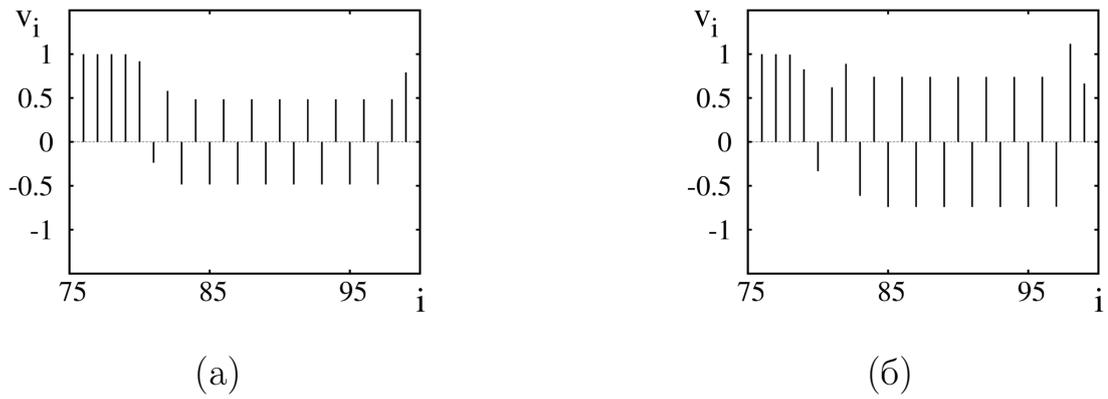


Рисунок 1.9. Распределение скоростей частиц в фрагментах цепочки в моменты времени $\tau = 0.13$ (а) и $\tau = 0.26$ (б). $N = 100, b\sigma = 5, \mu = 1$.

частицах, от параметра $b\sigma$. Видно, что при малых значениях $b\sigma$ время, необходимое для отделения девятого солитона от фрагмента оптической моды, не превышает 10 безразмерных единиц и уменьшается до 1 и менее с увеличением $b\sigma$. Следовательно, фрагмент оптической моды в длинной цепочке является неустойчивым состоянием с коротким временем жизни, и можно полагать, что вклад таких состояний в макроскопические характеристики цепочки пренебрежимо мал.

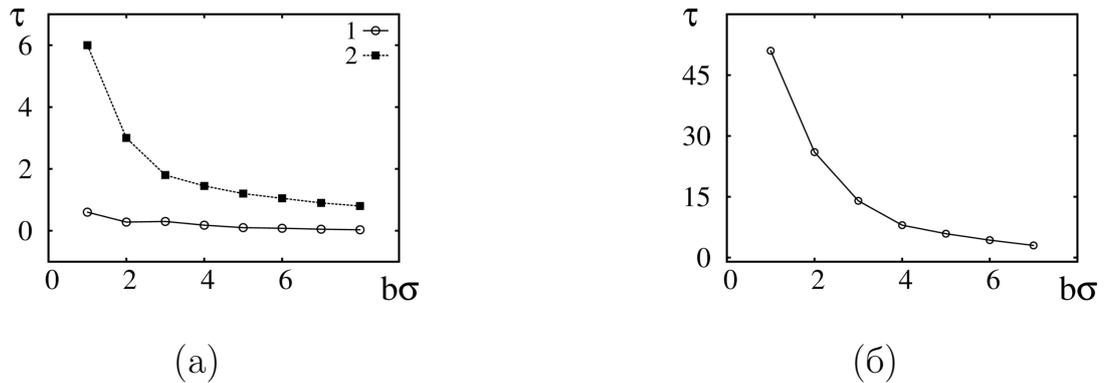


Рисунок 1.10. (а) Характерное время для отделения первого (кривая 1) и девятого (кривая 2) солитонов от фрагмента оптической моды в зависимости от параметра жесткости потенциала $b\sigma$. (б) Зависимость времени, за которое солитон отделяется от кластера, от параметра $b\sigma$. $N = 100, \mu = 1$

Солитонный кластер, образовавшийся после распада фрагмента оптической моды, также неустойчив, а процесс его распада на отдельные солитоны

аналогичен процессу распада фрагмента оптической моды, но занимает значительно больше времени.

1.5 Динамика солитонов в цепочке с периодическими граничными условиями

В работах [18, 19, 22] было показано, что в рассматриваемой цепочке с периодическими граничными условиями устойчивым является состояние с равномерным распределением солитонов, тогда как состояние, в котором диссипативные солитоны распределены неравномерно, является нестабильным. Процесс перехода к стационарному равномерному распределению солитонов занимает существенное время, зависящее от управляющих параметров. Выше было показано, что при старте со стохастических начальных возмущений сначала формируются солитонные кластеры или фрагменты оптической моды, которые затем медленно трансформируются в стационарные моды-аттракторы с равномерным распределением солитонов в цепочке. Поэтому солитонные кластеры можно рассматривать как метастабильные состояния с большим временем жизни, которые могут влиять на интегральные характеристики системы, особенно находящейся под внешним шумовым воздействием. Этим обусловлен интерес к изучению эволюции солитонных кластеров.

Как видно из рисунка 1.11 а, начальное состояние в форме солитонного кластера в течение некоторого времени сохраняется почти неизменным. Однако по прошествии времени в результате малых деформаций от кластера отделяется солитон (солитон условно считается отделившимся, когда его центр отделен от центра крайнего солитона в кластере как минимум тремя частицами), а размер кластера, соответственно, уменьшается на три частицы. Далее отделяется

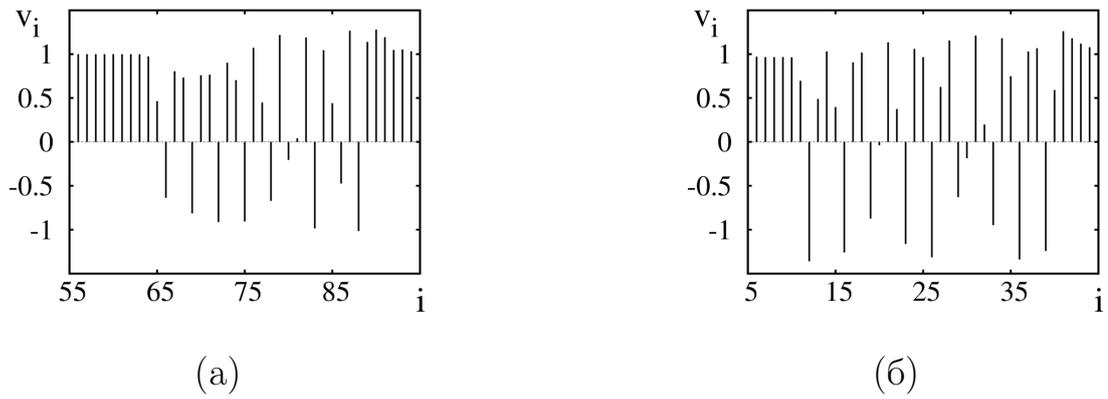


Рисунок 1.11. Кластер из 9 солитонов при $\tau \approx 2$ (а) и отделившийся солитон и кластер из 8 солитонов при $\tau \approx 8$ (б). $N = 100, b\sigma = 5, \mu = 1$.

следующий солитон, и так далее, пока кластер не распадется на отдельные солитоны.

Расстояние «в три частицы» между центрами отделившегося и ближайшего к нему солитонов сохраняется в течение длительного времени. При этом от кластера продолжают отделяться солитоны. Время до отделения первого (головного) солитона от кластера в цепочке с $b\sigma = 5, \mu = 1$ составляет $\tau \approx 8$, тогда как для фрагмента оптического моды аналогичное значение характеристического времени составляло $\tau \approx 0.5$.

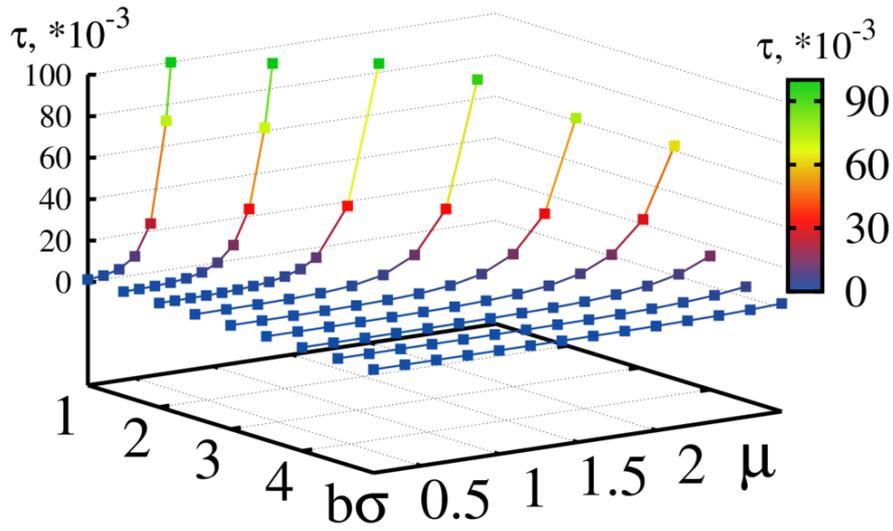
На рисунке 1.10 б приведена зависимость времени, за которое солитон отделяется от кластера, от параметра $b\sigma$. Видно, что с ростом $b\sigma$ значение характеристического времени падает.

Для исследования влияния параметров цепочки на длительности переходных процессов был проведен ряд численных экспериментов. Из множества случайных начальных возмущений были выбраны такие начальные условия, чтобы возбуждалась пара солитонов с расстоянием между центрами «в одну частицу» (такое состояние является метастабильным). Время, за которое переход к стационарному состоянию считался завершённым, то есть когда расстояние между центрами солитонов увеличивалось до половины длины ансамбля (что соответствует равномерному пространственному распределению солитонов), фиксировалось и принималось за длительность переходного процесса.

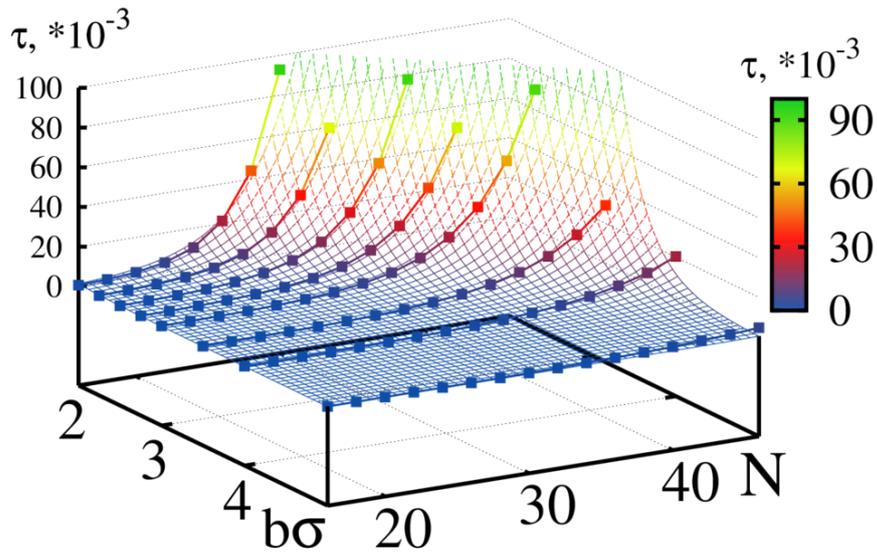
Семейство зависимостей длительности переходного процесса от параметров $b\sigma$ и μ и от числа частиц в цепочке приведено на рисунке 1.12. Видно, что зависимости от параметра μ имеют экспоненциальный характер и довольно точно аппроксимируется функцией вида $y = \alpha + \beta e^{\eta x}$, т.е. чем больше величина трения, тем дольше переходный процесс.

Кроме того, зависимость длительности переходных процессов от числа частиц в ансамбле так же носит экспоненциальный характер и так же может быть аппроксимирована функцией вида $y = \alpha + \beta e^{\eta x}$.

Время установления зависит и от параметра $b\sigma$. При большей жесткости связи $b\sigma$ равномерное распределение солитонов в цепочке устанавливается быстрее. Так, если при $\mu = 1$ и $b\sigma = 1$ длительность переходного процесса приблизительно 200, то при $\mu = 1$ и $b\sigma = 4$ стационарное распределение устанавливается в 6 раз быстрее.



(a)



(б)

Рисунок 1.12. (а) Семейство зависимостей длительности переходного процесса от параметра μ и $b\sigma$ в цепочке из $N = 20$ частиц; (б) семейство зависимостей длительности переходного процесса от числа частиц N при различных значениях $b\sigma$ при $\mu = 1$ (линии с точками) и соответствующая аппроксимация функцией $\tau(b\sigma, 1, N) = 1000 \exp(-3.2b\sigma + 0.285N + 2.1)$.

1.6 Расчет структурного динамического фактора для идентификации мод цепочки

Выше в роли количественной характеристики для определения типа моды цепочки выступала средняя по ансамблю скорость, которая меняется в соответствии с (1.9). Однако, эта формула позволяет только определить общее число солитонов в цепочке, но не несет информации об их скорости и пространственном распределении. Кроме того, точность определения моды невелика при большом количестве частиц; основное преимущество такого подхода – максимальная простота.

Для более точного количественного анализа поведения различных локализованных структур с периодической во времени динамикой удобно использовать такую характеристику, как структурный динамический фактор (СДФ) [103]. СДФ содержит информацию об эволюции во времени пространственной корреляции частиц.

В простейшем случае структурный динамический фактор $S(\omega, k)$ определяется как

$$S(\omega, k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{j\omega\tau} \langle \rho_{1d}(k, \tau) \rho_{1d}(-k, 0) \rangle d\tau, \quad (1.10)$$

где угловые скобки указывают на усреднение по множеству реализаций, ω и k - частота и волновое число, соответствующее направлению распространения волны, а $\rho_{1d}(x, \tau)$ и $\rho_{1d}(k, \tau)$ - функция плотности и ее пространственное преобразование Фурье, соответственно.

Поскольку нормированная плотность точечной частицы представляет собой дельта-функцию $\delta(x_i(\tau))$, где $x_i(\tau)$ – безразмерная координата частицы в рассматриваемом ряду, то можно ввести функцию плотности одномерной цепочки в виде

$$\rho_{1d}(x, \tau) = \sum_i \delta(x - x_i(\tau)). \quad (1.11)$$

Тогда преобразование Фурье от функции плотности будет записываться как

$$\rho_{1d}(k, \tau) = \sum_i e^{-jkx_i(\tau)}, \quad (1.12)$$

где k – волновое число.

Как видно из (1.10), СДФ представляет собой преобразование Фурье от функции плотности и по времени, и по координате (в отличие от статического структурного фактора, который идентифицирует только пространственные структуры без учета их динамики во времени). Таким образом, динамический структурный фактор позволяет определить характерные временные масштабы динамики пространственных структур.

В рамках численного эксперимента для вычисления СДФ используется длинная (порядка тысяч единиц безразмерного времени) временная реализация функции плотности цепочки. При необходимости рассматривается несколько таких реализаций, а результаты расчета СДФ впоследствии усредняются. В результате получают зависимости, представленные на рисунке 1.13.

Рассмотрим наиболее простой случай: пусть в цепочке из $N = 24$ частиц (с периодическими граничными условиями) распространяется один диссипативный солитон. При его распространении некоторым образом меняется функция плотности (1.11). При этом за счет граничных условий солитон большое количество раз «пробегаёт» по цепочке, в результате чего изменения функции плотности носят периодический характер, причем период определяется скоростью солитона и длиной (числом частиц) цепочки. Односолитонной моде соответствует волновое число $k_1 = \frac{2\pi}{N\sigma} = \pi/12\sigma$. В таком случае, зависимость $S(\omega, k_1)$ имеет ярко выраженный пик, соответствующий частоте обращения солитона по цепочке $0.36\omega_M$, что и продемонстрировано на рисунке 1.13 а.

В случае, когда в той же цепочке устанавливается двухсолитонная мода с волновым числом $k_2 = \pi/6\sigma$, в силу полной идентичности солитонов частота изменения функции плотности удваивается. Как видно из рисунка 1.13 б, для двух солитонов пик зависимости $S(\omega, k_2)$ приходится на частоту $0.68\omega_M$.

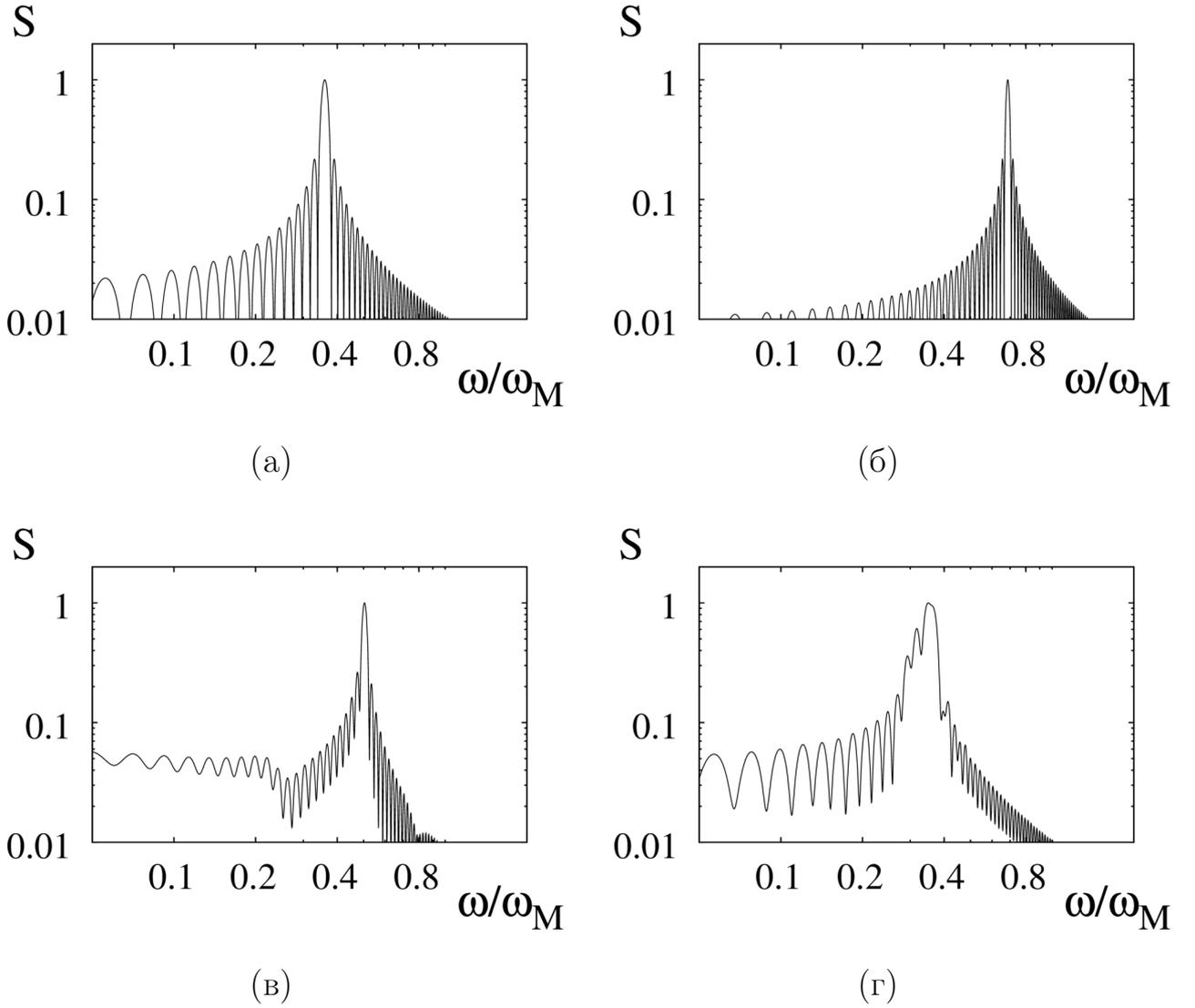


Рисунок 1.13. Структурный динамический фактор для цепочки из $N = 24$ частиц. (а) один солитон, волновое число $k\sigma = \pi/12$; (б) два солитона, волновое число $k\sigma = \pi/6$; (в) два солитона, изначально расположенные рядом (СДФ рассчитан для метастабильного состояния), волновое число $k\sigma = \pi/6$; (г) один солитон в присутствии шума, волновое число $k\sigma = \pi/12$.

$$b\sigma = 5, \mu = 1.41, v_0 = 0.14\omega_c\sigma.$$

Рассмотрим теперь более сложную ситуацию, когда в цепочке два солитона, изначально расположенных рядом. В таком случае солитоны начинают удаляться друг от друга, стремясь к равномерному распределению по цепочке. Соответственно, расстояние между солитонами и период их прохождения по цепочке будут меняться во времени, причем скорость «удаления» солитонов друг

от друга непостоянна во времени и уменьшается с ростом расстояния между ними. Это приводит к увеличению ширины пика зависимости $S(\omega, k_2)$ и смещению пика в сторону низких частот (рисунок 1.13 в). На бесконечно большом времени наблюдения в цепочке установится мода с равномерным распределением солитонов; при этом максимум СДФ приблизится к частоте $0.68\omega_M$. Но если для расчета используется интервал конечной длительности, результаты расчета будут зависеть от длительности интервала (при меньшей длительности ширина пика будет меньше, т.к. расстояние между солитонами и, соответственно, период их прохождения по цепочке изменятся в меньшей степени) и от дистанции между солитонами (чем ближе к равномерному распределению, тем меньше пик сдвигается в области низких частот и меньше уширение пика). Таким образом, ширина пика зависимости СДФ от частоты позволяет определить, является режим стационарным или метастабильным.

Наконец, динамический структурный фактор позволяет надежно идентифицировать моду в присутствии шума, когда визуальное определение типа моды по пространственно-временным диаграммам затруднено, а соотношение (1.9) не обязано строго выполняться. При шумовом воздействии пик структурного динамического фактора становится шире, однако почти не сдвигается по частоте, что показано на рисунке 1.13 г.

1.7 Диссипативные солитоны при нелокальной связи

Будем полагать, что каждая i -я частица связана не только «локально» с двумя ближайшими соседями, как в обычной цепочке, но и с двумя частицами с номерами $i + 2$ и $i - 2$ («соседними к соседним»). Такой простейший тип нелокальной связи является разумным приближением для цепочки Морзе, поскольку соответствующие потенциальные силы быстро падают с расстоянием при типичных значениях параметра жесткости $b\sigma$ (рисунок 1.2).

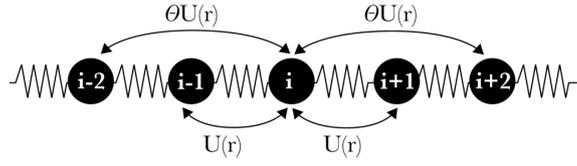


Рисунок 1.14. Топология нелокальной связи в цепочке

Таким образом, динамика цепочки описывается безразмерными уравнениями движения:

$$\begin{aligned}
 \ddot{q}_i - \mu\left(1 - \frac{\dot{q}_i^2}{v^2}\right)\dot{q}_i &= \\
 &= (1 - e^{q_i - q_{i+1}})e^{q_i - q_{i+1}} - (1 - e^{q_{i-1} - q_i})e^{q_{i-1} - q_i} + \\
 &+ \Theta(1 - e^{q_i - q_{i+2}})e^{q_i - q_{i+2}} - \Theta(1 - e^{q_{i-2} - q_i})e^{q_{i-2} - q_i}.
 \end{aligned} \tag{1.13}$$

Здесь использованы те же обозначения, как и в 1.8, а параметр Θ определяет жесткость нелокальной связи.

Длина цепочки $L = N \frac{z_{av}}{\sigma}$, где N - число частиц в ансамбле, z_{av} - среднее расстояние между частицами. Величина $n = \frac{\sigma}{z_{av}}$ определяет степень сжатия/разряжения ансамбля и характеризует плотность ансамбля.

В обычной цепочке при плотности $n = 1$ и равномерном распределении частиц все частицы находятся в минимумах потенциала Морзе. Такое состояние является устойчивым, а ансамбль с плотностью $n \leq 1$ называют плотным. Учет нелокальной связи делает ансамбль с плотностью $n = 1$ неустойчивым: силы притяжения между частицами возрастают, минимумы результирующего потенциала слегка смещаются и ансамбль становится неплотным. Как известно, в неплотных ансамблях при некоторых условиях могут возникать разрывы, и их динамика значительно отличается от динамики плотных ансамблей. Определить значение плотности, при котором все частицы будут находиться в минимумах потенциала сил взаимодействия (при равномерном распределении), можно из условия минимума потенциальной энергии, сформулированного в виде уравнения:

$$e^{-b((1-1/n)\sigma)} - e^{-2b((1-1/n)\sigma)} + 2e^{-b((2-1/n)\sigma)} - 2e^{-2b((2-1/n)\sigma)} = 0. \tag{1.14}$$

При $b\sigma = 2$ и $\sigma = 1$ уравнение (1.14) имеет решение $n \approx 1.13501$. Далее будут рассматриваться ансамбли с плотностью, вычисляемой на основе решения уравнения (1.14).

1.7.1 Стационарные и метастабильные состояния

В цепочке с нелокальной связью расположенные рядом солитоны ведут себя иначе по сравнению с солитонами в локально связанной цепочке. Если частицы связаны нелокально, то солитоны, ядра которых разделены двумя и более частицами, отталкиваются, тогда как солитоны, находящиеся на расстоянии в одну частицу друг от друга, не отталкиваются.

Вследствие такой особенности поведения меняется и вид стационарных состояний. Стационарными являются не только состояния с равномерным распределением максимумов скорости на цепочке, но и состояния с равномерным распределением кластеров из нескольких максимумов.

Так, на рисунке 1.15 показаны стационарные распределения скоростей частиц при локальной (а) и нелокальной (б) связи. В обоих случаях количество солитонов одинаковое, однако различается их пространственное распределение. Следует отметить, что при нелокальной связи между частицами распределение, представленное на рисунке 1.15 (а), легко достижимо при соответствующем задании начальных условий. Однако, если при локальной связи задать начальные условия в форме, изображенной на 1.15 (б), пространственное распределение солитонов трансформируется в равномерное, как на рисунке 1.15 (а).

В общем случае при нелокальной связи кластеры в пространственном распределении стационарной моды могут быть различного размера. Их размер определяется начальными условиями (начальным распределением скоростей частиц). Такое поведение принципиально отличается от динамики цепочки с

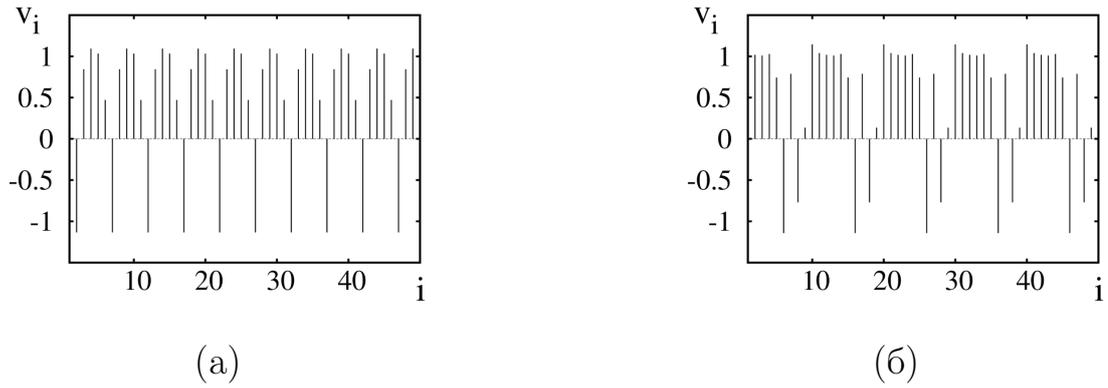


Рисунок 1.15. Распределение скоростей частиц в момент времени $\tau = 99990$ в стационарной моде в цепочке с локальной (а) и нелокальной (б) связью.

Значение параметров: $b\sigma = 2, \mu = 1, N = 50$.

локальной связью, в которой реализация той или иной стационарной моды зависит только от количества солитонов, но не от начального их расположения.

Таким образом, при нелокальной связи множество стационарных состояний цепочки с локальной связью дополняется состояниями с равномерным распределением кластеров с разным числом максимумов плотности и скорости.

1.7.2 Механизм установления стационарных состояний при нелокальной связи

В отличие от цепочки с локальной связью между частицами, в цепочке с нелокальной связью нельзя установить взаимно однозначное соответствие между заданным стационарным состоянием и количеством максимумов скорости частиц, образующихся при тех или других начальных условиях. На тип реализующегося стационарного состояния влияют не только начальные условия, но и значения управляющих параметров, поэтому важно определить, при каких условиях формируются кластеры.

Из результатов численного моделирования следует, что кластер расщепляется, если ближайшие к нему солитоны находятся на большом расстоянии.

Расположенный в начале кластера так называемый «головной» солитон одновременно подвергается двум противоположным воздействиям: он стремится отделиться от кластера, однако, этому препятствуют нелокальные силы притяжения между ядрами «головного» солитона и солитона, следующего за ним.

Кроме того, если два кластера A и B расположены рядом, последний солитон кластера A и первый солитон кластера B отталкиваются (то же наблюдается, когда кластер один, но его длина приближается к длине цепочки; в этом случае отталкиваются «головной» и «хвостовой» солитоны).

Расстояния L_{CR} между кластерами A и B , начиная с которого от кластеров начинают отделяться солитоны, косвенно характеризует «устойчивость» кластера, то есть показывает, как сильно динамика цепочки с нелокальной связью отличается от динамики цепочки с локальной связью (при тех же значениях параметров).

Зависимости L_{CR} от параметров приведены на рисунке 1.16.

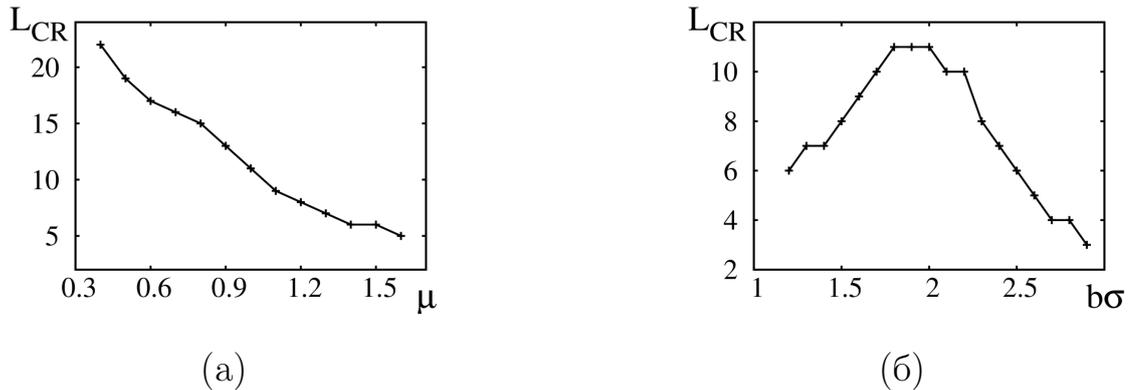


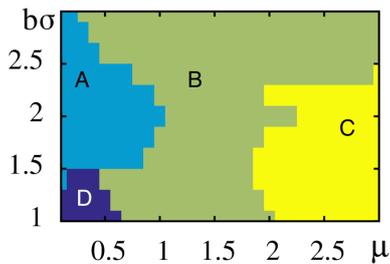
Рисунок 1.16. Зависимости расстояния L_{CR} , при превышении которого разрушаются кластеры, от параметра μ при $b\sigma = 2$ (а) и от параметра $b\sigma$ при $\mu = 1$ (б).

Видно, что при увеличении коэффициента трения μ для удержания кластера от распада требуется меньшее расстояние, то есть, кластеры становятся

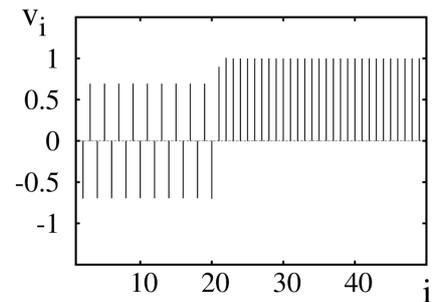
менее устойчивыми. Следовательно, при сильном трении динамика солитонов близка к классическому случаю с локальной связью.

Зависимость L_{CR} от жесткости потенциала $b\sigma$ имеет заметный максимум на $b\sigma \approx 1.9$. При таком значении жесткости потенциала формирование кластеров наблюдается наиболее часто. Характер зависимости следует из особенностей потенциала Морзе. При $b\sigma < 2$ потенциальная яма пологая и взаимодействие каждой частицы с соседними частицами и соседними к соседним является почти линейным. При $b\sigma > 2$ потенциальная яма становится уже, и частицы с индексом $n \pm 2$ перестают взаимодействовать с n -ной – то есть связь становится преимущественно локальной и существенно нелинейной.

Таким образом, на реализацию того или иного вида стационарного состояния оказывает влияние как тип начальных условий, так и значения параметров $b\sigma$ и μ . Для анализа влияния управляющих параметров на тип стационарного состояния была построена карта режимов, приведенная на рисунке 1.17 а. Эта диаграмма была построена для частного случая, когда начальные условия заданы в виде фрагмента оптической моды (рисунок 1.17 б).



(а)



(б)

Рисунок 1.17. (а) Диаграмма стационарных состояний на плоскости параметров μ , $b\sigma$ для $N = 50$. Показаны области, в которых реализуются различные типы мод: А – множество мелких кластеров; В – отдельные солитоны, нет формирования кластеров; С – один большой кластер (сохраняется начальное состояние); D – солитоны отсутствуют. (б) Начальное распределение скорости частиц.

При других начальных условиях сдвигаются границы между режимами, однако качественной перестройки структуры карты режимов не происходит. Так, наиболее интересной для анализа является область A , в которой стационарное состояние представляет собой множество кластеров небольшого ($k = 2 \dots 4$) размера, равномерно распределенных по цепочке. Для этой области характерно небольшое трение ($\mu < 1$) и значение жесткости потенциала $b\sigma$, близкое к 2. При этом эффект нелокальной связи максимален, а слабое нелинейное трение определяет достаточные для сохранения кластеров времена релаксации. В области B наблюдается стационарное состояние в виде равномерно распределенных солитонов. Такое состояние было подробно описано выше. Наконец, в области C нелинейное трение велико, а потенциал недостаточно жесткий, что приводит к замедлению переходных процессов [84] и сохранению начального состояния в течение длительного времени. Для области D характерна минимальная жесткость потенциала, поэтому солитонов не возникает.

1.8 Влияние шума на динамику солитонов

Рассмотрим, как влияет аддитивный шум на динамику цепочки 1.8. Для моделирования шумового воздействия необходимо модифицировать уравнение (1.8), добавив в него источник белого гауссовского шума. В таком случае, динамика i -той частицы будет определяться уравнением ланжевеновского типа в безразмерных переменных

$$\begin{aligned} \ddot{q}_i - \mu\left(1 - \frac{\dot{q}_i^2}{v^2}\right)\dot{q}_i &= \\ &= (1 - e^{q_i - q_{i+1}})e^{q_i - q_{i+1}} - (1 - e^{q_{i-1} - q_i})e^{q_{i-1} - q_i} + \\ &+ \sqrt{2D_E}\xi_i(t), \end{aligned} \quad (1.15)$$

где $\xi_i(t)$ – источник белого Гауссова шума с нулевым средним [18,26], а D_E – интенсивность шума. Остальные обозначения аналогичны таковым для уравнения (1.8).

1.8.1 Переключения мод под действием шума

Как было сказано выше, в цепочке из N частиц общее количество мод составляет $N + 1$, и каждая из них может быть возбуждена селективно соответствующим выбором начальных условий [18,19,22]. В присутствии шума различать моды можно по средней скорости, руководствуясь эмпирической формулой

$$\langle v \rangle \approx v_0 \frac{N - 2k}{N} - C(k, D_E), \quad (1.16)$$

где $\langle v \rangle$ - средняя по ансамблю скорость, k - общее число солитонов, а $C(k, D_E)$ - некоторая малая относительно $\langle v \rangle$ поправка, увеличивающаяся с ростом интенсивности шума и числа солитонов ($C \approx 0$ при отсутствии шума).

Поскольку в рассматриваемой цепочке состояние с равномерным распределением солитонов является стационарной модой, средняя по ансамблю скорость при нулевой интенсивности шума определяется начальными условиями и практически не меняется во времени.

Однако при повышении температуры цепочки (увеличении интенсивности шума) поведение мод качественно меняется. Во-первых, шум искажает траектории солитонов, поэтому строго равномерное распределение солитонов становится недостижимым. Во-вторых, солитоны могут возбуждаться и разрушаться, если интенсивность шума достаточно велика, что проиллюстрировано на рисунке 1.18 а и б, соответственно (по этим причинам, использовать для определения числа солитонов СДФ в настоящем Разделе не рационально, поскольку

нет гарантии, что на анализируемом временном интервале не произойдет изменение числа солитонов, а чем больше временной интервал – тем точнее расчет СДФ и больше вероятность возникновения или разрушения солитонов.) Как правило, индуцированные шумом солитоны возникают рядом с существующими; более подробно механизмы возникновения и разрушения солитонов будут рассмотрены далее.

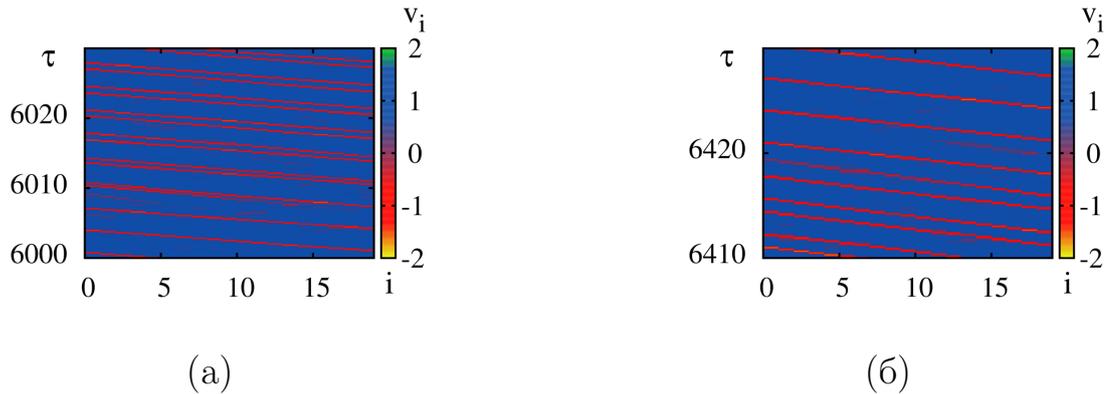


Рисунок 1.18. Пространственно-временные диаграммы, иллюстрирующие возникновение (а) и разрушение (б) солитонов в цепочке из 20 частиц при $b\sigma = 3, \mu = 1, D_E = 0.0672$. Цветом показана скорость частиц, а по горизонтальной оси отложены их номера.

Изменению количества k солитонов соответствуют переключения между различными значениями средней скорости $\langle v \rangle$. Такие переключения при ненулевой температуре можно наблюдать на зависимостях средней скорости от времени, как, например, на рисунке 1.19. Эти переключения выглядят как резкие скачки средней скорости между стационарными значениями, которые можно определить из формулы (1.16) для k -солитонной моды.

Следует отметить важную особенность: переключения между модами возможны в обоих направлениях, однако в общем случае вероятности увеличения и уменьшения числа солитонов не равны. Соотношение между этими вероятностями зависит от интенсивности шума. Определению вероятности переключения мод при шумовом воздействии различной интенсивности и посвящен следующий раздел.

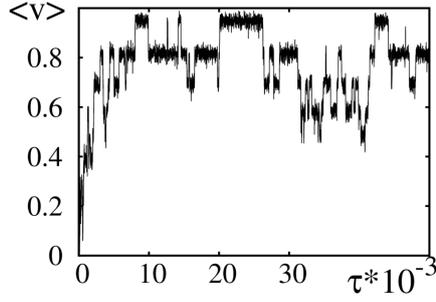


Рисунок 1.19. Зависимость средней скорости от времени для цепочки из 20 частиц при $b\sigma = 3$, $\mu = 1$, $D_E = 0.0672$.

1.8.2 Связь преимущественного направления переходов между модами с интенсивностью шума

Рассмотрев достаточно длинную зависимость средней скорости от времени (или набор коротких зависимостей с различными шумовыми реализациями, полагая, что система является эргодической), и установив соответствия между стационарными значениями средней скорости и числом солитонов по формуле (1.16), можно построить стационарное вероятностное распределение k -солитонных мод $P(k)$. Физический смысл величины $P(k)$ – вероятность обнаружить в цепочке k солитонов в произвольный момент времени

$$P(k) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\tau_k}{\tau} = \frac{\bar{\tau}_k}{\sum_{i=0}^{N/2} \bar{\tau}_i}, \quad (1.17)$$

где τ_k – сумма интервалов времени, в течение которых цепочка была в состоянии с k солитонами, τ – полное время наблюдения, а $\bar{\tau}_k$ – среднее значение τ_k . Как видно из (1.17), для определения $P(k)$ необходимо оценить $\bar{\tau}_k$. Для этого следует ввести плотность вероятности $\rho(k, \tau)$, такую, что вероятность обнаружить цепочку в состоянии с k солитонами в интервале времени $[\tau; \tau + d\tau]$ равна $\rho(k, \tau)d\tau$. Соответственно, тогда будет справедливо равенство

$$\bar{\tau}_k = \int_0^{\infty} \tau \rho(k, \tau) d\tau. \quad (1.18)$$

Проведенные численные эксперименты показали, что форма вероятностных распределений $P(k)$ меняется в зависимости от интенсивности шума. Наиболее характерные случаи показаны на рисунке 1.20. В случае низкой интенсивности шума ($D_E = 0.05$, рисунок 1.20 а) зависимость $P(k)$ имеет максимум при $k = 0$. Следовательно, вероятность уменьшения числа солитонов больше, чем вероятность увеличения, и шум малой интенсивности упорядочивает ансамбль.

С увеличением интенсивности шума происходит трансформация распределения вероятностей. Растет вероятность переключений в моды с большим числом солитонов, а максимум вероятностного распределения, соответственно, сдвигается ближе к $k = 9$. На рисунке 1.20 б показано состояние с почти «плоским» распределением при $D_E = 0.0672$, что примерно соответствует равенству вероятностей увеличения и уменьшения числа солитонов.

Наконец, при большой интенсивности шума $D_E = 0.08$ распределение вероятностей имеет ярко выраженный максимум на $k = 9$, как показано на рисунке 1.20 в.

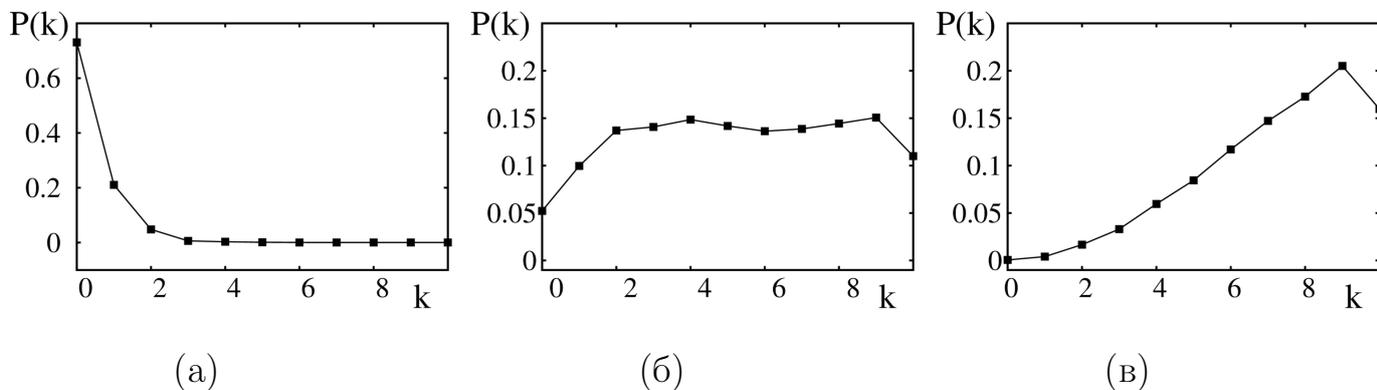


Рисунок 1.20. Стационарные вероятностные распределения $P(k)$ для различных значений интенсивности шума: а) $D_E = 0.05$, б) $D_E = 0.0672$, в) $D_E = 0.08$.

Как видно из рисунка 1.19, общее время существования моды τ_k характеризуется набором из коротких отрезков времени τ_k^{short} и числом переключений в моду k . То есть, одна и та же длительность τ_k может быть получена, например, как сумма двух больших интервалов времени или нескольких сотен коротких

интервалов. Соответственно, существует два независимых механизма, управляющих распределениями $P(k)$: один из них определяет время жизни τ_k^{short} моды k , а другой – вероятность переключения в эту моду. Тогда в предположении о независимости этих механизмов представим плотность вероятности как произведение двух независимых функций

$$\rho(k, \tau) = w_k(\tau)p(k), \quad (1.19)$$

где $w_k(\tau)$ соответствует плотности вероятности существования моды k в течение времени τ , а $p(k)$ представляет собой вероятность переключения в моду с k солитонами. В приближении бесконечно длинной временной реализации $p(k) \approx L_k/L$, где L_k – число переключений в конкретную моду, а L – общее число всех переключений между модами.

Для частиц с нелинейным трением Рэлея $\gamma(\dot{x}) = -\gamma_0(1 - \frac{\dot{x}^2}{v_0^2})$ очевидно, что состояние с нулевой скоростью $\dot{x} = 0$ является неустойчивым. Поэтому наиболее просто возбудить или разрушить солитон, «толкнув» частицу, когда ее скорость близка к нулю. Например, такая ситуация возможна в некоем интервале времени, близком к моменту соударения частиц.

Важно отметить, что тот факт, что система осталась в состоянии с k солитонами после очередного соударения, не влияет на вероятность переключений при последующих соударениях. Проще говоря, цепочка не обладает памятью по отношению к пиковым выбросам шумовой реализации.

Тогда вероятность переключения моды с k солитонами можно описать экспоненциальной плотностью вероятности $w_k(\tau)$ в виде

$$w_k(\tau) = \lambda(k)e^{-\lambda(k)\tau}, \quad (1.20)$$

где величина $\lambda(k)$ характеризует, как часто происходят переключения из моды k за единицу времени.

Эта плотность вероятности может быть определена из данных численного эксперимента, как число посещений системой моды с k солитонами в течение

интервала времени $\tau \pm \Delta\tau$. На рисунке 1.21 представлены зависимости вероятности сохранения моды в течение времени τ при различных интенсивностях шума; точками показаны численные результаты, а линиями – их аппроксимация функцией вида (1.20). Видно хорошее согласование эксперимента с теоретическими зависимостями.

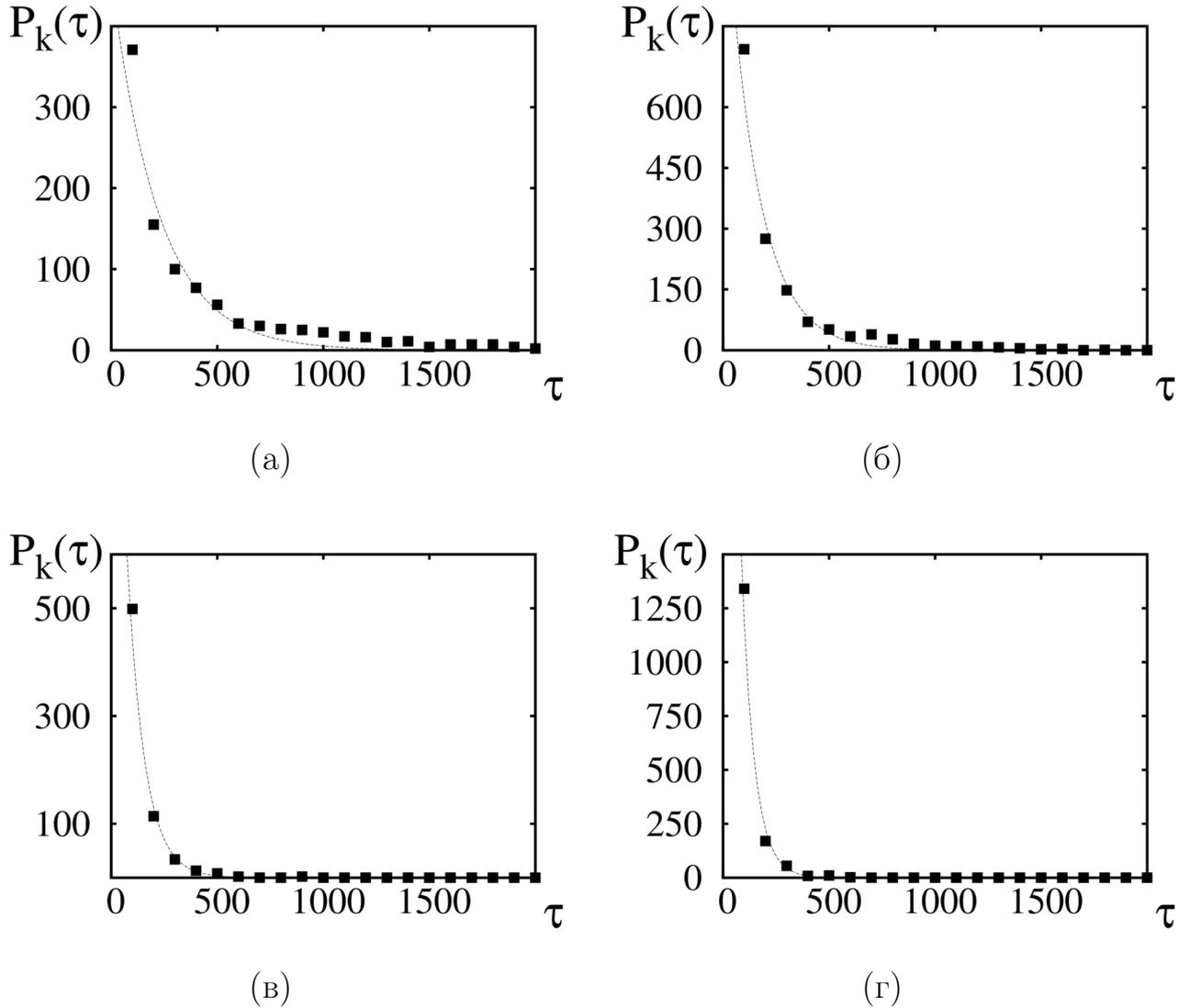


Рисунок 1.21. Плотность вероятности сохранения моды с k солитонами в течение времени τ при различных интенсивностях шума. Точками показаны численные результаты, а линии соответствуют экспоненциальной аппроксимации функцией вида (1.20); а) $k = 1, D_E = 0.06$, б) $k = 2, D_E = 0.06$, в) $k = 1, D_E = 0.07$, г) $k = 2, D_E = 0.07$.

На рисунке 1.22 приведено семейство зависимостей $\lambda(k)$ для различных интенсивностей шума; точки соответствуют данным численного эксперимента, а линии – полиномиальной аппроксимации. Как видно из приведенных на ри-

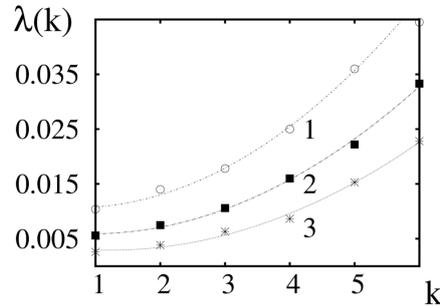


Рисунок 1.22. Семейство зависимостей $\lambda(k)$ от числа солитонов k при различных интенсивностях шума $D_E = 0.07$ (1), $D_E = 0.065$ (2), $D_E = 0.0575$

(3) и, соответственно, их аппроксимации функциями

$$g(x) = 0.0013x^2 - 0.0018x + 0.0105 \text{ (кривая 1),}$$

$$g(x) = 0.0010x^2 - 0.0019x + 0.006 \text{ (кривая 2), } g(x) = 0.0008x^2 - 0.002x + 0.004$$

(кривая 3).

сунке 1.22 зависимостей, число переключений между модами увеличивается с ростом интенсивности шума. Иначе говоря, при бóльшем шумовом воздействии времена жизни мод становятся меньше, как и ожидалось. Кроме того, зависимости $\lambda(k)$ монотонно увеличиваются с ростом числа солитонов. Так происходит, потому что переключения мод в основном соответствуют моментам соударений частиц, а чем больше число солитонов, тем большее количество соударений происходит в течение рассматриваемого интервала времени. Таким образом, характерные времена жизни мод в присутствии шума заданной интенсивности уменьшаются с ростом числа солитонов k .

Зависимости числа переключений L_k в моду с k солитонами от количества солитонов приведены на рисунке 1.23 для трех характерных значений интенсивности шума. Поскольку $p(k) \approx L_k/L$, из анализа зависимостей $L_k(k)$ можно сделать вывод, что плотность вероятности $p(k)$ переключения в моду с k солитонами возрастает с ростом k , однако вид аппроксимирующей функции сильно

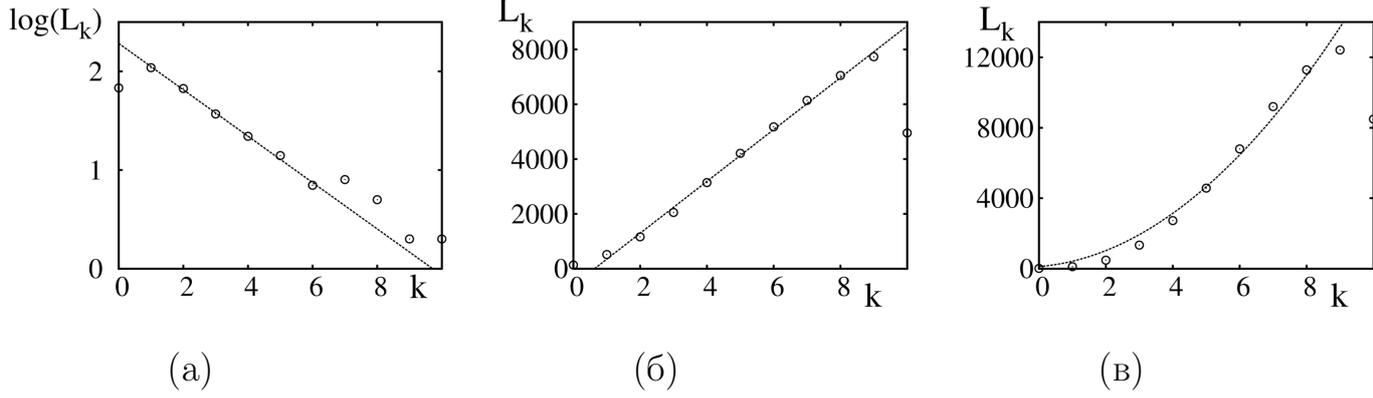


Рисунок 1.23. а) Зависимость $\ln(L_k)$ от числа солитонов k . Прямая линия – аппроксимация линейной функцией, $D = 0.05$; б) Зависимость L_k от числа солитонов k . Точками показаны численные результаты для $D = 0.07$, а сплошной линией - аппроксимация функцией $L_k(k) = 945.867k - 598.333$; в) то же при $D = 0.08$, аппроксимация квадратичной функцией

зависит от интенсивности шума. Когда интенсивность шума относительно мала, $\log p(k) \sim (k - 1)const_1 + const_2$ (рисунок 1.23 а). При промежуточном значении интенсивности шума $p(k) \sim const_3k + const_4$ (рисунок 1.23 б). Наконец, при шуме большой интенсивности $p(k) \sim const_5k^2 + const_6$.

1.9 Сопоставление динамики цепочки частиц и цепочки осцилляторов Рэлея

Осциллятор Рэлея представляет собой осциллятор с нелинейным трением, в котором нелинейное трение зависит от \dot{x} [95]. Динамика осциллятора Рэлея описывается дифференциальным уравнением

$$\ddot{x} - \epsilon(1 - \dot{x}^2)\dot{x} + \omega_r^2 x = 0. \quad (1.21)$$

При помощи простой замены переменных уравнение (1.21) сводится к уравнению осциллятора Ван дер Поля [95]. Из сравнения уравнения (1.21) с уравнением динамики отдельной, не взаимодействующей частицы Рэлея (1.5) следует,

что такая частица может рассматриваться как асимптотический случай осциллятора Рэлея с частотой $\omega_r = 0$.

Сравним динамику цепочки частиц (1.5) и цепочки осцилляторов (1.21), совершив переход от частиц как осцилляторов с нулевой частотой к осцилляторам с конечным значением частоты. Для этого рассмотрим цепочку осцилляторов Рэлея, связь между которыми осуществляется посредством сил потенциала Морзе (1.6) (следует отметить, что в таком ансамбле существует два характерных временных масштаба: один соответствует колебаниям в потенциальной яме сил связи, другой – собственным колебаниям осцилляторов). Динамика каждого осциллятора описывается уравнением

$$\ddot{q}_i - \mu\left(1 - \frac{\dot{q}_i^2}{v^2}\right)\dot{q}_i + \omega_r^2 q_i = (1 - e^{q_i - q_{i+1}})e^{q_i - q_{i+1}} - (1 - e^{q_{i-1} - q_i})e^{q_{i-1} - q_i}. \quad (1.22)$$

Основные обозначения в этом уравнении аналогичны таковым для уравнения (1.8), а величина ω_r представляет собой частоту собственных колебаний осцилляторов Рэлея, выраженную в единицах частоты линейных колебаний за счет связи $\omega_M = \sqrt{\frac{2Db^2}{m}}$. В рамках настоящего Раздела значения параметров $b\sigma = 5$, $\mu = 4$. Граничные условия будем предполагать периодическими.

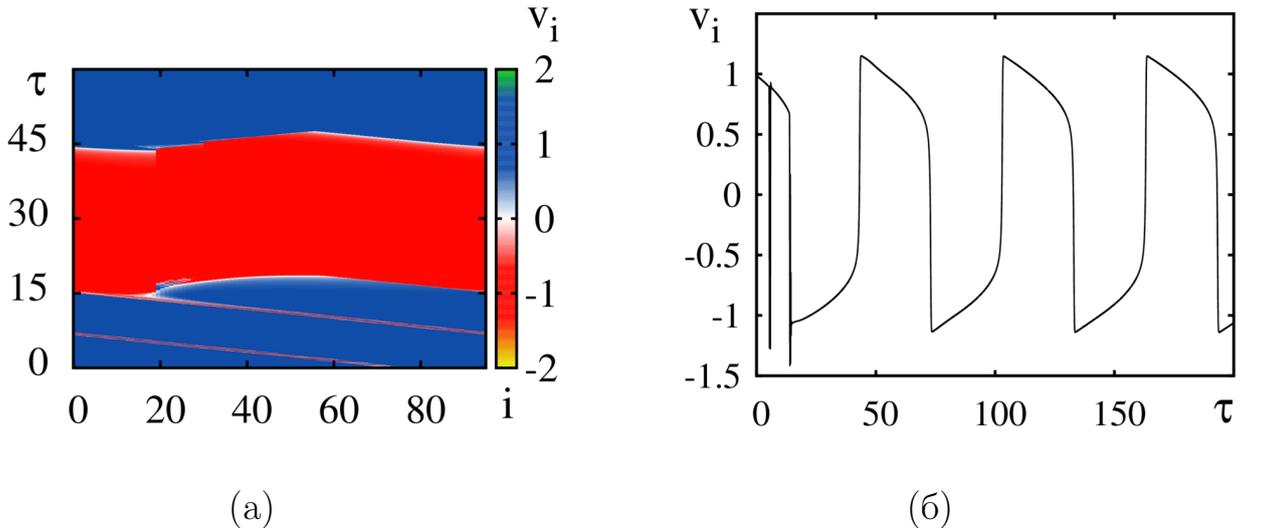


Рисунок 1.24. Пространственно-временная диаграмма, иллюстрирующая распространение солитонов в течение полупериода колебаний осцилляторов Рэлея; (б) временная динамика первого осциллятора цепочки.

Начнем с рассмотрения ансамбля из $N = 96$ элементов. Пусть частота собственных колебаний не равна нулю, но всё еще значительно частоты линейных колебаний за счет связи: $\omega_r = 0.05\omega_M$. Как показали результаты численного моделирования, в такой цепочке, как и в ансамбле частиц, могут возбуждаться диссипативные солитоны (см. рисунок 1.24 а), в том числе при старте со стохастических начальных возмущений. При подобном соотношении ω_r и ω_M период обращения солитонов по цепочке с заданным числом частиц $N = 96$ будет сопоставим с периодом колебаний осцилляторов Рэля. Дважды за период происходит перемена знака \dot{q}_i (см. рисунок 1.24 б), что приводит к разрушению диссипативных солитонов и установлению в цепочке пространственно однородного режима. Таким образом, при условии $\omega_r \ll \omega_M$ времена жизни диссипативных солитонов в цепочке осцилляторов Рэля ограничены периодом колебаний осцилляторов.

С увеличением частоты ω_r не происходит качественных изменений динамики диссипативных солитонов, пока не будет достигнуто бифуркационное значение $\omega_r \approx 1.2\omega_M$. При этом период колебаний осцилляторов Рэля столь мал, что распространение диссипативных солитонов становится невозможным. Начиная с этого значения и до $\omega_r \approx 6\omega_M$ соотношение частот таково, что диссипативные солитоны трансформируются в особые возбуждения, подобные бризерам в консервативных решетках. В качестве иллюстрации на рисунке 1.25 а, б приведены пространственно-временная диаграмма и мгновенный пространственный профиль такого возбуждения при $\omega_r = 1.3\omega_M$.

Видно (рисунок 1.25 а, б), что существует некая пространственная структура с четкими границами, локализованная на частицах с номерами $i = 41...48$. Поведение частиц в этой группе в определенной степени подобно поведению фрагментов оптической моды, рассмотренных выше в настоящей Главе. Следует отметить, что обнаруженные структуры не распадаются с течением времени, в отличие от фрагментов оптической моды в цепочках частиц.

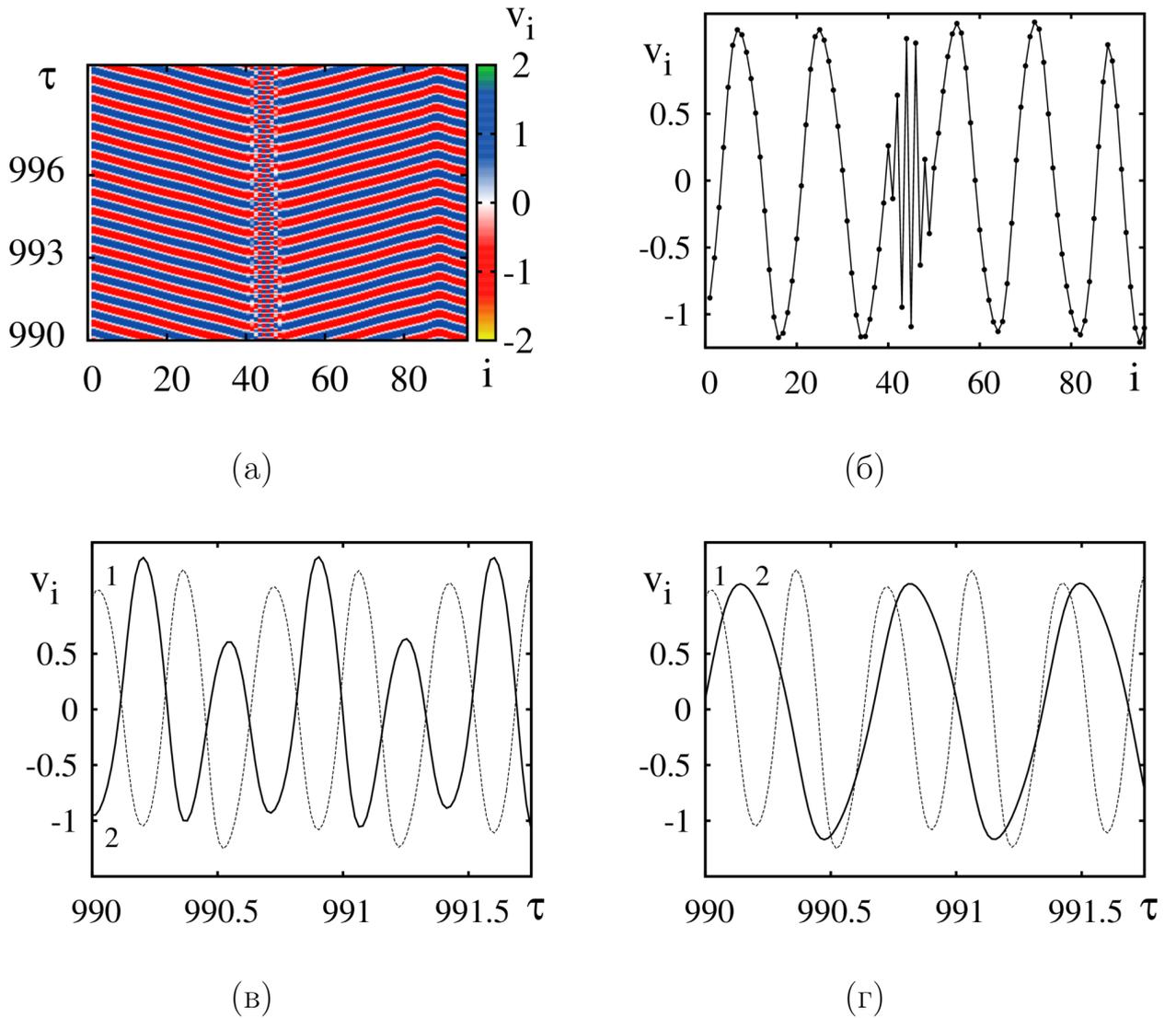


Рисунок 1.25. (а) пространственно-временная диаграмма, иллюстрирующая бризеро-подобные возбуждения; (б) мгновенный пространственный профиль ансамбля (эквивалент распределения скоростей частиц) в момент времени $\tau = 990$; (в) зависимость скорости элементов номер 45 (кривая 1) и 44 (кривая 2) от времени; (г) зависимость скорости элементов номер 45 (кривая 1) и 5 (кривая 2) от времени. $\omega_r = 1.3\omega_M$

В оставшейся части ансамбля инициируется распространение двух бегущих в противоположных направлениях волн (рисунок 1.25 а, б). Поскольку обнаруженные возбуждения подобны бризерам в консервативных цепочках, далее будем обозначать их термином «диссипативные бризеры».

Временная динамика элементов из той части цепочки, в которой распространяются волны, определяется свойствами осцилляторов Рэлея, тогда как динамика частиц с номерами $i = 41..48$ определяется свойствами потенциала Морзе.

На рисунке 1.25 в приведены временные реализации скорости двух элементов с номерами 44 и 45. Видно, что соседние элементы колеблются в противофазе, как во фрагменте оптической моды. Из сравнения временных реализаций скорости элементов цепочки с номерами 5 и 45 (рисунок 1.25 г) видно, что частота колебаний элементов внутри диссипативного бризера выше частоты колебаний осцилляторов Рэлея, что подтверждается результатами расчетов спектров мощности.

Спектр мощности колебаний частиц вне диссипативного бризера состоит из большого числа гармоник основной частоты ω_r , а максимум мощности приходится на гармонику, соответствующую ω_r .

Спектр мощности колебаний тех осцилляторов, на которых локализован диссипативный бризер, имеет более сложную структуру. Максимум спектра мощности приходится на частоту $\tilde{\omega}_M > \omega_r$, соответствующую колебаниям большой амплитуды за счет сил связи. Кроме того, в спектре присутствует частота ω_r и ее гармоники. Наконец, в спектре колебаний осцилляторов, на которых локализован бризер, присутствует большое количество различных разностных гармоник, соответствующих частотам $\tilde{\omega}_M - \omega_r$, $2\omega_r - \tilde{\omega}_M$ и так далее. Следует отметить, что всегда существует такая разностная гармоника ω_{MR} , что $\tilde{\omega}_M = k\omega_{MR}$ и $\omega_r = l\omega_{MR}$, где k и l – целые числа. Таким образом, колебания осцилляторов, на которых локализован бризер, носят периодический ангармонический характер.

В зависимости от начальных условий диссипативный бризер может включать различное количество частиц, а так же может быть неподвижным либо мобильным. В последнем случае кластер будет перемещаться по цепочке, со-

храняя свою структуру (см. рисунок 1.26). Из сравнения фрагментов рисунка 1.26, б и в видно, что бризер перемещается со скоростью $v_{br} \approx 0.18$.

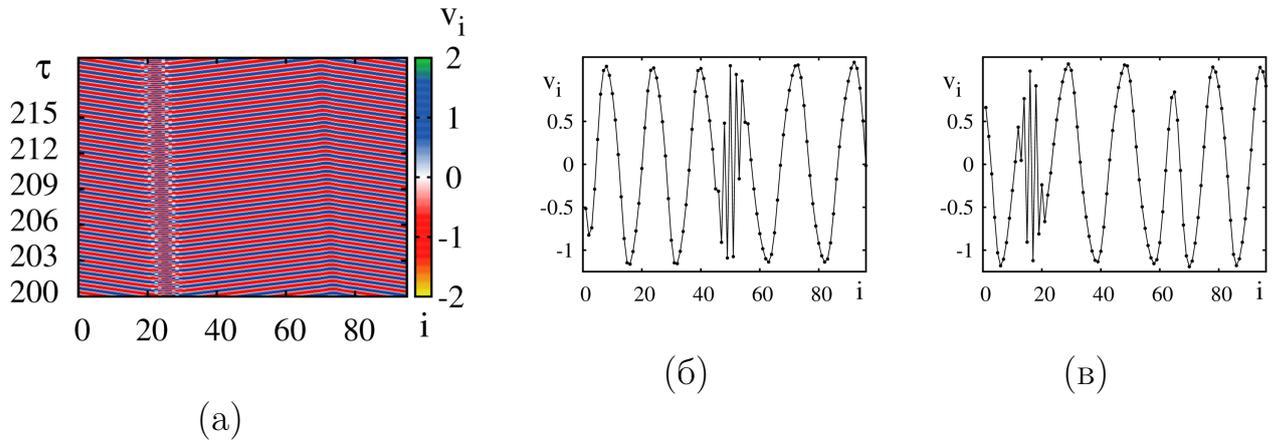


Рисунок 1.26. (а) пространственно-временная диаграмма, иллюстрирующая мобильный диссипативный бризер; (б) мгновенный пространственный профиль ансамбля в момент времени $\tau = 75$; (в) мгновенный пространственный профиль ансамбля в момент времени $\tau = 250$.

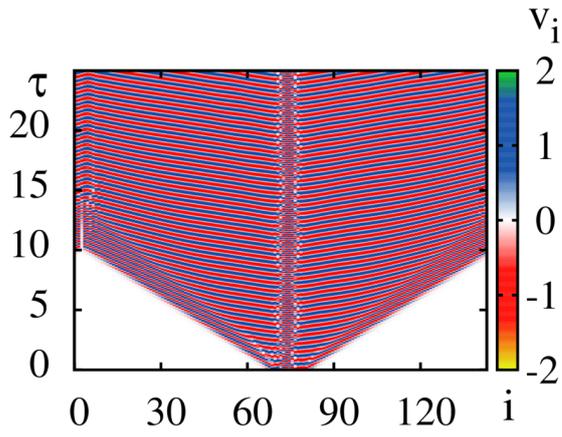
Существует следующая закономерность: если число частиц, на которых локализован диссипативный бризер, четное, то он будет неподвижным (локализованным в течение всего времени существования на одних и тех же элементах цепочки), поскольку в каждый момент времени внутри кластера будет одинаковое число частиц, движущихся «вправо» и «влево». В противном случае бризер будет мобильным, поскольку противофазные колебания частиц внутри кластера не будут скомпенсированы (в каждый момент времени будет k частиц, движущихся в одну сторону, и $k + 1$ частиц, движущихся в противоположную).

Принципиальным является вопрос: обнаруженные локализованные структуры являются независимыми от колебаний в остальной части цепочки или являются компонентами распределенной моды цепочки со сложной пространственной структурой? Для ответа на этот вопрос был проведен следующий эксперимент. Фрагмент цепочки, содержащий диссипативный бризер, изображенный на рисунке 1.25 б, был использован в качестве начальных условий для цепочки из $N = 144$ осцилляторов, как это показано на рисунке 1.27 а, б.

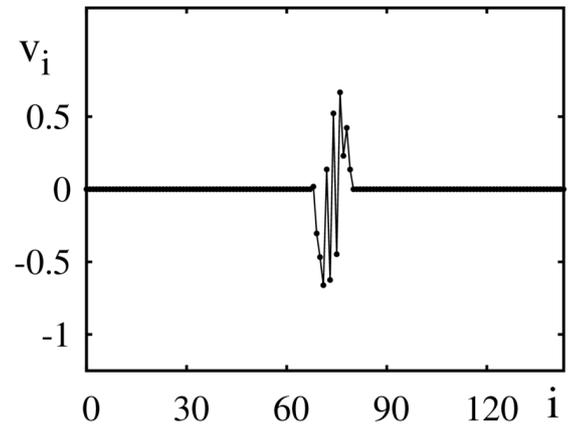
В результате было обнаружено, что бризер сохраняет свою конфигурацию и остается локализованным на тех же частицах, но при этом инициирует в своей окрестности распространение бегущих волн (см. рисунок 1.27 в,г). Характеристики этих волн определяются только параметрами осцилляторов и сил связи и не зависят от размеров бризера и длины цепочки. Таким образом, можно сделать вывод, что диссипативные бризеры в цепочках осцилляторов Рэлея, связанных силами потенциала Морзе, представляют собой локализованные возбуждения, слабо зависящие от динамики цепочки за их пределами.

Поскольку цепочка имеет конечные размеры, а граничные условия выбраны периодические, две волны, распространяющиеся в противоположных направлениях, сходятся в одной точке (см. рисунок 1.27 г, д). В результате в этой точке формируется еще один диссипативный бризер. Если фазы волн совпадают, размеры сформировавшегося бризера будут минимальны: например, на рисунке 1.27 д бризер локализован на элементах с номерами 5 и 6, которые колеблются синфазно. Однако, возможна ситуация, когда фазы волн в точке их схождения не совпадают (например, если бризеров несколько и они распределены по цепочке неравномерно); в этом случае сформировавшиеся бризеры будут локализованы на большем количестве элементов.

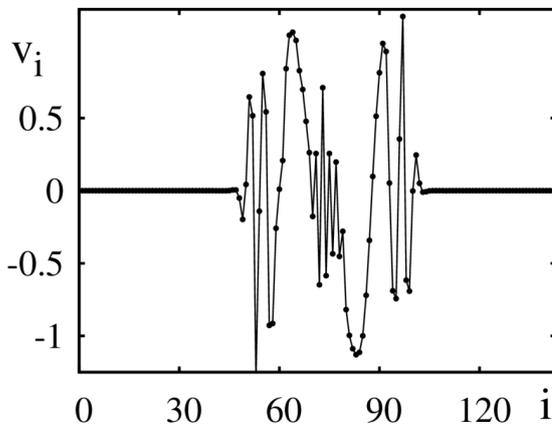
Известно, что в консервативных системах бризеры могут терять энергию на излучение волн (фононов) в решетку и со временем могут затухать. Однако изучаемая система является активной, и обнаруженные возбуждения не излучают волны, а лишь инициируют распространение автоволн. Таким образом, время жизни диссипативных бризеров не ограничено, и их можно считать стационарными режимами ансамбля осцилляторов.



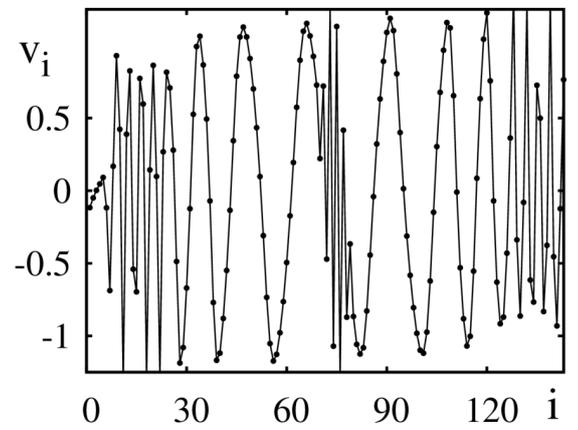
(a)



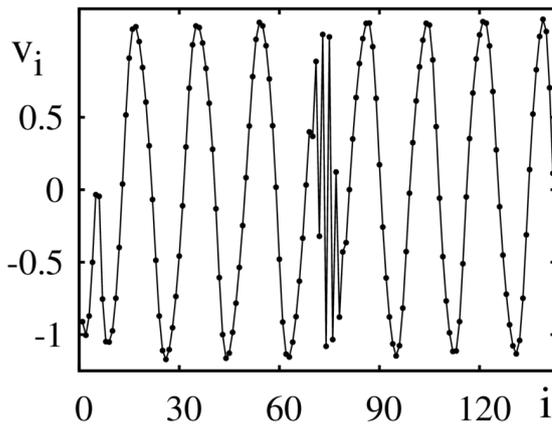
(б)



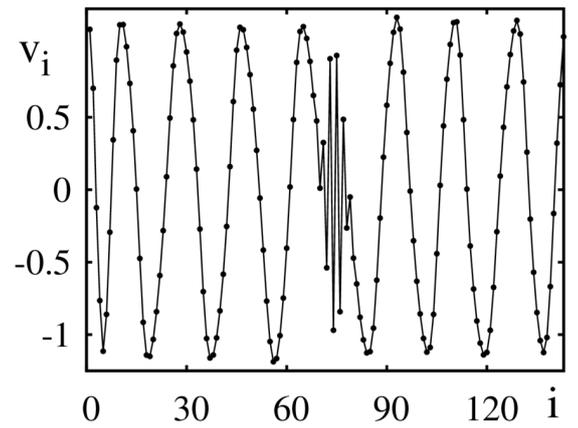
(в)



(г)



(д)



(е)

Рисунок 1.27. (а) пространственно-временная диаграмма, иллюстрирующая динамику ансамбля при старте с начальных условий в виде диссипативного бризера. Мгновенные пространственные профили ансамбля в моменты

времени (б) $\tau = 0$, начальные условия; (в) $\tau = 3$; (г) $\tau = 9$; (д) $\tau = 25$; (е)

$$\tau = 250. \omega_r = 1.3\omega_M$$

1.10 Выводы по первой главе

В главе представлены результаты численного моделирования динамики одномерной цепочки взаимодействующих активных частиц и осцилляторов с нелинейным трением в форме Рэлея и связанных силами потенциала Морзе (1.8). Основные результаты следующие:

1. Показано, что в цепочках активных частиц возможно возбуждение метастабильных мод с неравномерным распределением максимумов плотности частиц в цепочке. Определены характерные времена жизни таких состояний, которые могут составлять сотни и более периодов осцилляций Морзе.
2. Определена зависимость времени жизни метастабильных состояний от параметров потенциала, отрицательного трения и числа частиц в решетке. В частности, обнаружено, что длительность переходных процессов увеличивается по экспоненте с ростом числа частиц в цепочке.
3. Исследован механизм возникновения метастабильных состояний при различных начальных условиях. При достаточно жесткой связи одна возмущенная частица возбуждает в своей окрестности несколько диссипативных солитонов, которые спустя короткое время образуют солитонный кластер. Определена зависимость наиболее вероятного размера кластера от управляющих параметров.
4. Установлено, что в цепочке с нелокальными связями, в дополнение к связям с соседними элементами, существуют новые типы стационарных состояний в форме равномерно распределенных кластеров с различным числом солитонов.
5. В цепочке осцилляторов Рэлея, связанных нелинейными потенциальными силами, обнаружены стационарные моды, в пространственном распре-

делении которых существуют локализованные кластеры, которые можно назвать диссипативными дискретными бризерами, мобильными или немобильными.

6. Показано, что под влиянием шума в цепочке активных частиц возможно изменение числа возбужденных солитонов, то есть переключение мод. Преимущественное направление переключений зависит от интенсивности шума. При шумовом воздействии большой интенсивности наиболее вероятны переходы к модам с большим числом солитонов, тогда как воздействие шумом малой интенсивности приводит к уменьшению числа солитонов.

Глава 2. ДИССИПАТИВНЫЕ СОЛИТОНЫ И МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ДВУМЕРНОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ АКТИВНЫХ ЧАСТИЦ

2.1 Введение

Одномерные модели активных частиц позволяют определить некоторые общие свойства ансамблей активных элементов, однако большой интерес представляет также анализ поведения различного рода двумерных решеток активных частиц. Начать рассмотрение двумерных решеток разумно, основываясь на уже исследованной в Главе 1 модели частиц Морзе-Рэля. В простейшем случае двумерную решетку можно представить, как совокупность одномерных цепочек, расположенных параллельно друг другу на равновесном расстоянии. В зависимости от способа расположения частиц и размеров ячейки моделирования различают решетки с различной симметрией (квадратичные, треугольные и т.д.).

Следует отметить, что в аналогичных решетках консервативных частиц обнаружено большое разнообразие распределенных и локализованных возбуждений, в частности, дискретных солитонов, краудионов и разного рода бризеров [30–35, 70–73].

Для одномерной решетки (цепочки) активных частиц с нелинейным трением, связанных потенциальными силами [18, 19, 22, 84], в Главе 1 было показано, что стационарные моды (аттракторы) такой цепочки с периодическими граничными условиями представляют собой кноидальные волны с равномерным про-

странственным распределением максимумов плотности и скорости частиц. В случае, когда ширина пиков плотности много меньше расстояния между ними, эти моды можно рассматривать также как упорядоченный ансамбль диссипативных дискретных солитонов [102]. Также показано, что процессы установления стационарных мод могут быть очень длительными и могут рассматриваться как метастабильные состояния.

В настоящей главе излагаются результаты исследования стационарных мод и метастабильных состояний, наблюдаемых в двумерной плотноупакованной решетке активных частиц, связанных потенциальными силами Морзе. Описаны основные типы стационарных мод системы с периодическими граничными условиями, а также различные локализованные метастабильные моды, в частности, указаны условия для их возбуждения и оценены времена жизни.

2.2 Модель и уравнения динамики двумерной решетки

Рассматривается двумерная решетка, состоящая из порядка $10^2 - 10^3$ точечных активных частиц на плоскости с периодическими граничными условиями. Каждая частица находится под действием трения с коэффициентом $\gamma(\vec{v})$, нелинейно зависящим от скорости,

$$\gamma(\vec{v}_i) = \tilde{\mu} \left(1 - \frac{|\vec{v}_i|^2}{v_0^2}\right), \quad (2.1)$$

где $\tilde{\mu}$ - линейный коэффициент отрицательного трения, \vec{v}_i - вектор скорости i -той частицы, v_0 - стационарное значение модуля скорости. Из (2.1) следует, что изолированная частица всегда будет стремиться достичь скорости $|\vec{v}_i| = v_0$. Следует отметить, что используемый вид нелинейного трения в форме Рэлея не определяет направление движения частицы, а влияет лишь на величину ее скорости.

Связь между частицами задается модифицированным потенциалом Морзе [30]

$$U(z) = D(e^{-2b(z-\sigma)} - 2e^{-b(z-\sigma)}) \frac{1}{1 + e^{(z-d)/2\nu}}, \quad (2.2)$$

где z – расстояние между частицами, D – глубина потенциальной ямы, b – коэффициент жесткости потенциала, σ – равновесное расстояние между частицами, d и ν – параметры «сглаживающего» коэффициента потенциала.

Значения параметров d и ν выбираются таким образом, чтобы на границах окружности с радиусом отсечки R и центром в точке дислокации частицы потенциал взаимодействия и его производная были практически равны нулю (рисунок 2.1 а). Это означает, что взаимодействуют только частицы, расстояние между которыми не превышает R . Таким образом, рассматривается решетка с локальным взаимодействием, когда в равновесном состоянии каждая частица связана только с ближайшими соседями (рисунок 2.1 б).

Размеры ячейки моделирования и начальное распределение частиц соответствуют плотно-упакованной решетке с треугольной симметрией (рисунок 2.1 б). Значения параметров $b\sigma = 5$, $d = 1.35\sigma$ и $\nu = 0.035\sigma$ соответствуют радиусу отсечки $R = 1.6\sigma$ (рисунок 2.1 а), поэтому каждая частица взаимодействует в основном с ближайшими соседями.

Динамика i -той частицы подчиняется уравнению в безразмерных переменных:

$$\begin{aligned} \ddot{\vec{q}}_i - \mu \left(1 - \frac{|\dot{\vec{q}}_i|^2}{v_0^2}\right) \dot{\vec{q}}_i = \\ = \sum_{|\vec{q}_i^k| < R} \frac{\vec{q}_i^k}{|\vec{q}_i^k|} \left[\left(e^{b\sigma - |\vec{q}_i^k|} - e^{2(b\sigma - |\vec{q}_i^k|)} \right) \cdot \frac{1}{1 + e^{-\frac{|\vec{q}_i^k|}{2\nu}}} - \frac{1}{2b} \frac{e^{2(b\sigma - |\vec{q}_i^k|)} - 2e^{b\sigma - |\vec{q}_i^k|}}{2\nu \left(e^{-\frac{|\vec{q}_i^k|}{2\nu}} + 1 \right)^2} \cdot e^{\frac{|\vec{q}_i^k|}{2\nu}} \right]. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Здесь используются следующие обозначения: $\vec{q}_i = b\vec{r}_i$ – безразмерная координата (где $\vec{r}_i = \{x_i; y_i\}$ – размерная координата частицы), $\dot{\vec{q}}_i = \frac{\omega_M}{b} \vec{v}_i$ – безразмерная скорость, точками обозначается дифференцирование по безразмерному времени $\tau = \omega_M t$. Параметр $\mu = \tilde{\mu} \omega_M / b$ – безразмерный коэффициент отрицательного трения, величина $|\vec{q}_i^k|$ – безразмерное расстояние между i -той и k -той частицами,

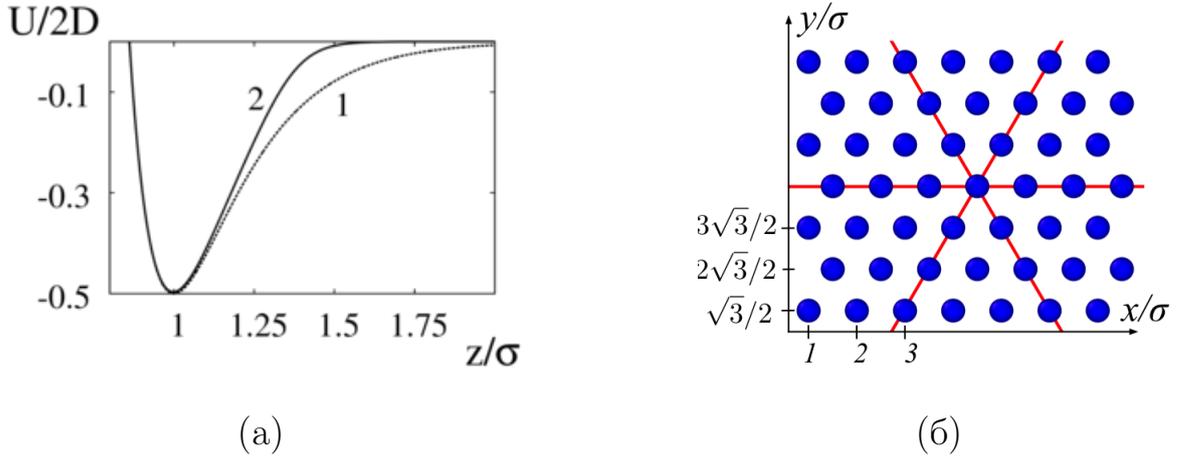


Рисунок 2.1. (а) профили традиционного (линия 1) и модифицированного (линия 2) потенциалов Морзе с параметрами $b\sigma = 5$, $d = 1.35\sigma$ и $\nu = 0.035\sigma$; (б) схематичное изображение решетки с треугольной симметрией. Линиями показаны кристаллографические оси.

а $\frac{\vec{q}_i^k}{|\vec{q}_i^k|}$ - единичный вектор, указывающий направление от i -той частицы к k -той. Таким образом, в выбранных обозначениях $1/\omega_M$ - единица времени, а $2D$ - единица энергии, $\omega_M = \sqrt{2Db^2/m}$ - частота линейных колебаний в яме потенциала Морзе, m - масса частицы. Далее при изложении результатов моделирования в качестве единицы скорости будет использоваться величина $\omega_M\sigma$, соответствующая скорости «звука» в одномерной консервативной Морзе-цепочке с теми же значениями параметров [84].

Для наглядного представления возмущений решетки ее элементы представляются на рисунках не в виде точечных частиц, а в виде кружков с центром, соответствующим координате частицы \vec{r}_i , и гауссовым распределением плотности по радиусу [30]

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_{|\vec{r}-\vec{r}_i| < 1.6\sigma} \exp\left(-\frac{(\vec{r}-\vec{r}_i)^2}{2\lambda^2}\right), \quad (2.4)$$

где λ - параметр, задающий форму распределения (например, см. рисунок 2.2 (а)). Такой подход удобен для визуальной идентификации различных пространственных структур.

2.3 Стационарные моды треугольной решетки с периодическими граничными условиями. Определение характеристик стационарных мод.

Для ансамбля взаимодействующих частиц, описываемых системой уравнений (2.3), существует несколько характерных значений энергии, а именно: кинетическая энергия $mv_0^2/2$, соответствующая равносному движению активной частицы, энергия «взаимодействия» D , энергия возмущения в решетке, которая в простейшем случае – при возмущении решетки просто импульсом одной частицы – равна $mv_{rel}^2/2$ (здесь v_{rel} – модуль скорости возмущенной частицы относительно ячейки моделирования). В зависимости от соотношения характерных значений энергии динамика ансамбля может быть различной. В настоящей Главе рассматривается динамика «ансамбля-решетки», в котором взаимодействие частиц превалирует над индивидуальной динамикой частиц. Поэтому динамика такой решетки активных частиц должна сохранять отдельные элементы динамики консервативной решетки. Однако стремление каждой частицы решетки восстанавливать после любого возмущения стационарное значение скорости приводит к новым особенностям динамики. Кроме того, эволюция возмущений в такой решетке зависит от соотношения характерных временных масштабов системы – инкремента линейных возмущений и времени демпфирования нелинейных возмущений активной частицы, а также периода Морзе-осцилляций, определяющего характерный масштаб коллективных движений. Анализируется в основном динамика решеток с быстрым темпом нарастания энергии на линейной стадии эволюции ($\mu \approx 1.4$) и короткой стадией нелинейного демпфирования ($v_0 \approx 0.14\omega_M\sigma$).

Основное стационарное состояние активной решетки – трансляционное движение решетки как целого со скоростью \vec{v}_0 . В этом режиме скорости всех

частиц равны по величине и сонаправлены. В простейшем случае относительные смещения частиц равны нулю (рисунок 2.2 а). Такое состояние является основным аттрактором системы, почти все метастабильные состояния трансформируются в трансляционную моду. В режиме трансляционной моды частицы способны восстанавливать кинетическую и потенциальную энергию после локального внешнего воздействия, однако направление движения центра масс решетки не является устойчивым и может изменяться под внешним воздействием.

Кроме того, существует набор трансляционных мод с дефектами в решетке, как, например, на рисунке 2.2 б. Существование таких состояний возможно потому что в решетке могут реализовываться конфигурации частиц с локальным минимумом потенциальной энергии: частица, выбитая из своего положения равновесия, может застревать между узлами решетки. Такие дефекты могут возникнуть, например, в результате распространения краудиона [33–35]. Для запуска краудиона необходимо придать одной или нескольким частицам начальный импульс, достаточно большой, чтобы частица могла преодолеть потенциальный барьер [35] и «перескочить» на место соседней (в соседний сайт). В рассматриваемой модели возбуждение краудионов возможно при малых значениях $\mu \lesssim 0.1$ (в противном случае быстрые частицы будут передемпфированы и потеряют большую часть энергии раньше, чем покинут сайт), либо при больших значениях $v_0 \gtrsim 0.5$ (в этом случае стационарное значение кинетической энергии частиц сравнимо с глубиной потенциальной ямы).

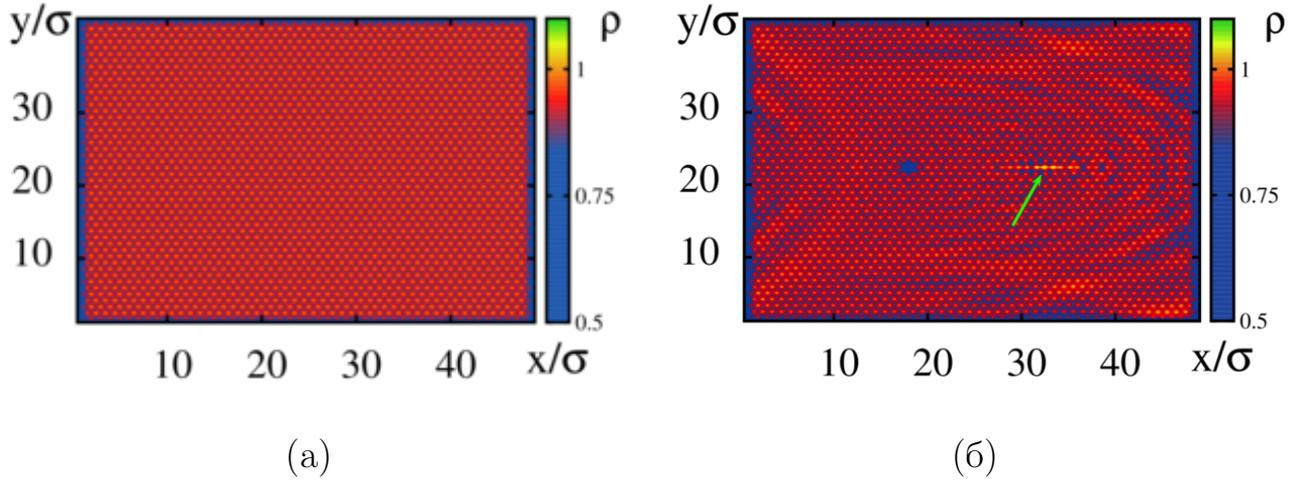


Рисунок 2.2. Мгновенные пространственные распределения плотности частиц в треугольной решетке 48×48 частиц для трансляционной моды без дефектов при $b\sigma = 5$, $\mu = 1.41$, $v_0 = 0.14\omega_M\sigma$ (а) и с дефектами в виде локального сгущения частиц (показано стрелкой), индуцированного застрявшей выбитой из ячейки частицей, и вакансии на месте выбитой частицы.

$$b\sigma = 4, \mu = 0.07, v_0 = 0.14\omega_M\sigma \text{ (б)}.$$

2.4 Метастабильные состояния двумерной треугольной решетки

Помимо стационарных состояний-аттракторов в форме трансляционного движения в разных направлениях однородной решетки и решетки с дефектами, выбором начальных условий для частиц в решетке можно возбуждать множество типов метастабильных мод. По сути, они представляют собой процессы перехода от начального состояния к стационарному состоянию. Длительность этих переходных процессов может быть очень большой и в ряде физических процессов они могут рассматриваться в течение длительного времени как квазистационарные моды, оказывающие существенное влияние на макроскопические характеристики системы. Связано это с тем, что в реальных системах, находящихся под действием внешней стохастической силы (при ненулевой тем-

пературе, например) исчезновение одних метастабильных мод сопровождается рождением других, вследствие чего в среднем в системе все время существуют метастабильные возбуждения. Поэтому важно выявить свойства различных метастабильных мод рассматриваемой решетки и оценить их времена жизни.

Результаты численных экспериментов показывают, что наиболее долгоживущей метастабильной модой треугольной решетки является плоская солитоноподобная волна (далее для краткости обозначаемая термином «плоский солитон»), представляющая собой суперпозицию одинаковых диссипативных метастабильных солитонов [84, 87] в смежных рядах частиц, ориентированных вдоль любой из трех кристаллографических осей треугольной решетки (рисунк 2.1 б). Солитоны в каждом ряду могут рассматриваться как сгущения частиц (максимумы плотности), которые локализованы как минимум на трех частицах и движутся вдоль соответствующего ряда. При этом солитоны в соседних рядах возбуждены таким образом, что в целом формируют фронт волны, поперечный направлению распространения.

Скорость солитонов при значениях параметров $b\sigma = 5, \mu = 1.41, v_0 = 0.14\omega_M\sigma$ составляет примерно $|\vec{v}_{sol}| \approx 1.3$ в единицах $\omega_M\sigma$ в системе координат, неподвижной относительно ячейки моделирования. При этом скорость солитона в лабораторной системе координат представляет собой сумму $\vec{v}_{sol} + \vec{v}_l$, где \vec{v}_l - скорость ячейки моделирования, зависящая от числа солитонов и произвольно ориентированная относительно кристаллографических осей. Для заданных значений параметров $b\sigma, \mu$ и v_0 скорость солитонов и их амплитуда не зависит от начальных условий: в рассматриваемой системе солитоны локализованы на упорядоченном множестве частиц, для которых в данный момент времени проекция вектора скорости на направление распространения солитона отличается по знаку от проекции средней скорости ансамбля, но примерно равна ей по величине. Эти проекции не могут сильно превосходить v_0 , поскольку нелинейное трение демпфирует быстрые частицы и ускоряет медленные.

В простейшем случае в ячейке моделирования с периодическими граничными условиями возбужден только один солитон (рисунок 2.3 а). Однако, в общем случае возможно существование нескольких солитонов, как, например, показано на рисунке 2.3 б. Рассматриваемые солитоноподобные возмущения являются метастабильными состояниями, время жизни которых зависит от их начального пространственного распределения, как и в одномерной цепочке [84], а также степени «возмущенности» решетки, обусловленной, например, тепловыми флуктуациями, а в компьютерном эксперименте – неточностями численного моделирования.

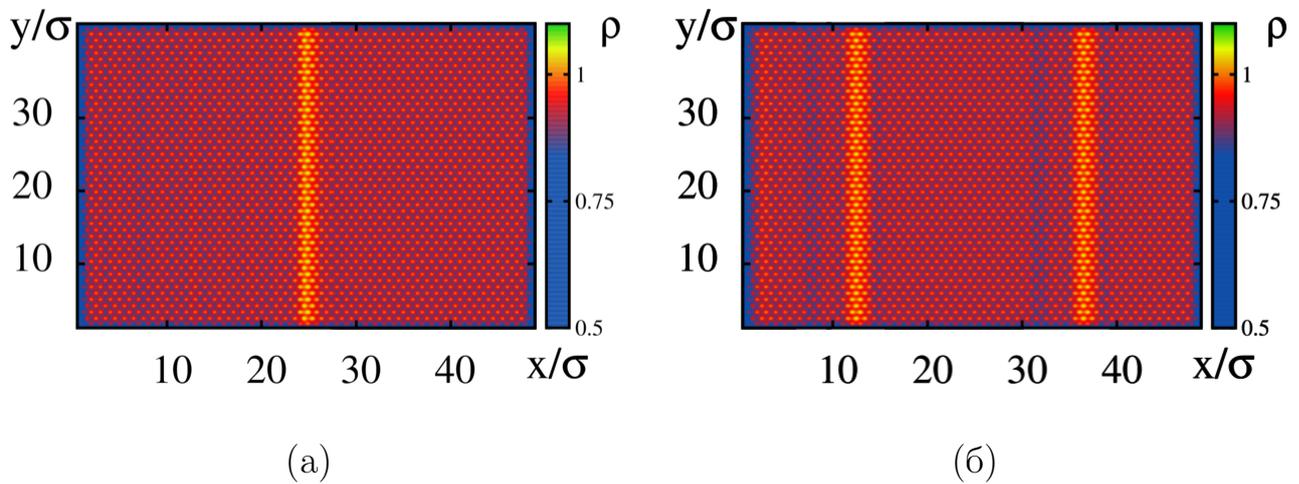


Рисунок 2.3. Мгновенные пространственные распределения плотности частиц в треугольной решетке 48×48 частиц при возбуждении одного (а) и двух (б) солитонов, распространяющихся вдоль оси x . $b\sigma = 5$, $\mu = 1.41$, $v_0 = 0.14\omega_M\sigma$.

Разрушение солитона связано с поперечной модуляционной неустойчивостью. Обнаружено, что если какая-либо частица получает в результате флуктуации небольшой толчок в направлении, перпендикулярном направлению распространения солитона, это возмущение со временем нарастает, в результате чего фронт деформируется и солитоны во всех рядах разрушаются.

Тем не менее, характерные времена жизни плоских солитонов достаточно большие – порядка 10^3 периодов Морзе-осцилляций. При использовании в компьютерном эксперименте ячейки моделирования ограниченного размера

солитоны могут сотни раз проходить по ячейке моделирования. В этом случае для количественного анализа динамических процессов в решетке удобно использовать такую характеристику, как структурный динамический фактор (СДФ) [103], которая ранее была введена в Главе 1 для одномерной цепочки.

В плоской волне достаточно выбрать один ряд частиц вдоль направления распространения солитонов и далее рассматривать этот ряд как одномерную цепочку, что позволяет применить для расчета СДФ формулу (1.10). Выбор того или иного ряда не влияет на результат, поскольку все ряды идентичны.

В таком случае, функция плотности (1.11) и ее Фурье-преобразования (1.12) вычисляются по аналогии с одномерной цепочкой. В используемой в настоящей Главе нормировке волновое число будет выражаться в величинах $1/\sigma$.

Результаты расчета СДФ представлены на рисунке 2.4 а-в. На графиках виден хорошо различимый пик на частоте, соответствующей времени прохождения солитонов по ячейке моделирования. В рассматриваемой ячейке, состоящей из 24×24 частиц, эта частота для одного солитона составляет $0.36\omega_M$ (рисунок 2.4 а). Соответственно, для двух равномерно распределенных солитонов частота в два раза выше и составляет $0.72\omega_M$ (рисунок 2.4 б). Таким образом, СДФ позволяет определить время периодического прохождения солитона по ячейке моделирования и, соответственно, скорость солитонов. Изменяя временное окно, по которому рассчитывается СДФ, можно определить время жизни солитона. Так, рисунок 2.4 в демонстрирует, как изменяется динамический структурный фактор при разрушении солитона: выраженный пик на частоте, соответствующей времени прохождения солитонов, отсутствует.

Кроме того, расчеты структурного динамического фактора для разных $k\sigma$ позволяют определить число солитонов, что показано на рисунке 2.4 г. Видно, что для случая двух солитонов наибольшую величину имеет пик, соответствующий волновому числу $k\sigma = \pi/6$ - то есть двум максимумам плотности в цепочке из 24 частиц.

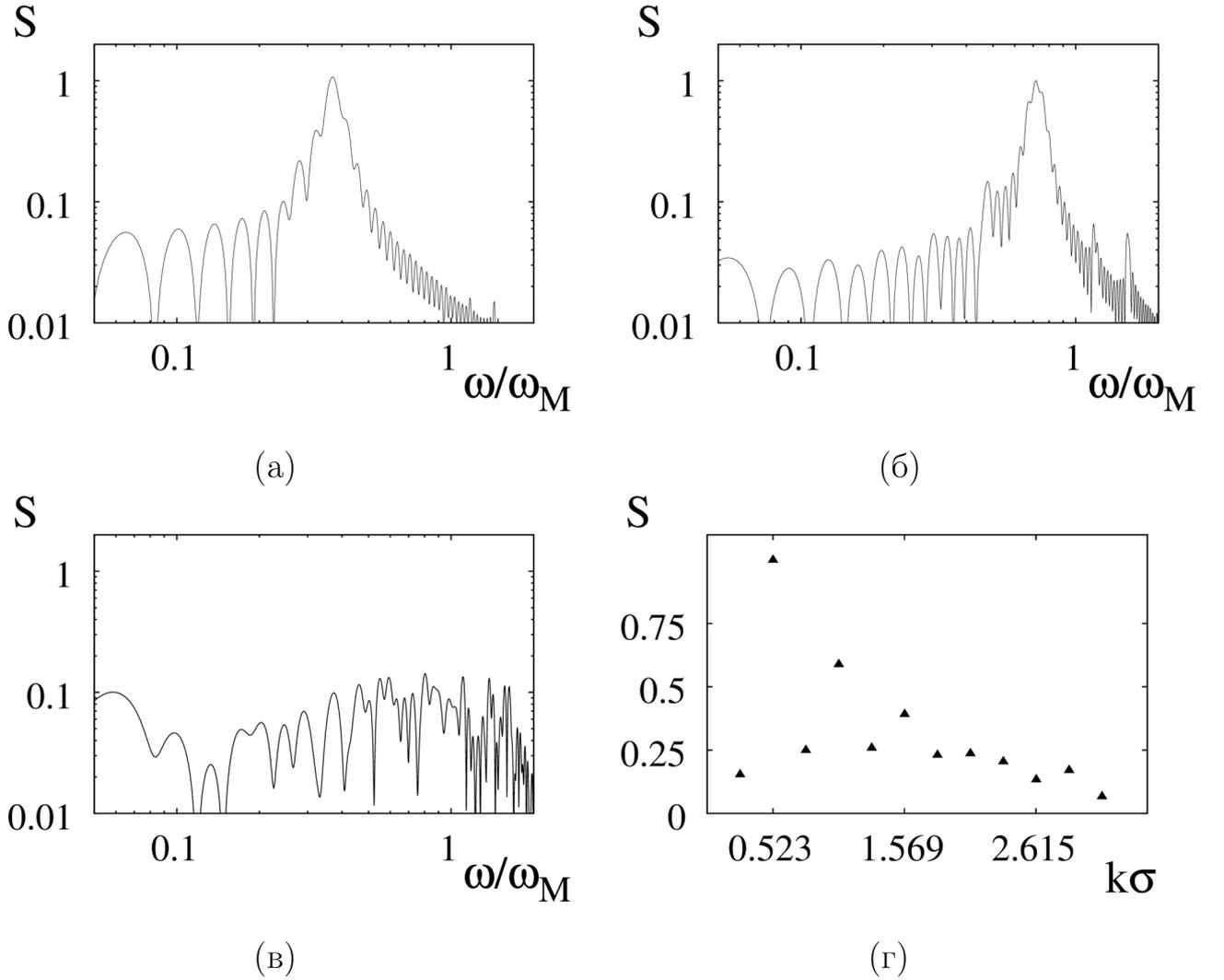


Рисунок 2.4. Структурный динамический фактор для ячейки моделирования из 24×24 частиц. (а) один солитон, волновое число $k\sigma = \pi/12$; (б) два солитона, волновое число $k\sigma = \pi/6$; (в) два солитона, временное окно для расчета СДФ выбрано после момента разрушения солитонов, волновое число $k\sigma = \pi/6$; (г) нормированная на максимум величина пика СДФ для разных волновых чисел в случае двух солитонов; максимум соответствует $k\sigma = \pi/6$.

$$b\sigma = 5, \mu = 1.41, v_0 = 0.14\omega_M\sigma.$$

Следует, однако, отметить, что ширина пиков СДФ в случае двумерной решетки значительно больше по сравнению с одномерной цепочкой. В одномерных цепочках реализуемы стационарные режимы с одним или несколькими солитонами. Периоды прохождения солитонов по цепочке не меняются во времени, за исключением ситуаций с неравномерным начальным распределением

солитонов. В двумерной решетке солитоноподобные возмущения не являются стационарными, их параметры (в частности, скорость) меняются, если система наблюдается в течение длительного времени, что приводит к уширению пиков на зависимостях СДФ от частоты.

Как было отмечено выше, состояние с неравномерным распределением солитонов (рисунок 2.5 а) является метастабильным. В течение длительного интервала времени солитоны удаляются друг от друга, и в итоге достигают равномерного распределения, поскольку отталкиваются друг от друга и стремятся максимально удалиться. Соответственно, метастабильное состояние с неравномерным распределением солитонов сначала трансформируется в другое метастабильное состояние с большим временем жизни.

Длительность процесса установления равномерного распределения солитонов приблизительно экспоненциально зависит от значений параметров, так же, как и в одномерной цепочке активных частиц [84], рассмотренной в Главе 1. На рисунке 2.6 представлена зависимость длительности метастабильной стадии от параметра μ для случая двух плоских солитонов в ячейке моделирования из 12×24 частиц, в начальный момент времени разделяемых двумя рядами частиц.

Видно, что при увеличении значения параметра μ длительность переходного процесса растет по экспоненте. Эти результаты качественно согласуются с данными, представленными выше для одномерной цепочки активных Морзе-частиц, а также в [84].

Еще один вид метастабильных состояний – плоские солитоны, фронт которых ориентирован параллельно одной из кристаллографических осей (рисунок 2.5 б), а направление распространения образует прямой угол с этой осью. Такие солитоны имеют малое время жизни вследствие, как показывают данные моделирования, более выраженной поперечной модуляционной неустойчивости. Поэтому большого интереса они не представляют.

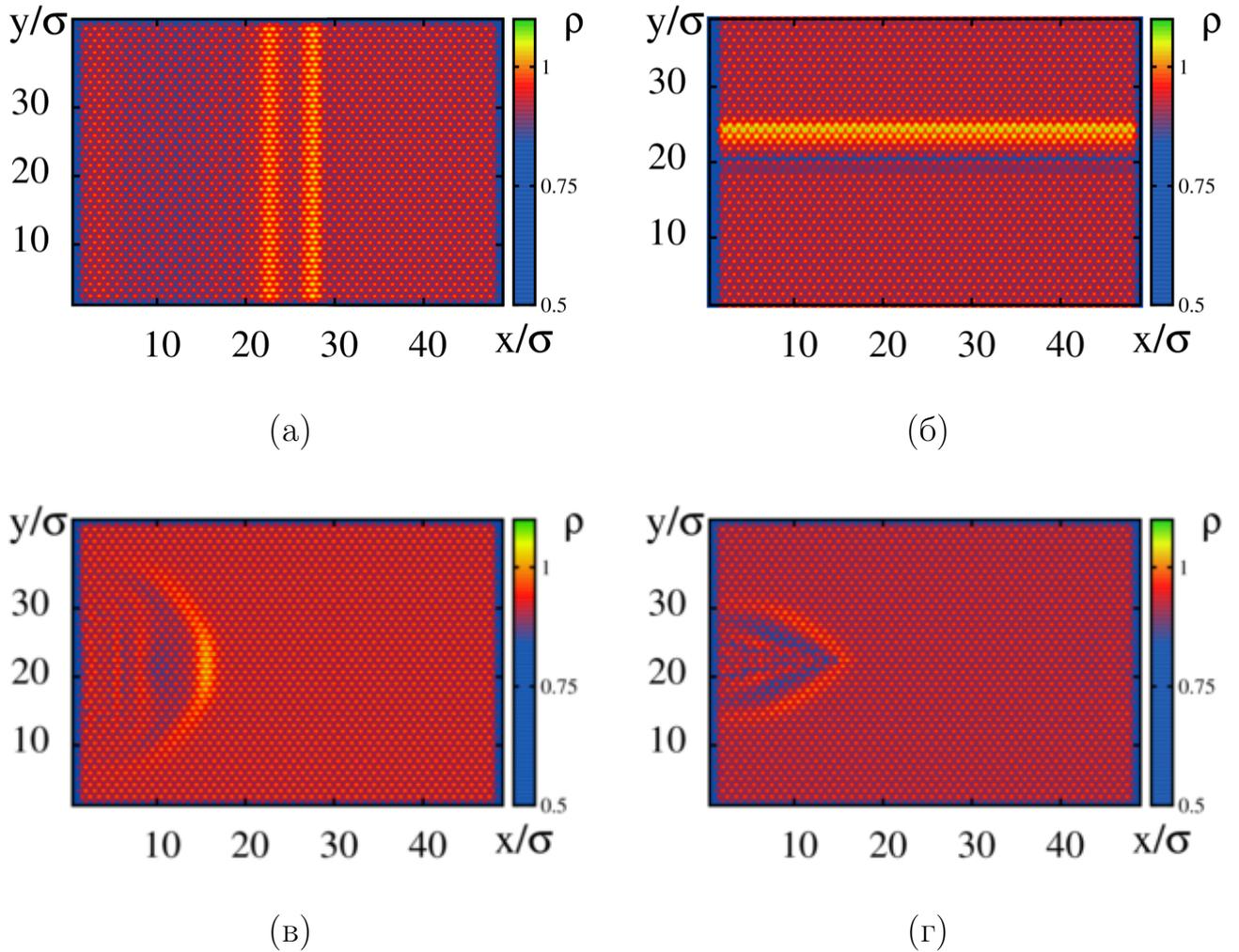


Рисунок 2.5. Пространственные распределения плотности для метастабильных состояний треугольной решетки 48×48 частиц: (а) пара плоских солитонов с неодинаковым расстоянием между максимумами плотности; (б) плоский солитон, фронт которого параллелен кристаллографической оси (ориентирован вдоль оси x), а направление распространения совпадает с биссектрисой угла между двумя другими осями (т.е. вдоль оси y); (в) подковообразный солитон, в начальный момент локализованный на 15 частицах; (г) квазиодномерный солитон. $b\sigma = 5, \mu = 1.41, v_0 = 0.14\omega_M\sigma$.

Кроме плоских волн, в двумерной решетке можно формировать локализованные возмущения в виде солитонов с фронтом конечной ширины (рисунок 2.5 в). Их время жизни линейно зависит от ширины фронта, как это показано на рисунке 2.7 а. Начальные условия для них аналогичны начальным условиям для

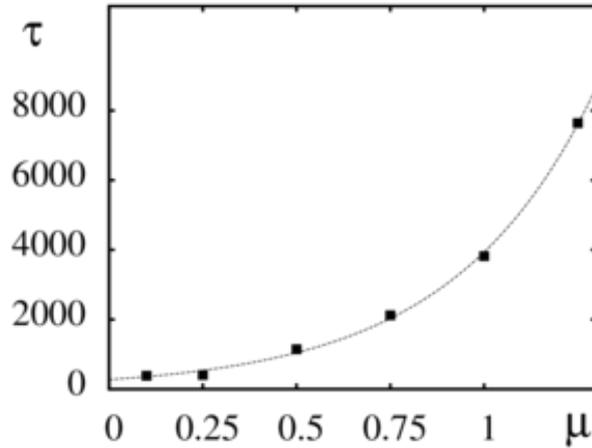


Рисунок 2.6. Зависимость времени установления равномерного распределения плоских солитонов от параметра μ (показана точками) и ее аппроксимация функцией вида $f(x) = \alpha + \beta e^{\gamma x}$ (линия) в цепочке из 12×24 частиц.

$$b\sigma = 5, v_0 = 0.14\omega_M\sigma$$

возбуждения M -солитонов или M -краудионов в консервативной решетке [35] – достаточно обеспечить начальный импульс частицам M смежных рядов вдоль какой-то кристаллографической оси, причем частицы выбираются так, что они образуют фронт, перпендикулярный направлению распространения.

В процессе распространения M -солитона частицы крайних рядов передают импульс не только в направлении распространения солитона, но и возмущают частицы в рядах, смежных с M -солитоном, теряя при этом энергию. В результате фронт сужается и деформируется, принимая подковообразную форму (рисунок 2.5 в), пока солитон полностью не исчезнет. В итоге решетка опять переходит в режим трансляции.

В предельном случае солитон может быть возбужден только в одном ряду. Такой тип возмущений представляет собой квазиодномерный солитон (рисунок 2.5 г). В рассматриваемой решетке, как и в консервативной решетке [30, 31] квазиодномерный солитон является локализованным метастабильным состоянием, по завершении переходных процессов трансформирующимся в трансляционную моду. Время жизни и длина пробега квазиодномерного солитона зависят от жесткости потенциала и начальной скорости v_{i0} возмущаемой частицы, как

это показано на рисунке 2.7 б. Существует некоторый диапазон значений начальной скорости, в котором длина пробега быстро нарастает с увеличением начальной энергии частиц. Однако при дальнейшем увеличении скорости длина трека перестает расти, а зависимость длины трека как функции начальной энергии достигает насыщения. Такое поведение объясняется демпфированием быстрых частиц под воздействием нелинейного трения.

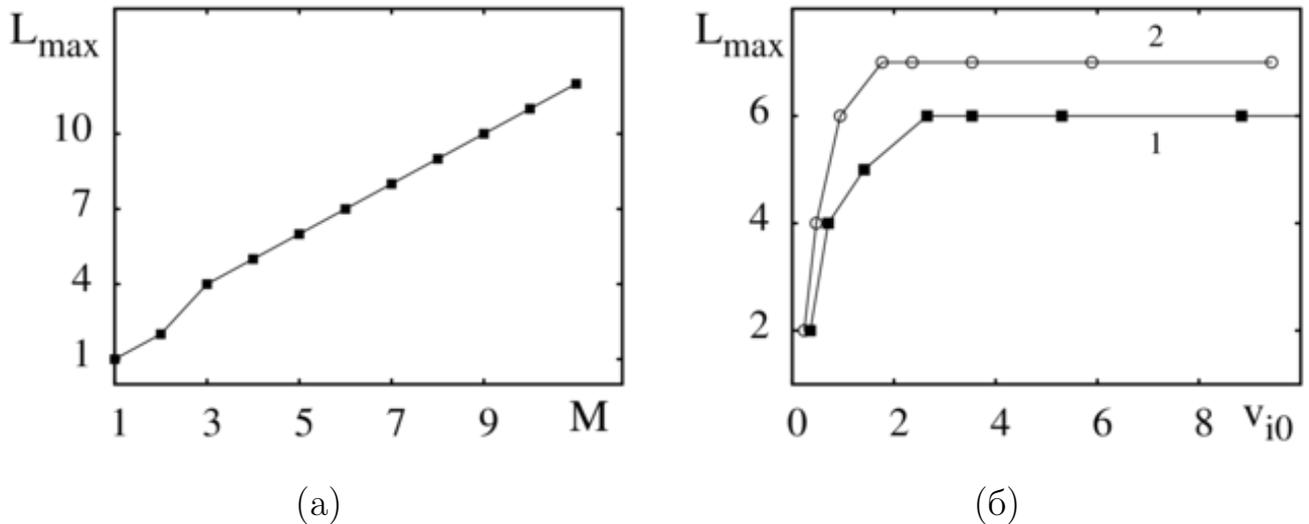


Рисунок 2.7. (а) Линейная зависимость длины трека L_{max} подковообразного солитона от начальной ширины фронта при $b\sigma = 5$, $\mu = 1.41$, $v_0 = 0.14\omega_M\sigma$; (б) зависимость длины трека квазиодномерного солитона от начальной скорости частицы при $b\sigma = 4$ (кривая 1) и $b\sigma = 6$ (кривая 2), $\mu = 1.41$, $v_0 = 0.14\omega_M\sigma$

При старте из состояния со стохастическим начальным распределением скоростей наблюдается случайный переходной процесс. Некоррелированные колебания частиц постепенно затухают под влиянием нелинейного трения и решетка переходит в стационарный режим трансляции. Время существования случайных колебаний зависит в большей степени от числа частиц в решетке и может достигать тысяч периодов осцилляций.

2.5 Формирование краудионов при асимптотических значениях параметров

Процессы возбуждения и распространения краудионов в консервативных Морзе-решетках на данный момент являются относительно изученными [33–35]. В частности, показано, что начальные условия, используемые для возбуждения краудиона, очень простые: i -той частице задается начальная скорость v_{i0} в направлении вдоль любой из кристаллографических осей. Если скорость невелика, возбуждается квазиодномерный солитон (описанное выше локализованное возбуждение, не сопровождаемое переносом массы). Но если начальная скорость достаточно большая для того, чтобы частица могла преодолеть потенциальный барьер и «оторваться» от своего положения в решетке, формируется сверхзвуковой краудион [35].

При распространении краудиона возникают два дефекта: компрессия частиц, вызванная наличием «лишней» междоузельной частицы, и вакансия, локализованная в месте, соответствующем начальному положению возмущаемой частицы. Таким образом, краудион представляет собой своего рода солитон, распространение которого сопровождается переносом массы (частицы) между узлами решетки.

Однако, процесс формирования и распространения краудиона в активных решетках имеет определенную специфику. Во-первых, изменяется вид начальных условий. Теперь для запуска краудиона необходимо, чтобы у всех частиц была скорость \vec{v}_0 , направленная вдоль кристаллографической оси, а скорость возмущаемой частицы v_{i0} должна быть ориентирована в противоположном направлении, поскольку состояние с нулевой скоростью у частиц с рэлеевским трением является неустойчивым.

Во-вторых, следует учитывать, что при больших значениях скорости частиц трение можно считать пропорциональным квадрату скорости. При этом

быстрые частицы (т.е. те, для которых $|\vec{v}_i| > v_0$) становятся передемпфированными и быстро замедляются.

Начнем изучение краудионов с анализа динамики решеток с небольшим коэффициентом трения $\mu = 0.05$. (Поведение таких решеток практически повторяет поведение консервативных решеток.)

Пусть частица с номером $i = 48 \cdot 5 + 3 = 243$, расположенная третьей слева в ряду номер 5 решетки из 12×48 частиц, получает начальную скорость $v_{i0} = 1.27\omega_M\sigma$ в направлении оси x . Как показано на рисунке 2.8 а, поведение краудиона в этом случае близко к поведению краудионов в консервативной решетке: первые 17 частиц обладают достаточной энергией, чтобы преодолеть потенциальный барьер и сдвинуться вправо на расстояние σ . Частицы с номерами j после прохождения краудиона занимают равновесные положения, соответствующие частицам с номерами $j + 1$, и без внешнего воздействия не могут вернуться к своим невозмущенным координатам. При этом образуется вакансия на месте частицы с номером $i = 243$.

Следует также отметить, что если коэффициент трения мал ($\mu \lesssim 0.1$), асимметрия распространения краудиона практически не фиксируется, поскольку решетка по своим свойствам близка к консервативной.

В другом асимптотическом случае, когда коэффициент μ достаточно большой, частицы становятся «активными», а поведение цепочки значительно отличается от консервативного случая. Во-первых, возникает сильная асимметрия распространения возмущений. Солитоны и краудионы могут распространяться только в том случае, если существует компонента средней скорости ансамбля, направленная против скорости краудиона.

Во-вторых, динамика активных частиц принципиально зависит от параметра v_0 . Соотношение между стационарным значением кинетической энергии частицы $mv_0^2/2$ и высотой потенциального барьера Пайерлса-Набарро U_{PN} [104] определяет динамику возмущений в решетке. Таким образом, для больших значений μ необходимо рассмотреть два случая – когда стационарная скорость ма-

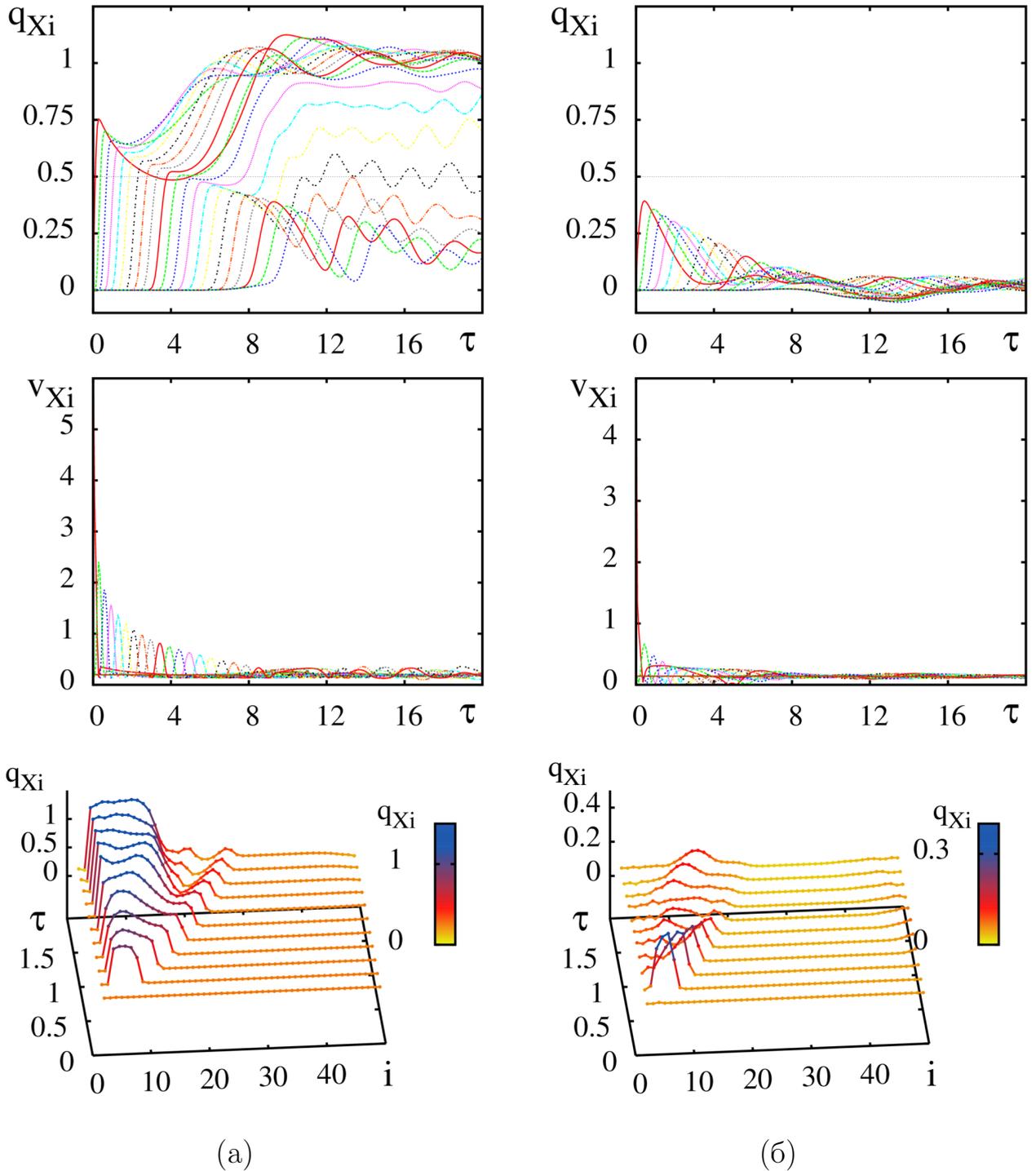


Рисунок 2.8. Верхний ряд – смещения частиц $i = 243..263$ как функция от времени; средний ряд – скорости тех же частиц как функция от времени; нижний ряд – эволюция пространственного профиля краудиона (солитона) во времени, цветом показаны смещения частиц от их положений равновесия в движущейся решетке моделирования; $v_{i0} \approx 7\omega_M\sigma$; (а) диссипативный краудион, $\mu = 0.07$, $v_0 = 0.56\omega_M\sigma$; (б) диссипативный солитон, $\mu = 0.7$, $v_0 = 0.14\omega_M\sigma$.

ла ($mv_0^2/1 < U_{PN}$) и когда она относительно велика ($mv_0^2/1 < U_{PN}$). Барьер Пайерлса-Набарро соответствует уровню энергии, необходимой для перемещения дефекта решетки (вакансии) на соседнюю ячейку.

Если стационарная скорость мала, $v_0 \approx 0.1$, даже при относительно малых значениях $\mu \gtrsim 0.1$ возбуждение краудионов невозможно при любых значениях начальной скорости (рисунок 2.8 б). При малой стационарной скорости частицы с большой начальной энергией за короткий промежуток времени релаксируют к состоянию с кинетической энергией $mv_0^2/2$, поскольку коэффициент трения для быстрых частиц пропорционален квадрату скорости в соответствии с уравнением (2.1). В результате частицы теряют большую часть энергии еще до того, как приблизятся к потенциальному барьеру. Зависимость минимального значения v_0 , начиная с которого возбуждение краудионов становится возможным, от параметра μ при $v_{i0} = 7\omega_M\sigma$ представлена на рисунке 2.9 а; существование краудионов возможно только при значениях μ и v_0 из области пространства параметров, расположенной выше представленной кривой (при заданной начальной скорости $v_0 = 0.84\omega_M\sigma$).

В противоположном случае, когда v_0 относительно велико, то есть когда стационарное значение кинетической энергии допускает «отрыв» частицы, следует рассмотреть две различных ситуации. Если начальная скорость больше стационарной, $|v_{i0}| \gg v_0$, краудион можно возбудить при любых значениях параметра μ (рисунок 2.10 а). В противном случае, когда $|v_{i0}| < v_0$, возбуждение краудиона так же возможно, но только при больших значениях коэффициента трения $\mu > 6.5$ (для $v_0 = 0.848\omega_M\sigma$) (рисунок 2.10 б). Соответствующая зависимость минимального значения стационарной скорости v_0 , начиная с которого можно возбудить краудион, от коэффициента отрицательного трения μ при начальной скорости возмущаемой частицы $v_{i0} = 7\omega_M\sigma$ приведена на рисунке 2.9 б.

Когда μ велико, скорость частиц быстро возрастает. В результате частицы с малой начальной энергией быстро ускоряются и успевают набрать кинетическую энергию, необходимую для преодоления барьера Пайерлса-Набарро.

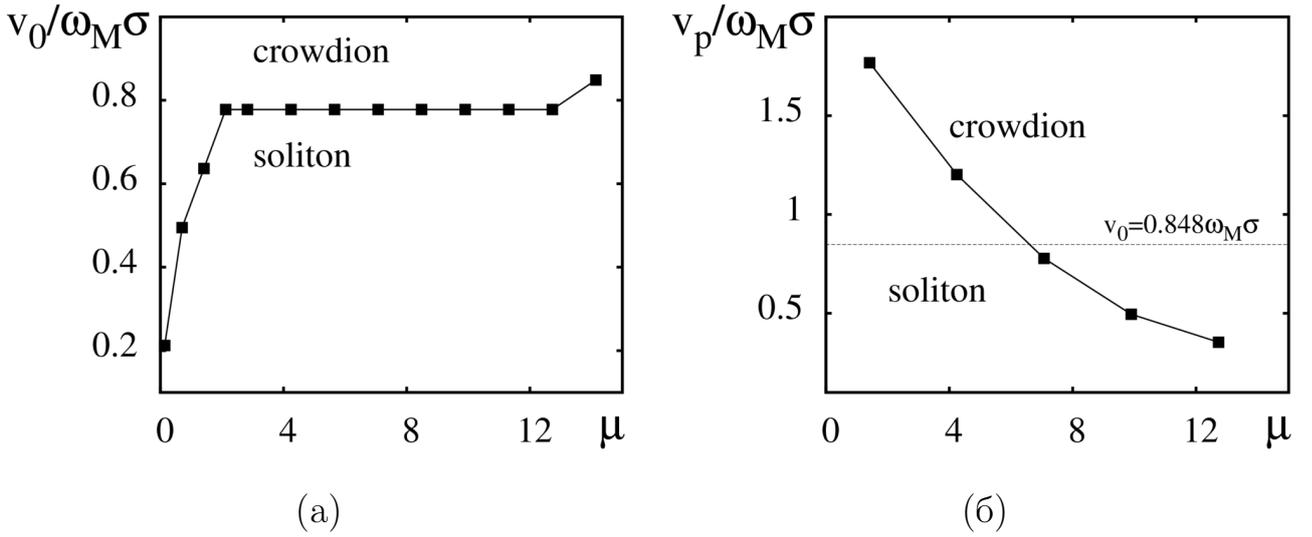


Рисунок 2.9. (а) зависимость минимального значения стационарной скорости v_0 , начиная с которого можно возбудить краудион, от коэффициента отрицательного трения μ при начальной скорости возмущаемой частицы $v_{i0} = 7\omega_M\sigma$; (б) зависимость минимального значения начальной скорости возмущаемой частицы v_{i0} , начиная с которого возможно возбуждение краудиона, от коэффициента отрицательного трения μ при $v_0 = 0.848\omega_M\sigma$

тическую энергию, достаточную для преодоления барьера. Однако, при этом вакансия появляется не в первоначально возмущенной ячейке с номером i , а в ячейке с номером $i + 3 \dots 5$, поскольку частица набирает необходимую энергию не сразу, а спустя 3-5 соударений, что соответствует времени релаксации скорости.

Кроме того, при больших μ и малых v_{i0} динамика диссипативного солитона отличается от динамики краудионов в консервативной решетке. После прохождения краудиона частицы смещаются не на равновесное расстояние, а на величину $\sigma/2$ (рисунок 2.11). Такое положение частиц не соответствует потенциальному минимуму, однако большой коэффициент трения не позволяет частицам быстро сместиться в один из минимумов. Как показано на рисунке 2.11, в ячейке моделирования с периодическими граничными условиями время жизни такого краудиона может быть достаточно большим. Это позволяет краудионам множество раз проходить по решетке, каждый раз смещая частицы на расстояние $\sigma/2$ (рисунок 2.11). За счет больших значений скорости частицы

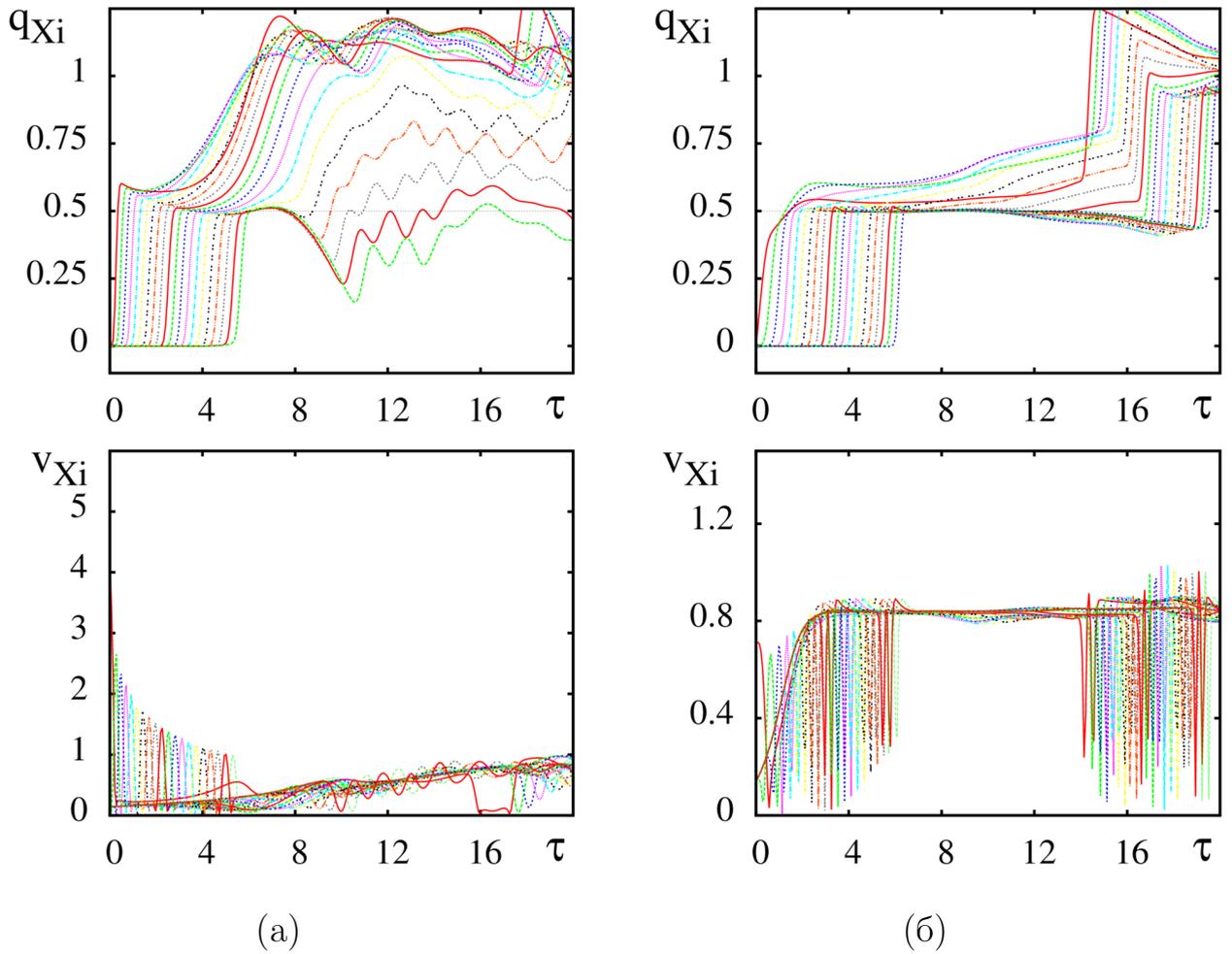


Рисунок 2.10. Возбуждение диссипативного краудиона. Верхний ряд – смещения частиц $i = 243..263$ как функция времени; средний ряд – скорости тех же частиц как функция времени; $v_0 = 0.84\omega_M\sigma$; (а) $\mu = 1.4$, $v_{i0} \approx 4.2\omega_M\sigma$; (б) $\mu = 12.7$, $v_{i0} \approx 0.7\omega_M\sigma$

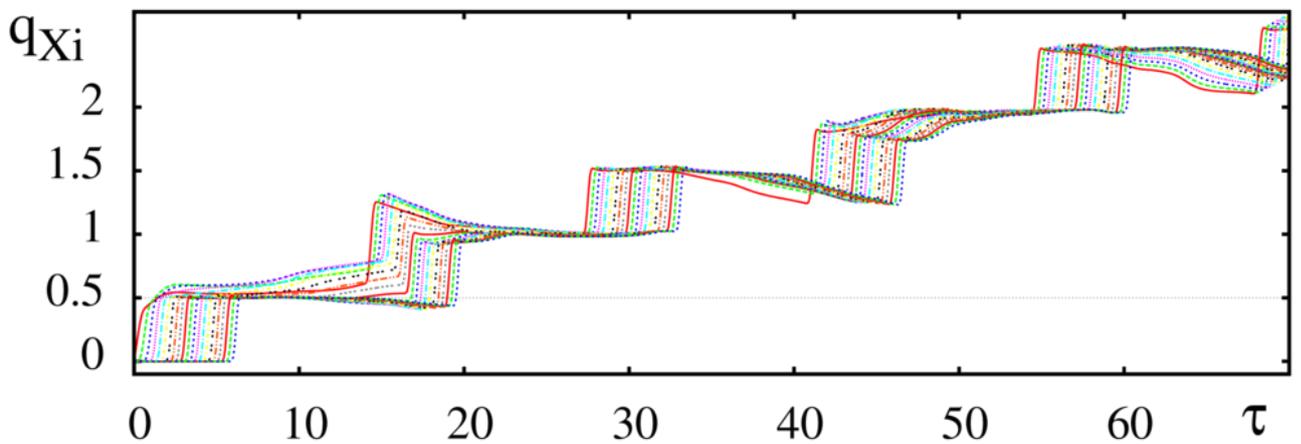


Рисунок 2.11. Возбуждение диссипативного краудиона. Смещения частиц $i = 243..263$ как функция времени; $\mu = 12.6$, $v_0 = 0.84\omega_M\sigma$, $v_{i0} \approx 0.7\omega_M\sigma$.

краудион практически не «успевает» возмутить соседние ряды решетки, поэтому энергия почти не рассеивается. Небольшое количество энергии, рассеиваемое краудионом, компенсируется за счет отрицательного трения. Разрушение краудиона связано не с падением кинетической энергии до уровня, меньшего, чем высота потенциального барьера, а с явлениями модуляционной неустойчивости. В идеализированном случае краудион, распространяющийся по невозмущенной бесконечно длинной решетке с большим коэффициентом трения μ и достаточно большой стационарной скоростью v_0 , будет существовать неограниченно долго.

Таким образом, распространение краудионов исследовано для трех характерных наборов значений параметров, задающих различные типы динамики. Эти наборы соответствуют динамике решетки с низкой «активностью» (малые значения коэффициента нелинейного трения μ), динамике активной решетки при небольшой стационарной скорости и динамике активной решетки при большой стационарной скорости.

Когда коэффициент трения μ мал, динамика решетки активных частиц аналогична динамике консервативной решетки. При достаточно большой начальной скорости можно возбудить диссипативный краудион, способный распространяться вдоль любой кристаллографической оси в обоих направлениях независимо от величины средней скорости ансамбля. Если первоначальной энергии частицы недостаточно для преодоления потенциального барьера, полученное возмущение будет являться диссипативным солитоном (т.е. не будет сопровождаться переносом частиц между ячейками решетки).

В случае, когда коэффициент трения большой, а стационарное значение кинетической энергии меньше высоты потенциального барьера Пайерлса-Набарро, возбуждение краудионов невозможно; возникают только диссипативные солитоны, после исчезновения которых решетка переходит в режим трансляции без дефектов.

Наконец, когда и отрицательное трение, и стационарная кинетическая энергия велики, в решетке возможно возбуждение диссипативных краудионов.

Минимальная необходимая для их запуска начальная энергия уменьшается с ростом μ , а сами краудионы могут существовать долго (сотни единиц безразмерного времени), поскольку отрицательное трение восполняет потери кинетической энергии на излучение фононов.

2.6 Выводы по второй главе

В главе представлены результаты анализа динамики плотноупакованной двумерной решетки активных частиц. Исследованы основные стационарные и метастабильные состояния, определены необходимые для их возбуждения начальные условия и области значений параметров. Основные результаты следующие.

1. В решетке активных частиц с треугольной симметрией набор стационарных мод (аттракторов) представлен трансляционными модами (движением решетки как целого) как с равномерным распределением частиц в пространстве, так и трансляционными модами с дефектами.
2. В треугольной решетке возможно возбуждение нескольких типов метастабильных состояний, трансформирующихся со временем в стационарные состояния. К ним относятся одиночные плоские солитоны и состояния с несколькими равномерно распределенными плоскими солитонами (время жизни порядка $10^3/\omega_M$), подковообразные M -солитоны (время жизни порядка $10^2/\omega_M$) и квазиодномерные солитоны. Все перечисленные метастабильные солитоны распространяются вдоль кристаллографических осей.
3. При старте со стохастических начальных возмущений наблюдаются затухающие случайные колебания, которые также можно отнести к метастабильным состояниям.

4. Плоские солитоны в случае, когда они неравномерно распределены по решетке, трансформируются либо сразу в трансляционную моду, либо сначала в метастабильное состояние с равномерным распределением солитонов по ячейке моделирования, которое затем трансформируется в стационарную трансляционную моду.
5. Формирование локализованных метастабильных возбуждений – диссипативных краудионов – возможно в определенных диапазонах значений параметров. Краудионы в активных решетках обладают большим временем жизни по сравнению с консервативными краудионами.

Глава 3. ДИНАМИКА ДВУМЕРНОГО НЕУПОРЯДОЧЕННОГО АНСАМБЛЯ НЕВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ, ЭВОЛЮЦИОНИРУЮЩИХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ОБЩЕГО ПОЛЯ

3.1 Введение

Ансамбли, рассмотренные в Главах 1 и 2, представляют собой так называемые плотные (плотноупакованные) ансамбли, или решетки. В подобных решетках взаимодействие между элементами зависит от расстояния, а сами элементы образуют в той или иной степени упорядоченную структуру.

Однако, существует и другой тип ансамблей активных частиц, не связанных друг с другом посредством потенциальных сил. Связь частиц в таких ансамблях может осуществляться, например, через общее поле скоростей. Иначе говоря, каждая частица стремится выровнять свою скорость со средней скоростью ансамбля (или его части).

Исследование поведения ансамблей в рамках модели активных броуновских частиц (АБЧ) является типичной проблемой статистического описания многомерных неравновесных нелинейных систем. В исключительных случаях удается получить аналитическое описание динамики системы; например, для ансамблей с очень большим числом элементов возможно применение подходов гидродинамики для описания поведения системы. Однако стандартным исследова-

довательским инструментом при применении модели АБЧ является численное моделирование.

В настоящей Главе излагаются результаты исследования динамики относительно малого ансамбля АБЧ со взаимодействием через общее поле скоростей. По причине небольшого числа частиц условия применения гидродинамического подхода при описания динамики малого ансамбля могут выполняться недостаточно точно. В то же время использование модели малого ансамбля частиц позволяет выявить тенденции эволюции динамики при возрастании числа элементов ансамбля и дает больше возможностей для проведения численных экспериментов.

3.2 Описание и уравнения модели

Исследуется поведение ансамбля идентичных двумерных активных броуновских частиц, взаимодействие которых происходит таким образом, что частицы ансамбля стремятся выровнять свои скорости со средней скоростью ансамбля [54, 82, 83]. Говоря другими словами, частица испытывает тем большее воздействие со стороны ансамбля, чем сильнее ее скорость отличается от средней скорости ансамбля. Кроме того, на частицу влияет множество некоррелированных внешних факторов, что позволяет представить это воздействие в виде стохастической силы (белого гауссова шума). Тогда динамика i -той частицы ($i = 1, \dots, N$) с массой $m_i = m$ определяется уравнениями Ланжевена:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = -\gamma(\vec{v}_i) \vec{v}_i + \tilde{\mu}(\vec{u}_A - \vec{v}_i) + \vec{\eta}_i(t). \quad (3.1)$$

Здесь \vec{r}_i и $\vec{v}_i = \frac{d\vec{r}_i}{dt}$ – радиус-вектор и скорость i -той частицы, γ – зависящий от модуля скорости коэффициент трения, $\tilde{\mu}$ – коэффициент взаимодействия, функция η описывает стохастическое воздействие, \vec{u}_A – средняя по ансамблю скорость частиц. Взаимодействие частиц осуществляется посредством линей-

ного механизма выравнивания скоростей. Это означает, что частица с номером i стремится выровнять свою скорость со средней скоростью частиц ансамбля. Если средняя скорость $\vec{u}_A = 0$, взаимодействие между частицами сводится к вязкому трению и замедляет частицы. Локальная (либо глобальная) средняя скорость вычисляется следующим образом:

$$\vec{u}_A = \frac{1}{N_{Ai}} \sum_{j=0}^{N_{Ai}} \vec{v}_j, \quad (3.2)$$

где N_{Ai} – множество взаимодействующих частиц, в общем случае локального взаимодействия – частиц из некоторой области A_i . При глобальной связи в A_i входят все частицы ансамбля. Активное поведение частиц определяется коэффициентом трения $\gamma(\vec{v}_i)$, который принимает положительные либо отрицательные значения в зависимости от скорости частицы. Предполагается, что коэффициент $\gamma(\vec{v}_i)$ описывается законом Шинбайна-Грулера [54, 59], т.е.

$$-\gamma(\vec{v}_i)\vec{v}_i = -\alpha\left(1 - \frac{v_0}{|\vec{v}_i|}\right)\vec{v}_i = \alpha(v_0 - |\vec{v}_i|)\vec{e}_{i,v}, \quad (3.3)$$

где v_0 – величина, к которой линейно релаксирует скорость каждой частицы, параметр α характеризует величину трения (скорость релаксации). Единичный вектор $\vec{e}_{i,v}$ указывает направление скорости частицы. Как следует из уравнения (3.3), частицы с малыми скоростями $|\vec{v}_i| < v_0$ ускоряются в направлении движения, а с большими скоростями $|\vec{v}_i| > v_0$ – тормозятся. В детерминированном случае время релаксации скорости $\tau_\alpha = m/\alpha$. Сила трения при скорости v_0 равна нулю: $\gamma(v_0) = 0$.

Слагаемое $\vec{\eta}_i(t)$ в уравнении (3.1) задает суперпозицию случайных сил, воздействующих на i -тую частицу. Единичный вектор $\vec{e}_{i,v}$ указывает направление скорости, $\vec{e}_{i,\phi}$ – перпендикулярен к скорости:

$$\vec{\eta}_i(t) = \sqrt{2d_E} \begin{pmatrix} \xi_{i,x}(t) \\ \xi_{i,y}(t) \end{pmatrix} + \sqrt{2d_v}\xi_{i,v}(t)\vec{e}_{i,v}(t) + \sqrt{2d_\phi}\xi_{i,\phi}(t)\vec{e}_{i,\phi}(t). \quad (3.4)$$

Первое слагаемое описывает аддитивный шум, действующий на обе компоненты вектора скорости \vec{v}_i с интенсивностью d_E . Он аналогичен обычным броуновским

флуктуациям, или тепловому шуму, и никаким образом не зависит от движения частиц.

Оставшиеся два слагаемых описывают мультипликативный шум, влияющий на величину скорости (компонента с интенсивностью d_v) и ее направление (компонента с интенсивностью d_ϕ). Случайный процесс $\xi_{i,\zeta}(t)$, $\zeta \in \{E, v, \phi\}$ – это белый Гауссов шум с нулевым средним. Уравнения 3.1, записанные в безразмерных переменных \vec{r} , t и \vec{v} ,

$$\frac{\alpha}{mv_0}\vec{r} \rightarrow \vec{r}, \quad \frac{\alpha}{m}t \rightarrow t, \quad \frac{\vec{v}}{v_0} \rightarrow \vec{v}, \quad (3.5)$$

имеют следующий вид:

$$\frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2} = \gamma(1 - |\vec{v}_i|)\vec{e}_{i,v} + \mu(\vec{u}_{A_i} - \vec{v}_i) + \sqrt{2D_E} \begin{pmatrix} \xi_{i,x} \\ \xi_{i,y} \end{pmatrix} + \sqrt{2D_v}\xi_{i,v}\vec{e}_{i,v} + \sqrt{2D_\phi}\xi_{i,\phi}\vec{e}_{i,\phi}, \quad (3.6)$$

где слагаемое $(1 - |\vec{v}_i|)\vec{e}_{i,v}$ соответствует кусочно-линейному трению (3.3), записанному в безразмерных переменных, μ – безразмерный коэффициент взаимодействия, \vec{u}_{A_i} – средняя скорость ансамбля в безразмерных единицах, $D_E = \frac{d_E}{m\alpha v_0^2}$ – интенсивность независимых источников аддитивного шума $\xi_{i,x}$, $\xi_{i,y}$, воздействующих на безразмерные координаты частиц, $D_v = \frac{d_v}{m\alpha v_0^2}$ и $D_\phi = \frac{d_\phi}{m\alpha v_0^2}$ – интенсивности источников мультипликативного шума $\xi_{i,v}$ и $\xi_{i,\phi}$, воздействующих на величину и направление безразмерной скорости частиц, соответственно. В уравнения входят преобразованные источники шума $\xi(t') = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}\xi(t)$. Решение системы безразмерных уравнений (3.6) зависит от коэффициента взаимодействия μ и трех величин интенсивности шума D_E, D_v, D_ϕ .

Для описания поведения очень большого ансамбля активных броуновских частиц можно применить гидродинамический подход, в рамках которого ансамбль движущихся частиц представляется в виде непрерывного гидродинамического потока. Уравнение для совместной плотности вероятности координат и компонент скорости выводится непосредственно из уравнений Ланжевена. Такой подход применялся для анализа модели (3.6) динамики АБЧ с выравниванием скорости в одномерном [68] и двумерном [69] ансамблях. Ниже кратко

изложено описание поведения ансамбля с позиций гидродинамики [54, 83], что позволяет сопоставить результаты численного моделирования с теоретическими расчетами.

Пусть $p(\vec{r}_j, \vec{v}_j, t) d\vec{r}_j d\vec{v}_j$ – вероятность обнаружить j -ю частицу в момент времени t со скоростью в интервале $[\vec{v}_j, \vec{v}_j + d\vec{v}_j]$ и в области пространства $[\vec{r}_j, \vec{r}_j + d\vec{r}_j]$. Плотность вероятности для одной частицы $p(\vec{r}_j, \vec{v}_j, t)$ может быть получена из совместной плотности вероятности $p(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_N, t)$ в результате интегрирования по координатам и скоростям всех частиц, кроме j -той. Так как все частицы находятся в одинаковых условиях, при решении индекс не используется. Более подробно методика решения изложена в [54]. Для пространственно однородного стационарного ансамбля в [54] получена система однородных уравнений для средней скорости \vec{u} и компонент тензора температуры $T_{\parallel, \perp}$, который характеризует интенсивность флуктуаций динамических переменных. Показано, что эти уравнения могут иметь два устойчивых решения. Одно из них соответствует неупорядоченному поведению ансамбля с нулевой средней скоростью и конечными флуктуациями:

$$\begin{aligned} |\vec{u}_1| &= 0; \\ T_1 &= \frac{2D_E + D_v}{1 + \mu} + 0.5(1 + \mu)^{-2} (1 \pm \sqrt{1 + 4(2D_E + D_v)(1 + \mu)}). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Оно устойчиво выше некоторого критического уровня шума и ниже критической силы связи (взаимодействия частиц). Другое решение соответствует упорядоченному состоянию ансамбля:

$$\begin{aligned} |\vec{u}_2| &= \sqrt{0.5(1 + \sqrt{1 - 4D_\phi}) - D_\phi - \frac{D_\phi + D_v + 2D_E}{\mu}}; \\ T_2 &= \frac{D_\phi + D_v + 2D_E}{\mu}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

В этом случае при нулевой интенсивности всех источников шума получаем значения $|\vec{u}_2| = 1; T_2 = 0$. Такое решение означает, что все частицы движутся со стационарной скоростью $|\vec{v}_i| = 1$. Оно устойчиво при малом шуме и силь-

ном взаимодействии. При слабом взаимодействии $\mu < 1$ теория предсказывает непрерывный переход средней скорости $|\vec{u}|$ от значения, соответствующего упорядоченному состоянию, к значению, соответствующему неупорядоченному (рисунок 3.1,а). В случае сильного взаимодействия $\mu > 1$ и небольшого уровня аддитивного шума возникает новый режим (рисунок 3.1,б). Для этого режима характерен скачкообразный переход «порядок–беспорядок» при изменении интенсивности шума D_ϕ , который влияет только на направление движения частиц. Более того, переходной процесс заканчивается установлением одного из нескольких возможных стабильных состояний в зависимости от начальных условий, то есть появляется бистабильность.

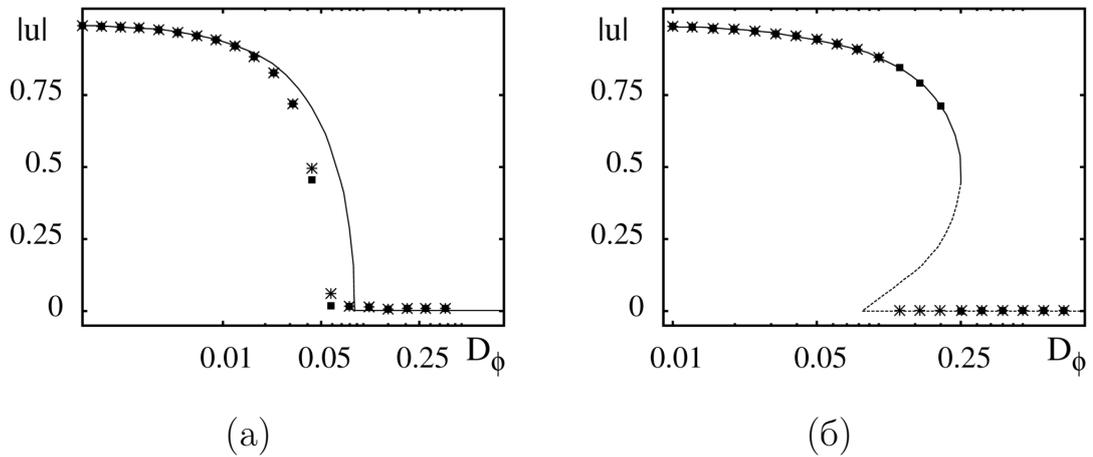


Рисунок 3.1. Зависимость модуля средней скорости от интенсивности влияющего на направление движения частицы шума, полученная аналитически в рамках гидродинамического подхода [54] при сильном взаимодействии и слабом аддитивном шуме (а) и при сильном аддитивном шуме и слабом взаимодействии (б). Сплошная кривая соответствует теоретическому расчету в рамках гидродинамического подхода, значками обозначены результаты численного моделирования динамики ансамбля из 10000 частиц из работы [54]: крестики соответствуют упорядоченному начальному состоянию; квадратики – неупорядоченному.)

Приведенные выше теоретические результаты, полученные для большого ансамбля частиц в [54] и кратко изложенные в [83], свидетельствуют о наличии

в ансамбле индуцированного шумом перехода: при увеличении интенсивности влияющего на направление движения частиц шума D_ϕ наблюдается переход от упорядоченного состояния к неупорядоченному, который может сопровождаться явлением бистабильности в некоторой области значений D_ϕ .

Однако изложенные теоретические результаты могут неадекватно отражать поведение ансамбля, если число его элементов недостаточно велико.

В связи с этим, возникает вопрос о границах применимости гидродинамического подхода. Цель исследований, результаты которых представлены в настоящей Главе – определить, как ведет себя малый ансамбль с количеством частиц $\approx 10^d$ и менее, где d – размерность пространства; выяснить, как влияет количество частиц на наличие области бистабильности и на индуцированный шумом переход «порядок–беспорядок», а также установить связь между динамикой ансамбля и статистическими характеристиками одной частицы.

Для исследования особенностей динамики малых ансамблей численно моделировался ансамбль (3.6) из 10–300 частиц на плоскости с периодическими граничными условиями. Взаимодействие между частицами полагалось «глобальным»: в (3.2), $N_{Ai} = N$, то есть суммирование происходит по всему ансамблю, что позволяет исключить влияние граничных условий.

Поведение малого ансамбля исследуется с учетом влияния, оказываемого аддитивным шумом различной интенсивности. При этом влияние мультипликативного шума, воздействующего на модуль скорости частицы, не учитывается ($D_v = 0$). Численное интегрирование осуществляется модифицированным методом Эйлера – Коши [105] с шагом $\Delta t = 0.005$, с учетом источников шума.

3.3 Индуцированный шумом переход между стационарными состояниями ансамбля

Для обнаружения индуцированного шумом перехода «порядок-беспорядок» в ансамбле из небольшого количества активных частиц необходимо, в первую очередь, ввести некую количественную характеристику упорядоченности и определить понятия «порядка» и «беспорядка». В работе [54] в качестве характеристики упорядоченности использовался модуль средней по ансамблю скорости $|\vec{u}|$. Однако, в случае малого ансамбля зависимость $|\vec{u}|$ от D_ϕ сильно флуктуирует в окрестности некоторого среднего значения. Чтобы исключить эти флуктуации, разумно усреднить $|\vec{u}|$ по времени на m шагах интегрирования. Обозначим усредненную характеристику порядка U и вычислять ее будем по формуле

$$U = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m |\vec{u}(t)|. \quad (3.9)$$

Упорядоченным состоянием ансамбля частиц (3.6) будем считать режим, когда скорости всех частиц совпадают по направлению и приблизительно одинаковы по величине. Пространственное распределение частиц в упорядоченном состоянии представлено на рисунке 3.2 а; отрезки линий ориентированы вдоль направления скорости. Такое состояние известно, как режим трансляции [54, 83, 84], то есть движение ансамбля «как целого». В упорядоченном состоянии значение U близко к v_0 .

В неупорядоченном состоянии скорости частиц разнонаправлены, а их координаты во времени флуктуируют около неподвижных точек, но в среднем не смещаются. При этом центр масс системы в среднем также не смещается. Такое состояние ансамбля представлено на рисунке 3.2, б. Очевидно, что в неупорядоченном состоянии значение U близко к нулю.

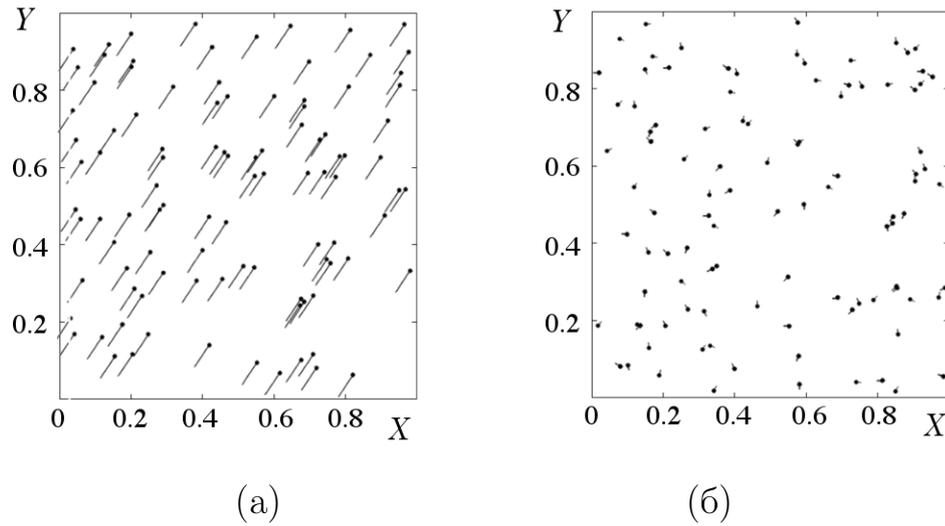


Рисунок 3.2. Типичные пространственные распределения частиц ансамбля при двух разных значениях интенсивности шума, влияющего на направление движения частиц: (а) – упорядоченный режим при $D_\phi = 0.2$; (б) – неупорядоченный режим при $D_\phi = 0.3$. $D_E = 0.01$, $\mu = 5$. Точками показаны координаты частиц, отрезки линий ориентированы вдоль направления скорости, длина отрезков пропорциональна модулю скорости.

Определив понятия упорядоченного и неупорядоченного состояний в исследуемой системе, исследуем влияние числа частиц в ансамбле на переходы между этими состояниями. На рисунке 3.3 приведены четыре зависимости величины U от интенсивности влияющего на направление движения частиц шума D_ϕ для ансамблей с различным количеством частиц при $\mu = 3$. Начальные условия во всех случаях одинаковы: координаты частиц распределены случайным образом, а их скорости сонаправлены и равны 1 по модулю. Видно, что во всех случаях присутствует индуцированный ростом интенсивности шума D_ϕ переход от упорядоченного состояния ансамбля к неупорядоченному: при малой интенсивности шума величина U близка к 1, а при большой интенсивности – к нулю.

При этом, в ансамблях из 300, 200 и 100 частиц при значении $D_\phi \approx 0.25$ происходит резкий скачок величины U , как и предсказывает теория (см. рисунок 3.1).

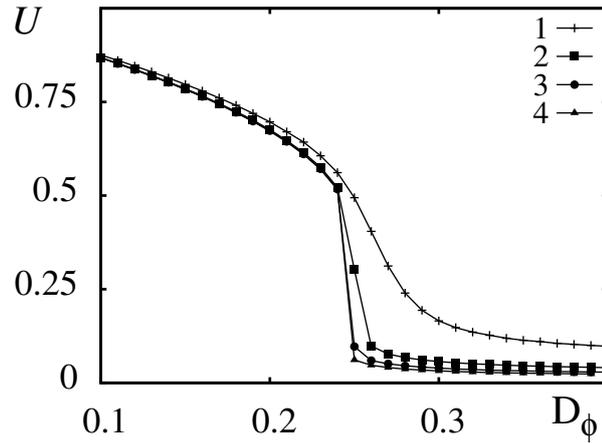


Рисунок 3.3. Зависимости средней скорости U от интенсивности шума, влияющего на направление движения частиц, при различном количестве частиц N в ансамбле: кривая 1 – $N = 20$; кривая 2 – $N = 100$; кривая 3 – $N = 200$; кривая 4 – $N = 300$. $D_E = 0.01$, $\mu = 3$.

Однако, если число частиц в ансамбле будет менее 100, вместо резкого скачка наблюдается плавное изменение U . Причина этого состоит в исчезновении области бистабильности в ансамбле из малого числа частиц при заданном значении μ . Как показывают результаты моделирования [82, 83], при $\mu = 3$ явление бистабильности наблюдается для ансамбля из 100 частиц, но не наблюдается в ансамблях с меньшим числом частиц.

Таким образом, если аддитивный шум отсутствует (или его воздействие пренебрежимо мало), то явление бистабильности при переходе «порядок–беспорядок», обнаруженное аналитически в приближении бесконечно большого числа частиц [54], существует в малых ансамблях (см. [82, 83]), для которых это приближение не выполняется. Бистабильность при этом понимается как возможность реализации при одной интенсивности влияющего на направление движения частиц шума двух различных стационарных распределений скорости. Выход системы на то или другое распределение определяется начальными условиями. На графике зависимости $U(D_\phi)$, изображенном на рисунке 3.4, наличие бистабильности соответствует петля гистерезиса.

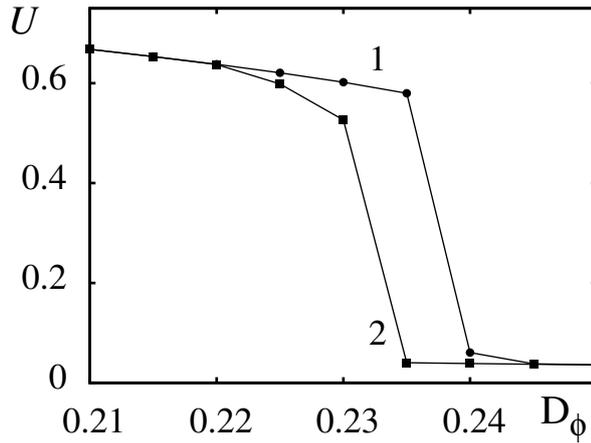


Рисунок 3.4. Петля гистерезиса на зависимости величины U от интенсивности шума для ансамбля из 100 частиц при $\mu = 5$. Результаты получены для времени наблюдения 10^6 после периода установления длительностью 10^3 .

Кривая 1 на рисунке 3.4 соответствует смещению по графику слева направо, то есть увеличению интенсивности шума, а кривая 2 – уменьшению его интенсивности (смещение по графику справа налево). При увеличении интенсивности шума упорядоченное состояние сохраняется до правой границы области бистабильности (кривая 1), а при уменьшении его интенсивности, соответственно, ансамбль остается в неупорядоченном состоянии вплоть до левой границы области бистабильности (кривая 2). Таким образом, внутри области бистабильности, при $0.23 < D_\phi < 0.235$, система «запоминает» начальное состояние и может оставаться как в упорядоченном (верхняя ветвь кривой 1), так и в неупорядоченном (нижняя ветвь кривой 2) состоянии при одном и том же значении интенсивности шума.

Если же область бистабильности отсутствует, как, например, в малом ансамбле, то зависимость $U(D_\phi)$ демонстрирует плавный переход в вне зависимости от направления изменения интенсивности шума, как на рисунке 3.3 для 20 частиц.

Способность больших ансамблей «сохранять информацию» о начальном состоянии связана с глобальным механизмом взаимодействия частиц. Действительно, каждая частица связана со всеми остальными частицами ансамбля, и

чем больше элементов в ансамбле, тем сильнее их совокупное влияние на каждую частицу. Таким образом, чем крупнее ансамбль, тем большее частиц нужно одновременно рассогласовать, чтобы произошел переход в неупорядоченное состояние. В малых ансамблях, напротив, каждая разупорядоченная частица значительно уменьшает выравнивающее взаимодействие со стороны общего поля скоростей. В результате начальное состояние быстро «забывается», а эффектов бистабильности не наблюдается.

В таком случае, логично предположить, что увеличив параметр μ , отвечающий за жесткость связи, можно усилить совокупное влияние всех элементов ансамбля на каждую частицу, и таким образом получить малый ($N < 100$) ансамбль, демонстрирующий бистабильность. Действительно, результаты экспериментов показали, что взаимосвязь между наличием бистабильности и интенсивностью взаимодействия μ существует. В ансамблях из менее чем 100 частиц также можно наблюдать бистабильность, но уже при $\mu > 3$. На рисунке 3.5 показана нижняя граница значений параметра μ , начиная с которых индуцированный шумом переход сопровождается явлением бистабильности для ансамблей различного числа частиц.

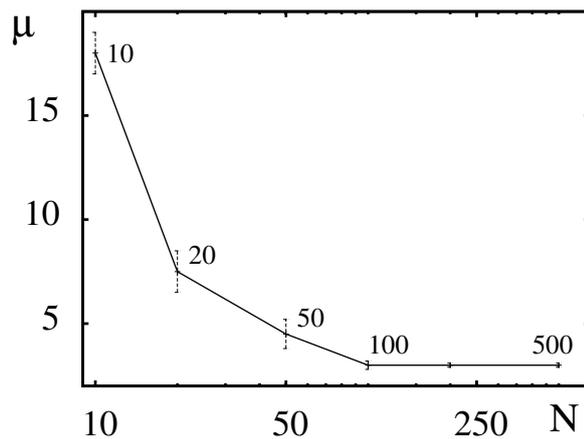


Рисунок 3.5. Граница существования области бистабильности на параметрической плоскости N, μ .

Видно, что минимальное значение жесткости связи, начиная с которого проявляется бистабильность, резко нарастает с уменьшением числа частиц. Так,

например, ансамбль из 10 частиц может демонстрировать бистабильность, если $\mu > 18$. При моделировании ансамблей с числом частиц менее 10 в рамках численного эксперимента нельзя однозначно определить наличие или отсутствие бистабильности, поскольку статистические характеристики таких маленьких ансамблей становятся неточными.

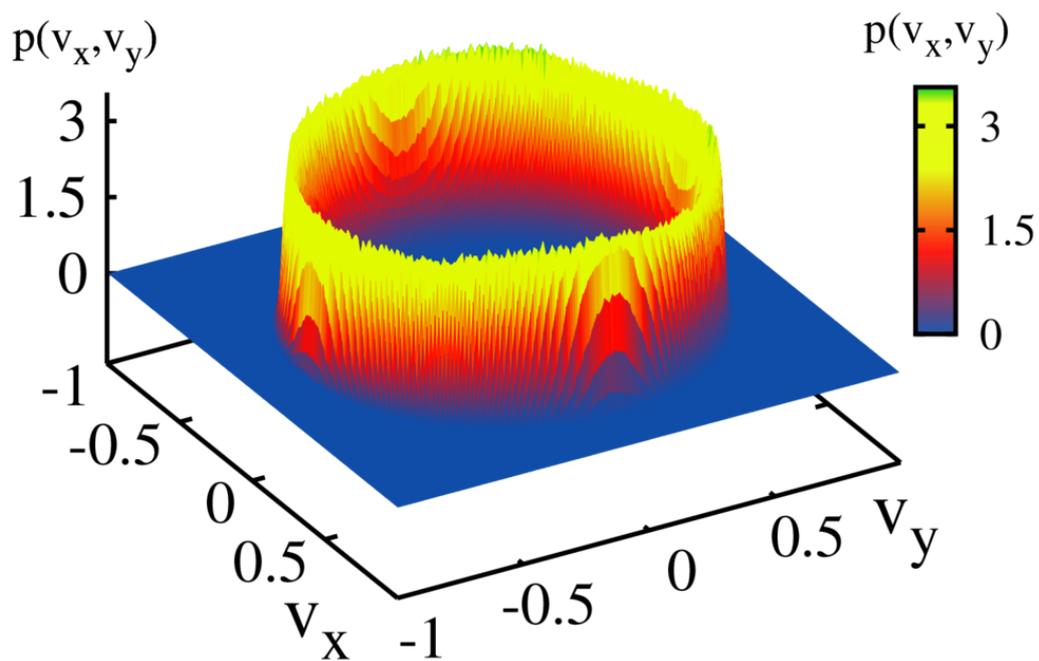
3.4 Эволюция распределения скорости частиц ансамбля

Для анализа влияния индуцированных шумом переходов между упорядоченным и неупорядоченным состояниями ансамбля рассмотрим вероятностные распределения компонент вектора скорости одной частицы. Поскольку все частицы находятся в одинаковых условиях, номер выбранной для анализа частицы не имеет значения, и соответствующий индекс можно опустить.

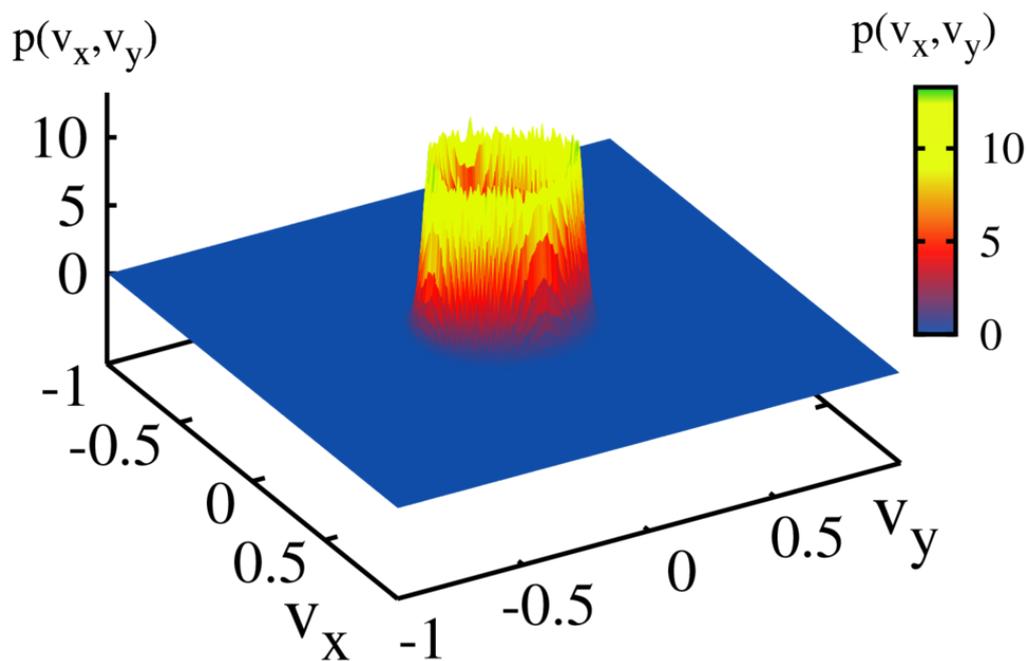
Введем функцию плотности вероятности $p(v_x, v_y)$ компонент вектора скорости частицы. Известно, что для активных броуновских частиц поверхность $p(v_x, v_y)$ имеет форму аксиально-симметричного кратера [45], причем максимум поперечного сечения кратера расположен на некоторой окружности, радиус которой v_m есть наивероятнейшая скорость частицы. На рисунке 3.6 изображены распределения $p(v_x, v_y)$ при низкой (а) и высокой (б) интенсивности шума, влияющего на направление движения частиц.

Вероятностные распределения симметричны, поскольку исследуемая система изотропна, и при бесконечном времени наблюдения могут реализовываться с одинаковой вероятностью любые направления движения частиц.

С учетом симметрии вероятностных распределений, для анализа формы распределения разумно рассматривать сечение распределения плоскостью $v_y = 0$, поэтому далее под вероятностным распределением будем подразумевать кривую $p(v_x, v_y = 0)$. Максимумы этой кривой соответствуют наиболее вероятной скорости частицы.



а)



б)

Рисунок 3.6. Стационарные распределения компонент скорости частицы в ансамбле $N = 100$ при $\mu = 5$, $D_E = 0$ и двух значениях параметра D_ϕ : а – в упорядоченном режиме, $D_\phi = 0.2$; б – в неупорядоченном режиме, $D_\phi = 0.3$.

Расчеты выполнялись для интервалов времени 10^6 после периода установления длительностью 10^3 .

Исследования эволюции вероятностного распределения скорости при переходе «порядок-беспорядок» разумно начать с наиболее простого случая, когда бистабильность отсутствует. Для этого рассмотрим ансамбль из 100 частиц при $\mu = 2$. Как было сказано выше, в отсутствие бистабильности изменение величины U происходит плавно. Распределение скорости при этом тоже плавно эволюционирует (см. рисунок 3.7), а именно – монотонно меняется наиболее вероятное значение скорости v_m .

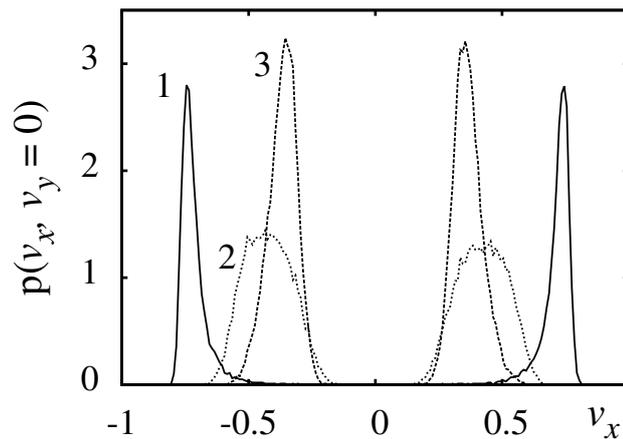


Рисунок 3.7. Стационарные вероятностные распределения $p(v_x, v_y = 0)$ в отсутствие бистабильности ($\mu = 2$, $D_E = 0$) при $D_\phi = 0.2$ (кривая 1), $D_\phi = 0.259375$ (кривая 2), $D_\phi = 0.275$ (кривая 3).

При малом шуме (кривая 1) система находится в упорядоченном состоянии и $v_m \approx 0.7$. С ростом интенсивности шума значение наиболее вероятной скорости уменьшается. Так, при $D_\phi = 0.259375$, $v_m \approx 0.45$ (кривая 2), а при $D_\phi = 0.275$ наиболее вероятное значение скорости $v_m \approx 0.35$ (кривая 3). Таким образом, в отсутствие бистабильности вероятностные распределения скорости постепенно эволюционируют при изменении интенсивности шума, а переход «порядок-беспорядок» не сопровождается стохастическими бифуркациями (разрушениями вероятностных распределений скорости).

В случае, когда ансамбль демонстрирует явление бистабильности, сценарий перехода от упорядоченного состояния к неупорядоченному усложняется.

В качестве примера рассмотрим ансамбль из 100 частиц при $\mu = 5$ (рисунок 3.8).

При $D_\phi = 0.225$ наивероятнейшая скорость $v_m \approx 0.7$, то есть система находится в упорядоченном состоянии (кривая 1). Но при малом увеличении интенсивности шума происходит жесткая стохастическая бифуркация [106]: стационарное вероятностное распределение скорости, соответствующее наиболее вероятной скорости частицы $v_m \approx 0.7$, разрушается, и возникает другое вероятностное распределение, для которого $v_m \approx 0.2$.

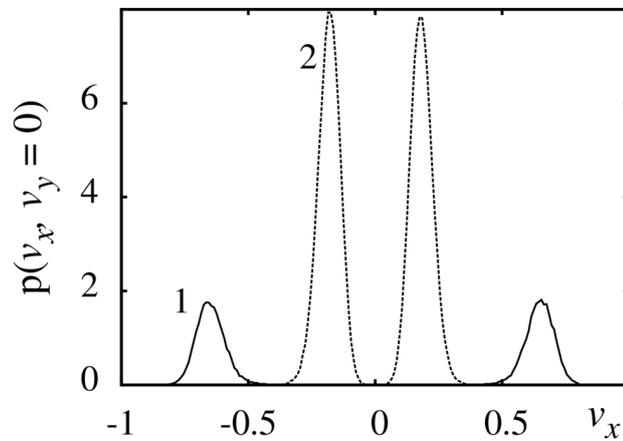


Рисунок 3.8. Стационарные вероятностные распределения $p(v_x, v_y = 0)$ в случае, когда переход «порядок-беспорядок» сопровождается бистабильностью ($\mu = 5$, $D_E = 0$), полученные при $D_\phi = 0.225$ (кривая 1) и $D_\phi = 0.228$ (кривая 2).

Способность ансамбля частиц (3.6) «сохранять информацию» о начальном состоянии в присутствии бистабильности подтверждается при анализе вероятностных распределений скорости. Так, на рисунке 3.9 изображены вероятностные распределения скорости, полученные для бистабильного ансамбля 100 частиц при $\mu = 5$ при старте с различных начальных условий при фиксированной интенсивности шума $D_\phi = 0.235$.

Кривая 1 соответствует упорядоченному начальному состоянию: скорости частиц сонаправлены и равны v_0 по абсолютной величине, тогда как кривая 2 построена для цепочки, стартующей со стохастическими начальными возмуще-

ниями (направления и величины скоростей равномерно распределены в интервалах $[0; 2\pi]$ и $[0; 1]$, соответственно). Видно (рисунок 3.9), что по крайней мере в течение времени наблюдения до 10^6 безразмерных единиц начальное состояние системы сохраняется.

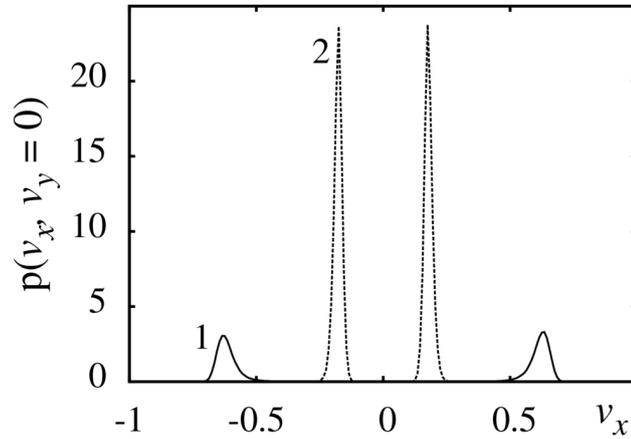


Рисунок 3.9. Стационарные распределения скорости в области бистабильности для упорядоченных (кривая 1) и случайных (кривая 2) начальных возмущений. Значения параметров: $\mu = 5$, $D_E = 0$, $D_\phi = 0.235$. Расчеты выполнялись для интервалов времени 10^6 после завершения переходного процесса длительностью 10^3 .

Связь между наивероятнейшим значением скорости и величиной U при варьировании интенсивности шума проиллюстрирована на рисунке 3.10 ($N = 100$ частиц, $\mu = 3$).

Видно, что в упорядоченном состоянии $v_m \approx U$, тогда как в неупорядоченном режиме $v_m > U$. В качестве иллюстрации этого феномена были построены распределения вероятностей средней (по ансамблю) скорости.

В упорядоченном состоянии (рисунок 3.11 а) наивероятнейшие значения скорости одной частицы и средней скорости ансамбля очень близкие. Это означает, что центр масс системы движется так же, как отдельные частицы.

Однако в неупорядоченном состоянии (рисунок 3.11 б) каждая частица движется с ненулевой наивероятнейшей скоростью $v_m \approx 0.2$ (кривая 1), но при этом наивероятнейшее значение средней скорости близко к нулю (кривая 2),

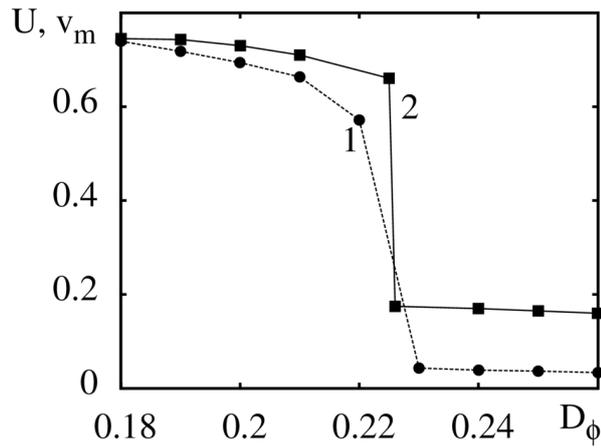


Рисунок 3.10. Зависимость значения U (кривая 1) и наивероятнейшей скорости v_m (кривая 2) от интенсивности влияющего на направление движения частиц шума D_ϕ при $N = 100$, $\mu = 5$, $D_E = 0$.

поскольку, хотя отдельные частицы и движутся с ненулевой скоростью $|v_i| \approx v_m$, но под влиянием шума направления их движений не согласованы, поэтому скорость U (модуль усредненной во времени векторной суммы скоростей всех его элементов) близка к нулю.

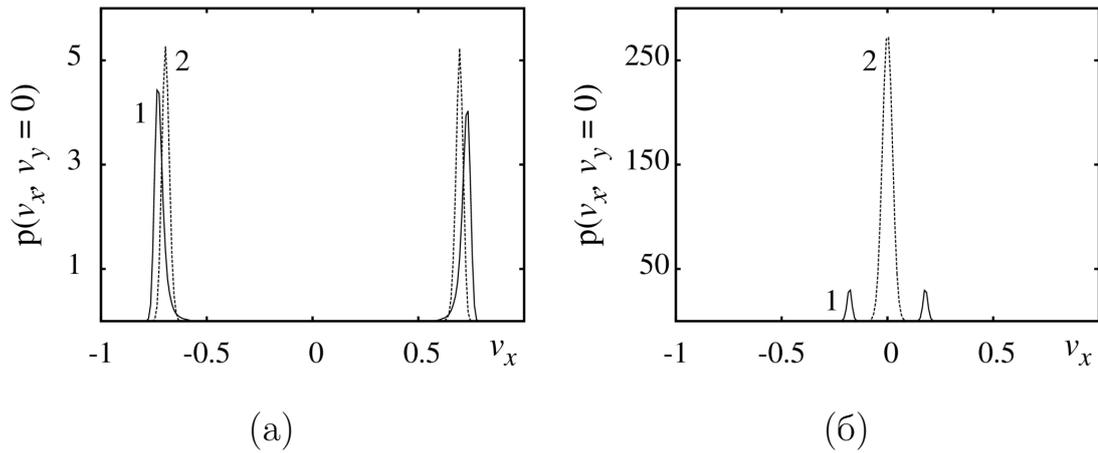


Рисунок 3.11. Вероятностные распределения скорости одной частицы (кривая 1) и средней скорости ансамбля из 100 частиц (кривая 2) при $\mu = 5$, $D_E = 0$ и различной интенсивности шума, влияющего на направление движения частиц:

(а) – в упорядоченном состоянии при $D_\phi = 0.2$; (б) – в неупорядоченном состоянии при $D_\phi = 0.3$.

3.5 Влияние аддитивного шума на характеристики стационарных состояний ансамбля

Выше было показано, что в области бистабильности в отсутствие аддитивного шума ансамбль может бесконечно долго находиться в одном из стационарных состояний, а выход на то или другое стационарное состояние определяется начальными условиями.

Однако, под воздействием аддитивного шума достаточной интенсивности становятся возможными переходы между стационарными состояниями. В этом случае некорректно говорить о существовании двух различных стационарных состояний распределения скорости частицы. При наличии аддитивного шума будет существовать только одно стационарное распределение скорости, однако если интенсивность D_E аддитивного шума будет всё же не слишком велика, то в некоторой области значений интенсивности мультипликативного шума D_ϕ в

сечении поверхности $p(v_x, v_y)$ будет не два, а четыре максимума, то есть распределение скорости будет бимодальным.

Распределение скорости частицы для этого случая показано на рисунке 3.12. При переходе «порядок-беспорядок» с ростом интенсивности влияющего на направление движения частиц шума в этом случае наблюдаются стохастические бифуркации [106], состоящие в появлении и исчезновении двух пар максимумов в сечении распределения $p(v_x, v_y)$. Эти бифуркации ограничивают область бимодальности справа и слева.

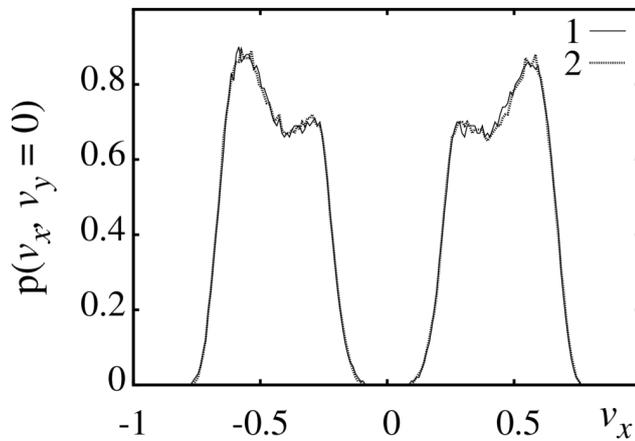


Рисунок 3.12. Стационарное распределение скорости частицы, полученное при старте из упорядоченных (кривая 1) и случайных (кривая 2) начальных возмущений в области бимодальности при $D_E = 0.1$, $D_\phi = 0.226$, $\mu = 5$, $N = 100$.

С ростом интенсивности аддитивного шума область бимодальности исчезает. В этом случае стохастические бифуркации перестают наблюдаться, и эволюция распределения скорости сводится к трансформации формы распределения без его каких-либо качественных изменений.

Добавление аддитивного шума изменяет не только механизм перехода «порядок–беспорядок», но также сдвигает пороговое значение интенсивности мультипликативного шума, при котором этот переход происходит. На рисунке 3.13 приведена двухпараметрическая диаграмма на плоскости параметров (D_ϕ, D_E) . Цветом показана величина наивероятнейшей скорости v_m . Если ис-

пользовать величину v_m для оценки степени упорядоченности, то перепад ее значений можно трактовать как переход между упорядоченным и неупорядоченным состояниями. Из диаграммы видно, что при нулевой интенсивности D_E переход происходит в диапазоне $D_\phi \in (0.2; 0.225)$. При $D_E = 0.45$ переход наблюдается в интервале $D_\phi \in (0.15; 0.175)$. Таким образом, чем больше интенсивность аддитивного шума, тем меньшая пороговая интенсивность мультипликативного шума нужна для разупорядочивания системы.

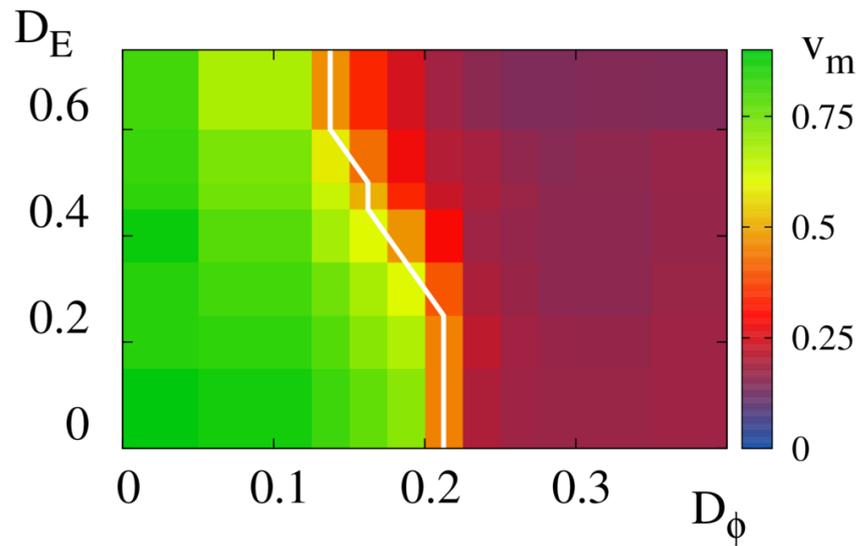


Рисунок 3.13. Наиболее вероятное значение скорости частицы на плоскости параметров D_E, D_ϕ для ансамбля из $N = 80$ частиц при $\mu = 3$.

3.6 Выводы по третьей главе

В главе представлены результаты численных исследований динамики малых (порядка 10^2 элементов) двумерных ансамблей активных частиц, взаимодействующих через общее поле скоростей. Произведено сравнение данных численного моделирования с известными результатами, полученными методом гидродинамического описания, а так же исследованы механизмы стохастических бифуркаций.

Основные результаты:

1. Поведение ансамбля $10 < N < 300$ взаимодействующих через общее поле частиц соответствует поведению более крупных ансамблей, по крайней мере при глобальном взаимодействии. При этом, с увеличением интенсивности мультипликативного шума, влияющего на направление движения частиц, наблюдается переход от упорядоченного состояния к неупорядоченному.
2. В малых ансамблях существует область бистабильности, однако значение параметра связи между частицами μ , при котором система становится бистабильной, тем больше, чем меньше частиц в ансамбле. Кроме того, реализация бистабильности в ансамбле из ограниченного числа частиц возможно только в отсутствие аддитивного шума.
3. В области бистабильности при разных начальных условиях возможно установление двух стационарных состояний с разными вероятностными распределениями скорости частиц. Границы области бистабильности связаны с жесткими стохастическими бифуркациями, состоящими в исчезновении одного состояния и возникновении другого.
4. В присутствии аддитивного шума явление бистабильности сменяется явлением бимодальности, состоящем в сосуществовании двух значений абсолютной величины скорости частицы с максимальной плотностью вероятности. Можно выделить область бимодальности, границы которой соответствуют мягким стохастическим бифуркациям, идентифицируемым по возникновению и исчезновению дополнительных экстремумов распределения вероятностей.

Глава 4. ВОЗБУЖДЕНИЕ МОБИЛЬНЫХ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В ЦЕПОЧКАХ ЧАСТИЦ НА ПРИМЕРЕ МОЛЕКУЛЫ ДНК

4.1 Введение

Ряд важных задач современной наноэлектроники в аспектах, касающихся разработки электронных логических элементов, связан с вопросами переноса заряда. Известно, что в качестве своего рода «молекулярных проволок» возможно использование молекул ДНК [74, 107–109]. При этом, основным механизмом переноса заряда в ДНК считается поляронный [78–81, 110, 111]. Однако, существует и альтернативный механизм транспорта заряда [75, 76], основанный на взаимодействии электронов с нелинейными локализованными возмущениями молекулы – бабблами и дискретными бризерами (ДБ), которые возбуждаются в ДНК в результате внешнего механического воздействия на отдельные нуклеотиды [74, 112].

Однако следует учесть, что одной из важных проблем при внешнем возбуждении локализованных волн является минимизация энергетических затрат на возбуждение. Так, например, создание баббла в ДНК требует закачки большой энергии в молекулу. Между тем, согласно результатам работ [75, 76, 113, 114], помимо бабблов в ДНК можно создавать мобильные бризеры, возбуждение которых энергетически менее затратно, чем возбуждение бабблов. Как следует из [75, 76], мобильные бризеры способны захватывать электроны, образуя с ними мобильные квазичастицы, подобно тому, как это происходит при формировании солитонов [26].

В настоящей главе исследуется один из возможных способов возбуждения мобильных дискретных бризеров в «плоской» модели ДНК, учитывающей только динамику возбуждений, обусловленных радиальными смещениями нуклеотидных пар (эффекты, связанные с их угловыми смещениями, не рассматриваются). Предполагается, что молекула возбуждается за счет начальных смещений от положения равновесия или начального возмущения скоростей в небольшой группе (2-4 пары) смежных нуклеотидных пар, требующих умеренных затрат энергии. Теоретическое обоснование такой возможности и метод детектирования бризера описаны, например, в [75].

Исследование проводится в рамках модели Пейрарда-Бишопа-Доксуа (ПБД) [77], которая, как считается в настоящее время, адекватным образом описывает динамические и статистические свойства ДНК.

Эта модель учитывает, что молекула ДНК состоит из двух полинуклеотидных цепочек, которые можно представить как две цепочки масс, связанных друг с другом продольными и поперечными пружинами. При этом взаимодействие между соседними узлами в одной цепочке описывается слабо-нелинейным потенциалом, а взаимодействие между узлами разных цепочек моделирует потенциал Морзе (в качестве имитации водородных связей, соединяющих основания комплементарных нуклеотидных пар).

4.2 Математическая модель Пейрарда-Бишопа-Доксуа (ПБД) для анализа нелинейных возмущений в ДНК

В основе приближенной модели Пейрарда-Бишопа-Доксуа [77] лежит гамильтониан

$$H_{lat} = \sum_i \frac{1}{2} M(\dot{w}_i^2 + \dot{v}_i^2) + V_i(w_i, v_i) + W_i(w_{i,i-1}, v_{i,i-1}), \quad (4.1)$$

где M - масса нуклеотида, w_i, v_i - смещения двух нуклеотидов в i -ой нуклеотидной паре от положения равновесия, точка означает производную по времени, а соответствующие величины - скорости нуклеотидов в i -ой нуклеотидной паре, потенциал V_i описывает взаимодействие частиц в i -ой нуклеотидной паре (on-site потенциал), а потенциал W_i - взаимодействие i -ой и $i - 1$ -ой нуклеотидных пар (стэкинг-взаимодействие).

При введении стандартных переменных [77]

$$x_i = (w_i + v_i)/\sqrt{2}, y_i = (w_i - v_i)/\sqrt{2}, \quad (4.2)$$

и использовании потенциала Морзе для описания связи частиц внутри нуклеотида

$$V_i = D(e^{-2by_i} - 2e^{-by_i}), \quad (4.3)$$

а также параболического потенциала с поправкой, определяющей нелинейность силы стэкинг-взаимодействия

$$W_i = \frac{k}{2}(y_i - y_{i-1})^2[1 + \rho e^{-\alpha(y_i - y_{i-1})}], \quad (4.4)$$

гамильтониан можно записать в виде

$$H = \sum_i \frac{1}{2} M \dot{y}_i^2 + D(e^{-2by_i} - 2e^{-by_i}) + \frac{k}{2}(y_i - y_{i-1})^2(1 + \rho e^{-\alpha(y_i - y_{i-1})}), \quad (4.5)$$

где параметры D и b - соответственно глубина потенциальной ямы и коэффициент жёсткости потенциала Морзе, k - коэффициент жесткости стэкинг-потенциала, параметры ρ и α задают нелинейность силы стэкинг-взаимодействия нуклеотидных пар.

Из гамильтониана 4.5, с учетом симметрии движения нуклеотидов в каждой паре, следует уравнение движения частиц в каждой нуклеотидной паре в безразмерных переменных:

$$\ddot{q}_i + \Gamma \dot{q}_i = e^{-q_i}(e^{-q_i} - 1) + \omega_{bond}^2 \{(q_{i+1} - 2q_i + q_{i-1}) + \rho f_i(q_{i,i-1,i+1})\}. \quad (4.6)$$

Здесь $q_i = by_i$ – безразмерное смещение i -го нуклеотида от положения равновесия $y_{i0} = 0$, точка теперь обозначает производную по безразмерному времени $\tau = \omega_M t$, причем производная имеет смысл безразмерной скорости, $\omega_M = \sqrt{2Db^2/M}$ – частота линейных колебаний Морзе осциллятора (4.3), $\omega_{bond} = \sqrt{k/M}/\omega_M$ – безразмерная частота малых линейных колебаний нуклеотида, возникающих за счет его связи с соседями, функция f_i описывает нелинейность силы взаимодействия:

$$f_i = (q_{i-1} - q_i)[1 + 0.5\alpha(q_{i-1} - q_i)]e^{-\alpha(q_{i-1} + q_i)} + (q_{i-1} - q_i)[1 + 0.5\alpha(q_{i-1} - q_i)]e^{-\alpha(q_{i-1} - q_i)}. \quad (4.7)$$

Отметим, что коэффициент α теперь тоже нормированный ($\alpha \rightarrow \alpha/b$) из-за введения безразмерного смещения (координаты) q , коэффициент трения Γ добавлен в уравнения для учета разного рода потерь энергии частиц при движении. Первая и последняя нуклеотидные пары предполагаются зафиксированными: $q_1 = q_N = 0$, $v_1 = v_N = 0$.

Уравнения (4.6) и (4.7) решаются численно методом Рунге-Кутты 4-го порядка с контролем точности выполнения закона сохранения энергии, соответствующего гамильтониану 4.5, с шагом интегрирования $\Delta t = 0.0005$. В процессе моделирования определяются смещения (координаты) $q_i(\tau)$ и скорости $v_i(\tau)$ частиц, а взаимное расположение смежных частиц определяет тип коллективных возбуждений (мод). Значения параметров выбираются близкими к реализующимся в реальных молекулах. В частности, жесткость связи в нуклеотидной паре всегда выше жесткости связи стэкингвого взаимодействия, поэтому локализованные нелинейные возбуждения в ДНК в основном представлены бабблами и бризерами [74]. Однако для формирования мобильных бризеров стэкингвое взаимодействие не должно быть очень слабым, иначе бризер будет «залипать» в цепочке, как это показано в [115]. В применении к модели Пейрарда-Бишопа Фахретдинов и др. [114] получили, в используемых здесь переменных, что для формирования устойчивого мобильного бризера должно выполняться условие

$\omega_{bond} > \omega_{bond\ cr} = 0.354$. Однако в ДНК с потенциалом (4.4) условие возникновения мобильного бризера не такое жесткое: $\omega_{bond} > \omega_{bond\ cr} = 0.354/(1 + \rho)^{1/2}$, поскольку «нелинейная» поправка при малых значениях возмущений не исчезает, а становится максимальной и равной ρ . Поэтому при одном стандартном значении $\rho = 0.5$ [74–76] это уточнение критического значения параметра связи не очень существенно, но при $\rho = 2$ смещает порог возбуждения мобильного бризера почти в два раза.

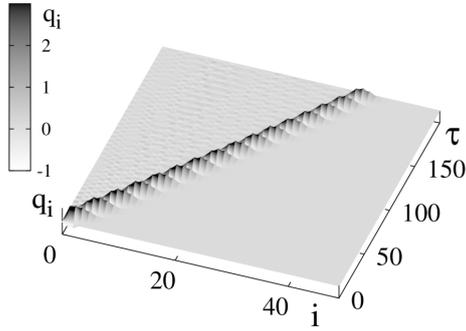
Отметим также, что формально возможные решения уравнений в форме солитонов в модели ПБД в ДНК попросту не реализуются, поскольку для их возбуждения требуется, чтобы межчастичное взаимодействие (в данном случае стэкинговое) было существенно сильнее, чем on-site взаимодействие [116]. Поэтому в настоящей Главе солитонные решения не рассматриваются. Основной целью исследования является определение возможности возбуждения мобильных дискретных бризеров как локализованных мобильных квази-частиц, играющих важную роль в динамике ДНК, а также как потенциальных носителей добавленных в молекулу внешних зарядов. Поскольку колебания нуклеотидов происходят поперек оси молекулы, то при возбуждении одной, например, нуклеотидной пары вдали от концов молекулы волновые возмущения распространяются симметрично в обе стороны. Чтобы обеспечить однонаправленное движение, предлагается возбуждать цепочку (вводить в нее энергию) вблизи одного из ее закрепленных концов, с тем, чтобы волна, направляющаяся к этому концу, отражалась от него и интерферировала с волной другого направления.

4.3 Возбуждение мобильных бризеров в ДНК за счет возмущения скорости нескольких смежных частиц

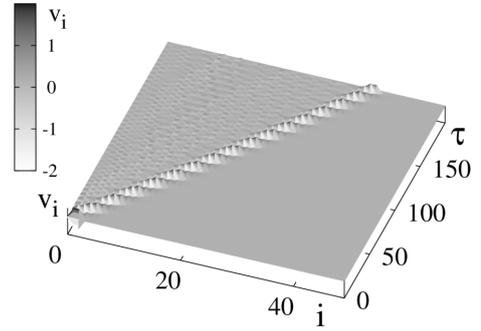
Пусть в начальный момент времени K смежных нуклеотидных пар вблизи закрепленного конца молекулы получают одинаковый достаточно сильный импульс, направленный к оси молекулы. В последующий момент времени эти пары сжимаются, затем растягиваются за счет сил потенциала Морзе. Процесс периодически повторяется, причем при определенном выборе параметров возбужденное состояние группы частиц может смещаться вдоль молекулы. На рисунке 4.1 представлены результаты моделирования при существенном возмущении трех ($K = 3$) частиц, приобретающих безразмерные значения скорости $v_{20} = v_{30} = v_{40} = -2$ (индекс 1 соответствует закрепленной «концевой» паре, для которой всегда $q_{10} = v_{10} = 0$). Это означает, что размер «пятна возбуждения» $(K - 1)\sigma$ составляет примерно два межпарных расстояния σ , а кинетическая энергия каждого нуклеотида, определяющая начальную локальную температуру, составляет $4D$ (кинетическая энергия пятна составляет $12D$, а в среднем на одну пару цепочки из 50 частиц приходится кинетическая энергия $T_{kin} = 0.04$ в единицах $2D$ (рисунок 4.1, в)). Из рисунков видно, что формируется устойчивый локализованный мобильный «кластер» (рисунок 4.1,а и 4.1,б), движущийся со скоростью $v_{br} \approx 0.2$, в котором частицы колеблются с частотой $\omega_{br} \approx 0.38$, а энергия слабо рассеивается при движении вдоль оси молекулы, т.е. мобильный дискретный бризер (рисунок 4.1,в).

Две характеристики, частоту ω_{br} и декремент бризера, нетрудно оценить из зависимости кинетической энергии от времени, а скорость бризера - из наклона его траектории на рисунках 4.1,а и 4.1,б. Малое рассеяние энергии связано с тем, что состояние молекулы остается слабо возмущенным после прохождения бризера с высокой энергией. Отметим также, что образовавшийся дискретный

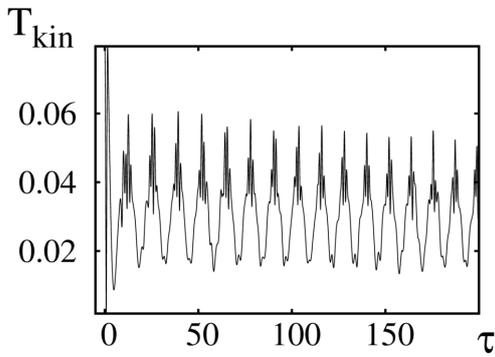
бризер низкочастотный – его частота лежит ниже нижней частоты зоны пропускания молекулы ДНК.



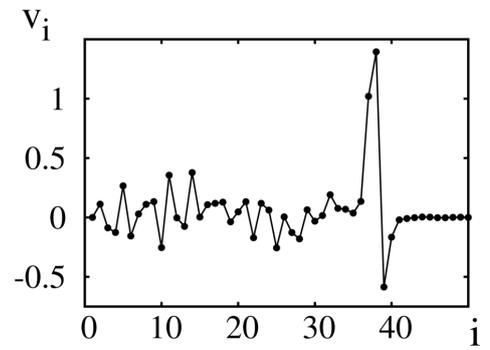
(а)



(б)



(в)



(г)

Рисунок 4.1. Мобильный бризер в ДНК с закрепленными концами при $v_{20} = v_{30} = v_{40} = -2$, $q_{i0} = 0$. (а) и (б) – эволюция распределений координат $q_i(\tau)$ и скорости $v_i(\tau)$ частиц, соответственно, в) – зависимость кинетической энергии цепочки T_{kin} (нормированной на число частиц N) от времени, г) – распределение скоростей частиц v_i в последний момент симуляции $\tau_k = 200$.

$$N = 50, \omega_{bond} = 0.4, \Gamma = 0.001.$$

В случае, когда энергия начального возмущения меньше ($v_{20} = v_{30} = v_{40} = -1$), кинетическая энергия каждого нуклеотида составляет $T_{kin} = 0.01$, (в единицах $2D$, рисунок 4.2 б), то скорость бризера ($v_{br} \approx 0.1$) и время его жизни падают, а частота растет ($\omega_{br} \approx 0.75$), оставаясь в нижней зоне непропускания $\omega < 1$.

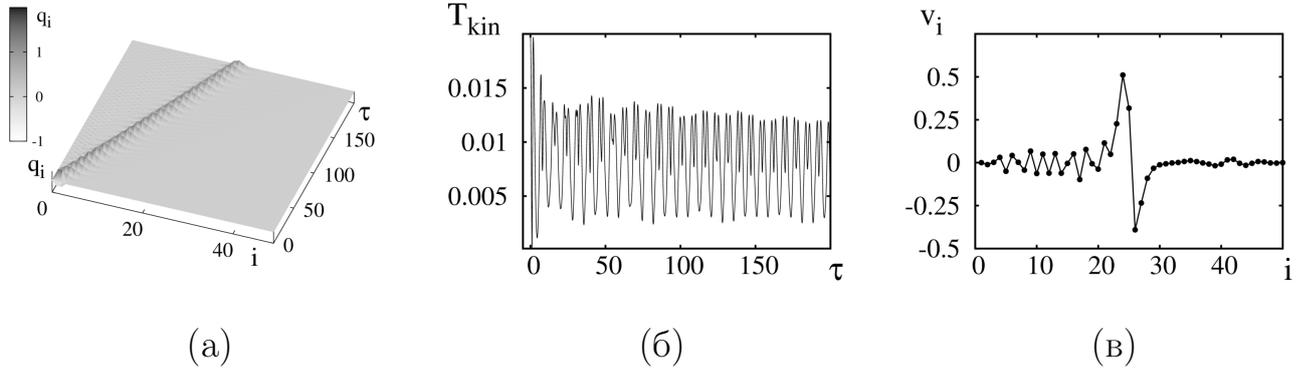


Рисунок 4.2. Мобильный бризер при $v_{20} = v_{30} = v_{40} = -1$, $q_{i0} = 0$. (а) – эволюция распределения координат $q_i(\tau)$ частиц, (б) – зависимость кинетической энергии T_{kin} цепочки (нормированной на число частиц N) от времени, (в) - распределение скоростей частиц v_i в последний момент симуляции $\tau_k = 200$. $N = 50$, $\omega_{bond} = 0.4$, $\Gamma = 0.001$.

Зависимость средней скорости бризера от суммарной энергии начального возбуждения «пятна» из трех частиц $T_{kinin} = T_{20} + T_{30} + T_{40}$ представлена на рисунке 4.3. Видно, что скорость бризера при достаточно большой энергии начального возбуждения растет с увеличением энергии, что типично для нелинейных локализованных возмущений (например, скорость солитонов, описываемых уравнением КдВ, также растет с увеличением их энергии). Начальный участок зависимости $v_{br}(T_{kinin})$ с нетипичным поведением объясняется тем, что при малой энергии возбуждения сформировавшаяся волна быстро теряет энергию и скорость бризера меняется в течение достаточно длительного времени моделирования $\tau_k = 200$ с, поэтому среднее значение не в полной мере характеризует движение бризера. К тому же ослабление потенциала взаимодействия (4.4) за счет «нелинейной» поправки сказывается при малой энергии в меньшей степени. В грубом приближении можно считать $v_{br}(T_{kinin}) \approx 0.1$ ниже интервала значений, при которых скорость растет с ростом энергии. При этом среднее значение частоты бризера падает с увеличением энергии, оставаясь ниже зоны распространения линейных волн («дисперсных фононов») (рисунок 4.3).

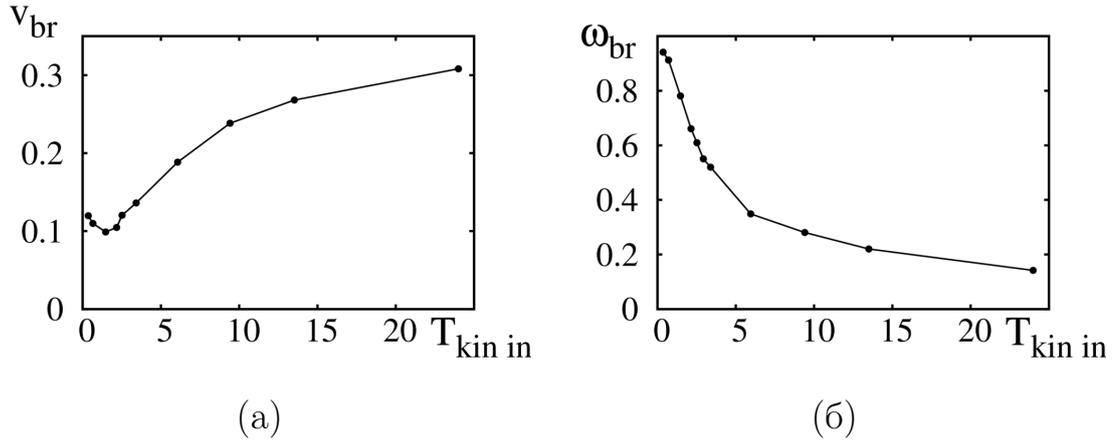


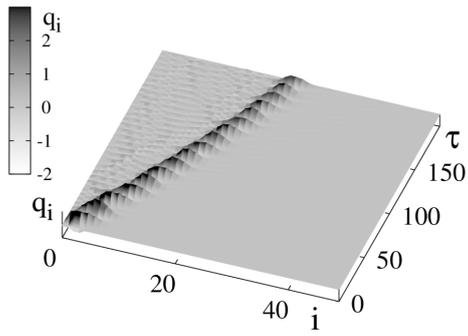
Рисунок 4.3. Зависимость скорости (а) и частоты (б) мобильного брызера от суммарной энергии начального возбуждения «пятна» из трех частиц

$$T_{kin in} = T_{20} + T_{30} + T_{40}. \tau_k = 200. N = 50, \omega_{bond} = 0.4, \Gamma = 0.001.$$

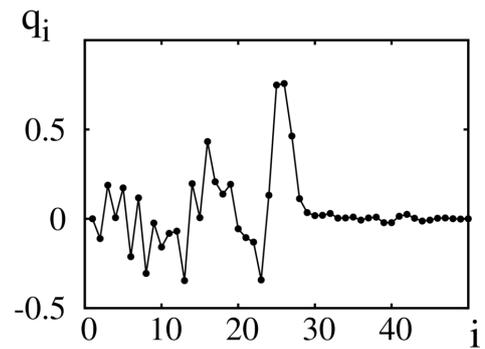
Варьирование расположения «пятна возбуждения» (рисунок 4.4) и варьирование числа K первоначально возбуждаемых частиц (размера «пятна возбуждения», не показано на рисунках) свидетельствуют, что оптимальным является значение $K = 2 \dots 4$, а «пятно возбуждения» должно быть приближено непосредственно к концу молекулы. Можно предположить, что интерференция нелинейных возбуждений, создаваемых каждой нуклеотидной парой, в остальных случаях является менее когерентной и не приводит к формированию устойчивого мобильного брызера.

Отметим, что влияние уровня стэкинг-взаимодействия на степень мобильности брызера также наглядно подтверждается результатами прямого численного моделирования цепочки для тех же значений параметров возбуждения, что соответствуют рисунку 4.1, но с меньшими значениями частоты ω_{bond} (рисунок 4.5). Из представленных на рисунке зависимостей $q_i(\tau)$ следует, что при $\omega_{bond} = 0.3$ сформировавшийся брызер начинает двигаться со скоростью $v_{br} = 0.06$, но быстро теряет энергию и останавливается, сместившись всего на несколько сайтов, а при $\omega_{bond} = 0.2$ брызер является немобильным.

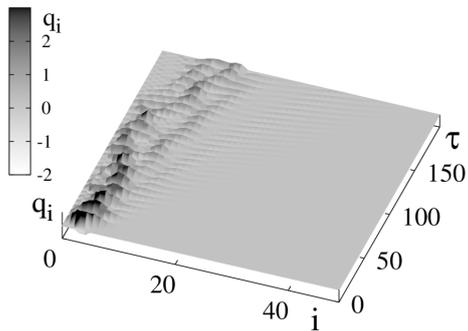
Если повторить описанные выше компьютерные эксперименты для случая начального возбуждения скорости частиц «от оси», $v_{0i} > 0$ (i - номера



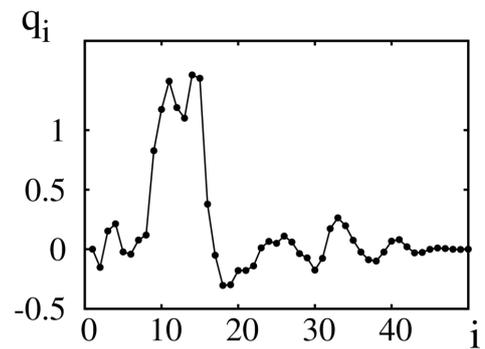
(а)



(б)



(в)



(г)

Рисунок 4.4. Мобильный бризер в ДНК с закрепленными концами при различной дислокации начального «пятна возбуждения» постоянной энергии.

(а),(в) – эволюция распределений координат частиц $q_i(\tau)$, (б), (г) – распределения смещений частиц из положения равновесия q_i в последний момент симуляции $\tau_k = 200$. Верхний ряд - $v_{30} = v_{40} = v_{50} = -2$, нижний - $v_{40} = v_{50} = v_{60} = -2$ (в сравнении с рисунком 4.1, где аналогичные результаты приведены для $v_{20} = v_{30} = v_{40} = -2$). $N = 50, \omega_{bond} = 0.4, \Gamma = 0.001$.

возмущаемых частиц), в целом картина соответствует описанной выше, с аналогичными характеристическими зависимостями частоты и скорости бризера от энергии начального возмущения, а также размера «пятна возбуждения» и его дислокации.

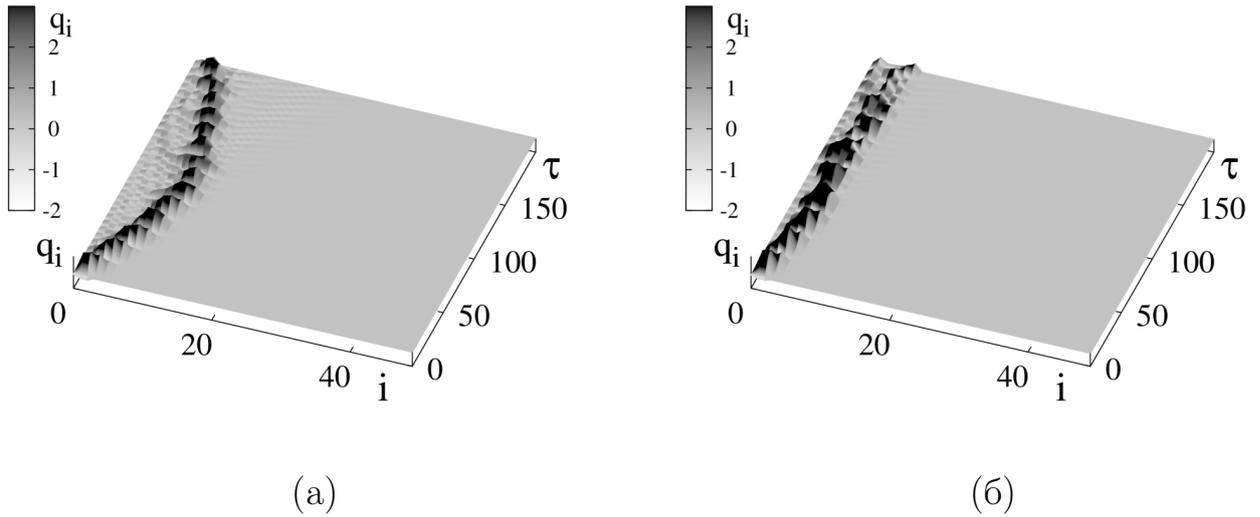


Рисунок 4.5. Бризер в ДНК с закрепленными концами при $v_{20} = v_{30} = v_{40} = -2$ и небольшими значениями стэкинг-взаимодействия $\omega_{bond} = 0.3$ (а) и $\omega_{bond} = 0.2$ (б). Показана эволюция распределений координат $q_i(\tau)$. $N = 50, \Gamma = 0.001$.

4.4 Возбуждение мобильных бризеров в ДНК за счет смещения нескольких смежных частиц

Если в начальный момент времени несколько смежных нуклеотидных пар вблизи закрепленного конца молекулы растягиваются или сжимаются, то также возможно возбуждение мобильных бризеров. В первом случае, при одинаковом растяжении, например, лишь двух нуклеотидных пар ($q_{20} = q_{30} = 2$) формируется узкий мобильный бризер, который преодолевает расстояние 85σ за длительное время $\tau = 800$, т.е. двигаясь со средней скоростью $v_{br} \approx 0.1$ (рисунок 4.6,а и 4.6,б), причем частота колебаний бризера составляет $\omega_{br} \approx 0.4$, а среднее значение кинетической энергии за начальный интервал времени $\tau = 0 - 200$ $T_{kin} \approx 0.007$. С учетом этого можно сделать вывод, что он аналогичен бризеру, возбужденному за счет возмущения начальной скорости с таким же уровнем энергии возбуждения (рисунок 4.2). Видно, что бризер сохраняет свою форму при движении и лишь слегка замедляется в течение длительного времени на-

блюдения $\tau = 800$, поскольку слабо рассеивает энергию при движении (рисунок 4.6,в).

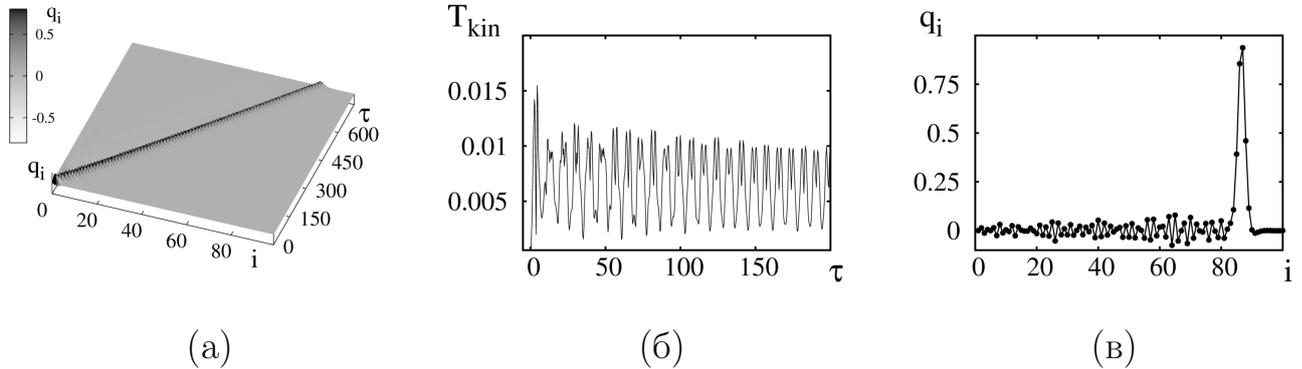


Рисунок 4.6. Мобильный бризер в ДНК с закрепленными концами при начальном растяжении двух нуклеотидных пар: $q_{20} = q_{30} = 2$, $v_{i0} = 0$. (а) – эволюция распределений координат $q_i(\tau)$ частиц, (б) – зависимость кинетической энергии T_{kin} цепочки (нормированной на число частиц N) от времени, (в) – распределение смещений частиц из положения равновесия q_i .

$$N = 100, \omega_{bond} = 0.4, \Gamma = 0.001.$$

Еще лучше формируется бризер, например, при начальном сжатии трех смежных нуклеотидных пар ($q_{20} = q_{30} = q_{40} = -0.5$, $v_{i0} = 0$, рисунок 4.7). Среднее значение кинетической энергии такого бризера $T_{kin} \approx 0.008$ выше, чем в предыдущем случае, и, соответственно, скорость $v_{br} \approx 0.125$ больше. Частота $\omega_{br} \approx 0.5$ также выше по сравнению с частотой в предыдущем случае. Приведенные результаты близки к оптимальным, поскольку выбраны из большого массива данных, полученных при варьировании параметров в широком диапазоне значений. Однако, мобильные бризеры не критичны к отклонению параметров и начальных условий от оптимальных значений.

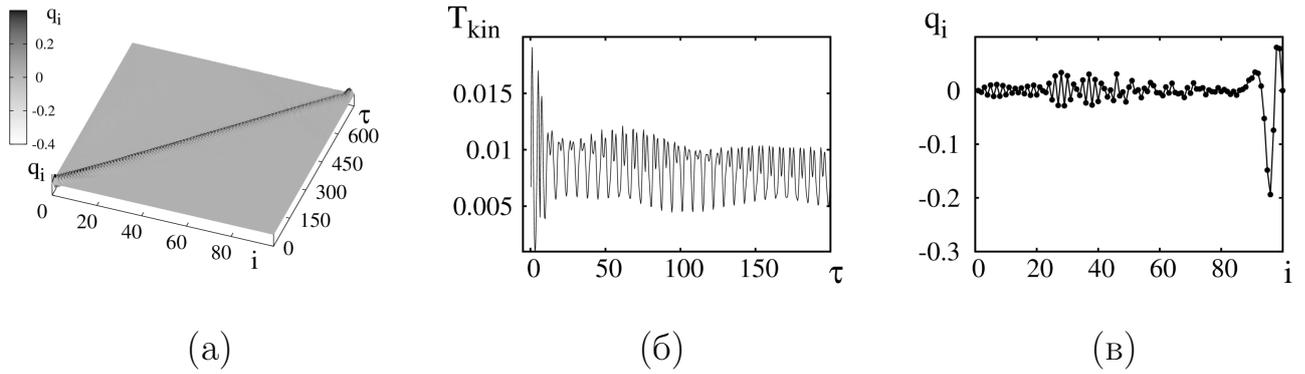


Рисунок 4.7. Мобильный бризер в ДНК с закрепленными концами при начальном сжатии трех нуклеотидных пар: $q_{20} = q_{30} = q_{40} = -0.5$, $v_{i0} = 0$. (а) – эволюция распределений координат $q_i(\tau)$ частиц, (б) – зависимость кинетической энергии T_{kin} цепочки (нормированной на число частиц N) от времени, (в) – распределение смещений частиц из положения равновесия q_i .

$$N = 100, \omega_{bond} = 0.4, \Gamma = 0.001.$$

4.5 Выводы по четвертой главе

В главе представлены результаты численного моделирования процессов распространения нелинейных волн – мобильных бризеров – в модели молекулы ДНК Пейрарда-Бишопа-Доксуа. Рассмотрены два способа возбуждения мобильных бризеров: путём задания начальных скоростей либо начальных смещений нескольких нуклеотидов. Определен вид оптимальных для возбуждения мобильных бризеров начальных условий. Основные полученные результаты:

1. В молекулах ДНК с закрепленными концами можно возбуждать мобильные дискретные бризеры за счет начального возмущения скоростей или координат небольшого числа смежных нуклеотидных пар, расположенных у одного из концов молекулы, если стэкинговое взаимодействие между нуклеотидными парами превышает определенный порог.
2. Мобильные бризеры возбуждаются как при положительном (от оси), так и при отрицательном (к оси) направлении возмущений скорости, причем

параметры бризеров (скорость, частота, энергия, ширина) примерно одинаковы в обоих случаях, если возбуждается одинаковое число пар и равны энергии возмущений.

3. Мобильные бризеры возбуждаются при начальном сжатии или растяжении нескольких смежных нуклеотидных пар. По своим характеристикам они аналогичны бризерам, полученным начальным возмущением скоростей нуклеотидных пар (при условии близких значений начальной энергии и аналогичной локализации начальных возмущений).
4. Длина пробега бризера может составлять несколько десятков межпарных расстояний и не критично зависит от значений параметров, однако оптимальные условия формирования соответствуют начальному возмущению 2-4 смежных пар, расположенных вплотную к одному из концов молекулы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках диссертационной работы были проведены исследования различных колебательных и волновых явлений в ансамблях и решетках активных и консервативных частиц, движущихся в пространстве различной размерности. Были рассмотрены модели ансамблей с различными способами связи между частицами (посредством потенциальных сил, через общее поле скоростей) и с различными способами задания неравновесности (трение Рэлея, кусочно-линейное трение).

Результаты моделирования плотноупакованных цепочек и решеток активных частиц позволили определить, как протекают метастабильные процессы, оказывающие влияние на интегральные характеристики системы. Были классифицированы метастабильные состояния двумерных активных решеток и обнаружена способность таких решеток восстанавливать свою структуру после локализованного внешнего воздействия.

Проведенные исследования позволили выявить общие свойства и различия в динамике цепочек осцилляторов и цепочек активных частиц на примере цепочки осцилляторов Рэлея.

Значительная часть исследований была связана с изучением влияния шума на стационарные режимы ансамблей. В частности, было обнаружено, что при варьировании интенсивности шума изменяются преимущественные направления переключений между стационарными модами.

В итоге проведенных исследований были получены следующие основные результаты диссертационной работы:

1. Показано, что в цепочках активных частиц с нелинейной потенциальной связью возможно возбуждение метастабильных состояний с неравномерным пространственным распределением дискретных диссипативных соли-

тонов (максимумов плотности и скорости частиц), представляющих собой длительные переходные процессы, заканчивающиеся с установлением равномерного пространственного распределения солитонов. Определены характерные времена жизни метастабильных состояний при различных значениях параметров. В частности, обнаружено, что длительность переходных процессов нарастает по экспоненте с ростом количества частиц в ансамбле.

2. Показано, что в цепочке активных частиц с нелокальной связью между ними возникают новые виды стационарных состояний в виде равномерно распределенных кластеров различного числа солитонов.
3. Обнаружено, что в цепочках осцилляторов Рэля возможно возбуждение диссипативных дискретных бризеров.
4. Установлено, что под влиянием шума в цепочке активных частиц происходит переключение мод (возбуждение и разрушение солитонов). Преимущественное направление переключений зависит от интенсивности шума; шум малой интенсивности уменьшает число солитонов, тогда как увеличение интенсивности шума стимулирует возбуждение новых солитонов.
5. Установлено, что в двумерных решетках активных частиц возможно возбуждение нескольких типов метастабильных состояний, включая одиночные плоские солитоноподобные волны и состояния с несколькими равномерно распределенными плоскими солитоноподобными волнами, подковообразные и квазиодномерные солитоноподобные волны, краудионы. Все метастабильные состояния трансформируются со временем в наиболее устойчивую трансляционную моду (режим полной синхронизации), которая является аттрактором решетки в пространстве скоростей.
6. При глобальном взаимодействии поведение двумерного ансамбля частиц, взаимодействующих через общее поле, состоящего из $10 < N < 300$ частиц,

соответствует поведению ансамблей с бесконечным числом частиц. В частности, наблюдаются индуцированные шумом переходы между упорядоченным и неупорядоченным состояниями ансамбля. Показано, что для малых ($N < 100$) ансамблей в пространстве параметров существует область бистабильности, внутри которой сосуществуют два различных стационарных распределения скорости. В области бистабильности каждое из двух стационарных состояний с разными вероятностными распределениями скорости частиц может быть реализовано селективно соответствующим заданием начальных условий. Границы области бистабильности обусловлены жесткими стохастическими бифуркациями исчезновения одного вероятностного распределения скорости и возникновения другого. При уменьшении числа частиц в ансамбле область бистабильности смещается в сторону больших значений коэффициента жесткости связи между частицами. В присутствии аддитивного шума явление бистабильности сменяется явлением бимодальности, состоящим в существовании двух значений абсолютной величины скорости частицы, при которых реализуется максимальная плотность вероятности. Можно выделить область бимодальности в пространстве параметров, границы которой соответствуют мягким стохастическим бифуркациям, идентифицируемым по возникновению (исчезновению) экстремумов вероятностного распределения скорости.

7. В молекулах ДНК с закрепленными концами можно возбуждать мобильные дискретные бризеры за счет начального возмущения скорости или координат небольшого числа смежных нуклеотидных пар, расположенных у одного из концов цепочки, если взаимодействие между нуклеотидными парами превышает определенный порог. Мобильные бризеры возбуждаются как при положительном направлении одинаковых возмущений скорости (от оси), так и при отрицательном (к оси), причем параметры бризеров (скорость, частота колебаний, энергия, ширина) примерно одинаковы в

обоих случаях, если возбуждается одинаковое число пар и сопоставимы энергии возмущений. Длина пробега бризера может составлять несколько десятков межпарных расстояний и не критично зависит от значений параметров, однако оптимальные условия формирования соответствуют начальному возмущению 2-4 смежных пар, расположенных вплотную к одному из концов молекулы.

Таким образом, поставленная цель диссертационной работы достигнута и основные задачи решены. В то же время, некоторые из задач, рассмотренных в диссертации, представляют собой сложные и многогранные проблемы и требуют дальнейшего изучения. В частности, представляет интерес изучение процессов распространения диссипативных краудионов, рассмотренных в Главе 2, в «нагретых» решетках. Также возможна дальнейшая разработка вопросов возбуждения и распространения мобильных бризеров в молекуле ДНК. Настоящая диссертационная работа, таким образом, может служить основой для проведения дальнейших исследований в различных областях нелинейной динамики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Nekorkin, V. I.* Travelling waves in a circular array of Chua's circuits / V. I. Nekorkin, V.B. Kazantsev, M. G. Velarde // *Int. J. Bif. and Chaos.* — 1996. — Vol. 6. — Pp. 473–484.
2. *Kazantsev, V.B.* Pulses, fronts and chaotic wave trains in a one-dimensional Chua's lattice / V.B. Kazantsev, V. I. Nekorkin, M.G. Velarde // *Int. J. Bif. and Chaos.* — 1997. — Vol. 7, no. 8. — Pp. 1775–1790.
3. Pattern interaction and spiral waves in a two-layer system of excitable units / V. I. Nekorkin, V.B. Kazantsev, M.G. Velarde, L.O. Chua // *Phys. Rev. E.* — 1998. — Vol. 58, no. 2. — Pp. 1764–1773.
4. *Nekorkin, V. I.* Clustering and phase resetting in a chain of bistable non-isochronous oscillators / V. I. Nekorkin, V.A. Makarov, M.G. Velarde // *Phys. Rev. E.* — 1998. — Vol. 58, no. 5. — Pp. 5742–5747.
5. *Makarov, V.A.* Phase resetting, clusters and waves in a lattice of oscillatory units / V.A. Makarov, V. I. Nekorkin, M.G. Velarde // *Int. J. Bifurcation and Chaos.* — 2001. — Vol. 11, no. 1. — Pp. 109–122.
6. *Vadivasova, T.E.* Phase-frequency synchronization in a chain of periodic oscillators in the presence of noise and harmonic forcings / T.E. Vadivasova, G.I. Strelkova, V.S. Anishchenko // *Phys. Rev. E.* — 2001. — Vol. 63. — P. 036225.
7. Бегущие волны в дискретной ангармонической автоколебательной среде / А.В. Шабунин, А.А. Акопов, В.В. Астахов, Т.Е. Вадивасова // *Известия вузов «Прикладная нелинейная динамика».* — 2005. — Т. 13, № 4. — стр. 37–55.

8. *Kuznetsov, S.P.* Hyperbolic attractor in a system of coupled non-autonomous van der Pol oscillators: Numerical test for expanding and contracting cones / S.P. Kuznetsov, I.R. Sataev // *Physics Letters A.* — 2007. — Vol. 365, no. 1-2. — Pp. 97–104.
9. A structure of the oscillation frequencies parameter space for the system of dissipatively coupled oscillators / Yu.P. Emelianova, A.P. Kuznetsov, L.V. Turukina et al. // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation.* — 2014. — Vol. 19, no. 4. — Pp. 1203–1212.
10. *Yeldesbay, A.* Chimeralike States in an Ensemble of Globally Coupled Oscillators / A. Yeldesbay, A. Pikovsky, M. Rosenblum // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Vol. 112. — P. 144103.
11. Collective dynamics of identical bistable self-sustained oscillators with delayed feedback coupled via a mean field / V.I. Ponomarenko, D.D. Kulminskii, A.S. Karavaev, M.D. Prokhorov // *Technical Physics Letters.* — 2017. — Vol. 43, no. 3. — Pp. 309–312.
12. *Morse, M.* Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels / M. Morse // *Physical Review - PHYS REV X.* — 1929. — Vol. 34. — Pp. 57–64.
13. *Toda, M.* Theory of Nonlinear Lattices / M. Toda. — Springer-Verlag, 1989.
14. *Jones, J.E.* On the determination of molecular fields. — II. From the equation of state of a gas / J.E. Jones // *Proc. R. Soc. Lond. A.* — 1924. — Vol. A 106. — P. 463.
15. *Fermi, E.* Studies of nonlinear problems. / E. Fermi, J. R. Pasta, S. M. Ulam // *Los Alamos Nat. Lab. Report LA-1940.* — 1965. — Pp. 978–988.

16. Nonlinear Dynamics and Fluctuations of Dissipative Toda Chains / W. Ebeling, U. Erdman, J. Dunkel, M. Jenssen // *J.Stat.Phys.* — 2000. — Vol. 101. — Pp. 443–457.
17. *Dunkel, J.* Thermodynamics and transport in an active Morse ring chain / J. Dunkel, W. Ebeling, U. Erdman // *Eur. Phys. J.* — 2001. — Vol. B24. — P. 511.
18. Dissipative Toda-Rayleigh lattice and its oscillatory modes / V.A. Makarov, E. del Rio, W. Ebeling, M.G. Velarde // *Phys. Rev. E.* — 2001. — Vol. E64. — Pp. 366011–366014.
19. *Ebeling, W.* Self-oscillations in ring Toda chains with negative friction / W. Ebeling, P.S. Landa, V.G. Ushakov // *Phys. Rev. E.* — 2001. — Vol. 63, no. 4. — P. 8.
20. Coherent motions and clusters in a dissipative Morse ring chain / J. Dunkel, W. Ebeling, U. Erdman, V.A. Makarov // *Int. J. Bif. and Chaos.* — 2002. — Vol. 12. — P. 2350.
21. *Chetverikov, A.P.* Phase behavior and collective excitations of the Morse ring chain / A.P. Chetverikov, J. Dunkel // *Eur. Phys. J.* — 2003. — Vol. B35. — Pp. 239–253.
22. Mode transitions and wave propagation in a driven-dissipative Toda – Rayleigh ring / E. del Rio, V.A. Makarov, M.G. Velarde, W. Ebeling // *Phys. Rev. E.* — 2003. — Vol. 67, no. 5. — P. 9.
23. A dissipative one-dimensional collision model with intermediate energy storage / J. Dunkel, W. Ebeling, J. Schmelzer, G. Ropke // *Physica D.* — 2003. — Vol. 185. — Pp. 158–174.

24. *Chetverikov, A.P.* Thermodynamic and phase transitions in dissipative and active Morse chain / A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde // *Eur. Phys. J.* — 2005. — Vol. 44. — Pp. 509–519.
25. *Velarde, M.G.* On the possibility of electric conduction mediated by dissipative solitons / M.G. Velarde, W. Ebeling, A.P. Chetverikov // *Int. J. Bifurcation and Chaos.* — 2005. — Vol. 15. — Pp. 245–251.
26. *Chetverikov, A.P.* Nonlinear excitations and electric transport in dissipative Morse-Toda lattices / A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde // *Eur. Phys. J. B.* — 2006. — Vol. 51. — Pp. 87–99.
27. *Chetverikov, A.P.* Dissipative solitons and complex currents in active lattices / A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde // *International Journal of Bifurcation and Chaos.* — 2006. — Vol. 16. — Pp. 1613–1632.
28. Anharmonicity and its significance to non-Ohmic electric conduction / V.A. Makarov, M.G. Velarde, A.P. Chetverikov, W. Ebeling // *Phys. Rev. E.* — 2006. — Vol. 73. — Pp. 066626–066638.
29. *Chetverikov, A.P.* Dynamical Clustering in Chains of Atoms with Exponential Repulsion / A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde // *Nucleation Theory and Applications*, Dubna, JINR. — 2006. — Pp. 64–84.
30. *Chetverikov, A.P.* Localized nonlinear, soliton-like waves in two-dimensional anharmonic lattices / A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde // *Wave Motion.* — 2011. — Vol. 48, no. 8. — Pp. 753–760.
31. *Chetverikov, A.P.* Soliton-like excitations and solitons in two-dimensional nonlinear lattices / A.P. Chetverikov, W. Ebeling, Velarde M.G. // *The European Physical Journal B.* — 2011. — Vol. 80, no. 2. — Pp. 137–145.

32. *Chetverikov, A.P.* Properties of nano-scale soliton-like excitations in two-dimensional lattice layers / A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. — 2011. — Vol. 240, no. 24. — Pp. 1954–1959.
33. *Dmitriev, S.V.* Supersonic N-crowdions in a two-dimensional Morse crystal / S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova, A.P. Chetverikov // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — 2018. — Vol. 126, no. 3. — Pp. 347–352.
34. Highly enhanced transport by supersonic N-crowdions / S.V. Dmitriev, N.N. Medvedev, A.P. Chetverikov et al. // *Physica Status Solidi - Rapid Research Letters*. — 2017. — Vol. 11, no. 12. — P. 5.
35. Breathing subsonic crowdion in Morse lattices / A.P. Chetverikov, I.A. Shepelyev, E.A. Korznikova et al. // *Computational Condensed Matter*. — 2017. — Vol. 13. — Pp. 59–64.
36. *Reimann, P.* Brownian motors: noisy transport far from equilibrium / P. Reimann // *Physics Reports*. — 2002. — Vol. 361, no. 2-4. — Pp. 57–265.
37. Quantitative analysis of random ameoboid motion / H.U. Bödeker, C. Beta, T.D. Frank, E. Bodenschatz // *Europhysics Letters*. — 2010. — Vol. 90, no. 2. — P. 28005.
38. Cell motility as random motion: A review / D. Selmecki, L. Li, L. I.I. Pedersen et al. // *Eur. Phys. J. Special Topics*. — 2008. — Vol. 157, no. 1. — Pp. 1–15.
39. *Komin, N.* Random walks theory applied to daphnia motion / N. Komin, U. Erdmann, L. Schimansky-Geier // *Fluctuation Noise Lett*. — 2004. — Vol. 4, no. 1. — Pp. 151–159.

40. *Howse, J.R.* Self-Motile Colloidal Particles: From Directed Propulsion to Random Walk / J.R. Howse, R.A.L. Jones, A.J. Ryan et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 99. — P. 048102.
41. Collective motion dynamics of active solids and active crystals / E. Ferrante, A.E. Turgut, M. Dorigo, C. Huepe // *New Journal of Physics.* — 2013. — Vol. 15.— P. 095011.
42. Scale-Free Correlations in Flocking Systems with Position-Based Interactions / C. Huepe, E. Ferrante, T. Wenseleers, Turgut A.E. // *J.Stat.Phys.* — 2015. — Vol. 158. — Pp. 549–562.
43. *Rein, M.* Applicability of effective pair potentials for active Brownian particles / M. Rein, T. Spech // *Eur. Phys. J. E.* — 2016. — Vol. 39, no. 84.
44. *Grauer, J.* Spontaneous membrane formation and self-encapsulation of active rods in an inhomogeneous motility field / J. Grauer, H. Lowen, L.M.C. Janssen // *Phys. Rev. E.* — 2018. — Vol. 97. — P. 022608.
45. Active Brownian Particles: From Individual to Collective Stochastic Dynamics / P. Romanczuk, M. Bar, W. Ebeling et al. // *Eur. Phys. J. Special Topics.* — 2012. — Vol. 202, no. 1. — Pp. 1–162.
46. *Saintillan, D.* Instabilities and Pattern Formation in Active Particle Suspensions: Kinetic Theory and Continuum Simulations / D. Saintillan, M.J. Shelley // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 100. — P. 178103.
47. Pattern Formation in Self-Propelled Particles with Density-Dependent Motility / F. D. C. Farrell, M. C. Marchetti, D. Marenduzzo, J. Tailleur // *Phys. Rev. Lett.* — 2012. — Vol. 108.— P. 248101.

48. *Lobaskin, V.* Collective dynamics in systems of active Brownian particles with dissipative interactions / V. Lobaskin, M. Romensky // *Phys. Rev. E.* — 2013. — Vol. 87. — P. 052135.
49. *Takatori, S.C.* A theory for the phase behavior of mixtures of active particles / S.C. Takatori, J.F. Brady // *Soft Matter.* — 2015. — Vol. 11, no. 40. — Pp. 7920–31.
50. *Mallory, S. A.* Anomalous dynamics of an elastic membrane in an active fluid / S. A. Mallory, C. Valeriani, Cacciuto A. // *Phys. Rev. E.* — 2015. — Vol. 92.
51. Collective dynamics of soft active particles / R. Drongelen, A. Pal, C.P. Goodrich, T. Idema // *Phys. Rev. E.* — 2015. — Vol. 91. — P. 032706.
52. Active particles in complex and crowded environments / C. Bechinger, R. Leonardo, H. Lowen et al. // *Rev. Mod. Phys.* — 2016. — Vol. 88. — P. 045006.
53. *Schweitzer, F.* Brownian agents and active particles: collective dynamics in the natural and social sciences / F. Schweitzer — Springer Science and Business Media, 2007.
54. *Großmann, R.* Active Brownian particles and active fluctuations with velocity-alignment / R. Großmann, L. Schimansky-Geier, P. Romanczuk // *New Journal of Physics.* — 2012. — Vol. 14. — P. 073033.
55. Minimal model of active colloids highlights the role of mechanical interactions in controlling the emergent behavior of active matter / M. Marchetti, Ya. Fily, S. Henkes et al. // *Current Opinion in Colloid and Interface Science.* — 2016. — Vol. 21. — Pp. 34-43.

56. *Ebeling, W.* Active Brownian particles with energy depots modeling animal mobility / W. Ebeling, F. Schweitzer, B. Tilch // *BioSystems*. — 1999. — Vol. 49. — Pp. 17–29.
57. *Strutt, J.W.* Theory of Sound / J.W. Strutt // *Phil. Mag.* — 1883. — Vol. 15. — Pp. 229–232.
58. Brownian particles far from equilibrium. / U. Erdman, W. Ebeling, L. Schimansky-Geier, F. Schweitzer // *Eur. Phys. J. B.* — 2000. — Vol. B15. — Pp. 105–113.
59. *Schienbein, M.* Langevin equation, Fokker-Planck equation and cell migration / M Schienbein, H. Gruler // *Bull. Math. Biol.*. — 1993.— Vol. 55. — Pp. 585.
60. *Ebeling, W.* Active Brownian Motion — Stochastic Dynamics of Swarms / W. Ebeling, U. Erdmann. — 2005. — 01. — Pp. 277–286.
61. Novel Type of Phase Transition in a System of Self-Driven Particles / T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1995. — Vol. 75. — Pp. 1226–1229.
62. *Romensky, M.* Hysteretic dynamics of active particles in a periodic orienting field / M. Romensky, D. Scholz, V. Lobaskin // *J. R. Soc. Interface*. — 2015. — Vol. 12, no. 108.
63. Controlling active self-assembly through broken particle-shape symmetry / H. H. Wensink, V. Kantsler, R.E. Goldstein, J. Dunkel // *Phys. Rev. E*. — 2014. — Vol. 89, no. 1. — P. 010302.
64. *Alarcón, F.* Spontaneous aggregation and global polar ordering in squirmer suspensions / F. Alarcón, I. Pagonabarraga // *Journal of Molecular Liquids*. — 2013. — Vol. 185. — Pp. 56–61.

65. Hydrodynamics of suspensions of passive and active rigid particles: a rigid multiblob approach / F. Usabiaga, B. Kallemov, B. Delmotte et al. // *Communications in Applied Mathematics and Computational Science*. — 2016. — Vol. 11, no. 2. — Pp. 217–296.
66. *Romanczuk, P.* Swarming and Pattern Formation due to Selective Attraction and Repulsion / P. Romanczuk, L. Schimansky-Geier // *Interface Focus*. — 2012. — Vol. 2, no. 6. — Pp. 746–756.
67. *Großmann, R.* Self-propelled particles with selective attraction–repulsion interaction: from microscopic dynamics to coarse-grained theories / R. Großmann, L. Schimansky-Geier, P. Romanczuk // *New Journal of Physics*. — 2013. — Vol. 15. — P. 095011.
68. *Romanczuk, P.* Collective motion of active Brownian particles in one dimension / P. Romanczuk, U. Erdmann // *Eur. Phys. J. Special Topics*. — 2010. — Vol. 187. — Pp. 127–134.
69. *Romanczuk, P.* Mean-field theory of collective motion due to velocity alignment / P. Romanczuk, L. Schimansky-Geier // *Ecol. Complexity*. — 2012. — Vol. 10. — Pp. 82–92.
70. Chaotic breathers of two types in a two-dimensional Morse lattice with an on-site harmonic potential / K. Ikeda, Yu. Doi, Feng Bao-Feng, T. Kawahara // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. — 2007. — Vol. 225, no. 2. — Pp. 184–196.
71. Highly symmetric discrete breather in a two-dimensional Morse crystal / E.A. Korznikova, S. Fomin, E.G. Soboleva, S.V. Dmitriev // *JETP Letters*. — 2016. — Vol. 103. — Pp. 277–281.
72. Instability of vibrational modes in hexagonal lattice / E.A. Korznikova, D.V. Bachurin, S.Y. Fomin et al. // *European Physical Journal B*. — 2017. — Vol. 90, no. 2. — P. 8.

73. Дискретные бризеры в кристаллах / С.В. Дмитриев, Е.А. Корзникова, Ю.А. Баимова, М.Г. Веларде // *УФН*. — 2016. — Т. 186. — стр. 471–488.
74. *Шигаев, А.С.* Теоретические и экспериментальные исследования открытых состояний ДНК / А.С. Шигаев, О.А. Пономарёв, В.Д. Лахно // *Математическая биология и биоинформатика*. — 2013. — Т. 8, № 2. — стр. 553–664.
75. *Лахно, В.Д.* Возбуждение бабблов и бризеров в ДНК и их взаимодействие с носителями заряда / В.Д. Лахно, А.П. Четвериков // *Математическая биология и биоинформатика*. — 2014. — Т. 9, № 1. — стр. 4–19.
76. On the possibility that local mechanical forcing permits directionally-controlled long-range electron transfer along DNA-like molecular wires with no need of an external electric field / A.P. Chetverikov, W. Ebeling, V.D. Lakhno et al. // *The European Physical Journal B*. — 2016. — Vol. 89, no. 4. — P. 101.
77. *Dauxois, T.* Dynamics and thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation / T. Dauxois, M. Peyrard, A.R. Bishop // *Phys. Rev. E*. — 1993. — Vol. 47, no. 1. — Pp. 684–695.
78. *Conwell, E.M.* Polarons in DNA / E.M. Conwell, S.V. Rakhmanova // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. — 2000. — Vol. 97, no. 9. — Pp. 4556–4560.
79. *Lakhno, V.D.* Formation of stationary electronic states in finite homogeneous molecular chains / V.D. Lakhno, A.N. Korshunova // *Mathematical biology and bioinformatics*. — 2010. — Vol. 5, no. 1. — Pp. 1–29.
80. *Lakhno, V.D.* A polaron in molecular chains with dispersion / V.D. Lakhno, N.S. Fialko // *Glass Physics and Chemistry*. — 2011. — Vol. 37, no. 11. — Pp. 51–59.

81. *Lakhno, V.D.* Solvation effects on hole mobility in the poly G/Poly C duplex / V.D. Lakhno, N.S. Fialko // *Russian Journal of Physical Chemistry A.* — 2012. — Vol. 86, no. 5. — Pp. 832–836.
82. *Сергеев, К.С.* Индуцированный шумом переход в малом ансамбле активных броуновских частиц / К.С. Сергеев, Т.Е. Вадивасова, А.П. Четвериков // *Письма в журнал технической физики.* — 2014. — Т. 40, № 21. — стр. 88–96.
83. *Сергеев, К.С.* Динамика ансамбля активных броуновских частиц, управляемых шумом / К.С. Сергеев, Т.Е. Вадивасова, А.П. Четвериков // *Математическая биология и биоинформатика.* — 2015. — Т. 10, № 1. — стр. 72–87.
84. *Сергеев, К.С.* Метастабильные возбуждения в цепочке Морзе–Рэлея / К.С. Сергеев, А.П. Четвериков // *Нелинейная динамика.* — 2016. — Т. 2, № 3. — стр. 341–353.
85. *Четвериков, А.П.* Возбуждение мобильных дискретных бризеров в ДНК начальными возмущениями смещений или скоростей нескольких смежных нуклеотидных пар / А.П. Четвериков, К.С. Сергеев, В.Д. Лахно // *Математическая биология и биоинформатика.* — 2017. — Т. 12, № 2. — стр. 375–384.
86. *Четвериков, А.П.* Захват и транспорт зарядов в ДНК мобильными дискретными бризерами / А.П. Четвериков, К.С. Сергеев, Лахно В.Д. // *Математическая биология и биоинформатика.* — 2018. — Т. 13, № 1. — стр. 1–12
87. Stationary modes and localized metastable states in triangular lattice of active particles / K.S. Sergeev, S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova, A.P. Chetverikov //

- Russian Journal of Nonlinear Dynamics*. — 2018. — Vol. 14, no. 2. — Pp. 195-207
88. *Chetverikov, A.P.* Dissipative Solitons and Metastable States in a Chain of Active Particles / A.P. Chetverikov, K.S. Sergeev, E. del Rio // *International Journal of Bifurcation and Chaos*. — 2018. — Vol. 28, no. 08. — P. 1830027.
89. *Vadivasova, T.E.* Noise induced transition in a small ensemble of active brownian particles / T.E. Vadivasova, K.S. Sergeev // *Nonlinear Dynamics of Deterministic and Stochastic systems: Unraveling Complexity*. — Saratov: 2014. — May 19-21. — P. 49
90. *Sergeev, K.S.* Noise influence on steady states and metastable modes in a nonlinear chain of interacting non-oscillating elements / K.S. Sergeev, A.P. Chetverikov // *International conference on Control of Complex systems and Networks*. — Heringsdorf, Germany: 2016. — September 4-8. — P. 71
91. *Ляхно, В.Д.* Транспорт заряда мобильными бризерами в молекуле ДНК, возмущенной начальными смещениями нуклеотидных пар / В.Д. Ляхно, К.С. Сергеев, А.П. Четвериков // VI международная конференция «Математическая биология и биоинформатика». — Пущино: 2016. — 16-21 октября. — стр. 26-27
92. *Сергеев, К.С.* Плоские солитоны в двумерной решетке активных частиц / К.С. Сергеев, А.П. Четвериков // XVIII научная школа «Нелинейные волны». — Нижний Новгород: 2018. — 26 февраля – 4 марта. — стр. 170–171.
93. *Сергеев, К.С.* Локализованные нелинейные волны в двумерной решетке активных частиц / К.С. Сергеев, А.П. Четвериков // *Материалы Международной научной конференции «Компьютерные науки и информационные технологии»*. — Саратов: 2018. — 2-3 июля. — стр. 355–359.

94. *М., Toda.* Теория нелинейных решеток / Тода М. — Москва, Мир, 1984.
95. *П.С., Ланда.* Нелинейные колебания и волны / Ланда П.С. — Москва: Наука, 1997.
96. *Романовский, Ю.М.* Молекулярная динамика ферментов / Ю.М. Романовский, В. Эбелинг. — Москва: Изд-во Моск. ун-та, 2000.
97. *Ebeling, W.* Stochastic Dynamics of Reacting Biomolecules / W. Ebeling, L. Schimansky-Geier, Yu. Romanovsky // World Scientific, Singapore. — 2002.
98. *Nekorkin, V. I.* Synergetic Phenomena in Active Lattices / V. I. Nekorkin, M.G. Velarde. — Springer Series in Synergetics, 2002.
99. *Schweitzer, F.* Complex motion of Brownian particles with energy depots / F. Schweitzer, W. Ebeling, B. Tilch // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Vol. 80. — Pp. 5044–5048.
100. *Климонтович, Ю.Л.* Нелинейное броуновское движение / Ю.Л. Климонтович // *УФН.* — 1994. — Т. 164. — стр. 811-844.
101. *Кернер, В.С.* Автосолитоны / В.С. Кернер, В.В. Осипов. — Москва: Наука, 1991.
102. *Velarde, M. G.* Solitons as dissipative structures / M. G. Velarde // *Int. J. Quant. Chem. (Special Issue).* — 2004. — Vol. 98. — Pp. 272–280.
103. *Четвериков, А.П.* Солитоны и кластеры в одномерных ансамблях взаимодействующих броуновских частиц / А.П. Четвериков, В. Эбелинг, М.Г. Веларде // *Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика.* — 2006. — Т. 6. — стр. 28.
104. *Peierls, R.* The size of a dislocation / R. Peierls // *Proceedings of the Physical Society.* — 1940. — Vol. 52, no. 1. — Pp. 34–37.

105. *Разевиг, В.Д.* Методы цифрового моделирования стохастических дифференциальных уравнений и оценка их погрешностей / В.Д. Разевиг, Н.Н. Никитин // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. — 1978. — Т. 18, № 1. — стр. 107.
106. *Arnold, L.* Random Dynamical System / L. Arnold. — Berlin: Springer, 2003.
107. *Lakhno, V. D.* DNA nanobioelectronics / V. D. Lakhno // *International Journal of Quantum Chemistry*. — 2008. — Vol. 108, no. 11. — Pp. 1970–1981.
108. *Lakhno, V.D.* Baseline logical elements on the basis of DNA / V.D. Lakhno, V.B. Sultanov // *International Journal of Quantum Chemistry*. — 2008. — Vol. 108, no. 11. — Pp. 1913–1920.
109. Nanobioelectronics - for Electronics, Biology, and Medicine / Ed. by A. Ofenhäusser, R. Rinaldi. — Springer-Verlag, New York, 2009.
110. *Lakhno, V.D.* Soliton-like Solutions and Electron Transfer in DNA / V.D. Lakhno // *Journal of biological Physics*. — 2000. — Vol. 26(2). — P. 133.
111. *Fialko, N.S.* Nonlinear dynamics of excitations in DNA / N.S. Fialko, V.D. Lakhno // *Physics Letters A*. — 2000. — Vol. 278. — P. 108.
112. *Yakushevich, L.I.* Nonlinear Physics of DNA / L.I. Yakushevich. — Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH, 2005.
113. Moving breathers in bent DNA with realistic parameters / J. Cuevas, E. B. Starikov, J. F. R. Archilla, D. Hennig // *Modern Physics Letters B*. — 2004. — Vol. 18, no. 25. — P. 1319.
114. *Фахретдинов, М.И.* Дискретные бризеры в модели ДНК Пейрара-Бишопа / М.И. Фахретдинов, Ф.К. Закирьянов // *Журнал технической физики*. — 2013. — Т. 83, № 7. — стр. 1-5.

115. *Aubry, S.* Mobility and reactivity of discrete breathers / S. Aubry, T. Cretegny // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. — 1998. — Vol. 119, no. 1. — Pp. 34–46.
116. From solitons to discrete breathers / M.G. Velarde, A.P. Chetverikov, W. Ebeling et al. // *The European Physical Journal B*. — 2016. — Vol. 89. — P. 233.