

PACS numbers: 05.40. – а, 64.70. – р

САМООРГАНІЗАЦІЯ В КОЛЕКТИВНІЙ ПОВЕДІНЦІ АКТИВНИХ ЧАСТИНОК

О.В. Ющенко, А.Ш. Баранова

Сумський державний університет,
вул. Р. Корсакова, 2, 40007, Суми, Україна
E-mails: yushchenko@phe.sumdu.edu.ua; mixifox@mail.ru

Досліджено феноменологічну схему, в рамках якої на основі трипараметричної системи Лоренца самоузгодженим чином описана самоорганізація сукупності активних наночастинок. Розглянуті безперервний та переривчастий типи переходу від обертального режиму руху до поступального. Досліджено вплив флуктуацій на перехід та побудовані діаграми можливих режимів поведінки групи активних наночастинок. На основі фазових портретів проаналізована кінетика переходу між обертальним та поступальним режимами руху для різних співвідношень між часами зміни основних параметрів системи.

Ключові слова: СЕРЕДНЯ ШВИДКІСТЬ, ДАЛЕКОДІЙНА СИЛА, ПАРАМЕТР ВНУТРІШНЬОГО СТАНУ, ФУНКЦІЯ РОЗПОДІЛУ, ФАЗОВИЙ ПОРТРЕТ.

(Одержано 05.03.2010, у відредагованій формі – 26.04.2010)

1. ВСТУП

На сьогоднішній день одним із найпрогресивніших напрямків розвитку сучасної науки вважаються нанотехнології, які впроваджуються практично у всі сфери життєдіяльності, а особливо в біологію та медицину [1-19]. Останнє пояснюється тим, що основними об'єктами для вивчення, діагностики та лікування є клітини, бактерії, віруси, різні макромолекули і т.д. Відмінна риса таких об'єктів, здатність до самоорганізації, активно використовується при моделюванні поведінки біологічних систем, або при створенні штучних біологічних структур. Тому одним із актуальних завдань сьогодення постає дослідження колективної поведінки наночастинок [5-20].

Але, незважаючи на велику кількість робіт [5-20], єдиної аналітичної схеми, що дозволяє описати поведінку наночастинок, їх колективний рух та можливе структуроутворення, на даний момент не існує. Більшість робіт охоплює тільки деякі аспекти цієї проблеми, ґрунтуючись на чисельному експерименті. Наприклад, у роботах [5,6] чисельно проаналізована молекулярна динаміка наночастинок різного типу; у роботі [8] досліджувалася динаміка руху співполімерних стабілізованих наночастинок на основі моделі броунівського руху; оптимізація руху скупчення наночастинок розглянута у [6-12]; у [13] моделюється самоорганізація наночастинок в суспензії; за допомогою дослідження мікроскопічних сил між наночастинками у [14,15,20] описані макроскопічні властивості всієї сукупності наночастинок; в роботі [18] розглянута кристалізація наночастинок різних розмірів; у [19] – спрямований рух біологічних наночастинок для доставки ліків.

В результаті постає питання, чи можливо описати самоорганізацію сукупності наночастинок за допомогою єдиного феноменологічного підходу. За аналогією з [8] дослідження поведінки такої сукупності проведемо на основі моделі броунівського руху, але для *активних* броунівських частинок. Термін *активні* легше за все зрозуміти на прикладі біологічних наночастинок, що не лише здійснюють неупорядкований рух, а й мають запас внутрішньої енергії, яка потім перетворюється в механічну.

Системи, що випробовують самоорганізацію, останнім часом широко вивчаються [21]. При цьому вони не обмежуються лише об'єктами неживої природи, коли індивідуальні риси складових системи практично не враховуються, а поширюються на економічні, соціальні та біологічні системи. Багатьох вчених ще з XIX століття цікавила ідея опису поведінки біологічних систем за допомогою методів теоретичної фізики (див. [22, 23] і посилання у них). Ця проблема зумовлена складністю біологічних систем, які мають безліч складових, що взаємодіють між собою нелінійним чином, у зв'язку з чим поведінка всієї системи не наслідуює поведінку її складових. З іншого боку, природні складні системи мають дисипативний характер, тому їх самоорганізація вимагає додаткової зовнішньої енергії.

Відомо, що використання моделей, які базуються на методах нелінійної динаміки та теорії самоорганізації, дозволило пояснити структурування для багатьох біологічних об'єктів в різних діапазонах від нанометрового до кілометрового [23-26]. Як показують дослідження [23-26], типи руху біологічних об'єктів не залежать від рівня біологічної сукупності, починаючи з вірусів, клітин і бактерій, закінчуючи високоорганізованими птахами, рибами і т.д. Це дозволяє подати такі сукупності як ансамблі активних броунівських частинок, кожна з яких, маючи запас внутрішньої енергії, може змінювати свій внутрішній стан, що задається параметром θ . Враховуючи взаємодію між частинками, можна описати динаміку сукупності, зумовлену дією, наприклад, хімічного реагенту (або дією магнітного поля). Виділення такого реагенту призводить до просторово-часового розподілу $h(r, t)$ концентрації хімічних продуктів, що еквівалентно появі поля, $f \equiv \nabla h(r, t)$, яке задається градієнтом концентрації цих продуктів. Характерно, що реакція частинки на хімічний сигнал зводиться не тільки до її зміщення в просторі, але й до утворення хімічних продуктів, склад яких визначається параметром внутрішнього стану θ . В результаті виявляється, що група активних частинок може здійснювати:

- обертальний рух навколо відносно порожнього центру мас, в результаті чого скупчення утворює тороїдальну форму (при цьому центр мас залишається у спокої);
- поступальний рух, коли сукупності рухається як ціле, утворюючи щільну групу;
- переривчастий рух (послідовне чергування зазначених вище режимів).

У роботі [23] розпочата спроба подання зазначених режимів руху, але розвинена авторами схема не є самоузгодженою. Це пов'язано з тим, що один із параметрів, який визначає поведінку системи, задається штучним чином, а саме, внутрішній параметр набуває лише два значення $\theta = \pm 1$.

В даній роботі наведена та досліджена феноменологічна схема, в рамках якої самоорганізацію сукупності активних наночастинок подано самоузгодженим чином. Наш підхід ґрунтується на трипараметричній системі Лоренца, яка відповідає найпростішому польовому поданню системи, що самоорганізується. В першому розділі розглянуто синергетичний перехід від обертального режиму руху до поступального. Розділ 2 присвячений дослідженню кінетики безперервного переходу між обертальним та поступальним режимами руху. У третьому розділі проаналізовано переривчастий перехід між вказаними режимами руху, та умови його реалізації. В останньому розділі 4 досліджені можливі режими переривчастого переходу для різних співвідношень між часами зміни основних параметрів.

2. СИНЕРГЕТИКА КОЛЕКТИВНОЇ ПОВЕДІНКИ АКТИВНИХ ЧАСТИНОК

Використовуючи приклад конденсованого середовища [27], дослідити систему, що самоорганізується, можна за допомогою самоузгодженого опису часових залежностей параметра порядку, сполученого йому поля та керуючого параметра. В якості параметру порядку, що розрізняє стани поступального та обертального режимів руху, необхідно взяти середню швидкість руху активних наночастинок v . Відповідно сполучене поле задається далекодійною силою $f \equiv \nabla h(r, t)$ хімічного типу, а керуючий параметр θ характеризує внутрішній стан, який визначається реакцією наночастинок на цю силу. В результаті задача зводиться до виразу швидкостей зміни $\dot{v}, \dot{f}, \dot{\theta}$ зазначених величин через їх значення v, f, θ (далі для простоти розглянемо одновимірний випадок).

З огляду на те, що параметр порядку $v(t)$ є основним, а його поведінка наслідуються силою $f(t)$ та внутрішнім параметром $\theta(t)$, співвідношення для середнього прискорення запишемо в лінійній формі

$$\tau_v \dot{v} = -v + A_v f. \quad (1)$$

Тут перший доданок у правій частині враховує релаксацію швидкості до нульового значення за час τ_v , а другий описує лінійну реакцію прискорення \dot{v} на зростання поля f ($A_v > 0$ – константа зв'язку). Рівняння для сполученого поля беремо у вигляді

$$\tau_f \dot{f} = -f + A_f v \theta, \quad (2)$$

де перший доданок знову має релаксаційну природу з характерним часом τ_f , другий виражає позитивний зворотній зв'язок середньої швидкості руху й параметра внутрішнього стану зі швидкістю зміни сполученого поля ($A_f > 0$ – константа зв'язку). Саме цей зв'язок обумовлює зростання сполученого поля, що є причиною самоорганізації.

Останнє рівняння еволюції системи описує релаксацію параметра внутрішнього стану θ , який відіграє роль керуючого параметра:

$$\tau_\theta \dot{\theta} = (\theta_e - \theta) - A_\theta v f. \quad (3)$$

На відміну від (1), (2) перший доданок в рівнянні (3) описує релаксацію параметра θ не до нуля, а до кінцевого значення θ_e , яке задається зовнішнім впливом (τ_f – відповідний час релаксації, $A_\theta > 0$ – константа зв'язку). Згідно з (3) негативний зворотний зв'язок далекодійної сили та швидкості руху частинок зі швидкістю зміни параметра внутрішнього стану призводить до зменшення цього параметра, відповідно до принципу Ле-Шательє.

Згідно [28] система синергетичних рівнянь (1)-(3) є найпростішою польовою схемою, що подає ефект самоорганізації. Для аналізу цієї системи зручно скористатися безрозмірними змінними, а саме віднести час t , швидкість руху v сполучене поле f та параметр внутрішнього стану θ до наступних масштабів

$$t_v, v_c \equiv (A_f A_\theta)^{-1/2}, \quad f_c \equiv (A_v^2 A_f A_\theta)^{-1/2}, \quad \theta_c \equiv (A_v A_f)^{-1}. \quad (4)$$

В результаті поведінка групи активних частинок подається безрозмірною системою рівнянь:

$$\dot{v} = -v + f, \quad (5)$$

$$\sigma \dot{f} = -f + v\theta, \quad (6)$$

$$\delta \dot{\theta} = (\theta_e - \theta) - v f, \quad (7)$$

де співвідношення між характерними часами релаксації позначені як

$$\sigma \equiv \frac{\tau_f}{\tau_v}, \quad \delta \equiv \frac{\tau_\theta}{\tau_v}. \quad (8)$$

Монотонний режим самоорганізації реалізується, коли час релаксації середньої швидкості τ_v набагато більший ніж масштаби зміни сполученого поля τ_f та керуючого параметра τ_θ [21]:

$$\delta, \sigma \ll 1. \quad (9)$$

Оскільки безрозмірні швидкості $\dot{v}, \dot{f}, \dot{\theta}$ мають однаковий порядок, то умова (9) дозволяє знехтувати лівими частинами рівнянь (6), (7), що призводить до співвідношень

$$f = \theta_e \frac{v}{1+v^2}, \quad \theta = \frac{\theta_e}{1+v^2}. \quad (10)$$

Таким чином, спонтанне зростання середньої швидкості в інтервалі, обмеженому максимальним значенням v_c , призводить до збільшення далекодійної сили f і до зменшення параметра внутрішнього стану θ від значення $\theta_e/3$, що фіксується зовнішнім впливом, до $\theta_e/2$ (див. рис.1).

Підстановка першої із рівностей (10) до (5) дає рівняння Ландау-Халатнікова:

$$\dot{v} = -\frac{\partial E}{\partial v}, \quad (11)$$

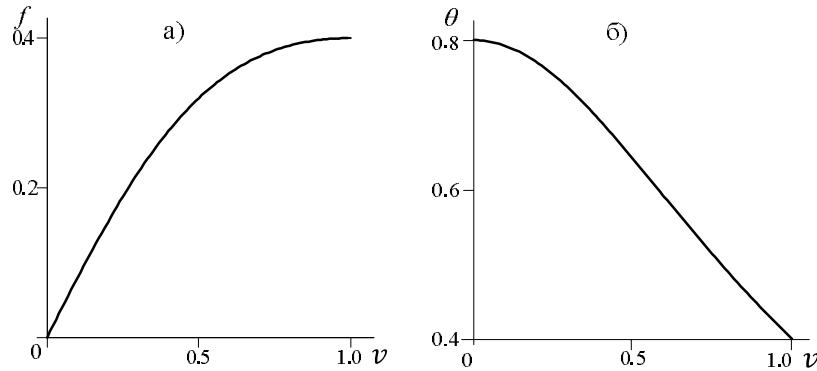


Рис. 1 – Залежність сполученого поля f (а) та параметру внутрішнього стану θ (б) від середньої швидкості v при $\theta_e = 0,8$

вигляд якого визначається кінетичною енергією руху

$$E = \frac{v^2}{2} - \frac{\theta_e}{2} \ln(1 + v^2), \quad (12)$$

що вимірюється в одиницях v_c^2 . Для малих значень параметра внутрішнього стану θ_e залежність $E(v)$ має монотонно зростаючий вигляд (рис. 2) з мінімумом $v_0 = 0$, що відповідає обертовому руху (невпорядкований стан). З ростом θ_e до значень, що перевищують критичний рівень θ_c , з'являється мінімум

$$v_0 = \sqrt{\theta_e - 1}, \quad (13)$$

який відповідає поступальному руху (впорядкований стан). При цьому далекодійна сила набуває кінцевого значення $v_0 = f_0$ а параметр внутрішнього стану зменшується до критичного значення $\theta_0 = 1$.

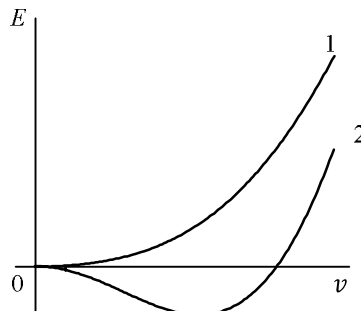


Рис. 2 – Залежність кінетичної енергії E від середньої швидкості v . Крива 1 відповідає $\theta_e = 0,8$, крива 2 – $\theta_e = 1,4$

Проведений аналіз показує, що використання системи (5)-(7) дозволяє подати самоузгоджену картину спонтанного переходу групи активних частинок від обертального до поступального режиму руху.

3. КІНЕТИКА БЕЗПЕРЕРВНОГО ПЕРЕХОДУ МІЖ ОБЕРТАЛЬНИМ І ПОСТУПАЛЬНИМ РЕЖИМАМИ РУХУ

3.1 Випадок $\tau_f \ll \tau_v, \tau_\theta$

Починаючи дослідження немонотонної поведінки, розглянемо випадок, коли найменше значення має час релаксації далекодієвої сили, яка наслідуює зміни середньої швидкості та параметра внутрішнього стану. За таких умов коливаннями далекодієвої сили можна знехтувати, приймаючи в (6) $\dot{f} = 0$. Це дає зв'язок

$$f = v\theta, \quad (14)$$

врахування якого в рівняннях (5)-(7) призводить до системи

$$\dot{v} = -v(1 - \theta), \quad (15)$$

$$\dot{\theta} = \delta^{-1}[\theta_e - \theta(1 + v^2)]. \quad (16)$$

Її поведінка задається характерним значенням параметра внутрішнього стану θ_e , що визначає ступінь невривноваженості системи, і співвідношенням характерних часів зміни параметра θ і середньої швидкості

$$\delta \equiv \frac{\tau_\theta}{\tau_v}. \quad (17)$$

У загальному випадку стандартний аналіз [29] системи (15)-(16) показує, що її фазовий портрет характеризується наявністю двох особливих точок $D(\theta_e, 0)$ і $O(1, v_0)$ з координатами $\theta = \theta_e$, $v = 0$ і $\theta = 1$, $v = v_0$ відповідно, де v_0 визначається рівністю (13). Таким чином, у точці D реалізується обертальний режим руху, що відповідає нульовій середній швидкості, а в точці O – поступальний режим руху, де середня швидкість $v \neq v_0$. Показники Ляпунова для цих точок визначаються рівняннями

$$\lambda_D = \frac{\delta(\theta_e - 1) - 1}{2\delta} \left\{ 1 \pm \sqrt{1 + \frac{4\delta(\theta_e - 1)}{[\delta(\theta_e - 1) - 1]^2}} \right\}, \quad (18)$$

$$\lambda_O = -\frac{\theta_e}{2\delta} \left\{ 1 \pm \sqrt{1 - 8\delta \frac{\theta_e - 1}{\theta_e^2}} \right\}. \quad (19)$$

Звідси видно, що в докритичній області ($\theta_e < 1$), коли характерне значення параметра внутрішнього стану менше критичного $\theta_c = 1$, точка D представляє стійкий вузол, а точка O відсутня. В результаті система активних частинок набуває режиму обертального руху D відповідно до фазового портрету, наведеного на рис. 3 а.

Зростання параметра (17) призводить до закручування траєкторій навколо точки D , що вказує на тенденцію до коливального режиму, який виявляється зі збільшенням інерційності зміни параметра внутрішнього стану в порівнянні з середньою швидкістю ансамблю активних частинок.

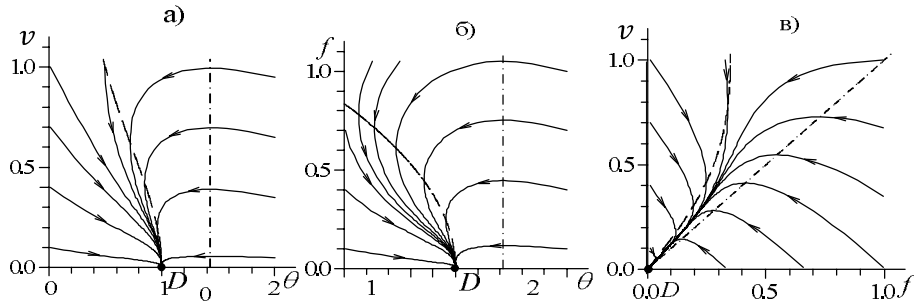


Рис. 3 – Фазові портрети обертального режиму руху ($\theta_e = 0,7\theta_c$): $\tau_f \ll \tau_v = \tau_\theta$ (а); $\tau_v \ll \tau_f = \tau_\theta$ (б); $\tau_\theta \ll \tau_f = \tau_v$ (в). Тут і далі штрихова лінія вказує точки, де фазові траєкторії мають вертикальну дотичну, штрих-пунктирна – горизонтальну

Як видно з фазового портрета, наведеного на рис. 4, ця тенденція реалізується повною мірою при переході до області, де характерне значення параметра внутрішнього стану θ_e перевищує критичне значення.

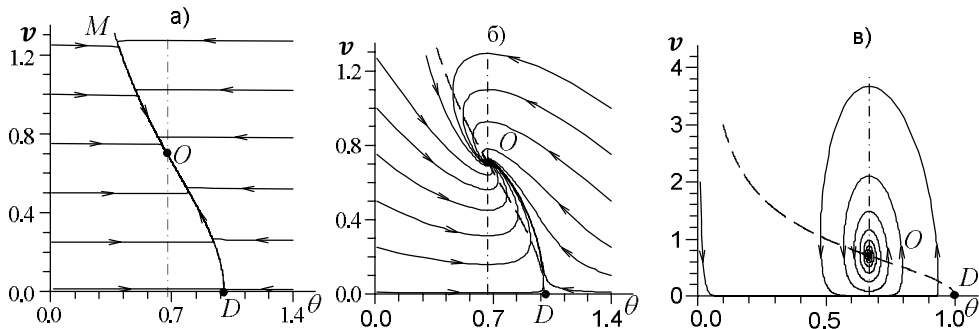


Рис.4 – Фазові портрети поступального режиму руху ($\theta_e = 1,5\theta_c$): $\tau_f \ll \tau_v = 100\tau_\theta$ (а); $\tau_f \ll \tau_v = \tau_\theta$ (б); $\tau_f \ll \tau_\theta = 100\tau_v$ (в)

Тут точка D трансформується в сідло, і з'являється додаткова точка O , що відповідає поступальному режиму руху. При значеннях параметра δ обмежених величиною

$$\delta_c = \frac{\theta_e^2}{8(\theta_e - 1)}, \quad (20)$$

ця точка являє собою стійкий вузол, а з його зростанням до значень $\delta > \delta_c$ – стійкий фокус. У першому випадку поступальний рух сукупності активних частинок досягається за рахунок монотонної зміни

характерного параметра внутрішнього стану і середньої швидкості руху, в другому – реалізується режим згасаючих коливань цих величин.

Проведений розгляд показує, що при $\tau_v \ll \tau_\theta$ у закритичній області $1 < \theta_e \leq 2$ виникає коливальний режим переходу системи до поступального режиму руху: згідно рис. 4в зменшення середньої швидкості призводить до збільшення параметра внутрішнього стану, зростання якого викликає зростання середньої швидкості, що зменшує згодом параметр внутрішнього стану.

Обернена межа $\tau_\theta \ll \tau_v$ відповідає адіабатичному наближенню, що становить стандартну картину переходу. Відповідно до фазових портретів на рис. 4 зменшення параметру $\delta \rightarrow 0$ призводить до збігання всіх траєкторій до ділянки MOD , положення якої не залежить від мікроскопічних деталей системи. З рис. 4а видно, що до цієї ділянки параметр внутрішнього стану швидко змінюється, а потім повільно еволюціонує за нею (при цьому ефект уповільнення позначається тим сильніше, чим менше параметр неадіабатичності δ). З формальної точки зору ділянка MOD відповідає притягуючій множині, яку називають *русло великої річки*.

3.2 Випадок $\tau_v \ll \tau_f, \tau_\theta$

Розглянемо тепер випадок, коли середня швидкість руху сукупності активних частинок змінюється настільки швидко, що встигає наслідувати зміни далекодійної сили і параметра внутрішнього стану. В результаті можна прийняти в (5) $\dot{v} = 0$, що призводить до зв'язку

$$v = f. \quad (21)$$

Його підстановка до (6), (7) дає систему

$$\dot{f} = -f(1 - \theta), \quad (22)$$

$$\dot{\theta} = \tau^{-1} \left[\theta_e - (\theta + f^2) \right], \quad (23)$$

де час t вимірюється в одиницях τ_f і введене співвідношення характерних часів

$$\tau \equiv \tau_\theta / \tau_f. \quad (24)$$

Аналогічно попередньому випадку фазовий портрет визначається особливими точками $D(\theta_e, 0)$ і $O(1, f_0)$, де величина

$$f_0 = \sqrt{\theta_e - 1} \quad (25)$$

задає стаціонарне значення далекодійної сили. Показники Ляпунова зазначених точок мають вигляд

$$\lambda_D = \frac{\tau(\theta_e - 1) - 1}{2\tau} \left\{ 1 \pm \sqrt{1 + \frac{4\tau(\theta_e - 1)}{[\tau(\theta_e - 1) - 1]^2}} \right\}, \quad (26)$$

$$\lambda_O = -\frac{1}{2\tau} \left[1 \pm \sqrt{1 - 8\tau(\theta_e - 1)} \right]. \quad (27)$$

Як і раніше, точка D відповідає обертальному режиму руху сукупності активних частинок, та зображується при $\theta_e < 1$ стійким (притягуючий) вузлом, а при $\theta_e > 1$ – сідлом. При цьому, не зважаючи на характерне значення параметра внутрішнього стану $\theta_e \neq 1$, далекодійна сила хімічного типу відсутня. Коли далекодійна сила набуває кінцевого стаціонарного значення, точка O , що відповідає поступальному руху сукупності, реалізується у закритичній області $\theta_e > 1$, де вона є притягуючим вузлом для малих значень параметра τ і стійким фокусом, якщо величина (24) перевищує критичне значення

$$\tau_c = \frac{1}{8(\theta_e - 1)}. \quad (28)$$

Проведений аналіз і фазові портрети на рис. 5 показують, що для великих значень τ , коли параметр внутрішнього стану змінюється набагато повільніше, ніж далекодійна сила, система набуває режиму згасаючих коливань (рис. 5в). Зі зменшенням величини τ до значень $\tau \ll 1$ досягається повільний режим еволюції системи активних частинок (рис. 5а). Подібно до попереднього випадку для адиабатичної умови $\tau \rightarrow 0$ еволюція системи набуває універсального характеру, який відображається наявністю ділянки MOD на рис. 5а, потрапляючи на яку система повільно рухається до стаціонарної точки O , що відповідає поступальному режиму руху.

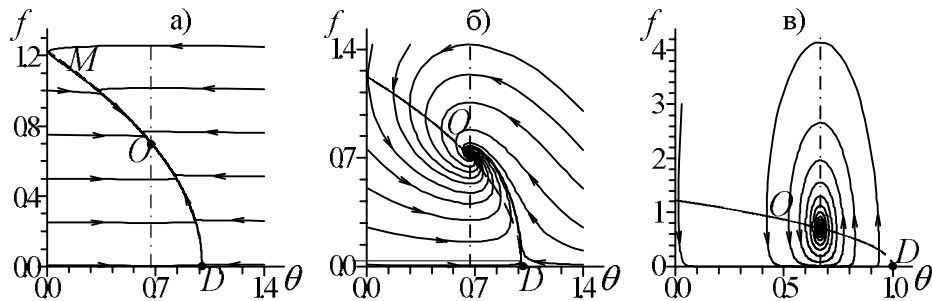


Рис. 5 – Фазові портрети поступального режиму руху ($\theta_e = 1,5\theta_c$) $\tau_v \ll \tau_f = 100\tau_\theta$ (а); $\tau_v \ll \tau_f = \tau_\theta$ (б); $\tau_v \ll \tau_\theta = 100\tau_f$ (в)

3.3 Випадок $\tau_\theta \ll \tau_v, \tau_f$

Оскільки тут найшвидші зміни характерні для параметра внутрішнього стану, то приймаючи в (7) покладемо $\dot{\theta} = 0$, в результаті чого знаходимо зв'язок

$$\theta = \theta_e - v f. \quad (29)$$

Рівняння (5), (6), з урахуванням (29) набувають вигляду

$$\dot{v} = -v + f, \quad (30)$$

$$\dot{f} = \sigma^{-1} \left[\theta_e v - f(1 + v^2) \right], \quad (31)$$

де введене відношення характерних часів

$$\sigma \equiv \tau_f / \tau_v. \quad (32)$$

Фазовий портрет такої системи (див. рис. 6) має особливі точки $D(0, 0)$ і $O(\sqrt{\theta_e - 1}; \sqrt{\theta_e - 1})$, друга з яких реалізується тільки для поступального режиму руху та значення характерного параметра внутрішнього стану $\theta_e > 1$.

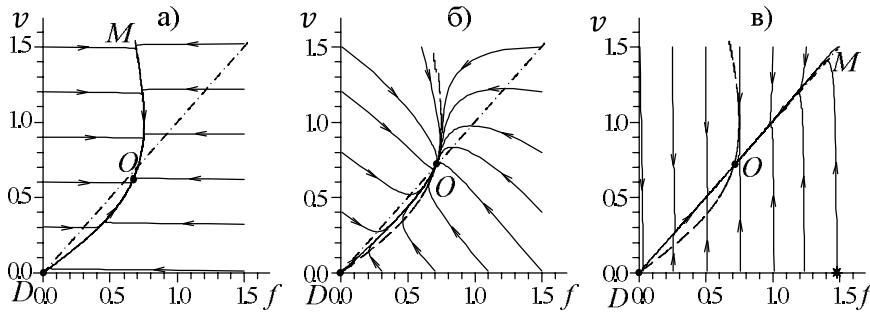


Рис.6 – Фазові портрети поступального режиму руху ($\theta_e = 1,5\theta_e$) $\tau_\theta \ll \tau_v = 100\tau_f$ (а); $\tau_\theta \ll \tau_v = \tau_f$ (б); $\tau_\theta \ll \tau_f = 100\tau_v$ (в)

Відповідні показники Ляпунова визначаються рівняннями

$$\lambda_D = -\frac{1+\sigma}{2\sigma} \left[1 \pm \sqrt{1 + 4\sigma \frac{\theta_e - 1}{(1+\sigma)^2}} \right], \quad (33)$$

$$\lambda_O = -\frac{\theta_e + \sigma}{2\sigma} \left[1 \pm \sqrt{1 - 8\sigma \frac{\theta_e - 1}{(\theta_e + \sigma)^2}} \right]. \quad (34)$$

При $\theta_e < 1$ точка D являє собою стійкий вузол, що відповідає обертовому режиму руху, а з переходом до закритичної області $\theta_e > 1$ трансформується в сідло. При значеннях параметра σ що належать інтервалу (σ_-, σ_+) , де

$$\sigma_\pm = (3\theta_e - 4) \pm \sqrt{8(\theta_e - 1)(\theta_e - 2)}, \quad (35)$$

точка O , що відповідає поступальному режиму руху, зображується притягуючим фокусом, а поза ним – притягуючим вузлом. На відміну від розглянутих вище випадків, тут коливальний режим практично не проявляється.

Відповідно до фазових портретів, показаних на рис. 6, універсальність кінетичної поведінки системи виявляється як для $\tau_f \ll \tau_v$, так і для $\tau_f \gg \tau_v$. У першому випадку вихід до універсальної ділянки відбувається за рахунок швидкої зміни далекодієвої сили $f(t)$ за умов практично незмінної середньої швидкості $v(t)$ (рис. 6а), а в другому спостерігається зворотна картина: середня швидкість змінюється дуже швидко, а далекодієва сила майже не змінюється (рис. 6в). У проміжній області $\tau_f \propto \tau_v$ універсальність виявляється тільки для малих початкових значень далекодієвої сили або середньої швидкості (рис. 6б). На відміну від розглянутих випадків, тут універсальна ділянка має не спадний, а зростаючий характер.

4. ПЕРЕРИВЧАСТИЙ ТИП РУХУ АКТИВНИХ ЧАСТИНОК

Істотна особливість картини самоорганізації, викладеної в попередніх розділах, полягає у тому, що всі величини, які входять у рівняння (5)-(7), характеризують поведінку сукупності як цілого. Це означає, що всі представляють значення, усереднені за об'ємом системи, для детального опису якої варто врахувати флуктуації швидкості, сполученого поля і параметра внутрішнього стану. З цієї метою додамо в праві частини системи (5)-(7) стохастичні джерела $\sqrt{I_f}\eta(t)$, $\sqrt{I_v}\eta(t)$, $\sqrt{I_\theta}\eta(t)$, визначені інтенсивностями I_v , I_f , I_θ вимірними в одиницях $(A_f A_\theta)^{-1}$, $(A^2 A_f A_\theta)^{-1}$, $(A_v A_\theta)^{-2}$ відповідно, множник $\eta(t)$ являє собою білий шум, обумовлений рівностями

$$\langle \eta(t) \rangle = 0, \quad \langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \delta(t - t'),$$

де кутові дужки означають усереднення. Тоді в рамках адіабатичного наближення (9) сполучене поле $f(t)$ і параметр внутрішнього стану $\theta(t)$ набувають стохастичної форми

$$f(t) = \bar{f} + \tilde{f}\eta(t), \quad \theta(t) = \bar{\theta} + \tilde{\theta}\eta(t), \quad (36)$$

де детерміністичні і випадкові складові мають вигляд

$$\bar{f} \equiv \theta_e d(v), \quad \tilde{f} \equiv \sqrt{I_f + I_\theta v^2} d(v), \quad (37)$$

$$\bar{\theta} \equiv \theta_e d(v), \quad \tilde{\theta} \equiv \sqrt{I_\theta + I_f v^2} d(v), \quad (38)$$

$$d(v) \equiv (1 + v^2)^{-1}.$$

Перші з цих виразів зводяться до рівностей (10), а другі впливають з відомої властивості адитивності дисперсій гаусівських випадкових величин. Залежність інтенсивностей шумів \tilde{f} , $\tilde{\theta}$ від параметра порядку v означає, що синергетичний принцип підпорядкованості переводить адитивні шуми сполученого поля f і параметра внутрішнього стану θ до мультиплікативних. У результаті рівняння (5), доповнене стохастичними доданками, зводиться до рівняння Ланжевена

$$\dot{v} = F(v) + \sqrt{I(v)}\eta(t), \quad F(v) \equiv \frac{dE}{dv} = -v \frac{\theta_e}{1 + v^2}, \quad (39)$$

де ефективна сила F задається кінетичною енергією E , а ефективна інтенсивність шуму виражається рівністю

$$I(v) \equiv I_v + (I_f + I_\theta v^2)d^2(v), \quad (40)$$

що слідує з зазначеної властивості адитивності інтенсивностей шумів. Щоб уникнути непорозумінь, слід зазначити, що безпосередня підстановка рівностей (36)-(38) до (5) призводить до появи стохастичного доданку

$$\left[I_v^{1/2} + (I_f^{1/2} + I_\theta^{1/2} v) d(v) \right] \eta(t), \quad (41)$$

квадрат амплітуди якого відрізняється від ефективної інтенсивності шуму (40). Більш того, безпосереднє використання адіабатичного наближення в рівняннях (6), (7) дає флуктуаційні доданки залежностей (36) у вигляді $\tilde{f} \equiv (I_f^{1/2} + I_\theta^{1/2} v) d(v)$, $\tilde{\theta} \equiv (I_\theta^{1/2} - I_f^{1/2} v) d(v)$, відмінному від виразів (37), (38). Останній з цих доданків має явно нефізичну форму, оскільки дає повну компенсацію флуктуацій параметра внутрішнього стану θ для швидкості $v = \sqrt{I_\theta/I_f}$. Формальною причиною зазначеного протиріччя є неможливість застосування звичайних методів аналізу до рівняння Ланжевена.

Відомо, що рівняння Ланжевена (39) має набір випадкових рішень, розподіл за якими задається рівнянням Фоккера-Планка

$$\frac{\partial(v, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} \left\{ -F(v)P(v, t) + \frac{\partial}{\partial v} [I(v)P(v, t)] \right\}. \quad (42)$$

У стаціонарному стані імовірність розподілу за значеннями швидкості $P(v, t)$ не залежить від часу, і вираз у фігурних дужках в правій частині (42) зводиться до нуля. В результаті приходимо до стаціонарного розподілу

$$P(v) = \frac{z^{-1}}{I(v)} \exp\{-U(v)\}, \quad (43)$$

де z – нормувальна стала. Ефективна енергія

$$U(v) = -\int_0^v \frac{F(v')}{I(v')} dv', \quad F \equiv -\frac{\partial E}{\partial v}, \quad (44)$$

задається значеннями сили (39) та інтенсивності шуму (40).

Рівняння, яке визначає положення екстремумів розподілу $P(v)$, має вигляд

$$x^3 - \theta_e x^2 - 2I_\theta x + 4(I_\theta - I_f) = 0, \quad x = 1 + v. \quad (45)$$

Звідси випливає, що вигляд розподілу $P(v)$ не залежить від інтенсивності флуктуацій швидкості I_v , але істотно залежить від параметра внутрішнього стану θ_e , визначеного зовнішнім впливом, та інтенсивностей шумів сполученого поля і параметра внутрішнього стану I_f , I_θ , тому далі можна покласти $I_v = 0$. Розподіл (43) має максимум у

точці $v = 0$, якщо параметр внутрішнього стану θ_e , що задається зовнішнім впливом, не перевищує критичного значення

$$\theta_e^0 = 1 + 2I_\theta - 4I_f, \quad (46)$$

яке зростає зі збільшенням інтенсивності флуктуацій параметра внутрішнього стану і зменшується з ростом інтенсивності флуктуацій сполученого поля. Така ситуація відповідає оберտальному режиму руху сукупності, коли її центр мас знаходиться у спокої.

Умови поступального руху легко знайти у випадку $I_f = 0$, коли швидкість руху набуває значення

$$v_\pm^2 = \frac{1}{2} \left[\theta_e - 3 + \sqrt{(3 - \theta_e)^2 + 4(2\theta_e - 3 + 2I_\theta)} \right], \quad (47)$$

які впливають із (45) після виключення кореня $v_2 = 0$. Мінімальна величина цієї швидкості

$$v_c^2 = \frac{1}{2} \left[(\theta_e - 3) - \sqrt{(\theta_e + 7)(\theta_e - 1)} \right] \quad (48)$$

досягається на прямій (46), де $I_f = 0$. При $\theta_e < 4/3$ корені v_c є комплексними, а при $\theta_e > 4/3$ – дійсними, при цьому $v_+ = -v_-$. Таким чином, у трикритичній точці

$$\theta_e = 4/3, \quad I_\theta = 1/6 \quad (49)$$

виникає поступальний рух, для якого розподіл швидкостей має максимуми в симетричних точках v_\pm .

Знайдемо умови існування коренів v_\pm . Приймаючи дискримінант рівняння (45) рівним нулю, одержуємо вирази

$$I_\theta = 0, \quad I_\theta^2 - I_\theta \left[\frac{27}{2} \left(1 - \frac{\theta_e}{3} \right) - \frac{\theta_e}{8} \right] + \frac{\theta_e^3}{2} = 0, \quad (50)$$

останній із яких дає залежність

$$2I_\theta = \left[\frac{27}{2} \left(1 - \frac{\theta_e}{3} \right) - \frac{\theta_e^2}{8} \right] \pm \left\{ \left[\frac{27}{2} \left(1 - \frac{\theta_e}{3} \right) - \frac{\theta_e^2}{8} \right]^2 - 2\theta_e^3 \right\}^{\frac{1}{2}} = 0. \quad (51)$$

Вона відповідає кривій $\theta_e(I_\theta)$, що перетинає горизонтальну вісь у точках $I_\theta = 0$ і $I_\theta = 27/2$ і має максимум у точці

$$\theta_e = 2, \quad I_\theta = 2. \quad (52)$$

При $I_f = 0$ ця крива торкається прямої (46) у точці (49).

На рис. 7а показана фазова діаграма можливих режимів поведінки групи активних частинок при різних значеннях параметра внутрішнього стану θ_e і інтенсивності його флуктуацій I_θ (флуктуації сполученого поля $I_f = 0$).

З діаграми видно, що для значень θ_e , які перевищують границю (46), найбільш ймовірна величина швидкості $v \neq 0$, і група активних частинок рухається поступально. При зменшенні θ_e з'являється максимум у точці $v = 0$, що відповідає обертальному руху. Під кривою (51) цей максимум стає єдиним. За наявності флуктуацій сполученого поля $I_f \neq 0$ координати (49) трикритичної точки набувають вигляду

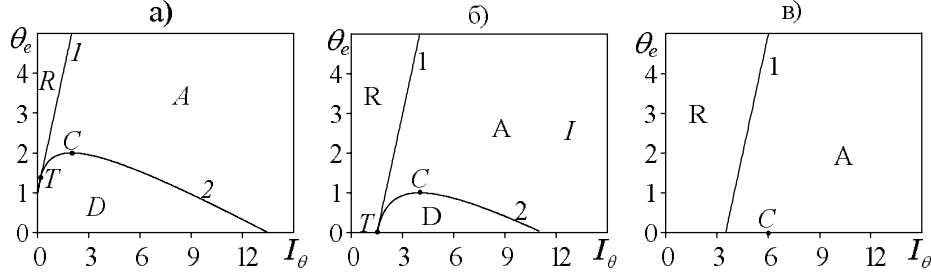


Рис. 7 – Діаграма можливих режимів поведінки групи активних частинок при різних значеннях параметра внутрішнього стану θ_e , його флуктуацій I_θ і флуктуацій сполученого поля I_f (рисунок а, б, в відповідають значенням $I_f = 0; 1; 2$). Криві 1, 2 вказують межі областей поступального Т і обертального R руху; I – область переривчастого руху.

$$\theta_e = \frac{4}{3}(1 - I_f), I_\theta = \frac{1}{6}(1 + 8I_f), \quad (53)$$

а положення критичної точки (52) змінюється більш складним чином. Порівняння рисунків 7 а-в показує, що флуктуації сполученого поля заглушають обертальний рух: з їх ростом до значення $I_f = 1$ трикритична точка (53) попадає на вісь $\theta_e = 0$, а при $I_f = 2$ область обертального руху зникає зовсім. З іншого боку, фазова діаграма показує, що флуктуації параметра внутрішнього стану I_θ призводять до появи двофазного стану, де система набуває переривчастого руху: виконує послідовно поступальний рух чергується зі станом спокою. Згідно рис. 7а такий режим досягається навіть під час відсутності зовнішнього впливу ($\theta_e = 0$), коли інтенсивність флуктуацій I_θ перевищує критичне значення $I_\theta^c = 27/2$, що спадає до $I_\theta^c = 2(I_f - 1/4)$ при $I_f = 2$. В результаті система переходить до режиму самоузгодженої критичності, де розподіл швидкості (43), обумовлений ефективною енергією (44), на межі $I_\theta \gg I_v$, I_f набуває вигляду

$$P(v) = I_\theta^{-1} \left(\frac{1 + v^2}{2} \right)^2 \exp \left\{ I_\theta^{-1} \int \frac{F(v)(1 + v^2)^2}{v^2} dv \right\} \sim \frac{I_\theta^{-1}}{v^2} \quad (54)$$

Таким чином, зростання флуктуацій параметра внутрішнього стану призводить до самоподібного режиму, що характеризується однорідною функцією з показником 2. Згідно рис. 8, в залежності від значень параметра зовнішнього впливу θ_e і рівня флуктуацій I_θ , I_f функція розподілу швидкості $P(v)$ може набувати різного вигляду.

Якщо система потрапляє до області обертального руху, позначеної на рис. 7 буквою R , то найбільш ймовірними будуть малі швидкості, розподілені відповідно до рис. 8а. Бімодальний режим, показаний на рис. 8б, зображує переривчастий рух, що відповідає області I на рис. 7. І, нарешті, одномодовий режим (рис. 8в), де найбільш ймовірними будуть кінцеві значення швидкості, характерний для поступального руху в області T .

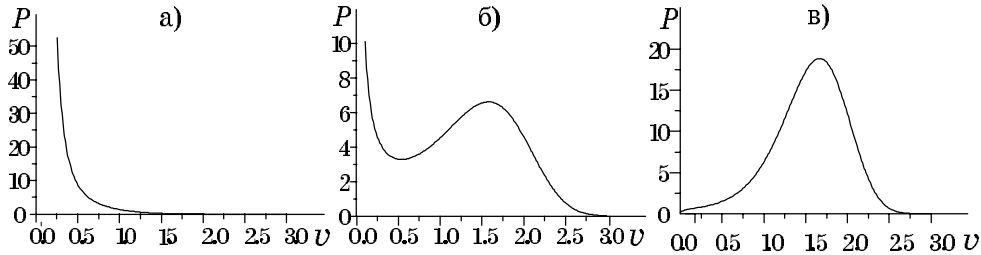


Рис. 8 – Функція розподілу швидкості активних частинок: а) в області обертального руху R ($\theta_e = 0,1$, $I_\theta = 1,1$); б) в області I переривчастого руху ($\theta_e = 3$, $I_\theta = 2$); в) в області поступального руху T ($\theta_e = 3,5$, $I_\theta = 1,1$)

5. КІНЕТИКА ПЕРЕРИВЧАСТОГО ПЕРЕХОДУ

Викладена вище поведінка системи активних частинок припускає, що для переходу від обертального до поступального режиму руху характерний час зміни середньої швидкості τ_v залишається сталим. В дійсності реакція системи на збільшення середньої швидкості v може привести до зростання часу τ_v . Таке уповільнення призводить до трансформації безперервного переходу до переривчастого. Для відображення такої залежності скористаємося найпростішою апроксимацією

$$\tau_v = \tau_0 \left(1 + \frac{\kappa}{1 + v^2/v_r^2} \right)^{-1}, \quad (55)$$

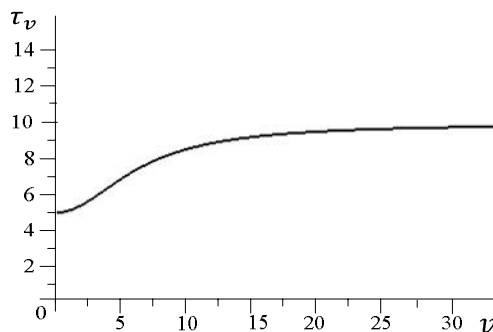


Рис. 9 – Залежність характерного часу τ_v від середньої швидкості v при $\tau_0 = 10$, $\kappa = 1$, $v_r = 4$

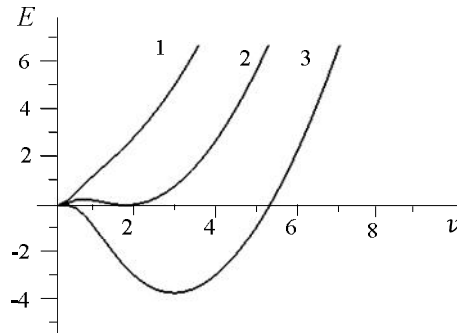


Рис. 10 – Залежність кінетичної енергії руху (56) від зміни середньої швидкості v : крива 1 відповідає $\theta_e < \theta_c^0$, 2 – $\theta_c^0 < \theta_e < \theta_{c0}$, 3 – $\theta_e > \theta_c^0$

що визначається позитивними константами τ_0 , κ , v_r , (див. рис. 9).

У рамках адіабатичного наближення (9) системи Лоренца (5)-(7) з урахуванням залежності (55) відповідає кінетична енергія руху:

$$E = \frac{v^2}{2} - \theta_e \ln(1 + v^2) + \frac{\kappa v_1^2}{2} \ln \left[1 + \left(\frac{v}{v_1} \right)^2 \right], \quad v_1 \equiv \frac{v_r}{v_c}, \quad (56)$$

що відрізняється від (12) останнім доданком. Згідно (56) за малих значень параметра внутрішнього стану θ_e залежність $E(v)$ має монотонно зростаючий вигляд (рис. 10) із мінімумом у точці $v = 0$, що відповідає обертовому режиму руху.

Для значення

$$\theta_c^0 = 1 + v_1^2(\kappa - 1) + 2v_1\sqrt{\kappa(1 - v_1^2)} \quad (57)$$

на залежності $E(v)$ з'являється плато, яке для $\theta_e > \theta_c^0$ трансформується у мінімум, що відповідає середній швидкості $v_0 \neq 0$ (поступальний рух), і максимум (нестійкий стан), що розділяє мінімуми $v_0 = 0$ і $v_0 \neq 0$. З подальшим зростанням параметра внутрішнього стану θ_e мінімум, що відповідає поступальному режиму руху, заглиблюється, а висота бар'єра, що розділяє стаціонарні стани, падає, досягаючи нуля для критичного значення параметра внутрішнього стану

$$\theta_{c0} = 1 + \kappa. \quad (58)$$

Стаціонарні значення середньої швидкості визначаються співвідношеннями

$$v_0^m = v_{00} \left\{ 1 \mp \left[1 + \left(\frac{v_1}{v_{00}^2} \right)^2 (\theta_e - \theta_{c0}) \right]^{1/2} \right\}^{1/2}, \quad (59)$$

$$v_{00}^2 \equiv \frac{1}{2} [(\theta_e - 1) - (1 + \kappa)v_1^2], \quad (59a)$$

де верхній знак відповідає нестійкому стану v^m , коли кінетична енергія руху набуває максимуму, а нижній – стійкому стану v_0 (поступальний рух). Якщо параметр внутрішнього стану збільшується повільно, то в точці $\theta_e = \theta_c^0$ відбувається стрибок стаціонарного значення середньої швидкості v_0 від нуля до $\sqrt{2}v_{00}$, а потім його величина зростає повільно. Для зворотного спадання θ_e стаціонарне значення середньої швидкості v_0 повільно зменшується до точки $\theta_e = \theta_c^0$, $v_0 = v_{00}$ а потім стрибком набуває нульового значення. Таким чином, при $v_1 \equiv v_r/v_c < 1$ спостерігається гістерезис, зумовлений наявністю бар'єра на залежності кінетичної енергії руху (56). З ростом швидкості зміни параметра внутрішнього стану петля гістерезису звужується.

Якщо віднести середню швидкість руху v , далекодіяну силу f і параметр внутрішнього стану θ до масштабів v_c , f_c , θ_c , що визначені рівностями (4), можна дослідити можливі режими еволюції системи, що задаються різними співвідношеннями характерних часів τ_0 , τ_f , τ_θ . При цьому слід пам'ятати, що ефективний час зміни середньої швидкості τ_v у вихідному рівнянні (5) задається рівністю (55).

5.1 Випадок $\tau_f \ll \tau_0, \tau_\theta$

Починаючи дослідження немонотонної поведінки, розглянемо випадок, коли найменше значення має час релаксації далекодіяної сили, яка наслідуює зміни середньої швидкості та параметра внутрішнього стану. В результаті можна знехтувати коливаннями далекодіяної сили та вважати, що в (6) $\dot{f} = 0$. Це призводить до зв'язку

$$f = v\theta. \quad (60)$$

Враховуючи (55), (60) у рівняннях (5), (7), отримуємо систему рівнянь (час вимірюється в одиницях τ_0):

$$\dot{v} = -v \left[(1 - \theta) + \kappa (1 + v^2/v_1^2)^{-1} \right], \quad (61)$$

$$\dot{\theta} = \delta^{-1} \left[\theta_e - \theta (1 + v^2) \right]. \quad (62)$$

Її поведінка задається значенням параметра внутрішнього стану θ_e , що визначає ступінь нерівноважності системи, і співвідношенням характерних часів зміни параметра внутрішнього стану та середньої швидкості

$$\delta = \tau_\theta/\tau_0. \quad (63)$$

Стандартний аналіз [29] системи (61), (62) показує, що її фазовий портрет характеризується наявністю трьох особливих точок $D(\theta_e, 0)$, $O(\theta_-, v_-)$, $S(\theta_+, v_+)$, координати яких θ_\pm , v_\pm визначаються рівностями

$$\theta_\pm = \frac{\left(1 + v_{00}^2 \pm \sqrt{(1 + v_{00}^2)^2 - \theta_e (1 - v_1^2)} \right)}{1 - v_1^2}, \quad (64)$$

$$v_{\pm} = \sqrt{(\theta_e - \theta_{\pm})/\theta_{\pm}}. \quad (65)$$

Точці D відповідають показники Ляпунова,

$$\lambda_D = \frac{\delta(\theta_e - 1) - 1}{2\delta} \left\{ 1 \pm \sqrt{1 + \frac{4\delta(\theta_e - \theta_{c0})}{[\delta(\theta_e - \theta_{c0}) - 1]^2}} \right\}, \quad (66)$$

де відповідно до (58) величина $\theta_{c0} = 1 + \kappa$ визначає точку втрати стійкості. Тому для $\theta_e < \theta_{c0}$ точка D являє собою стійкий вузол, а для $\theta_e > \theta_{c0}$ – сідло. Показники Ляпунова точок $O(\theta_-, v_-)$, $S(\theta_+, v_+)$ визначаються їх координатами (64), (65) за допомогою співвідношень

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= \lambda_0 (1 \pm \sqrt{1 + \Delta}), \\ \lambda_0 &= \frac{\theta_e - \theta_{\pm}}{\kappa v_1^2 \theta_{\pm}} (\theta_{\pm} - 1)^2 - \frac{\theta_e}{2\delta \theta_{\pm}}, \\ \lambda_0^2 \Delta &= \frac{2}{\delta} (\theta_e - \theta_{\pm}) \left(\frac{\theta_e (1 - \theta_{\pm})^2}{v_1^2 \kappa \theta_{\pm}} - 1 \right). \end{aligned} \quad (67)$$

В інтервалі $\theta_e^0 < \theta_e < \theta_{c0}$ точка S зображується сідлом, а O – стійким вузлом або фокусом.

Наведені дані показують, що зі зростанням параметра внутрішнього стану θ_e фазовий портрет системи змінюється згідно рис. 11. Для $\theta_e < \theta_{c0}$, коли залежність (56) має монотонно зростаючий вигляд, точки S , O не реалізуються, а D представляє собою стійкий вузол, який відповідає оберальному режиму руху активних частинок. З перевищенням характерного значення (57) у системі відбувається біфуркація, що відображається появою сідла S і стійкого вузла/фокуса O , які визначаються координатами (64), (65). Зі зростанням параметра θ_e сідло, що відповідає енергетичному бар'єру на залежності $E(v)$, наближається до вузла D , і в точці θ_{c0} поглинає його. Подальше зростання θ_e дає картину, що відповідає поступальному режиму руху.

На рис. 12 зображено, яким чином змінюється фазовий портрет, що відповідає поступальному режиму руху сукупності активних частинок ($\theta_e^0 < \theta_e < \theta_{c0}$), зі зміною співвідношення часів релаксації $\delta = \tau_{\theta}/\tau_0$.

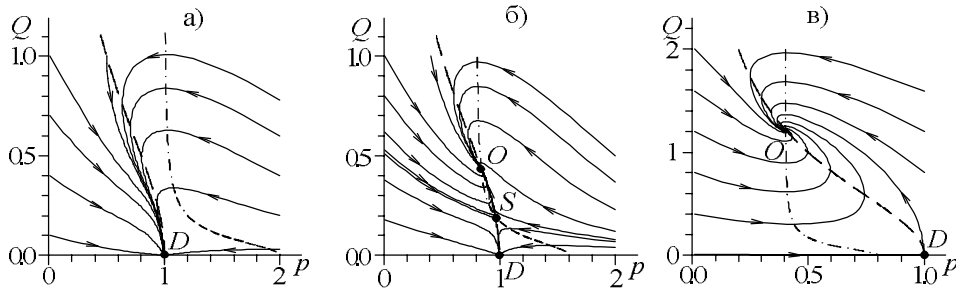


Рис. 11 – Фазові портрети переривчастого переходу між режимами руху активних частинок для різних значень параметра внутрішнього стану ($\kappa = 1$, $v_1 = 0,1$, $\tau_f \ll \tau_0 = \tau_{\theta}$): $\theta_e = \theta_{c0}$ (а); $\theta_e = 1,25\theta_{c0}$ (б); $\theta_e = 1,25\theta_{c0}$ (в)

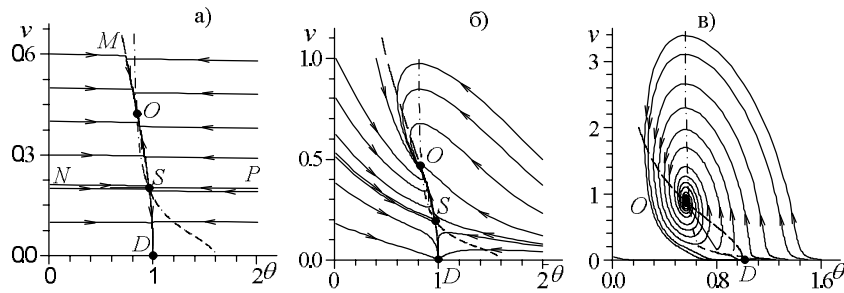


Рис. 12 – Фазові портрети переривчастого переходу для різних значень параметра внутрішнього стану та для різних співвідношень між часами зміни гідродинамічних мод ($\kappa = 1$, $v_1 = 0,1$): $\theta_e = 1,25\theta_c$, $\tau_f \ll \tau_0 = 100\tau_\theta$ (а); $\theta_e = 1,25\theta_c$, $\tau_f \ll \tau_0 = \tau_\theta$ (б); $\theta_e = 1,8\theta_c$, $\tau_f \ll \tau_0 = 10\tau_\theta$ (в)

Як видно з рисунка в околі точки O для адиабатичного наближення $\tau_f \ll \tau_0$ траєкторії швидко збігаються до універсальної ділянки MOS (рис.12а), а в протилежному випадку $\tau_f \gg \tau_0$ з'являється режим загасаючих коливань (рис.12в). Крім цього в області малих значень середньої швидкості з'являється сепаратриса, що показує наявність бар'єра на залежності $E(v)$. Дослідження часових залежностей шляху, пройденого точкою за фазовою траєкторією [30], показує, що тут відбувається уповільнення поблизу *русла великої річки MOS*, що відповідає околиці мінімуму впорядкованого стану (поступальний режим). Знайдені особливості еволюції системи можуть бути проаналізовані на основі вигляду залежності $E(v, \theta)$ кінетичної енергії руху від середньої швидкості v та параметра внутрішнього стану θ .

При цьому слід врахувати той факт, що в ході своєї еволюції система досить довго знаходиться в околі екстремумів залежності $E(v, \theta)$. Оскільки час релаксації уздовж кожної з осей v, θ обернено пропорційний кривизні залежності $E(v, \theta)$ вздовж відповідної осі, то умова $\tau_\theta \ll \tau_0$, означає, що залежність $E(v, \theta)$ змінюється набагато швидше вздовж осі θ , ніж уздовж універсальної траєкторії, обумовленої залежністю $\theta(v)$ вигляду (10). Як видно з рис. 12а система швидко скочується уздовж осі θ , яка має велику кривизну, до жолобу, наявність якого забезпечує універсальний характер еволюції системи, оскільки поблизу екстремумів залежність $E(v, \theta)$ завжди має вигляд параболи

$$E \approx E(v_0, \theta_0) \frac{\chi_v^{-1}}{2} (v - v_0)^2 + \frac{\chi_\theta^{-1}}{2} (\theta - \theta_0)^2, \quad (68)$$

де значення v_0, θ_0 визначають положення екстремуму, а сприйнятливості χ_v, χ_θ – кривизну відповідних осей.

У зв'язку зі сказаним здається, що для наближення $\tau_0 \ll \tau_\theta$, оберненого адиабатичному, залежність $E(v, \theta)$ також повинна мати жолоб, і стає незрозумілою природа загасаючих коливань, наведених на рис.12в. Але слід пам'ятати, що поблизу мінімуму залежності $E(v, \theta)$ сприйнятливості χ_v, χ_θ у рівності (68) пов'язані із часами релаксації τ_0, τ_θ

різними співвідношеннями $\chi_\theta \propto \tau_\theta$, $\chi_v \propto \tau_0 |\theta_e - \theta_{c0}|^{-1}$. Оскільки $|\theta_e - \theta_{c0}|^{-1} \ll 1$, то, незважаючи на мале значення τ_0 , кривизна $\chi_v^{-1} \propto \tau_0^{-1} |\theta_e - \theta_{c0}|$ параболи (68) уздовж осі v виявляється порівняною з кривизною $\chi_\theta^{-1} \propto \tau_\theta^{-1}$ залежності $E(v, \theta)$ уздовж осі θ . Іншими словами, для $\tau_0 \ll \tau_\theta$ залежність $E(v, \theta)$ має поблизу мінімуму, який відповідає поступальному режиму руху, вигляд параболоїда із малими та порівняними значеннями кривизни уздовж осей v, θ . В результаті, коли конфігураційна точка скочується до мінімуму, вона буде обертатися за поверхнею цього параболоїда. Очевидно, таке обертання відображається загасаючими коливаннями, показаними на рис. 12в. Слід мати на увазі, що описане критичне зростання сприйнятливості χ_v у співвідношенні (68) має колективний характер, властивий системі, що самоорганізується [27], і не виявляється поблизу максимуму залежності $E(v, \theta)$. Саме з цієї причини не закручується сепаратриса у наближенні $\tau_0 \ll \tau_\theta$ (див. рис. 12в).

5.2 Випадок $\tau_0 \ll \tau_\theta, \tau_v$

З аналітичної точки зору даний випадок найбільш складний, оскільки підстановка ефективного часу зміни середньої швидкості (55) у вихідне рівняння (5), де необхідно покласти $\dot{v} = 0$, призводить до кубічного рівняння (див. [31]). Його рішення зручно записати у вигляді

$$3v = f + v_+(f) + v_-(f), \quad (69)$$

де введені функції

$$v_\pm(f) = \left\{ f(f^2 + f_1^2) \pm 3v_1 \sqrt{3v_1 \left[(f^2 + f_1^2)^2 + f_3^4 \right]} \right\}^{1/3}, \quad (70)$$

а сталі $f_1 - f_3$ визначаються рівностями

$$\begin{aligned} f_1^2 &\equiv \frac{9}{2} v_1^2 (2 - \kappa), \\ f_2^2 &\equiv \frac{1}{8} v_1^2 \left[36(2 - \kappa) - (8 - \kappa)^2 \right], \\ f_3^2 &\equiv \frac{1}{8} v_1^2 \sqrt{\kappa(8 - \kappa)^3}. \end{aligned} \quad (71)$$

Підстановка зв'язку (69) до рівняння (6), (7) призводить системи

$$\dot{f} = -f + \frac{1}{3} \theta [f + v_+(f) + v_-(f)], \quad (72)$$

$$\tau \dot{\theta} = (\theta_e - \theta) + \frac{1}{3} f [f + v_+(f) + v_-(f)], \quad (73)$$

де час вимірюється в одиницях τ_f і введене співвідношення часів релаксації $\tau \equiv \tau_0 / \tau_f$.

Аналітично для системи (72), (73) не можливо знайти особливі точки та відповідні їм показники Ляпунова, але чисельне дослідження фазового

портрету (див. рис. 13) показує, що поведінка системи схожа на вже досліджену у підрозділі 5.1. Тут, як і у попередньому випадку, з'являється сепаратриса для значень параметра внутрішнього стану θ і далекодійної сили f , які відповідають енергетичному бар'єру, що відокремлює поступальний режим руху від обертального.

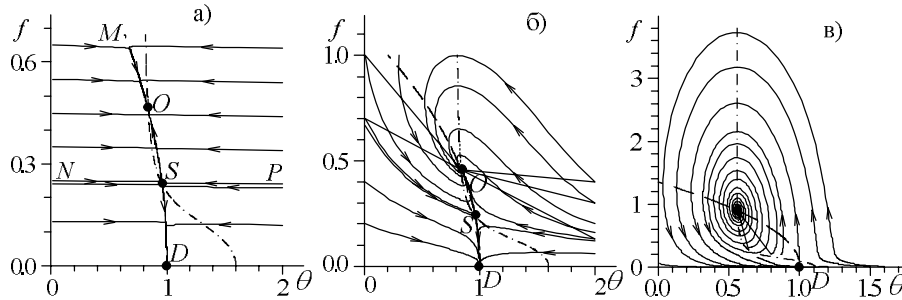


Рис. 13 – Фазові портрети переривчастого переходу ($\kappa = 1$, $v_1 = 0,1$): $\theta_e = 1,25\theta_c$, $\tau_\theta \ll \tau_f = 100\tau_\theta$ (а); $\theta_e = 1,25\theta_c$, $\tau_\theta \ll \tau_f = \tau_\theta$ (б); $\theta_e = 1,8\theta_c$, $\tau_\theta \ll \tau_\theta = 10\tau_f$ (в)

Тоді за аналогією з попереднім розділом легко побачити, що для $\tau_\theta \ll \tau_f$, коли універсальність еволюції системи проявляється максимально (див. рис.13а), залежність $E(f, \theta)$ має вузький жолоб уздовж універсальної ділянки траєкторій. Наявність режиму загасаючих коливань у протилежній випадку $\tau_\theta \gg \tau_f$ (рис.13в) вказує на критичне зростання сприйнятливості далекодійної сили $\chi_f^{-1} \propto \tau_f |\theta_e - \theta_{c0}|^{-1}$. Очевидно, вихідною причиною цього зростання є критичний збільшення сприйнятливості середньої швидкості $\chi_v \propto \tau_0 |\theta_e - \theta_{c0}|^{-1}$. Наявність чіткого функціонального зв'язку (69) між середньою швидкістю та далекодійною силою забезпечує зростання сприйнятливості далекодійної сили.

5.3 Випадок $\tau_\theta \ll \tau_0$, τ_f

Якщо у (7) припустити $\dot{\theta} = 0$, то одержимо зв'язок

$$\theta = \theta_e - v f, \quad (74)$$

підстановка якого до (6) дає рівняння

$$\dot{f} = \frac{1}{\sigma'} [\theta_e v - f(1 - v^2)], \quad (75)$$

де $\sigma' \equiv \tau_f / \tau_0$. Рівняння (5) при цьому набуває вигляду

$$\dot{v} = -v \left(1 + \frac{\kappa}{1 + v^2 / v_1^2} \right) + f. \quad (76)$$

Фазовий портрет системи (75), (76) характеризується наявністю трьох особливих точок $D(0,0)$, $O(v_-, f_-)$, $S(v_+, f_+)$, координати яких v_\pm, f_\pm задаються рівностями

$$v_{\pm} = \left\{ v_{00}^2 \pm \sqrt{v_{00}^4 + [\theta_e - (1 - \kappa)]v_1^2} \right\}^{1/2}, \quad (77)$$

$$f_{\pm} = \theta_e \frac{v_{\pm}}{1 + v_{\pm}^2}. \quad (78)$$

Показники Ляпунова особливої точки D визначаються співвідношенням

$$\lambda_D = -\frac{1}{2}(\theta_{c0} + \sigma^{-1}) \left\{ 1 \pm \sqrt{1 + \frac{4\delta(\theta_e - \theta_{c0})}{\sigma(\theta_{c0} + \sigma^{-1})^2}} \right\}. \quad (79)$$

Для $\theta_e < \theta_{c0}$ ця точка зображується стійким вузлом, а для $\theta_e \geq \theta_{c0}$ – сідлом. Показники Ляпунова точок $O(\theta_-, v_-)$, $S(\theta_+, v_+)$, залежать від їх координат (77), (78) наступним чином:

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= \lambda_0 (1 \pm \sqrt{1 + \Delta}), \\ \lambda_0 &= \frac{(f_{\pm} - v_{\pm})^2}{\kappa v_1^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{1 + v_{\pm}^2}{\sigma} + \frac{f_{\pm}}{v_{\pm}} \right), \\ \lambda_0^2 \Delta &= \frac{(1 - v_{\pm}^2)f_{\pm}}{\tau v_{\pm}} - \frac{1 + v_{\pm}^2}{\sigma} \left[\frac{f_{\pm}}{v_{\pm}} - \frac{2(f_{\pm} - v_{\pm})^2}{\kappa v_1^2} \right]. \end{aligned} \quad (80)$$

В інтервалі реалізації переривчастого переходу $\theta_c^0 < \theta_e < \theta_{c0}$ точка S зображується сідлом, а O – стійким вузлом або фокусом.

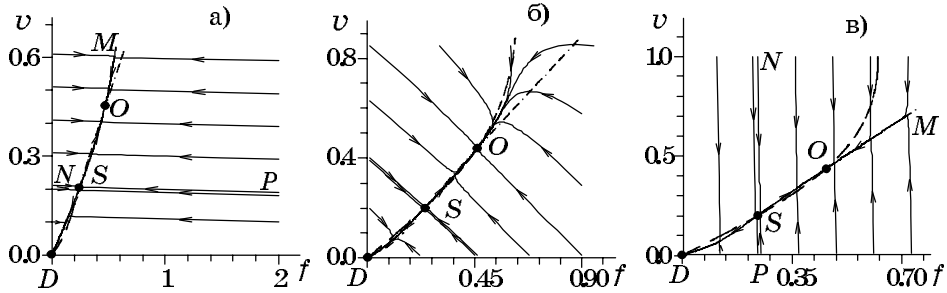


Рис. 14 – Фазові портрети переривчастого переходу ($\kappa = 1$, $v_1 = 0,1$): $\theta_e = 1,25\theta_c$, $\tau_\theta \ll \tau_0 = 100\tau_f$ (а); $\theta_e = 1,25\theta_c$, $\tau_\theta \ll \tau_0 = \tau_f$ (б); $\theta_e = 1,8\theta_c$, $\tau_\theta \ll \tau_f = 10\tau_0$ (в)

Чисельне визначення фазового портрета показано на рис. 14, з якого видно, що універсальність еволюції системи проявляється не тільки для $\tau_f \ll \tau_0$ (рис. 14а), але й у протилежному випадку $\tau_f \gg \tau_0$ (рис. 14в), де, здавалося б, можна чекати появи коливань. Це пов'язано з тим, що кривизна парабол уздовж осей v , f визначається значеннями $\chi_f^{-1} \ll \tau_f^{-1} |\theta_e - \theta_{c0}|$, $\chi_v^{-1} \ll \chi_0^{-1} |\theta_e - \theta_{c0}|$ обернених сприйнятливостей. Тому для $\tau_f \gg \tau_0$ виконуються співвідношення сприйнятливостей $\chi_f^{-1} \ll \chi_v^{-1}$, яке означає, що кривизна залежності $E(v, f)$ уздовж осі значень далекодійної сили f набагато менше, ніж уздовж осі середньої швидкості v . Тому на

рис. 14в траєкторії, за якими конфігураційна точка швидко скочується до *русла великої річки*, спрямовані практично уздовж осі v .

Істотна особливість системи, яка самоорганізується, полягає в тому, що стаціонарне значення внутрішнього параметра θ_0 не збігається з параметром θ_e , який задається зовнішнім впливом. Для переривчастого переходу реалізується значення θ_* (див.(64)), що відповідає мінімуму залежності $E(v)$. Оскільки величини θ_c , θ_* представляють мінімальні значення внутрішнього параметра, починаючи від яких відбувається перехід до поступального режиму руху, то негативний зворотній зв'язок між середньою швидкістю та далекодією силою (останній доданок у (7)) призводить до настільки сильного зменшення параметра внутрішнього стану, яке тільки на межі забезпечує самоорганізацію. Згідно рис. 15, стаціонарне значення внутрішнього параметру θ_0 збігається зі значенням θ_e в інтервалі $0 < \theta_e < \theta_{c0}$.

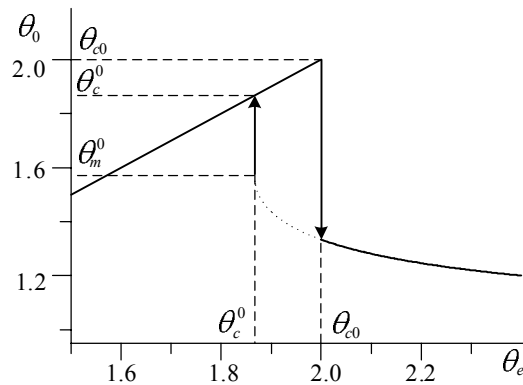


Рис. 15 – Залежність стаціонарного значення параметра внутрішнього стану θ_0 від параметра θ_e , що задається зовнішнім впливом ($\kappa = 1$, $v_1 = 0,5$).

Якщо $\theta_e > \theta_{c0}$ стаціонарне значення внутрішнього параметру θ_0 стає двозначним та повільно зменшується від значення

$$\theta_m^0 = \theta_{c0} \left(1 + v_1 \sqrt{\frac{\kappa}{1 - v_1^2}} \right), \quad (81)$$

що відповідає $\theta_e = \theta_c^0$ до θ_c для $\theta_e \rightarrow \infty$. За умов повільного росту θ_e від 0 до θ_{c0} стаціонарне значення внутрішнього параметра лінійно зростає у тому ж інтервалі. Після стрибка вниз у точці $\theta_e = \theta_{c0}$ величина θ_0 повільно зменшується згідно залежності (64) для θ_* . Для зворотного зменшення θ_e стаціонарне значення внутрішнього параметру θ_0 повільно зростає, а в точці θ_c^0 змінюється стрибком від значення θ_m^0 до θ_c^0 . Оскільки в актуальній області параметрів v_1 , κ , що обмежена величиною

$$\kappa_{\min} = \frac{v_1^2}{1 - v_1^2}, \quad (82)$$

значення θ_m^0 менше θ_c^0 , то в інтервалі $(\theta_c^0, \theta_{c0})$ мінімальне значення внутрішнього параметра θ_0 менше ніж θ_e .

Таким чином у випадку переривчастого переходу для $\theta_e = \theta_c^0$ відбувається біфуркація, в результаті якої з'являються вузол D , що характеризує обертальний рух, сідло S , що відповідає енергетичному бар'єру на залежності $E(v)$, і вузол/фокус O , який характеризує поступальний режим руху сукупності активних частинок. Зі зростанням параметра внутрішнього стану в інтервалі $(\theta_c^0, \theta_{c0})$ сідло S наближається до вузла D , поглинаючи його в точці θ_{c0} , а вузол/фокус O зміщується у бік зростання середньої швидкості й далекодійної сили.

6. ВИСНОВКИ

Проведене дослідження показує, що система Лоренца (5)-(7) дозволяє самоузгодженим чином відобразити основні особливості переходу від обертального режиму руху сукупності активних частинок до поступального. При цьому роль параметра порядку, що розрізняє упорядкований та невпорядкований стани системи (поступальний та обертальний режими руху активних частинок), відіграє середня швидкість руху сукупності частинок; сполучене поле зведеться до далекодійної сили хімічного (або магнітного) типу; керуючий параметр задається параметром внутрішнього стану. Феноменологічний опис такої системи досягається завдяки використанню залежності кінетичної енергії руху $E(v)$ від середньої швидкості руху. У випадку безперервного переходу ця залежність визначається характерним значенням параметра внутрішнього стану θ_e : при $\theta_e < 0$ одержуємо монотонно зростаючу залежність $E(v)$ з мінімумом у точці $v_0 = 0$ що відповідає обертальному руху, а при $\theta_e > 0$ з'являється мінімум $v_0 \neq 0$ що відповідає поступальному режиму руху. Для переривчастого типу переходу окрім вказаних режимів на залежності $E(v)$ для значення $\theta_e = \theta_c^0$ (див.(57)) з'являється плато, яке при $\theta_e > \theta_c^0$ трансформується у мінімум, що відповідає середній швидкості $v_0 \neq 0$ (поступальний рух), і максимум (нестійкий стан), що розділяє впорядкований ($v_0 \neq 0$) та невпорядкований ($v_0 = 0$) стани.

Крім того зазначений тип переходу був досліджений з урахуванням флуктуацій середньої швидкості, далекодійної сили та параметра внутрішнього стану у три параметричній системі Лоренца. Отримане в результаті рівняння Ланжевена має набір випадкових рішень, розподіл за якими для стаціонарного випадку відображає можливість існування трьох режимів руху: обертального, поступального та переривчастого (рис. 8). В залежності від інтенсивностей флуктуацій далекодійної сили та параметра внутрішнього стану побудована фазова діаграма, що вказує межі існування кожного із вказаних режимів руху, а флуктуації параметра внутрішнього стану призводять до послідовного чергування поступального та обертального руху (переривчастий режим).

Кінетична картина переходу була представлена фазовими портретами, показаними на рис. 3-6, та 11-14. На основі фазових портретів були досліджені процеси безперервного та переривчастого переходів між обертальним і поступальним режимами руху активних частинок, які

відповідають різним співвідношенням часів зміни середньої швидкості, далекодійної сили і параметра внутрішнього стану. Показано, що критичне зростання двох перших часів призводить до коливального режиму, якщо параметр внутрішнього стану змінюється набагато повільніше інших величин. У протилежному випадку еволюція системи визначається універсальною ділянкою фазової траєкторії.

Автори висловлюють подяку за допомогу при роботі над статтею професору Олемському Олександрові Івановичу.

САМООРГАНИЗАЦИЯ В КОЛЛЕКТИВНОМ ПОВЕДЕНИИ АКТИВНЫХ НАНОЧАСТИЦ

О.В. Ющенко, А.Ш. Баранова

Сумский государственный университет,
ул. Р. Корсакова, 2, 40007, Сумы, Украина
E-mails: yushchenko@phe.sumdu.edu.ua; mixifox@mail.ru

Исследована феноменологическая схема, в рамках которой на основе трехпараметрической системы Лоренца самосогласованным образом описана самоорганизация совокупности активных наночастиц. Рассмотрены непрерывный и прерывистый типы перехода от вращательного режима движения к поступательному. Исследовано влияние флуктуаций на переход, построены диаграммы возможных режимов поведения группы активных наночастиц. На основе фазовых портретов проанализирована кинетика перехода между вращательным и поступательным режимами движения для разных соотношений между временами изменения основных параметров системы.

Ключевые слова: СРЕДНЯЯ СКОРОСТЬ, ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩАЯ СИЛА, ПАРАМЕТР ВНУТРЕННЕГО СОСТОЯНИЯ, ФАЗОВЫЙ ПОРТРЕТ, ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ.

SELF-ORGANIZATION IN COLLECTIVE BEHAVIOUR OF ACTIVE NANOPARTICLES

O.V. Yushchenko, A.Sh. Baranova

Sumy State University,
2, R. Korsakov Str., 40007, Sumy, Ukraine
E-mail: yushchenko@phe.sumdu.edu.ua; mixifox@mail.ru

The self-organization of the set of active nanoparticles was self-consistently described on the basis of Lorentz's three-parametrical system in frameworks of the phenomenological scheme. The continuous and discontinuous types of transition from a rotary movement mode to the forward were considered. The fluctuation's influence on transition is investigated and diagrammed of possible modes of active nanoparticles group behavior are constructed. The kinetics of transition between rotary and forward movement types for different correlations between characteristic times of system's key parameters was analyzed on the basis of phase portraits.

Keywords: AVERAGE VELOCITY, LONG-RANGE FORCE, STATE PARAMETER, PHASE PORTRAIT, DISTRIBUTION FUNCTION.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. М.К. Роко, Р.С. Уильямс, П. Алившатова, *Нанотехнологии в ближайшем десятилетии. Прогноз направление исследований* (М.: Мир: 2002).
2. Г.Г. Еленин, *Нанотехнологии, наноматериалы, наноустройства. Новое в синергетике: Взгляд в третье тысячелетие.* (М.: Наука: 2002).
3. М. Рыбалкина, *Нанотехнологии для всех* (М.: Nanotechnology News Network: 2005)
4. И.П. Суздальев, *Нанотехнология: Физико - химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов* (М.: КомКнига: 2006).
5. D. Aeyels, F. De Smet, *Physica D* **237**, 2517 (2008).
6. H. Akbarzadeh, H. Abroshan, G.A. Parsafar, *Solid State Commun.* **150**, 254 (2010).
7. B. Alatas, E. Akin, A.B. Ozer, *Chaos Soliton Frac.* **40**, 1715 (2009).
8. A.S. Almusallam, D.S. Sholl, *J. Colloid Interf. Sci.* **313**, 345 (2007).
9. W.-D. Chang, S.-P. Shih, *Commun. Nonlinear. Sci. Numer. Simulat.* **15** 3632, (2010)
10. T. Chu, L. Wang, T. Chen, S. Mu, *Chaos Soliton Fract.* **30**, 875 (2006).
11. L. Ding, R.L. Davidchack, J. Pan, *Comp. Mater. Sci.* **45**, 247 (2009).
12. Z.-W. Dong, X.-C. Yang, Z.-H. Li, J.-X. Xu, K.-J. Liu, C.-F. Zhang, G.-J. You, Y.-L. Yan, S.-X. Qian, *Thin Solid Films* **517**, 6046 (2009).
13. M. Fujita, Y. Yamaguchi, *J. Comput. Phys.* **223**, 108 (2007).
14. X. Gao, T. Wang, B. Wu, J. Chen, J. Chen, Y. Yue, N. Dai, H. Chen, X. Jiang, *Biochem. Bioph. Res. Co.* **377**, 35 (2008).
15. C.M. Henein, T. White, *Physica A* **373**, 694 (2007).
16. D. Li, C. Liang, Y. Liu, S. Qian, *J. Lumin.* **122**, 549 (2007).
17. B. Liu, T. Chu, L. Wang, Z. Wang, *Chaos Soliton Fract.* **38**, 277 (2008).
18. R. Orlik, A.C. Mitus, B. Kowalczyk, A.Z. Patashinski, B.A. Grzybowski, *J. Non-Cryst. Solids* **355**, 1360 (2009).
19. J.K. Vasir, V. Labhasetwar, *Adv. Drug Deliver. Rev.* **59**, 718 (2007).
20. J. Zhang, Y. Zhao, B. Tian, L. Peng, H.-T. Zhang, B.-H. Wang, T. Zhou, *Physica A.* **388**, 1237 (2009).
21. Г. Хакен, *Синергетика* (М.: Мир: 1980) (H. Haken, *Synergetics. Introduction and Advanced Topics.* (Springer: Berlin: 2004)).
22. H. Markl, *A.V. Humboldt-Magazin* **13**, 65 (1995).
23. W. Ebeling, F. Schweitzer, ([arXiv:cond-mat/0211606v2](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0211606v2)).
24. А.Б. Медвиглядинский, С.В. Петровский, И.А. Тихонова, Д.А. Тихонов, Б.Л. Ли, Э. Вентурино, Х. Мальхё, Г.Р. Иваницкий *УФН* **172**, 31 (2002) (A.B. Medvinskii, S.V. Petrovskii, I.A. Tikhonova, D.A. Tikhonov, B.-L. Li, E. Venturino, H. Malchow, G.R. Ivanitskii, *Phys. Usp.* **45**, 27 (2002)).
25. W. Alt, G. Hoffmann, *Biological Motion, Lecture Notes in Biomathematics* **89**, 391 (Berlin: Springer-Verlag: 1990).
26. Г.Р. Иваницкий, А.Б. Медвиглядинский, М.А. Цыганов, *УФН* **164**, 1041 (1994) (G.R. Ivanitskii, A.B. Medvinskii, M.A. Tsyganov, *Phys. Usp.* **37**, 961 (1994)).
27. А.И. Олемской, А.А. Кацнельсон, *Синергетика конденсированной среды* (УРСС: Москва: 2003).
28. А.И. Olemskoi, *Physica A* **310**, 223 (2002).
29. А.А. Андронов, А.А. Витт, С.Э. Хайкин, *Теория колебаний.* (М.: Наука, 1981).
30. А.И. Олемской, А.В. Хоменко, *ЖЭТФ* **110**, 2144 (1996).
31. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теоретическая физика.* (Москва: Физматлит: 2002).