

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СИНЕРГЕТИКИ. «ЖИВЫЕ» СТРУКТУРЫ

Ляпцев А. В.¹, доктор физико-математических наук, ✉ upm_eno@mail.ru

¹ Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена,
набережная реки Мойки, д. 48, 191186, Санкт-Петербург, Россия

Аннотация

Предлагается модель, демонстрирующая свойства самоорганизующихся систем и основанная на двумерном движении взаимодействующих частиц. Попарное взаимодействие между частицами описывается потенциалом Ленарда-Джонса. Необходимое для самоорганизации свойство диссипативности обеспечивается введением зависящих от скоростей сил, возникающих при столкновении частиц. Влияние внешней среды описывается постепенным ослаблением («старением») связей между частицами при их объединении в структуры. Результаты численных расчетов иллюстрируют все особенности способных к самоорганизации систем: образование структур из первоначального хаотического состояния и последующая эволюция с постоянным распадом имеющихся структур и образованием новых структур. Подобные свойства характерны, например, для структур живой материи.

Ключевые слова: синергетика, процессы самоорганизации, математическая модель, диссипация, компьютерное моделирование.

Цитирование: Ляпцев А. В. Компьютерное моделирование процессов синергетики. «Живые» структуры // Компьютерные инструменты в образовании. 2019. № 3. С. 44–51. doi:10.32603/2071-2340-2019-3-44-51

1. ВВЕДЕНИЕ

В соответствии с определением, данным автором этого термина Г. Хакеном, синергетика — область научных исследований, целью которых является выявление общих закономерностей в процессах образования, устойчивости и разрушения упорядоченных временных и пространственных структур в сложных неравновесных системах различной природы [1]. Формирование этой области исследований обусловлено тем, что основные законы, описывающие подобные процессы, являются универсальными как для сложных систем, какими являются, например, живые системы, так и для достаточно простых «физических» систем, примером которых являются, например, процессы генерации электромагнитных волн. При изучении синергетики в соответствующих дисциплинах, входящих в образовательные программы ряда вузов, важно продемонстрировать именно универсальность законов синергетики, то есть показать, что качественные особенности подобных процессов в сложных системах аналогичны процессам в простейших системах, если основные свойства систем на качественном уровне совпадают.

Однако если процессы в «неживых» системах, связанные с образованием временных упорядоченных структур, могут описываться достаточно простыми уравнениями (например процессы генерации в электрических цепях), то процессы образования пространственных структур с точки зрения математического описания являются гораздо более сложными. Классическим примером, иллюстрирующим подобные процессы в лабораторных условиях, являются «ячейки Бенара» — сотовая структура в слое жидкости, подогреваемой снизу [1]. Образованные конвекционными потоками ячейки описываются уже системой дифференциальных уравнений в частных производных, в связи с чем изучение этих процессов и их моделирование для демонстрации соответствующих законов является относительно сложной задачей (см., например, [2]).

Следует отметить еще одну особенность вышеприведенного примера. Процесс образования ячеек Бенара описывает образование, но не распад структур, после их образования ячейки остаются стабильными. Это «роднит» в смысле наглядности подобный процесс с «неживым» процессом кристаллизации. Дело, естественно, не в том, что рассматривается система, не связанная с жизнью, аналогичные гранулы, образующиеся на Солнце в результате конвекции, живут достаточно короткое время (около 10 минут), после чего распадаются с образованием новых.

При изучении синергетики для наглядной демонстрации процесса образования структур из первоначально хаотического состояния используют также в качестве примера компьютерную игру «Жизнь», придуманную Дж. Конвейем (см., например, [3]). Эта популярная демонстрация входит, например, в среду MatLab (программа life). Суть процесса в том, что расчерченное на квадраты поле первоначально хаотически заполняется «живыми» клетками, оставшиеся клетки считаются «мертвыми». Эволюция системы описывается дискретными шагами, так что на каждом шаге состояния каждой клетки (живая, или мёртвая) изменяются в зависимости от состояний окружающих её клеток. Компьютерный эксперимент показывает, что при любом первоначально хаотическом состоянии системы через конечное число шагов образуются структуры из живых клеток. Как правило, с течением времени образуется стационарное состояние, в котором некоторые из образованных структур остаются статичными, а другие периодически изменяются, оставаясь в целом неподвижными. Своей наглядностью игра действительно напоминает «жизнь», которая, однако, «застывает» в конечном состоянии, что не характерно для живых систем.

Несмотря на наглядность в плане образования структур законы, описывающие эволюцию в игре «Жизнь», выглядят явно искусственными, не связанными с природными процессами. Представляет интерес разработка компьютерной модели, которая продемонстрировала бы характерные особенности игры «Жизнь» и, возможно, также и распад образующихся структур, а с другой стороны, математически описывалась бы уравнениями, аналогичными уравнениям для реальных систем. Кроме того, применительно к процессу обучения ценность модели тем выше, чем более простыми являются исходные уравнения. Простота уравнений, во-первых, способствует лучшему пониманию процессов самоорганизации, и, во-вторых, позволяет применить модель в качестве учебной задачи, доступной для решения студенту, изучающему математическое моделирование.

2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

В соответствии с общими положениями синергетики процессы возникновения и распада структур возникают в системах, обладающих рядом ключевых свойств. Во-первых,

эти системы должны описываться нелинейными уравнениями, во-вторых, эти системы должны быть открытыми и, в-третьих, они должны быть диссипативными. Не обсуждая эти особенности в общем случае, укажем лишь, что для «механических систем», то есть для систем, эволюция которых описывается законами классической механики и для которых может быть введено понятие механической энергии, требования «открытости» и «диссипативности» легко формулируются на основе понятия энергии. В диссипативной системе имеются процессы, в которых механическая энергия — энергия упорядоченного движения — переходит во внутреннюю энергию — энергию неупорядоченного движения. В открытой системе происходит обмен энергией с окружением системы.

Будем рассматривать в качестве модели частицы, движущиеся в двумерном пространстве (на плоскости) и взаимодействующие между собой. Для образования связанных состояний (структур) из этих частиц необходимо, чтобы потенциал попарного взаимодействия частиц имел минимум при некотором расстоянии между ними. Одним из простейших потенциалов, удовлетворяющих этому требованию, является модельный потенциал Ленарда-Джонса, имеющий вид (см., например, [4]):

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (1)$$

Параметры, входящие в выражение, определяют глубину потенциальной ямы (ϵ и расстояние, соответствующее минимуму потенциала ($r_{min} = \sigma \sqrt[6]{2}$). В уравнения движения частиц входят силы взаимодействия между ними. Вычисляя градиент потенциала взаимодействия двух частиц, получим силу, действующую на частицу j со стороны частицы i :

$$\mathbf{F}_{ij} = \frac{24\epsilon \mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^2} \left[2 \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (2)$$

где \mathbf{r}_{ij} — радиус-вектор, направленный от частицы i к частице j , r_{ij} — модуль этого радиус-вектора.

Система частиц, между которыми действуют только вышеприведенные силы взаимодействия, является не диссипативной. Объединения частиц в структуры в такой системе могут происходить крайне редко, только при одновременном столкновении 3 и более частиц. Будем моделировать диссипацию путем введения сил, зависящих от скорости. Примем следующие положения, определяющие такие силы.

1. Силы возникают при сближении двух частиц и становятся малыми при расстоянии между частицами, превышающими в несколько раз r_{min} .
2. Силы зависят от скорости сближения частиц и являются квадратичной функцией от этой скорости.

Выражение для силы, действующей на частицу j при сближении её с частицей i можно записать в виде:

$$\mathbf{F}_{ij}^{(v)} = -k \mathbf{v}_{ijn} v_{ijn} f(r_{ij}). \quad (3)$$

В этой формуле \mathbf{v}_{ijn} — составляющая вектора относительной скорости $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ направленная вдоль вектора перемещения от частицы i к частице j (рис. 1), v_{ijn} — модуль вектора \mathbf{v}_{ijn} , k — параметр, характеризующий величину диссипации, $f(r_{ij})$ — функция, обеспечивающая убывание диссипативной силы при удалении частиц друг от друга. При расчете такая функция моделировалась выражением:

$$f_{ij} = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctg \left(10 \left(\frac{r_{ij}}{r_{min} - 1} \right) \right),$$

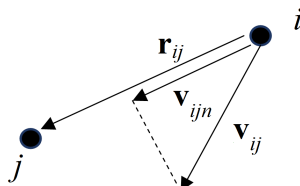


Рис. 1

Заметим, что действие введенной таким образом диссипативной силы эквивалентно действию амортизатора, гасящего колебания, например, при движении автомобиля. Определенные выражениями (2) и (3) силы зависят только от взаиморасположения и относительных скоростей частиц, поэтому при движении частиц, взаимодействующих с такими силами, сохраняется полный импульс и момент импульса системы. Наличие диссипативной силы приводит, естественно, к уменьшению энергии системы.

При численных расчетах удобно перейти к ограниченному пространству, в котором движутся частицы. Для этого можно считать, что движение происходит в квадрате, верхняя граница которого соединена с нижней, а правая — с левой. В результате частица, пересекающая, например, верхнюю границу, входит в квадрат снизу. Аналогичные переходы возникают и при пересечении других границ. Заметим, что подобное замыкание границ является стандартной процедурой и использовано, в частности, в вышеупомянутой компьютерной игре «Жизнь».

Проведенные расчеты показывают, что при движении частиц, взаимодействующих посредством введенных сил, постепенно происходит образование структуры в виде одного конгломерата, состоящего из равносторонних треугольников. Подобный процесс эквивалентен реальному процессу кристаллизации. В конечном состоянии взаиморасположение частиц соответствует одному из минимумов потенциальной энергии их взаимодействия. Чтобы наблюдались процессы распада структур, необходимо некоторое внешнее воздействие на систему, обеспечивающее восполнение энергии. Подобное воздействие можно смоделировать различным образом. Обращаясь к биологическим системам, можно заметить, что процесс старения организма с последующей смертью (распад структур) связан с повреждением некоторых макромолекул, то есть с разрывом связей между составляющими этих молекул. Аналогом в нашей модели может быть ослабление («старение») связи между двумя частицами, после того как они оказываются связанными, то есть в течение некоторого времени расстояние между ними приближенно равно r_{min} .

Для реализации этой идеи время при расчете эволюции системы разбивалось на одинаковые интервалы, и в конце каждого из интервалов определялись расстояния r_{ij} между частицами в каждой паре и рассчитывалась функция $g_{ij}(t)$, на которую домножалась сила F_{ij} при расчете эволюции на следующем интервале. Если в начале последнего временного интервала $r_{ij} > 2r_{min}$, а в конце интервала $r_{ij} < 1,5r_{min}$ (за время последнего временного интервала образовалась связь), то

$$g_{ij}(t) = \exp \left(\frac{t_f - t}{\tau} \right), \quad (4)$$

где t_f — время, соответствующее концу интервала, τ — параметр, характеризующий «скорость старения». Если вначале последнего интервала $r_{ij} < 1,5r_{min}$, а в конце интервала $r_{ij} > 2r_{min}$ (связь разрушилась), то $g_{ij}(t) = 1$. Во всех остальных случаях функция $g_{ij}(t)$ не изменяется.

Введение такого «старения» связи эквивалентно постепенному увеличению полной энергии системы под воздействием внешнего окружения, поскольку потенциальная энергия взаимодействия двух частиц, образующих связь, отрицательна. Таким образом, в данной модели имеют место два «конкурирующих» процесса — уменьшение энергии системы вследствие диссипации и восполнение энергии вследствие «старения» связей. Подобная «конкуренция» характерна для систем, способных к самоорганизации, предметом изучения которых является синергетика.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

Численный расчет проводился на основе решения уравнений, следующих из 2-го закона Ньютона:

$$m\ddot{\mathbf{r}}_j = \sum_{i=1}^N \left(g(r_{ij}, t) \mathbf{F}_{ij}(\mathbf{r}_{ij}) + \mathbf{F}_{ij}^{(v)}(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{v}_{ij}) \right), \quad j = 1, \dots, N, \quad (5)$$

где входящие в уравнение силы определены выражениями (2) и (3), точки над \mathbf{r} обозначают вторую производную по времени. В качестве единицы длины при расчёте выбиралась сторона квадрата, определяющего область движения частиц, в качестве единицы массы — масса частицы m и в качестве единицы энергии — величина 4ϵ , входящая в выражение (1). Задание этих масштабов однозначно определяет единицу времени, используемую при расчетах. В качестве безразмерных параметров модели выбирались параметр k , характеризующий величину диссипации (выражение (3)), параметр τ , характеризующий скорость «старения связи» (выражение (4)) и параметр $d = 2\sigma$, характеризующий размер частицы по отношению к размеру области движения (параметр σ входит в выражения (1) и (2)). Наконец, еще одним параметром модели является число частиц N .

В качестве начального состояния при расчете выбиралось состояние, в котором частицы случайным образом распределены в области движения, а их скорости, равные по величине единице, случайным образом распределены по направлениям. Все функции $g_{ij}(t)$ полагались равными единице. Система из N векторных дифференциальных уравнений второго порядка для функций $\mathbf{r}_i(t)$ сводится к системе из $2N$ скалярных дифференциальных уравнений 2-го порядка для функций $x_i(t)y_i(t)$. После введения новых функций $v_{xi}(t) = \dot{x}_i(t)$, $v_{yi}(t) = \dot{y}_i(t)$ система уравнений сводится к системе из $4N$ дифференциальных уравнений 1-го порядка. Решение системы проводилось с использованием процедуры решения системы дифференциальных уравнений ode45, входящей в среду Matlab.

Расчеты показывают, что при любых начальных состояниях со временем образуются структуры, основным элементом которых являются равносторонние треугольники из трех частиц. В процессе эволюции эти структуры распадаются и преобразуются с изменением количества структур и их формы. На рисунке 2 в качестве примера приведены результаты расчета в разные моменты времени для 10 частиц при следующих параметрах: $d = 0,05$, $k = 1$, $\tau = 10$.

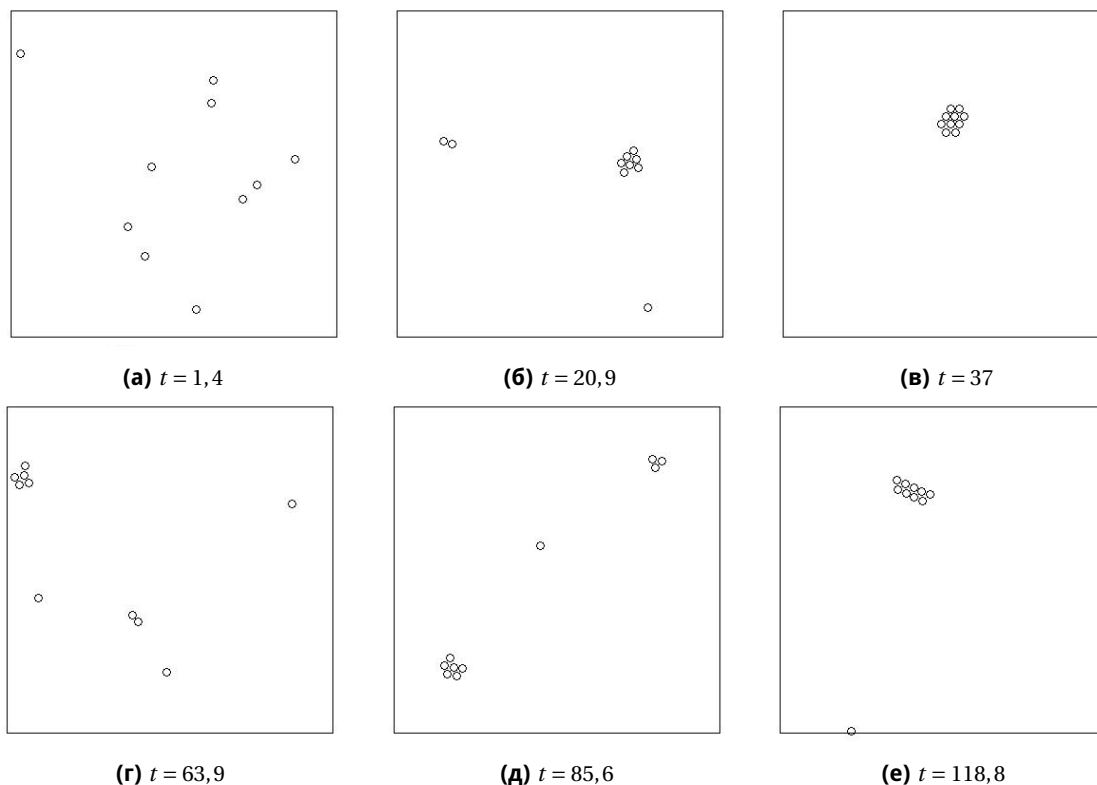


Рис. 2

Видео эволюции системы частиц в данной модели можно посмотреть на сайте <https://youtu.be/kgRz0oBhv88> (10 частиц) и <https://youtu.be/iZCn63S3Fzw> (15 частиц).

Отметим, что характерные особенности — образование структур из нескольких частей, их последующий распад и образование новых структур наблюдается и при других параметрах задачи. При этом наблюдаемые процессы носят хаотический характер и изменяются в зависимости от начального состояния. Вычислительный эксперимент показывает, что уменьшение параметров d, k , также как и увеличение параметра τ , приводят к замедлению процессов эволюции.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенная модель демонстрирует явление самоорганизации, изучаемое синергетикой, и обладает, на наш взгляд, рядом достоинств, среди которых можно выделить следующие.

1. Демонстрация результатов расчета, выполненных на основе модели является весьма наглядной, поскольку механическое движение частиц, является более наглядным, чем, например, конвекционное движение жидкости.
2. Модель содержит минимум элементов, необходимых и достаточных для существования явлений самоорганизации в системе многих частиц.
3. Математические уравнения, описывающие эволюцию модели, аналогичны уравнениям, применяемым при описании реальных систем.
4. Для реализации модели не требуется больших вычислительных мощностей.

5. Модель может быть применена в учебном процессе как для демонстрации эволюции систем, способных к самоорганизации, так и при обучении математическому моделированию.

Список литературы

1. Хакен Г. Синергетика. М.: Мир, 1980.
2. Попов С. Е. Методическая система подготовки учителя в области вычислительной физики: Монография. Нижний Тагил: НТГСПА, 2005.
3. Клумова И. Н. Игра «Жизнь» // Квант. 1974. № 9. С. 26–30.
4. Каплан И. Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы. 1982. 312 с.

Поступила в редакцию 06.07.2019, окончательный вариант — 30.08.2019.

Ляпцев Александр Викторович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры методики обучения физике РГПУ им. А. И. Герцена, ✉ upm_eno@mail.ru

Computer tools in education, 2019

№ 3: 44–51

<http://cte.eltech.ru>

doi:10.32603/2071-2340-2019-3-44-51

Computer Modelling of Processes of Synergetics. «Living» Structures

Liapzev A. V.¹, PhD, professor, ✉ upm_eno@mail.ru

¹ Herzen State Pedagogical University of Russia,
Moika river embankment, 48, 191186, Saint Petersburg, Russia

Abstract

A model demonstrating the properties of self-organizing systems and based on two-dimensional motion of interacting particles is proposed. The pairwise interaction between particles is described by the Lenard-Jones potential. The dissipativity property which is necessary for self-organization is provided by the introduction of velocity-dependent forces arising in the collision of particles. The influence of the external environment is described by the gradual weakening ("aging") of the bonds between the particles, when they are combined into structures. The results of numerical calculations illustrate all the features of systems capable of self-organization: the formation of structures from the initial chaotic state and subsequent evolution with the constant decay of existing structures and the formation of new structures. Such properties are typical, for example, for the structures of living matter.

Keywords: *synergetics, self-organization processes, mathematical model, dissipation, computer modeling.*

Citation: A. V. Liapzev, "Computer Modelling of Processes of Synergetics. 'Living' Structures," *Computer tools in education*, no. 3, pp. 44–51, 2019 (in Russian); doi:10.32603/2071-2340-2019-3-44-51

References

1. G. Khaken, *Sinergetika* [Synergetics], Moscow: Mir, 1980 (in Russian).
2. S. E. Popov, *Metodicheskaya sistema podgotovki uchitelya v oblasti vychislitel'noi fiziki: Monografiya* [Methodological system for teacher training in the field of computational physics: Monograph], Nizhniy Tagil, Russia: NTGSPA, 2005 (in Russian).
3. I. N. Klumova, "Igra «Zhizn'»" [Conway's Game of Life], *Kvant*, no. 9, pp. 26–30, 1974 (in Russian).
4. I. G. Kaplan, *Vvedenie v teoriyu mezhmolekulyarnykh vzaimodeistvii* [Introduction to the theory of intermolecular interactions], Moscow, USSR: Nauka, 1982 (in Russian).

Received 06.07.2019, The final version — 30.08.2019.

Alexander V. Liapzev, PhD, professor of the Department of methods of teaching physics at RSPU.
A. I. Herzen, ✉ upm_eno@mail.ru