

1 局部耦合中跨边界坐标的调整

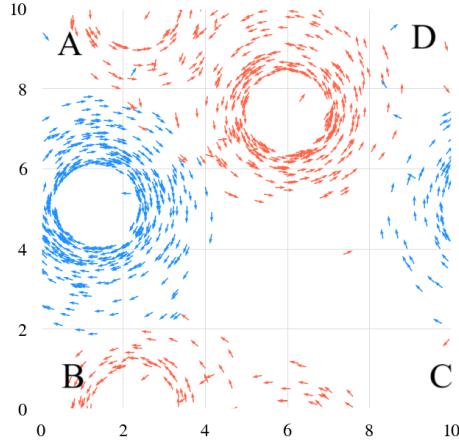


Figure 1: 跨边界坐标的调整

给定 (x_i, y_i) , 对于任意的 (x_j, y_j) , 做如下变换

$$\bar{x}_j = \begin{cases} x_j, & |x_i - x_j| \leq L/2 \\ x_j + L, & x_i - x_j > L/2 \\ x_j - L, & x_j - x_i > L/2 \end{cases}, \quad \bar{y}_j = \begin{cases} y_j, & |y_i - y_j| \leq L/2 \\ y_j + L, & y_i - y_j > L/2 \\ y_j - L, & y_j - y_i > L/2 \end{cases} \quad (1)$$

其中, L 为边界长度. 例如, 对于1中的情况, 以 A 为 (x_i, y_i) 时, B 需调整纵坐标, D 需调整横坐标, C 需同时调整横纵坐标.

原始距离为

$$d_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}$$

变换后的距离为

$$\bar{d}_{ij} = \sqrt{(x_i - \bar{x}_j)^2 + (y_i - \bar{y}_j)^2}$$

下证 $\bar{d}_{ij} \leq d_{ij}$, 即调整后的距离不会大于原始距离.

对于 $(x_i - x_j)^2, (x_i - \bar{x}_j)^2$, 若 $x_i \neq \bar{x}_j$, 有

$$\begin{aligned}
& (x_i - \bar{x}_j)^2 - (x_i - x_j)^2 \\
&= (x_j \pm L - x_i)^2 - (x_i - x_j)^2 \\
&= L^2 \pm 2L(x_j - x_i) \\
&= \begin{cases} L^2 + 2L(x_j - x_i), & x_i - x_j > 5 \\ L^2 - 2L(x_j - x_i), & x_j - x_i > 5 \end{cases} \\
&< L^2 - 10L \\
&= 0, (L = 10)
\end{aligned}$$

即

$$(x_i - \bar{x}_j)^2 < (x_i - x_j)^2, (L = 10, x_i \neq \bar{x}_j)$$

同理可证

$$(y_i - \bar{y}_j)^2 < (y_i - y_j)^2, (L = 10, x_i \neq \bar{x}_j)$$

综上有

$$\bar{d}_{ij} = \sqrt{(x_i - \bar{x}_j)^2 + (y_i - \bar{y}_j)^2} \leq \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} = d_{ij}$$

当且仅当 $x_i = \bar{x}_j$ 且 $y_i = \bar{y}_j$ 时，取等号。

因此

$$\begin{aligned}
D_{ij} &= \min \left\{ \sqrt{(x_i - \bar{x}_j)^2 + (y_i - \bar{y}_j)^2}, \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \right\} \\
&= \sqrt{(x_i - \bar{x}_j)^2 + (y_i - \bar{y}_j)^2}
\end{aligned}$$

2 相位-取向关联的集群振子系统的动力学研究

△ 聚焦点

1. 环态及其相变
2. 环态的解域与相位同步的关系
3. 数值结果的细致讨论, 分类
4. 必要的理论分析与估计

2.1 单个粒子的运动问题 (无相互作用)

$$\begin{cases} \Delta x(t) = v \cos \theta \Delta t & \dot{x} = v \cos \theta \\ \Delta y(t) = v \sin \theta \Delta t & \dot{y} = v \sin \theta \\ \dot{\theta}_i = \omega_i \rightarrow \theta_i(t) = \omega_i t \\ v = \sqrt{\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2} = v \text{ (constant)} \end{cases}$$

运动半径的求解

$$\begin{cases} x_i(t) = x_i(0) - \frac{v}{\omega_i} \sin \omega_i t \\ y_i(t) = y_i(0) - \frac{v}{\omega_i} \cos \omega_i t \end{cases} \Rightarrow (x_i - x_i^0)^2 + (y_i - y_i^0)^2 = \left(\frac{v}{\omega_i}\right)^2$$

每个粒子的运动轨迹是一个圆, 圆心为 (x_i^0, y_i^0) , 半径为 $\frac{v}{\omega_i}$

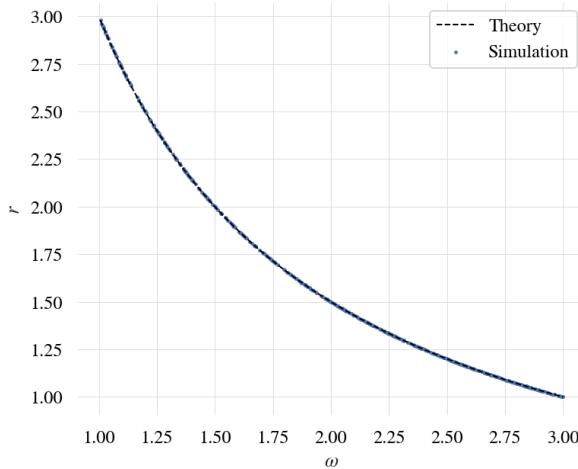


Figure 2: 解析解与数值模拟结果 ($\lambda = 0, d_0 = 0, randomseed = 10$, Single Chirality)

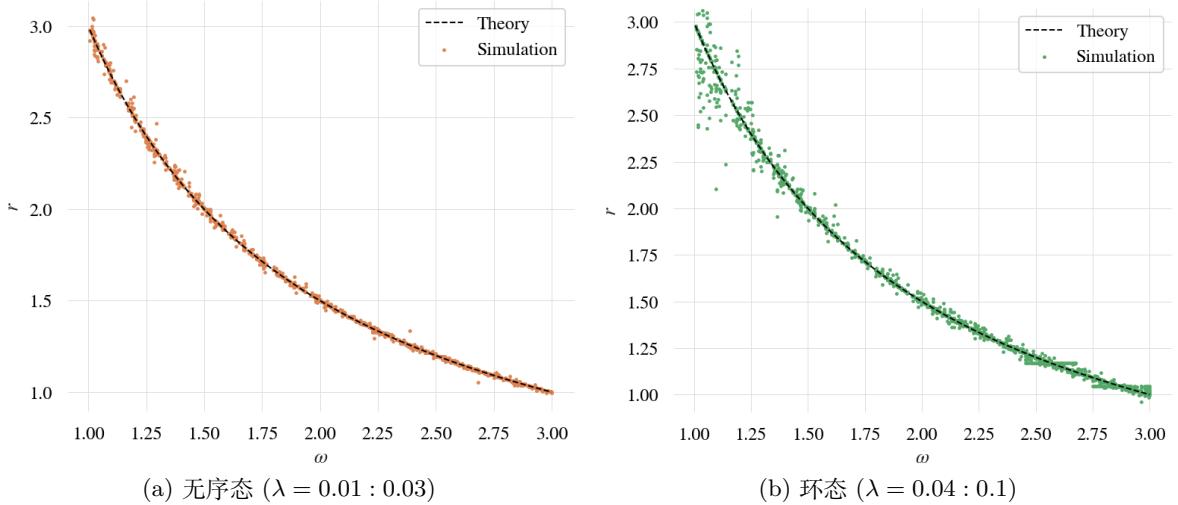


Figure 3: 无序态、环态解析解与数值模拟结果 ($d_0 = 0.1$, randomseed = 10 Single Chirality)

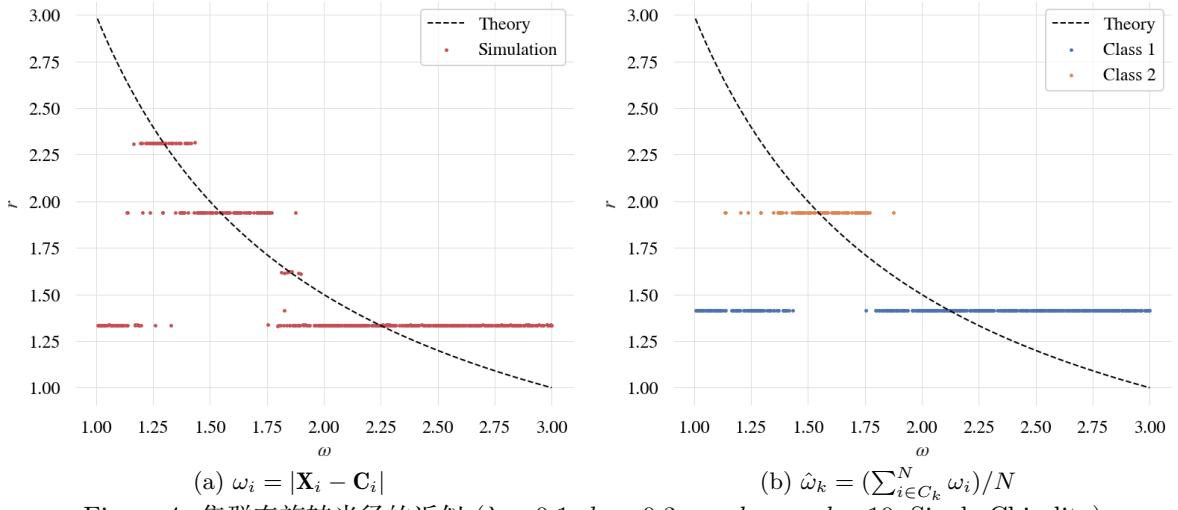


Figure 4: 集群态旋转半径的近似 ($\lambda = 0.1$, $d_0 = 0.3$, randomseed = 10, Single Chirality)

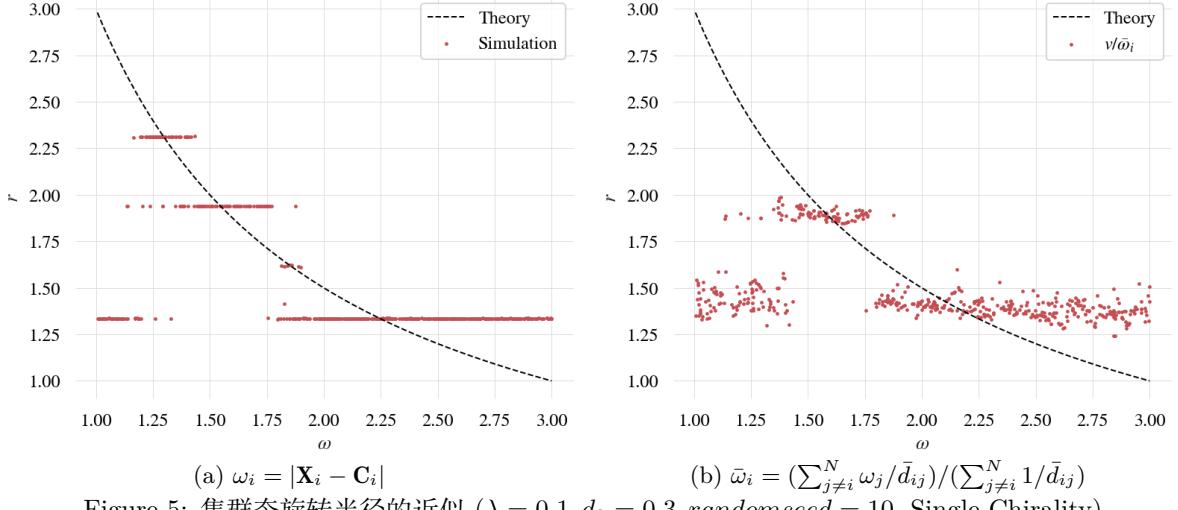


Figure 5: 集群态旋转半径的近似 ($\lambda = 0.1$, $d_0 = 0.3$, randomseed = 10, Single Chirality)

2.2 考虑相互作用 λ , 耦合距离 d_0 ($\{A_{ij}\}$, 注意是时变的)

- 看空间聚集过程
- 空间尺度也考虑进去

粒子数 N , $L \times L \sim \sqrt{\frac{L \times L}{N}} \sim \frac{L}{\sqrt{N}}$

1. 每个单粒子的运动空间尺度, $\frac{v}{\omega_i}$
2. 耦合距离 d_0
3. 粒子平均间距 $\frac{L}{\sqrt{N}}$

$$d_0 \sim \frac{L}{\sqrt{N}} \rightarrow d_0 \ll \frac{L}{\sqrt{N}}, d_0 \gg \frac{L}{\sqrt{N}}$$

低频粒子: $d_0 \ll \frac{v}{\omega_i}$ 高频粒子: $d_0 \gg \frac{v}{\omega_i}$

在计算空间 pattern 同时, 还要跟踪每个粒子的相速度 $\dot{\theta}_i(t)$

2.3 序参量 Order Parameter

2.3.1 相位单位圆

由于粒子数较多，为了更清晰地刻画粒子相位的同步情况，绘制三维空间中的单位圆。将单位圆等分为 M 个区间，每个区间的大小为 $\frac{2\pi}{M}$ ， z 轴表示单位圆上相位处于该区间的粒子数，类似于分布。

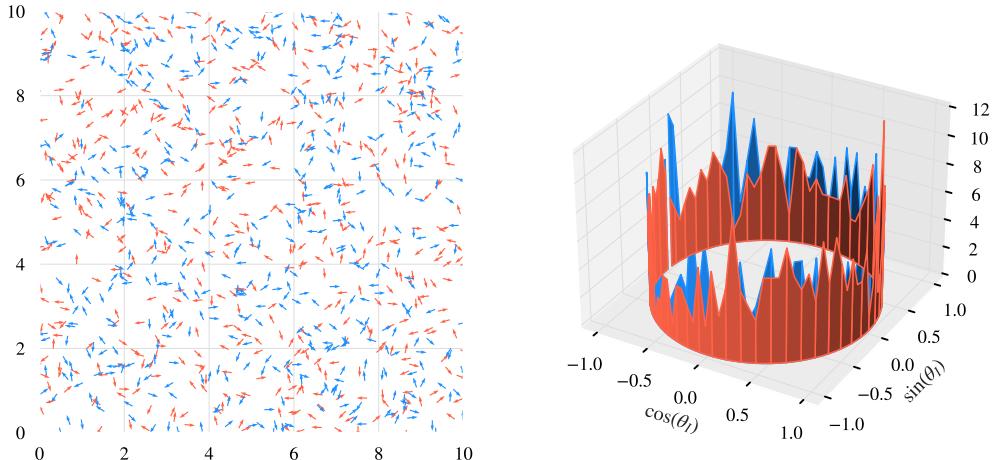


Figure 6: 无序态 ($\lambda = 0.01, d_0 = 0.1, \text{randomseed} = 10$)

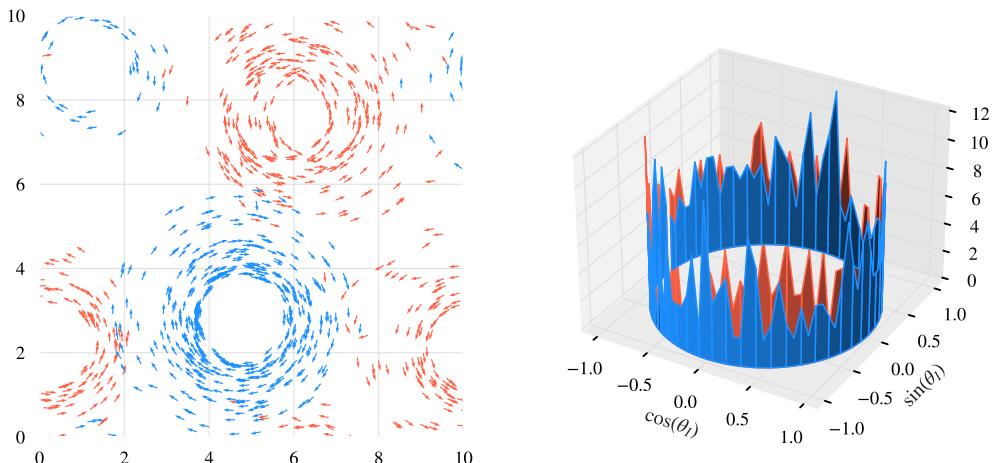


Figure 7: 环态 ($\lambda = 0.02, d_0 = 0.3, \text{randomseed} = 10$)

当粒子处于无序态或环态时，相位单位圆的分布如图6和图7所示。此时，单位圆分布较为平滑，单位圆上的粒子数分布较为均匀，相位同步的程度较低。

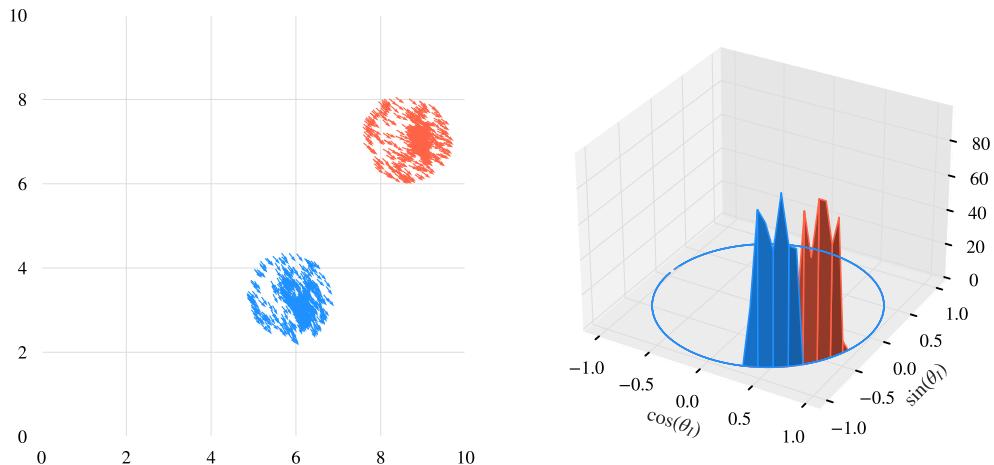


Figure 8: 集群态 ($\lambda = 0.01, d_0 = 2, \text{randomseed} = 10$)

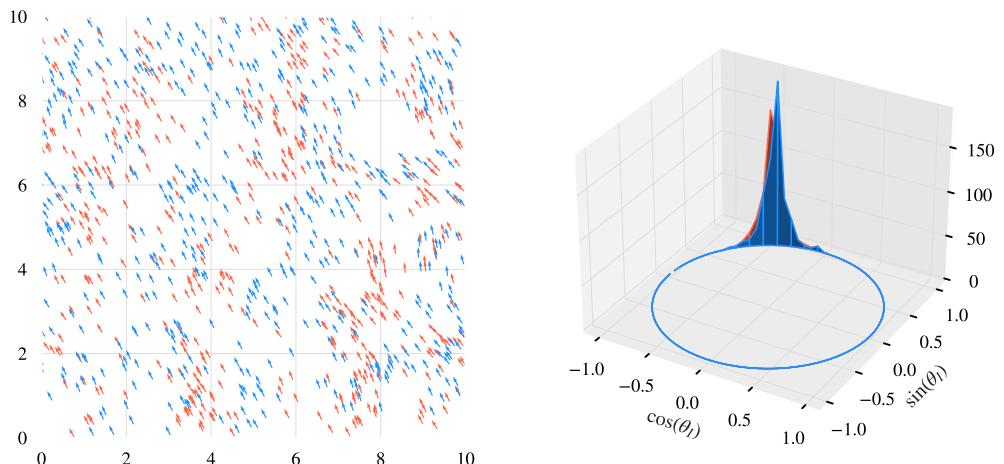


Figure 9: 快速同步态 ($\lambda = 0.6, d_0 = 3, \text{randomseed} = 10$)

当粒子处于集群态或快速同步态时，相位单位圆的分布如图8和图9所示。这两种状态的相位同步的程度较高。

2.3.2 粒子旋转中心的坐标

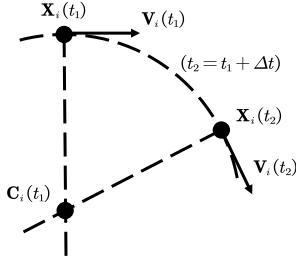


Figure 10: 旋转圆心示意图

如图 10 所示, 对于任意粒子 i , 其当前坐标为 $\mathbf{X}_i(t_1)$, 速度为 $\mathbf{V}_i(t_1)$, 下一时刻的坐标为 $\mathbf{X}_i(t_2)$, 速度为 $\mathbf{V}_i(t_2)$, 则其旋转中心坐标为两个时刻法向量所在直线的交点, 假设旋转中心坐标为 $\mathbf{C}_i(t_1)$, 则有

$$\begin{cases} \mathbf{C}_i(t_1) \cdot \mathbf{V}_i(t_1) = \mathbf{X}_i(t_1) \cdot \mathbf{V}_i(t_1) \\ \mathbf{C}_i(t_1) \cdot \mathbf{V}_i(t_2) = \mathbf{X}_i(t_2) \cdot \mathbf{V}_i(t_2) \end{cases}$$

求解上述方程组, 可以得到每个粒子的旋转中心坐标, 如下图11:

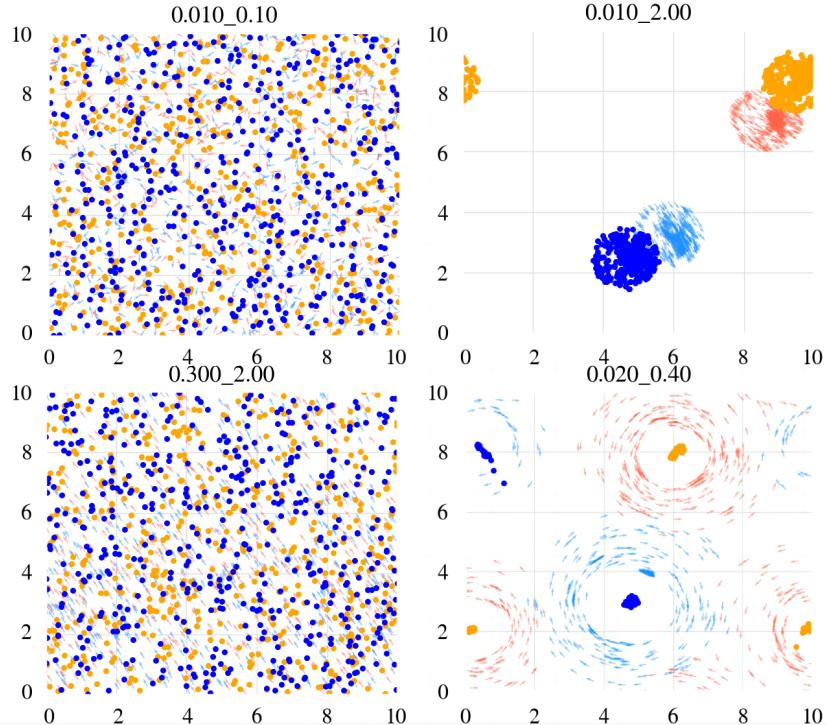


Figure 11: 旋转中心求解结果示例

上图中, 带有箭头的半透明色点表示粒子, 光滑实心点表示粒子的旋转中心, 其中, 橙色点为正手性粒子 (半透明红色箭头) 的旋转中心, 蓝色点为负手性粒子 (半透明蓝色箭头) 的旋转中心. 从图中可以看出, 形成清晰的环态后, 环上粒子的旋转中心较为集中, 说明同一环上粒子的运动规律较为接近, 且近似圆周运动.

2.3.3 基于调整耦合距离的聚类算法

考虑到粒子在形成环态或集群态时，会形成多个环或集群，因此可以对粒子进行聚类从而计算各环或群的局部序参量。由于环在欧氏空间中的分布较为特殊（中空，环与环相邻），因此改为对粒子的旋转中心进行聚类。此外，周期性边界条件会导致粒子的旋转中心跨边界，这里采样式1对旋转中心坐标进行调整。

Algorithm 1: Clustering algorithm based on adjusted distance

Data: A set $S = \{(\bar{x}_i, \bar{y}_i)\}$ of particles' circular center coordinates

Input: cluster distance d_{th}

Result: A cluster set $C = \{\{1\}\}$

```

1  $C \leftarrow \{(\bar{x}_1, \bar{y}_1)\};$ 
2 for  $i \leftarrow 2$  to  $N$  do
3   for class set  $C_k$  in  $C$  do
4     for  $j$  in  $C_k$  do
5       if  $\bar{d}_{ij} < d_{th}$  then                                // belong to  $C_k$ 
6          $C_j \leftarrow C_j \cup \{i\};$ 
7         go to line 2;
8       end
9     end
10   end
11    $C \leftarrow C \cup \{\{i\}\};$                          // create new class
12 end

```

取 $d_{th} = 1, \lambda = 0.02, d_0 = 0.4, randomseed = 80$ 并对模型终态执行算法，可得到如下图12所示的聚类结果。对比左侧子图与右侧子图，可以发现，算法可以较好地将多个环分开。

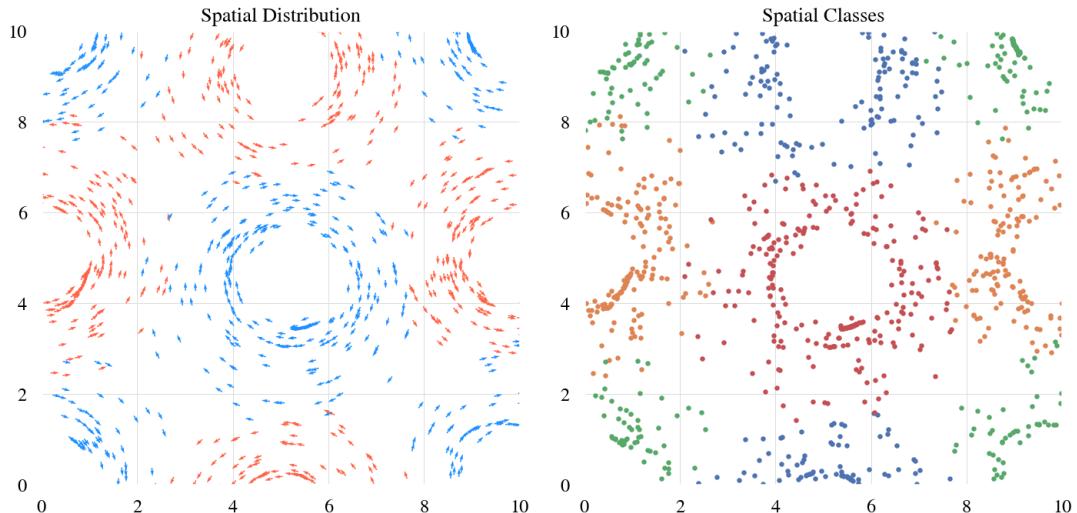


Figure 12: 聚类结果 ($d_{th} = 1, \lambda = 0.02, d_0 = 0.4, randomseed = 80$)

2.3.4 序参量的定义与计算

为了评估截面序参量对相图的刻画能力，这里根据终态的拓扑结构绘制了主观划分的相图，以提供对比，如下图13所示。从左至右，从上至下，分别为无序态、环态、集群态、快速同步态。图11中的四种状态分别对应图13中的四个区域，对比观察可以发现，环态与集群态在空间上的聚集程度较高，而无序态与快速同步态在空间上分布较为均匀，聚集程度低；此外，集群态与快速同步态在相位（速度方向）上的同步程度较高，而环态与无序态较低。

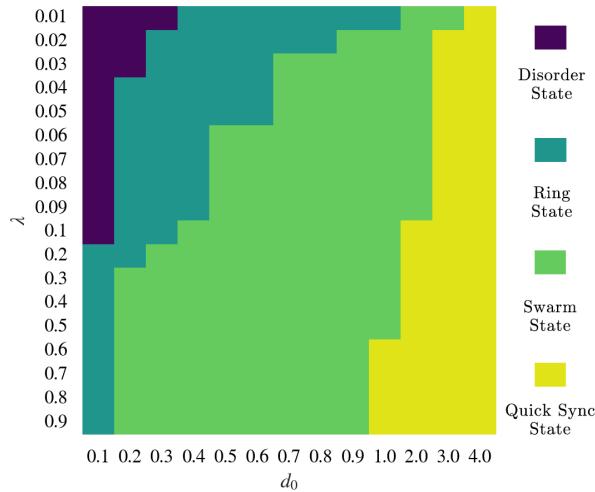


Figure 13: 主观划分相图

相位（速度方向）同步率（截面序参量）

$$re^{i\psi} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i\theta_j}$$

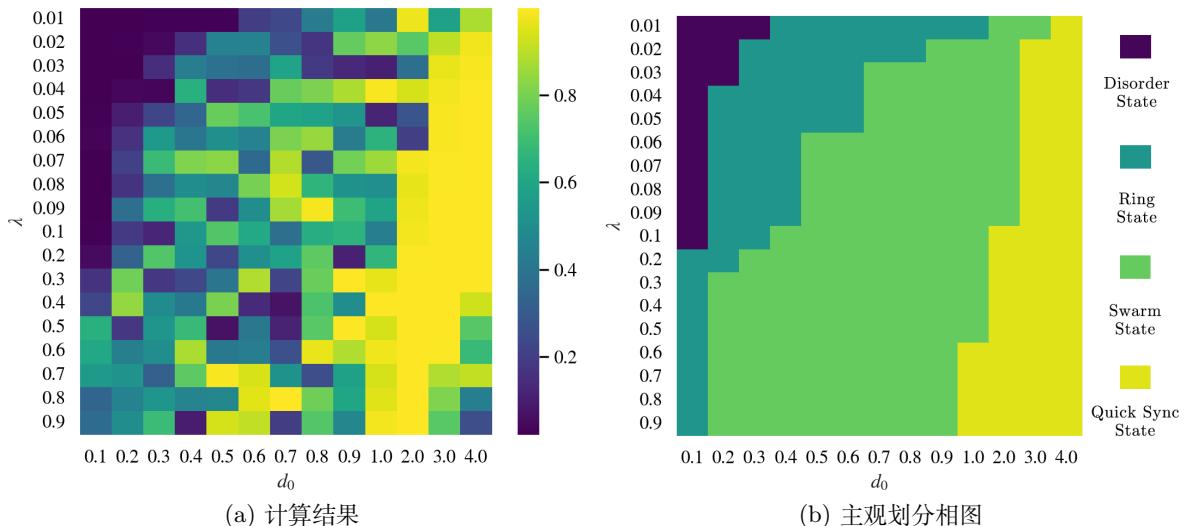


Figure 14: 相位（速度方向）同步率

由于部分集群态存在分裂现象，因此某些集群态的全局相位同步程度较低，导致该序参量过渡不均匀，不易区分环态与集群态。针对这个问题的改进见17和18。

旋转中心空间聚集程度 1(截面序参量)

这里以粒子旋转中心间的距离来刻画中心的空间聚集程度，考虑到周期性边界条件，这里采用式1对旋转中心坐标进行调整，然后计算所有粒子旋转中心间距离的算数平均，即

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \bar{d}_{ij} \right)$$

其中， \bar{d}_{ij} 为调整后的粒子 i 与粒子 j 的旋转中心距离.

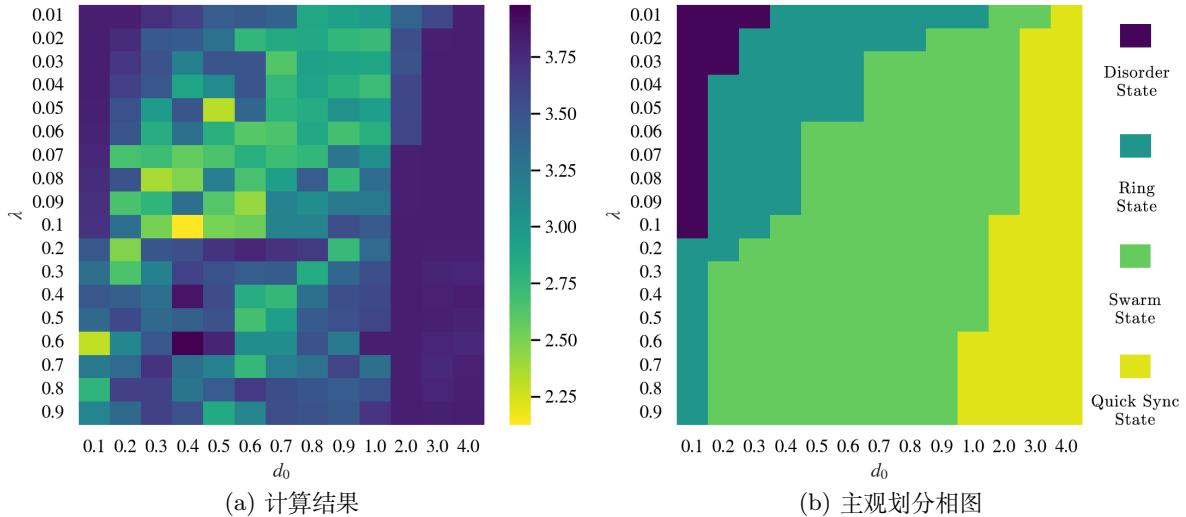


Figure 15: 旋转中心空间聚集程度 1

旋转中心空间聚集程度 2(截面序参量)

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\sum_{j=1}^N \mathbf{C}_i - \bar{\mathbf{C}}_j}{N} \right|$$

其中， $\bar{\mathbf{C}}_j$ 为第 j 个粒子旋转中心以第 i 个粒子旋转中心为基准，根据方法1调整后的坐标.

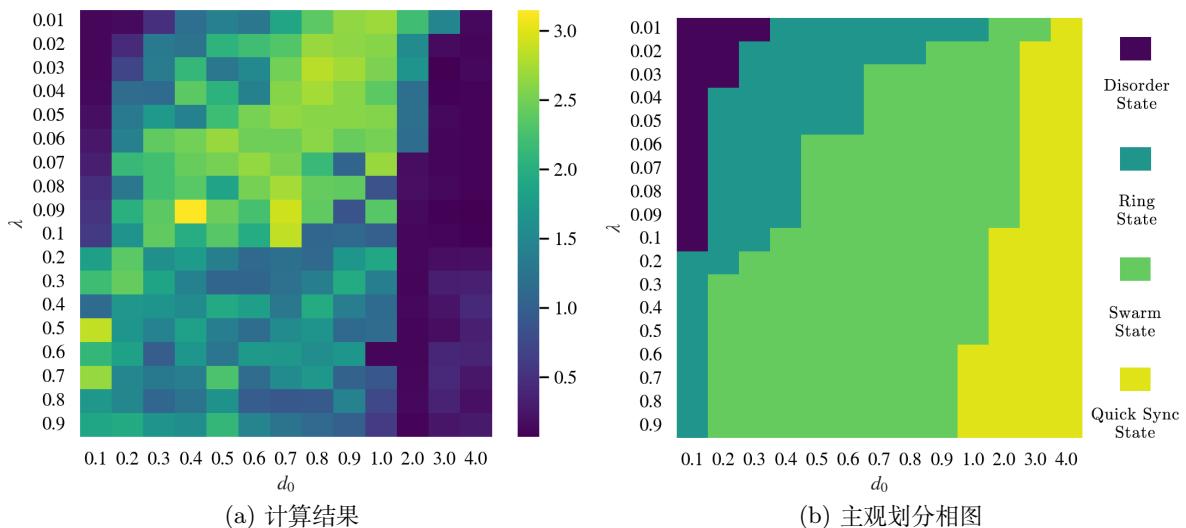


Figure 16: 旋转中心空间聚集程度 2

聚类平均相位同步程度 (截面序参量)

这里基于方法2.3.3($d_{th} = 1$)对粒子旋转中心进行聚类，然后计算每一类(粒子数不足5个的分类剔除)中粒子的相位同步程度，最后取所有类的相位同步程度的算数平均，即

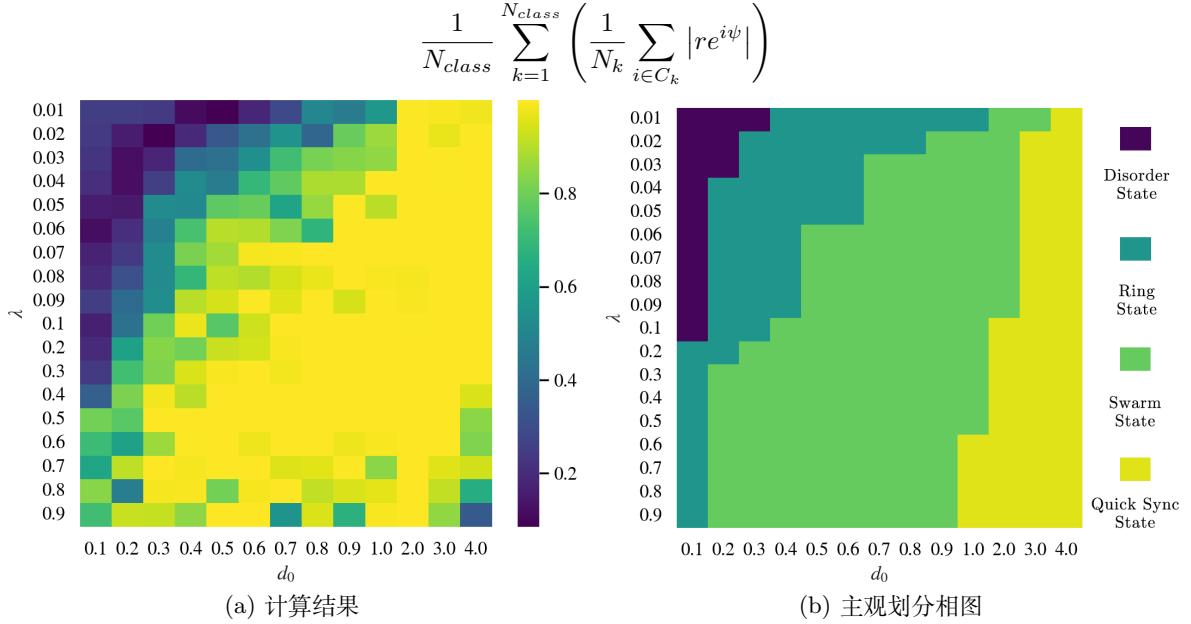


Figure 17: 聚类平均相位同步程度

对比图14可以发现，图17能够更好地刻画环态与集群态的相位同步程度，从而将它们区分，但算法2.3.3的计算复杂度较高，且不易区分集群态与快速同步态，因此做出如下改进：

中心距离倒数加权相位同步程度 (截面序参量)

$$S = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\sum_{j \neq i}^N e^{i\theta_j / \bar{d}_{ij}}}{\sum_{j \neq i}^N 1 / \bar{d}_{ij}} \right| \quad (2)$$

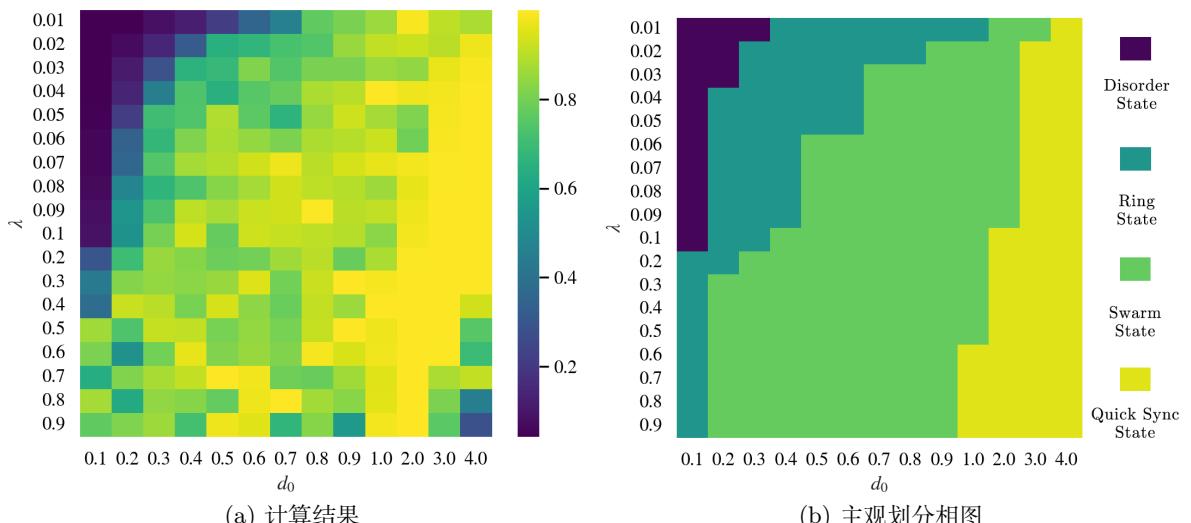


Figure 18: 中心距离倒数加权相位同步程度

对比图17可以发现两序参量的刻画能力相近，但图18能够将集群态与快速同步态相区分，与主观划分相图更接近。此外，式2的计算复杂度更低。

旋转中心空间分布 (时序参量)

考虑到粒子在二维平面上运动，因此该序参量分为 x 坐标和 y 坐标两个分量，将各粒子旋转中心坐标以散点图形式分别绘制得到图下图像：

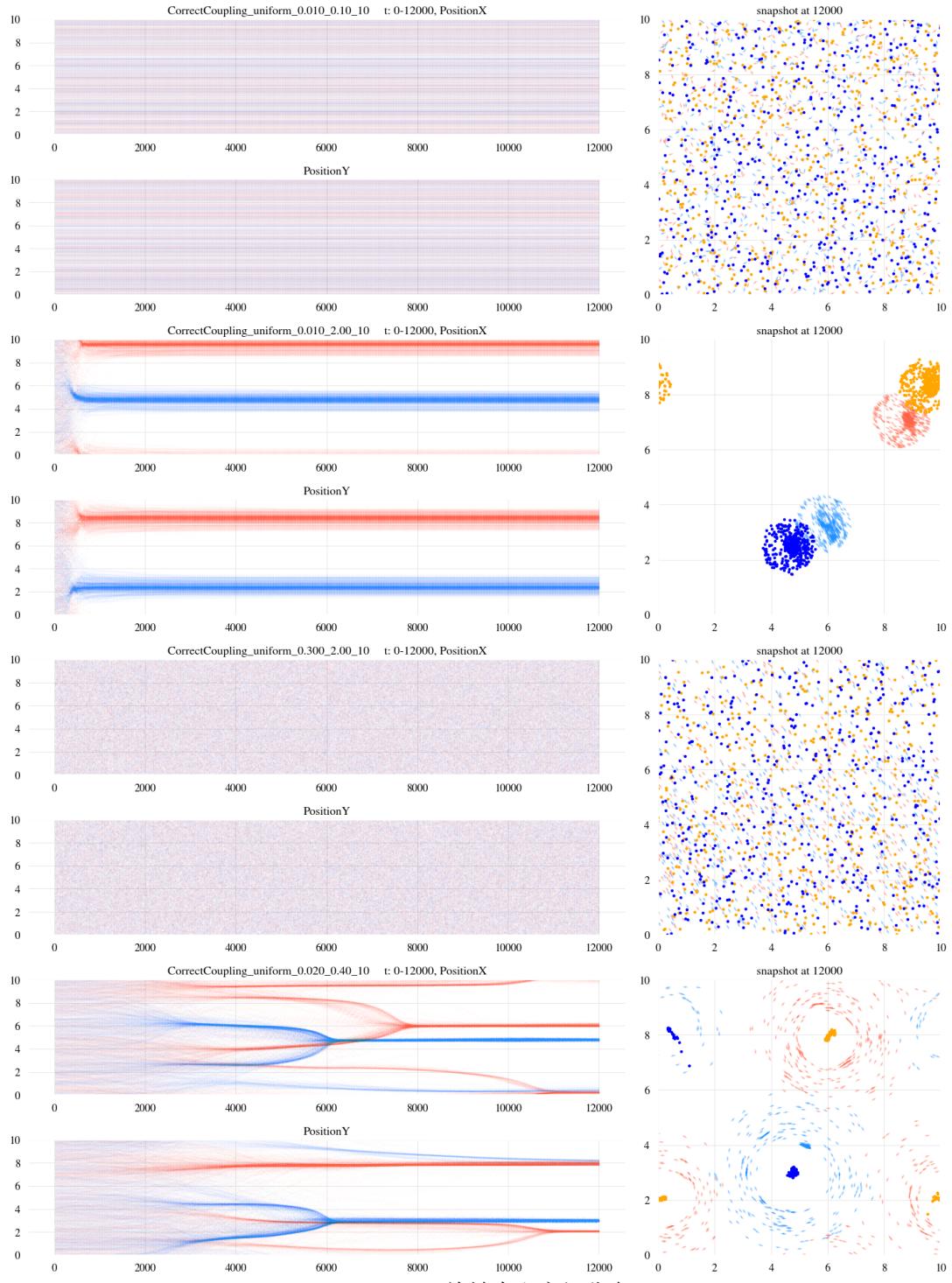


Figure 19: 旋转中心空间分布

中心距离倒数加权相位同步程度 (各粒子/时序序参量)

$$S_i = \left| \frac{\sum_{j \neq i}^N e^{i\theta_j / \bar{d}_{ij}}}{\sum_{j \neq i}^N 1 / \bar{d}_{ij}} \right|$$

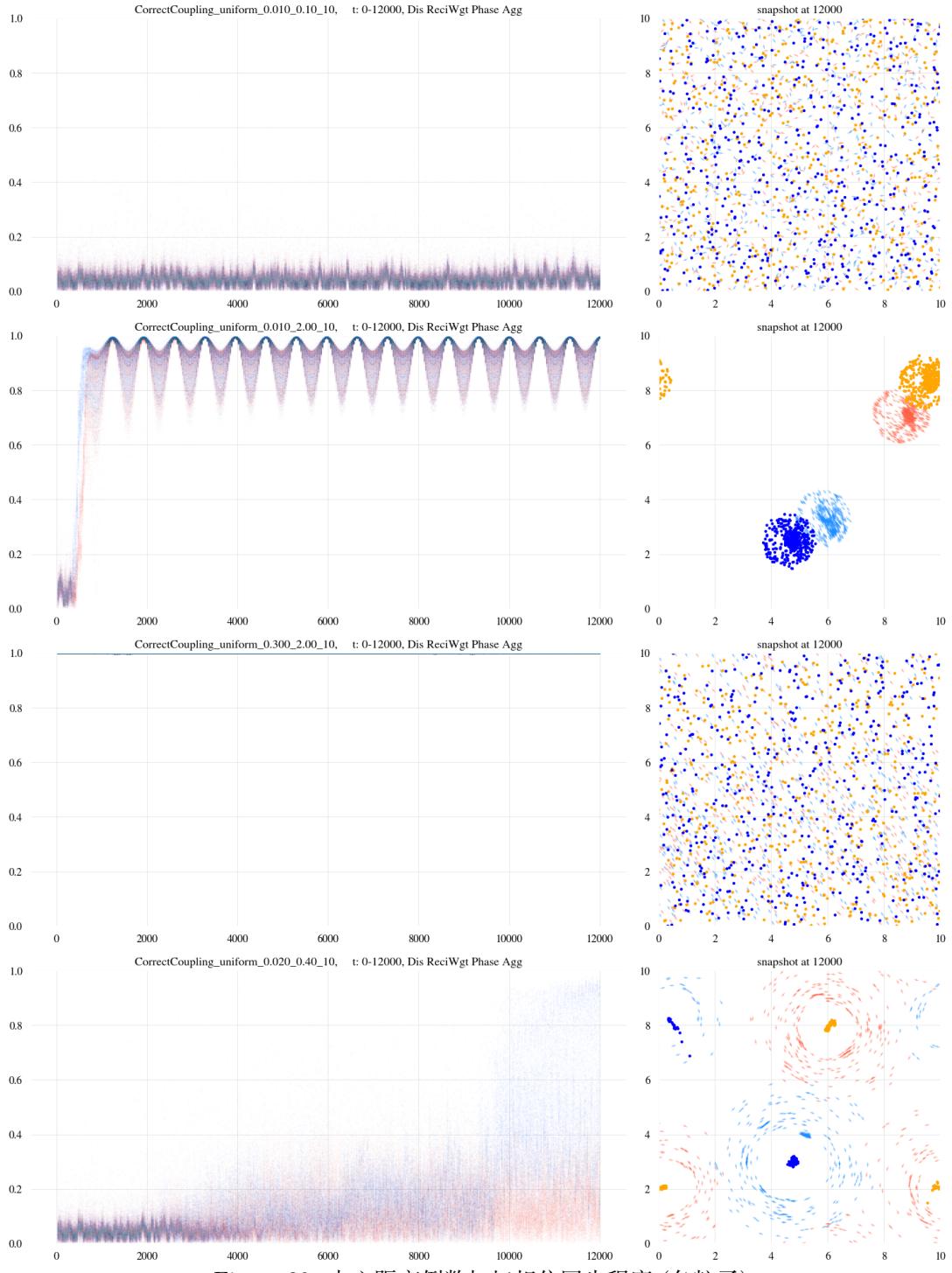


Figure 20: 中心距离倒数加权相位同步程度 (各粒子)

中心距离倒数加权相位同步程度 (全局/时序序参量)

$$S = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\sum_{j \neq i}^N e^{i\theta_j / \bar{d}_{ij}}}{\sum_{j \neq i}^N 1 / \bar{d}_{ij}} \right|$$

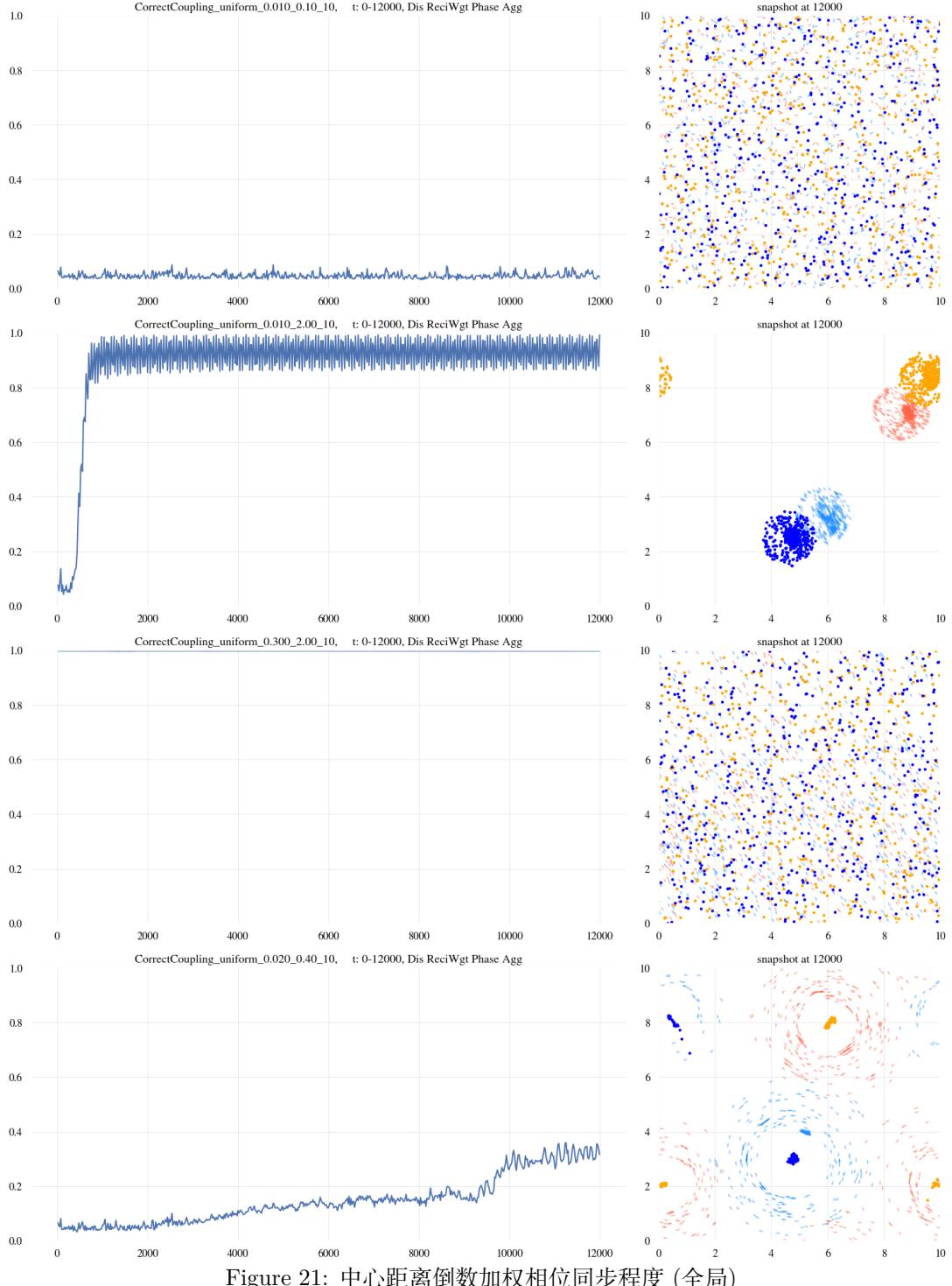


Figure 21: 中心距离倒数加权相位同步程度 (全局)

旋转中心空间聚集程度 1(时序序参量)

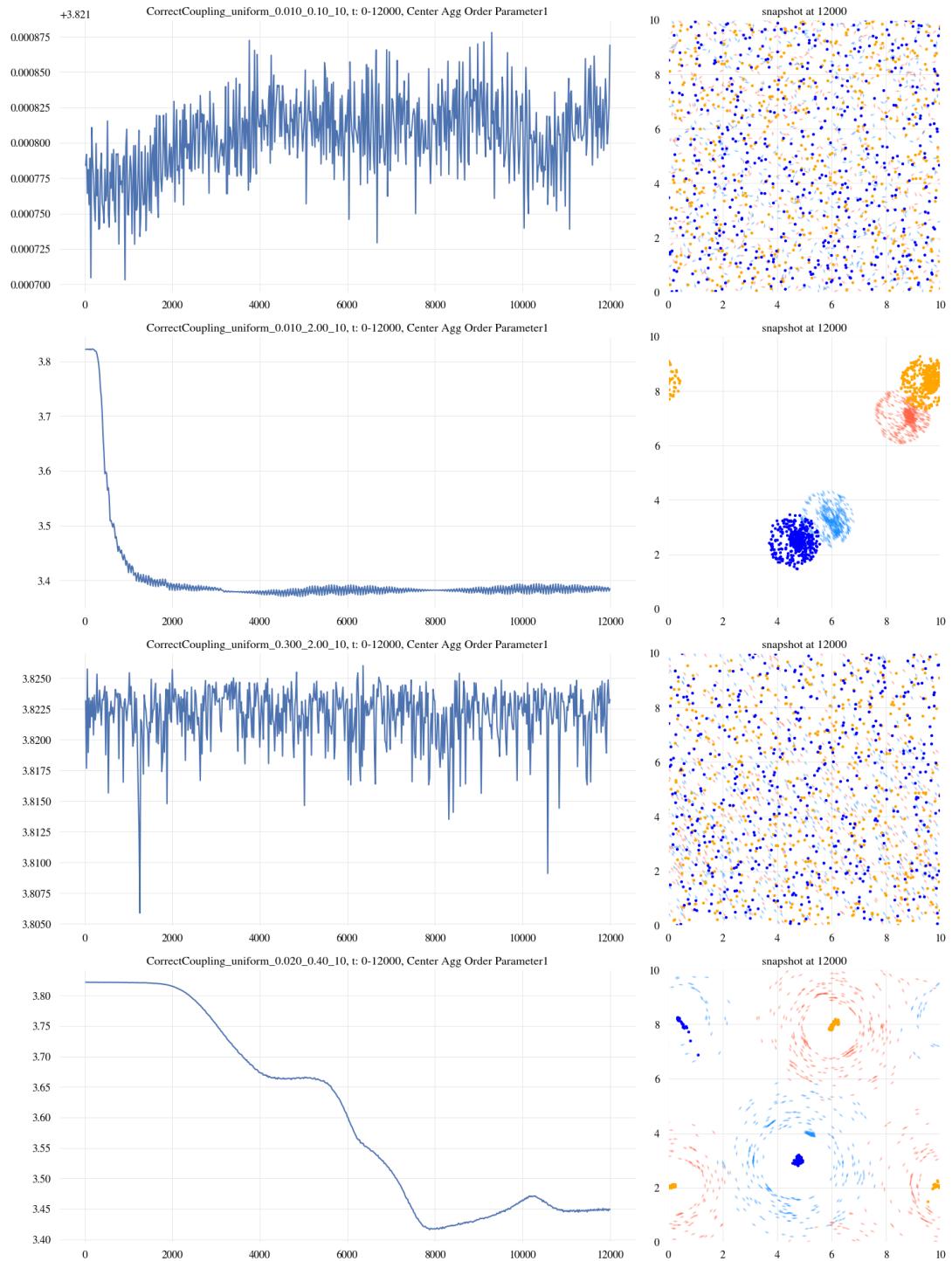


Figure 22: 旋转中心空间聚集程度 1

旋转中心空间聚集程度 2(时序序参量)

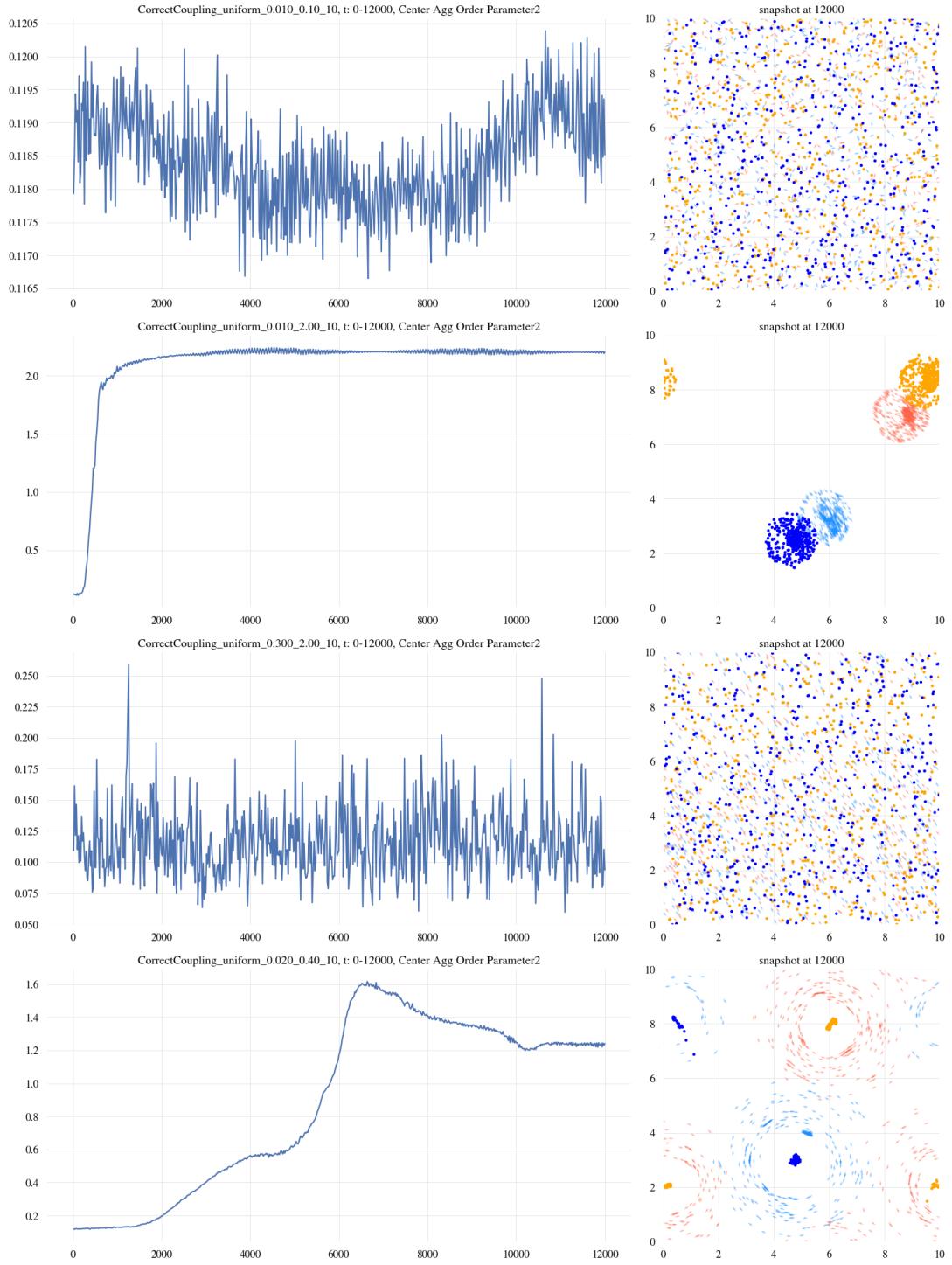


Figure 23: 旋转中心空间聚集程度 2

旋转中心平均距离分布 (时序参量)

将各粒子旋转中心与其余旋转中心的距离求平均，得到旋转中心平均距离分布，如下图所示：

$$\bar{D}_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \bar{d}_{ij}$$

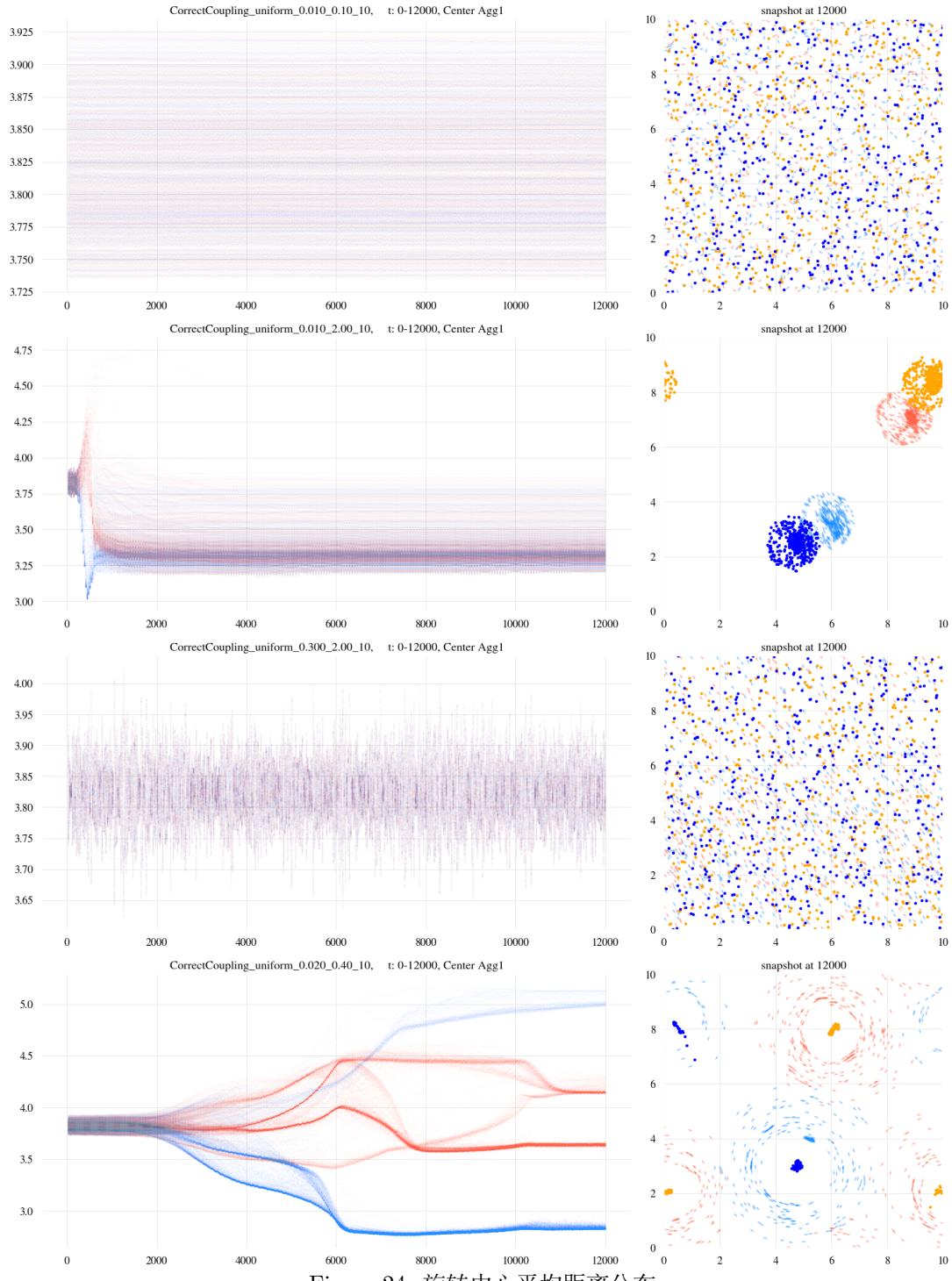


Figure 24: 旋转中心平均距离分布