

1 局部耦合中跨边界坐标的调整

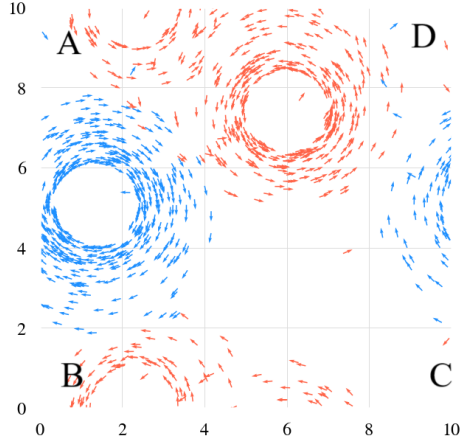


Figure 1: 跨边界坐标的调整

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

分析点

2.1 单个粒子的运动问题 (无相互作用)

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta x(t) = v \cos \theta \Delta t \quad \rightarrow \quad \dot{x} = v \cos \theta \\ \Delta y(t) = v \sin \theta \Delta t \quad \rightarrow \quad \dot{y} = v \sin \theta \\ \dot{\theta}_i = \omega_i \rightarrow \theta_i(t) = \omega_i t \\ v = \sqrt{\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2} = v(\text{constant}) \end{array} \right.$$

运动半径 = ?

$$\left\{ \begin{array}{l} x_i(t) = x_i(0) - \frac{v}{\omega_i} \sin \omega_i t \\ y_i(t) = y_i(0) - \frac{v}{\omega_i} \cos \omega_i t \end{array} \right.$$

$$\Rightarrow (x_i - x_i^0)^2 + (y_i - y_i^0)^2 = \left(\frac{v}{\omega_i} \right)^2$$

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 $\frac{v}{\omega_i}$

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.

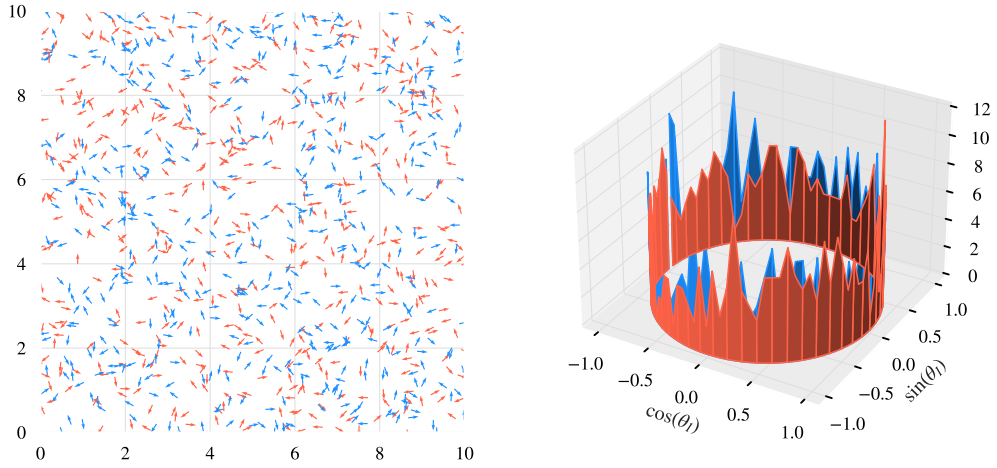


Figure 2: 混沌态 ($\lambda = 0.01, d_0 = 0.1, randomseed = 10$)

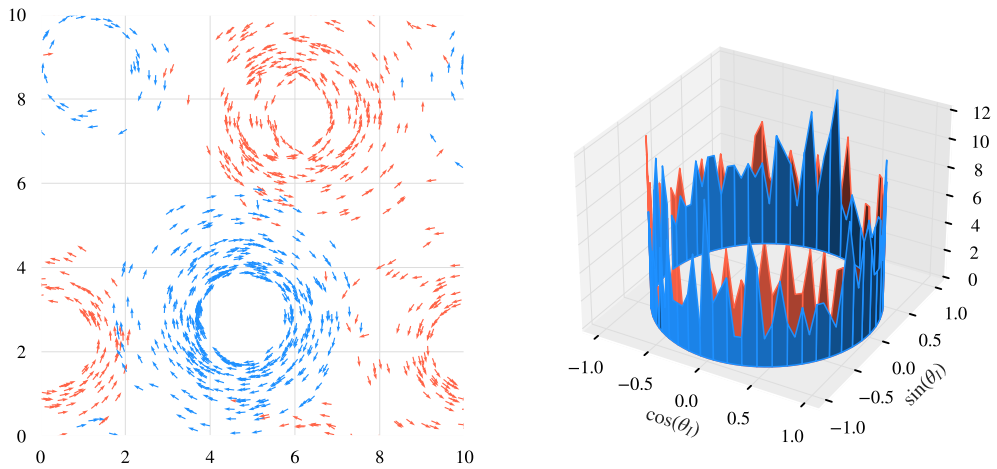


Figure 3: 环态 ($\lambda = 0.02, d_0 = 0.3, randomseed = 10$)

当粒子处于混沌态或环态时，相位单位圆的分布如图2和图3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。

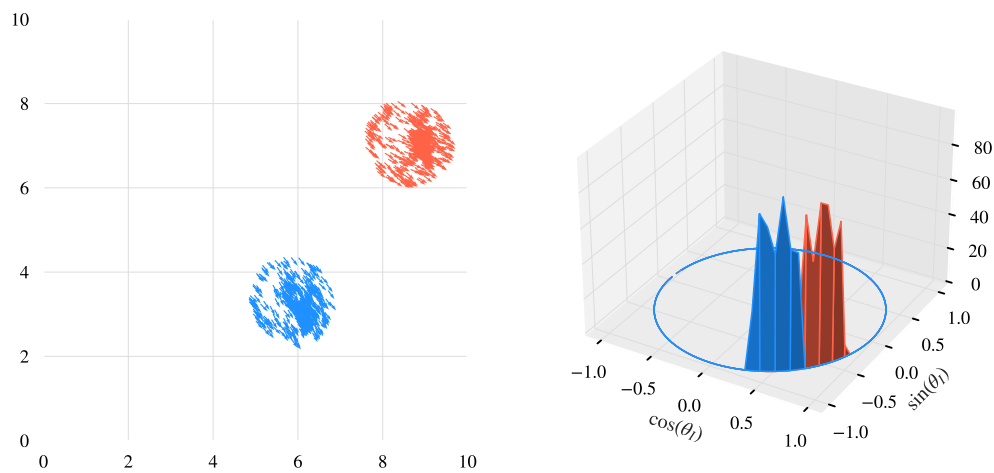


Figure 4: 集群态 ($\lambda = 0.01, d_0 = 2, randomseed = 10$)

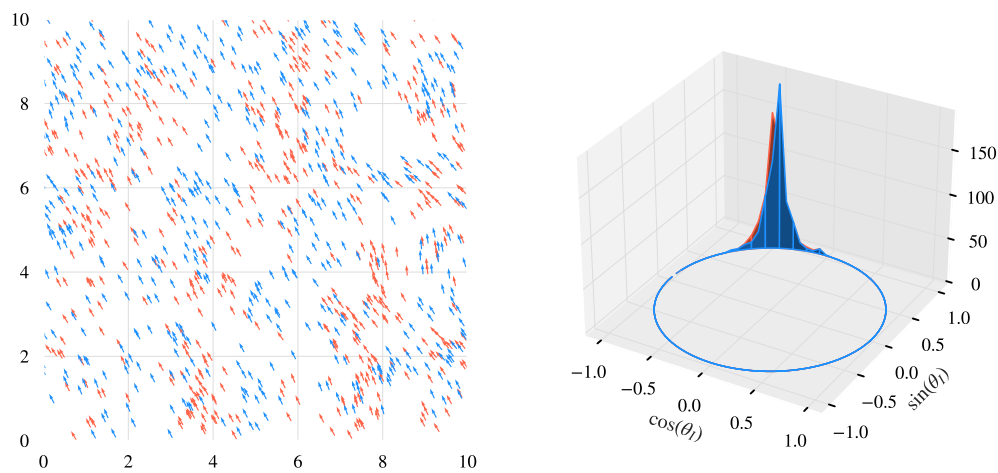


Figure 5: 快速取向一致 ($\lambda = 0.6, d_0 = 3, randomseed = 10$)

当粒子处于集群态或快速取向一致时，相位单位圆的分布如图4和图5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

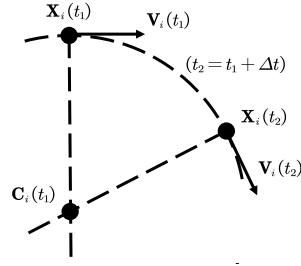


Figure 6: 旋转圆心示意图

如图 6 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7:

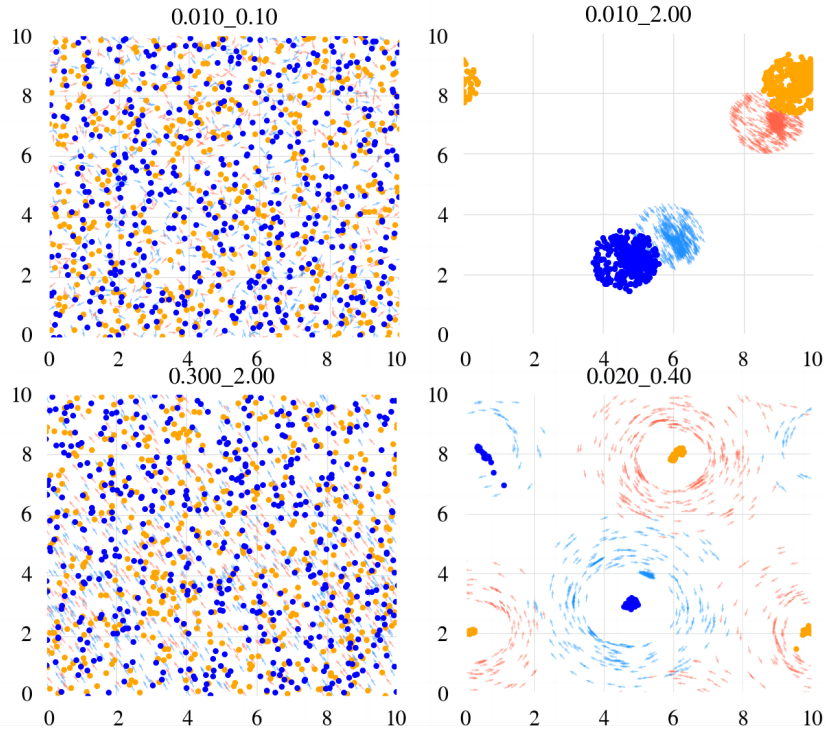


Figure 7: 旋转中心求解结果示例

上图中，带有箭头的半透明色点表示粒子，光滑实心色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
```

执行该算法后，可以得到如下图8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.

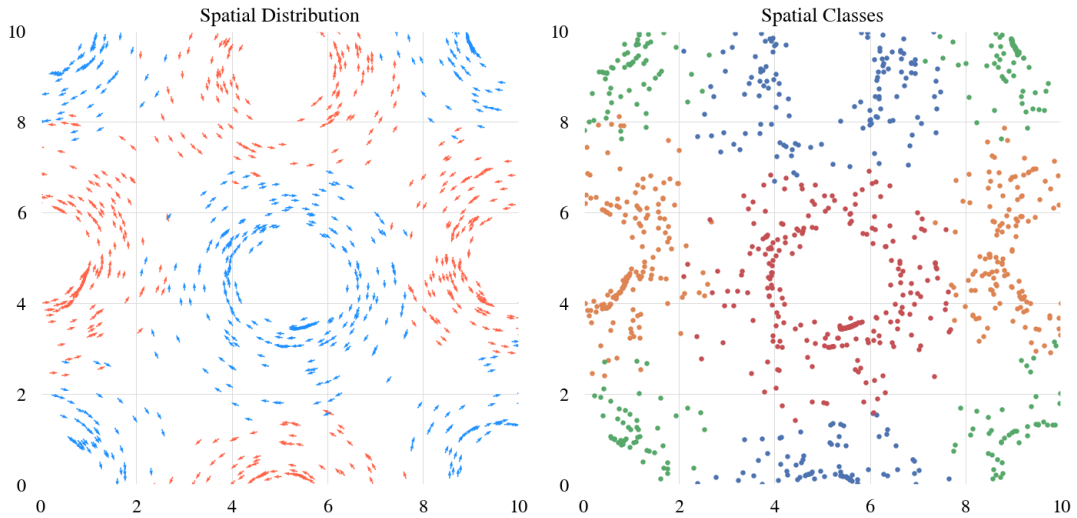


Figure 8: 聚类结果 ($d_{th} = 1, \lambda = 0.02, d_0 = 0.4, randomseed = 80$)

2.3.4 序参量的定义与计算

旋转中心邻域内的其余中心数（截面序参量）

$$N_{nearby} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^N [\bar{d}_{ij} < \bar{d}_{ij}^{th}] \right),$$

其中， \bar{d}_{ij}^{th} 为阈值，取 $\bar{d}_{ij}^{th} = 1$.

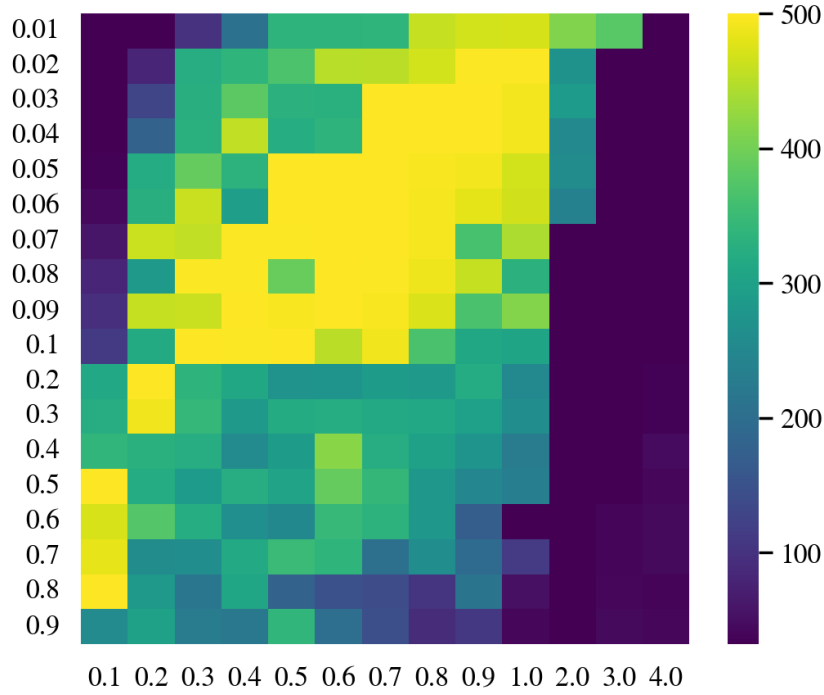


Figure 9: 旋转中心邻域内的其余中心数

观察图9，可以发现，该序参量可以较好地反映空间当中的聚集情况。左上角与右下角深色区域的粒子在空间上没有形成聚集，而中间部分的粒子在空间上形成了聚集。此外，集群态的序参量取值比环态的序参量取值小，这是因为集群态的旋转中心集中度较低，导致与原点距离的标准差更小。

粒子旋转中心坐标 (时序序参量)

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：

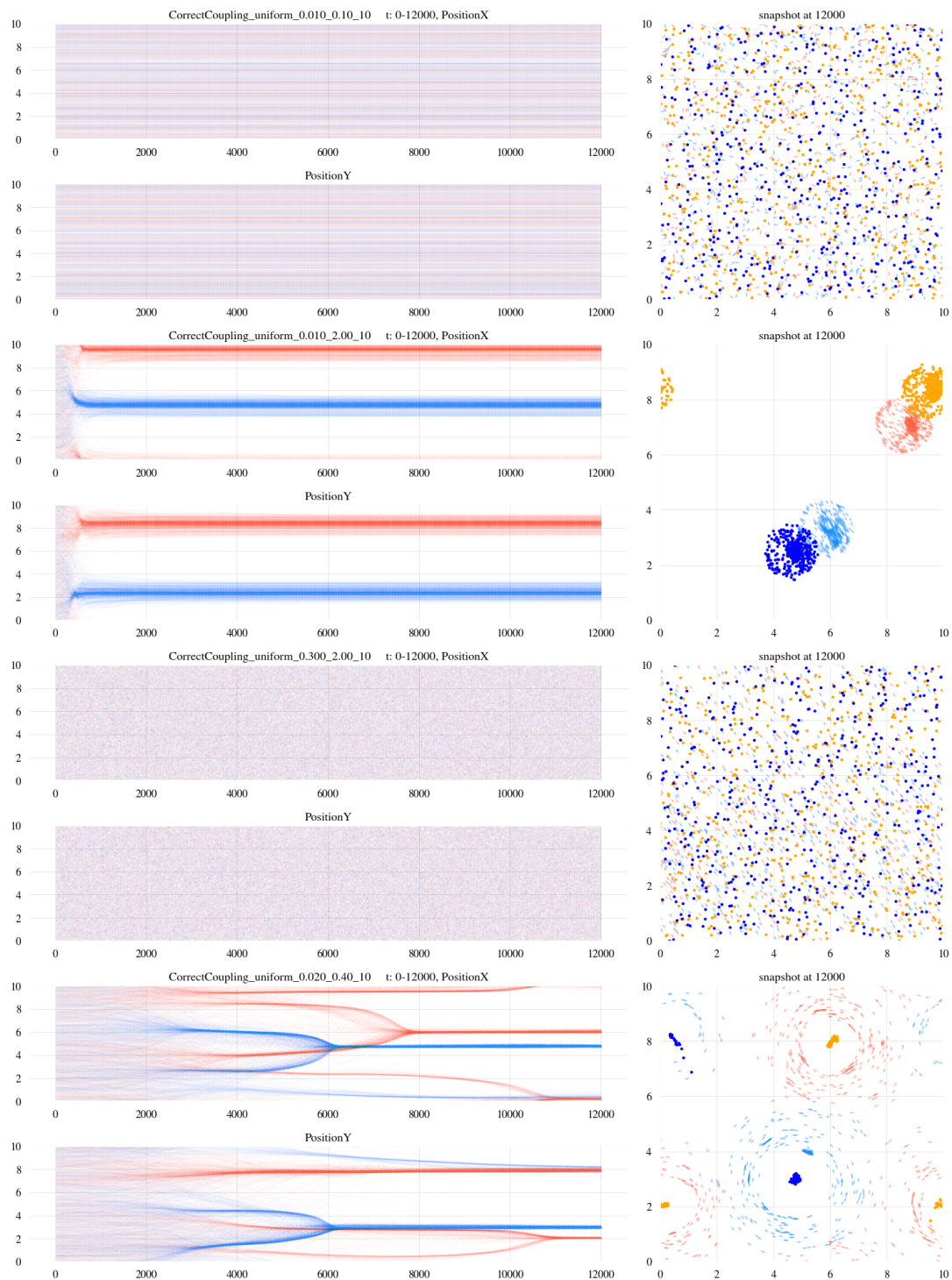


Figure 10: 旋转中心坐标

粒子旋转半径 (时序序参量)

聚类旋转半径 (时序序参量)

根据欧式聚类的结果，将所有粒子分为若干类，每一类的旋转半径为该类所有粒子的旋转半径的算数平均，即

$$\bar{R}_c = \frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} \bar{r}_i, (N_c \geq N_{th})$$

其中， N_c 为第 c 类的粒子数. 此外，为防止空间当中出现孤立的粒子，将粒子数小于某一阈值的类剔除，这里， N_{th} 为阈值，取 $N_{th} = 5$.

聚类中心坐标 (时序序参量)

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，即

$$\bar{x}_c = \frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} \bar{x}_i, \quad \bar{y}_c = \frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} \bar{y}_i, \quad (N_c \geq N_{th})$$