Казахский национальный университет им. аль-Фараби

УДК 51-7:533.9

На правах рукописи

МАШЕЕВА РАННА УЫТБАЕВНА

Компьютерное моделирование пылевой плазмы во внешнем магнитном поле

6D070500-Математическое и компьютерное моделирование

Диссертация на соискание ученой степени
доктора философии (PhD)

Отечественный научный консультант
доктор физико-математических наук,
профессор Джумагулова К.Н.

Зарубежный научный консультант
доктор философии (Ph.D), профессор
Золтан Донко

Республика Казахстан
Алматы, 2019

СОДЕРЖАНИЕ

НОРМАТИВНЫЕ ССЫЛКИ 3
ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ 4
ВВЕДЕНИЕ 5
1 СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ПРОБЛЕМЫ 11
2 МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И ЧИСЛЕННАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦ 18
2.1 Математическая модель пылевой плазмы 18
2.2 Алгоритм метода молекулярной и ланжевевновой динамики 41
2.3 Зависимость энергии взаимодействия пылевых частиц от времени 44
2.4 Анализ траекторий движения частиц в разных режимах 45
3 МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ 58
3.1 Парная функция распределения пылевых частиц 58
3.2 Автокорреляционные функции скоростей и колебания в системе 61
3.3. Кейгеновые и направленные корреляционные функции пылевых частиц 74
3.4 Коэффициент диффузии пылевых частиц 100
4 АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ КОМПЛЕКС КОМПЬЮТЕРНЫХ ПРОГРАММ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИССЛЕДОВАНИЯ СВОЙСТВ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ 108
ЗАКЛЮЧЕНИЕ 123
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ 125

НОРМАТИВНЫЕ ССЫЛКИ

В настоящей диссертационной работе использованы ссылки на следующие стандарты:

ГОСТ 7.1-84 Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Библиографическое описание документа. Общие требования и правила составления.

ГОСТ 7.9-95 (ИСО214-76) Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Реферат и аннотация. Общие требования.

ГОСТ 7.12-93 Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Библиографическая запись. Сокращение слов на русском языке описание документа. Общие требования и правила.

ГОСТ 7.32-2001 Межгосударственный стандарт. Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Отчет о научно-исследовательской работе. Структура и правила оформления.

ГОСТ 8.417-81 Государственная система обеспечения единства измерений. Единицы физических величин.

ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

ЛД – ланжевеновая динамика
МД – молекулярная динамика
УТС – управляемый термоядерный синтез
СВ – схема Верле
АФС – автокорреляционная функция скоростей
MSD – среднеквадратичное смещение частиц
QLCA – приближение квази-локализации зарядов
V – объем ячейки моделирования
S – площадь ячейки моделирования
N – число частиц в базовой ячейке моделирования
U – энергия системы
Φ_{ij} – парный потенциал взаимодействия
U – энергия системы
Q – заряд пылевых частиц
a – среднее расстояние между пылевыми частицами
n – концентрация реальной системы
e – элементарный заряд электрона
λ_D – радиус Дебая
k_B – постоянная Больцмана
T – температура
Z – зарядовое число
a_D – размер пылевых частиц
κ – безразмерный коэффициент экранировки
θ – безразмерный коэффициент трения
ε_0 – электрическая постоянная
Γ – безразмерный параметр связи
β – безразмерный параметр магнитного поля
ω_c - циклотронная частота
ω_p - частота колебания пылевых частиц
$\vec{B}$ – индукция магнитного поля
X_i – безразмерная координата
V_i –безразмерная скорость
τ – безразмерное время

ВВЕДЕНИЕ

Общая характеристика работы

В настоящей диссертационной работе выполнено компьютерное моделирование ансамбля заряженных частиц на основе методов молекулярной и ланжевеновой динамики с учетом влияния внешнего однородного магнитного поля. Для решения этой задачи были построены математические модели пылевой плазмы и процессов в ней, получена численная схема интегрирования уравнений движения, учитывающая влияние внешнего магнитного поля и силы трения, где шаг по времени не зависит от величины магнитного поля.

Актуальность темы

В диссертационной работе проводится компьютерное моделирование на основе методов молекулярной (МД) и ланжевеновой динамики (ЛД). Метод МД является одним из мощных вычислительных методов, основан на численном решении классических уравнений движения частиц в некотором выделенном объеме среды, эффективно применяется для моделирования физических и биологических систем и позволяет рассматривать временную эволюцию системы, состоящую из большого количества частиц. Данный метод применим, если длина волны де Бройля частицы много меньше, чем межчастичное расстояние.

Последние десятилетия использование методов компьютерного моделирования для исследования поведения и свойств ансамбля заряженных частиц представляет большой интерес в научном мире. Особое внимание уделяется случаю, когда в системе имеется сильная связь [1-4], т.е. когда кулоновское взаимодействие частиц превышает их кинетическую энергию. Пылевая плазма [5-10] представляет собой примечательный вид много частичной сильно связанной (неидеальной) системы, которая часто встречается в астрофизических средах [11-14], а также может быть реализована в лабораторных условиях [15-18]. Пылинками называются частицы конденсированного вещества микронных размеров, образующиеся в плазменных реакторах в результате распыления материала стенок, химических реакций и процессов агломерации, или попадания в плазму извне. Пылинки, имеющие относительно большую поверхностную площадь, попадая в плазму, заряжаются потоками плазменных электронов и ионов до очень больших значений электрического заряда. В земных условиях заряд чаще всего отрицательный из-за большей подвижности электронов. Большой заряд обуславливает сильное электростатическое взаимодействие пылевых частиц между собой и это сильно отражается на свойствах пылевой плазмы, в некоторых случаях приводя к появлению упорядоченных структур, так называемого плазменного кристалла [19-23]. Пылевая плазма, образующаяся, в частности, в пристеночной области установок управляемого термоядерного синтеза (УТС) [24-26] с магнитным удержанием, представляет собой сильно связанную магнитоактивную плазму. Пристеночная пылевая плазма серьезно влияет на протекание процессов в установках УТС. В частности коэффициент

диффузии связан с удержанием плазмы в магнитных ловушках, с потерями энергии медленных ионов в плотной плазме, вследствие чего представляет особенный интерес и для установок инерциального термоядерного синтеза, а также установок с нагревом посредством ионных пучков. Также пылевая плазма является полезным инструментом для изучения многих физических процессов, протекающих в многочастичной системе.

Широко обсуждаются перспективы применения пылевой плазмы и плазменного кристалла в нанотехнологиях [27-30], компьютерных и других технологиях. Таким образом, пыль и буферная плазма образуют собой весьма интересный объект - пылевую (комплексную) плазму, обладающую уникальными свойствами и поведением, чем и обусловлен выбор такой системы для компьютерного моделирования.

Обзор научной литературы и анализ развития моделей и методов в области математического моделирования показывает, что в последние десятилетия проделан значительный объем работ по исследованию свойств многочастичных систем с помощью методов компьютерного моделирования. Однако, большинство работ не учитывает диссипацию в системе, связанную с наличием фоновой плазмы, либо выполнены для незамагниченной плазмы. В задачи настоящей диссертационной работы входит разработка математических моделей для описания процессов в пылевой магнитоактивной плазме посредством включения силы Лоренца и диссипативного члена в уравнения движения пылинок, создание пакета программ для исследования влияния диссипации и магнитного поля на свойства сильно связанной магнитоактивной плазмы.

Связь темы диссертации с планами научных работ. Диссертационная работа выполнена в соответствии с планами фундаментальной научно-исследовательской работы (НИР) КН МОН РК «Грантовое финансирование научных исследовании» по темам: «Элементарные процессы и оптические свойства плазмы сложного состава инерциального термоядерного синтеза» (2015-2017гг., № гос.регистрации 0115РК01037, шифр 3102/ГФ4), «Компьютерное моделирование свойств магнитоактивной плазмы сложного состава» (2015-2017 гг., № гос.регистрации 0115РК01042, шифр 3087/ГФ4), «Исследование пыле-звуковых солитонов в магнитоактивной плазме сложного состава» (2018-2020 гг., № гос.регистрации 0118РК00609, шифр AP05132665/ГФ), Программы целевого финансирования «Исследование фундаментальных проблем физики плазмы и плазмоподобных сред» (2018-2020 гг., шифр BR05236730/ГФ), «Разработка и исследование математических моделей, численных методов и комплекса программ комбинаторной оптимизации (на примере задач прямоугольного раскроя)» (2015-2017 гг.), «Исследование и разработка моделей и методики представления и организации знаний с применением онтологического подхода и инструментальных средств Smart-технологии, при реализации образовательных программ и процессов» (2018-2020 гг., № гос.регистрации AP05134973), «Разработка информационных технологий и систем для стимулирования устойчивого развития личности как

одна из основ развития цифрового Казахстана» (2018-2020 гг., шифр BR05236839/ГФ);

Цель работы

Целью данной диссертационной работы является разработка компьютерных программ для моделирования процессов в пылевой магнитоактивной плазме методом молекулярной и ланжевеновой динамики, учитывающих диссипацию (силы трения), использование результатов компьютерного моделирования для исследования и анализа динамических, структурных и транспортных свойств пылевой плазмы.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи:**

- построить математическую модель для компьютерного моделирования магнитоактивной пылевой плазмы
- выполнить компьютерное моделирование пылевой магнитоактивной плазмы, позволяющее корректно проводить исследование свойств пылевой плазмы.
- создать математическую модель для направленных корреляционных функций, адекватно описывающих процессы локализации частиц вдоль и поперек направлению внешнего магнитного поля.
- построить автоматизированный комплекс компьютерных программ для моделирования и исследования свойств пылевой плазмы.

Предметом исследования являются математические модели и численные схемы, необходимые для компьютерного моделирования физических свойств пылевой плазмы, а также результаты самого моделирования.

Методы исследования.

Математическая модель основывается на использовании стандартного метода молекулярной динамики и ланжвевеновой динамики с учетом диссипации (силы трения), а также специально подобранных уравнений для обработки данных компьютерного эксперимента. Для интегрирования уравнений движения частиц был использован разностный алгоритм Верле, основанный на разложении скорости и координат частиц в ряд Тейлора. Построенная математическая модель включает в себя также уравнения для кейгеновых корреляционных функций, впервые записанных в диссертации отдельно для компонент параллельных и перпендикулярных внешнему магнитному полю. Коэффициент диффузии исследован на основе метода среднеквадратичного смещения частиц по формуле Эйнштейна.

Новизна работы. Научная новизна и оригинальность диссертационной работы заключаются в том, что в ней впервые:

- получена численная схема интегрирования уравнений движения, учитывающая влияние внешнего магнитного поля и силы трения, где шаг по времени не зависит от величины магнитного поля.
- выполнено компьютерное моделирование, позволяющее корректно проводить исследование свойств пылевой плазмы.

- построена математическая модель для направленных корреляционных функций, адекватно описывающих процессы локализации частиц вдоль и поперек направлению внешнего магнитного поля.
- построен автоматизированный комплекс компьютерных программ для моделирования и исследования свойств пылевой плазмы.

Практическая значимость исследования. Компьютерное моделирование является мощным средством изучения свойств и поведения многочастичных систем, особенно в том случае, когда использование других теоретических подходов затруднительно. Сильно неидеальная плазма является как раз такой системой, в которой из-за отсутствия малого параметра нельзя использовать методы, основанные на разложении по малому параметру. Так же большим преимуществом компьютерного моделирования является возможность исследования свойств системы в условиях, близких к реальному эксперименту, но не требующих столь больших экономических затрат. Обычная молекулярная динамика и ее расширенный вариант, ланжевеновая динамика, применялись для систем без учета и с учетом диссипации, соответственно. Выбор методов обусловлен тем, что альтернативный метод компьютерного моделирования, метод Монте-Карло, обычно не используется для исследования динамических процессов, а находит применение в основном для изучения структурных и термодинамических свойств многочастичных систем.

Практическая значимость исследований продиктована, в частности жизненной необходимостью развития энергетики, использующей практически неограниченный ресурс, безопасный в эксплуатации и достаточно чистый в экологическом плане. В связи с этим в последние десятилетия развиваются крупные проекты (к примеру, ITER, NIF и др.), связанные с развитием термоядерной энергетики. В ходе работ по созданию термоядерных установок с магнитным удержанием было замечено, что в пристеночной области разрядных камер образуется большое количество пыли, существенным образом влияющей на процессы, протекающие в центральной области. Таким образом, построение математических моделей для моделирования и исследования динамических, транспортных и других свойств пылевой магнитоактивной плазмы имеет большое значение, как в национальном, так и международном масштабе.

Положения, выносимые на защиту:

- Построенная математическая модель для компьютерного моделирования магнитоактивной пылевой плазмы позволяет корректно учитывать влияние внешнего магнитного поля и силы трения на динамику пылевых частиц в буферной плазме.
- На основе компьютерного моделирования магнитоактивной пылевой плазмы были получены новые данные по ее структурным (парная корреляционная функция) и динамическим (автокорреляционная функция скоростей и диффузия) свойствам.
- Построенная математическая модель для направленных корреляционных функций адекватно описывает процессы локализации частиц вдоль и поперек направлению внешнего магнитного поля.

•Создан автоматизированный комплекс компьютерных программ для моделирования и исследования свойств пылевой плазмы.

Личный вклад автора заключается в том, что весь объем диссертационной работы, решение задач выполнены автором самостоятельно. Постановка задач, выбор метода исследования и обсуждение результатов проводились совместно с научными руководителями.

Достоверность и обоснованность полученных результатов подтверждаются публикациями в журналах дальнего зарубежья с высоким импакт-фактором и в изданиях, рекомендованных Комитетом по контролю в сфере образования и науки МОН РК, и в трудах международных научных конференций ближнего и дальнего зарубежья.

Апробация диссертационной работы. Результаты, полученные в диссертационной работе, докладывались и обсуждались:

–на Международной конференции студентов и молодых ученых «Мир науки» (2013, 2014, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан);

–на 51-й Международной конференции «Студент и научно-технический прогресс» (2013, Новосибирск, Россия)

–на Международной научной конференции, посвященной 75-летию академика НАН РК Абильдина Мейрхана Мубараковича «Актуальные проблемы современной физики» (2013, Алматы, Казахстан);

–на Международной конференции «The International Conference on Phenomena in Ionized Gases (IIGPIG)» (2015, Iasi, Romania);

–на Международной конференции «International Conference on the Physics of Dusty Plasmas (ICPDP - 7)» (2014, New Delhi, India)

–на Международной конференции «15th International Conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas (PNP)» (2015, Almaty, Kazakhstan);

–на Международном симпозиуме «21st International Symposium of Heavy-Ion Inertial Fusion (HIF)» (2016, Astana, Kazakhstan);

–на Международной конференции «XXII Europhysics Conference on Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases (ESCAMPIG)» (2016, Bratislava, Slovakia);

–на Международной конференции «International Conference on Strongly Coupled Coulomb Systems (SCCS)» (2017, Kiel, Germany);

–на Международной конференции «The International Conference on Research and Application of Plasmas (PLASMA)» (2017, Warsaw, Poland);

–на Международной конференции «42nd European Physical Society Conference on Plasma Physics (EPS)» (2018, Prague, Czech Republic);

–на Международной конференции «XV Russian conference (with international participation) on thermophysical properties of substances (RCTP-15)» (2018, Moscow, Russia);

–на Международной научной конференции «Современные достижения физики и фундаментальное физическое образование» (2016, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан);

–на Международной конференции студентов и молодых ученых «Фараби

Әлемі» (2015, 2016, 2017, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан);

–на Международной конференции «XXIX IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2017)» (2017, Paris, France);

–на Международной конференции «СДФФФО-9» (2016, Алматы, Казахстан);

–на 10-ой Международной научной конференции «Хаос и структуры в нелинейных системах. Теория и эксперимент» посвященная 75-летнему юбилею профессора З.Ж Жанабаева (2017, Алматы, Казахстан);

– на научных семинарах кафедры физики плазмы и компьютерной физики, кафедры математического и компьютерного моделирования КазНУ им. аль-Фараби.

–на научных семинарах института информационных и вычислительных технологий КН МОН РК.

Публикации. По материалам диссертационной работы опубликовано 42 печатных работ: 11 в журналах из Перечня ККСОН МОН РК для опубликования основных результатов диссертации на соискание ученой степени PhD и 8 статьи в журналах дальнего зарубежья с импакт-фактором, входящих в международный информационный ресурс Web of Knowledge (Thomson Reuters, США) и Scopus (Elsevier, Нидерланды); 21 работа в материалах Международных научных конференций и 2 авторских свидетельств.

Объем и структура диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырех разделов, заключения и списка использованных источников из 154 наименований, содержит 135 страниц основного компьютерного текста, включая 73 рисунков и 1 таблицы.

Во введении дано описание проблемы, краткий обзор предметной области. Обоснована актуальность диссертационной работы и сформулированы постановка задачи и этапы решения задачи.

Первый раздел посвящен современному состоянию методов компьютерного и математического моделирования много частичных систем.

Во втором разделе рассматривается метод молекулярной динамики и численная схема для решения уравнений движения частиц с учетом влияния сил, зависящих от скорости частиц. Дано краткое описание моделируемой системы и приведена зависимость энергии взаимодействия пылевых частиц от времени и анализ траекторий движения частиц.

В третьем разделе представлены математические модели для вычисления характеристик пылевой плазмы на основе данных компьютерного моделирования, результаты вычислений и их анализ.

Последний раздел посвящен описанию автоматизированного комплекса компьютерных программ для моделирования и исследования свойств пылевой плазмы во внешнем магнитном поле.

В заключении сформулированы полученные в работе основные результаты и их значение для области знания, к которой они относятся, а также для области их практического применения.

1 СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ПРОБЛЕМЫ

Компьютерное моделирование является одним из альтернативных методов исследования системы и сводится к построению модели объекта, которая служит заместителем оригинала и позволяет вычислять интересующие нас свойства и характеристики системы. Модель представляет собой упрощенное восприятие реальной системы с некоторыми ограничениями, которые необходимы, так как реальные процессы, протекающие в природе, настолько сложны и связаны с большим количеством окружающих факторов, что построение модели, которая учитывает все эти факторы, является невозможной задачей. Но, несмотря на это, метод компьютерного моделирования — это универсальный метод и, что немало важно, во многом является дополнением к реальным экспериментам.

Использование методов компьютерного моделирования для исследования многочастичных систем на сегодняшний день является интересной отраслью в науке. Одной из наиболее интересных систем является сильно связанная плазма [31-35]. Особенностью такой системы является то, что потенциальная энергия взаимодействия намного превышает тепловую энергию. Среди плазменных систем выделяется пылевая плазма [36-42], которая представляет собой ионизованный газ с находящимися в нем заряженными частицами вещества микронных размеров (пыль). Пылевые частицы заряжаются (до порядка $10^3 - 10^5$ заряда электрона) в результате поглощения потоков электронов и ионов окружающей плазмы. Вследствие высокой подвижности электронов пылинки в большинстве случаев заряжаются отрицательно, но в случаях, когда интенсивны процессы термоэмиссии или фотоэмиссии электронов с поверхности пылинок, заряд может быть и положительным. Диссипация кинетической энергии частиц происходит большей частью из-за столкновений с нейтралами фоновой (буферной) плазмы. Совместное действие сил межчастичного взаимодействия с процессами диссипации может приводить к формированию упорядоченных плазменно-пылевых структур [43-46], подобных жидкости или твердому телу. Пылевая плазма встречается в астрофизических средах [47-49], также может быть реализована в лабораторных условиях [50-53]. В лабораторных установках пылевые частицы могут расти в реактивной плазменной среде, либо преднамеренно вводиться в плазму. Может быть реализована как трехмерная, так и двумерная конфигурация частиц. В условиях микрогравитации [54] предпочтительнее трехмерные структуры, в то время как в присутствии силы тяжести регулярно образуются конфигурации меньшей размерности.

Основные трудности при экспериментальном изучении свойств плазмы сложного состава связаны с отсутствием адекватных теоретических моделей для некоторых явлений и многопараметричностью таких систем. В таких ситуациях проблема частично разрешается использованием современных методов компьютерного моделирования неидеальных физических систем,

таких как: Монте-Карло [55-60], молекулярная динамика [61-66], броуновская (ланжевеновая) динамика [67-75], метод частиц в ячейках [76-81] и т.д.

Моделирование сильно связанной (неидеальной) пылевой плазмы во внешнем магнитном поле является важной задачей как физики, так и прикладной математики. Исследования пылевой плазмы проводятся также экспериментальными методами [82-85], как для двухмерных (2D), так и для трехмерных систем (3D). В экспериментальных стендах на основе высокочастотного и тлеющего разрядов по исследованию свойств пылевой плазмы во внешнем магнитном поле удобно проводить наблюдение с помощью видеозаписи за поведением пылевых частиц в одном, выделенном специальной подсветкой, двумерном слое частиц, перпендикулярном направлению силовых линий магнитного поля. При этом 2D системы порой проявляют ряд особенностей по сравнению с 3D системами [86-90]. Большинство работ сообщает об отклонении измеренных значений коэффициента диффузии от нормальной диффузии, т.е. диффузии, получаемой из среднеквадратичного смещения по формуле Эйнштейна [90,91]. При этом сообщается как об увеличении диффузии, так и об ее уменьшении по сравнению с нормальной. Так, например, в работе [86] при исследовании диффузии частиц двумерной Юкава системы без учета внешнего магнитного поля с помощью метода ланжевеновой динамики авторы выявили аномальное поведение коэффициента диффузии.

Такая же работа была проделана авторами работы [92]. В отличие от предыдущей работы здесь кроме силы трения, обусловленной наличием буферной плазмы, учитывается влияние внешнего магнитного поля на свойства двумерной Юкава системы, что представляет особый интерес для данной диссертационной работы. В этой работе в определенных диапазонах времени в зависимости от параметра магнитного поля также получено аномальное поведение коэффициента диффузии, в частности супердиффузия. Возникновение таких расхождений не известно и само существование аномалий до сих пор является спорным вопросом. Тем не менее, исследование данной проблемы представляет собой большой интерес в различных областях физики и биологии [93], где методы моделирования обеспечивают большой вклад в количественную оценку переноса частиц. Некоторые авторы предполагают, что в реальном термодинамическом пределе в изотропных системах с короткодействующими межчастичными взаимодействиями диффузия становится нормальной, а мгновенное значение показателя диффузии асимптотически приближается к единице [86]. Однако для систем конечных размеров и в коротких временных масштабах, система может проявлять аномальный перенос, который может быть даже усилен с учетом влияния внешнего магнитного поля [94-96].

Метод молекулярной динамики был использован в работе [83,97] для детального исследования влияния магнитного поля на коллективные возбуждения классической однокомпонентной плазмы (с нейтрализующим однородным фоном).

Влияние магнитного поля на двумерную однокомпонентную и бинарную Юкавовские системы было изучено в работе [98] с помощью метода компьютерного моделирования молекулярной динамикой. Транспортные свойства, в частности, диффузия частиц трехмерной сильно связанной однокомпонентной плазмы вдоль и поперек магнитного поля в широком диапазоне изменения параметров системы были исследованы в работе [95]. Показано, что, как и в слабо связанной плазме, коэффициент диффузии перпендикулярно полю проявляет бомовское поведение 1/B в пределе сильного магнитного поля, но его общий масштаб существенно отличается. Коэффициент диффузии параллельно полю сильно зависит от поля, и также приближается к 1/B, что представляет собой разительный контраст с более ранними прогнозами.

Эксперименты также показали очень интересные и неожиданные эффекты, например, вращение пылевых структур в газоразрядной плазме и последующее изменение направления вращения с усилением внешнего магнитного поля.

Теоретические и численные исследования показали формирование магнетоплазмонов и их высших гармоник в сильно связанных Кулоновской и Юкавовской системах [82]. Эти теоретические предсказания были подтверждены в работах [92, 93] по экспериментальной реализации вращающейся пылевой плазмы. В данных работах метод исследования влияния магнитного поля основан на эквивалентности магнитной силы Лоренца и силы инерции Кориолиса, действующей на движущиеся объекты, когда они рассматриваются во вращающейся системе отсчета. Отметим, что в намагниченной сильно связанной плазме многие эффекты качественно отличаются от наблюдаемых и хорошо известных эффектов в слабо связанной плазме, из-за влияния магнитного поля и сильной связи одновременно.

В работе [83] представлены первые исследования спектра коллективных колебаний сильно связанной одно-компонентной плазмы в сильном магнитном поле. Спектр содержит шесть основных мод, которые, как было установлено, хорошо согласуются с результатами приближения квазилокализованного заряда. При высоких частотах наблюдаются дополнительные моды колебаний, которые включают колебания типа Бернштейна и их поперечные составляющие, которые имеют значение для высокочастотных оптических и транспортных свойств плазмы. В работах [99, 82] было показано, что при сильной связи в системе доминирующий пик продольного спектра колебании принимает вид:

$$\omega_1^2 = \omega_c^2 + 2\omega_E^2 = \beta^2\omega_p^2 + 2\omega_E^2, \qquad (1.1)$$

где ω_E - частота Эйнштейна, которая определяется как частота колебания пробной частицы в среде других неподвижных частиц, ω_c - циклотронная частота, ω_p - плазменная частота системы. Соотношение, которое обсуждалось выше, справедливо только при больших связях. В пределе малых корреляции

(слабо связанный предел плазмы $\Gamma \to 0$) частота результирующей гибридной моды в намагниченной плазме (направление распространения перпендикулярно направлению магнитного поля) как известно, превращается в значения приближения случайных фаз:

$$\omega_2^2 = \omega_c^2 + \omega_p^2 = \omega_p^2(\beta^2 + 1). \qquad (1.2)$$

где β -отношение циклотронной и плазменной частот.

В работе [84] изучается дисперсионное соотношение в двумерном сильно связанном плазменном кристалле с помощью теоретического анализа и моделирования молекулярной динамикой с учетом постоянного магнитного поля, параллельного нормали кристалла. Выражение для дисперсионного соотношения ясно показывает, что высокочастотная и низкочастотная ветви существуют как результат сочетания продольной и поперечной мод вследствие силы Лоренца, действующей на пылевые частицы. Высокочастотная и низкочастотная ветви оказались принадлежащими волнам правой и левой поляризованности, соответственно.

Влияние постоянного магнитного поля на распространение колебаний решетки пылевой структуры в двумерном шестиугольном кристалле сильно связанной пылевой плазмы рассматривалось также в работе [85], но в этой работе поляризация волновых мод пылевой решетки находилась для разных магнитных полей и для их разных направлений. Выражение для дисперсионного соотношения опять ясно показывает, что высоко- и низкочастотные колебания решетки пыли существуют в результате связи между продольными и поперечными модами пылевой решетки. Было обнаружено, что во внешнем магнитном поле скорость затухания высокочастотных (низкочастотных волн) увеличивается (уменьшается). Для отдельных значений волнового числа и направления распространения волн, мнимая часть низкочастотной моды равна нулю, а мнимая часть высокочастотной достигает максимального значения. Исследование показало, что скорости затухания зависят от направления внешнего магнитного поля.

В пылевой плазме легко добиться кристаллизации, что происходит за счет больших зарядов пылевых частиц. Кристаллическое состояние, характеризуется полной локализацией частиц. Однако локализация заряженных частиц уже проявляется в сильно связанной жидкой фазе. Частицы проводят значительные промежутки времени в локальных минимумах потенциальной поверхности, которая развивается в таких системах. Однако время локализации частиц ограничено изменением потенциальной поверхности за счет диффузии частиц.

Интересным и эффективным теоретическим подходом является приближение квази-локализации зарядов (QLCA), которое является очень полезным инструментом в теоретических исследованиях свойств сильно связанных Кулоновских и Юкавовских систем [100, 101]. Для того, чтобы применить QLCA для вычислений предполагается, что время, за которое

частицы находятся в локальных потенциальных минимумах, длится несколько колебательных циклов.

Локализация частиц исследуется на основе так называемых кейгеновых автокорреляционных функций. Этот относительно новый термин от английского слова «Cage», означающего “клетка, садок”, впервые был введен Эраном Рабани [102], и получил развитие в связи с прямой корреляцией с процессом диффузии в многочастичных системах. Рабани первым построил математическую модель для вычисления кейгеновой корреляционной функции системы частиц, взаимодействующих с помощью потенциала Леннарда - Джонса. Суть корреляционного метода Рабани заключается в отслеживании изменения окружения каждой частицы Графическое представление идеи вычисления кейгеновой корреляционной функции представлено на рисунке 1.1. Окружение частицы лучше всего описывается списком других частиц, составляющих первую координатную оболочку. По истечении времени вследствии диффузии частица оставляет свое первоначальное окружение и выходит за пределы радиуса обрезания (радиус клетки) r_{cage} и в следующий момент времени частица будет находиться в окружении других частиц. И в какой то момент времени первоначальное окружение частицы полностью поменяется. Если было бы возможно нарисовать идентификационные числа на каждую частицу и отследить список окружающих частиц, выход частиц, тогда существенное изменение списка частиц был бы очевиден.

Таким образом, кейгеновая автокорреляционная функция использует обобщенный список соседей для отслеживания окружения каждой частицы. Если список соседей каждой частицы в момент времени t идентичен списку соседей в момент времени 0, кейгеновая корреляционная функция имеет значение 1 для данной частицы. Если любой из первоначальных соседей частицы вышел из данного радиуса, то кейгеновая корреляционная функция уменьшается. Окружение частицы может также меняться за счет колебательного движения, но в течение времени первоначальные частицы могут опять возвращаться в свое окружение, поэтому только те события, которые приводят к необратимым изменениям, заставят частицы клетки декоррелировать в течение долгого периода времени.

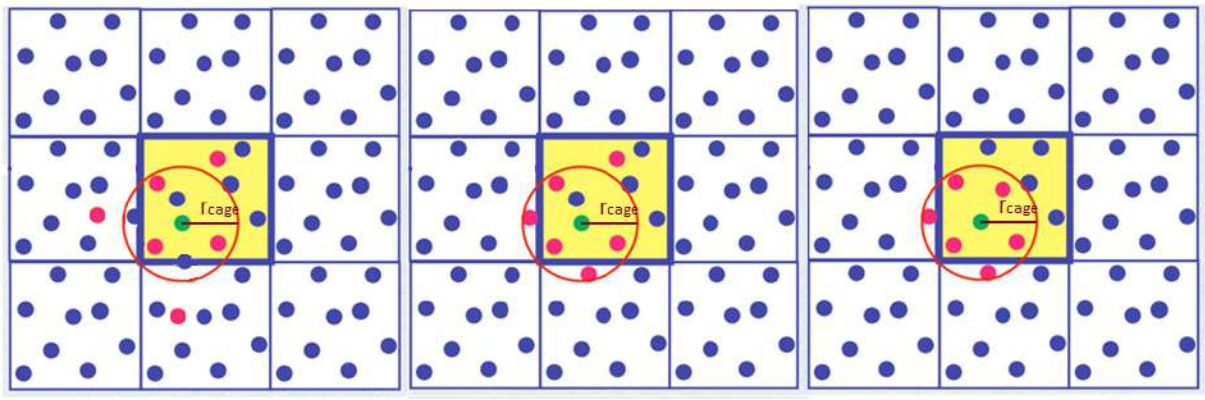


Рисунок 1.1 – Схема, поясняющая смысл кейгеновой корреляционной функции

Дадим описание математической модели, позволяющей вычислить кейгеновые корреляционные функции. Надо отметить, что радиус обрезания (радиус клетки) принято выбирать как расстояние, соответствующее первому минимуму на парной корреляционной функции распределения частиц, значение которого, приведенное на среднее расстояние между частицами примерно равно $r_{cage} \approx 2.5$. Таким образом, для вычисления кейгеновой корреляционной функции рассматривается окружение частицы и формируется список частиц, находящихся в окружении частицы i: $l_i = \{f(r_{i,1}), f(r_{i,2}) \ldots f(r_{i,N})\}$, где $f(r_{i,j}) = \Theta(r_{cage} - r_{i,j})$, Θ - функция Хевисайда. Если частица находится в пределах радиуса r_{cage}, т.е. $r_{i,j} \le r_{cage}$, то в значение функции $f(r_{ij})$ записывается 1, в противном случае $f = 0$. Неравенство $r_{i,j} \le r_c$ означает, что частица j находится в клетке частицы i, т.е. является ее ближайшим соседом.

Изменения в ближайшем окружении частиц оцениваются с помощью корреляционной кейгеновой функции.

Число частиц, покидающих первоначальный круг частицы i в момент времени t, может быть определено как:

$$n_i^{out}(t) = \left| l_i(0)^2 \right| - l_i(0) \cdot l_i(t), \tag{1.3}$$

где первый член дает число частиц вокруг частицы i в момент $t = 0$, а второй член дает число тех же частиц, оставшихся в окружении частицы i по истечении времени t. Корреляционная кейгеновая функция $C_{cage}^c(t)$ может быть рассчитана через усреднение по частицам и начальным временам функции $\left\langle \Theta(c - n_i^{out}) \right\rangle$:

$$C_{cage}^c(t) = \left\langle \Theta(c - n_i^{out}) \right\rangle, \tag{1.4}$$

где $c = 7$ в трехмерной системе, так как рассматривается 14 ближайших соседей (гранецентрированная кубическая решетка) тестовой частицы, в случае двумерной системы $c = 3$, то есть при вычислении кейгеновой корреляционной функции наблюдается эволюция половины всех соседей тестовой частицы. В начальный момент времени функция $C_{cage}^c(t = 0) = 1$, и по истечению времени монотонно затухает.

Также могут быть вычислены времена удержания ближайших соседних частиц, которые называются временами декорреляции t_{decorr}, определяющихся при $C_{cage}^c(t_{decorr}) = 0.1$.

Кейгеновая функция для Кулоновских и Юкавовских систем без внешнего магнитного поля была исследована с помощью метода молекулярной динамики в работах [103, 104], где было показано, что при сильной связи в системе динамика частиц значительно меняется: частицы удерживаются ближайшими

соседями и проводят несколько колебательных циклов в локальных минимумах потенциальной поверхности, не испытывая существенных изменений в их окружениях.

Кейгеновые корреляционные функции также могут быть рассчитаны для отдельных частиц [103]. Графики в соответствии с различными значениями числа частиц обычно показывают колебания, т.е. некоторые из покинувших «клетку» частиц вновь возвращаются через какое-то время. Эти колебания являются менее частыми при меньших значениях параметра связи. Выход отдельных частиц из «клетки» может быть связан с процессом диффузии. Так как кейгеновая корреляционная функция $C^{c}_{cage}(t)$ дает вероятность выхода менее чем c частиц, то вероятность выхода точно одной частицы может быть дана как:

$$P_1 = C^{c=2}_{cage}(t) - C^{c=1}_{cage}(t). \qquad (1.5)$$

График P_1 как функции от времени показывал наличие экспоненциального затухания (исключение на малых временах). Характерное время затухания t_0 связано с вероятностью того, что любая из первоначальных частиц в «клетке» выйдет: коэффициент диффузии может быть тогда рассчитан как:

$$D = (\Delta x)^2 / 14 t_0, \qquad (1.6)$$

где Δx - смещение частиц, связанное с выходом их «клетки». Авторы работ сравнили данные для полученного коэффициента диффузии с данными, полученными непосредственно на основе формулы Эйнштейна со среднеквадратичными смещениями и обнаружили хорошую корреляцию между ними в области больших значений параметра связи, показывающую, что выход частиц из «клетки» обуславливает процесс самодиффузии в этой области.

2 МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И ЧИСЛЕННАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦ

В главе описывается алгоритм методов молекулярной и ланжевеновой динамики и приводится их блок-схема. Приводится скоростная схема Верле для решения уравнений движения частиц с учетом влияния однородного внешнего магнитного поля и силы трения.

В главе описываются моделируемая система и основные параметры, характеризующие систему.

Представленная математическая модель построена для магнитоактивной пылевой плазмы с учетом влияния силы трения, обусловленной наличием окружающей среды (буферной плазмы). Математическая модель построена как для трехмерной, так и для двумерной системы, частицы которой взаимодействуют с помощью потенциала Юкава. Проведен детальный анализ траекторий и фазовых портретов индивидуальной частицы для разных значений параметров магнитного поля, связи и трения.

2.1 Математическая модель пылевой плазмы

Как уже было выше упомянуто, в диссертационной работе выполнено компьютерное моделирование магнитоактивной пылевой плазмы с учетом и без учета влияния силы трения, обусловленной наличием окружающей среды (буферной плазмы). В качестве метода компьютерного моделирования был использован метод молекулярной динамики, где временная эволюция исследуемой системы взаимодействующих частиц отслеживается интегрированием их уравнений движения. Для описания движения частиц применяется классическая механика. Классический метод молекулярной динамики при учете дополнительной силы трения и броуновской силы называется методом ланжевеновой динамики [105-107].

Для реализации метода ланжевеновой динамики все трехмерное пространство разбивается на равные ячейки объемом V (для простоты кубические) с N частицами в каждой. В двумерном случае рассматривается квадрат с площадью S. Одна из ячеек считается базовой, остальные – копии (реплики). Конфигурации частиц базовой ячейки повторяются во всех остальных ячейках. Длина ребра базовой ячейки $L^3 = V$. На базовую ячейку и на реплики были наложены периодические граничные условия (ПГУ). Начальное распределение компонент координат и скоростей частиц берется случайным, компоненты скоростей можно брать любыми в процессе термализации они примут значения, распределенные по гауссовскому закону с заданной температурой. На первом этапе моделирования система должна перейти в равновесное состояние, что происходит достаточно быстро. Так как моделирование проводится для канонического ансамбля, используется термостат для поддержания постоянной температуры. После того, как в системе достигается равновесие, начинается сбор данных о скоростях и координатах частиц, эти данные необходимы для дальнейших вычислений.

Метод классической МД имеет границы применимости:

- Данный метод не применяется в случае, когда начинают играть роль квантовые эффекты.
- Необходимо, чтобы времена, на которых рассматривается поведение системы, были больше, чем время релаксации исследуемых физических величин.
- В связи с тем, что время вычислений растет пропорционально квадрату количества частиц, метод может быть использован для систем с ограниченным количеством частиц (например для PC Intel(R) Core(TM)i7-6500U, Intel HD Graphics 510, CPU 2.50GHz, ОЗУ 8.00 Гб число частиц $N < 20000$).

При реализации метода молекулярной динамики имеются следующие допущения:

- В установках для реального экспериментального исследования пылевой плазмы число частиц может браться очень большим (сотни тысяч) тогда как в компьютерном моделировании симулируется ячейка, в которой находится конечное число N частиц: $N = nV$, n-концентрация реальной системы (см. рис. 2.1), V - объем ячейки (чаще всего кубической).
- Допускается, что в каждой реплике содержится такое же количество N частиц той же конфигурации, что и в базовой ячейке.
- Для всех частиц масса частиц и заряд берутся одинаковыми, при этом размер пылинок не учитывали в своих расчетах.

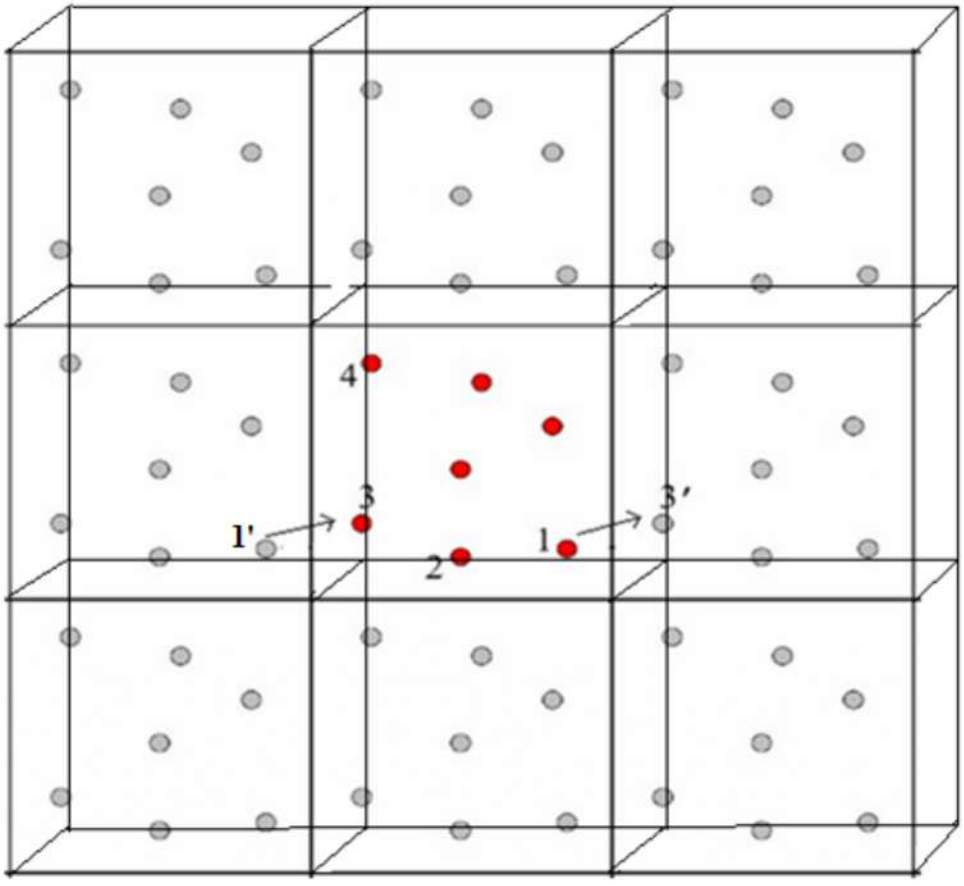


Рисунок 2.1 – Базовая ячейка и реплики в методе молекулярной динамики

Также при реализации метода молекулярной динамики на движение частиц налагаются периодические граничные условия, то есть, если одна из частиц базовой ячейки (частица 1 на рис.2.1) выходит за ее пределы и занимает положение в другой ячейке (частица 3'), то одновременно образ данной частицы из соседней ячейки (частица 1') входит в базовую ячейку через противоположную грань и занимает положение вышедшей частицы (частица 3 на рис. 2.1). Таким образом, число частиц в основной ячейке остается прежним, плотность и энергия системы сохраняются. Также, несмотря на то, что речь идет о неограниченной системе, достаточно рассматривать только основную ячейку, так как конфигурация частиц повторяется во всех ее репликах. При этом подсчет энергии любой конфигурации, а также сил действующих на частицы производится суммированием взаимодействий частиц независимо от того находятся ли они в базовой ячейке или в соседних репликах:

$$U = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \Phi_{ij}, \tag{2.1}$$

$$\vec{F}_i = \sum_{i \neq j}^{N} \vec{\nabla} \Phi_{ij}. \tag{2.2}$$

где Φ_{ij} - парный потенциал взаимодействия. В случае, когда рассматриваемая система - пылевая плазма, в качестве потенциала межчастичного взаимодействия пылевых частиц берется экранированный потенциал Дебая-Хюккеля или как его часто называют потенциал Юкава [108-110]. Это обусловлено тем, что пылевые частицы двигаются в плазме, состоящей из ионов, электронов и атомов, и так как в земных условиях пылевые частицы заряжаются до очень больших значений электрического заряда, то частицы сильно электростатически взаимодействует друг с другом, но это взаимодействие экранируется окружающей фоновой плазмой, состоящей из ионов и электронов. Поэтому в пылевой плазме потенциалом взаимодействия является экранированный потенциал Дебая-Хюккеля:

$$\Phi(r) = \frac{Q^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{\exp(-r/\lambda_D)}{r}, \tag{2.3}$$

здесь Q – заряд частиц и $\lambda_D = \sqrt{\varepsilon_0 k_B T / ne^2}$ – длина Дебая, которая характеризует пространственный масштаб экранировки поля выбранной частицы в плазме, ε_0 - электрическая постоянная, e - элементарный заряд электрона, k_B - постоянная Больцмана. Отношение между межчастичной

потенциальной энергий и тепловой энергий выражается через безразмерный параметр связи [111,112]:

$$\Gamma = \frac{Q^2}{4\pi\varepsilon_0 a k_B T}, \tag{2.4}$$

где T – температура, $\kappa = a / \lambda_D$ – параметр экранировки, $a = (1/\pi n)^{-1/2}$ –радиус Вигнера-Зейтца для двумерной системы (среднее расстояние между частицами), n – концентрация пылевых частиц. При $\Gamma \ll 1$ плазму можно рассматривать как идеальную, частицы которой взаимодействуют только при столкновениях; при $\Gamma \geq 1$ - слабонеидеальная плазма; при $\Gamma \gg 1$-сильно неидеальная плазма.

Отметим, что для многих видов потенциала взаимодействия достаточно учесть взаимодействия с окружением в сфере радиуса $L/2$ (см. рис. 2.2.).

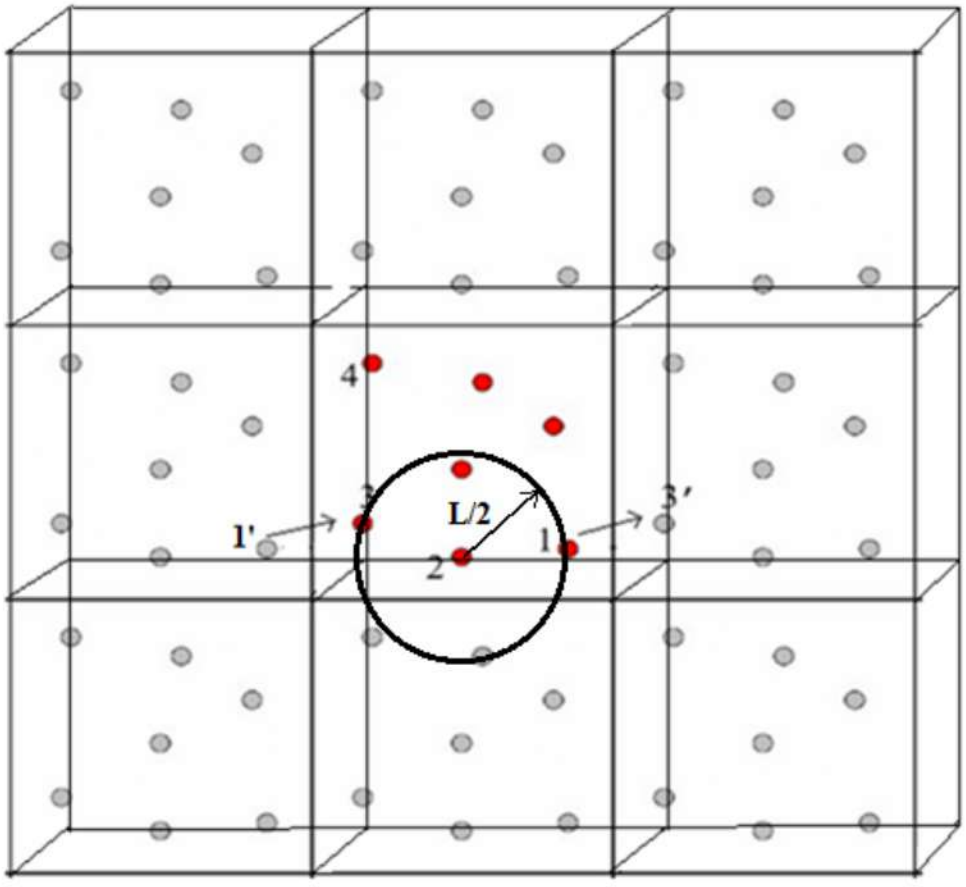


Рисунок 2.2 – Вычисление силы взаимодействия пылевых частиц.

Далее мы рассматриваем силу влияния внешнего однородного магнитного поля $\vec{B} = B_z \vec{k}$ направленного вдоль оси z определяемой следующим образом:

$$\vec{F}_{mag} = Q\dot{\vec{r}}_i \times \vec{B}. \tag{2.5}$$

Так как пылевые частицы испытывают трение со стороны внешней буферной плазмы, учитывается также сила трения, которая пропорциональна произведению частоты столкновений пылевых частиц с частицами плазмы ν и скорости пылевых частиц:

$$\vec{F}_{fr} = -m\nu\frac{d\vec{r}}{dt}. \tag{2.6}$$

А случайная «броуновская» сила, учитывающая случайные толчки со стороны окружающих плазменных частиц или другие стохастические процессы, например, случайные флуктуации заряда частиц, приводящие к росту их кинетической энергии, определяется как:

$$F_{br}(t) = A\xi(t). \tag{2.7}$$

где ξ (τ) - дельта-коррелированный гауссов белый шум, значение множителя A определяется флуктуационно-диссипативной теоремой.

Таким образом, основной идеей метода МД является решение уравнений движения Ньютона для системы многих тел. Данные уравнения без учета внешних дополнительных сил записываются как:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{r}_i}{dt} &= \vec{\upsilon}_i, \\ \frac{d\vec{v}_i}{dt} &= \frac{1}{m}\vec{F}_i, \end{aligned} \tag{2.8}$$

где $\vec{r}_i$, $\vec{\upsilon}_i$ - координата, скорость i - той частицы, и m - масса частиц, $i = 1,...,N$, а $\vec{F}_i$ - сила, действующая на частицу i со стороны остальных частиц.

Но в случае учета стохастической силы, учитывающей случайные толчки частиц окружающей плазменной среды на пылевые частицы, метод МД называется методом ЛД. И таким образом, полная сила, действующая на пылевую частицу в методе компьютерного моделирования ЛД с учетом влияния силы магнитного поля, представляется в виде:

$$m\ddot{\vec{r}}_i = \sum_{i\neq j}\vec{F}_{ij}(t) + Q\dot{\vec{r}}_i \times \vec{B} - \nu m\dot{\vec{r}}_i + \vec{F}_{br}(t), \tag{2.9}$$

В безразмерном виде система уравнений Ньютона после подстановки потенциала (2.8) перепишется следующим образом:

$$\dot{X}_i = \frac{V_i}{\sqrt{\Gamma}}, \tag{2.10}$$

$$\dot{V}_i = \sum_{j \neq i} (\Gamma / 4\pi)^{1/2} \frac{1 + kR_{ij}}{R_{ij}^3} \exp(-kR_{ij})(\vec{R}_{ij} \cdot \vec{e}_x) - \theta V_i + S\xi(\tau), \quad (2.11)$$

где X_i, V_i – безразмерные координаты и скорость i-ой пылевой частицы, τ – безразмерное время, $\vec{R}_{ij} = \vec{R}_i - \vec{R}_j$ ($R_{ij} = \left|\vec{R}_{ij}\right|$).

Влияние силы магнитного поля выражается с помощью безразмерного параметра:

$$\beta = \frac{\omega_c}{\omega_p}, \quad (2.12)$$

где $\omega_c = QB / m$ – циклотронная и $\omega_p = \sqrt{nQ^2 / 2\varepsilon ma}$ – двухмерная плазменная частота, m – масса частицы. Влияние силы трения учитывается с помощью безразмерного параметра трения:

$$\theta = \frac{\nu}{\omega_d}. \quad (2.13)$$

где ν - коэффициент трения пылевых частиц, который определяет частоту их столкновений с нейтральными частицами окружающей плазмы.

Время берется в единицах, обратных ленгмюровской пылевой частоте, а скорость в единицах тепловой скорости частиц $v_{T_d} = (k_B T_d / m_d)^{-1/2}$. Таким образом, поведение системы определяется следующими безразмерными параметрами: $\Gamma, \kappa, \beta, \theta$.

Для решения уравнений движения частиц существуют несколько численных схем, такие как: алгоритм Рамана, использующий схему «предиктор-корректор», алгоритм Верле [113-116], алгоритм Бимана и т.д.

Алгоритм Рамана. Пусть известны $\vec{r}_i(t), \vec{\upsilon}_i(t)$ и ускорение $\vec{a}_i(t)$, в момент времени t производится оценка $\vec{r}_i(t + \Delta t)$ в первом приближении с помощью выражения:

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{\upsilon}_i \Delta t. \quad (2.14)$$

С помощью $\vec{r}_i(t + \Delta t)$ и потенциала определяются оценочно $\vec{a}_i(t + \Delta t)$, а затем и скорости при $(t + \Delta t)$:

$$\vec{v}_i(t + \Delta t) = \vec{\upsilon}_i(t) + \frac{1}{2}[\vec{a}_i(t + \Delta t) + \vec{a}_i(t)]\Delta t. \quad (2.15)$$

Для значений координат в следующем приближении имеем:

$$\vec{r}_i(t+\Delta t) = \vec{r}_i(t) + \frac{1}{2}[\vec{\upsilon}_i(t+\Delta t) + \vec{\upsilon}_i(t)]\Delta t. \qquad (2.16)$$

Данные процедуры повторяются для дальнейшего уточнения, пока не достигается желаемая точность при итерации между предсказанными и уточненными значениями. После этого все расчеты повторяются для момента времени $t+2\Delta t$. Данный алгоритм требует дополнительное машинное время. Использование данного алгоритма для моделирования свойств не является эффективным в силу больших затрат компьютерного времени.

Наиболее распространенным алгоритмом является алгоритм Верле. Ввиду хорошей точности, эта схема не требует итерационной процедуры, что и является основной причиной ее широкого пользования. Ошибка интегрирования численной схемы порядка $(\Delta t)^2$. В схеме Верле функция $\vec{r}_i(t+\Delta t)$ разлагается в ряд Тейлора по степеням Δt:

$$\vec{r}_i(t+\Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{\upsilon}_i\Delta t + \frac{1}{2}\dot{\vec{a}}_i(t)(\Delta t)^2 + \frac{1}{6}\vec{a}_i(t)(\Delta t)^3 + \ldots \qquad (2.17)$$

Если известны координаты $\vec{r}_i(t+\Delta t)$, то можно записать:

$$\vec{\upsilon}_i(t) = \frac{1}{2}\left[\vec{r}_i(t+\Delta t) - \vec{r}_i(t-\Delta t)\right] / \Delta t. \qquad (2.18)$$

Ограничиваясь в (2.17) членами малости $(\Delta t)^2$, с учетом (2.18) можно записать следующее:

$$\vec{r}_i(t+\Delta t) = 2\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t-\Delta t) + \frac{\vec{F}_i(t)}{m_i}(\Delta t)^2. \qquad (2.19)$$

(2.18) и (2.19) составляют численную схему Верле. Для ее запуска требуется знание начального и последующего положения частицы. Также существует скоростная схема Верле:

$$\begin{aligned} \vec{r}_i(t+\Delta t) &= \vec{r}_i(t) + \vec{\upsilon}_i(t)\Delta t + \frac{(\Delta t)^2}{2m_i}\vec{F}_i(t), \\ \vec{\upsilon}_i(t+\Delta t) &= \vec{\upsilon}_i(t) + \left(\frac{\Delta t}{2m_i}\right)\left(\vec{F}_i(t+\Delta t) - \vec{F}_i(t)\right). \end{aligned} \qquad (2.20)$$

По сравнению с предыдущей своей версией данная схема имеет ряд преимуществ: координаты, и скорости частиц вычисляются на одном и том же временном шаге и данная форма более устойчива.

Алгоритм Бимана. Данный алгоритм имеет более высокую точность, чем схема Верле, так как при моделировании некоторых систем с использованием алгоритма Верле, энергия системы имеет тенденцию к понижению или повышению, обусловленную погрешностью схемы. Сохранив в разложении функции $\vec{r}_i(t+\Delta t)$ (2.17) члены пропорциональные $\sim O(\Delta t)^3$ и учитывая, что

$$\dot{\vec{a}}_i(t)\Delta t \simeq \vec{a}_i(t) - \vec{a}_i(t-\Delta t),$$

получим:

$$\vec{r}_i(t+\Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{\upsilon}_i(t)\Delta t + \frac{1}{6}[4\vec{a}_i(t) - \vec{a}_i(t-\Delta t)](\Delta t)^2. \qquad (2.21)$$

Алгоритм для скорости получается с помощью выражения (2.21) и дифференцирования уравнения (2.18), только вместо $2\Delta t$ примем Δt:

$$\vec{\upsilon}_i(t+\frac{1}{2}\Delta t) \simeq [\vec{r}_i(t+\Delta t) - \vec{r}_i(t)] / \Delta t = \vec{\upsilon}_i(t) + \frac{1}{6}[4\vec{a}_i(t) - \vec{a}_i(t-\Delta t)](\Delta t)^2. \qquad (2.22)$$

Прибавляя ко всем аргументам Δt, в последнем выражении имеем:

$$\vec{\upsilon}_i(t+\frac{3}{2}\Delta t) \simeq \vec{\upsilon}_i(t+\Delta t) + \frac{1}{6}[4\vec{a}_i(t+\Delta t) - \vec{a}_i(t)](\Delta t). \qquad (2.23)$$

С помощью приближенного соотношения

$$\vec{a}_i(t+\Delta t)\Delta t \simeq \vec{\upsilon}_i(t+\frac{3}{2}\Delta t) - \vec{\upsilon}_i(t+\frac{1}{2}\Delta t) \qquad (2.24)$$

и после несложных преобразований получим:

$$\vec{\upsilon}_i(t+\Delta t) \simeq \vec{\upsilon}_i(t) + \frac{1}{6}[2\vec{a}_i(t+\Delta t) + 5\vec{a}_i(t) - \vec{a}_i(t-\Delta t)]\Delta t. \qquad (2.25)$$

Соотношения (2.21) и (2.25) составляют алгоритм Бимана.

Таким образом, результатами моделирования системы методом молекулярной динамики являются координаты, скорости, энергии и другие характеристики частиц в любой момент времени. Данные характеристики используются для исследования динамических, транспортных, структурных и

других свойств всей системы. То есть, решается основная задача классической механики.

Еще одним вопросом моделирования является выбор шага по времени Δt. В гидродинамическом приближении и в большой области фазового пространства время моделирования Δt может быть большим. Компьютерное время пропорционально N_t (числу временных шагов) и поэтому Δt нужно брать как можно большим. Однако с увеличением Δt точность численного интегрирования быстро падает и колебания полной энергии системы увеличиваются. Надо отметить, что одним из критериев выбора шага по времени при моделировании плазмы является выполнение условия:

$$\Delta t \ll t_0, \tag{2.26}$$

где $t_0 = r_0 / \upsilon_T$, r_0 - среднее расстояние между частицами; υ_T - тепловая скорость.

Работы по исследованию алгоритмов для решения уравнения движения показали, что во всех случаях с помощью оптимального подбора шага по времени, можно добиться одинаковых траекторий, хотя скорости при использовании различных алгоритмов могут все-таки несколько отличаться.

Для интегрирования уравнений движения частиц с учетом влияния внешнего магнитного поля без учета силы трения нами был использован разностный алгоритм Верле, предложенный в работе [117]. При разработке конечно-разностной схемы для исследования физических свойств плазмы в электромагнитных полях основной трудностью является выбор временного шага моделирования Δt. Временной шаг моделирования должен быть выбран достаточно малым для корректного отслеживания винтового движения частицы: частица с зарядом q/m выполняет ларморовское вращение с частотой $\omega_c = qB/m$, когда на нее действует магнитное поле $\vec{B}$. Одним из условий для выбора Δt, связанным с величиной магнитного поля, является: $\omega_c \Delta t \ll 2\pi$. Когда магнитное поле слабое, то есть, когда шкала времени τ_{int}, которая определяется взаимодействиями внутри самой системы, мала по сравнению с ларморовской частотой $2\pi/\omega_c$, выбор шага Δt подавляется τ_{int} и автоматически выполняется условие: $\Delta t \ll \tau_{\text{int}} \ll 2\pi/\omega_c$. При сильном магнитном поле $2\pi/\omega_c \ll \tau_{\text{int}}$, тогда в рамках компьютерного моделирования молекулярной динамики придется выполнить огромное количество мелких шагов по времени, чтобы, подчиняясь условию $\omega_c \Delta t \ll 2\pi$, покрыть временные интервалы порядка τ_{int}.

Численный алгоритм, предложенный в [117], позволяет моделировать систему заряженных частиц под воздействием сильного статического внешнего магнитного поля без выполнения условия $\omega_c \Delta t \ll 2\pi$, что означает, что выбор шага по времени не зависит от величины магнитного поля $2\pi/\omega_c$, а

определяется только внутренними физическими свойствами рассматриваемой системы. Это свойство данного метода является важным для моделирования ансамбля заряженных частиц с учетом электромагнитных полей. В [117] предполагалось, что магнитное поле однородно и направлено вдоль оси z, то есть $\vec{B} = (0,0,B)$.

Используя данную технику, в диссертационной работе была получена схема для интегрирования уравнений движения с учетом влияния силы трения, обусловленной наличием буферного газа. Схема учитывает силу трения и основана на разложении ускорения и скорости частиц в ряд Тейлора. Дальше следует правильный выбор всех членов, которые не больше чем $O((\Delta t)^2)$. Но, прежде чем приступить к ее выводу, прежде всего следует описать явные и неявные схемы вычислений.

Для решения дифференциальных уравнений первого порядка существует множество численных алгоритмов, из них скоростной алгоритм Верле чаще всего используется в МД моделировании:

$$\vec{r}(t+\Delta t) = \vec{r}(t) + \Delta t\vec{\upsilon}(t) + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \vec{a}(t) + O\left((\Delta t)^3\right), \tag{2.27}$$

$$\vec{a}(t+\Delta t) = \vec{a}(\vec{r}_1(t+\Delta t),\ldots,\vec{r}_N(t+\Delta t),\vec{\upsilon}_1(t+\Delta t),\ldots,\vec{\upsilon}_N(t+\Delta t),t+\Delta t), \tag{2.28}$$

$$\vec{\upsilon}(t+\Delta t) = \vec{\upsilon}(t) + \frac{1}{2}\Delta t(\vec{a}(t) + \vec{a}(t+\Delta t)) + O\left((\Delta t)^3\right). \tag{2.29}$$

В схеме (2.27)-(2.29) $t+\Delta t$ встречается в двух сторонах уравнений (2.28),(2.29), поэтому она выглядит как неявная схема. В отсутствие магнитного поля и трения во многих простых задачах МД ускорение частиц не зависит от скорости частиц, и уравнение (2.28) будет выглядеть следующим образом

$$\vec{a}(t+\Delta t) = \vec{a}(\vec{r}_1(t+\Delta t),\ldots,\vec{r}_N(t+\Delta t),t+\Delta t). \tag{2.30}$$

Из уравнения (2.27) мы можем найти $\vec{r}(t+\Delta t)$. Используя $\vec{r}(t+\Delta t)$, из уравнения (2.30) найдем $\vec{a}(t+\Delta t)$. Таким образом, неявный вид уравнений (2.27)-(2.30) исчезает. В этом случае скоростная схема Верле является схемой интегрирования второго порядка, то есть остаточный член порядка $O((\Delta t)^2)$.

Очевидно, что, когда на заряженные частицы влияет магнитное поле, а также частицы испытывают силу трения в фоновом газе, то ускорение зависит от скорости и (2.30) не будет выполняться, мы имеем неявную схему (2.27)-(2.29). Как было показано в [117], в случае статического однородного внешнего магнитного поля, действующего на систему, схема Верле может быть модифицирована, чтобы восстановить явный вид. Мы выполним это с учетом силы трения. Тогда, в однородном магнитном поле, ускорение каждой

частицы, испытывающей к тому же торможение при движении в фоновом газе, можно записать в следующем виде:

$$\vec{a}(t) = \vec{a}^{C}(t) - \omega_c \vec{e}_z \times \vec{\upsilon}(t) - \nu\vec{\upsilon}(t), \tag{2.31}$$

здесь $\vec{a}^{C}(t)$ - часть ускорения, которая не зависит от скорости,

$$\vec{a}^{C}(t) = \vec{a}^{C}(\vec{r}_1(t),...,\vec{r}_N(t);t), \tag{2.32}$$

$\omega_c = qB/m$ -ларморовкая циклотронная частота, $\vec{e}_z = (0,0,1)$-единичный вектор, направленный вдоль оси z. Для упрощения обозначений, мы будем рассматривать систему, где все частицы имеют одно и то же отношение заряда к массе. Далее мы опишем два разных приближения, учитывающих магнитное поле и силу трения в схеме СВ, которые мы в согласии с [117] назвали "инверсия $\vec{e}_z \times \vec{\vartheta}$," и "разложение Тейлора".

В выражении ускорения частицы (2.31) мы имеем векторное произведение $\vec{e}_z \times \vec{\upsilon}$, которое после подстановки в уравнения (2.27)-(2.29) связывает компоненты υ_x и υ_y. Переписав уравнение (2.29) в явном виде для $\vec{\upsilon}(t+\Delta t)$, имеем следующие уравнения явной схемы Верле с ускорением, заданным (2.31):

$$r_x(t+\Delta t) = r_x(t) + \Delta t\upsilon_x(t) + \frac{1}{2}(\Delta t)^2\left[a_x^C(t) - \nu\upsilon_x(t) + \omega_c\upsilon_y(t)\right] + O((\Delta t)^3), \tag{2.33}$$

$r_y(t+\Delta t)$ получается из (2.33) заменой $x \to y$ и $\omega_c \to -\omega_c$

$$r_z(t+\Delta t) = r_z(t) + \Delta t\vartheta_z(t) + \frac{1}{2}(\Delta t)^2\left[a_z^C(t) - \nu\vartheta_z(t)\right] + O((\Delta t)^3), \tag{2.34}$$

$$\upsilon_x(t+\Delta t) = \frac{1}{K}\left[\upsilon_x(t) + \frac{1}{2}\Delta t\left(\frac{\omega_c}{1+\nu\Delta t/2}\left(\begin{array}{l} a_x^C(t) + a_x^C(t+\Delta t) + \omega_c\upsilon_y(t) - \nu\upsilon_x(t) + \\ \upsilon_y(t) + \frac{\Delta t}{2}a_y^c(t) + \frac{\Delta t}{2}a_y^c(t+\Delta t) - \\ \frac{\Delta t}{2}\omega_c\upsilon_x(t) - \frac{\Delta t}{2}\nu\upsilon_y(t) \end{array}\right)\right)\right] + O((\Delta t)^3), \tag{2.35}$$

где $K = 1 + \frac{\omega_c{}^2(\Delta t)^2}{4+2\nu\Delta t} + \frac{\nu\Delta t}{2}$,

$\upsilon_y(t+\Delta t)$ получается из (2.35) заменой $x \to y$ и $\omega_c \to -\omega_c$

$$\upsilon_z(t+\Delta t)=\frac{1}{1+\nu\Delta t/2}\left[\upsilon_z(t)+\frac{1}{2}\Delta t\left(a_z^C(t)+a_z^C(t+\Delta t)\right)\right]+O((\Delta t)^3). \qquad (2.36)$$

Когда $\nu\to 0$ уравнения (2.33)-(2.36) преобразуются в следующий вид:

$$r_x(t+\Delta t)=r_x(t)+\Delta t\upsilon_x(t)+\frac{1}{2}(\Delta t)^2\left[a_x^C(t)+\omega_c\upsilon_y(t)\right]+O((\Delta t)^3), \qquad (2.37)$$

$r_y(t+\Delta t)$ получается из (2.37) заменой $x\to y$ и $\omega_c\to-\omega_c$

$$r_z(t+\Delta t)=r_z(t)+\Delta t\upsilon_z(t)+\frac{1}{2}(\Delta t)^2 a_z^C(t)+O((\Delta t)^3), \qquad (2.38)$$

$$\upsilon_x(t+\Delta t)=\frac{1}{1+\frac{1}{4}(\omega_c\Delta t)^2}\left\{\begin{array}{l}\upsilon_x(t)+\frac{1}{2}\Delta t\left(a_x^C(t)+a_x^C(t+\Delta t)+2\omega_c\upsilon_y(t)\right)+\\ \frac{(\Delta t)^2\omega_c}{4}\left(a_y^C(t)+a_y^C(t+\Delta t)-\omega_c\upsilon_x(t)\right)\end{array}\right\}+O((\Delta t)^3), \qquad (2.39)$$

$$\upsilon_z(t+\Delta t)=\upsilon_z(t)+\frac{1}{2}\Delta t\left(a_z^C(t)+a_z^C(t+\Delta t)\right)+O((\Delta t)^3). \qquad (2.40)$$

Уравнения (2.37)-(2.40) были получены в работе [117] для случая без учета силы трения. Таким образом, мы показали, что предельный переход $\nu\to 0$ корректно выполняется.

Как будет показано ниже, схема (2.37)-(2.40) будет устойчива только для случая слабых магнитных полей. При сильных магнитных полях она становится неустойчивой относительно шага по времени и требует выполнения большого количества вычислений с малым временным шагом.

Напомним, что в работе [117] была получена схема на основе разложения координат $\vec{r}(t+\Delta t)$ и скоростей $\vec{\upsilon}(t+\Delta t)$ частиц в ряд Тейлора с последующим корректным выбором всех членов не выше $O((\Delta t)^2)$, устойчивая к изменению шага по времени при больших внешних магнитных полях. Временной шаг в этой схеме не зависит от периода ларморовских осцилляций. Эта схема была успешно использована во многих работах [118-120]. В нашей работе мы вводим в скоростную схему Верле силу трения, выполняя для этого все этапы по выводу устойчивой схемы, описанные в [117]. Мы применили данную технику для случая, когда моделируемые частицы находятся в однородной стационарной среде, приводящей к появлению силы трения, воздействующей на движущиеся частицы. Приведем теперь вывод соответствующих численных уравнений.

Предполагаем, что магнитное поле достаточно сильное, то есть $\Omega\Delta t << 2\pi$ не выполняется. Разложение в ряд Тейлора $\vec{r}(t+\Delta t)$ записывается:

$$\vec{r}(t+\Delta t) = \vec{r}(t) + \Delta t\vec{\upsilon}(t) + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(\Delta t)^n}{n!} \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \vec{a}(t), \tag{2.41}$$

аналогичное разложение для скорости записывается следующим образом:

$$\vec{\upsilon}(t+\Delta t) = \vec{\upsilon}(t) + \Delta t\vec{a}(t) + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(\Delta t)^n}{n!} \frac{d^{n-1}}{dt^{n-1}} \vec{a}(t), \tag{2.42}$$

где $\vec{a}(t)$ приведено в (2.31).

Общий член в (2.41):

$$\frac{(\Delta t)^n}{n!} \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \vec{a}(t). \tag{2.43}$$

Так как $\vec{a}(t) = \vec{a}^C(t) - \omega_c \vec{e}_z \times \vec{\upsilon} - \nu\vec{\upsilon}$ и $\vec{a} = d\vec{\upsilon}/dt$, мы имеем

$$\begin{aligned} &\frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \vec{a}(t) = \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \vec{a}^C(t) - \omega_c \vec{e}_z \times \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \vec{\upsilon} - \nu \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \vec{\upsilon} = \\ &= \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \vec{a}^C(t) - \omega_c \vec{e}_z \times \frac{d^{n-3}}{dt^{n-3}} \vec{a}(t) - \nu \frac{d^{n-3}}{dt^{n-3}} \vec{a}(t). \end{aligned} \tag{2.44}$$

В работе [117] было показано, что:

$$\frac{(\Delta t)^n}{n!} \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \vec{a}(t) = O((\Delta t)^n) O((\Delta t)^{-n+1}) = O((\Delta t)^1), \tag{2.45}$$

и ряд Тейлора (2.41) больше не сортируется по возрастанию Δt, так как каждый член порядка $O((\Delta t)^1)$.

Для эффективного рассмотрения действия поперечного произведения x и y компонент введем комплексное обозначение:

$$\mathcal{M} : R^3 \to C; \quad \vec{b} \mapsto b = b_x + ib_y, \tag{2.46}$$

где $\vec{b} \in R^3$ - произвольный трехмерный вектор. $\mathcal{M}$ сопоставляет векторное произведение $\vec{e}_z \times \vec{b}$ и простое умножение: $\vec{e}_z \times \vec{b} \mapsto -b_y + ib_x = ib$. Компонента

z уравнения не зависит от магнитного поля, поэтому компонента $b_z = 0$ и можно определить обратное отображение через

$$\mathcal{M}^{-1} : C \to R^3; \quad b = \Re b + i\Im b \mapsto \vec{b} = (\Re b, \Im b, 0). \tag{2.47}$$

Перепишем уравнение (2.23) с учетом указанного отображения как:

$$\frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} a(t) = \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} a^C(t) - (i\omega_c + \nu) \frac{d^{n-3}}{dt^{n-3}} a^C(t), \tag{2.48}$$

Рекурсивно подставляем (2.48) в себя $n-3$ раз и в конце мы получаем:

$$\frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} a(t) = \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} a^C(t) - (i\omega_c + \nu) \left\{ \frac{d^{n-3}}{dt^{n-3}} a^C(t) - (i\omega_c + \nu) \left[\begin{array}{l} \frac{d^{n-4}}{dt^{n-4}} a^C(t) \ldots - \\ -(i\omega_c + \nu)(a^C(t) - \\ -(i\omega_c + \nu)\upsilon) \end{array} \right] \right\}. \tag{2.49}$$

Так как $a^C(t), \upsilon = O((\Delta t)^0)$ и $\omega_c = O((\Delta t)^{-1})$ можно найти меньшую степень Δt собирая высшие степени ω_c:

$$\begin{aligned} &\frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} a(t) = (-i\omega_c - \nu)^{n-1} \upsilon + (-i\omega_c - \nu)^{n-2} a^C(t) + \sum_{k=1}^{n-2} (-i\omega_c - \nu)^{n-2-k} \frac{d^k}{dt^k} a^C = \\ &= (-i\omega_c - \nu)^{n-1} \upsilon + (-i\omega_c - \nu)^{n-2} a^C(t) + O((\Delta t)^{3-n}). \end{aligned} \tag{2.50}$$

Общий член (2.43) записывается как:

$$\frac{(\Delta t)^n}{n!} \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} a(t) = \frac{((-i\omega_c - \nu)\Delta t)^n}{n!} \left(\frac{\upsilon(t)}{-i\omega_c - \nu} + \frac{a^c(t)}{(-i\omega_c - \nu)^2} \right) + O((\Delta t)^3). \tag{2.51}$$

Полученный результат в конечном итоге подставляется в разложение Тейлора (2.51):

$$r(t+\Delta t)=r(t)+\Delta t\upsilon(t)+\sum_{n=2}^{\infty}\left[\begin{array}{l}\dfrac{((-i\omega_c-\nu)\Delta t)^n}{n!}\left(\dfrac{\upsilon(t)}{-i\omega_c-\nu}+\dfrac{a^C(t)}{(-i\omega_c-\nu)^2}\right)\\ +O((\Delta t)^3)\end{array}\right]=$$

$$=r(t)+\Delta t\upsilon(t)+\left[\begin{array}{l}\exp((-i\omega_c-\nu)\Delta t)-1+\\ +(i\omega_c+\nu)\Delta t\end{array}\right]\left(\frac{\upsilon(t)}{-i\omega_c-\nu}+\frac{a^C(t)}{(-i\omega_c-\nu)^2}\right)+O((\Delta t)^3). \tag{2.52}$$

После применения $\mathcal{M}^{-1}$ можно получить формулы для x и y компонент. Компонента z остается неизменной:

$$r_x(t+\Delta t)=r_x(t)-\frac{1}{(\omega_c{}^2+\nu^2)}\left[\begin{array}{l}\left(\nu\upsilon_x(t)+\omega_c\upsilon_y(t)\right)\cdot\left(\exp(-\nu\Delta t)\cos(\omega_c\Delta t)-1\right)+\\ \left(\nu\upsilon_y(t)-\omega_c\upsilon_x(t)\right)\exp(-\nu\Delta t)\sin(\omega_c\Delta t)\end{array}\right]+$$

$$+\frac{1}{(\omega_c{}^2+\nu^2)^2}\left[\begin{array}{l}C(\omega_c\Delta t)\left((\nu^2-\omega_c{}^2)a_x^C(t)+2\nu\omega_c a_y^C(t)\right)+\\ S(\omega_c\Delta t)\left((\nu^2-\omega_c{}^2)a_y^C(t)-2\nu\omega_c a_x^C(t)\right)\end{array}\right]+O((\Delta t)^3). \tag{2.53}$$

$r_y(t+\Delta t)$ получается из (2.30) заменой $x\to y$ и $\omega_c\to-\omega_c$)

$$r_z(t+\Delta t)=r_z(t)+\Delta t\upsilon_z(t)+\frac{1}{2}(\Delta t)^2\left[a_z^C(t)-\nu\upsilon_z(t)\right]+O((\Delta t)^3), \tag{2.54}$$

где мы использовали следующие обозначения:

$$S(\omega_c\Delta t)\equiv\exp(-\nu\Delta t)\sin(\omega_c\Delta t)-\omega_c\Delta t\,, \tag{2.55}$$

$$C(\omega_c\Delta t)\equiv\exp(-\nu\Delta t)\cos(\omega_c\Delta t)-1+\nu\Delta t\,, \tag{2.56}$$

$$\begin{aligned}&\upsilon_x(t+\Delta t)=\exp(-\nu\Delta t)(v_x(t)\cos(\omega_c\Delta t)+v_y(t)\sin(\omega_c\Delta t))+\\&+\frac{1}{\omega_c{}^2+\nu^2}[\exp(-\nu\Delta t)(\omega_c\sin(\omega_c\Delta t)-\nu\cos(\omega_c\Delta t))a_x^c(t)+\nu a_x^c(t)-\\&-\exp(-\nu\Delta t)(\omega_c\cos(\omega_c\Delta t)+\nu\sin(\omega_c\Delta t))a_y^c(t)+\omega_c a_y^c(t)]+\\&+\frac{1}{(\omega_c{}^2+\nu^2)^2}[\{\exp(-\nu\Delta t)((\nu^2-\omega_c{}^2)\cos(\omega_c\Delta t)-2\nu\omega_c\sin(\omega_c\Delta t))+\\&+(\omega_c{}^2-\nu^2)+(\omega_c{}^2+\nu^2)\nu\Delta t\}\frac{d}{dt}a_x^c(t)+\{\exp(-\nu\Delta t)((\nu^2-\omega_c{}^2)\sin(\omega_c\Delta t)+\\&+2\nu\omega_c\cos(\omega_c\Delta t))-2\nu\omega_c+(\omega_c{}^2+\nu^2)\omega_c\Delta t\}\frac{d}{dt}a_y^c(t)],\end{aligned} \tag{2.57}$$

$\vartheta_y(t+\Delta t)$ получается из (2.57) заменой $x \to y$ и $\omega_c \to -\omega_c$

$$\upsilon_z(t+\Delta t) = \frac{1}{1+\nu\Delta t/2}\left[\upsilon_z(t) + \frac{1}{2}\Delta t\left(a_z^C(t) + a_z^C(t+\Delta t)\right)\right] + O((\Delta t)^3). \qquad (2.58)$$

Система уравнений (2.53)–(2.58) представляет собой численную схему второго порядка для решения уравнений движения частиц, находящихся во внешнем однородном стационарном магнитном поле и фоновой среде. Выбор шага интегрирования для нее не ограничивается условием $\Omega\Delta t << 2\pi$. В данных уравнениях нет ссылок на ускорения, вызванные действием силы Лоренца и силы трения, они оказались полностью встроенными в эти уравнения. Ссылки есть только на $\vec{a}^C$, обусловленную как взаимодействием частиц, так и внешними силами, не зависящими от скорости частиц. Выбор шага по времени сейчас зависит только от временного масштаба, обусловленного $\vec{a}^C$. При $\nu \to 0$ уравнения (2.53)–(2.58) перейдут в соответствующие уравнения, представленные в работе [117] для случая без фонового окружения, что свидетельствует о достоверности полученных конечно-разностных уравнений. Таким образом, уравнения (2.53)–(2.58) без фонового окружения имеют вид:

$$\begin{aligned} r_x(t+\Delta t) = r_x(t) + \frac{1}{\omega_c}\left[\upsilon_x(t)\sin(\omega_c\Delta t) - \upsilon_y(t)C(\omega_c\Delta t)\right] + \\ + \frac{1}{\omega_c{}^2}\left[-a_x^C(t)C(\omega_c\Delta t) - a_y^C(t)S(\omega_c\Delta t)\right] + O((\Delta t)^3), \end{aligned} \qquad (2.59)$$

$$\begin{aligned} r_y(t+\Delta t) = r_y(t) + \frac{1}{\omega_c}\left[\upsilon_y(t)\sin(\omega_c\Delta t) + \upsilon_x(t)C(\omega_c\Delta t)\right] + \\ + \frac{1}{\omega_c{}^2}\left[-a_y^C(t)C(\omega_c\Delta t) + a_x^C(t)S(\omega_c\Delta t)\right] + O((\Delta t)^3), \end{aligned} \qquad (2.60)$$

Для трехмерного случая добавляется уравнение:

$$r_z(t+\Delta t) = r_z(t) + \Delta t\upsilon_z(t) + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 a_z^C(t) + O((\Delta t)^3), \qquad (2.61)$$

$$\upsilon_x(t+\Delta t)=\upsilon_x(t)\cos(\omega_c\Delta t)+\upsilon_y(t)\sin(\omega_c\Delta t)+$$
$$+\frac{1}{\omega_c}\left[-a_y^C(t)C(\omega_c\Delta t)+a_x^C(t)\sin(\omega_c\Delta t)\right]+ \qquad (2.62)$$
$$+\frac{1}{\omega_c{}^2}\left[\begin{array}{l}-\dfrac{a_x^C(t+\Delta t)-a_x^C(t)}{\Delta t}C(\omega_c\Delta t)-\\ -\dfrac{a_y^C(t+\Delta t)-a_y^C(t)}{\Delta t}S(\omega_c\Delta t)\end{array}\right]+O((\Delta t)^3),$$

$$\upsilon_y(t+\Delta t)=\upsilon_y(t)\cos(\omega_c\Delta t)-\upsilon_x(t)\sin(\omega_c\Delta t)+$$
$$+\frac{1}{\omega_c}\left[a_x^C(t)C(\omega_c\Delta t)+a_y^C(t)\sin(\omega_c\Delta t)\right]+ \qquad (2.63)$$
$$+\frac{1}{\omega_c{}^2}\left[\begin{array}{l}-\dfrac{a_y^C(t+\Delta t)-a_y^C(t)}{\Delta t}C(\omega_c\Delta t)+\\ +\dfrac{a_x^C(t+\Delta t)-a_x^C(t)}{\Delta t}S(\omega_c\Delta t)\end{array}\right]+O((\Delta t)^3),$$

Также, для трехмерного случая добавляется уравнение:

$$\upsilon_z(t+\Delta t)=\upsilon_z(t)+\frac{1}{2}\Delta t\left[a_z^C(t)+a_z^C(t+\Delta t)\right]+O((\Delta t)^3), \qquad (2.64)$$

где $S(\omega_c\Delta t)\equiv\sin(\omega_c\Delta t)-\omega_c\Delta t,\ C(\omega_c\Delta t)\equiv\cos(\omega_c\Delta t)-1.$

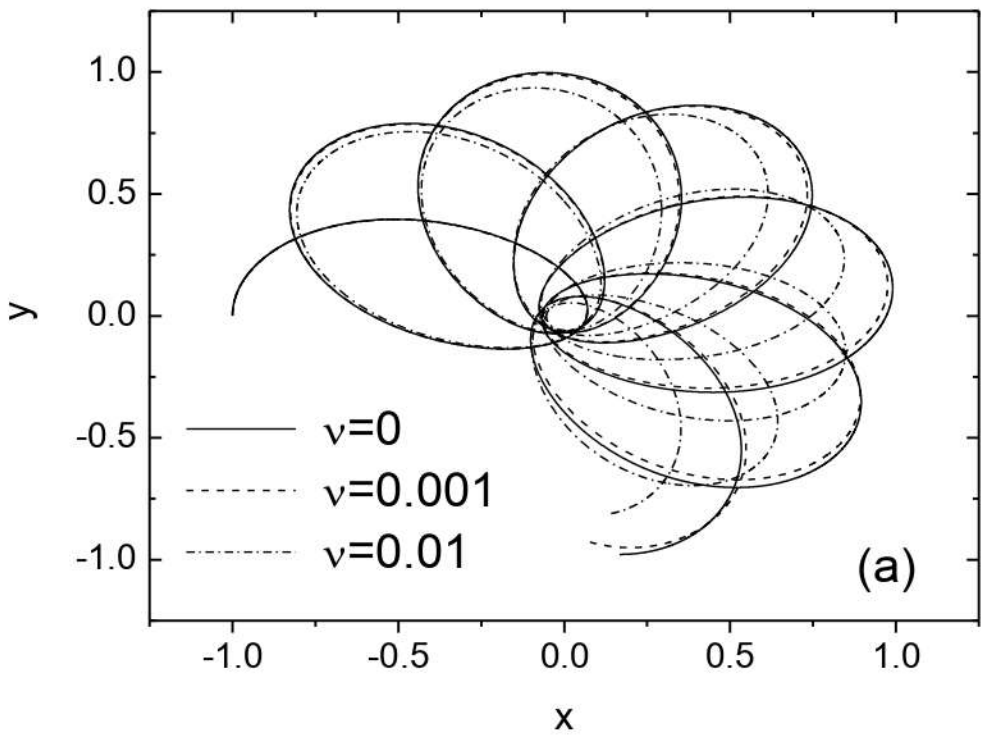
Рассмотрим следующий пример. Рассчитаем траекторию заряженной частицы (заряд и масса которой равны $q_1=-1, m_1=1$), движущейся в газовой среде с коэффициентом трения ν, в кулоновском поле второй неподвижной заряженной частицы ($q_2=1$) и в статическом однородном внешнем магнитном поле. В начальный момент времени $t=0$ положение и скорость первой частицы определяются векторами $\vec{r}(0)=(-1,0,0)$ и $\vec{\upsilon}(0)=(0,1,0)$, соответственно. Вторая частица находится в точке начала координат (0,0,0). Тогда ускорение первой частицы задается как:

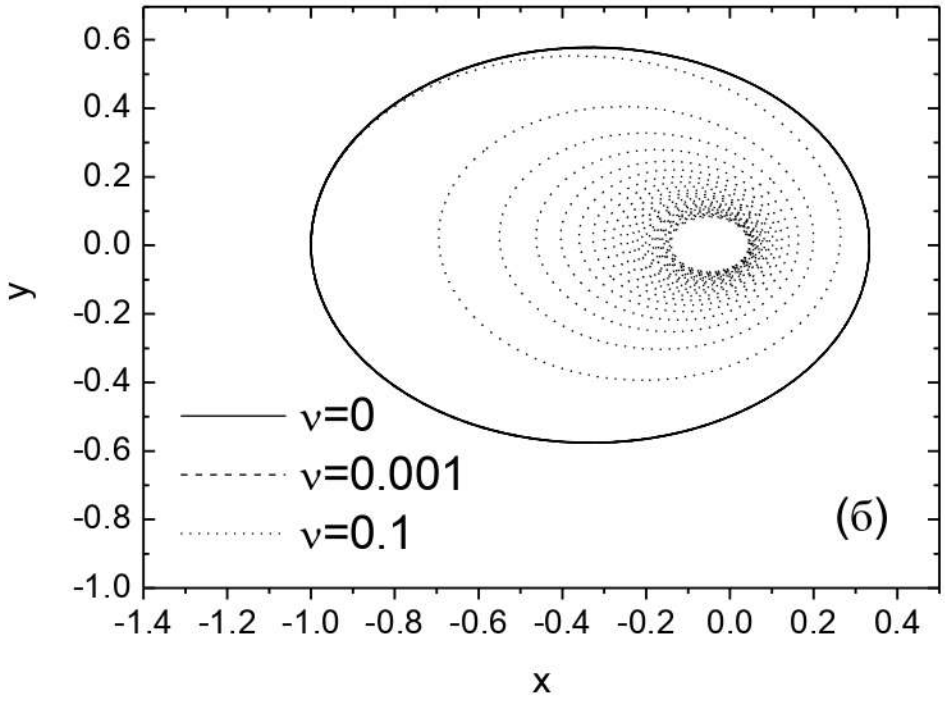
$$\vec{a}(t)=-\frac{\vec{r}}{|\vec{r}|^3}-\omega_c\vec{e}_z\times\vec{\vartheta}(t)-\nu\vec{\vartheta}(t). \qquad (2.65)$$

Решаем уравнения движения численно от $t=0$ до $t=20$ в широком диапазоне изменения параметров $\omega_c, \Delta t$ и ν обоими методами, инверсным алгоритмом (2.34)-(2.40) и алгоритмом разложения в ряд Тейлора (2.59)–(2.64).

На рисунке 2.3 приведены траектории, вычисленные при разных значениях ω_c и ν на основе уравнений (2.34)–(2.40), а также даны траектории, вычисленные по схеме разложения в ряд Тейлора, в которой не учитывается сила трения ($\nu = 0$). Как видно из этих графиков, при $\nu = 0.001$ траектории, вычисленные по (2.59)–(2.64) и [117] практически совпадают, с увеличением ν появляются заметные отличия. Также видно, что с увеличением магнитного поля помимо вращения вокруг силового центра электрического поля появляются ларморовские вращения.

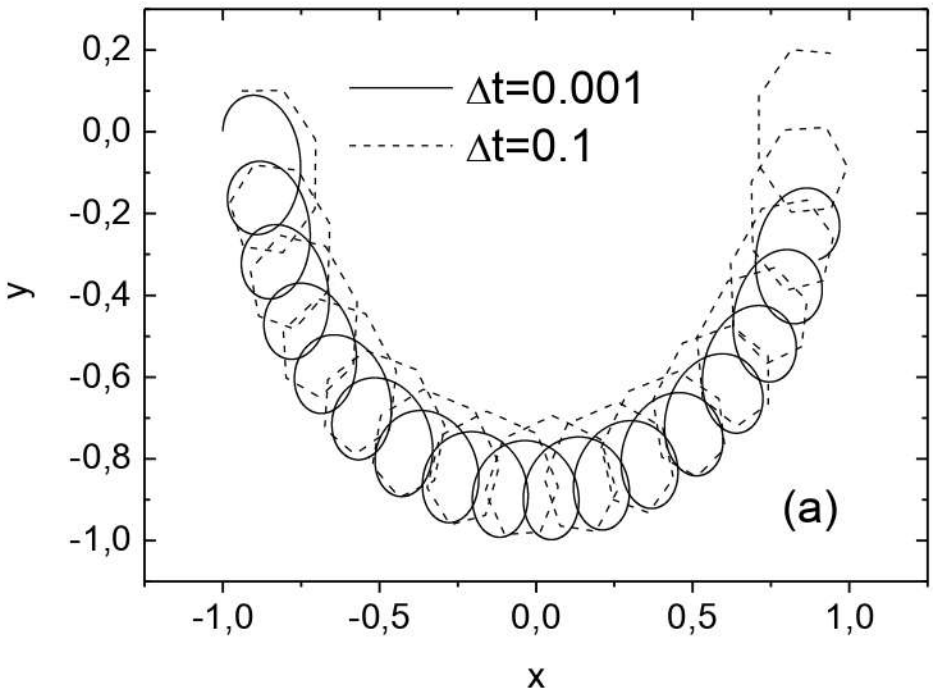
На рисунке 2.3(а) приведены траектории, вычисленные при разных значениях шага по времени Δt на основе уравнений (2.33)–(2.36), а также на рисунке 2.4(б) - по схеме разложения в ряд Тейлора (2.53)–(2.58). В первом случае из рисунка 2.4(а) видно, что увеличение шага по времени приводит к неустойчивости решений уравнений движения частицы. Наоборот, из рисунка 2.4 (б) видно, что алгоритм разложения в ряд Тейлора (2.53)–(2.58) обладает устойчивостью к изменению шага по времени, при $\Delta t = 0.1$ траектория становится более ломанной в связи с меньшим количеством расчетных точек на ларморовской окружности, однако отклонение этого решения от траектории, вычисленной при $\Delta t = 0.001$, остается в пределах допустимой погрешности. Таким образом решения, вычисленные по алгоритму (2.33)–(2.36), сильно зависят от Δt, в то время как решения по алгоритму разложения в ряд Тейлора (2.53)–(2.58) более устойчивы относительно изменения временного шага.

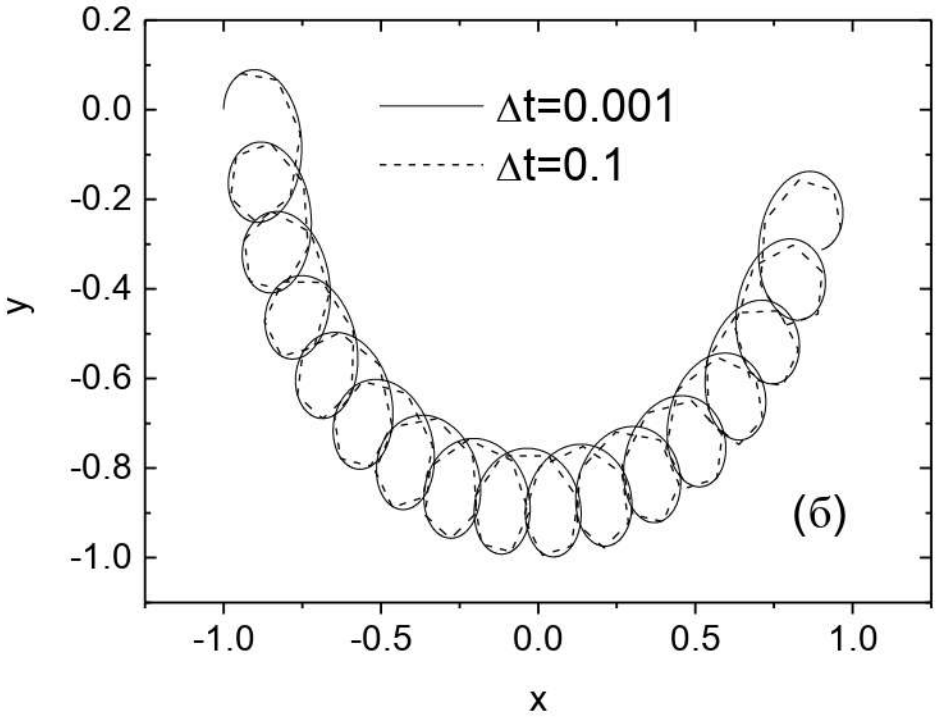




(а) - $\omega_c = 1$; (б) - $\omega_c = 0.001$.

Рисунок 2.3Траектории движения заряженной частицы с ускорением (2.65)





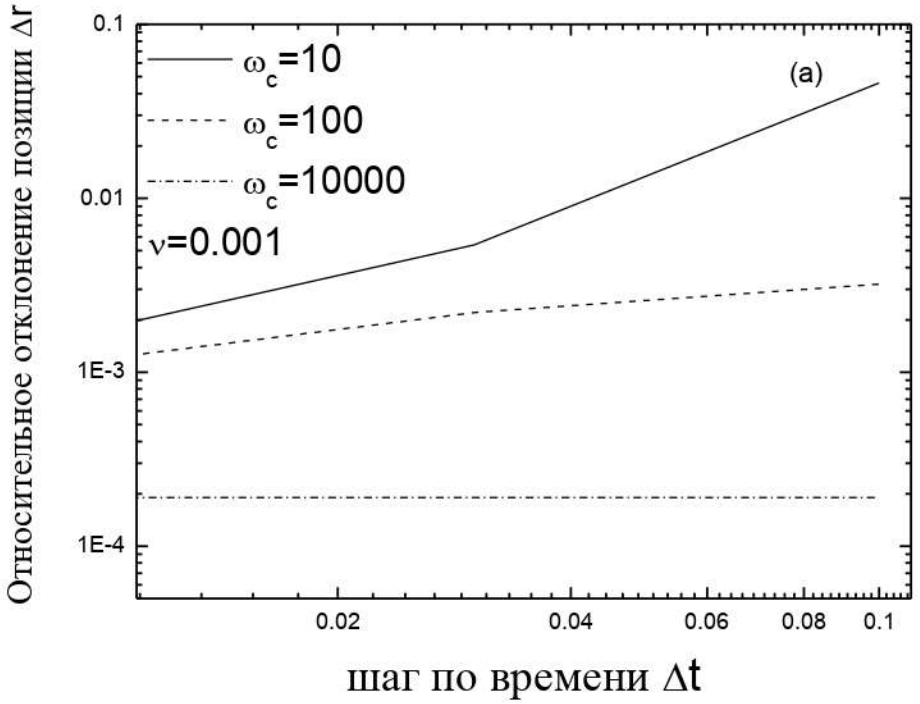
(а) – алгоритм (2.33)-(2.36) ; (б) – алгоритм (2.53)-(2.58).

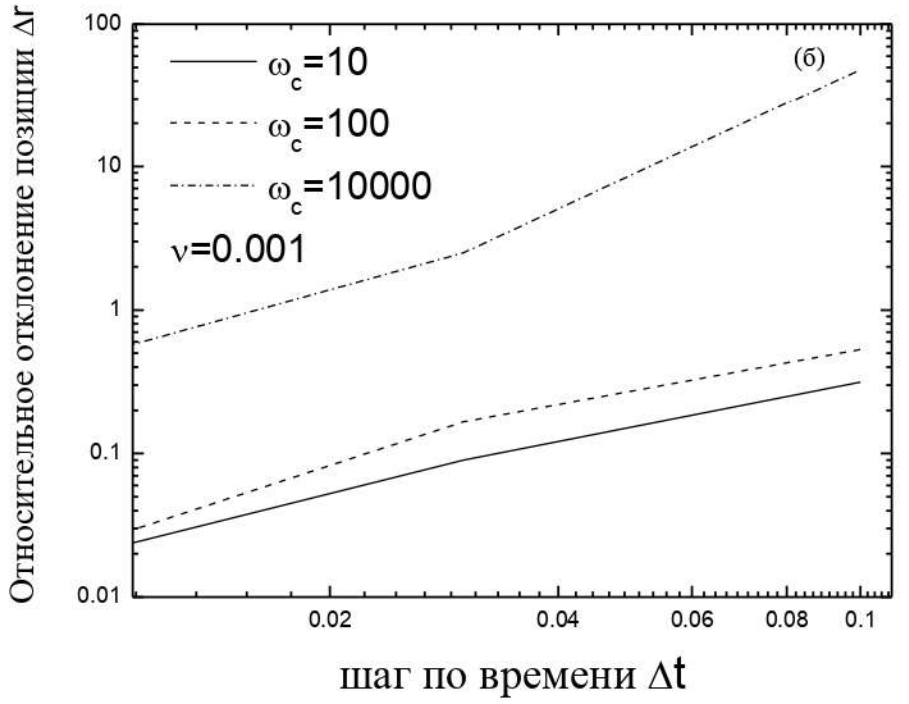
Рисунок 2.4 . Траектории движения заряженной частицы с ускорением (2.65) при $\omega_c = 10, \nu = 0.001$

Для оценки устойчивости схем можно использовать максимальное относительное отклонение модуля радиус-вектора от «точной» траектории, рассчитанной при шаге $\Delta t = 0.001$ по схеме:

$$\Delta r = \max_{0 \le t \le 20} \left| \frac{\left|\vec{r}_{\omega_c, \Delta t}(t)\right| - \left|\vec{r}_{\omega_c, ex}(t)\right|}{\left|\vec{r}_{\omega_c, ex}(t)\right|} \right|. \qquad (2.66)$$

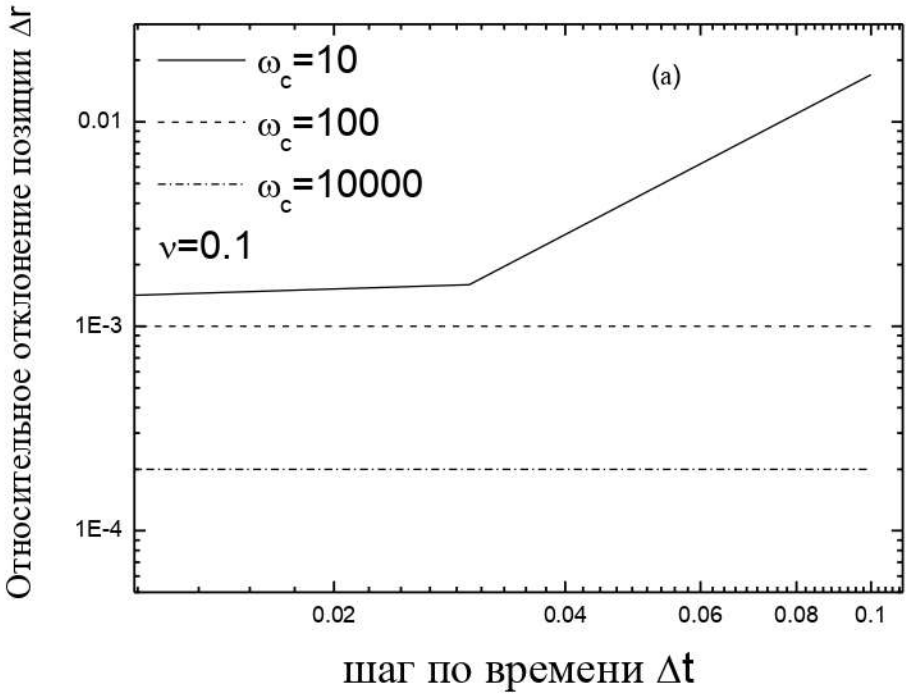
Зависимости максимального относительного отклонения модуля радиус-вектора от временного шага для двух схем приведены на рисунке 2.5 для случая $\nu = 0.001$ и на рисунке 2.6 для случая $\nu = 0.1$.

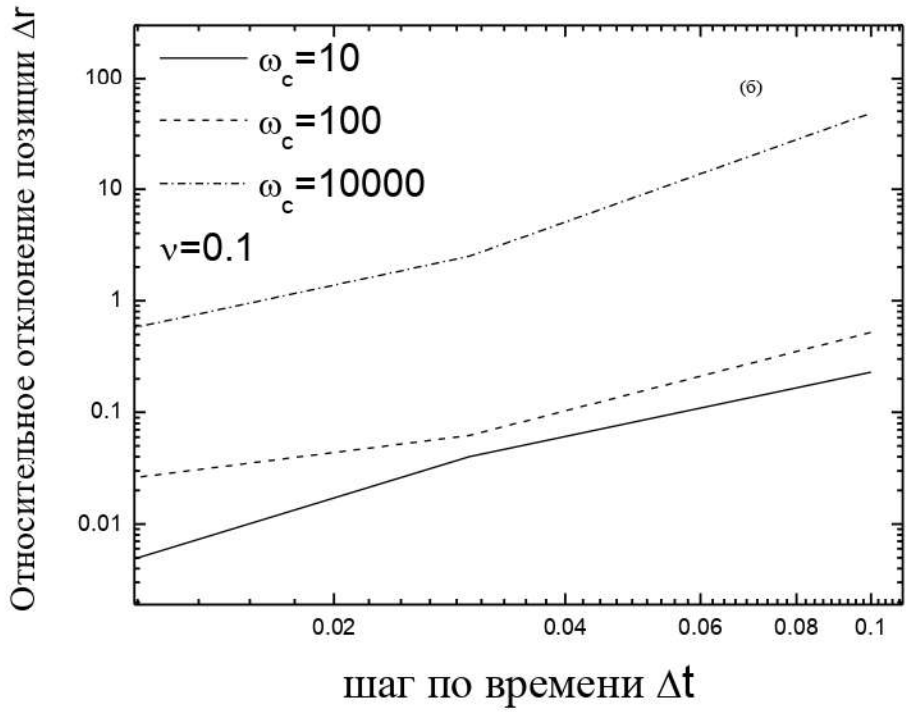




(а) – вычисления по схеме разложения в ряд Тейлора; (б) – обратный алгоритм, $\nu = 0.001$.

Рисунок 2.5 – Относительное отклонение позиции частицы, заданное выражением (2.66)





(а) – вычисления по схеме разложения в ряд Тейлора; (б) – обратный алгоритм.

Рисунок 2.6 – Относительное отклонение позиции частицы, заданное выражением (2.66) при $\nu = 0.10$

2.2 Алгоритм метода молекулярной и ланжевеновой динамики

Алгоритм выполнения компьютерного моделирования ЛД состоит из следующих этапов.

- Размещается N частиц внутри базовой ячейки. Для этого случайным образом разыгрывается начальная конфигурация:

$$\begin{aligned} x_i &= \frac{L}{2}(1-2\varsigma), \\ y_i &= \frac{L}{2}(1-2\varsigma), \\ z_i &= \frac{L}{2}(1-2\varsigma), \end{aligned} \tag{2.67}$$

где ς - каждый раз заново генерируемое случайное число от 0 до 1, $i = 1,2,...,N$, N - номера частиц.

- Разыгрываются скорости частиц:

$$\begin{aligned} \mathrm{v}_{xi} &= \varphi, \\ \mathrm{v}_{yi} &= \varphi, \\ \mathrm{v}_{zi} &= \varphi, \end{aligned} \tag{2.68}$$

где φ-случайные числа от $-\infty$ до $+\infty$, распределенные согласно распределению Гаусса вокруг нуля с квадратичным отклонением $\sigma=\sqrt{\mathrm{k_B T/m}}$.

Начальные координаты и скорости N частиц выбираются случайным образом с условием, что полный импульс системы равен нулю:

$$\sum_{i=1}^{N} m_i \vec{\upsilon}_i = 0\,. \tag{2.69}$$

Температура системы определяется как:

$$< T >= \frac{1}{3Nk_B} \sum_{i=1}^{N} m_i \upsilon_i^2 \quad . \tag{2.70}$$

- Решаются 6N уравнений движения для N частиц, в векторном виде записывающихся следующим образом:

$$\begin{aligned}
&\frac{dx_i}{dt} = \upsilon_{xi}, && \frac{d\upsilon_{xi}}{dt} = F_{xi},\\
&\frac{dy_i}{dt} = \upsilon_{yi}, && \frac{d\upsilon_{yi}}{dt} = F_{yi},\\
&\frac{dz_i}{dt} = \upsilon_{zi}, && \frac{d\upsilon_{zi}}{dt} = F_{zi},\\
& && i = 1,2,...,N,
\end{aligned} \qquad (2.71)$$

- Решение системы (2.71) разностной схемой Верле дает значения координат и скоростей всех частиц в момент времени $t + \Delta t$.
- Проверяются периодические граничные условия.
- Сохраняются координаты и скорости частиц.
- Переход к следующему моменту времени $t = t + \Delta t$. Рассчитанные значения координат и скоростей в момент времени $t + \Delta t$ принимаются как начальные.
- Выполняем предыдущие шаги необходимое количество раз, получаем микроскопические характеристики системы (координаты, скорости в разные моменты времени).

Блок-схема алгоритма метода молекулярной (ланжевеновой) динамики представлена на рисунке 2.7.

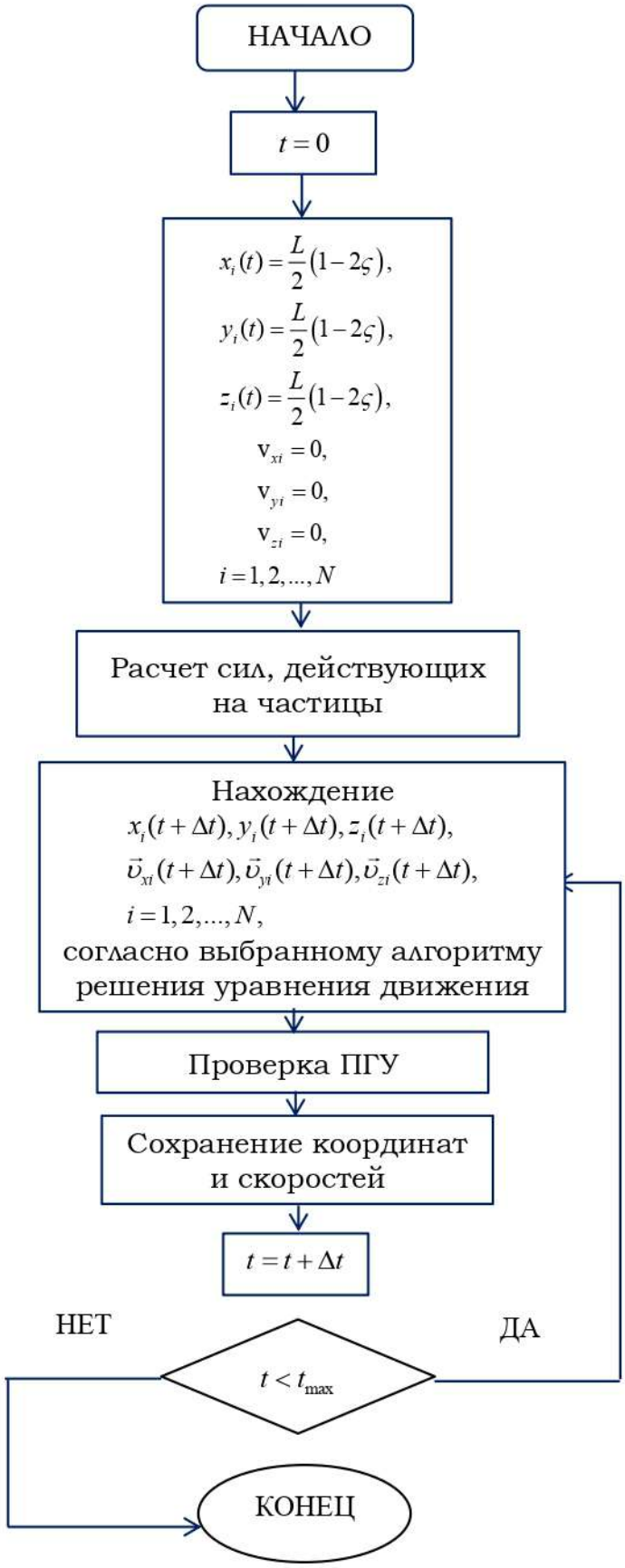


Рисунок 2.7 – Блок-схема алгоритма метода компьютерного моделирования ланжевеновой динамики

2.3 Зависимость энергии взаимодействия пылевых частиц от времени

Данные для расчетов, необходимых для исследования свойств пылевой плазмы, берутся с равновесного участка зависимости энергии взаимодействия от времени (так называемой, контрольной карты). На рисунке 2.8 представлена типичная контрольная карта численного эксперимента. Видно, что система с изначально случайными распределениями координат и скоростей быстро переходит в равновесное состояние с постоянной энергией. Именно с этого равновесного участка записываются данные о микросостояниях системы (координаты и скорости всех частиц) для последующей обработки. Отсчет времени наблюдения ведется с начала равновесного участка. Контрольные карты получены в широком диапазоне изменений параметров связи Γ, экранирования κ и трения θ. Как видно из рисунка 2.8, параметр трения не влияет на энергию взаимодействия, которая обуславливается лишь параметрами связи и экранировки. На рисунке 2.9 представлены контрольные карты, полученные при разных Γ. Видно, что с увеличением параметра связи энергия взаимодействия увеличивается, то же самое происходит при уменьшении параметра экранировки κ.

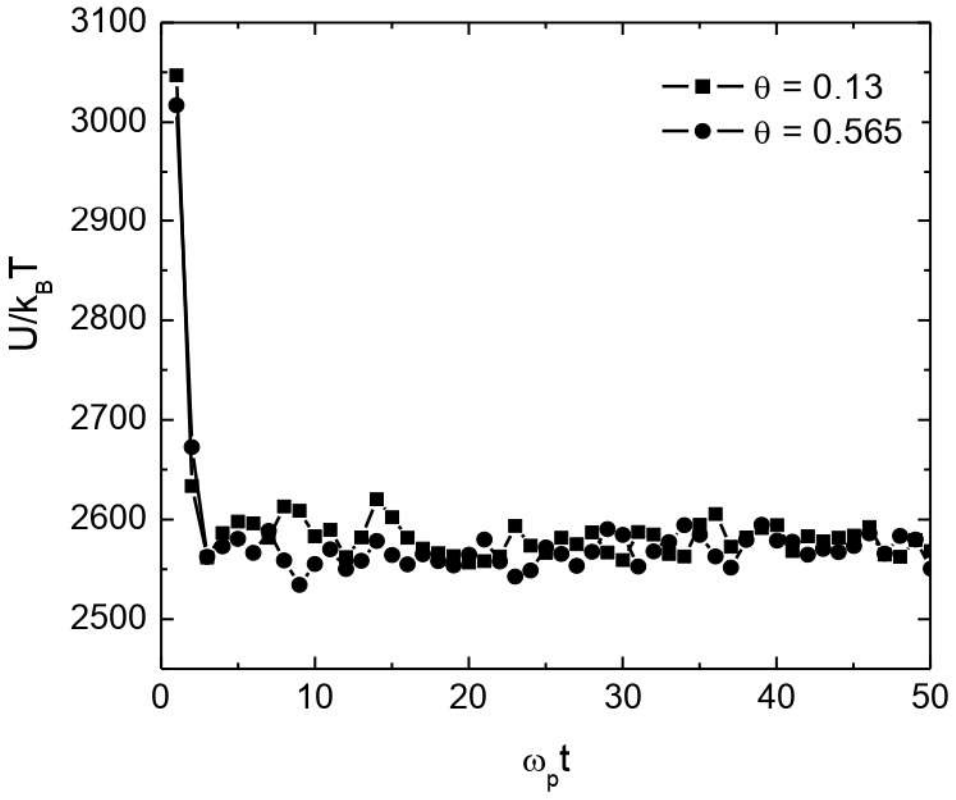


Рисунок 2.8 – Контрольные карты моделирования, Γ=50 и $\kappa = 2$

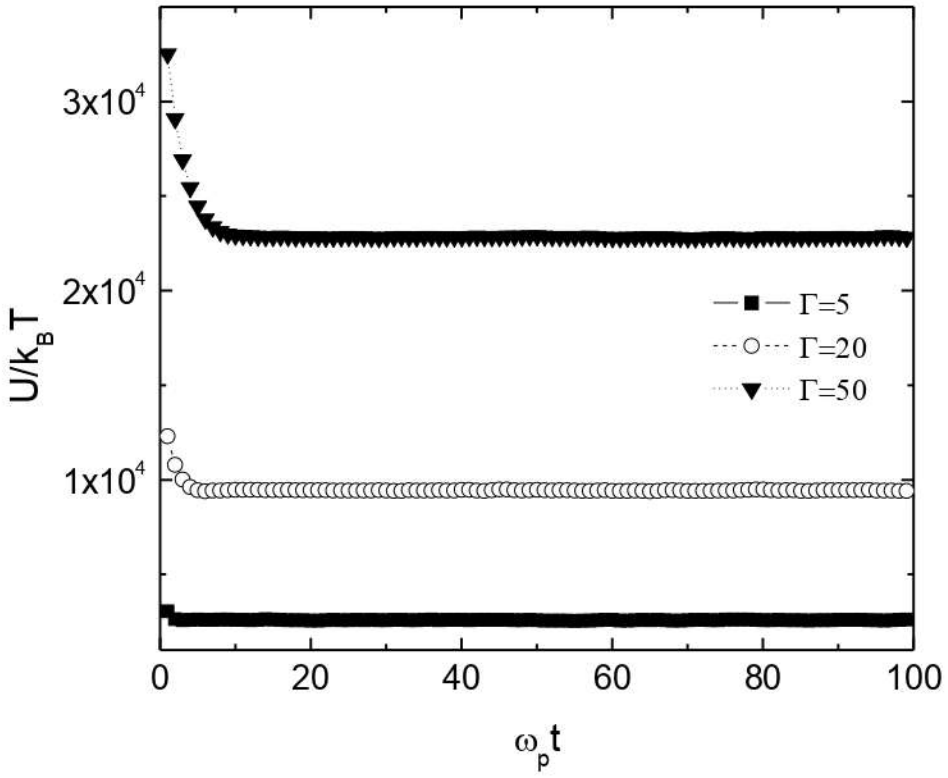


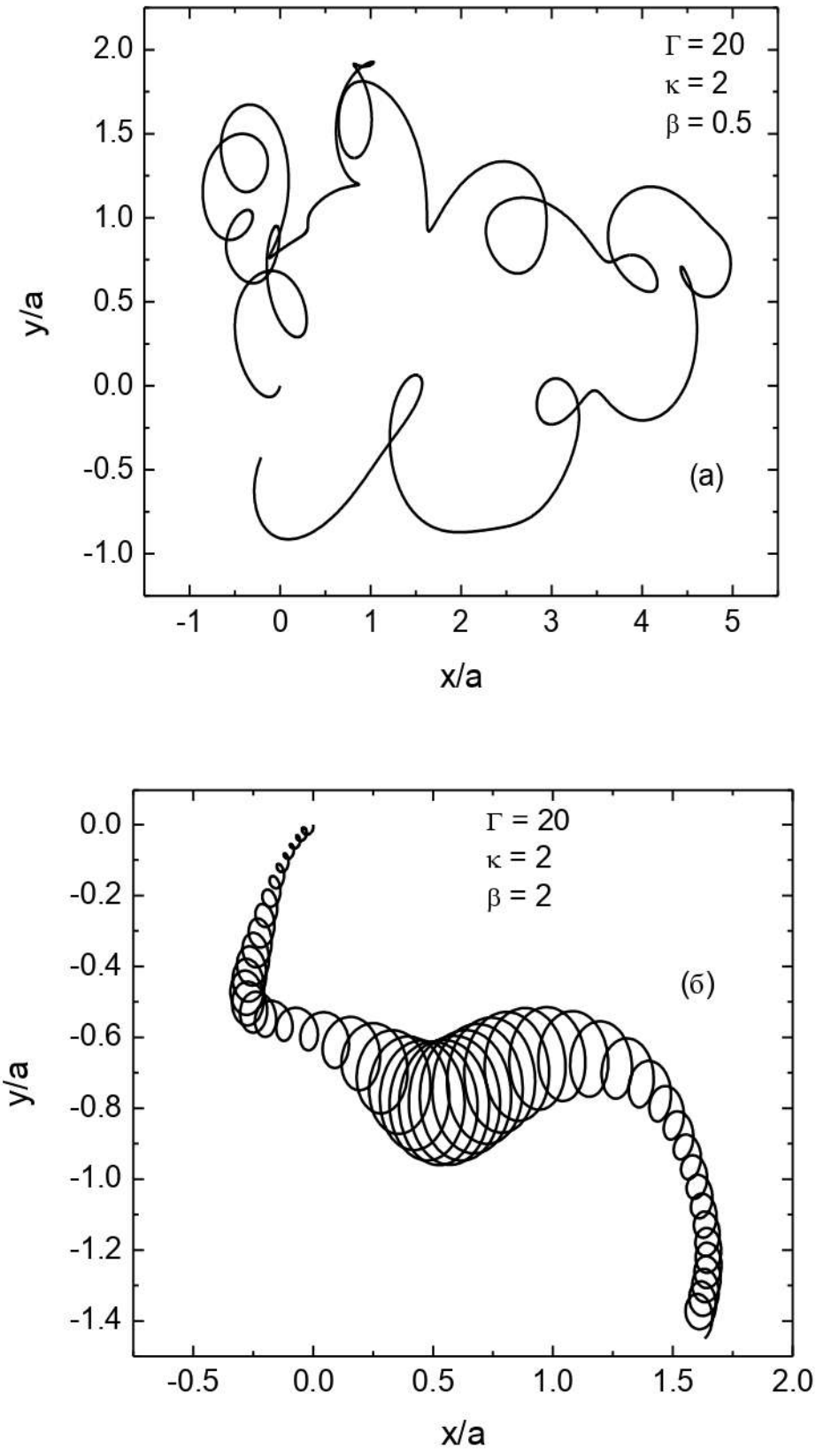
Рисунок 2.9 – Контрольные карты моделирования, $\kappa = 2$, $\theta = 0.13$

2.4 Анализ траекторий движения частиц в разных режимах

Компьютерное моделирование было проведено в широком диапазоне изменения параметров системы. Для исследования микроскопической динамики пылевых частиц во внешнем магнитном поле были построены траектории $(y - x)$ и фазовые портреты $(v_x - x)$ индивидуальных частиц в широком диапазоне изменения параметра связи, параметра экранировки и параметра магнитного поля.

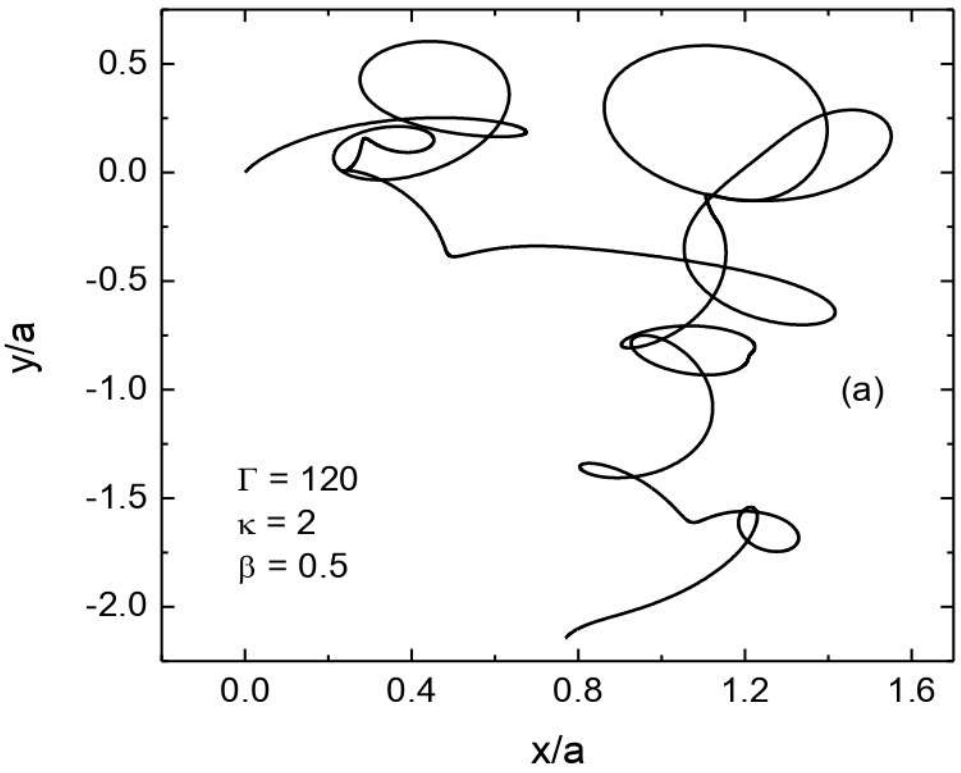
На рисунках 2.10 и 2.11 представлены траектории $(y - x)$ пылевых частиц при разных значениях параметра связи, параметра магнитного поля и параметра экранировки за один и тот же промежуток времени. Данные результаты получены без учета влияния силы трения в уравнениях движения частиц. В соответствии с рисунками 2.10(а), 2.11(а), можно увидеть, что с увеличением параметра связи Γ пылевые частицы локализуются в более ограниченной области пространства. Такая же картина наблюдается на рисунках 2.10(б), 2.11(б) при разных значениях параметра связи для фиксированного значения параметра магнитного поля $\beta = 2$ и параметра экранировки $\kappa = 2$, причем на данных графиках магнитное поле больше по сравнению с магнитным полем на графиках 2.10(а), 2.11(а). Локализация пылевых частиц с увеличением магнитного поля происходит как вдоль x так и вдоль y, что можно увидеть, сравнив рисунок 2.10(а) с рисунком 2.11(б), а также рисунок 2.10(а) с рисунком 2.10(б). Также из рисунков 2.10(б), 2.11(б) можно увидеть винтовое движение частиц во внешнем магнитном поле.

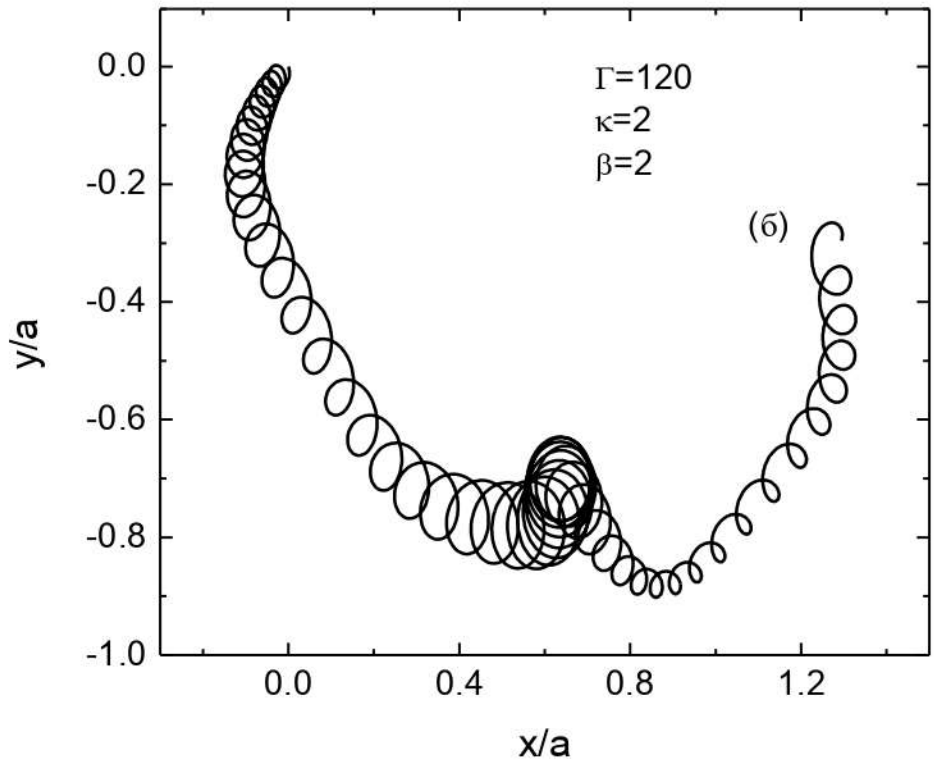
По рисункам 2.11, 2.12 можно исследовать влияние параметра магнитного поля и параметра связи на фазовые портреты $(v_x - x)$ пылевых частиц. Локализация частиц в ограниченной области пространства с увеличением, как параметра связи, так и параметра магнитного поля наблюдается и на этих рисунках. Отметим, что траектории и фазовые портреты пылевых частиц показаны при фиксированном значении параметра экранировки $\kappa = 2$, при других значениях параметра экранировки характерное поведение траекторий и фазовых портретов имеет аналогичный вид.



(а) $-\beta = 0.5$; (б) $-\beta = 2.0$.

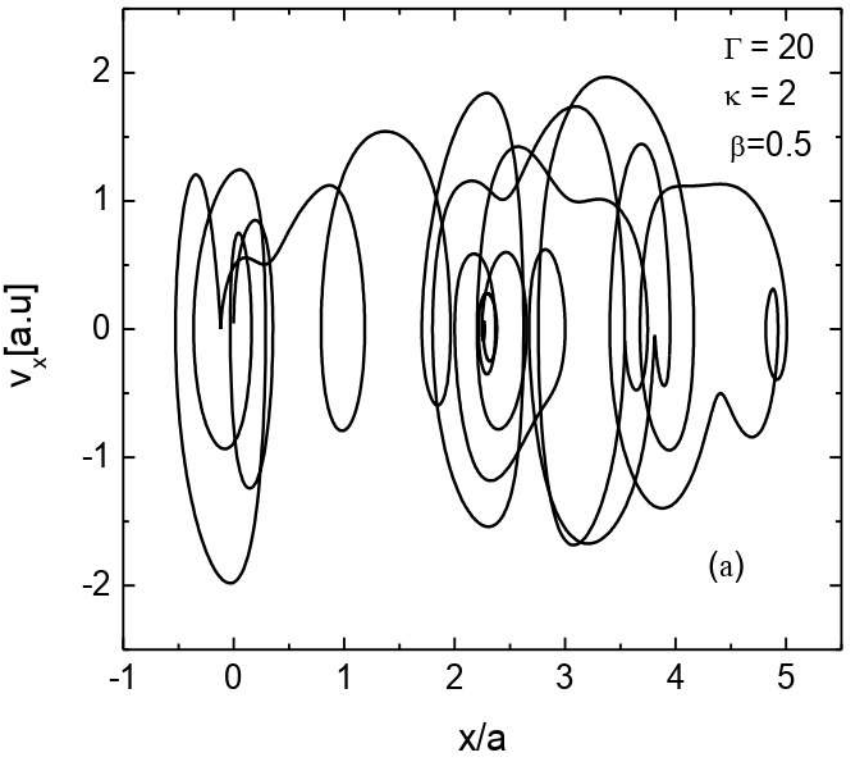
Рисунок 2.10 – $(y-x)$ траектория пылевой частицы при $\Gamma = 20, \kappa = 2$

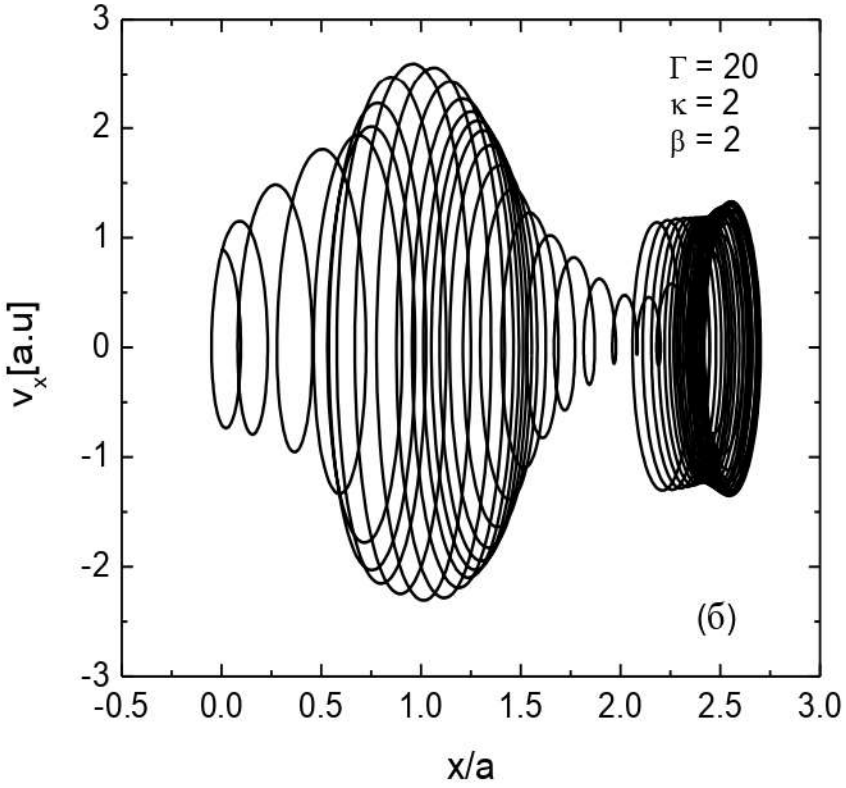




(а) $-\beta = 0.5$; (б) $-\beta = 2.0$.

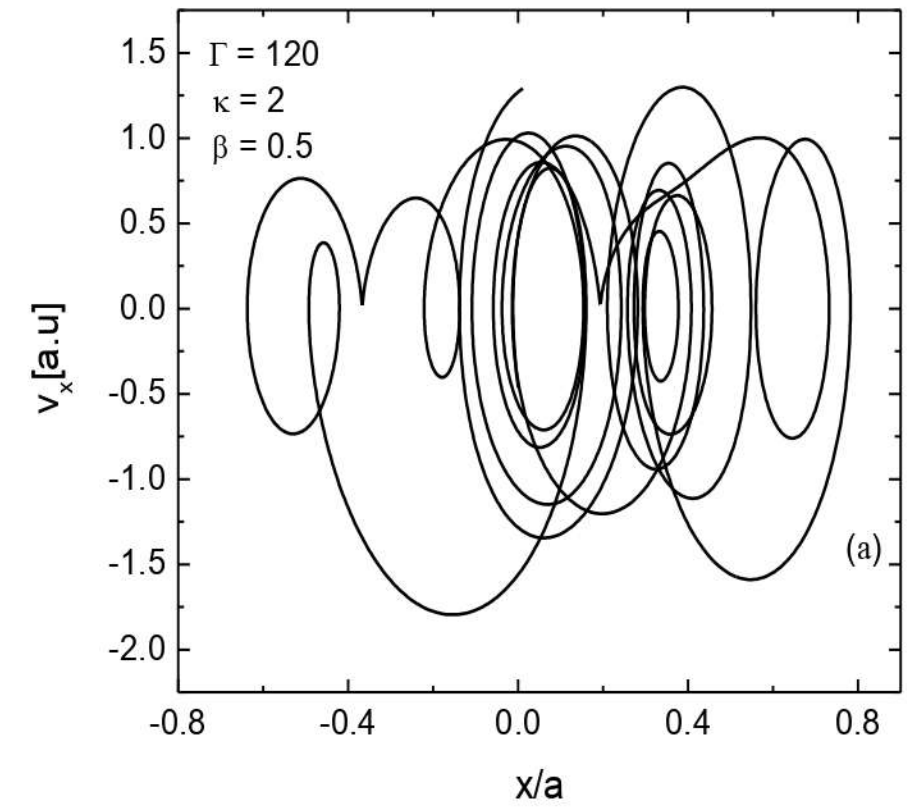
Рисунок 2.11 – $(y-x)$ траектории пылевой частицы при $\Gamma = 120, \kappa = 2$

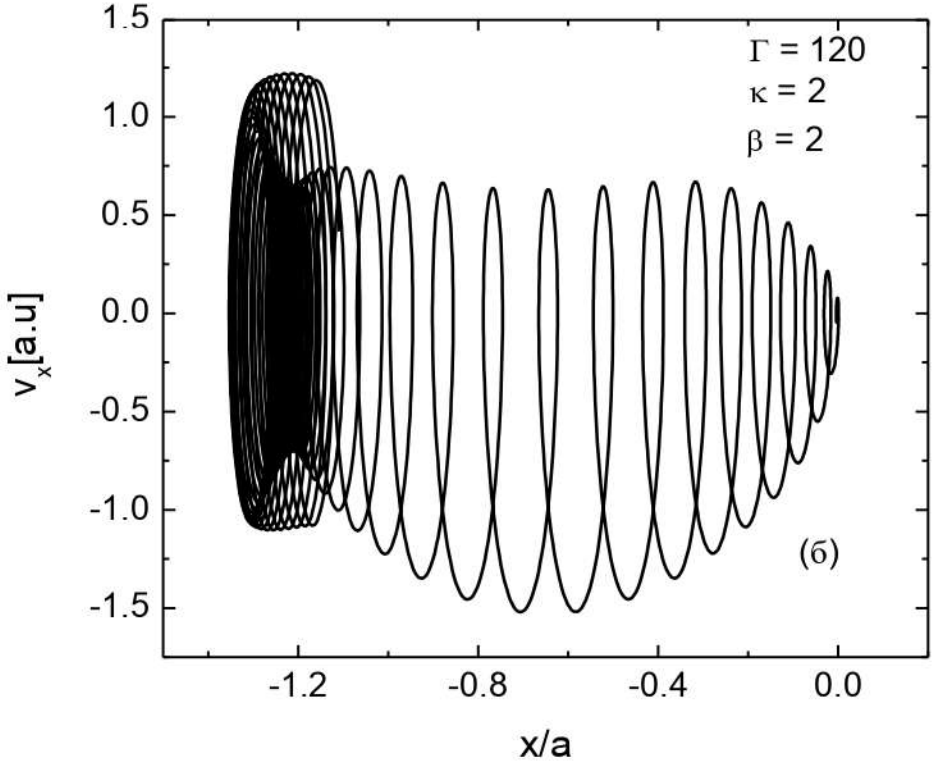




(а) $-\beta = 0.5$; (б) $-\beta = 2.0$.

Рисунок 2.12 – $(v_x - x)$ фазовый портрет пылевой частицы при $\Gamma = 20, \kappa = 2$





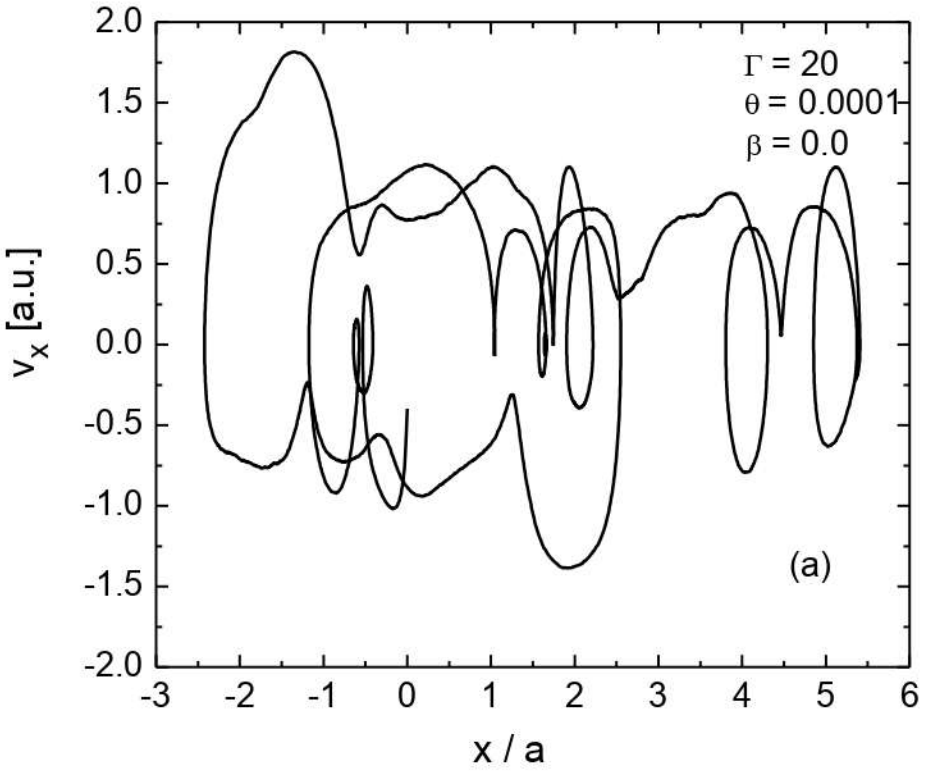
(а) $-\beta = 0.5$; (б) $-\beta = 2.0$.

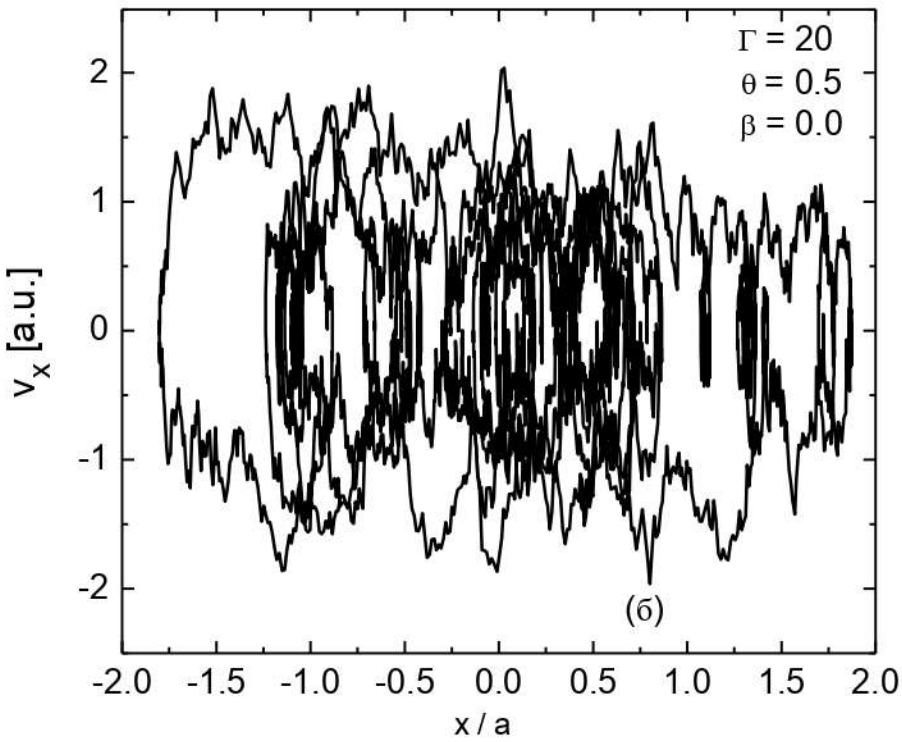
Рисунок 2.13 – $(v_x - x)$ фазовый портрет пылевой частицы при $\Gamma = 120, \kappa = 2$

Следующие результаты приведены без учета влияния силы Лоренца в уравнении движения частиц, т.е. при $\beta = 0$. На рисунке 2.14 представлены фазовые портреты частиц с учетом диссипации в системе для разного значения параметра трения. На рисунке 2.14 (а) показан фазовый портрет при малом значении параметра трения. В данном случае пылевые частицы двигаются свободнее. При увеличении коэффициента трения траектория частиц показывает сильную локализацию пылевых частиц, что видно на рисунке 2.14 (б). Безразмерное время записи $\omega_p \Delta t = 500$.

На рисунках 2.15 и 2.16 показаны сегменты траекторий частиц для различных параметров. Рисунок 2.16 показывает результаты при малом значении ($\beta = 10^{-6}$) и при большом значении параметра магнитного поля ($\beta = 1.5$). На обоих рисунках коэффициент трения увеличивается. Время записи для всех случаев $\omega_p T = 200$.

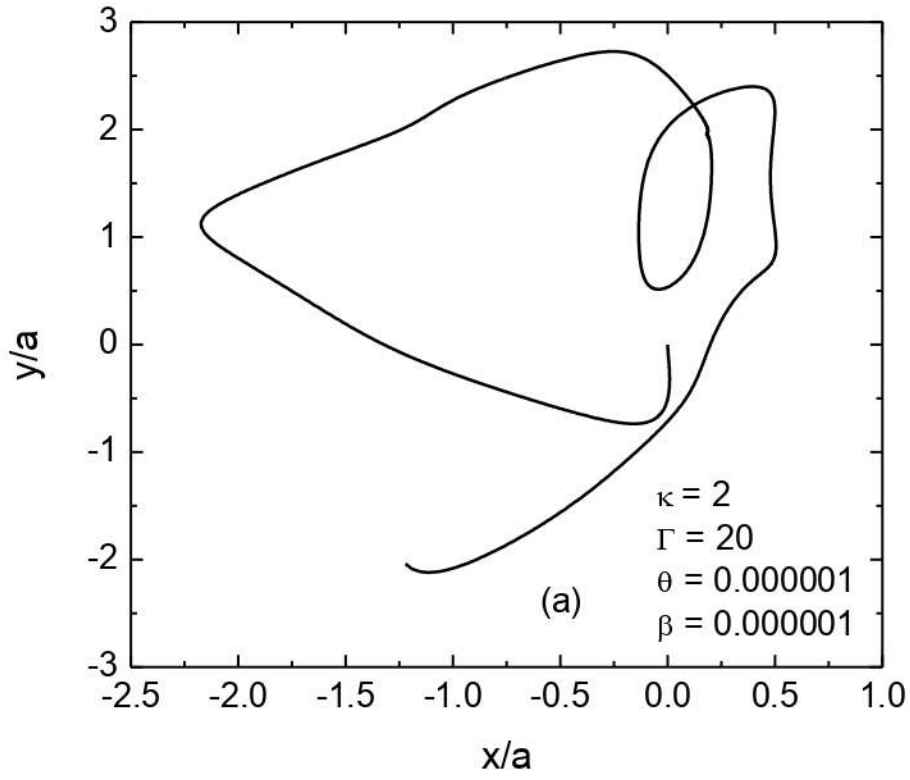
Траектория, представленная на рисунке 2.15(а) для малого значения параметра магнитного поля и силы трения, является гладкой, а отклонения скорости обусловлены межчастичными «столкновениями». Когда вводится трение, характер движения меняется, и более частые изменения направления движения проявляются уже на рисунке 2.15(б) при $\theta = 0.2$. При дальнейшем увеличении трения эти «разрывы» становятся еще более частыми, и частица стремится совершить случайное движение. Также размер координатных областей, внутри которых находится частица во время записи, уменьшается.

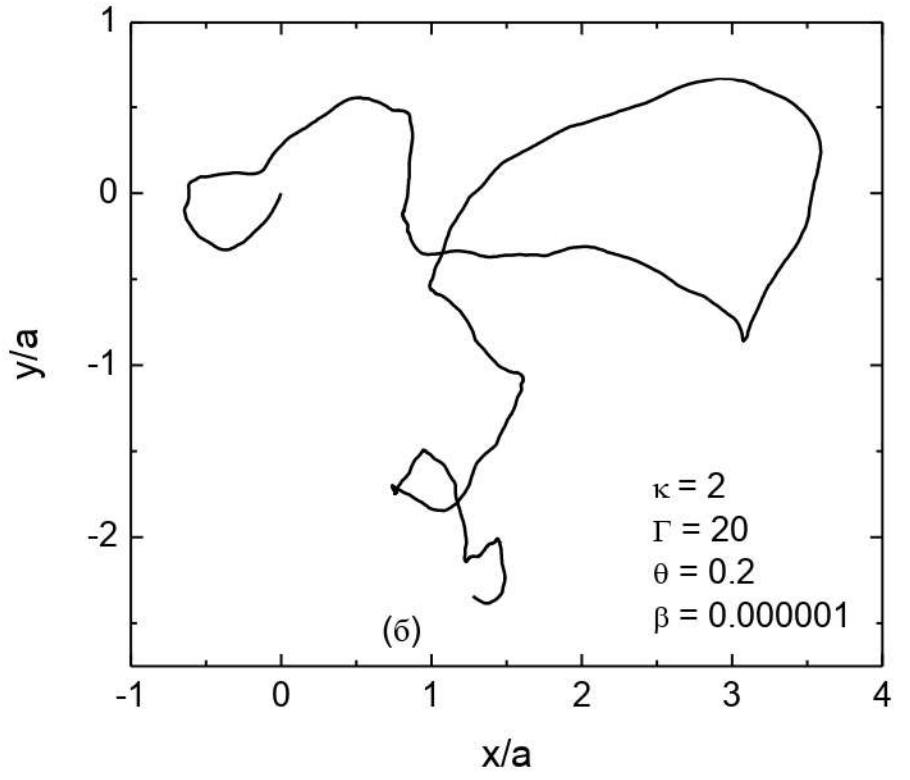




(а) – $\theta = 0.0001$; (б) – $\theta = 0.5$.

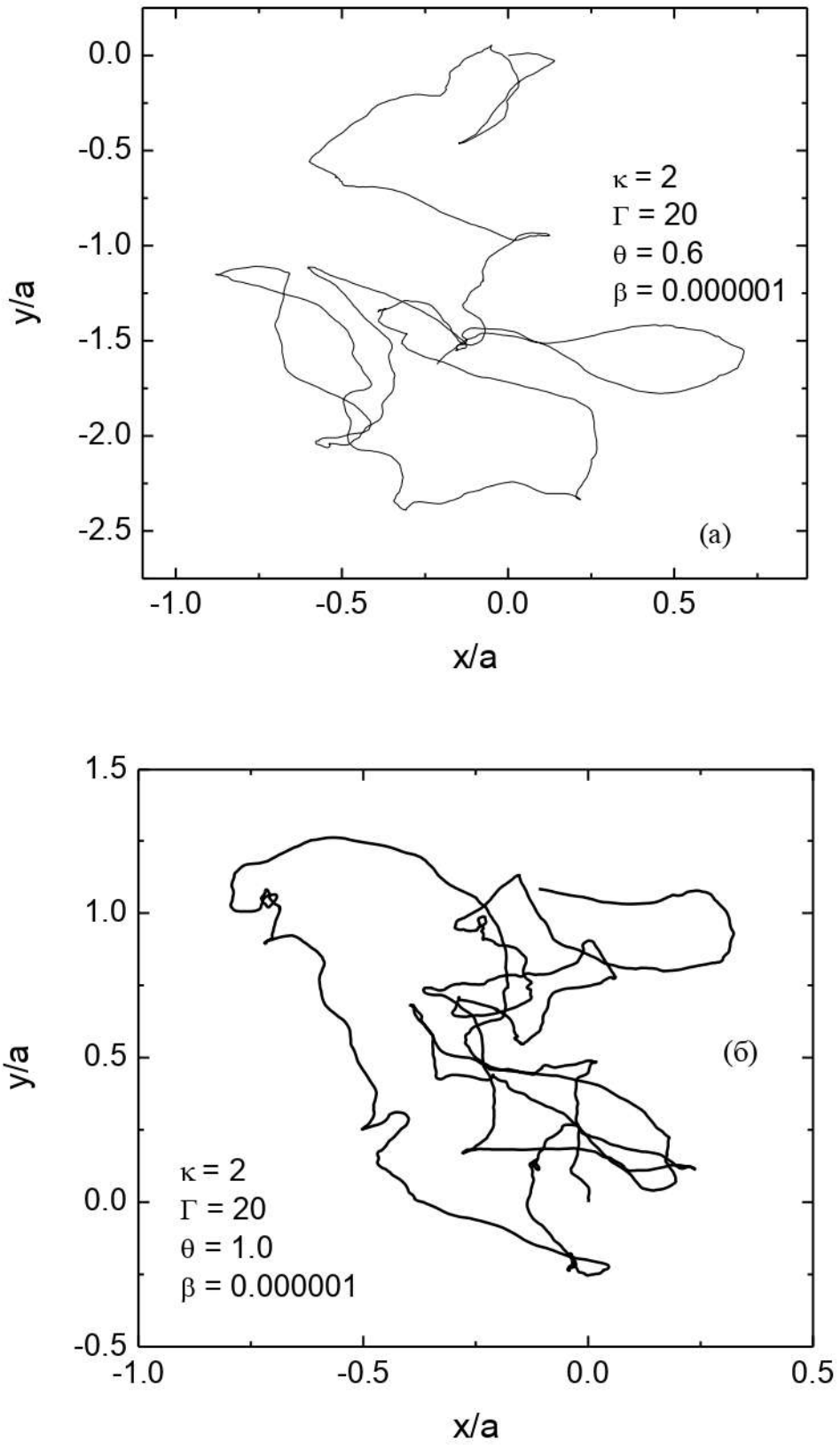
Рисунок 2.14 – Фазовые портреты (x, υ_x) пылевых частиц при разных значениях параметра трения, $\kappa = 1$





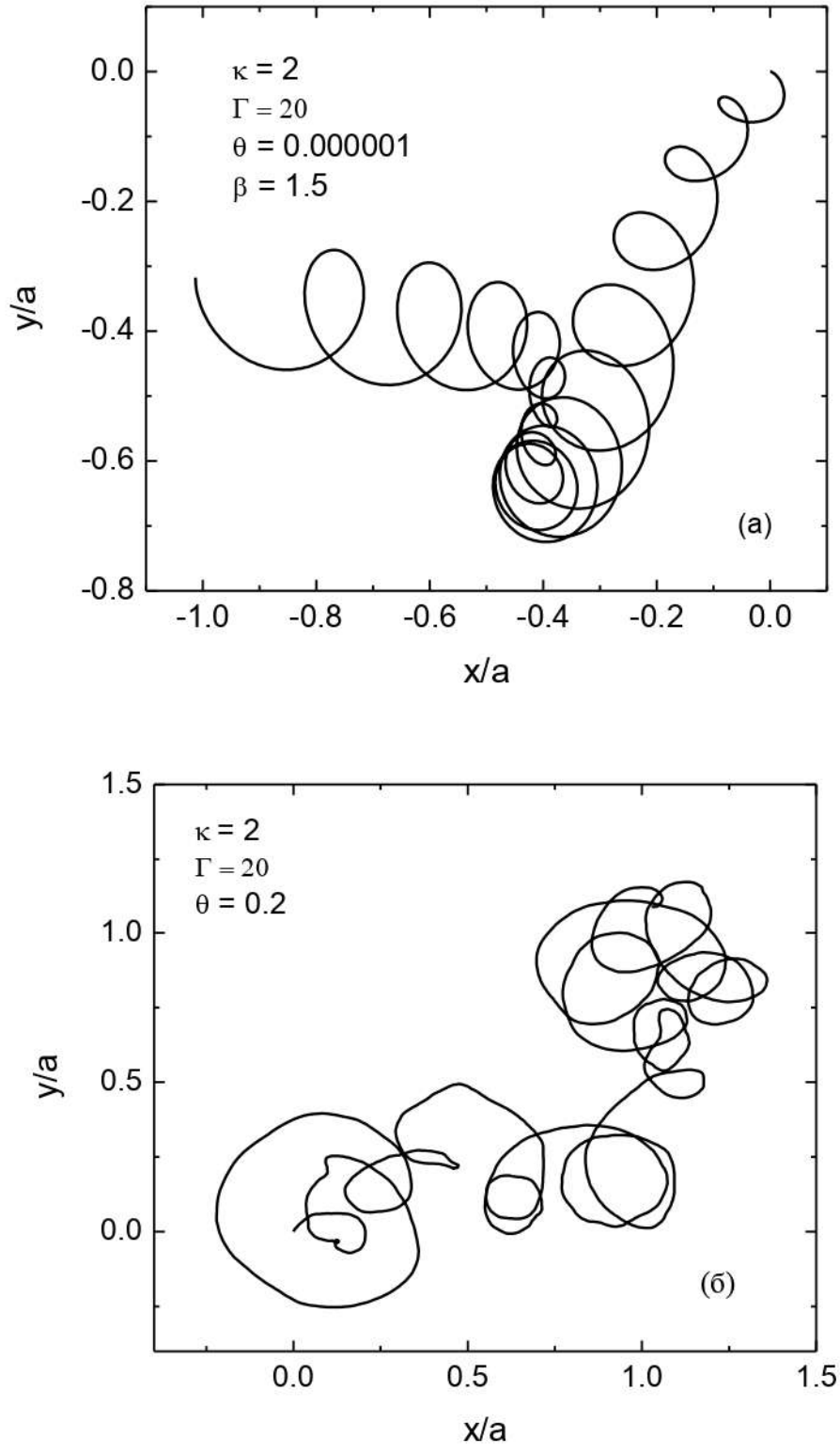
(а) – $\theta = 0.000001$; (б) – $\theta = 0.2$.

Рисунок 2.15 – Траектория индивидуальной частицы для малого значения параметра магнитного поля $\beta = 10^{-6}$, $\Gamma = 20$ и $\kappa = 2$



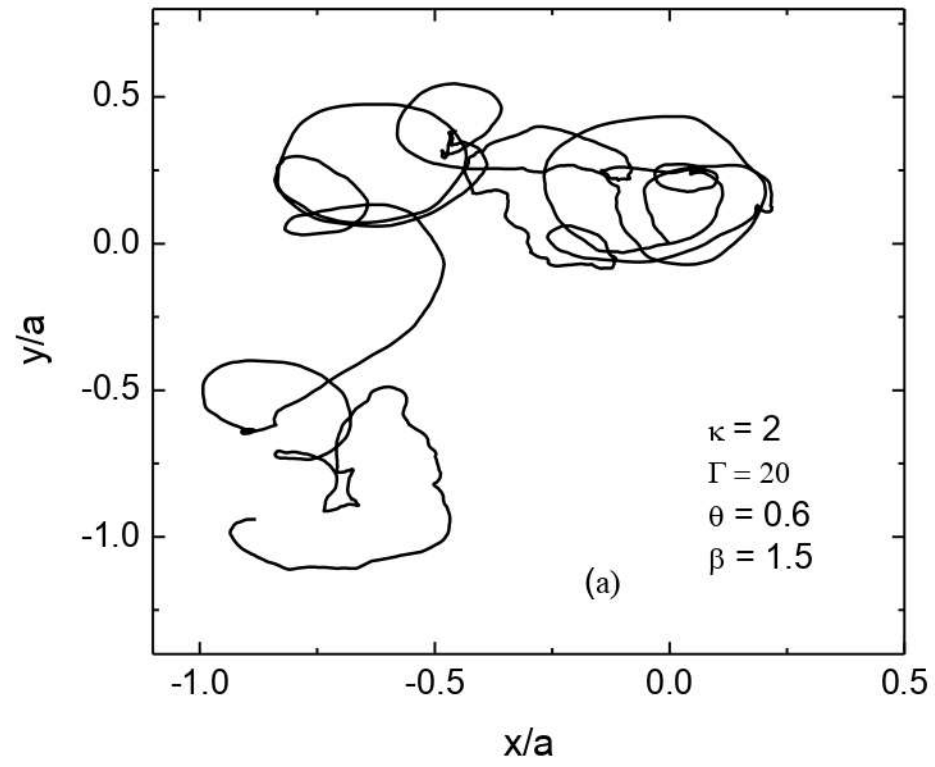
(а) – $\theta = 0.6$; (б) – $\theta = 1.0$.

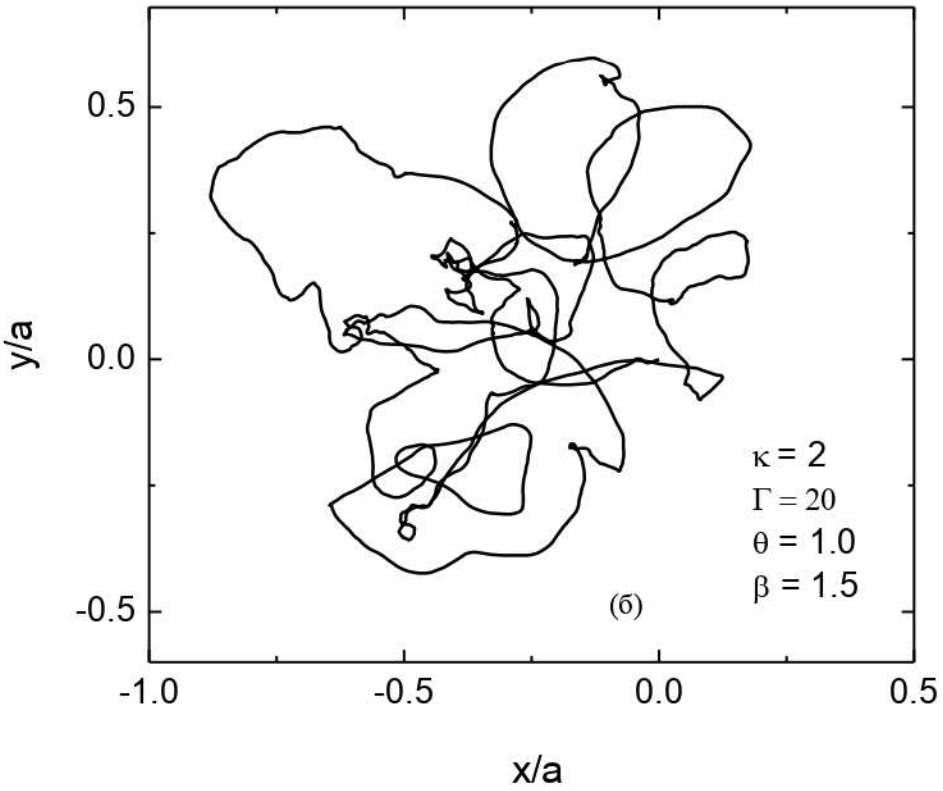
Рисунок 2.16 – Траектория индивидуальной частицы для малого значения параметра магнитного поля $\beta = 10^{-6}$, $\Gamma = 20$ и $\kappa = 2$



(а) – $\theta = 0.000001$; (б) – $\theta = 0.2$.

Рисунок 2.17 – Траектория индивидуальной частицы для малого значения параметра магнитного поля $\beta = 1.5$, $\Gamma = 20$ и $\kappa = 2$





(а) $\theta = 0.6$, (б) $\theta = 1.0$

Рисунок 2.18 – Траектория индивидуальной частицы для малого значения параметра магнитного поля $\beta = 1.5$, $\Gamma = 20$ и $\kappa = 2$

На рисунках 2.17(а) показана траектория одной частицы при малом значении параметра трения для $\beta = 1.5$. Траектория частиц круговая за счет циклотронного движения частицы в сочетании с диффузией и взаимодействием с другими частицами. Такое сильное магнитное поле значительно усиливает локализацию частицы. Когда вводится трение (рисунок 2.17(б) $\theta = 0.2$), круговые движения все еще хорошо видны, однако, они искажены случайными изменениями скорости за счет влияния трения. Таким образом, ограничивающий эффект магнитного поля уменьшается. При дальнейшем увеличении коэффициента трения круговые движения видны только для отдельных частей траектории, как показано на рисунке 2.18(а) для $\theta = 0.6$, в то время как они почти полностью исчезают на рисунке 2.18(б), что показывает сильно затухающий случай при $\theta = 1$. В последнем случае локализация преобладает больше за счет трения. Временной масштаб движения для одного круга (период) для этого сильно намагниченного ($\omega_c \gg \omega_E$) случая равен $\omega_c T = \beta \omega_p T \sim 2\pi$, из которого $vT \approx \theta(2\pi / \beta) \approx 0.83$, то есть временные рамки изменения направления движения примерно совпадают с циклотронным периодом. Мы предполагаем, что это эффект, который частично разрушает эффективность удержания частиц магнитным полем. Когда число столкновений за цикл удваивается, положительный эффект трения на локализацию начинает доминировать.

3 МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

3.1 Парная функция распределения пылевых частиц

Одной из важнейших структурных характеристик многочастичной системы являются парные корреляционные функции распределения $g(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$, которые определяют вероятность нахождения первой частицы в точке $\vec{r}_1$ и второй в точке $\vec{r}_2$. В случае изотропной системы парная функция зависит лишь от расстояния между частицами и называется радиальной функцией распределения $g(r)$. Потенциал взаимодействия частиц влияет на поведение функции распределения. Там, где потенциал взаимодействия стремится к нулю, т.е. на больших расстояниях имеем некоррелированное распределение.
Вероятность нахождения частиц на заданном расстоянии принято рассматривать относительно некоррелированного распределения, следовательно, радиальные функции с ростом межчастичного расстояния должны стремиться к единице.

На основе обработки данных компьютерного моделирования можно получить радиальные функции распределения частиц. Когда имеется набор координат частиц в разные моменты времени (конфигурации), подсчет радиальной функции распределения 2-х мерной системы осуществляется следующим образом. Для каждой частицы пространство вокруг этой частицы от 0 до $\frac{L}{2}$ делится на круговые слои толщиной Δr и подсчитывается число частиц в каждом слое $\Delta N(r)$. Полученные значения усредняются по всем частицам данной конфигурации и по различным конфигурациям траектории марковской цепи.

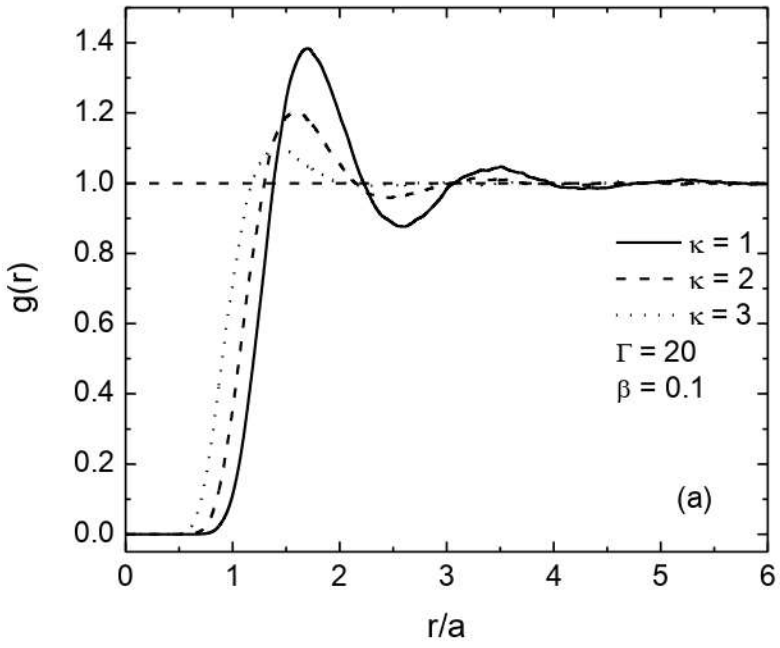
Парная корреляционная функция вычисляется по формуле

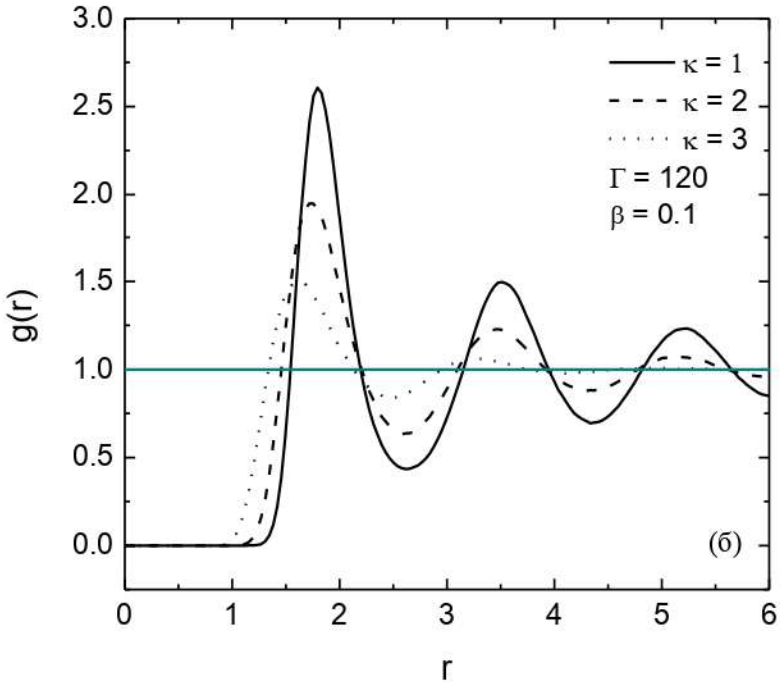
$$g(r) = \frac{v}{2\pi r} \cdot \frac{\Delta \bar{N}(r)}{\Delta r}, \qquad (3.1)$$

где $v = 1/n, \Delta \bar{N}(r)$- усредненное значение числа частиц в круговом слое. Вид корреляционной функции связан с фазовым состоянием системы.

На рисунке 3.1 представлены результаты по парным корреляционным функциям распределения частиц при разных значениях коэффициента экранировки для фиксированных значений параметра связи и параметра магнитного поля. Влияние связи в системе на парные корреляционные функции распределения частиц при фиксированных значениях параметра экранировки и параметра магнитного поля показано на рисунке 3.2. Из рисунков видно, что пик радиальной функции распределения увеличивается с увеличением параметра связи и с уменьшением параметра экранировки. Стоит отметить, что

внешнее магнитное поле не влияет на вид радиальной функции распределения частиц. Вычисления показывают, что расстояние, на котором находится первый минимум на парной корреляционной функции, не зависит от параметров плазмы и внешнего магнитного поля и равен $r_c \simeq 2.5$. Это означает, что частицы из ближайшего слоя в 2-х мерной пылевой плазме будут расположены в пределах r_c при любых условиях. Количество таких частиц было подсчитано и оно равно 6 для 2-х мерного случая, это число так называемых ближайших соседей, оно сохраняется при любой связи в системе и любых приложенных внешних полях. Сами частицы могут покидать это окружение, но их место занимает другая частица, таким образом, число частиц в окружении выделенной частицы сохраняется.





(а) – $\Gamma = 20$; (б) – $\Gamma = 120$.

Рисунок 3.1 – Парная корреляционная функция распределения частиц для разного значения параметра экранировки при фиксированных значениях параметра магнитного поля $\beta = 0.1$

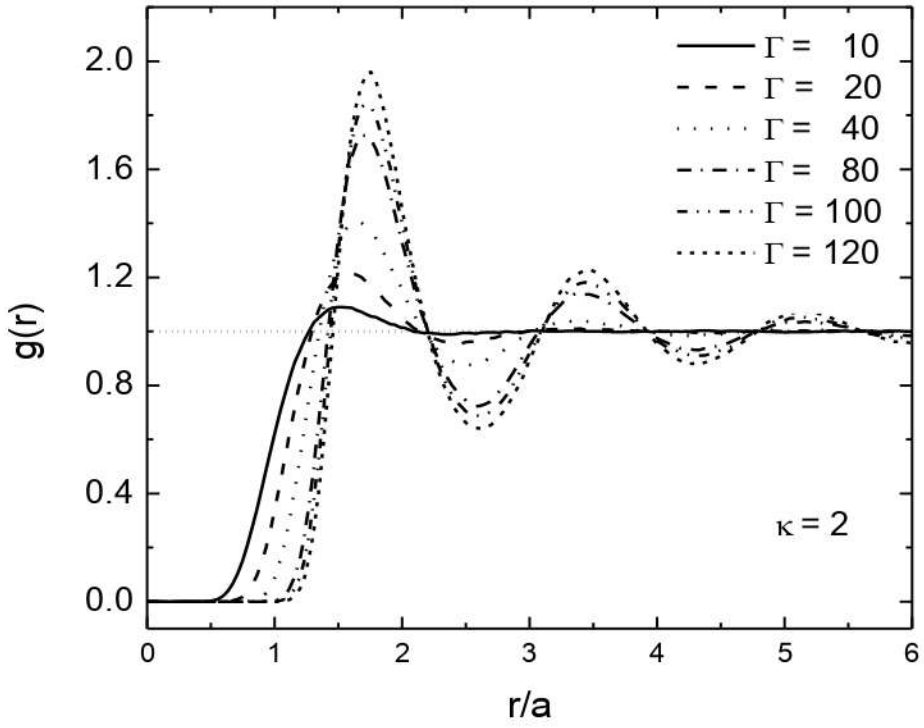


Рисунок 3.2 – Парная корреляционная функция распределения частиц для разного значения параметра связи при фиксированных значениях параметра экранировки $\kappa = 2$ и любых значениях параметра магнитного поля

3.2 Автокорреляционные функции скоростей и колебания в системе

Полученные данные по микроскопическим характеристикам системы могут быть использованы для дальнейшего анализа физических свойств Юкава системы. Полученные данные мы использовали для расчета автокорреляционных функции динамических величин [121-125] пылевых частиц (автокорреляционная функция скоростей) в широких диапазонах изменения различных параметров (параметр связи Γ, параметр магнитного поля β и параметр экранировки κ.

Автокорреляционная функция скоростей (АФС) [126,127] – одна из важных динамических характеристик системы, которая определяется как:

$$A_{\upsilon\upsilon}(t) = \left\langle \vec{\upsilon}(t)\vec{\upsilon}(0) \right\rangle, \tag{3.2}$$

тогда как ее нормированное значение ($\bar{A}_{\upsilon\upsilon}(0) = 1$) выражается как:

$$\bar{A}_{\upsilon\upsilon}(t) = \frac{\left\langle \vec{\upsilon}(t)\vec{\upsilon}(0) \right\rangle}{\left\langle \vec{\upsilon}(0)\vec{\upsilon}(0) \right\rangle}, \tag{3.3}$$

где скобки означают усреднение по ансамблю и по различным начальным моментам времени.

Влияние внешнего магнитного поля на поведение автокорреляционных функций скоростей показано на рисунке 3.3 при $\Gamma = 120, \kappa = 2$. При $\beta = 0$ автокорреляционная функция скоростей имеет несколько колебаний, соответсвующих локализованным колебаниям частиц. С учетом магнитного поля значения экстремумов колебания автокорреляционных функции скоростей увеличиваются. Кривая нормированной АФС без учета магнитного поля, представленная на рисунке 3.4, подтверждает, что $\bar{A}_{\upsilon\upsilon}(t)$ затухает как t^{-1} при больших значениях времени. Серия нормированных автокорреляционных функций скоростей при разных значениях параметра магнитного поля при фиксированных значениях параметра связи $\Gamma = 120$ для коэффициента экранировки $\kappa = 1$ представлена на рисунке 3.5. Данные показывают, что с учетом влияния магнитного поля поведение $\bar{A}_{\upsilon\upsilon}(t)$ значительно меняется. Колебания автокорреляционных функций скоростей сохраняются дольше с увеличением параметра магнитного поля. Влияние сильной связи в системе на нормированные автокорреляционные функции скоростей при фиксированных значениях параметра магнитного поля $\beta = 0.5$ и коэффициента экранировки $\kappa = 1$ показано на рисунке 3.6. Результаты по автокорреляционным функциям скоростей в зависимости от времени показывают устойчивую корреляцию при сильной связи. А также автокорреляционные функции скоростей при разных значениях коэффициента экранировки для фиксированных значений магнитного поля $\beta = 0.5$ и параметра связи $\Gamma = 100$ представлены на рисунке 3.7. Результаты показывают, что с увеличением коэффициента экранировки пики автокорреляционных функций скоростей сдвигаются.

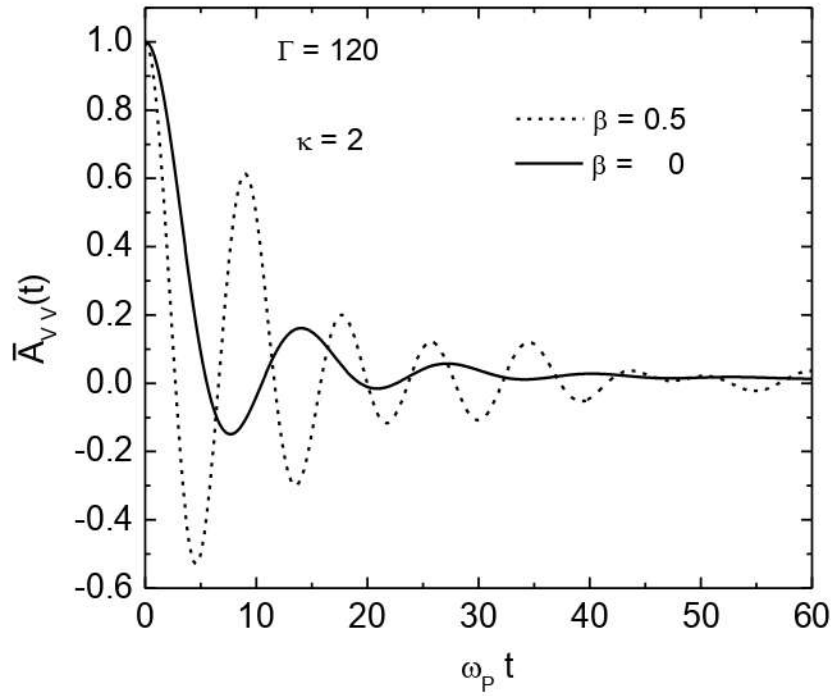


Рисунок 3.3 – Нормированные автокорреляционные функции скоростей при $\beta = 0$ и $\beta = 0.5$, для $\Gamma = 120, \kappa = 2$

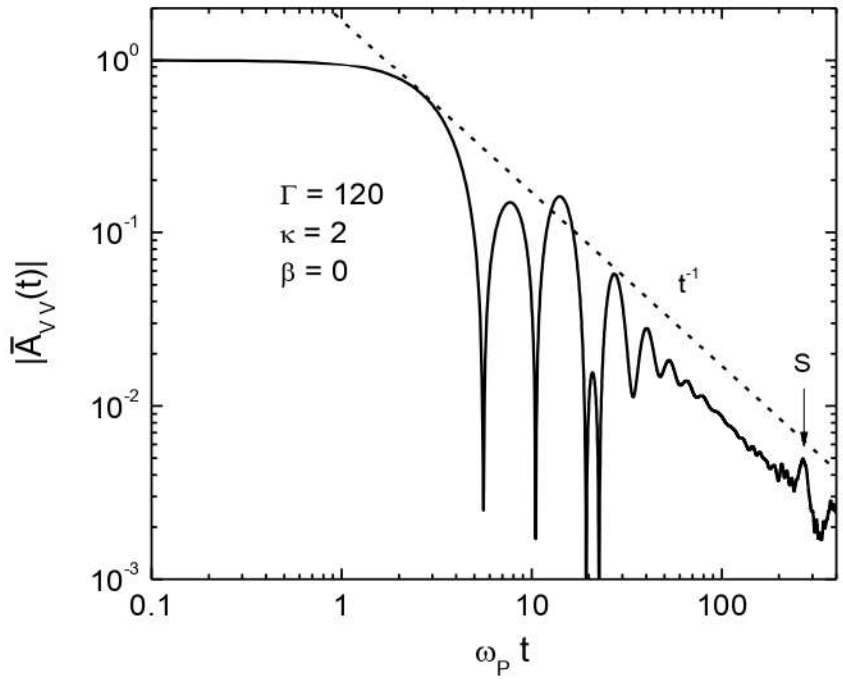


Рисунок 3.4 – Величина нормированной автокорреляционной функции скоростей в логарифмическом масштабе при $\beta = 0$ для $\Gamma = 120, \kappa = 2$

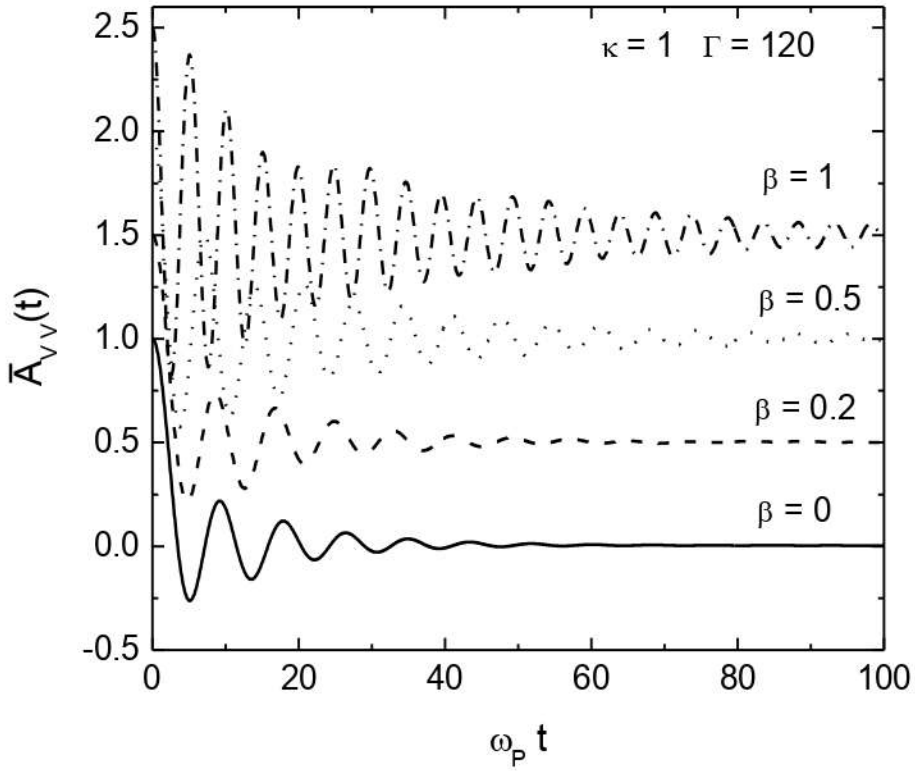


Рисунок 3.5 – Нормированные автокорреляционные функции скоростей при $\Gamma = 120, \kappa = 1$ для разных значений β

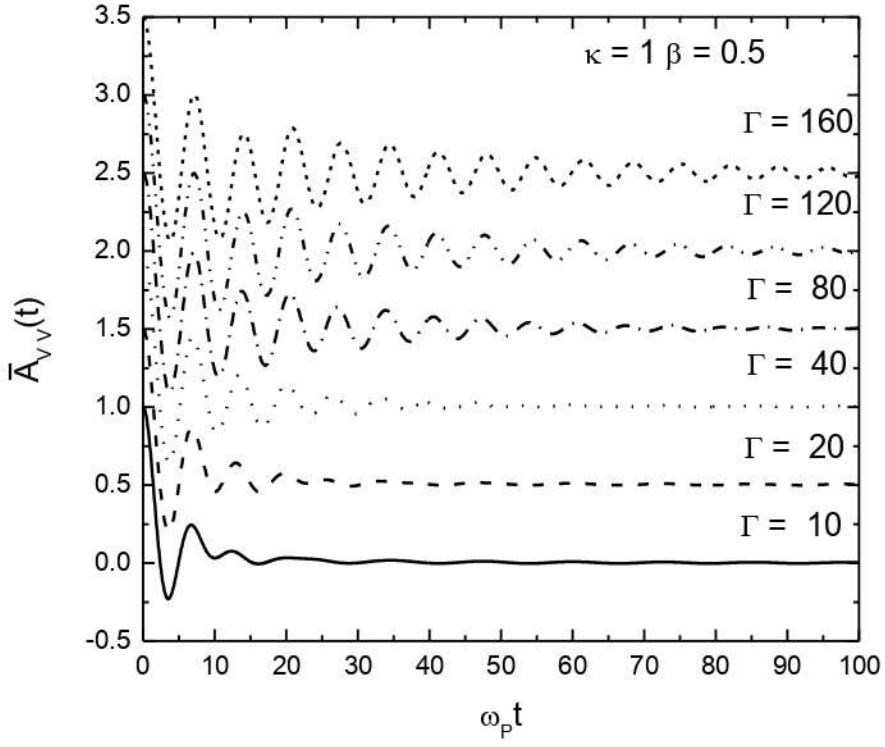


Рисунок 3.6 – Нормированные автокорреляционные функции скоростей при $\beta = 0.5, \kappa = 1$ для разных значений Γ

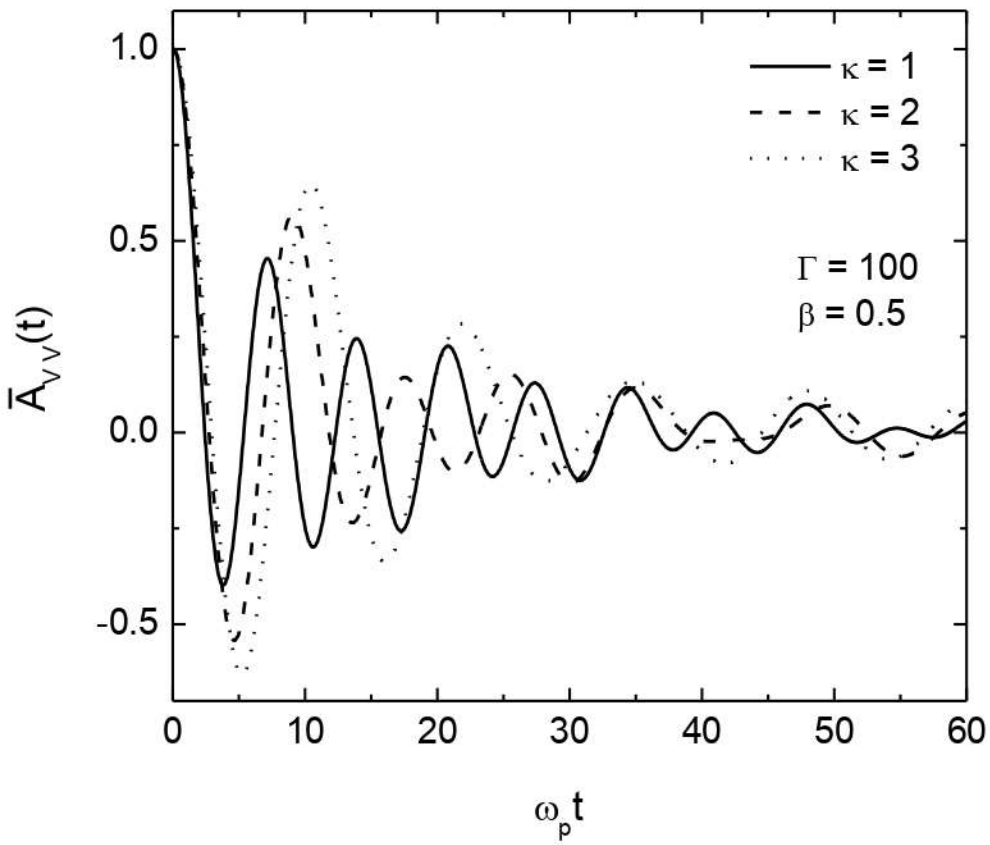


Рисунок 3.7 – Нормированные автокорреляционные функции скоростей при $\beta = 0.5, \Gamma = 100$ для разных значений κ

С помощью данных автокорреляционных функции скоростей (АФС) можно вычислить спектральную функцию пылевых частиц на основе Фурье-преобразования автокорреляторов скоростей с помощью следующего уравнения [128-130]:

$$A_{\upsilon\upsilon}(\omega) = \int_0^{\infty} A_{\upsilon\upsilon}(t) e^{i\omega t} dt, \tag{3.4}$$

где $A_{\upsilon\upsilon}(t)$ - автокорреляционная функция скоростей. Данный интеграл вычислен при замене верхнего предела интеграла на $t_{\max}$, когда $A_{\upsilon\upsilon}(t) \cong 0$ при $t > t_{\max}$.

С учетом влияния внешнего магнитного поля доминирующие частоты (рисунок 3.7) значительно увеличиваются, также как и экстремумы автокорреляционных функций скоростей. Фурье-преобразование автокорреляционных функций скоростей, представленное на рисунке 3.8 при Г = 120 и $\kappa = 2$ в случае $\beta = 0$ показывает, что спектральная функция имеет только один пик $\omega / \omega_p \approx 0.48$. Данный пик, как известно, можно связать с продольными флуктуациями [131]. При $\beta > 0$ формирование магнетоплазмонов

сдвигает пик на более высокие значения $\omega/\omega_p \approx 0.74$, вследствие чего изменяет характер дисперсионных мод. Также мы наблюдали формирование маленького пика при $\omega/\omega_p \approx 0.5$ который соответствует циклотронной частоте пылевых частиц.

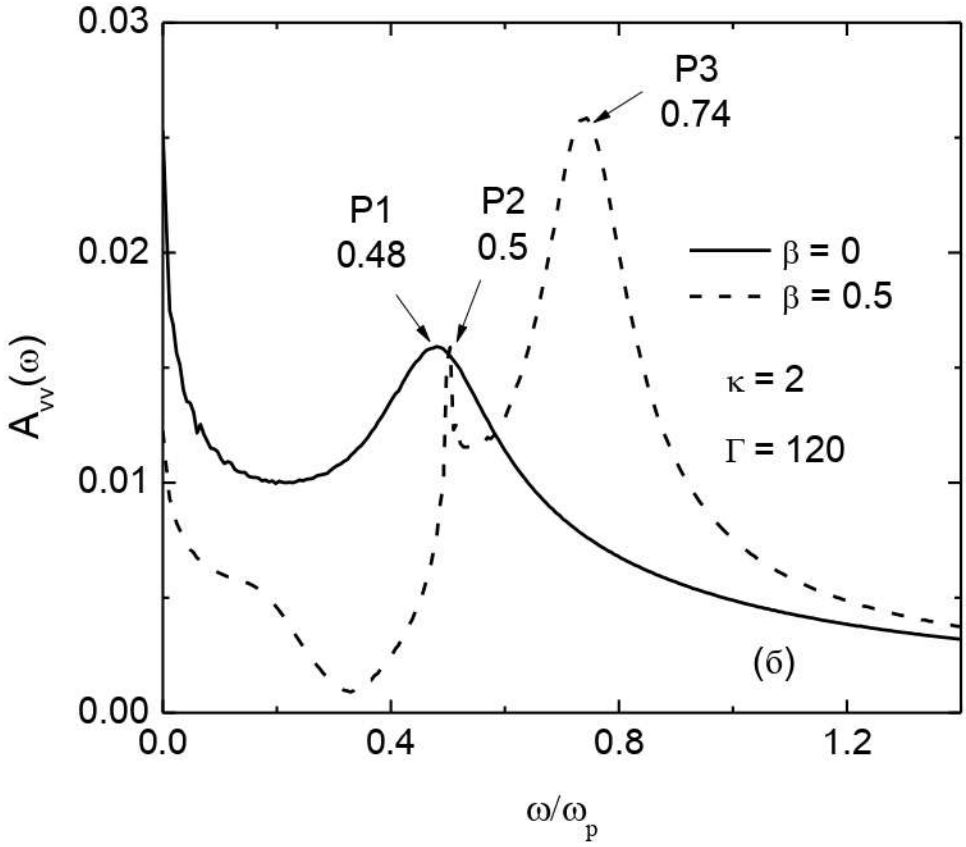


Рисунок 3.8–Фурье-преобразование автокорреляционных функций скоростей с учетом и без учета влияния магнитного поля

На рисунке 3.9 показаны Фурье-преобразования автокорреляционных функций скоростей $A_{\upsilon\upsilon}(\omega)$ для разных значений параметра магнитного поля при фиксированных значениях параметра связи $\Gamma = 120$ и параметра экранировки $\kappa = 1$. Данные показывают, что доминирующие частоты увеличиваются с увеличением β. В работах [132,133] было показано, что при сильной связи в системе доминирующий пик продольного спектра колебаний принимает вид:

$$\omega_1^2 = \omega_c^2 + 2\omega_E^2 = \beta^2\omega_p^2 + 2\omega_E^2, \qquad (3.5)$$

где ω_E - частота Эйнштейна, которая определяется как частота колебания пробной частицы в замороженной среде других частиц. При $\kappa = 1$ получено $\omega_E \cong 0.52\omega_p$. Сравнения результатов теоретических данных, вычисленных по формуле (3.5) с положениями пиков $A_{\upsilon\upsilon}(\omega)$, наблюдаемых на рисунке 3.9 для $\Gamma = 120, \kappa = 1$ представлены в таблице 1.

Таблица 1-Сравнение результатов теоретических данных

При β	ω / ω_p	Теоретическая ω_1 / ω_p, уравнение (3.5)
0	0.74	0.74
0.2	0.78	0.76
0.5	0.92	0.89
1.0	1.28	1.24

Мы нашли очень хорошее согласие (только несколько % отклонения) между двумя наборами данных, которые подтверждают теоретические данные работы [134,135], в соответствии с которыми доминирующая частота колебаний образуется при совместном действии магнитного поля и сильной связи, увеличивая фундаментальную частоту выше циклотронной частоты $\omega_c = \beta\omega_p$.

Далее мы исследовали влияние сильной связи на Фурье-образ автокорреляционных функций скоростей частиц при фиксированном значении параметра магнитного поля $\beta = 0.5$. Эти результаты показаны на рисунке 3.10 для $\kappa = 1$. Видно, что частотный спектр $A_{\upsilon\upsilon}(\omega)$ имеет сдвиг доминирующего пика в сторону увеличения частоты с уменьшением параметра Γ. Соотношение (3.5), которое обсуждалось выше, справедливо только при больших Γ. В пределе малых корреляций (слабо связанный предел плазмы, $\Gamma \to 0$) частота результирующей гибридной моды в замагниченной плазме (направление распространения перпендикулярно направлению магнитного поля), как известно, превращается в значения приближения случайных фаз (RPA):

$$\omega_2^2 = \omega_c^2 + \omega_p^2 = \omega_p^2(\beta^2 + 1). \qquad (3.6)$$

При $\beta = 0.5$ частота, определенная с помощью уравнения (3.6), есть $\omega_2 \cong 1.19\omega_p$.

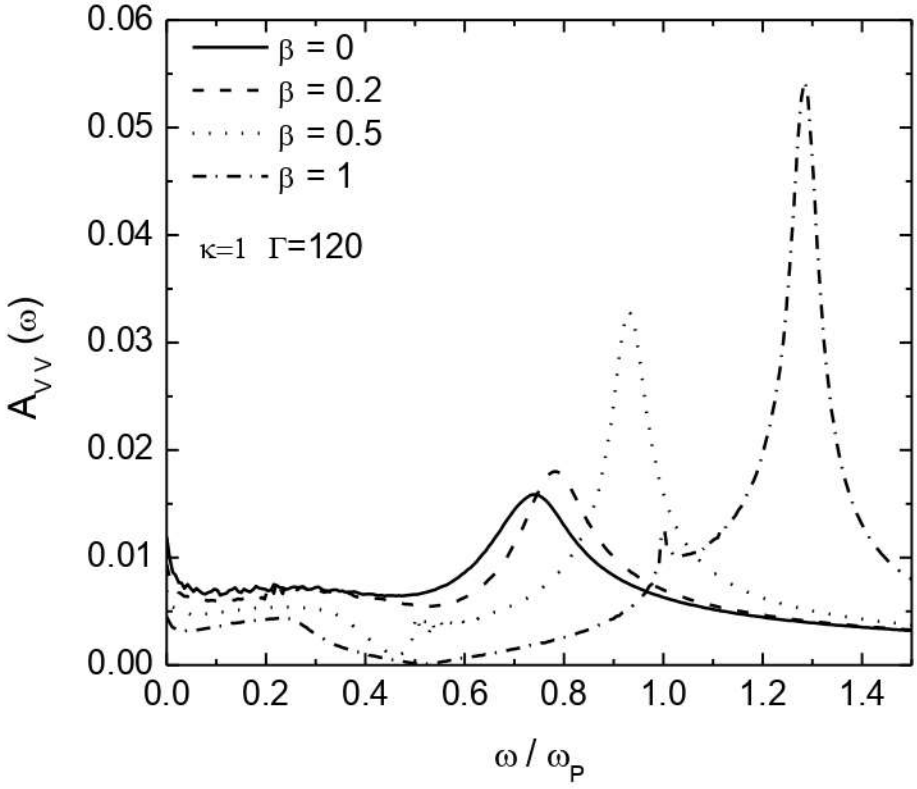


Рисунок 3.9 – Фурье-преобразование автокорреляционных функции скоростей при $\Gamma = 120, \kappa = 1$ и разных значениях β

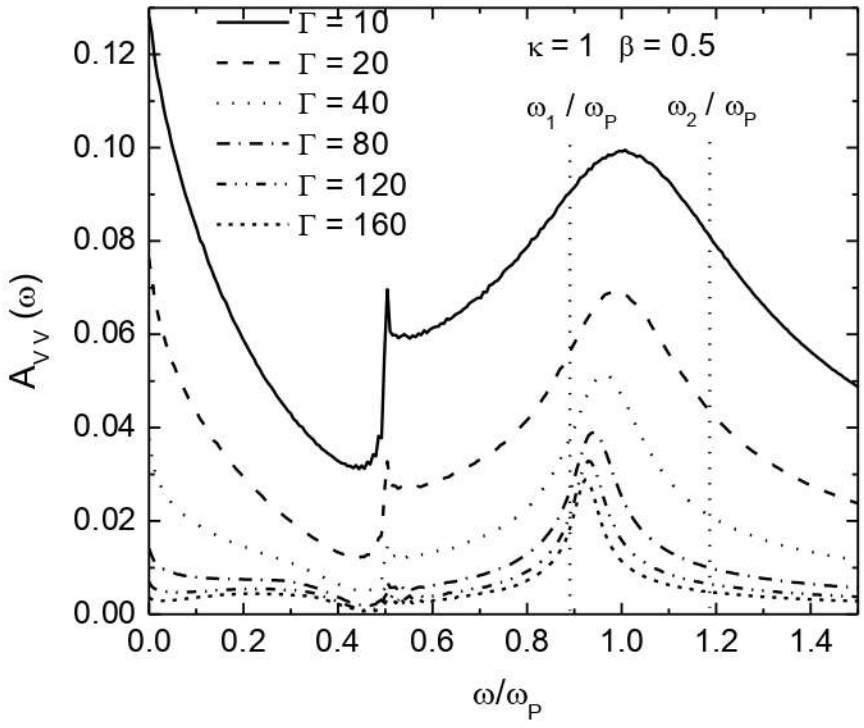


Рисунок 3.10 – Фурье-преобразование автокорреляционных функций скоростей при разных значениях параметра связи Γ

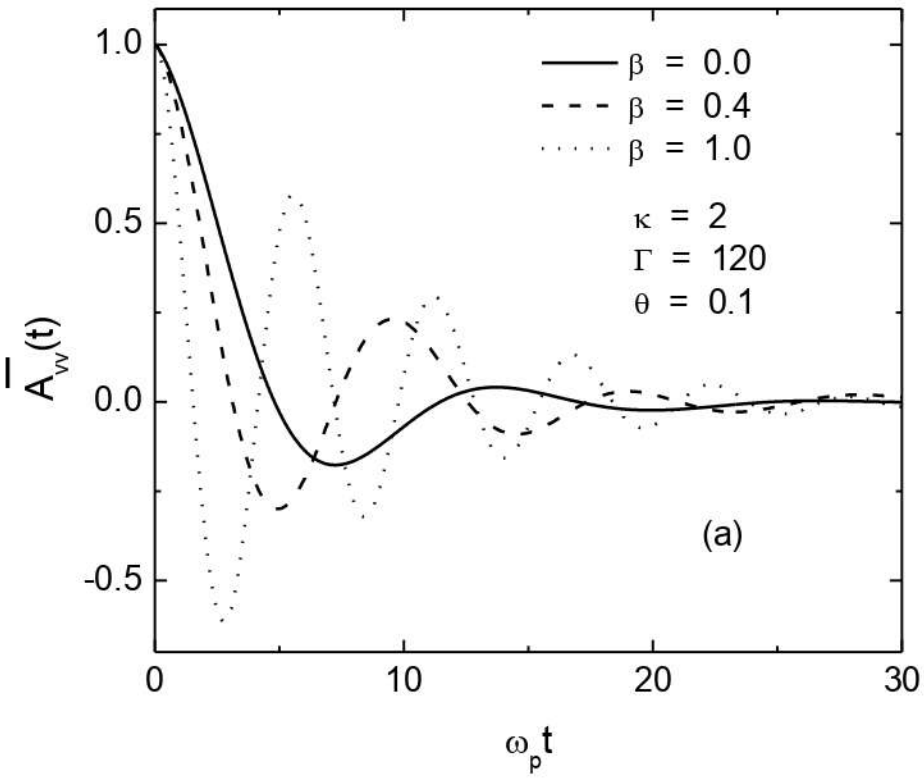
Ниже представлены результаты моделирования по автокорреляционным функциям скоростей с учетом влияния внешнего магнитного поля и силы трения, одновременно. На рисунке 3.11(а) представлены результаты нормированных автокорреляционных функций скоростей для $\kappa = 2$, $\Gamma = 120$ и $\theta = 0.1$ при разных значениях параметра магнитного поля $\beta = 0; 0.5; 1$. На панели (б) данного рисунка представлены такие же результаты для $\theta = 0.5$.

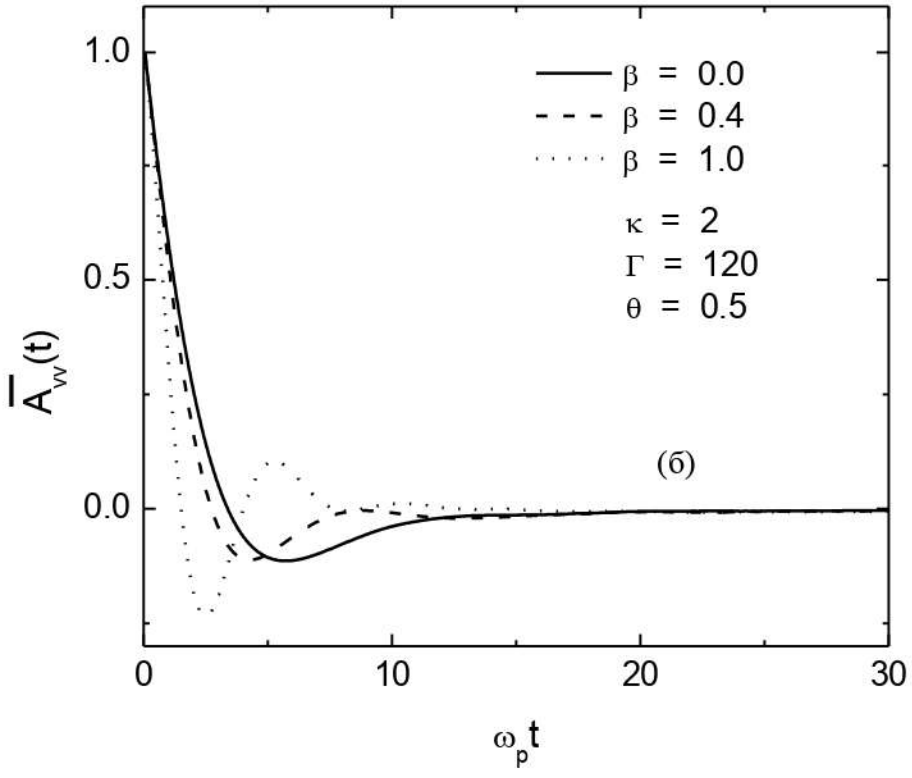
Влияние силы трения на автокорреляционные функции скоростей представлено на рисунке 3.12 для $\Gamma = 120$, $\kappa = 2$, и $\beta = 0.5$ (панель (а)) , $\beta = 1$ (панель (б)). В обоих случаях величина колебаний уменьшается с увеличением коэффициента трения θ [136], но частоты остаются одинаковыми.

Надо отметить, что все результаты и заключения, приведенные ниже, корректны для разных значений параметра связи Γ и экранировки κ.

Как уже было отмечено, колебания в системе можно исследовать с помощью Фурье - преобразования автокорреляционных функций скоростей. Рисунок 3.13 показывает Фурье-преобразование от автокорреляторов скоростей $A_{\upsilon\upsilon}(\omega)$ для $\beta = 0.5$ (панель (а)) и $\beta = 1$ (панель (б)). Видно, что с увеличением параметра трения $\theta > 0.01$ маленький пик $\omega / \omega_p = \beta$, соответствующий циклотронной частоте, исчезает. Это объясняет, почему в работе [92] он не был выявлен, так как там результаты были получены только для одного значения коэффициента трения, равного $\theta = 0.027$.

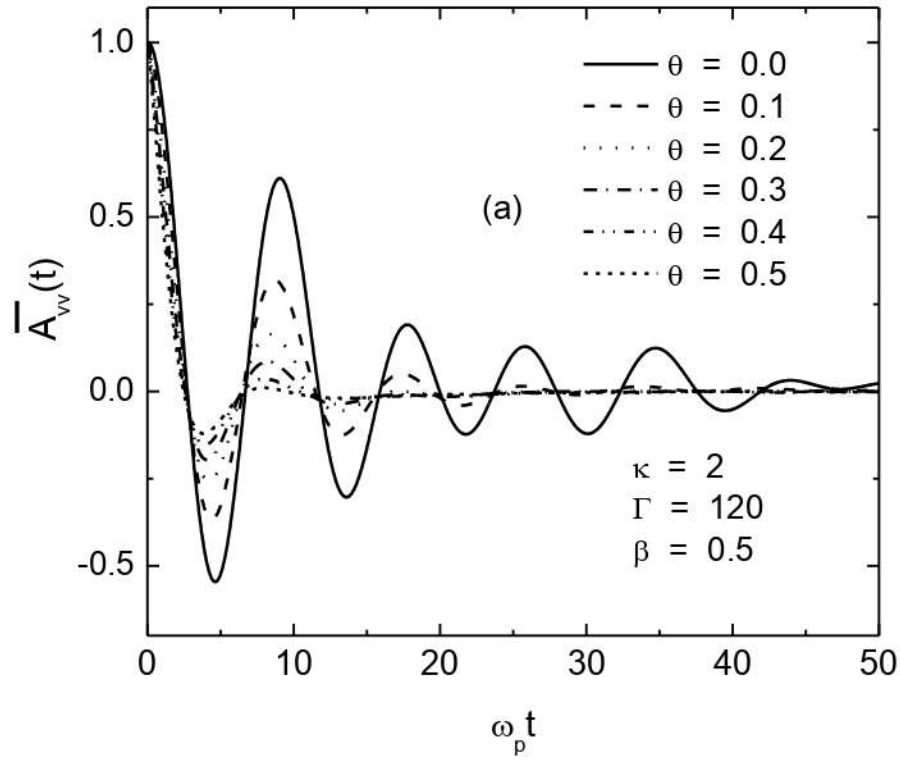
Рисунок 3.14 показывает результаты по $A_{\upsilon\upsilon}(\omega)$ для $\theta = 0.1$ при разных значениях параметра магнитного поля. На панели (б) представлены результаты по $A_{\upsilon\upsilon}(\omega)$ для коэффициента трения $\theta = 0.5$. Нужно отметить, что на панели (а) спектральная функция автокорреляционных функций скоростей демонстрирует увеличение величины доминирующего пика при увеличении магнитного поля, тогда как на панели (б) можно видеть противоположное поведение. Это означает, что возрастающее трение, вызванное газовой средой, сильнее подавляет колебания более высокой частоты, чем колебания с более низкой частотой. Это согласуется с общим фактом, что скорость затухания волн в среде возрастает с ростом частоты колебаний.

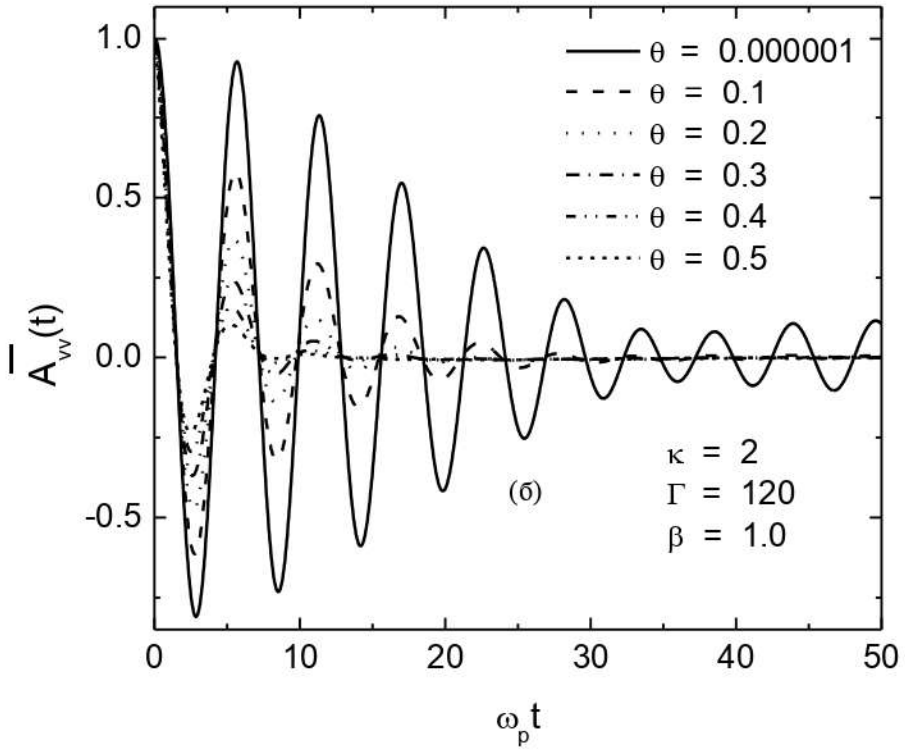




(a) - $\theta = 0.1$; (b) - $\theta = 0.5$.

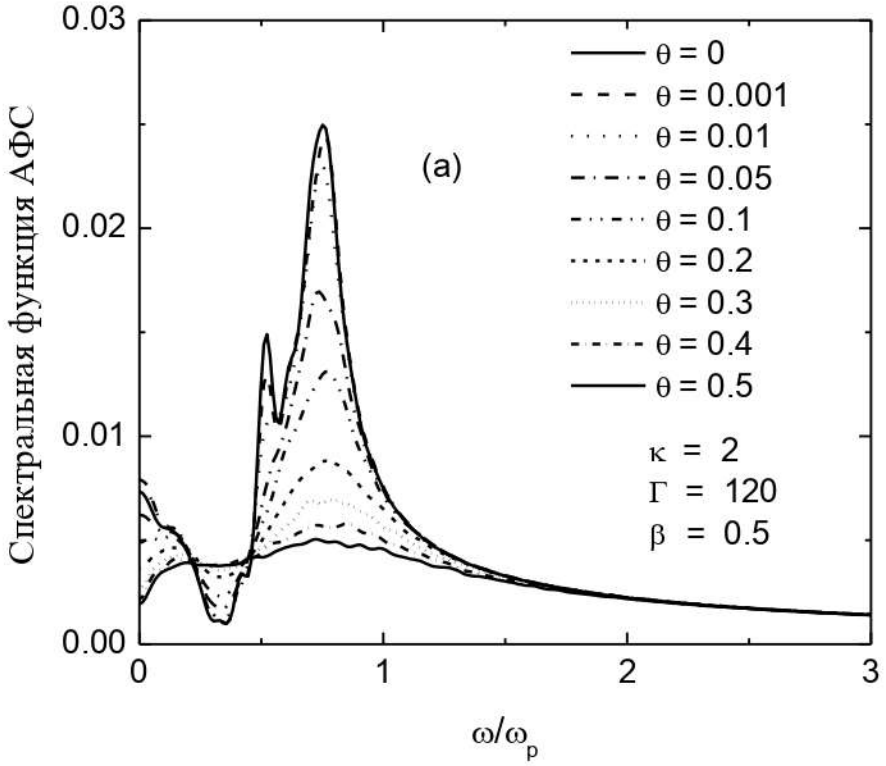
Рисунок 3.11. Автокорреляционная функция скоростей частиц для $\Gamma = 120$ и $\kappa = 2$ при трех значениях параметра магнитного поля β

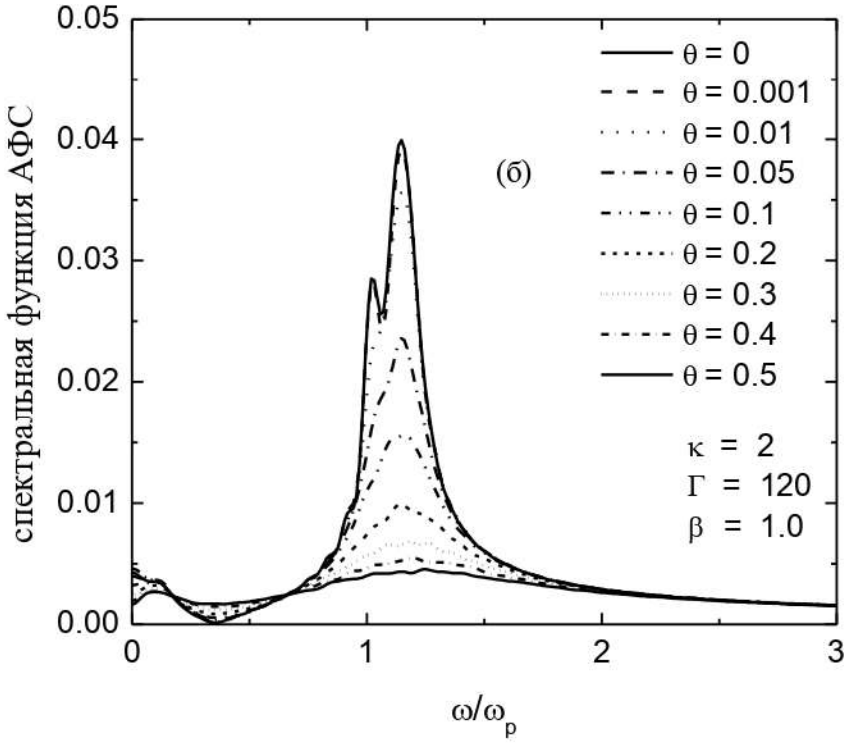




(a)- $\beta = 0.5$; (b) - $\beta = 1.0$.

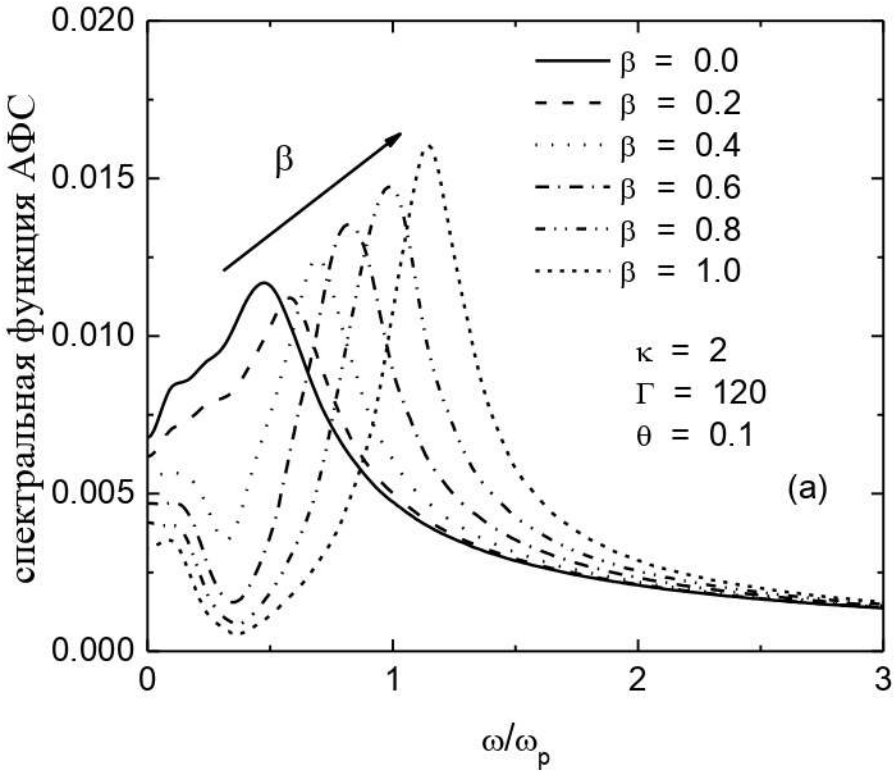
Рисунок 3.12 - Автокорреляционная функция скоростей частиц для $\Gamma = 120$ и $\kappa = 2$ для широкого значения параметра трения θ

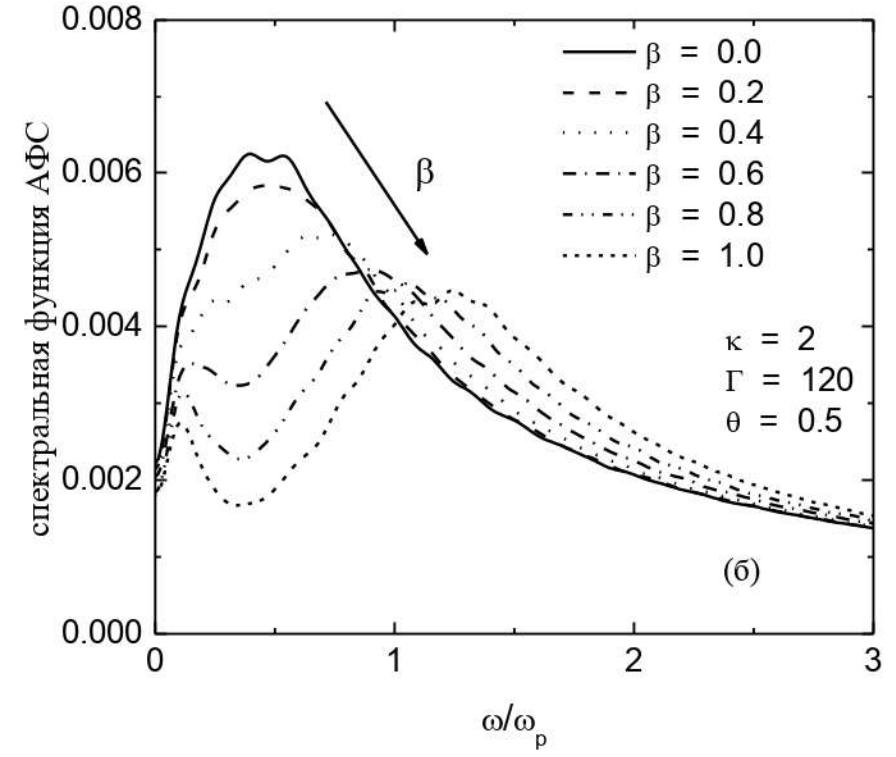




(a) - $\beta = 0.5$; (b) - $\beta = 1.0$.

Рисунок 3.13 – Спектр колебаний автокорреляционных функций скоростей при $\Gamma = 120$ и $\kappa = 2$ для широкого спектра значений параметра трения θ





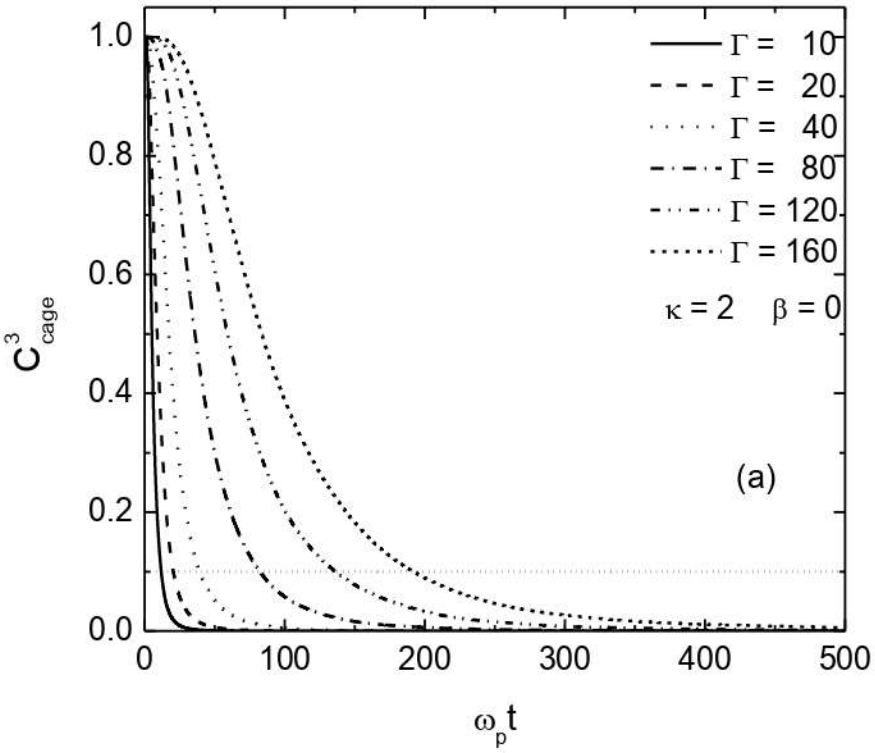
(а) - $\theta = 0.1$; (б) - $\theta = 0.5$.

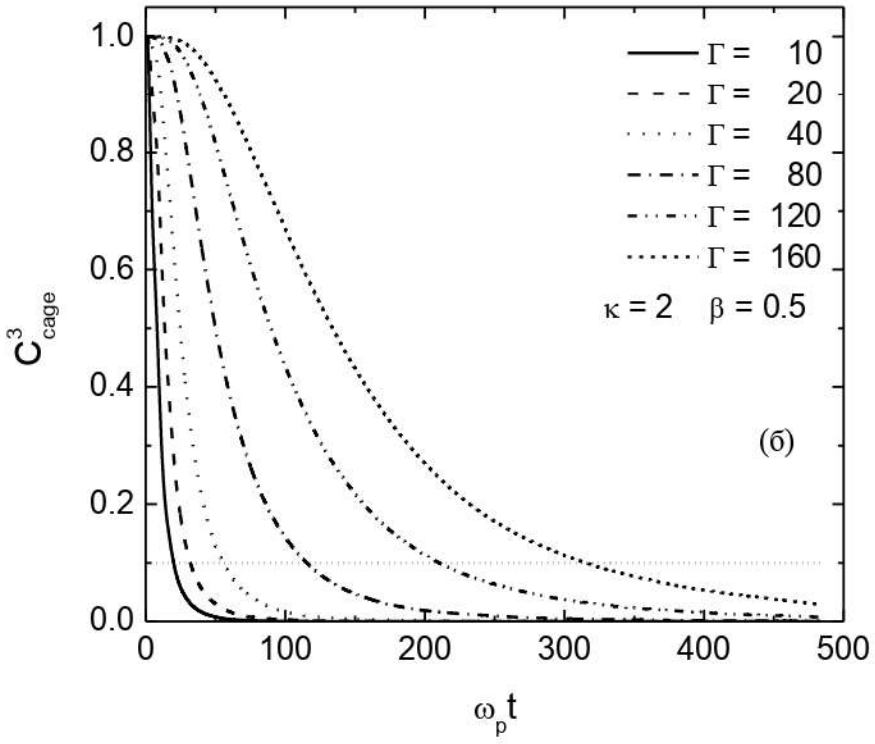
Рисунок 3.14 – Спектр колебаний автокорреляционных функции скоростей для $\Gamma = 120$ и $\kappa = 2$ при для широкого спектра значений параметра магнитного поля β

3.3. Кейгеновые и направленные корреляционные функции пылевых частиц

В данной части рассматривается локализация частиц с помощью изменения окружения каждой частицы корреляционным методом, разработанным Рабани и др. Локализация частиц исследуется с помощью кейгеновых корреляционных функций. Кейгеновая корреляционная функция [137-140] была вычислена как для трехмерного случая, так и для двумерного.

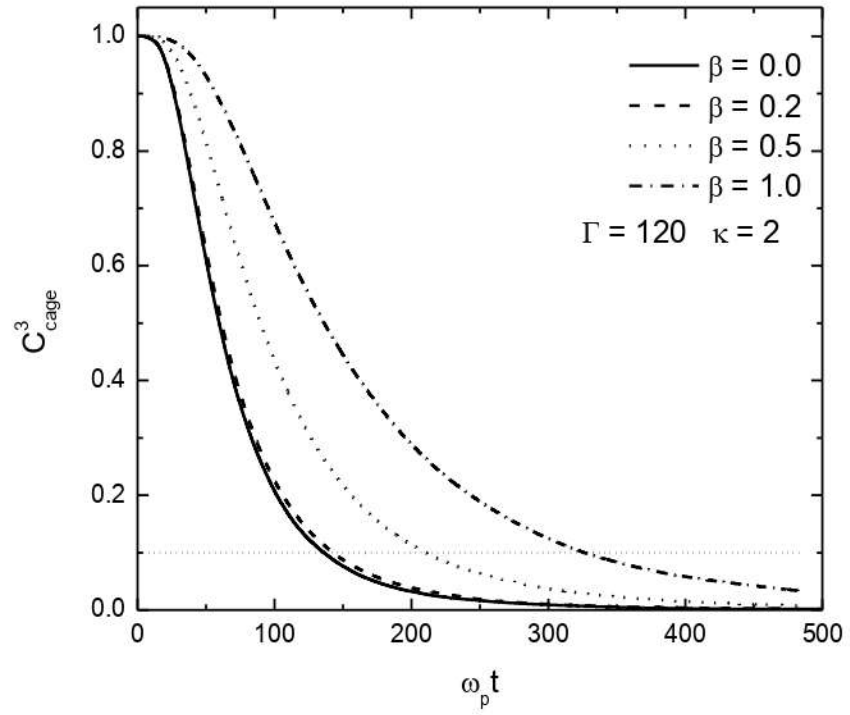
Зависимости кейгеновых корреляционных функций $C^3_{cage}(t)$, которые определяются с помощью формулы (1.31) (см. Главу 1), от параметров системы проанализированы на рисунках 3.15, 3.16. На рисунке 3.15 кейгеновые корреляционные функции были вычислены для разных значений параметра связи Γ без учета влияния магнитного поля $\beta = 0$ и с учетом влияния магнитного поля $\beta = 0.5$ [141-143]. Как можно увидеть из этих графиков, с увеличением параметра связи увеличивается время декорреляции частиц. Кейгеновые корреляционные функции при разных значениях параметра магнитного поля β и при фиксированном значении параметра связи $\Gamma = 120$ для $\kappa = 2$ представлены на рисунке 3.16(а). Из рисунка видно, что с увеличением параметра магнитного поля увеличивается время декорреляции, то есть частицы дольше остаются в круге частицы i. Такое поведение функции можно легко объяснить уменьшением Ларморовского радиуса частиц. Влияние коэффициента экранировки на поведение кейгеновых корреляционных функций показано на рисунке 3.16(б). Как можно увидеть из этого графика, с увеличением коэффициента экранировки уменьшается время деккореляции частиц. Также зависимости времени декорреляции t_{cage}, ранее определенной как $C^3_{cage}(t_{cage}) = 0.1$, от параметра магнитного поля при фиксированных значениях параметра связи $\Gamma = 120$ и $\Gamma = 20$ при $\kappa = 2$ представлены на рисунке 3.17(а), результат влияния коэффициента экранировки на времена декорреляции при фиксированном значении параметра связи $\Gamma = 100$ представлен на рисунке 3.17(б). Результаты показывают, что время декорреляции увеличивается примерно в три раза с увеличением параметра магнитного поля от 0 до 1 для обоих значений параметра связи, а также с увеличением коэффициента экранировки время декорреляции уменьшается. На рисунке 3.18 представлена зависимость времени декорреляции от параметра связи при фиксированных значениях параметра магнитного поля $\beta = 0.5$ и $\beta = 0$. Из рисунка можно увидеть, что как с увеличением магнитного поля, так и с увеличением связи в системе времена декорреляции увеличиваются.

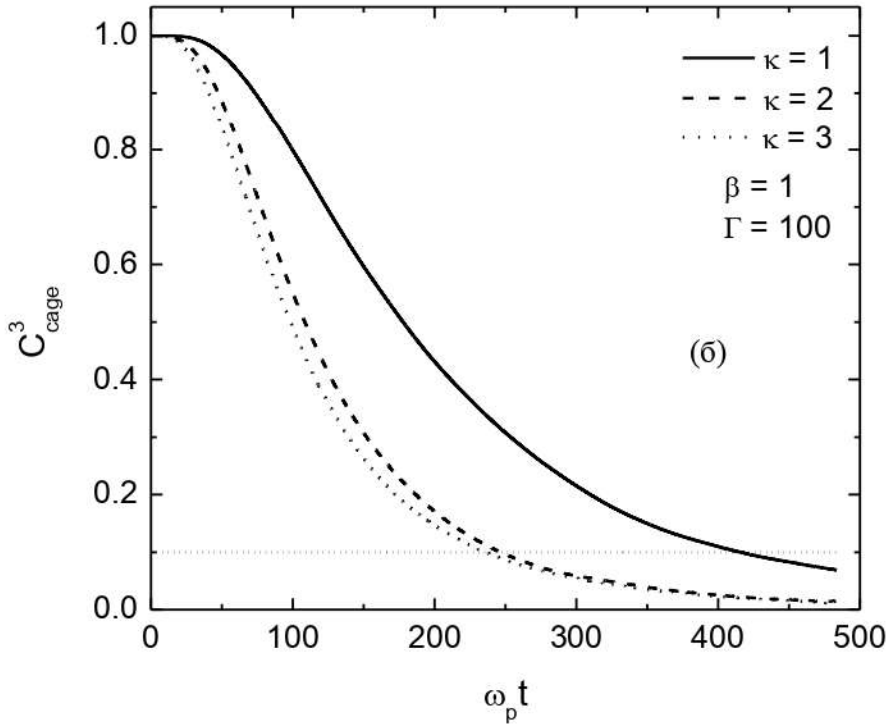




(а) - $\beta = 0$; (б) - $\beta = 0.5$.

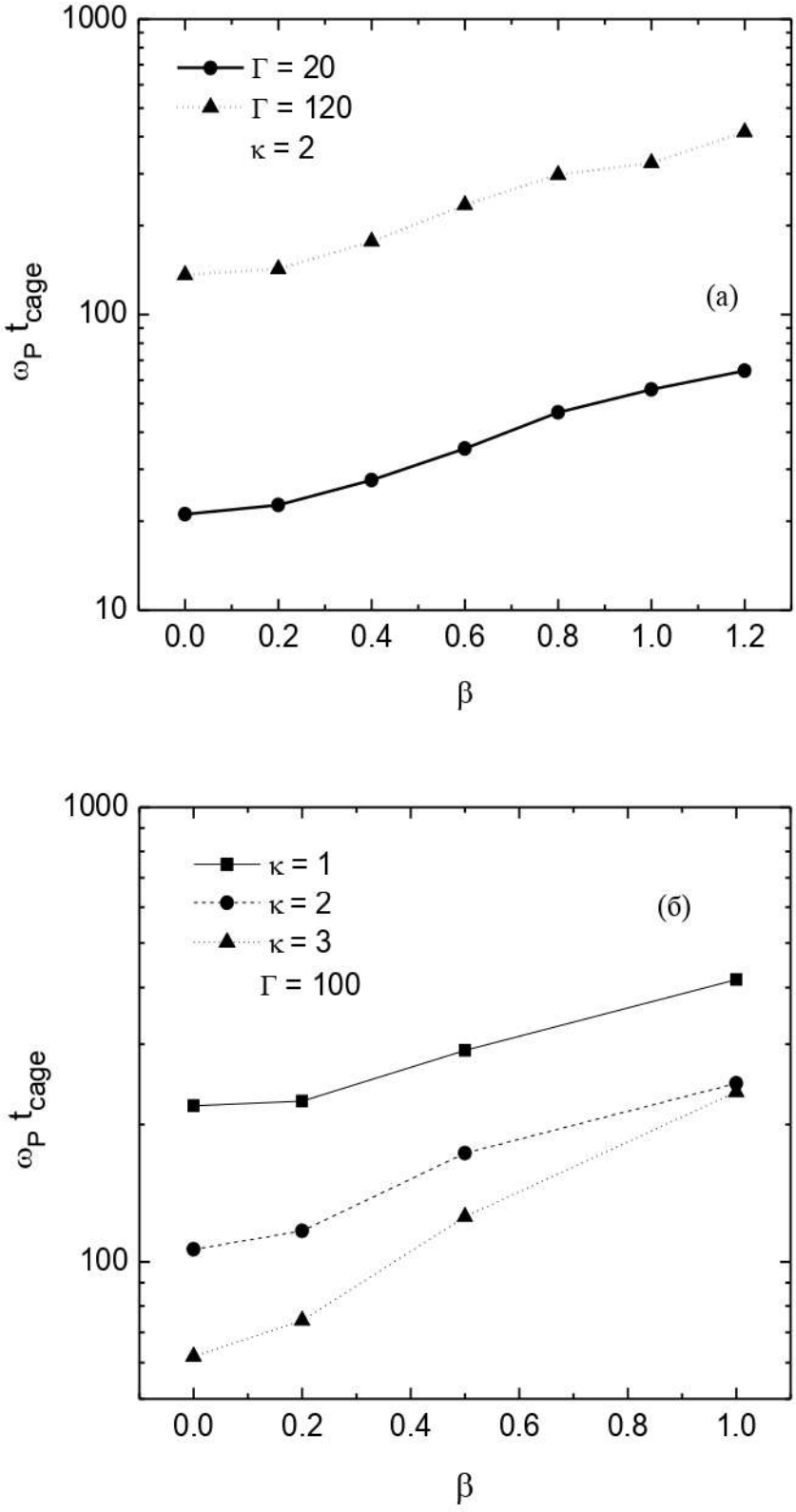
Рисунок 3.15 – Кейгеновые корреляционные функции





(а) - для разного значения параметра магнитного поля, $\kappa = 2, \Gamma = 120$; (б) - Для разного значения параметра экранировки, $\beta = 1, \Gamma = 100$.

Рисунок 3.16 – Кейгеновые корреляционные функции



(а) - при разных значениях параметра связи, $\kappa = 2$; (б) - при разных значениях коэффициента экранировки, $\Gamma = 100$.

Рисунок 3.17 – Зависимость времени декорреляции от параметра магнитного поля

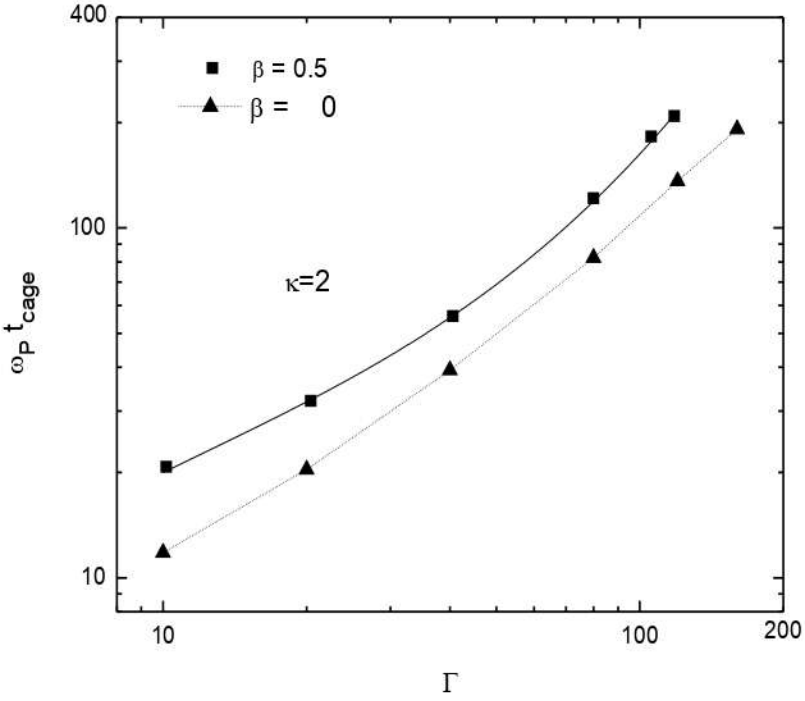


Рисунок 3.18 – Зависимость времени декорреляции от параметра связи при $\beta = 0$ и $\beta = 0.5$ для $\kappa = 2$

Как уже было упомянуто в начале главы, компьютерное моделирование было проведено как для двумерной системы так и для трехмерной системы. Далее рассматривается влияние внешнего магнитного поля на динамические свойства трехмерной Юкава системы [144-146]. При исследовании трехмерной Юкава системы параметры системы определяются другими выражениями, так, например, радиус Вигнера-Зейтца в трехмерном случае записывается как: $a = (3/4\pi n)^{1/3}$. Таким образом, при реализации метода молекулярной и ланжевеновой динамики частицы двигаются в трехмерной кубической решетке (x, y, z) и предполагается, что магнитное поле однородно и направлено вдоль оси z.

При вычислении кейгеновой корреляционной функции в трехмерной системе рассматривается 14 ближайших соседей (гранецентрированная кубическая решетка). Число ближайщих соседей проверяется при моделировании и всегда равно 14. Таким образом, результаты кейгеновой корреляционной функции были получены при $c = 7$. То есть наблюдается эволюция половины всех соседей частицы. Число частиц при вычислении кейгеновой корреляционной функции было взято равным $N = 1000$.

На рисунке 3.19(а) и 3.19(б) представлены результаты по кейгеновым корреляционным функциям, полученные для разных значений параметра магнитного поля $0 \le \beta \le 5$ при $\kappa = 1$ и $\kappa = 2$ параметр связи $\Gamma = 10$. Напомним, что время декорреляции t_{cage} определяется как $C^7_{cage}(t_{cage}) = 0.1$. Для $\kappa = 1$ время

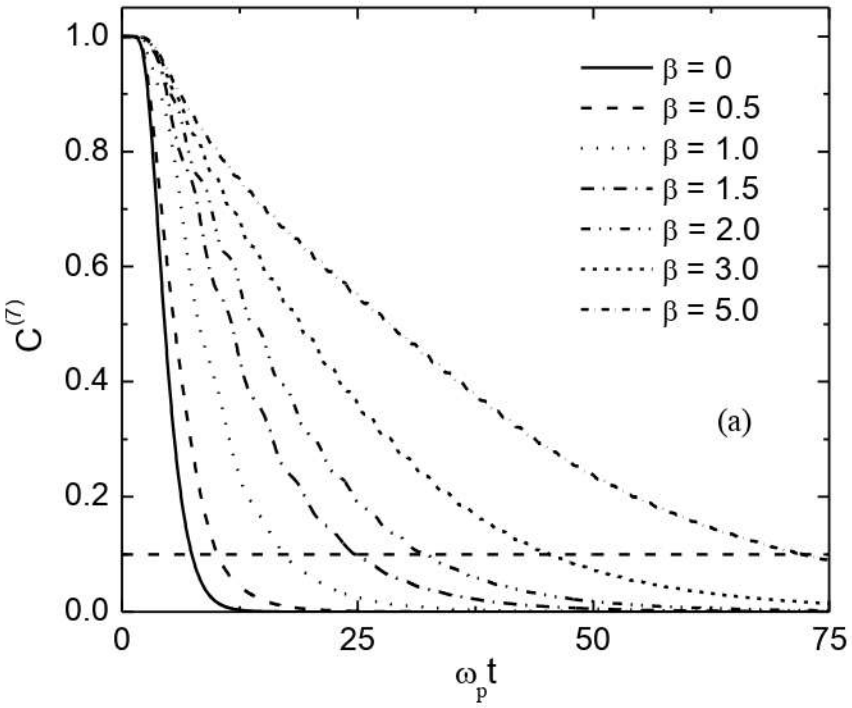
деккореляции $\omega_p t \approx 8$, что соответствует одному циклу плазменного колебания. Такое «слабо некоррелированное» поведение кейгеновых корреляционных функций меняется с учетом влияния магнитного поля, при $\beta = 3$ время деккореляции частиц увеличивается в 6 раз. Аналогичная зависимость получена и для $\kappa = 2$ (рисунок 3.19(б)). Также из рисунка 3.19(а) и 3.19(б) можно увидеть колебания кривых кейгеновых корреляционных функций, особенно тех, которые соответствуют промежуточным значением β. Появление таких колебаний можно объяснить, взяв производные этих кривых, которые представлены на рисунке 3.20(а) и 3.20(б). Частота этих кривых пропорциональна параметру магнитного поля, и на основе этих результатов появление таких колебаний можно объяснить тем, что частицы периодически покидают и заходят в клетку, двигаясь по циклотронной орбите. В самом деле, измерения частот ω^* кривых dC^7_{cage}/dt подтверждают $\omega^* \cong \omega_c$. Амплитуда колебания dC^7_{cage}/dt затухает с увеличением β за счет уменьшения Ларморовского радиуса траекторий частиц. С другой стороны, при малых значениях параметра магнитного поля β, колебания менее заметны, так как удержания в клетке менее выражены и кейгеновая корреляционная кривая затухает на временной шкале обратно циклотронной частоте.

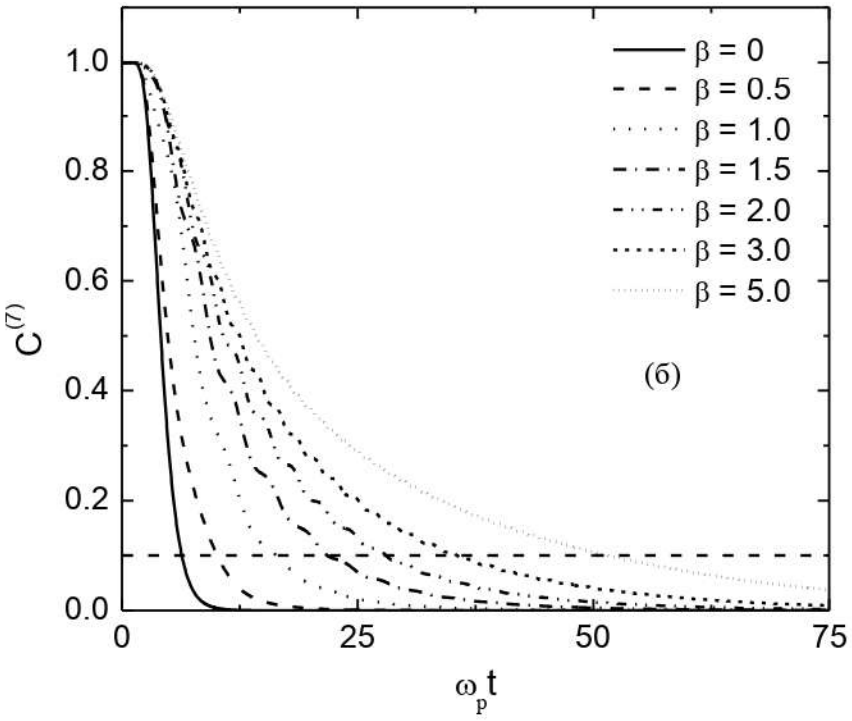
Зависимость кейгеновой корреляционной функции от параметра связи показана на рисунке 3.21(а) и 3.21(б) при $\kappa = 1$ и $\kappa = 2$ для фиксированного значения параметра магнитного поля $\beta = 2$. Увеличение связи в системе также способствует увеличению времени декорреляции частиц. При больших значениях параметра связи кейгеновая корреляционная функция уменьшается до значения 0.1, когда значение $\omega_p t$ достигает несколько сотен, это означает, что частицы находятся от несколько десятков до сотен плазменных колебаний в клетке. Это число возможно, так как высокие значения параметра связи Γ соответствуют примерно 70% и 45% критическим значениям фазового перехода жидкость-твердое тело (которые $\Gamma = 217{,}4$ и 440,1, соответственно, для $\kappa = 1$ и $\kappa = 2$), время декорреляции для твердой фазы бесконечно.

Анализ зависимости dC^7_{cage}/dt от параметра связи на рисунках 3.23(а) и 3.23(б) показывает, что с увеличением параметра связи Γ колебания уменьшаются, и приблизительно при значении ~ 50 исчезают. Уменьшение амплитуды колебаний связано с тем, что при больших значениях параметра связи Γ ларморовское вращение частиц происходит синхронно, то есть, все частицы клетки двигаются вместе, и в кадре, зафиксировавшем частицы кажется, что все частицы в клетке не меняют свои позиции.

Результаты, полученные по временам декорреляции частиц, показаны на рисунке 3.23. Панель (а) показывает зависимость t_{cage} от параметра магнитного поля при фиксированных значениях параметра связи Γ, тогда как панель (б) показывает зависимость t_{cage} от параметра связи при фиксированных значениях параметра магнитного поля β. В первом случае мы нашли почти линейный рост

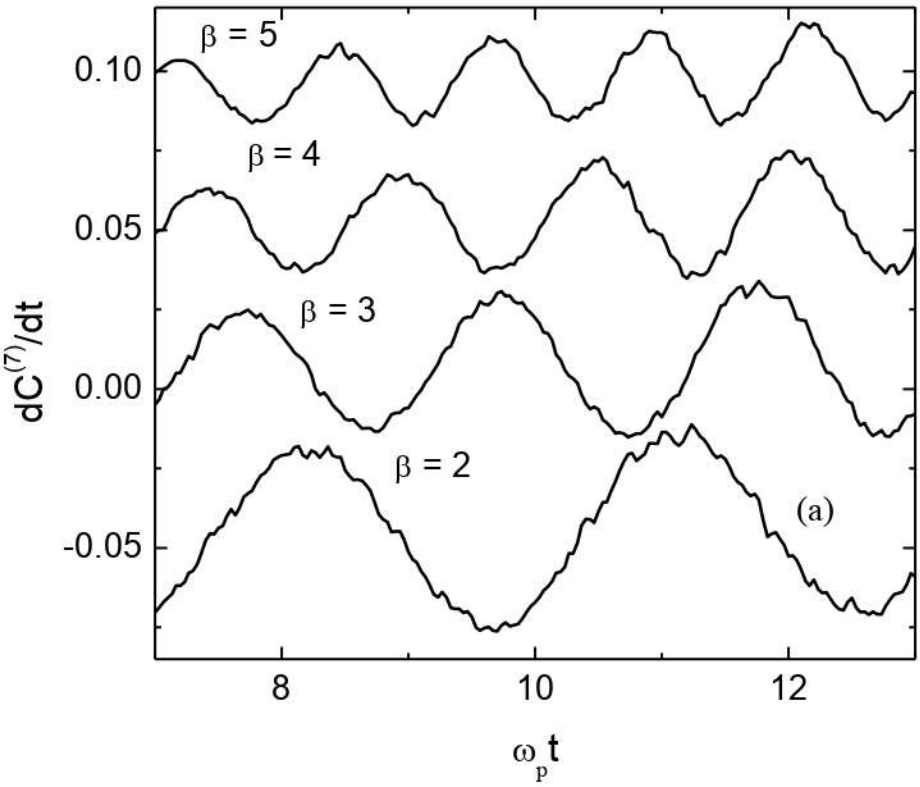
времени декорреляции с увеличением β, тогда как связь между t_{cage} и Γ является почти степенной функцией. Помимо нескольких точек при малых значениях Γ, кривые на рисунке 3.23(б), построенные для разных значений β, почти параллельны, что указывает на универсальное поведение.

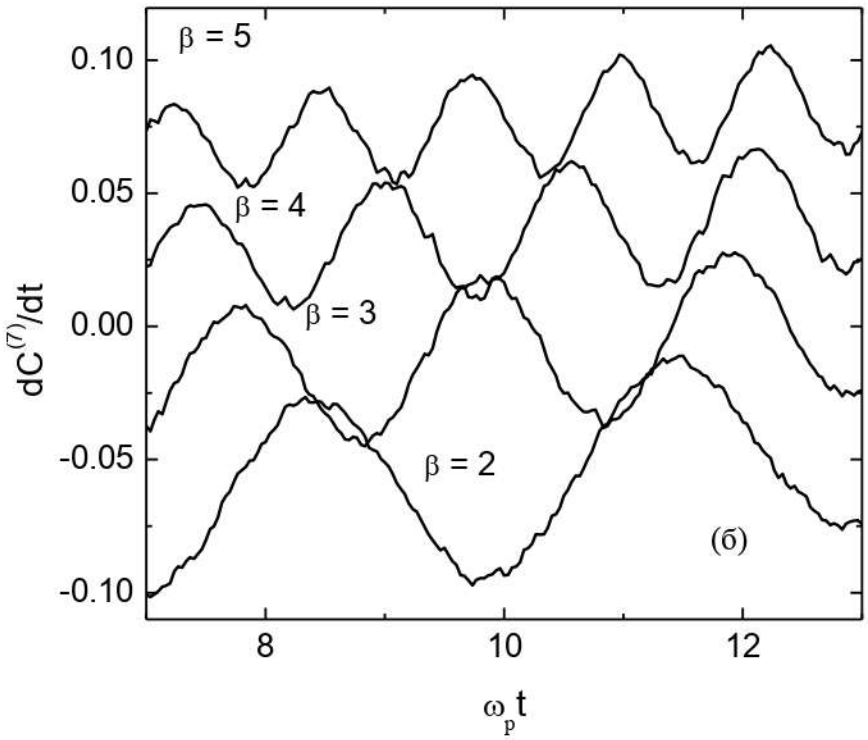




(а) - $\kappa = 1$; (б)- $\kappa = 2$.

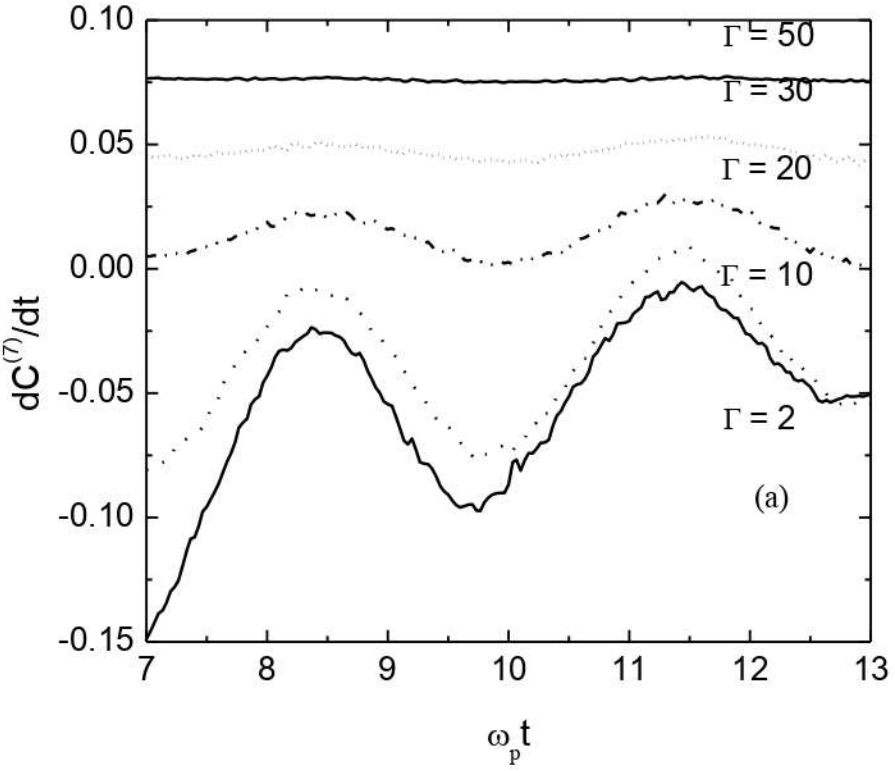
Рисунок 3.19– Кейгеновые корреляционные фунции $C^7_{cage}(t)$ при $\Gamma = 10$ для разных значений параметра магнитного поля, прямая $C^7_{cage} = 0.1$ определяет время декорреляции

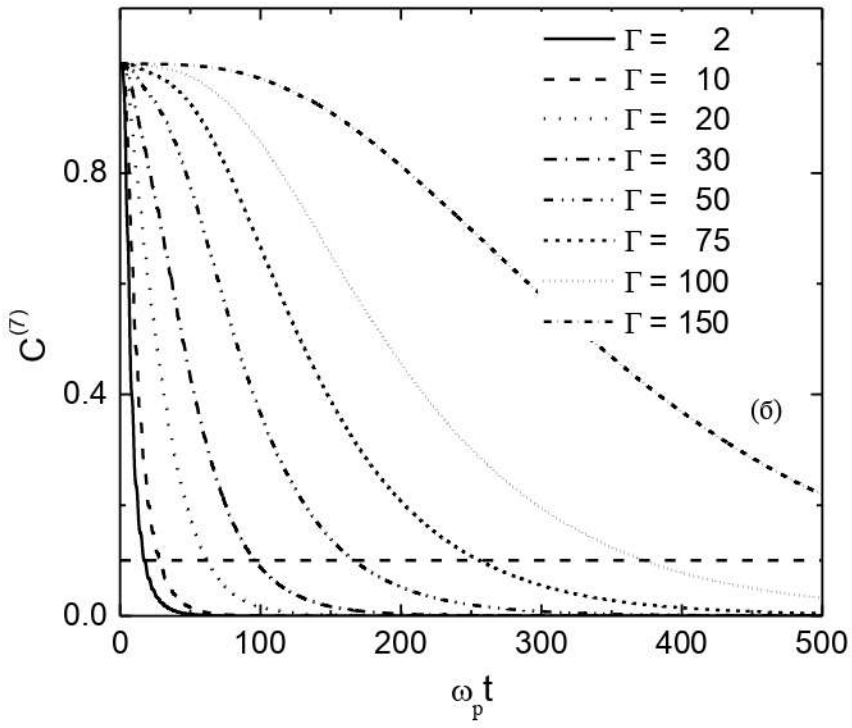




(а) - $\kappa = 1$; (б)- $\kappa = 2$.

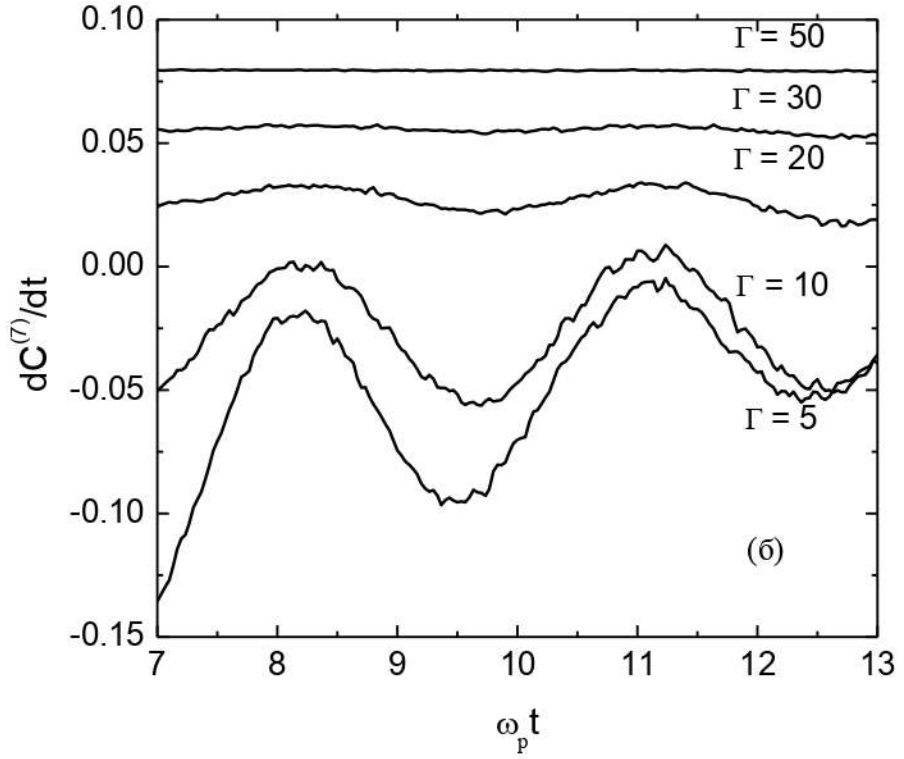
Рисунок 3.20–Производные кейгеновых корреляционных фунции по времени dC^{7}_{cage} / dt при $\Gamma = 10$ для разных значений параметра магнитного поля, кривые смещены вертикально для ясности

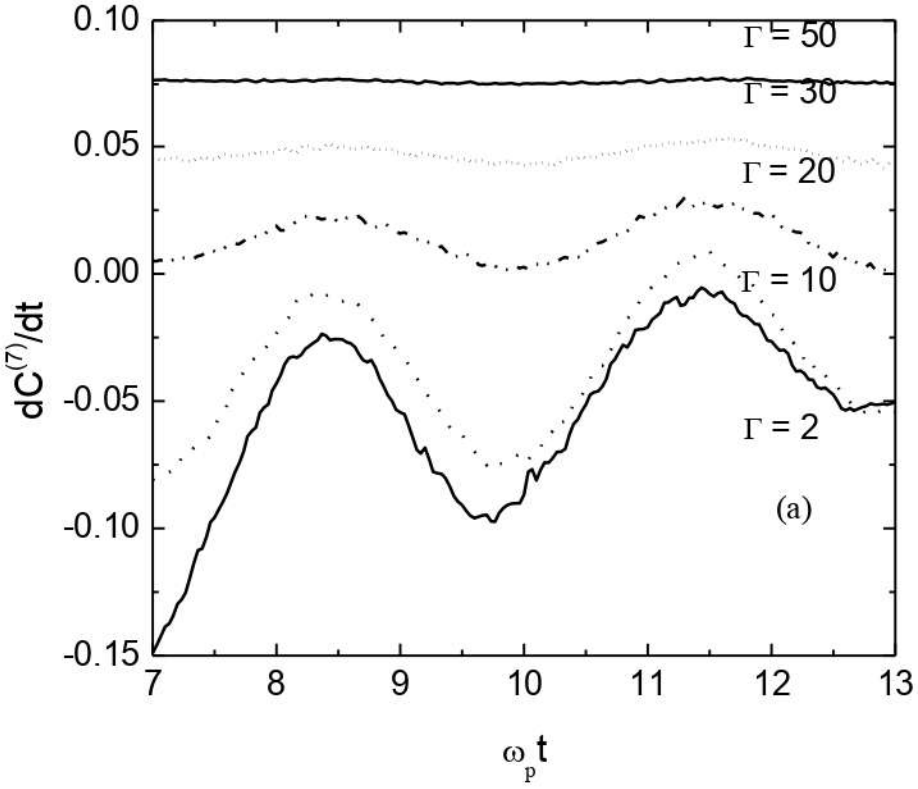




(а) - $\kappa = 1$; (б)- $\kappa = 2$.

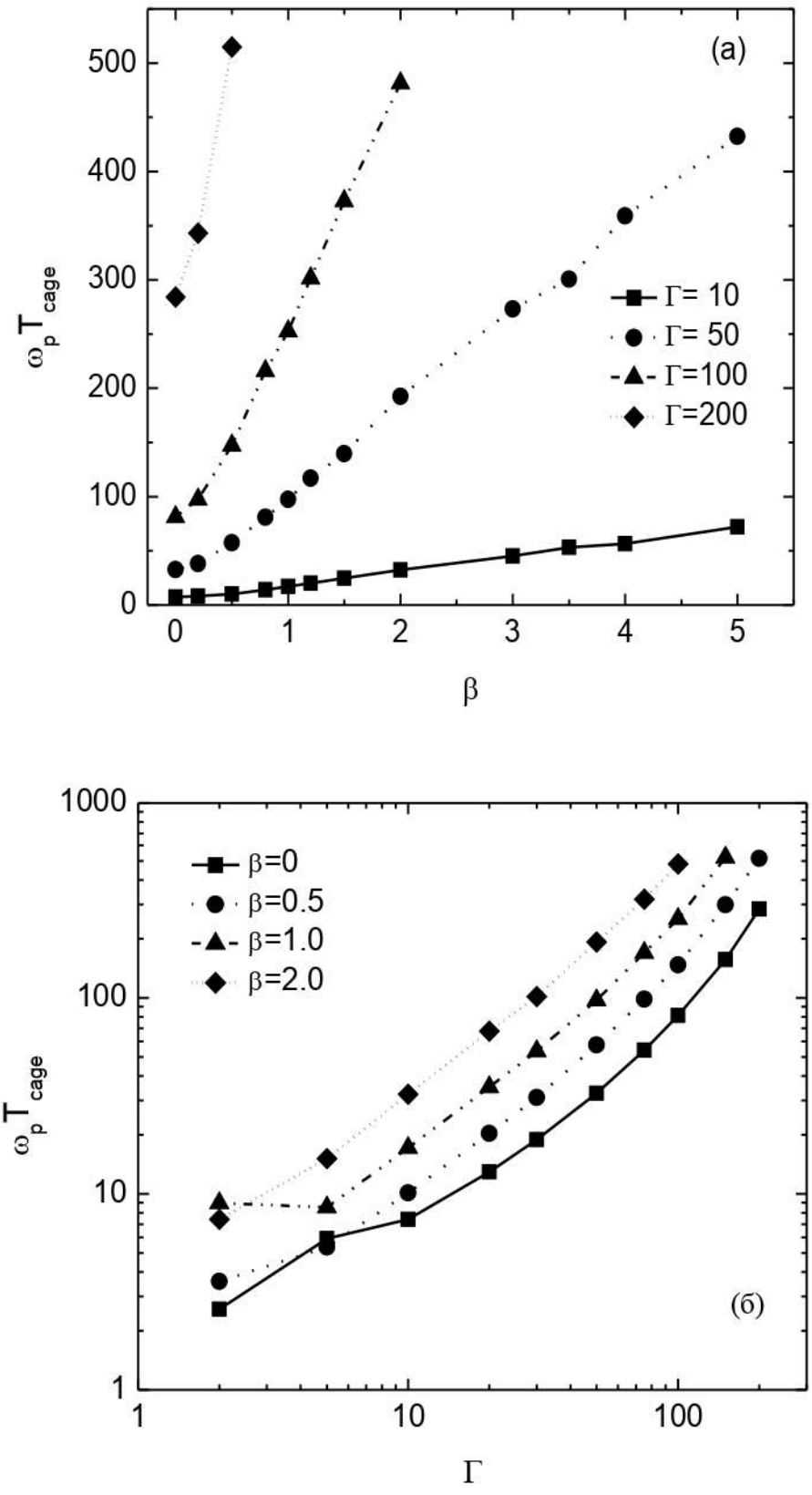
Рисунок 3.21 – Кейгеновые корреляционные фунции $C^7_{cage}(t)$ при $\beta = 2$ для разных значений параметра связи, прямая $C^7_{cage} = 0.1$ определяет время декорреляции





(а) - $\kappa = 1$; (б)- $\kappa = 2$.

Рисунок 3.22 – Производные кейгеновых корреляционных фунции по времени dC^{7}_{cage} / dt при $\beta = 2$ для разных значений параметра связи. Кривые смещены вертикально для ясности



(а)-для разных значений параметра связи Γ; (б)- параметра магнитного поля β.

Рисунок 3.23 – Время декорреляции частиц при $\kappa = 1$

С появлением внешнего магнитного поля изотропность системы нарушается, частицы могут покидать клетку в разных направлениях с разной скоростью (вероятностью). Это значит, что с появлением внешнего магнитного поля в трехмерной системе имеет смысл отдельно учитывать выход окружающих соседей частицы в разных направлениях, т.е. вдоль и поперек направлению магнитного поля. Для решения этой задачи нами впервые были записаны уравнения для описания локализации частиц с учетом анизотропии путем введенных нами так называемых направленных корреляционных функций (НКФ) $F_x^c(t), F_y^c(t)$ и $F_z^c(t)$ [147,148]:

$$f_{ij,x}(t) = \begin{cases} 1 & if \quad x_{ij} < r_c, \\ 0 & if \quad x_{ij} \geq r_c, \end{cases} \tag{3.7}$$

$$\begin{aligned} n_{i,x}^{out}(t) &= \left| l_{i,x}(0)^2 \right| - l_{i,x}(0) \cdot l_{i,x}(t), \\ F_x^c(t) &= \left\langle \Theta(c - n_{i,x}^{out}(0,t)) \right\rangle, \end{aligned} \tag{3.8}$$

где $x_{ij} = \left| r_{x_i} - r_{x_j} \right|$ - расстояние в направлении x между i и j частицей. Функции $F_y^c(t), F_z^c(t)$ определяются аналогичным образом. Отличие направленных корреляционных функций от обычной кейгеновой функции C_{cage}^c, введенной Рабани, заключается в том, что они описывают локализацию частиц не в клетке с определенным радиусом, а только вдоль выбранного направления (см.рис.3.24).

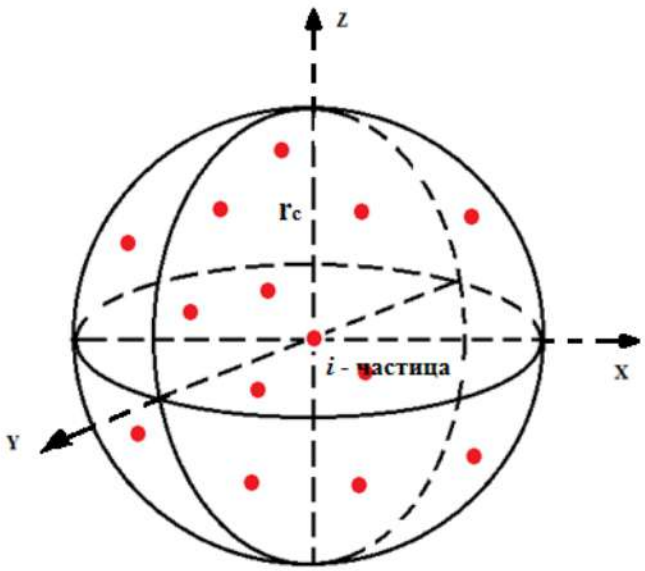


Рисунок 3.24 – Схематическое представление вычиления направленных кейгеновой корреляционных функции частиц в трехмерной системе

Результаты вычислений представлены на рисунке 3.25 для $\Gamma = 10$ и $\kappa = 1$. Панель (а) соответствует очень малому значению магнитного поля $\beta = 0.001$, где все компоненты кейгеновой корреляционной функции совпадают (т.е. $C_x^7(t) = C_y^7(t) = C_z^7(t)$). Когда магнитное поле увеличивается (см. рис. 3.25 (б) для $\beta = 0.5$) наблюдается значительно сильное удержание частиц, движущихся поперек (x, y) магнитному полю по сравнению с частицами направленных вдоль z, т.е. магнитному полю. Эффект усиливается, когда значение β достигает более высокого значения, что видно из рисунка 3.25 (с) для сильного магнитного поля со значением параметра $\beta = 2$.

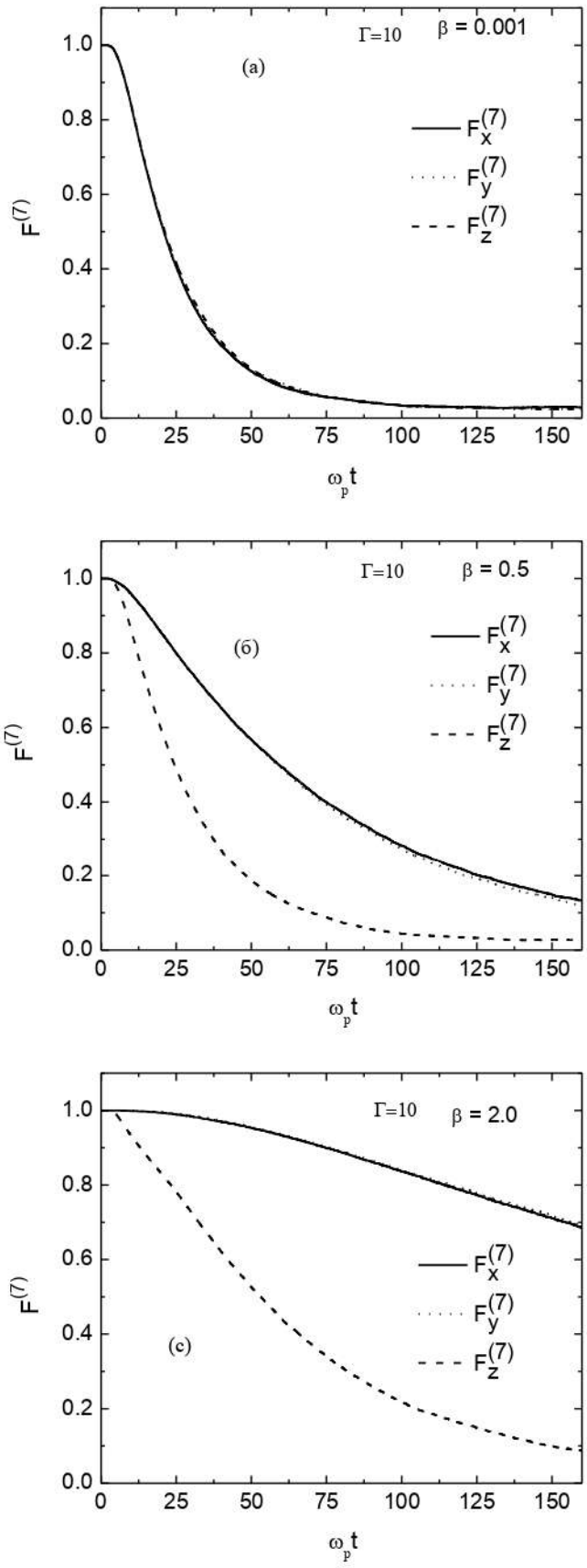
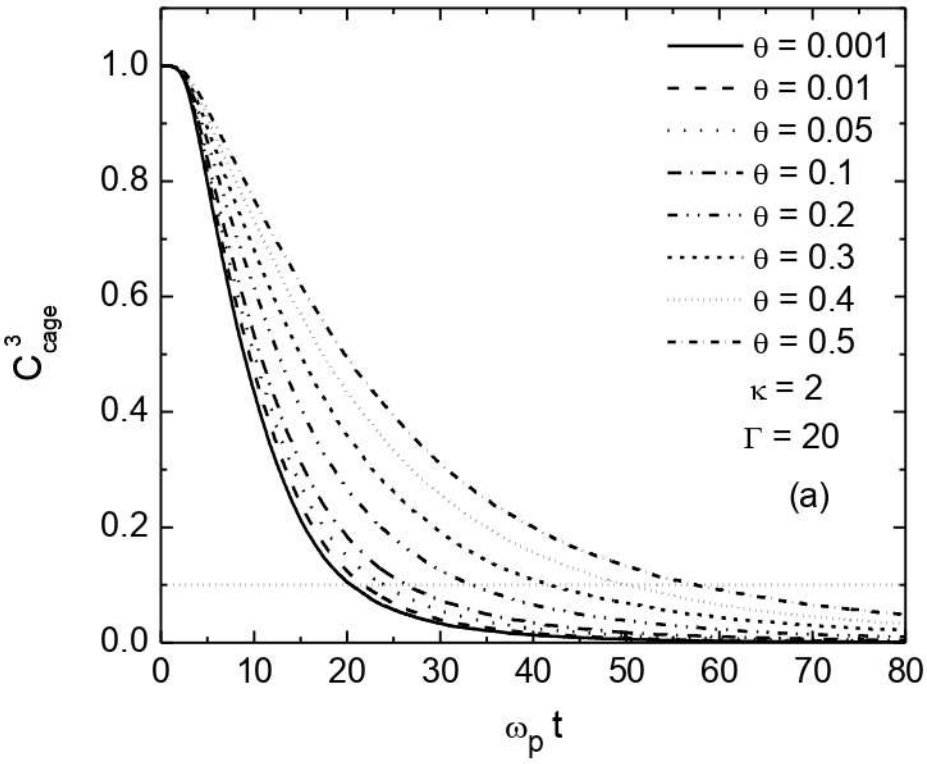
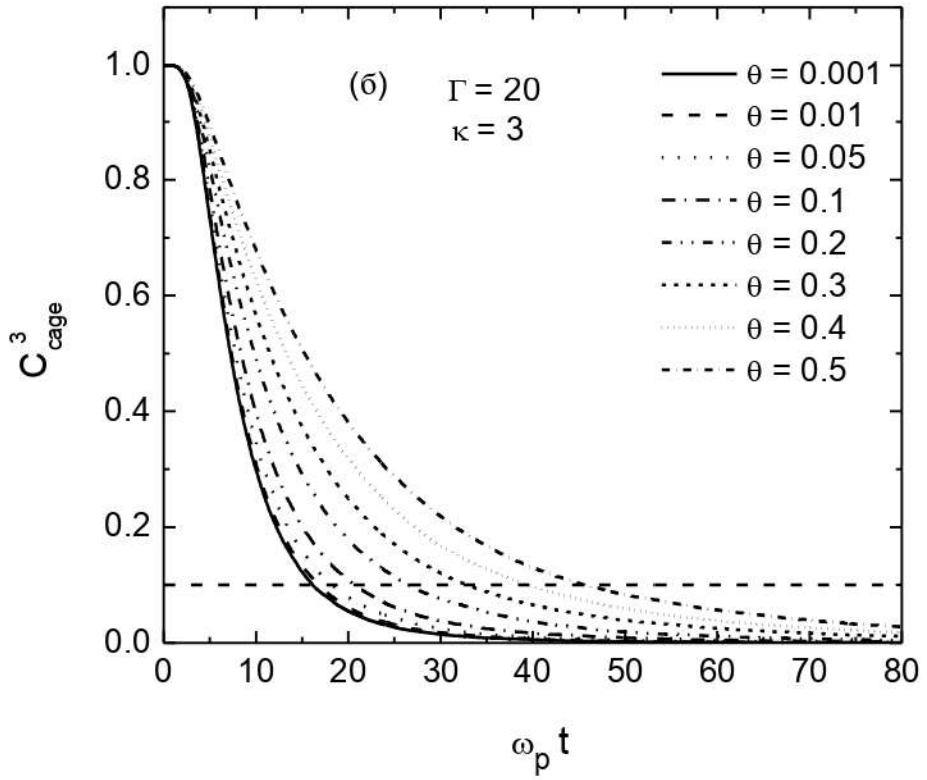


Рисунок 3.25 - $C_x^7(t) = C_y^7(t) = C_z^7(t)$ направленные кейгеновые корреляционные функции при $\Gamma = 10$ и $\kappa = 1$ для разных значений параметра магнитного поля

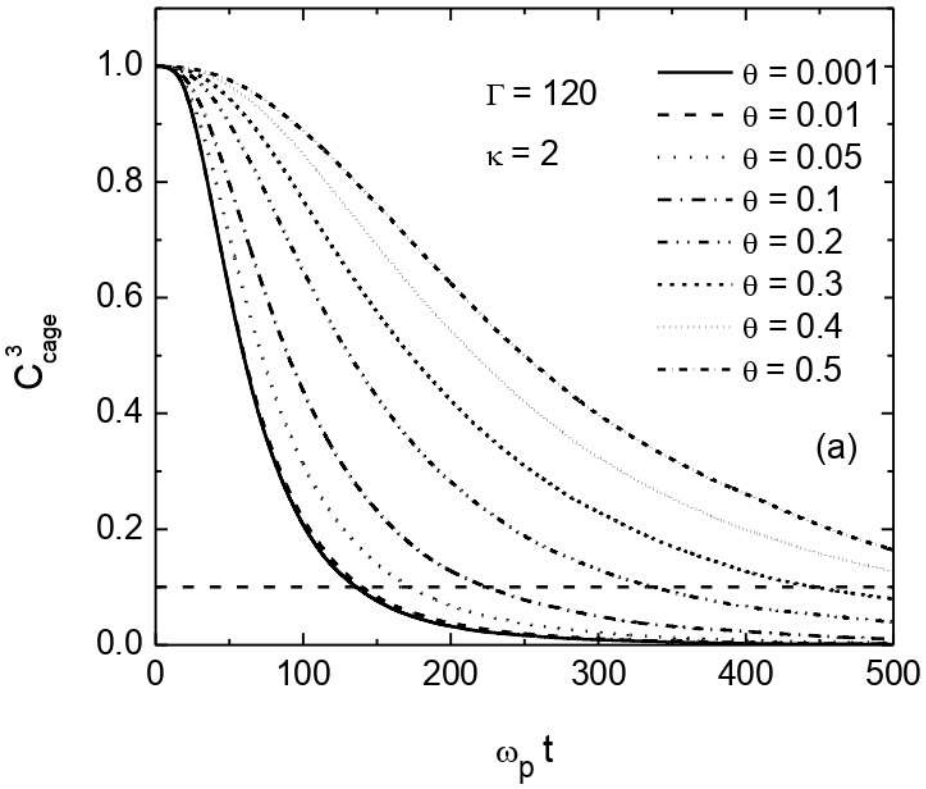
Все данные результаты приведены для случая, когда не учитывается сила трения в уравнениях движения частиц. Влияние диссипации в системе на кейгеновые корреляционные функции представлено на рисунках 3.26 и 3.27 в широком диапазоне изменения параметров системы. Из этих рисунков можно увидеть, что увеличение трения увеличивает время декорреляции частиц и приводит к более медленному убыванию корреляционной функции. Это можно объяснить тем, что сильное трение и последующее случайное движение препятствуют выходу частиц из клеток. При $\Gamma = 20$ находим, что время декорреляции увеличивается почти в три раза с увеличением параметра трения до $\theta = 0.5$.

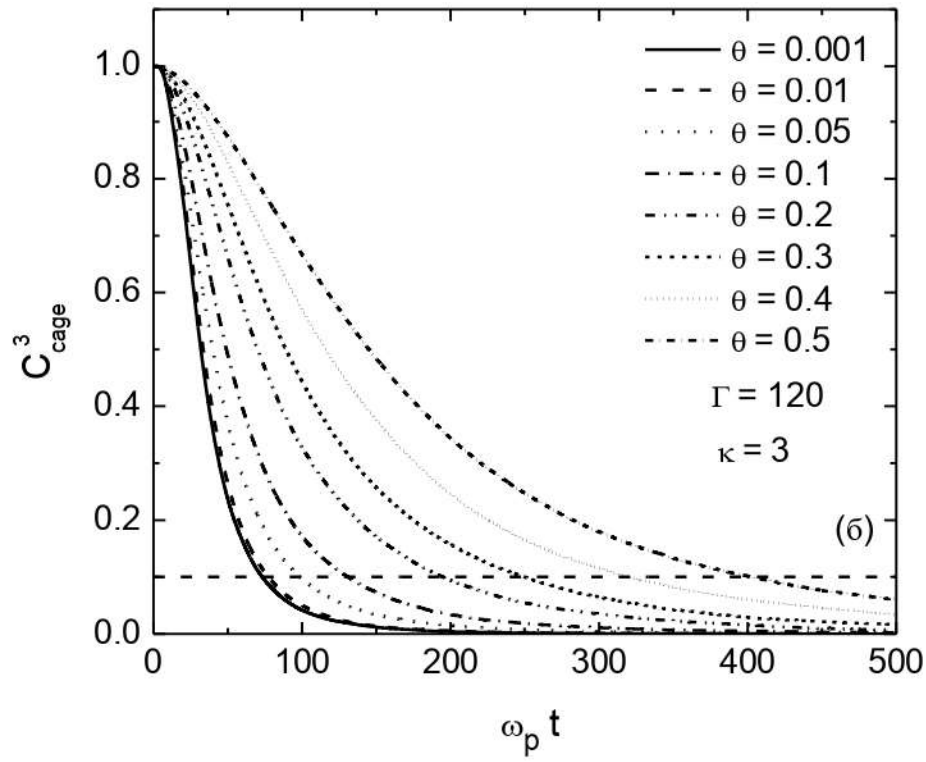




(а) - $\kappa = 2$; (б) - $\kappa = 3$.

3.26 - Кейгеновые корреляционные функции при разных значениях коэффициента трения, $\beta = 0$, $\Gamma = 20$

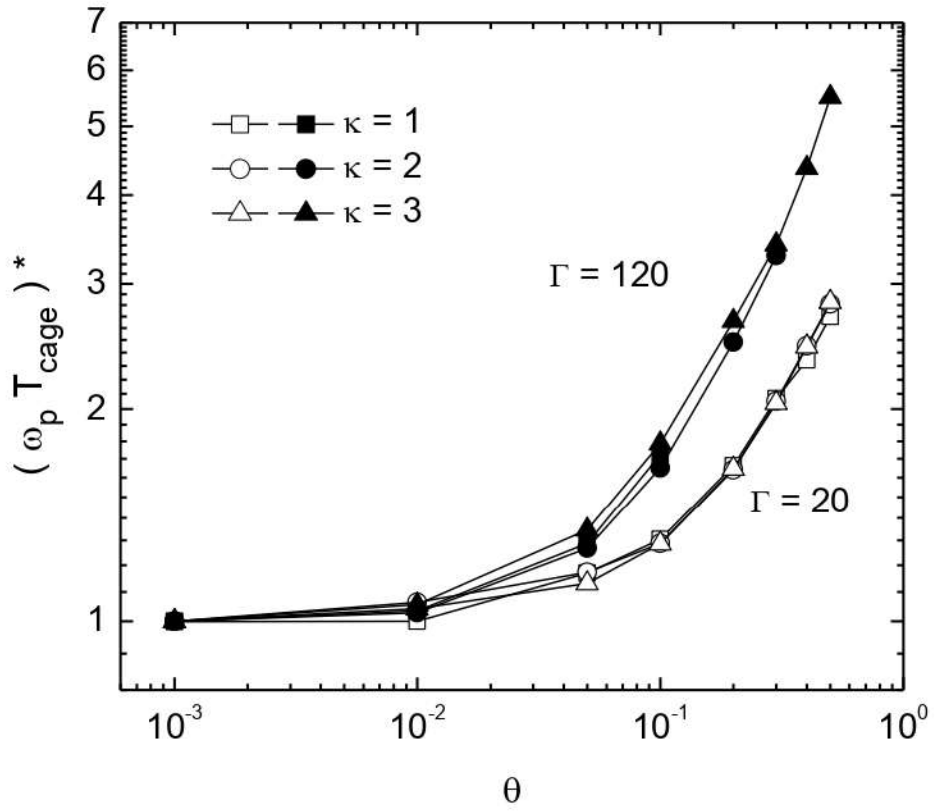




(а) - $\kappa = 2$; (б) - $\kappa = 3$.

3.27 – Кейгеновые корреляционные функция при разных значениях коэффициента трения, $\beta = 0$, $\Gamma = 120$

Увеличение параметра связи также сильно влияет на локализацию частиц, что видно из сравнения рисунков 3.26 и 3.27, время декорреляции на рисунке 3.27 увеличивается по сравнению с рисунком 3.26 в указанных пределах коэффициента трения. Полученные данные по времени декорреляции при разных значениях параметра экранировки, но при фиксированных значениях параметра связи связаны универсальными кривыми (рисунок 3.28). Результаты показывают, что трение увеличивает время декорреляции, при этом она почти не зависит от коэффициента экранировки. Время декорреляции увеличивается почти в два раза с увеличением параметра связи в пределах значений коэффициента трения $\theta = 0.001 : 0.5$.



3.28 – Зависимость времени декорреляции от коэффициента трения пылевых частиц при разных значениях параметра экранировки, $\beta = 0$

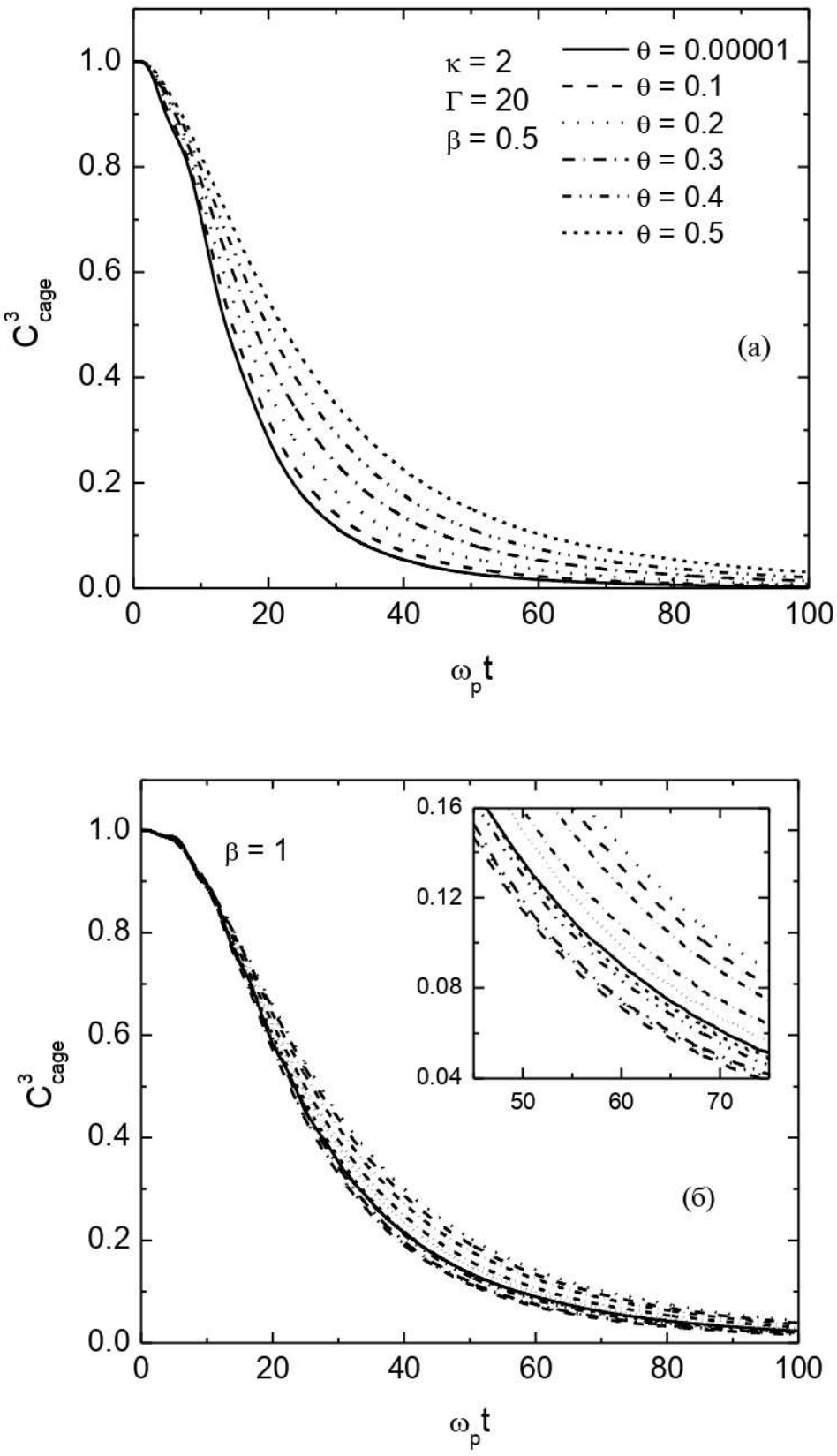
Ниже приведены результаты кейгеновых корреляционных функций, полученные с помощью компьютерного моделирования с учетом влияния магнитного поля и силы трения, обусловленной наличием фоновой среды. При использовании схемы (2.11)-(2.16) значения параметра магнитного поля и коэффициента трения берутся очень маленькими ($10^{-6} - 10^{-5}$), когда не учитывается магнитное поле или сила трения. Полученные таким образом результаты приближаются к результатам при $\beta = 0$ и/или $\theta = 0$ в пределах статистического шума.

На рисунке 3.29(а) представлены результаты $C^3_{cage}(t)$, полученные для параметров системы $\kappa = 2, \Gamma = 20, \beta = 0.5$ при разных значениях коэффициента трения θ. Такой же результат представлен в рисунке 3.29(б) для более высокого значения параметра магнитного поля $\beta = 1.0$. Один период колебаний плазмы без учета влияния магнитного поля, соответствует $\omega_E T \sim 2\pi$, где ω_E - частота Эйнштейна, что отражает замедление динамики за счет влияния экранировки. При данном значении параметра экранировки $\kappa = 2$, находим $\omega_E / \omega_p T \cong 0.49$ в результате $\omega_p T \approx 4\pi \approx 12.6$. Времена декорреляции для условий на рисунке 3.29(а) составляют по времени более 2-5 плазменных колебаний. Такое длинное затухание характерно для сильно связанной плазмы, где временной масштаб диффузии частиц медленнее по сравнению с плазменными колебаниями, частицы являются «квазилокализованными» на потенциальной поверхности.

Сравнивая панели (а) и (б) на рисунке 3.29, можно заметить, что увеличение трения имеет более сильное влияние на корреляционную функцию при малых значениях параметра магнитного поля. При $\beta = 0.5$ корреляционная функция монотонно возрастает с ростом θ, однако при $\beta = 1.0$ кейгеновая функция показывает немонотонное поведение. Возрастающее значение θ сдвигает пересечение корреляционных функций с линией $C^3_{cage} = 0.1$ в сторону более низких времен, а затем с $\theta \approx 0.1$ увеличение θ ведет к увеличению времени декорреляции.

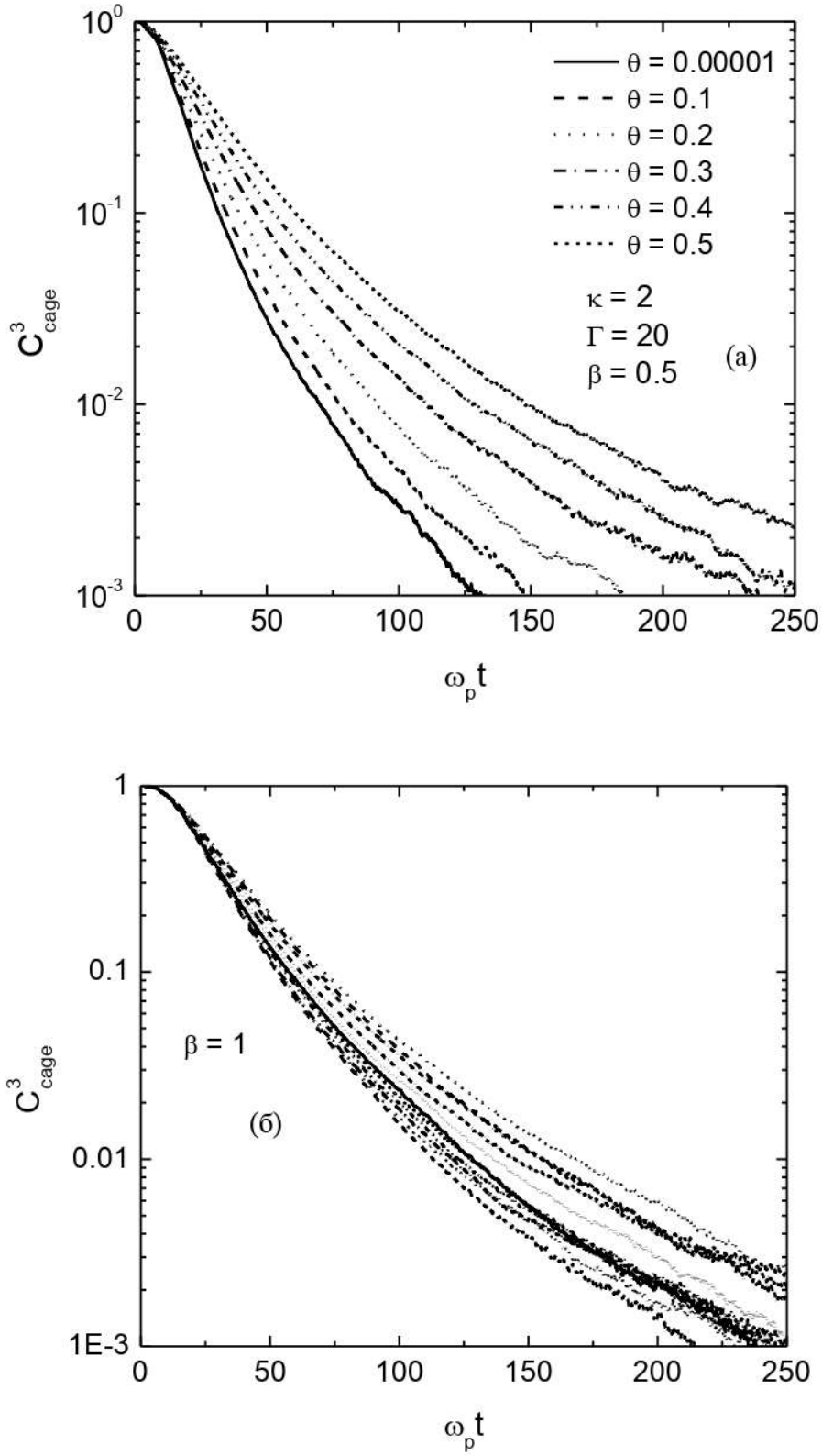
На рисунке 3.30 представлены одинаковые результаты с результатами рисунка 3.29(б), но в полулогарифмическом масштабе для получения детальной информации о затухании кейгеновой корреляционной функции в более длительные периоды времени. Немонотонность затухания кривых с увеличением параметра трения подтверждено в более длительные периоды времени (рисунок 3.30(б)).

Влияние внешнего магнитного поля на кейгеновые корреляционные функции для $\kappa = 2, \Gamma = 20$ при $\theta = 0.1$ (а) и $\theta = 0.5$ (б) представлено на рисунке 3.31. Корреляционная функция монотонно увеличивается с увеличением параметра магнитного поля в обоих случаях. Более сильная зависимость от параметра магнитного поля обнаружена при малых значениях параметра трения. Данные результаты представлены в полулогарифмическом масштабе на панелях (а) и (б) рисунка 3.32.



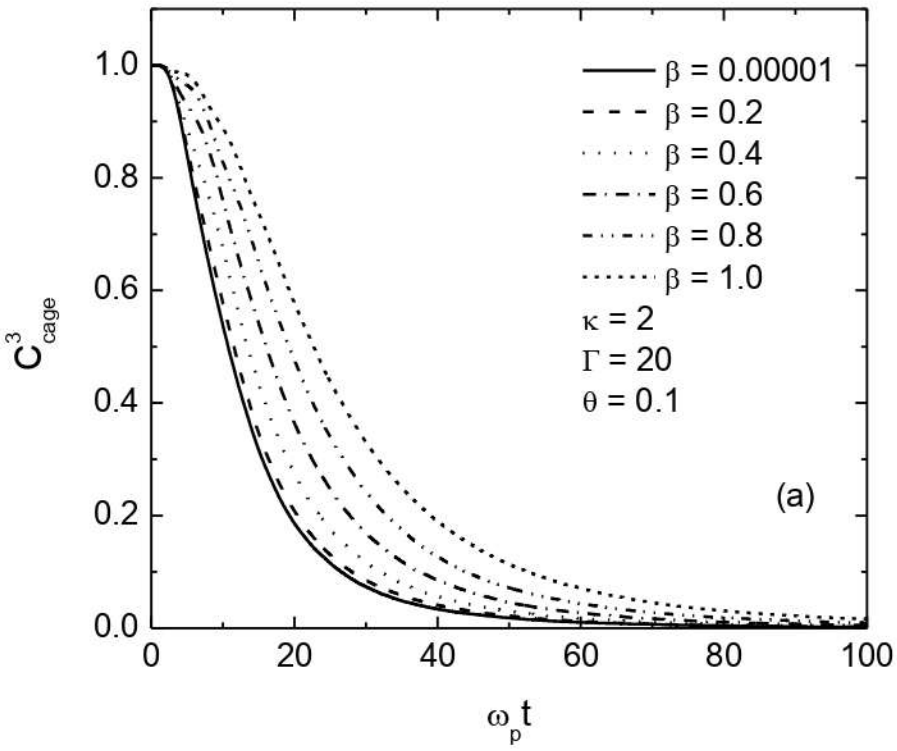
(а) - $\beta = 0.5$; (б) - $\beta = 1.0$.

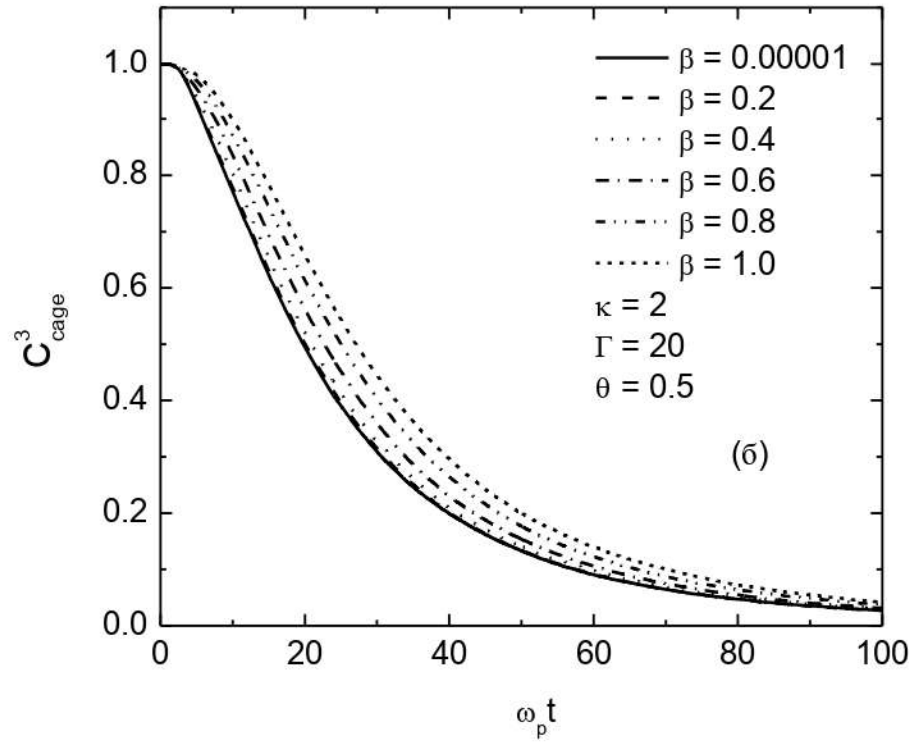
Рисунок 3.29 – Кейгеновая корреляционная функция $\kappa = 2, \Gamma = 20$ разных значениях коэффициента трения θ



(а) - $\beta = 0.5$; (б) - $\beta = 1.0$.

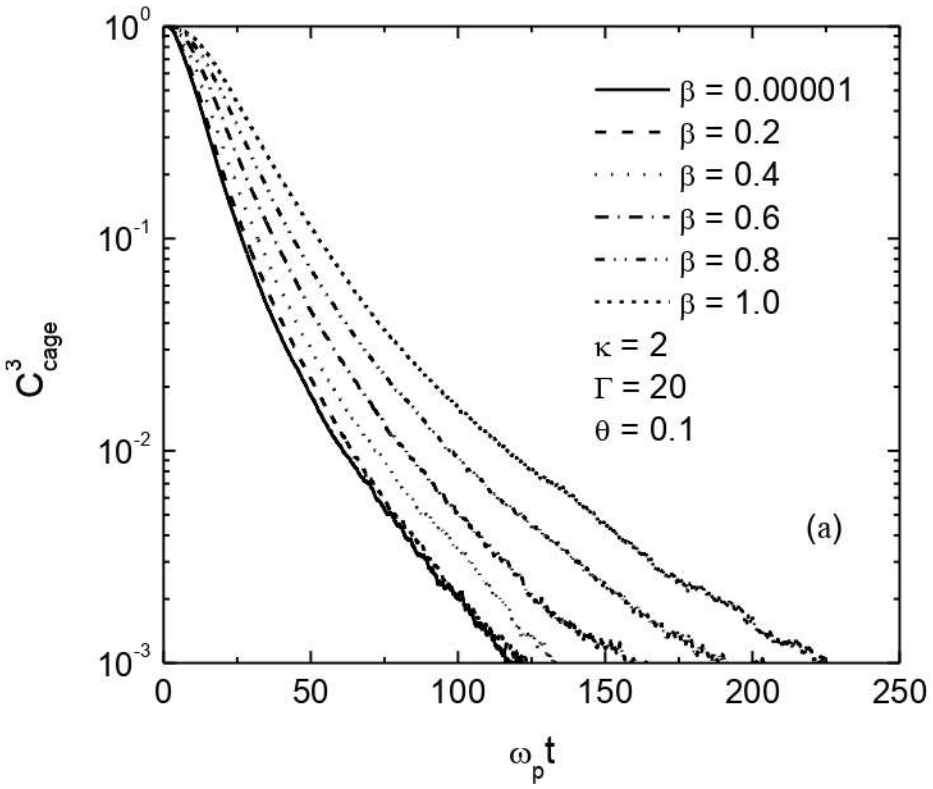
Рисунок 3.30 – Кейгеновая корреляционная функция $\kappa = 2, \Gamma = 20$ при разных значениях коэффициента трения θ в полулогарифмическом масштабе

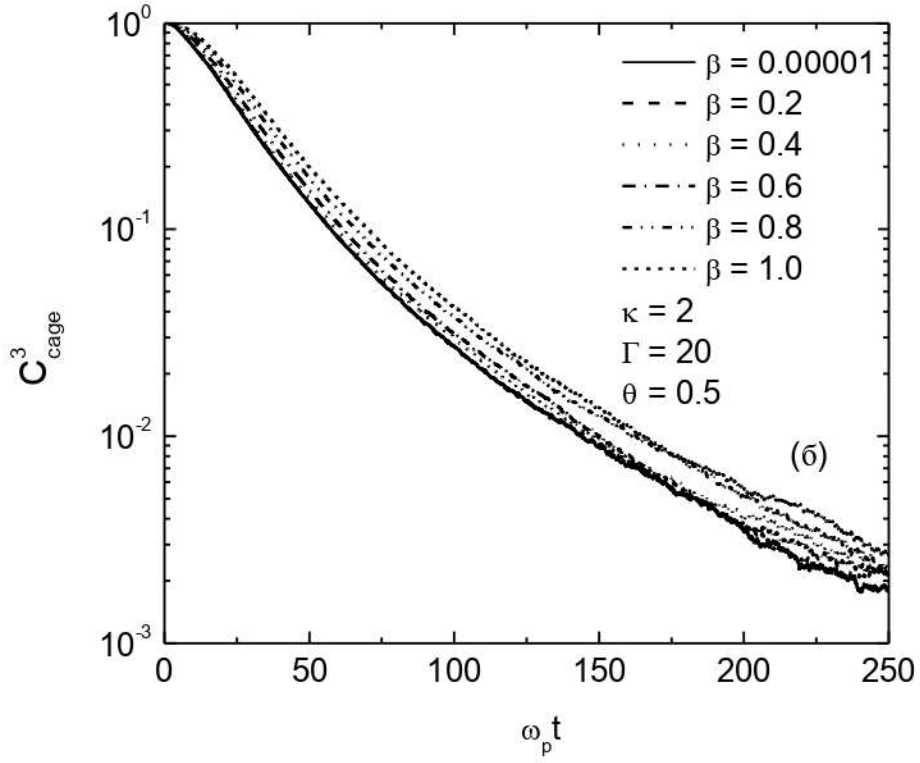




(а) - $\theta = 0.1$; (б) - $\theta = 0.5$.

Рисунок 3.31 – Кейгеновая корреляционная функция $\kappa = 2, \Gamma = 20$ при разных значениях коэффициента магнитного поля β

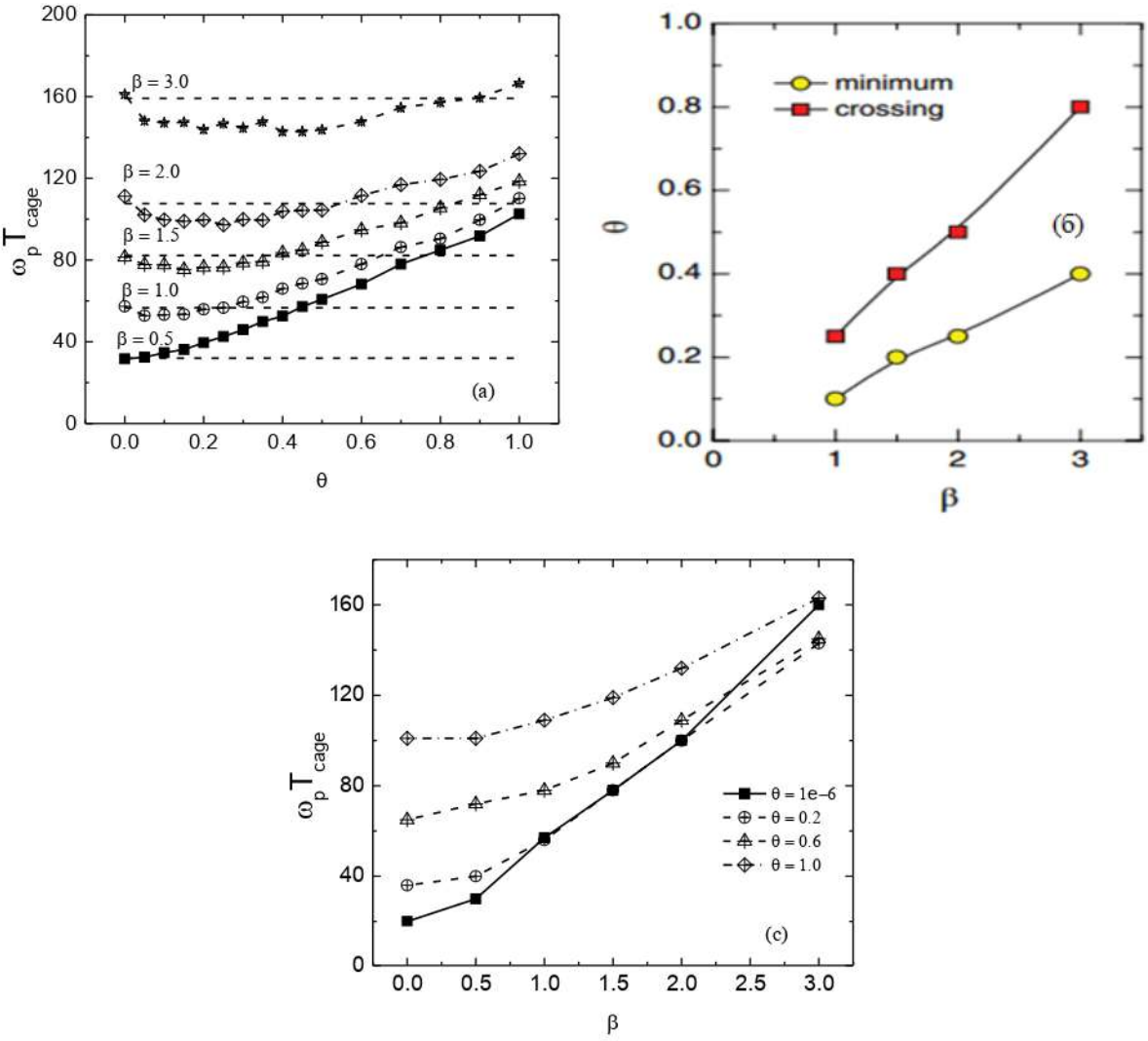




(а) - $\theta = 0.1$; (б) - $\theta = 0.5$.

Рисунок 3.32 – Кейгеновая корреляционная функция $\kappa = 2, \Gamma = 20$ при разных значениях коэффициента магнитного поля β в полулогарифмическом масштабе

Немонотонная зависимость времени декорреляции от коэффициента трения проанализирована на рисунке 3.33(а). При малых значениях магнитного поля время декорреляции увеличивается монотонно с увеличением коэффициента трения. При $\beta > 0.5$, однако, как уже показано на рис. 3.29(б), эта зависимость немонотонна. Эффект, когда время декорреляций сначала уменьшается как функция θ, становится более выраженным при высоких значениях параметра магнитных поля. Значение θ при котором время декорреляции принимает минимальное значение $T_{cage}(\theta_{\min})$, а также значение θ_{cross}, то есть когда магнитное поле и сила трения компенсируют друг друга, увеличивается с увеличением параметра магнитного поля. Данная зависимость представлена на рисунке 3.33(б). Обе зависимости почти линейны, минимум возникает при $\theta_{\min} \approx 0.13\beta$, а пересечение находится при $\theta_{cross} \approx 0.26\beta$. Зависимость времени декорреляции от параметра магнитного поля β при разных значениях коэффициента трения при фиксированных значениях параметра связи и экранировки представлена на рисунке 3.33(с). Данная зависимость монотонна для фиксированных значений коэффициента трения.



(а)- зависимость времени декорреляции от коэффициента трения θ при заданных значениях параметра магнитного поля β, пунктирные горизонтальные линии соответствуют T_{cage} при $\theta = 0$; (б) - значения коэффициента трения при минимальных значениях коэффициента декорреляции и при пересечении с горизонтальными линиями ($\theta > 0$) на панели (а);(с)- время декорреляции как функция нормированного параметра магнитного поля для выбранных значений коэффициента трения.

Рисунок 3.33 – Зависимость времени декорреляции от параметров системы,

Одновременное влияние внешнего магнитного поля и силы трения на кейгеновые корреляционные функции нетривиально. В предыдущих пунктах диссертации было показано, что когда магнитное поле и силы трения действуют в одиночку, время декорреляции увеличивается. Магнитное поле приводит к увеличению времени декорреляции, заставляя частицы двигаться по круговым траекториям. Когда ларморовский радиус меньше, чем межчастичный радиус, диффузионное движение по силовым линиям значительно затруднено, и время декорреляции увеличивается. Влияние трения на времена декорреляции аналогично, но является результатом другого физического механизма. Как было ранее объяснено, наличие фонового газа моделируется с помощью механизма затухания на фоне (как континууме) и случайной («броуновской») силой, которая показывает случайные толчки частицами окружающей среды. Первый из них замедляет, а второй увеличивает энергию частицы, но меняет направление ее скорости хаотично.

3.4 Коэффициент диффузии пылевых частиц

Использование результатов моделирования для исследования транспортных свойств, в частности для вычисления коэффициента диффузии частиц пылевой плазмы является актуальной задачей для многих систем. Коэффициент диффузии может быть вычислен на основе среднеквадратичного смещения частиц и на основе автокорреляционных функций скоростей, с помощью соотношения Грина-Кубо. Также в работе [103], авторы установили связь между выходом одной частицы из клетки и процессом диффузии [149,150] следующим образом. Как ранее было объяснено, кейгеновая корреляционная функция C^{c}_{cage} означает вероятность выхода меньше чем c частицы из клетки. Поэтому, вероятность выхода ровно одной частицы из клетки вычисляется следующим образом:

$$P_1(t) = C^{c=2}_{cage}(t) - C^{c=1}_{cage}(t). \tag{3.9}$$

Мы нашли, что $P_1(t)$ показывает экспоненциальное затухание (кроме начального времени):

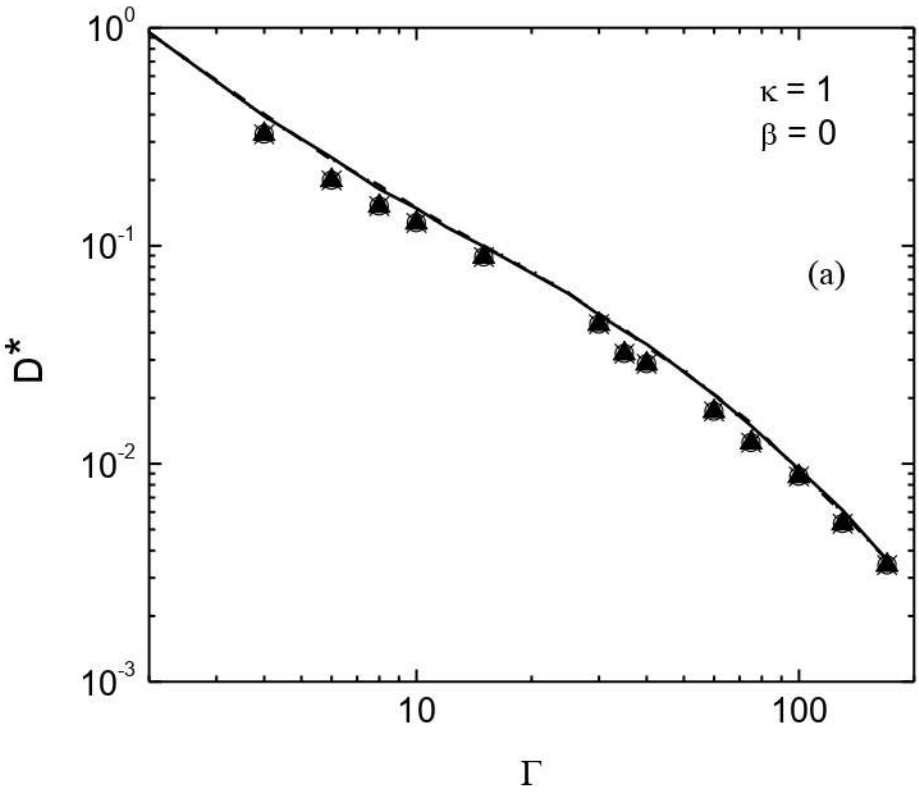
$$P_1(t) = A\exp(-t/t_0), \tag{3.10}$$

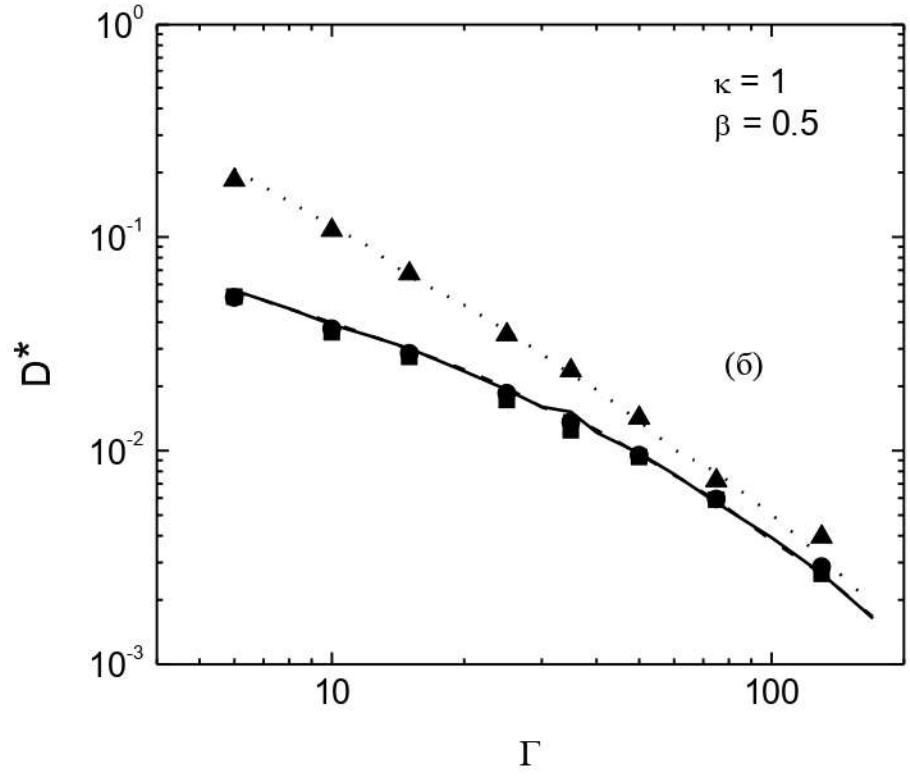
где t_0 - характерное время, связанное с прыжком одной частицы через границы клетки, которое является функцией параметров системы (Γ, κ, β). Мы определили характерную длину δ этих прыжков. Так как мы предполагаем, что все частицы находятся в состоянии покоя, кроме одной частицы, которая совершает прыжок из клетки, среднеквадратичное смещение, связанное с

прыжком одной частицы и усредненное по всем частицам будет $\frac{\delta^2}{14}$. Это дает возможность вычислить коэффициент диффузии:

$$D_c = \frac{\delta^2}{14 t_0}. \qquad (3.11)$$

Коэффициент диффузии, вычисленный с помощью данного подхода, может быть сравнен с коэффициентом диффузии, вычисленным на основе среднеквадратичного смещения частиц методом молекулярной динамики. Следующие результаты получены только с учетом внешнего магнитного поля. Рисунки 3.34 и 2.35 показывают сравнение между приведенным коэффициентом диффузии $D^* = D / \omega_p a^2$, вычисленным на основе кейгеновой корреляционной функции, где значение $\frac{\delta}{a} = 0.71$ - характерная длина прыжков, и коэффициентом диффузии, вычисленным на основе среднеквадратичного смещения. Значение $\frac{\delta}{a} = 0.71$ близко к среднему разделению частиц ~ a, то есть это значение можно рассматривать как прыжок частиц, при котором частицы меняют свои позиции. Коэффициенты диффузии, полученные двумя способами, показывают хорошее согласие между собой для всех значений параметров системы Γ, κ, β.





(а) - получен с помощью кейгеновой корреляционной функции; (б)-методом среднеквадратичного смещения.

Рисунок 3.34 – Сравнение коэффициента диффузии

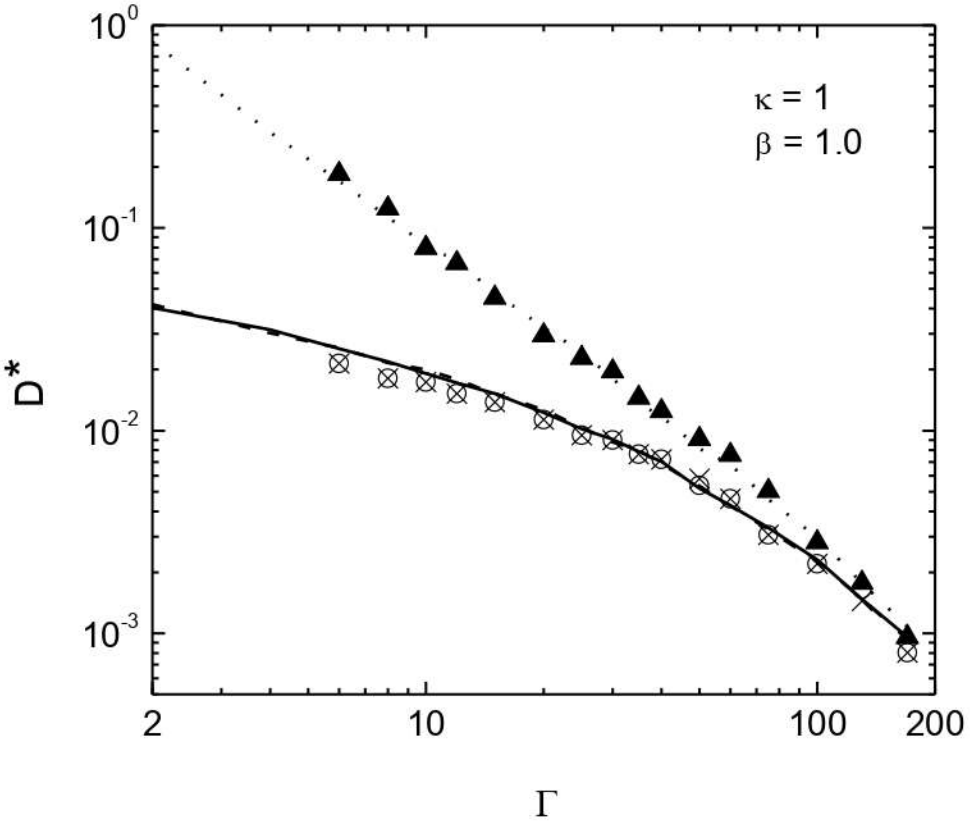


Рисунок 3.35 – Сравнение коэффициента диффузии, полученного с помощью кейгеновой корреляционной функции и методом среднеквадратичного смещения

Также для полноты информации по коэффициенту диффузии, данная величина была получена на основе метода компьютерного моделирования ланжевоновой динамики с $\beta = 0$ и $\theta \neq 0$.

Коэффициент диффузии вычислялся с помощью среднеквадратичного смещения частиц, в трехмерном случае он записывается в следующем виде:

$$\mathrm{D}_{\mathrm{msd}} = \lim_{t\to\infty}(\left\langle \vec{r}(0) - \vec{r}(t) \right\rangle^2 / 6t). \qquad (3.12)$$

Также коэффициент диффузии можно вычислить с помощью соотношения Грина - Кубо:

$$\mathrm{D}_{\mathrm{G\text{-}K}} = \frac{1}{3}\int_0^\infty A_{\upsilon\upsilon}(t)dt, \qquad (3.13)$$

здесь $A_{\upsilon\upsilon}(t)$ – автокорреляционная функция скоростей.

В работе [98,136] приведены расчеты коэффициента диффузии,

вычисленного по соотношениям (3.12) и (3.13), полученные результаты находятся в хорошем согласии. Но для метода Грина-Кубо нужно меньше времени для достижения стационарного состояния.

Расчеты коэффициента диффузии были проведены в широком диапазоне изменения параметров, характеризующих систему. На основе интерполяции этих данных была получена интерполяционная формула для приведенного коэффициента диффузии пылевой компоненты плазмы сложного состава:

$$D = \frac{A\ k_B T}{(\nu + B)m}, \tag{3.14}$$

где A и B – интерполяционные коэффициенты, а m – масса частиц.

На рисунке 3.36 представлены результаты зависимости коэффициента диффузии от коэффициента трения ν для параметров системы: $\Gamma = 50, \kappa = 2, Z = 8000$ (а) и $\Gamma = 50, \kappa = 2, Z = 12000$ (б). Зависимости коэффициентов A и B от эффективного параметра связи Γ^* при разных значениях зарядового числа Z представлены на рисунке 3.37. $\Gamma^* = \Gamma(1 + \kappa + \kappa^2/2)\exp(-\kappa)$ - эффективный параметр связи, зависящий как от Γ, так и от κ. Удобство введения эффективного параметра связи заключается в том, что было замечено проявление эффекта подобия, т.е. при любых комбинациях значений Γ и κ, если они дают одно и тоже значение эффективного параметра связи, свойства системы будут аналогичны. Эффективный параметр связи используется во многих работах по моделированию систем с Юкавовским потенциалом взаимодействия. Как можно увидеть из данных результатов, коэффициент A слабо зависит от заряда пылевых частиц, и сильно зависит от эффективного параметра связи Γ^*, в чем можно убедиться из рисунка 3.37(а). Коэффициент B зависит и от параметра заряда и от эффективного параметра (см.рисунок 3,37(б)). С увеличением заряда пылевых частиц пропорционально увеличивается коэффициент B.

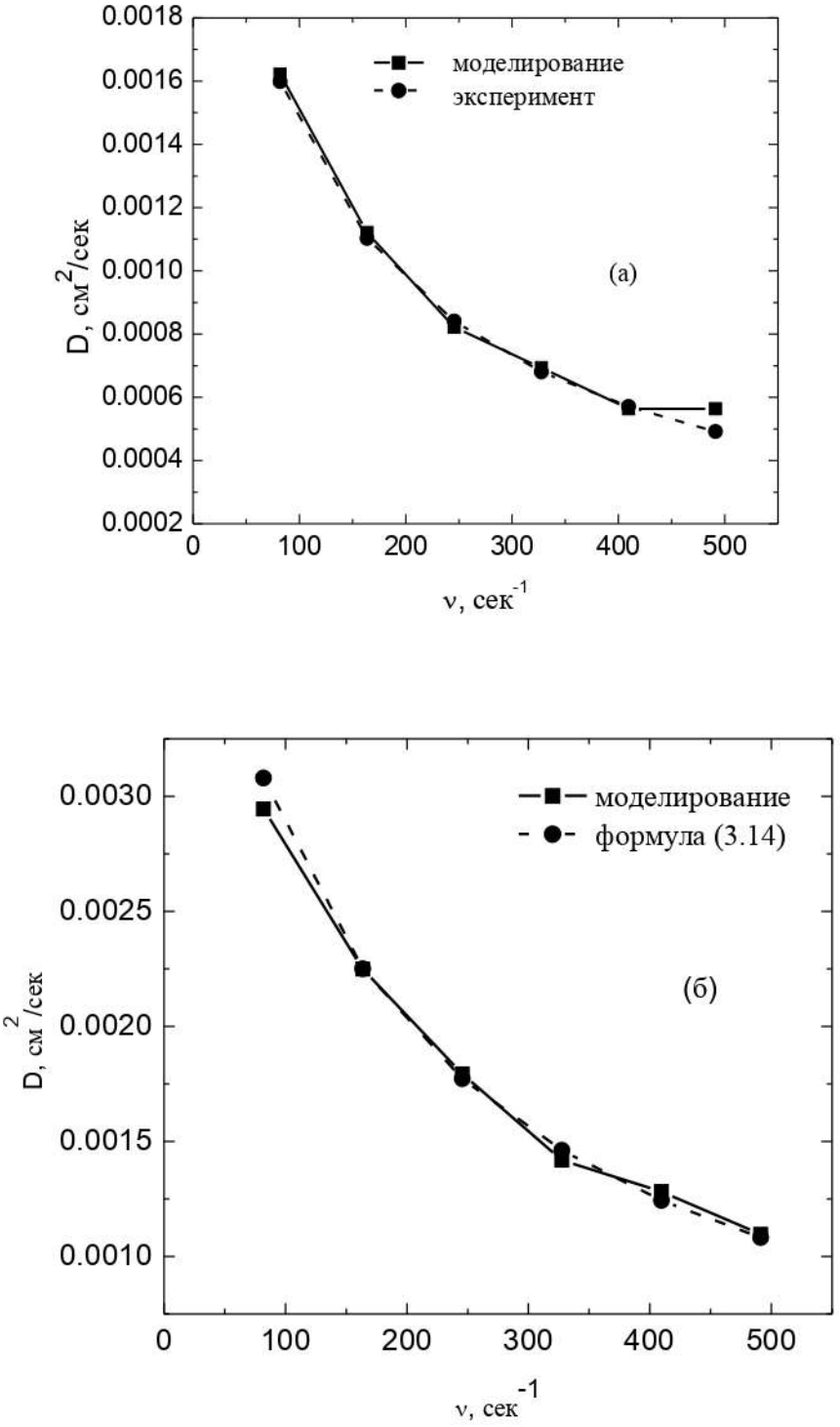
Безразмерный вид данного соотношения можно записать следующим образом:

$$D / D_0 = \frac{A(\Gamma^*)}{(1 + C(\Gamma^*, \theta))}, \tag{3.15}$$

где $D_0 = k_B T / (\nu m)$ - соотношение Эйнштейна для коэффициента диффузии не взаимодействующих частиц в жидкости, $C(\Gamma^*, \theta) = \frac{B(Z, \Gamma^*)}{\nu} = \frac{\omega_d B'(\Gamma^*)}{\nu} = \frac{B'(\Gamma^*)}{\theta}$.

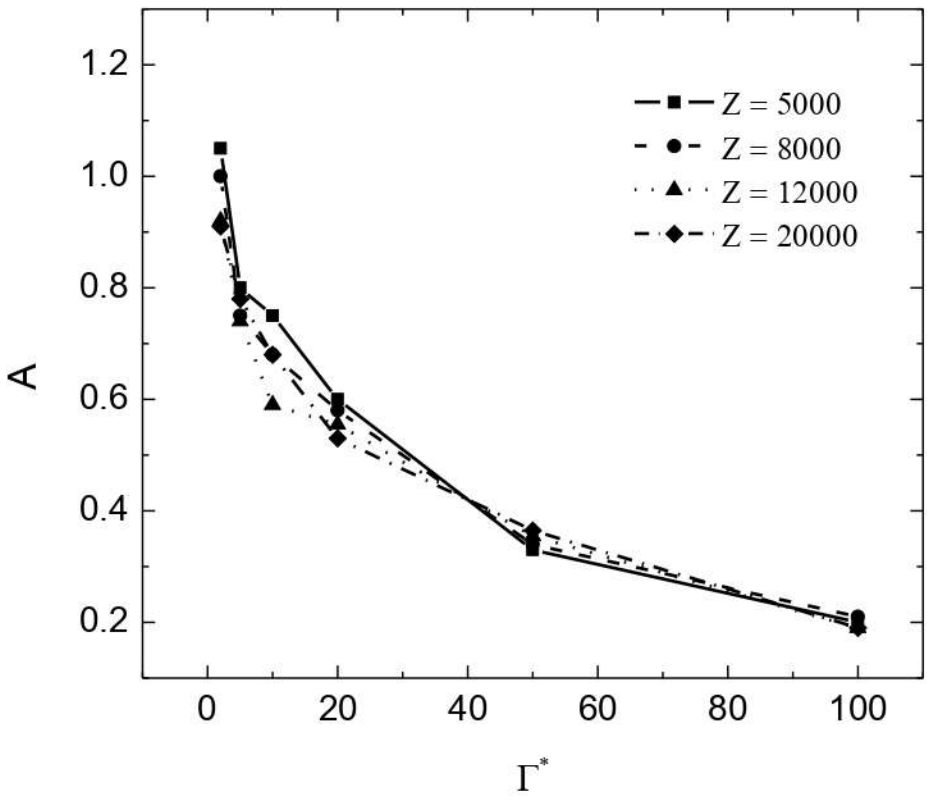
Численные коэффициенты $A(\Gamma^*)$ и $C(\Gamma^*, \theta)$ описываются следующими интерполяционными соотношениями:

$$A(\Gamma^*) = \frac{7.5}{(6+\sqrt[5]{\Gamma^{*4}})},\ C(\Gamma^*,\theta) = \frac{1}{\theta(5+\sqrt{\Gamma^*})}. \qquad (3.16)$$



(а)- $\Gamma = 50, Z = 8000, \kappa = 2$; (б)- $\Gamma = 50, Z = 12000, \kappa = 2$

Рисунок 3.36 – Коэффициент диффузии



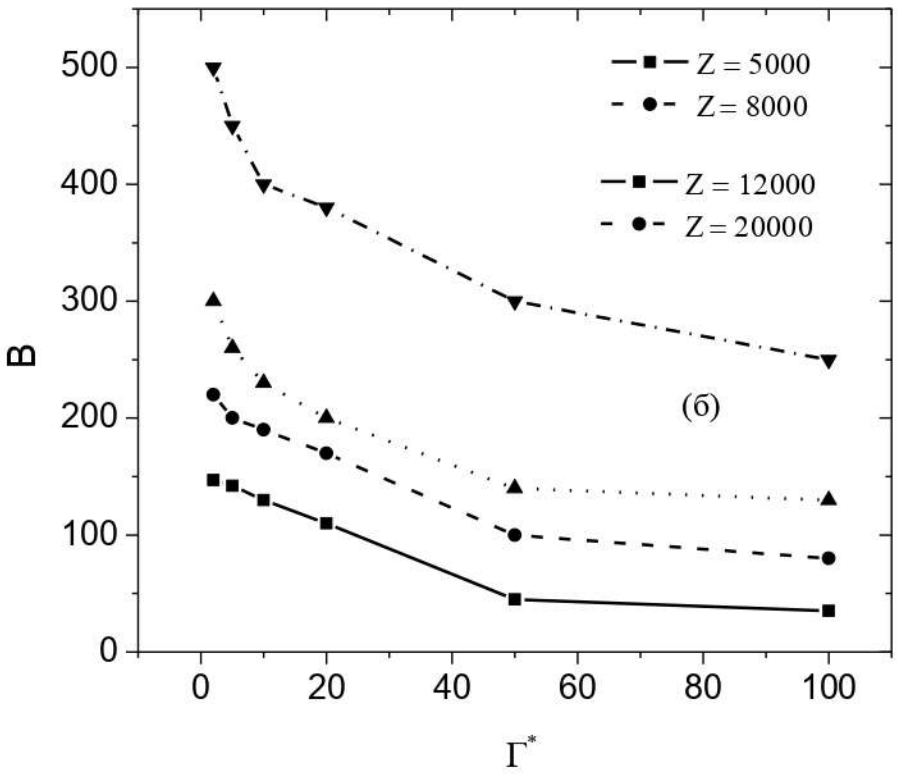
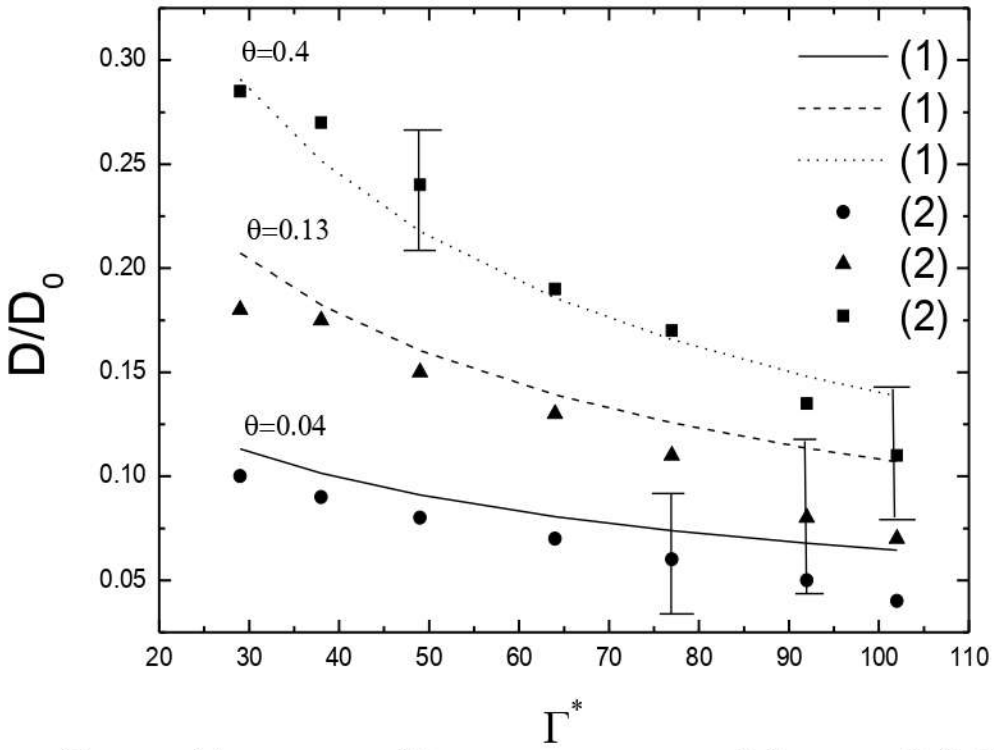


Рисунок 3.37 – Зависимость коэффициента A и B от эффективного параметра связи Γ^*



(1) - коэффициент диффузии, вычисленный формулой (3.15);
(2) – коэффициент диффузии, полученный в работе [151].

Рисунок 3.38 - Зависимости приведенного коэффициента диффузии от Γ^* (эффективного параметра связи) при разных значениях θ

На рисунке 3.38 приведено сравнение коэффициента диффузии, расчитанного по формуле (3.15), и данных экспериментов, проведенных в космосе в условиях микрогравитации [151]. Максимальное отклонение результатов численного моделирования от экспериментальных данных составляет около 30%, при этом погрешность экспериментального определения коэффициента диффузии составляет также около 30-40%. Данная формула может быть использована при расчетах параметров реальных технологических установок, использующих плазму с конденсированной дисперсной фазой, например, в установках по получению микросхем.

4 АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ КОМПЛЕКС КОМПЬЮТЕРНЫХ ПРОГРАММ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЯ СВОЙСТВ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В данной главе рассматриваются разработанные автоматизированные комплексы компьютерных программ [152] по исследованию и моделированию физических свойств пылевой плазмы методами ланжевеновой и молекулярной динамики:

1. Автоматизированный комплекс «Magnetized Dusty Plasma» для исследования свойств пылевой плазмы под действием внешнего магнитного поля.

2. Автоматизированный комплекс «Структурные и диссипативные свойства в магнитоактивной плазме» для анализа и моделирования свойств пылевой плазмы под действием внешнего магнитного поля и диссипативных сил.

Комплексы были созданы в среде объектно-ориентированного программирования Borland Delphi7, с использованием дополнительных компонентов. Первый комплекс был построен на основе метода компьютерного моделирования молекулярной динамики, где диссипативные процессы в системе не учитываются, тогда как второй комплекс позволяет исследовать физические свойства пылевой плазмы методом ланжевеновой динамики.

Цель разработки интерфейса, обеспечивающего передачу информации между пользователем-человеком и программно-аппаратными компонентами компьютерной системы - сделать общение пользователя с компьютером простым и естественным, насколько это возможно. Вводимый или запрашиваемый пользователем характер информации выделяет несколько групп функций взаимодействия интерфейса с пользователем:

1. Первой из функций является справочная функция, в которой выводится информация или справка о состояние исследуемой системы, методах исследования, возможностях комплекса и т.д. Отдельные справки, занимающие значительную часть экрана, целесообразно выводить только по запросу пользователя, передаваемому через интерфейс управления.

2. Приём информации от пользователя и контроль управляющей информации. На модули этого интерфейса целесообразно возложить и первичный (лексический) контроль вводимой информации, чтобы исключить явные ошибки пользователя, в том числе случайное нажатие клавиш.

3. Ввод данных, и вывод данных на экран или печатающее устройство.

4. Внешний интерфейс должен обеспечить ввод данных из файлов базы данных или вывод данных в файл. К функциям внешнего интерфейса можно отнести и действия по сохранению состояния программы и данных при временном прерывании работы с программой.

Созданный интерфейс пользователя удовлетворяет требованиям стандарта CUA (Common User Access), разработанному фирмой IBM и включающего в

себя систему меню, контекстно-зависимую помощь, многооконный интерфейс, позволяющий вычислять величины системы, возможность просмотра выходных документов, в виде графика полученных результатов.

Интерфейс максимально приближен пользователю, и пользователь полностью может управлять за ходом действия программы. Для того, чтобы максимально приблизить интерфейс к пользователю были использованы привычные терминологии, настройка на реалии пользователя, дружелюбие интерфейса и прозрачность интерфейса.

Использование привычной терминологии приблизит задачу к терминологии пользователя, что позволяет пользователю быстро переключиться с методов прежней работы на интерфейс приложения.

Настройка на реалии пользователя позволяет пользователю отображать реалии прежних знаний бумажного процесса на программный интерфейс.

Прозрачность интерфейса, при которой пользователю нет необходимости концентрировать внимание на механизме работы приложения и знать алгоритм работы программы. Для него разработанное приложение – инструмент для решения задач.

Согласно второму принципу пользователь может управлять вводом данных, обрабатывая их в различных режимах и в удобной для себя последовательности, а так же прерывать работу без каких-либо отрицательных последствий.

Основным важным требованием программного продукта является его надежность. Надежность технических характеристик программного продукта определяется в основном надежностью компонента и ошибками в конструкции, допущенными при создании.

Доминирующим для надежности комплекса программ является второй фактор - ошибки проектирования. Источниками ненадежности являются непроверенные сочетания исходных данных, при которых отлаженный комплекс программ дает неверные результаты или отказы. Отказ связан с нарушением работоспособности объекта автоматизации и его соответствия требованиям технической документации, что приводит к прекращению выдачи пользователям информации и управляющих воздействий или к значительному искажению ее содержания и темпов выдачи.

Заданной надежности можно достигнуть либо путем повышения надежности компонент (отладкой программ), либо путем введения методов контроля над действиями пользователя, либо совместным сбалансированным применением этих методов повышения надежности.

То есть, при создании автоматизированных программных продуктов одним из главных требований является надежность. Данный комплекс явным и неявным образом не позволяет пользователю делать ошибки, например, при вводе данных. Соответствующие инструкции или сообщения позволят быстро исправить ошибку.

Основной интерфейс комплекса компьютерного моделирования состоит из нескольких вкладок, с помощью которых проводится исследование свойств

магнитоактивной пылевой плазмы. Во время расчетов можно менять параметры системы, нарисовать график полученных результатов, остановить и выйти из программы. На основе данного комплекса получены 2 авторских свидетельств [153,154].

Основное окно программного комплекса продемонстрировано на рисунке 4.1.

При нажатии на кнопку «Динамические свойства» появляются дополнительные вкладки, то есть с помощью данного окна можно вычислить автокорреляционную функцию скоростей, кейгеновые корреляционные функции, коэффициент диффузии. Данная вкладка представлена на рисунке 4.2.

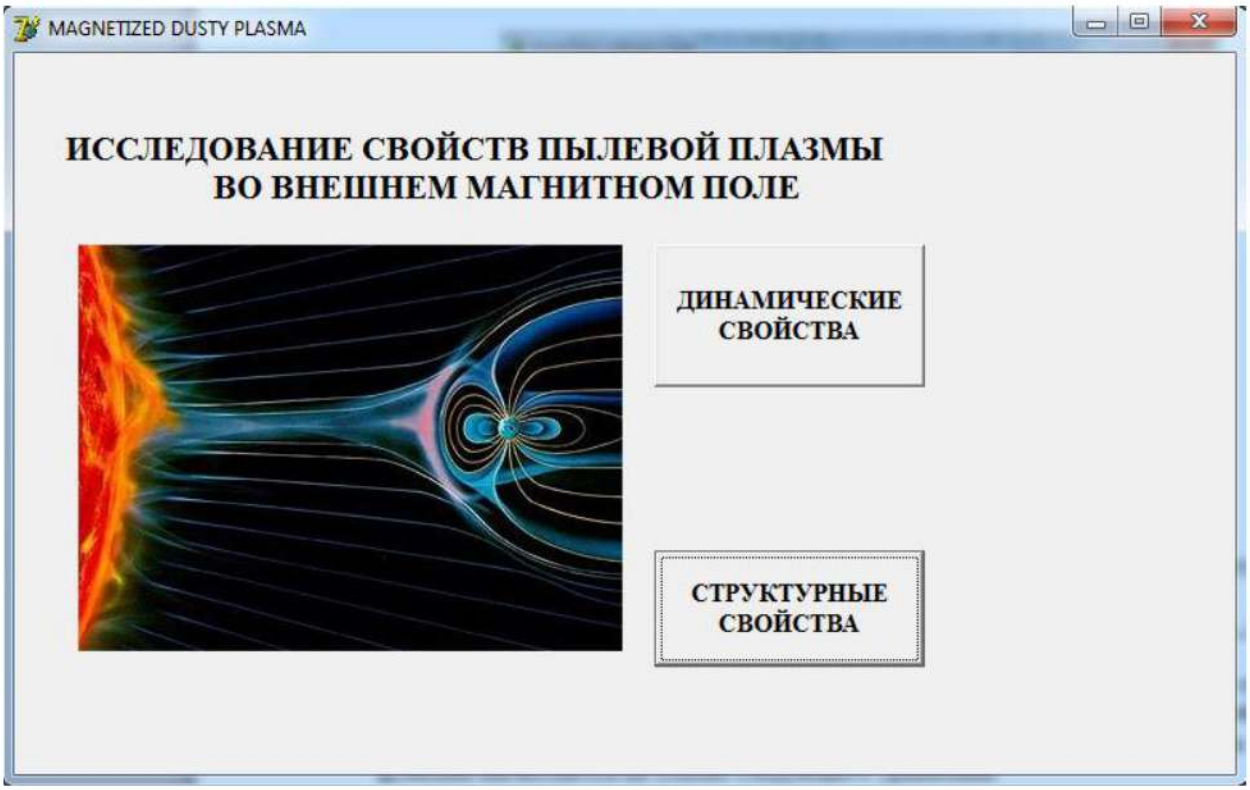


Рисунок 4.1– Основное окно автоматизированного комплекса

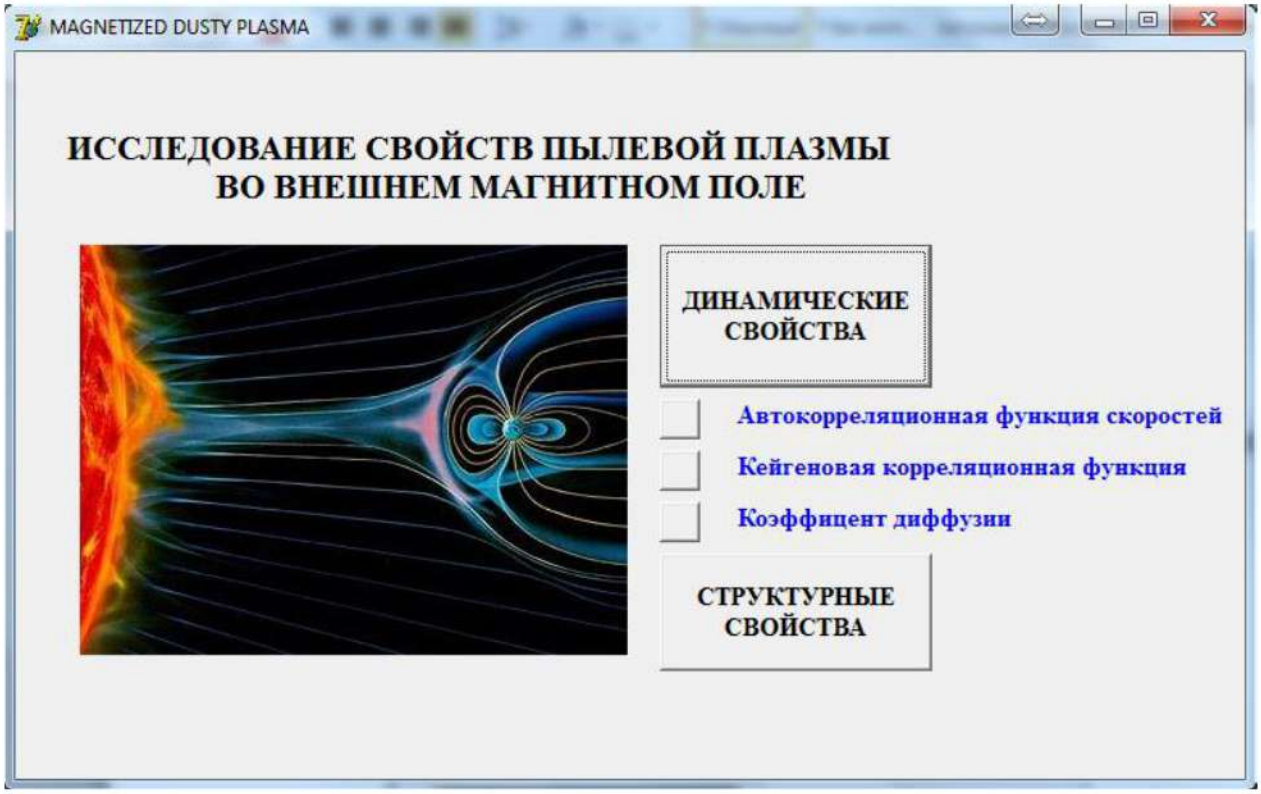


Рисунок 4.2– Окно исследования «Динамических свойств»

Теория вычисления динамических свойств представлена в предыдущих главах.

На рисунке 4.3 представлен интерфейс вычисления автокорреляционной функции скоростей частиц. Нажатием кнопки «Пуск», можно начать вычисления автокорреляционных функций скоростей. В левой части представлено окно, в котором можно отслеживать процесс вычисления, при появлении строки «End», вычисления заканчиваются. Нажатием кнопки «Рисунок» можно получить график функции, что представлено в правой части окна. В окне Параметры системы можно менять параметры системы: параметр связи, параметр экранировки и параметр магнитного поля. Основные параметры, характеризующие свойства системы, представлены в правой части окна. Также с помощью кнопки «Сохранить» можно сохранить данные вычисления в текстовом файле для дальнейшего использования. Кнопка «Выйти» позволяет выйти из данного окна вычисления.

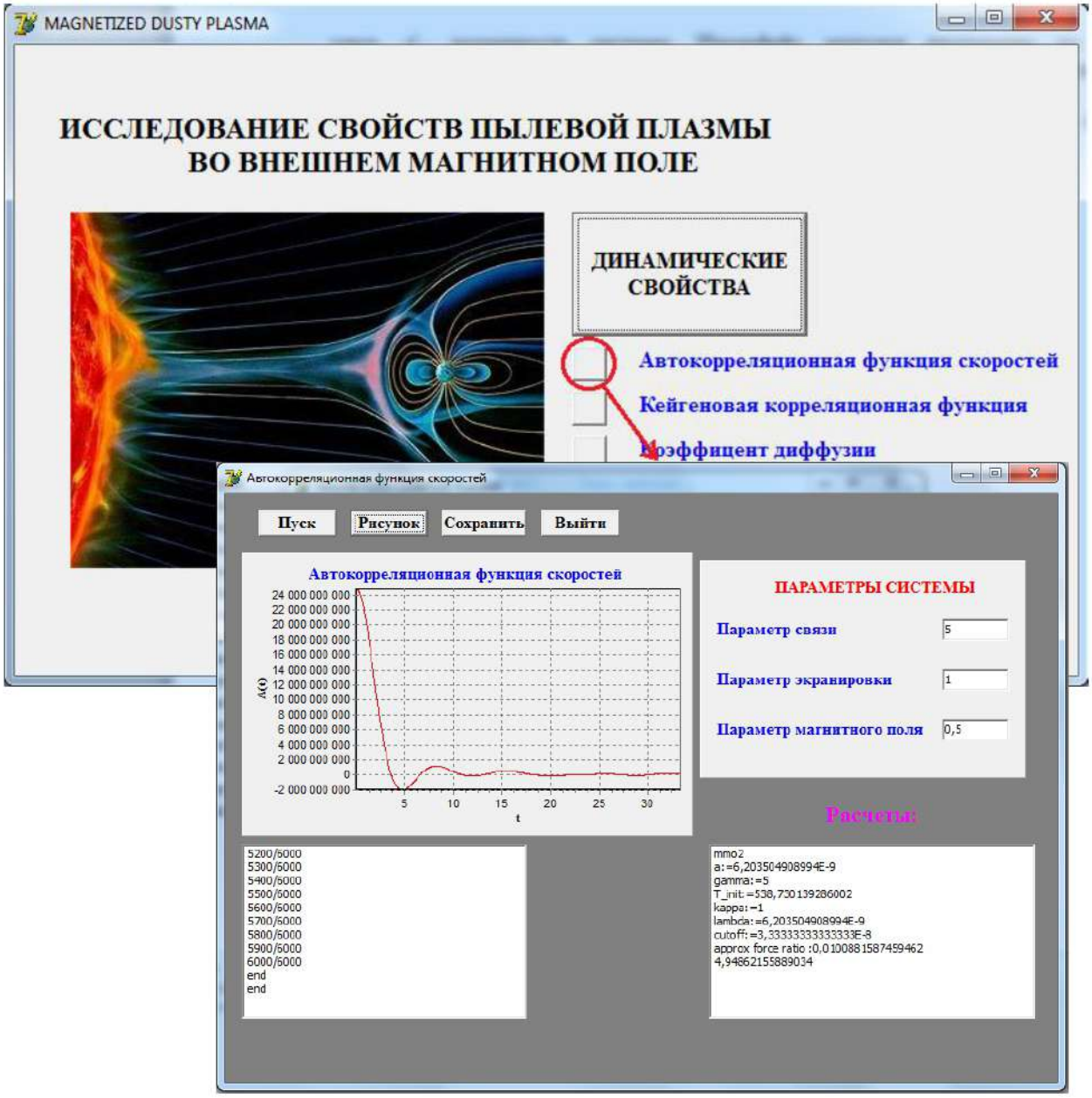


Рисунок 4.3 – Интерфейс для вычисления автокорреляционных функций скоростей

Интерфейс вычисления кейгеновой корреляционной функции представлен на рисунке 4.4. В данной вкладке представлены направленные кейгеновые функции.

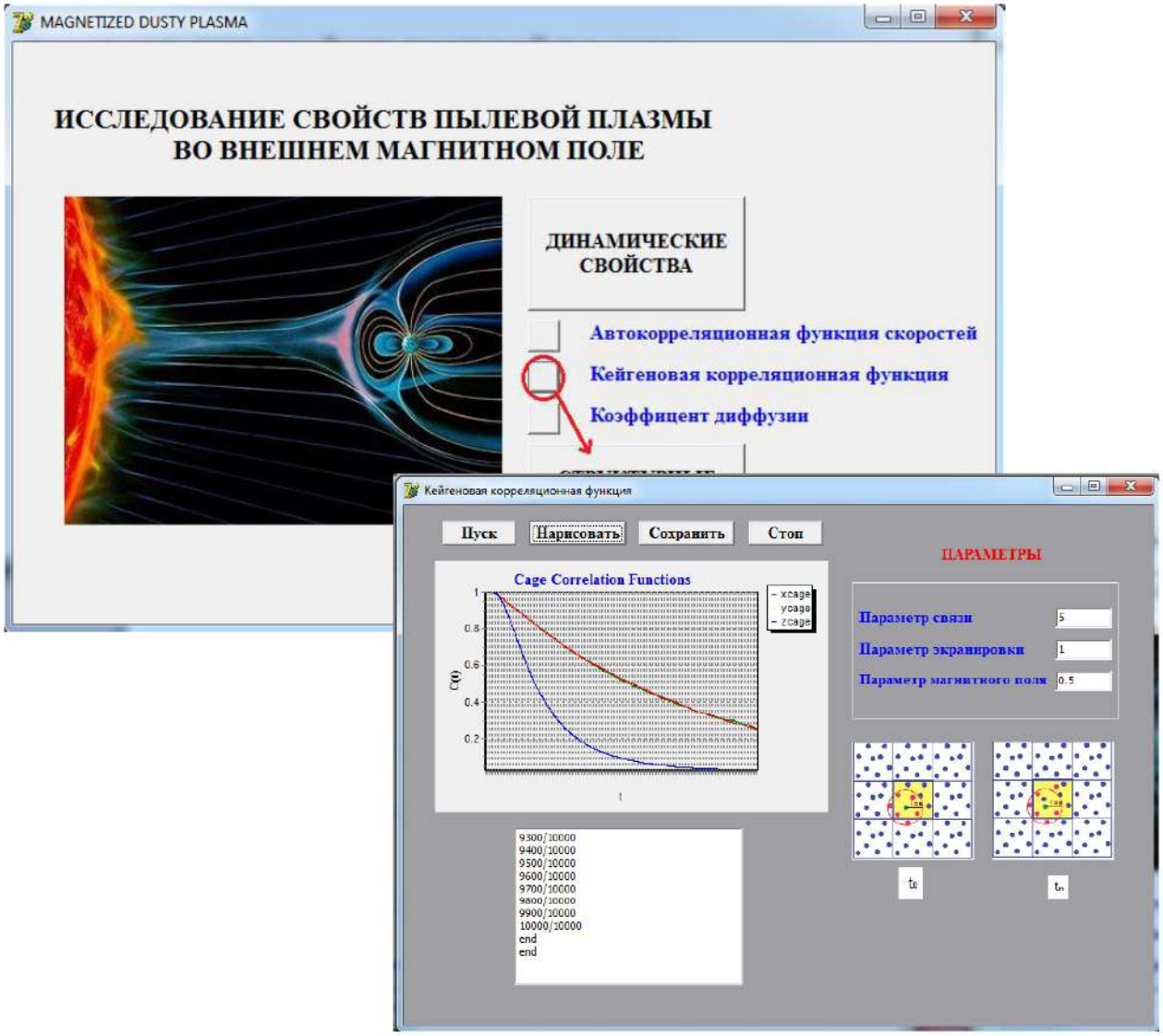


Рисунок 4.4 – Интерфейс для вычисления кейгеновых корреляционных функций

Как уже было выше написано во Главе 3, коэффициент диффузии можно вычислить с помощью среднеквадратичного смещения и автокорреляционной функции скоростей. В данном случае коэффициент диффузии был вычислен с помощью уравнения Грина-Кубо.

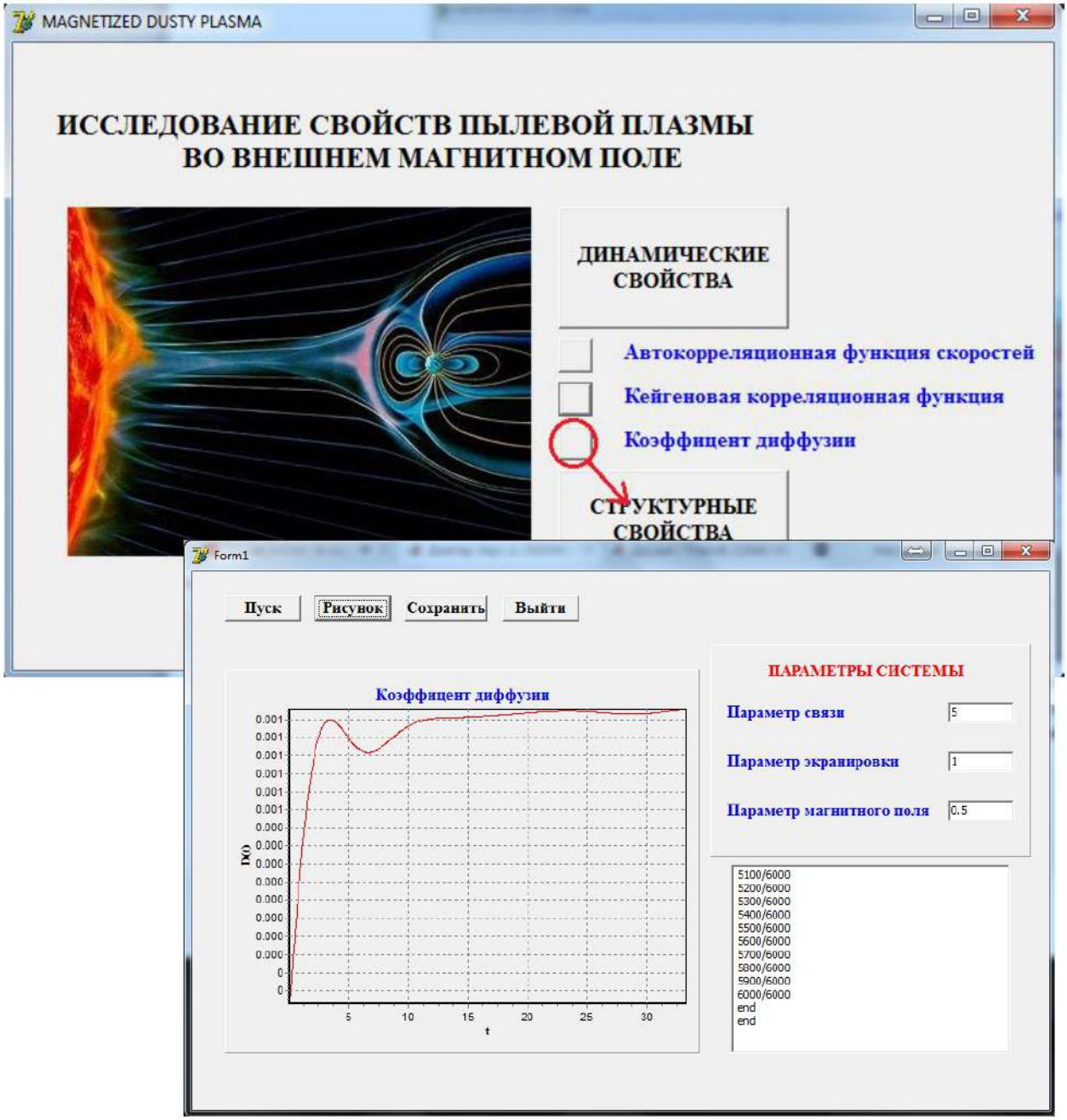


Рисунок 4.5 - Интерфейс для расчета коэффициента диффузии

Интерфейс для вычисления одного из структурных свойств системы – радиальной функции распределения появляется при нажатии кнопки «Структурные свойства» он представлен на рисунке 4.6. Вид радиальной функции связан с фазовым состоянием системы.

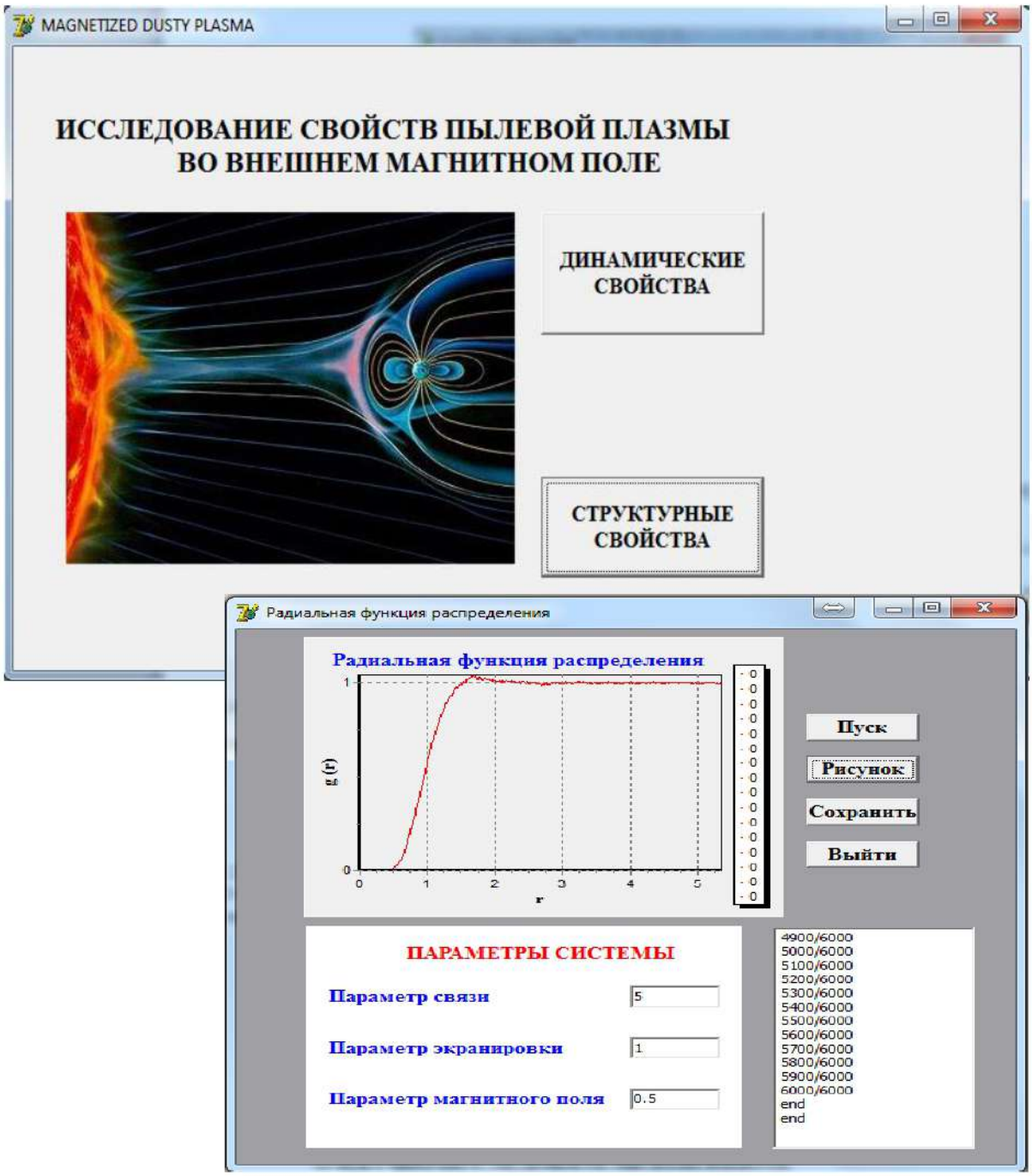


Рисунок 4.6 – Интерфейс для вычисления парной корреляционной функций

Основное окно автоматизированного комплекса «Структурные и диссипативные свойства магнитоактивной плазмы» для анализа и моделирования свойств пылевой плазмы под действием внешнего магнитного поля и диссипативных сил представлено на рисунке 4.7.



Рисунок 4.7 - Основное окно автоматизированного комплекса «Структурные и диссипативные свойства магнитоактивной плазмы»

Программное обеспечение «Исследование свойств пылевой плазмы на основе ланжевеновой динамики» состоит из трех приложений: «Динамические свойства», «Структурные свойства» и «Визуализация». Единый комплекс представляет собой программы по исследованию и моделированию свойств пылевой плазмы с учетом влияния силы магнитного поля и диссипативных сил, обусловленных наличием буферной плазмы.

В приложении «Динамические свойства» можно исследовать динамические свойства пылевой плазмы: автокорреляционную функцию скоростей, кейгеновую корреляционную функцию и среднеквадратичное смещение частиц. Для загрузки программы необходимо нажать на кнопку 

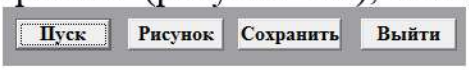
и далее работать с ним в соответствии с данным описанием.

После нажатия данной кнопки в основном окне появляются дополнительные кнопки (рисунок 4.8).



Рисунок 4.8 - Основное окно автоматизированного комплекса «Структурные и диссипативные свойства магнитоактивной плазмы» после нажатия «Динамические свойства»

При нажатии 

появляется окно вычисления автокорреляционных функций скоростей (рисунок 4.9), которое состоит из нескольких блоков. В блоке 

запускается программа, результаты выдаются в виде графиков. Можно вводить параметры исследуемой системы, сохранять все данные расчетов в виде файла данных, которые можно использовать при дальнейшем анализе и расчетах. Также есть окна для того, чтобы следить за ходом вычисления и вывода основных параметров системы.

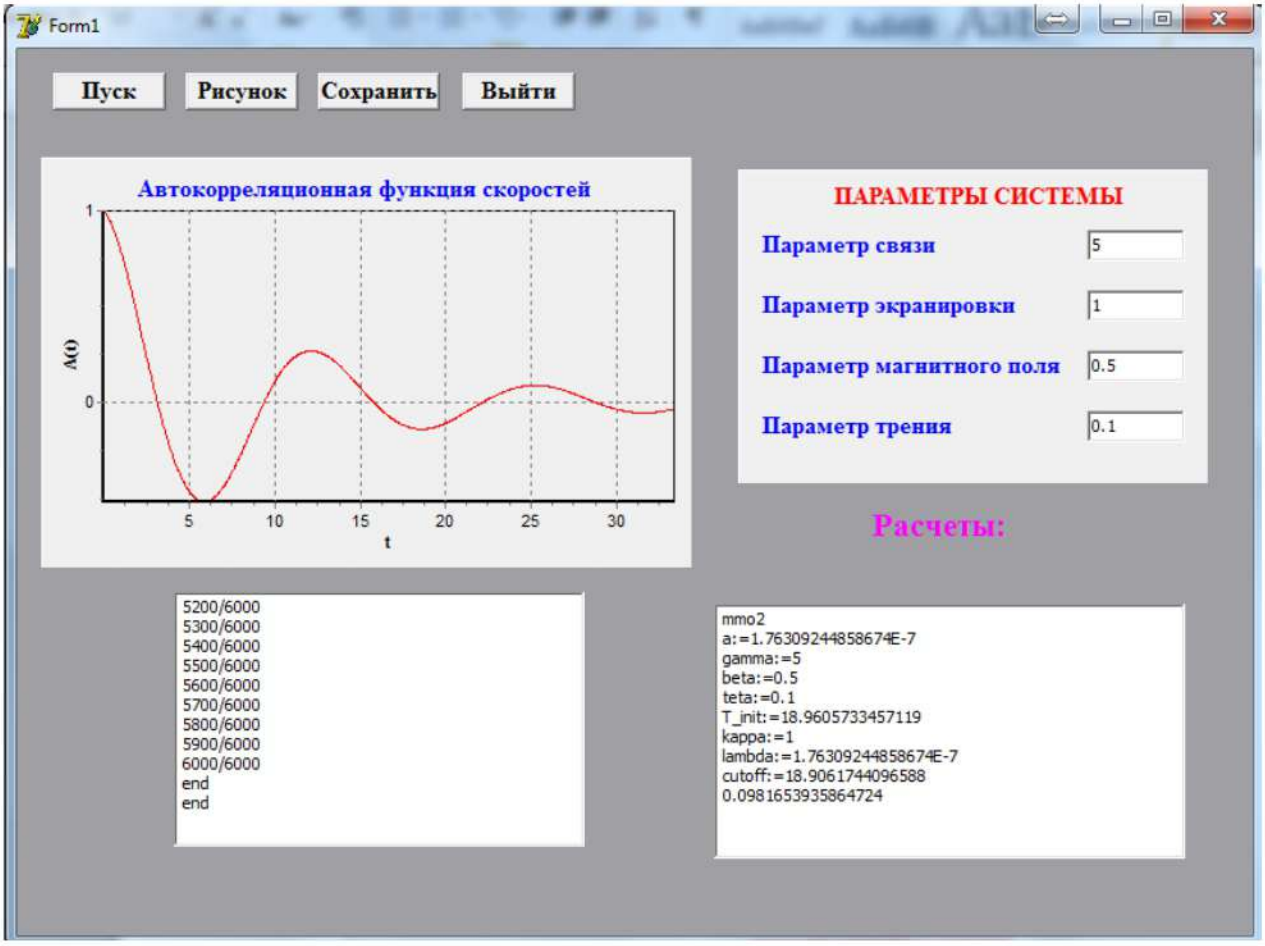


Рисунок 4.9 – Интерфейс для вычисления автокорреляционных функций скоростей

Интерфейс программы разработан в соответствии с требованиями стандарта приложений для Windows.

Нажатие кнопки КЕЙГЕНОВАЯ КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ открывает окно, представленное на рисунке 4.10. С помощью нажатия кнопки «Нарисовать» можно в реальном времени получить график кейгеновых корреляционных функций. Теория вычисления кейгеновой корреляционной функции была представлена в предыдущих главах.

Нажатием кнопки СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ СМЕЩЕНИЕ ЧАСТИЦ открывается окно, представленное на рисунке 4.11.

Среднеквадратичное смещение частиц вычисляется с помощью следующего уравнения:

$$msd(t) = \left\langle \left| \vec{r}_i(t + t_0) - \vec{r}_i(t_0) \right|^2 \right\rangle_{i,t_0}. \qquad (4.1)$$

В данном уравнении $\vec{r}_i(0)$ и $\vec{r}_i(t)$ являются начальными и конечными координатами i частицы во временном интервале t. Скобки $\langle ... \rangle$ в уравнении (9) означают усреднение по ансамблю всех частиц.

В приложении «Структурные свойства» можно исследовать радиуальную функцию распрделения частиц нажатием СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА (см. рис. 4.12).

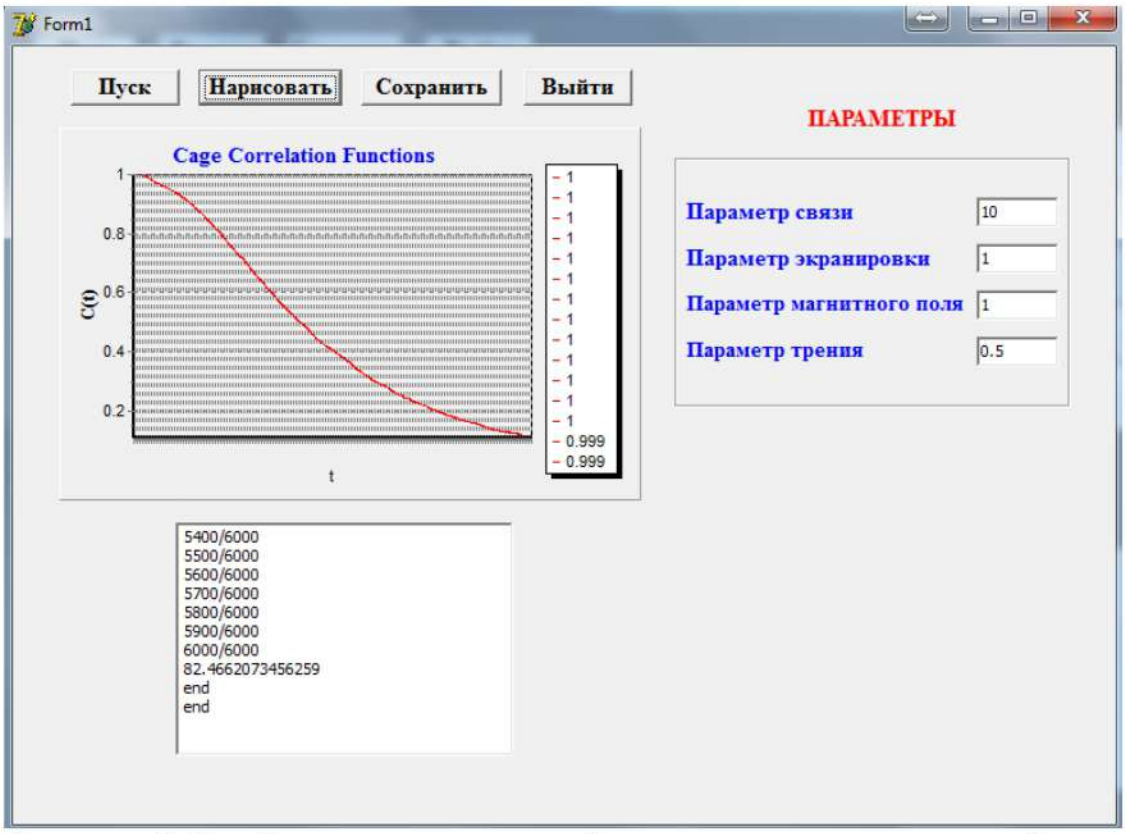


Рисунок 4.10 – Окно вычисления кейгеновых корреляционных функций

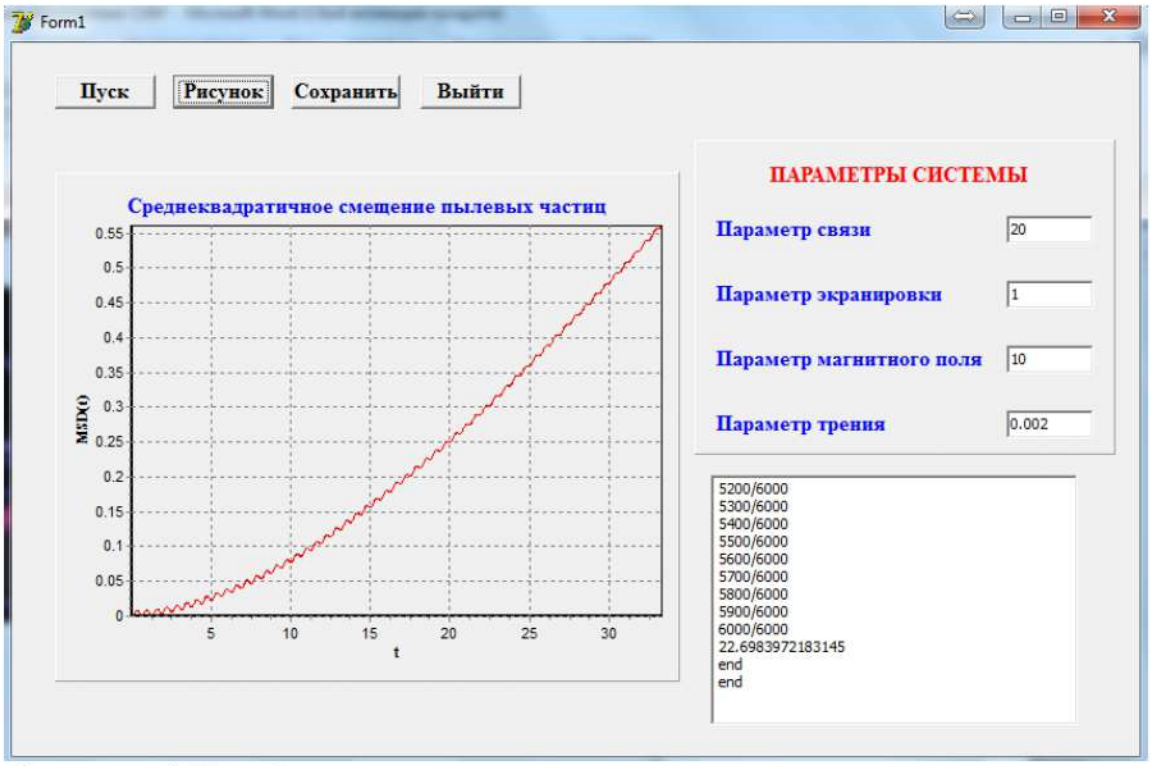


Рисунок 4.11 – Окно вычисления среднеквадратичного смещения частиц

- Вид данной функции связан с фазовым состоянием системы. Интерфейс радиальной функции распределения представлен на рисунке 4.12, который появляется при нажатии кнопки СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА.

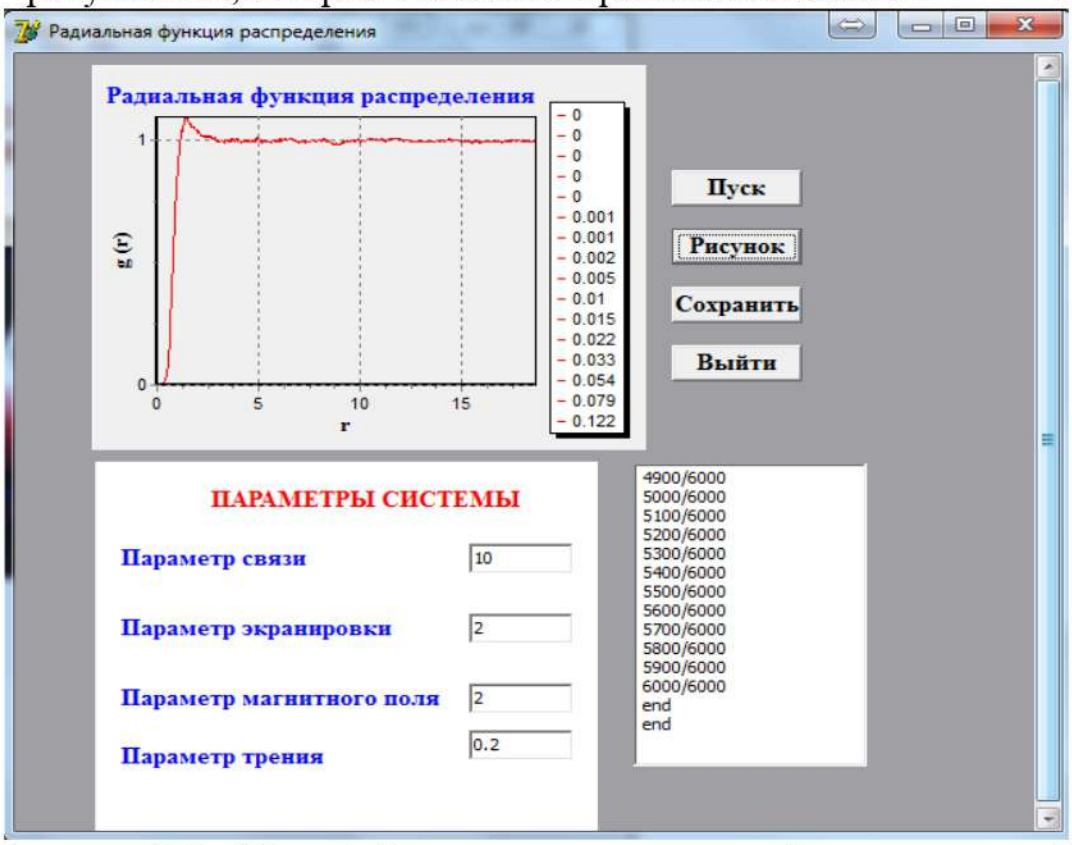


Рисунок 4.12 – Интерфейс для вычисления парной корреляционной функций

С помощью инструментальных средств среды объектно-ориентированного программирования Delphi и растрового графического редактора OpenGL получены визуальная демонстрация движения частиц в базовой ячейке. Программа позволяет в интерактивном режиме наблюдать движения частиц в базовой ячейке, как в трехмерном так и двумерном случае. С помощью данной функции интерфейса получается возможным визуально оценить траекторию частиц. Таким образом, нажатием кнопки ВИЗУАЛИЗАЦИЯ в основном окне появляются дополнительные кнопки для визуализации частиц в базовой ячейке. На рисунке 4.13 представлено окно, которое появляется при нажатие кнопки 2D.

На рисунке 4.13 при запуске программы частицы располагаются без какого-либо порядка в системе, но при параметрах, соответствующих кристаллизации, частицы выстраиваются в плазменный кристалл (см.рисунок 4.14).

Интерфейс, позволяющий следить за движением частиц в базовой трехмерной ячейке, представлен на рисунке 4.15.

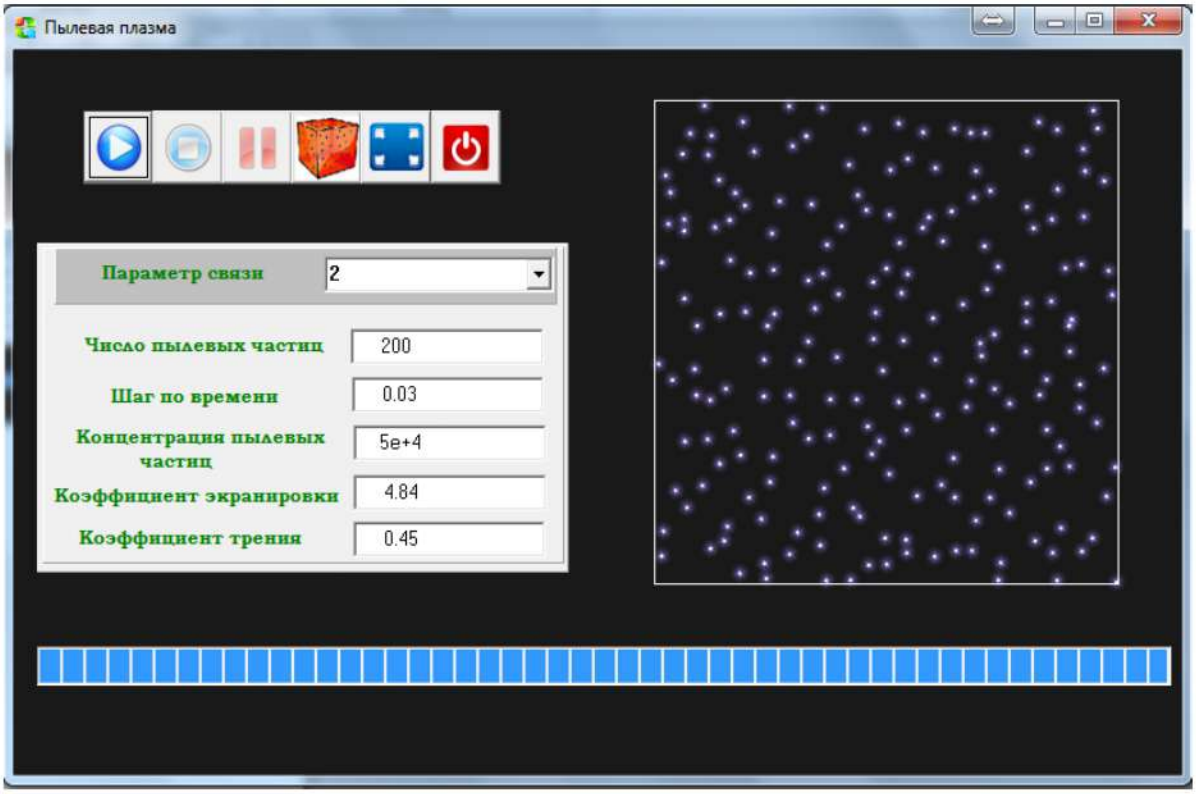


Рисунок 4.13 – Интерфейс для визуализации для двумерного случая

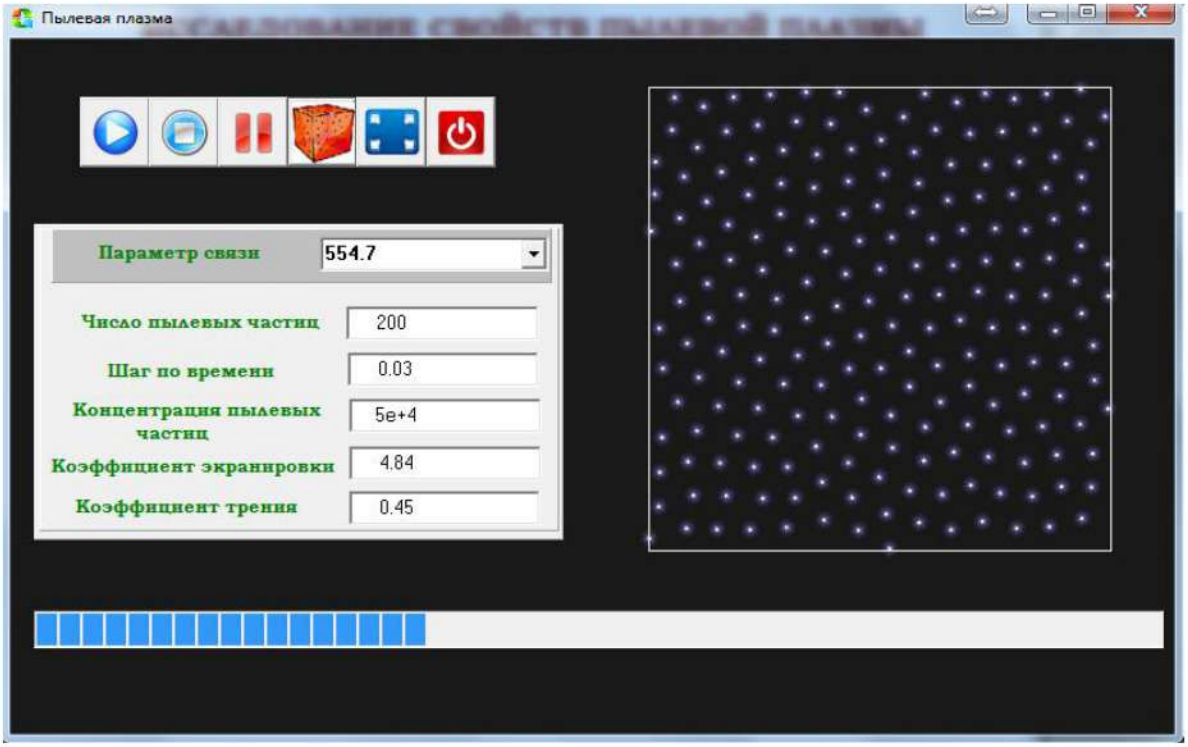


Рисунок 4.14 – Интерфейс для визуализации для двумерного случая, плазменный кристалл

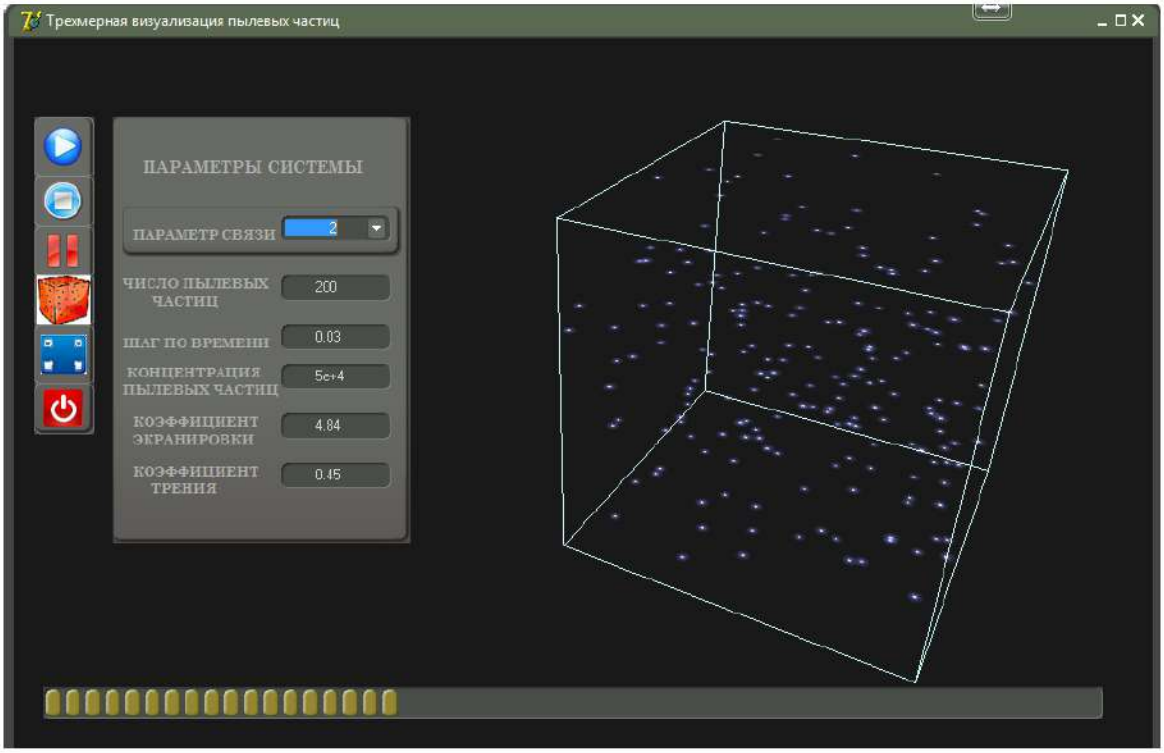


Рисунок 4.15 – Беспорядочное расположение частиц

Окно со смоделированным плазменным кристаллом при соответствующих параметрах системы представлено на рисунке 4.16.

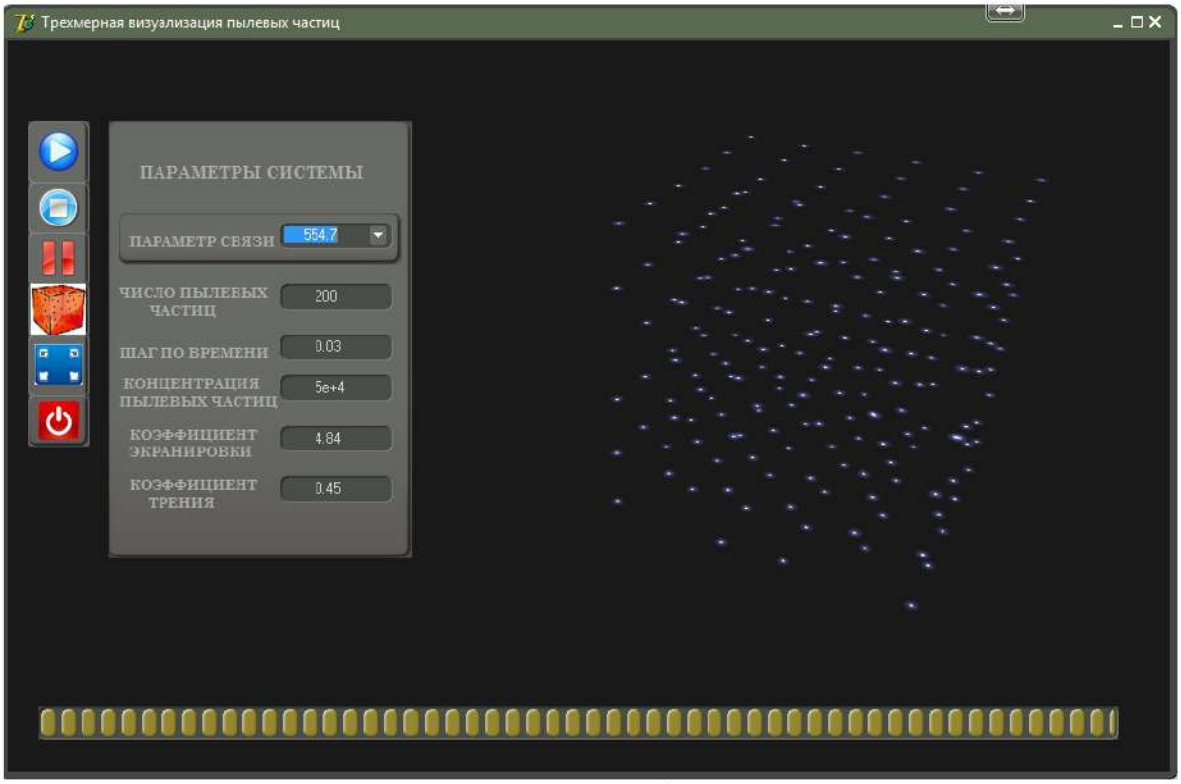


Рисунок 4.16 – Расположение частиц базовой ячейки в кристаллическом состоянии

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Диссертационная работа посвещена компьютерному моделированию пылевой плазмы во внешнем магнитном поле с учетом и без учета силы трения, обусловленной наличием окуражающей среды.

Проведено детальное моделирование микроскопических и динамических свойств пылевой плазмы методом молекулярной и ланжевеновой динамики на основе Юкавовской модели взаимодействия, учитывающей коллективные эффекты экранировки поля заряда пылинки окруженной плазмой буферного газа. Сделан обзор работ по методам компьютерного моделирования многочастичных систем и по последним данным по исследованию влияния магнитного поля и силы трения на физические свойства Юкавовских систем. Написаны основные программы, выполняющие компьютерное моделирование магнитоактивной пылевой плазмы, методами молекулярной и Ланжевеновой динамики а также подпрограммы, обрабатывающие данные компьютерного моделирования.

Были построены фазовые портреты и проанализированы траектории взаимодействующих пылевых частиц во внешнем магнитном поле с учетом и без учета диссипации в системе в широком диапазоне изменения параметров системы. Результаты показывают локализацию частиц в ограниченной области пространства с увеличением параметра связи, параметра магнитного поля и параметра трения. С увеличением магнитного поля, направленного вдоль z, локализация частиц происходит по координатам x и y. Траектории индивидуальной частицы показывают наличие винтового движение частиц под действием магнитного поля.

Результаты по автокорреляционным функциям скоростей показывают устойчивую корреляцию при сильной связи. Показано, что с ростом параметра магнитного поля колебания автокорреляционных функции скоростей становится интенсивнее и сохраняются дольше.

Вычислена парная корреляционная функция распределения частиц. Данные показывают, что пик парной корреляционной функции распределения увеличивается с увеличением параметра связи, и с уменьшением параметра экранировки. Также выявлено, что расстояние, на котором находится первый минимум на парной корреляционной функции, не зависит от параметров плазмы и внешнего магнитного поля и равен $r_c \simeq 2.5$, означающий, что частицы из ближайшего слоя будут расположены в пределах r_c при любых условиях.

Исследованы кейгеновые корреляционные функции и так называемые времена деккореляции, времена удержания ближайших соседних частиц. Полученные результаты по кейгеновым корреляционным функциям использованы для исследования диффузии частиц. В свою очередь, коэффициент диффузии связан с удержанием плазмы в магнитных ловушках, с потерями энергии медленных ионов в плотной плазме, вследствие чего представляет особенный интерес и для установок УТС.

Впервые построена математическая модель для вычисления направленных кейгеновых корреляционных функций частиц пылевой плазмы во внешнем магнитном поле.

Создана программная оболочка с графическим интерфейсом, позволяющая исследовать влияние внешнего магнитного поля на динамические и структурные свойства трёхмерной Юкава системы на основе компьютерного метода молекулярной динамики.

Все полученные результаты были получены как для трехмерной и для двумерной системы.

Проведенное компьютерное моделирование свойств неидеальной магнитоактивной плазмы имеет как фундаментальное, так и важное практическое значение, так как полученные результаты могут быть использованы при проектировании реальных плазменных установок.

На основании проведенных исследований можно сделать вывод о корректности разработанной программы для описания микроскопических, динамических и структурных характеристик пылевой плазмы во внешнем магнитном поле с учетом и без учета диссипаций в системе с помощью компьютерного моделирования молекулярной и ланжевеновой динамики.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Fortov V.E., Khrapak A.G., and Iakubov I.T., Physics of Strongly Coupled Plasmas: Oxford University Press, Oxford, 2005. – 587 p.

2. Ramazanov T.S., Baimbetov F.B., Bekenov M.A., Redmer R., Röpke G. Correlation functions and equation of state of strongly coupled hydrogen plasma in HNC approximation // In: Strongly Coupled Coulomb Systems / ed. G. Kalman, M. Romel, K. Blagoev. – N.Y.: Plenum Press, 1998. –236 p.

3. Fortov V.E., Nefedov A.P., Petrov O.F., Samarian A.A., Chernyschev A.V. Emission properties and structural ordering of strongly coupled dust particles in a thermal plasma // Phys. Letters. A. – 1996. – Vol. 219. – P. 89–94.

4. Rogers F.J. Activity expansion calculations for dense hydrogen // In Strongly Coupled Coulomb Systems / ed. G.J. Kalman, J.M. Rommel, K. Blagoev. – N.Y.: Plenum Press, 1999. – 15 p.

5. Thomas H., Morfill G. Plasma Crystal: Coulomb Crystallization in a Dusty Plasma // Phys. Rev. Letters. – 1994. – Vol. 73. – 652 p.

6. Maiorov S.A. Influence of the trapped ions on the Screening Effect and frictional force in a dusty plasma // Plasma Phys. Rep. - 2005. - Vol. 31. - P. 690-699.

7. Fortov V.E., Molotkov V.I., Nefedov A.P, et al., Formation of Liquidlike and Crystalline Structures in dusty Plasmas // IEED Transact. on Plasma Science. - 2001. – Vol. 29, №2. – 210 p.

8. Baimbetov F.B., Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N., Kadyrsizov E.R., Petrov O.F., Gavrikov A.V. Modelling of dusty plasma properties by computer simulation methods // J.Phys.A: Math. And Gen. – 2006. – Vol. 39. – P. 4521–4525.

9. Арцимович Л.А., Сагдеев Р.З. Физика плазмы для физиков. М.: Атомиздат, 1979 г.

10. Спитцер Л.. Физика полностью ионизованного газа. М.: Изд-во иностр. лит., 1957 г.

11. Goertz C.K. Dusty plasmas in the solar system // Rev. Geophys. – 1989. – Vol. 27, № 2. – P. 271–292.

12. Tsytovich V.N. Dust plasma crystals, drops, and clouds // Phys. Usp. – 1997. – Vol. 40. – P. 53–94.

13. Whipple E.C. Potentials of surfaces in space // Rep. Prog. Phys. – 1981. – Vol. 44. – P. 1197–1250.

14. Robinson P.A. and Coakley P. Spacecraft charging-progress in the study of dielectrics and plasmas // IEEE Trans. Electr. Insul. – 1992. – Vol. 27. – P. 944–960.

15. Melzer A., Trottenberg T., Piel A. Experimental determination of the charge on dust particles forming Coulomb lattices // Phys.Letters. A. – 1994. – Vol. 191. – P. 301–308.

16. Досболаев М.К. Экспериментальная установка для исследования свойств пылевой плазмы и плазменно-пылевых структур // Сборник трудов 60-ой научной конференции студентов и молодых ученых. – Алматы, 2006. – С. 61.

17. Рамазанов Т.С., Баимбетов Ф.Б., Досболаев М.К., Денисеня М.И., Петров О.Ф., Антипов С.Н., Гавриков А.В. Экспериментальный стенд для

изучения и моделирования свойств пристеночной пылевой плазмы ТЯР // Материалы Международного семинара Экспериментальные возможности Токамака КТМ и программа исследований. – Астана, 2005. – С. 56–57.

18. Досболаев М.К. Экспериментальное определение заряда пылевых частиц в разряде постоянного тока // Вестник КазНУ. Серия физическая. – 2007. – №1 (23). – С. 59–63.

19. Рамазанов Т.С., Джумагулова К.Н., Рёпке Г., Виерлинг А.. Об образовании упорядоченных структур в сильносвязанной пылевой плазме // Журнал проблем эволюции открытых систем. – 2003. – Т. 1, вып. 5. – С. 95–101.

20. Нефедов А.П., Петров О.Ф., Фортов В.Е. Кристаллические структуры в плазме с сильным взаимодействием макрочастиц // УФН. – 1997. – Т. 167. – С. 1215–1226.

21. Майоров С.А. О влиянии столкновений ионов на характеристики плазменно-пылевых структур // Физика плазмы. – 2006. – Т. 32. – С. 802–815.

22. Рамазанов Т.С., Бекенов М.А., Джумагулова К.Н. Квазисвязанные состояния и упорядоченные структуры в плотной плазме // Проблемы эволюции открытых систем. – Алматы, 2000. – С. 153–156.

23. Vishnyakov V.I., Dragan G.S. Ordered spatial structures of dust grains in the thermal plasma // Phys.Rev.E. – 2006. – Vol. 73. –026403 p.

24. Арцимович Л.А. Управляемые термоядерные реакции. М.: Физматгиз, 1960 г.

25. Цытович В.Н., Винтер Дж. Пыль в установках управляемого термоядерного синтеза // УФН. – 1998. – Т. 168, №8. – С. 899–907.

26. Bacharis M., Coppins M., Allen J.E. Dust in tokamaks: an overview of the physical model of the dust in tokamaks code // Phys. Plasmas. – 2010. – Vol. 17. – 042505 p.

27. Hayashi Y. and Tachibana S. Observation of Coulomb-crystal formation from carbon particles grown in a methane plasma // Jpn. J. Appl. Phys. – 1994. – Vol. 33. – P. 804–806.

28. Kress J., Collins L., Lenosky T., Kwon I. and Troullier N., in Strongly Coupled Coulomb Systems / edited by G.J. Kalman, K. Blagoev, and M. Rommel – N.Y.: Plenum Press, 1998. – 331 p.

29. Kaw P. K. Collective modes in a strongly coupled dusty plasma // Physics of Plasmas. – 2001. – Vol. 8. – 1870 p.

30. Zollweg R. J. and Liebermann R. W. Electrical conductivity of nonideal plasma // Journal of Applied Physics. – 1998. – Vol. 62., – 3621 p.

31. Fortov V.E., Vaulina O.S., Petrov O.F. Dusty plasma liquid: structure and transfer phenomena // Plasma Phys. Control. Fusion. – 2005. – Vol. 47. – P. 552–563.

32. Gavrikov A., Ivanov A., Shakhova I., Vorona N., Petrov O., FortovV. Analysis of applicability of Navier-Stokes equation for dusty plasma liquid viscosity investigation. // In book: New vistas in dusty plasmas. – Orlean, 2005. – P.418.

33. Джумагулова К.Н. К термодинамическим свойствам пылевой плазмы // Вестник КарГУ. Серия физика. – 2008. – Vol. 1, № 49 – С. 43–47.

34. Джумагулова К.Н. Теоретическое исследование структурных свойств пылевой плазмы в сравнении с экспериментом // Доклады НАН РК. – 2008.– № 6. – С. 38–41.

35. Maiorov S.A., Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N., Dosbolayev A.N., Jumabekov A.N. Investigation of plasma-dust structures in He-Ar gas mixture // Phys. Plasmas. – 2008. – Vol. 15. – P. 093701.

36. Фортов В. Кристаллы в пылевой плазме // Наука и жизнь. – 2005.– №. 7. – С. 42–46.

37. Steinmüller B., Dietz C, Kretschmer M. Crystallization process of a three-dimensional complex plasma // Phys. Rev. E. – 2018. – Vol. 97. – 053202 p.

38. Griin E., Morfill G. E., and Mendis D. A. In Planetary Rings / edited by A. Brahic and R. Greenberg. Press: Univ. Arizona Press, Tucson, 1984. – 275 p.

39. Hartquist T.W., Havnes O., Morfill G.E. The Effects of Dust on the Dynamics of Astronomical and Space Plasmas // Fundamentals Cosmic Phys. – 1992. – Vol. 15. – 107 p.

40. Morfill G.E., Griin E., and Johnson T.V. Dust in Jupiter's magnetosphere: Physical processes // Planetary Space Sci. – 1980. – Vol. 28. – 1087 p.

41. Bliokh P, Sinitsin V, Yaroshenko V. Dusty and Self-Gravitational Plasmas in Space / Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., Ukraine, 1995.

42. Whipple E.C. Potentials of surfaces in space // Rep. Prog. Phys. – 1981. – Vol. 44 – 1197 p.

43. Bouchoule A. and Boufendi L. Particulate formation and dusty plasma behaviour in argon-silane RF discharge // Plasma sources Sci. Technol. – 1993. – Vol. 2. – 204 p.

44. Dosbolayev M.K., Utegenov A.U., Ramazanov T.S., Daniyarov T.T. Structural and transport properties of dust formation in plasma of noble gases mixture in radio frequency discharge //Contributions to Plasma Physics. – 2013. – Т. 53, №. 4-5. – С. 426–431.

45. Orazbayev S.A., Dosbolayev M.K., Silamiya M., Jumagulov M.N., Ramazanov T.S. Optical properties of the dusty plasma in RF discharge //16thBook of abstracts of the International Congresses on Plasma Physics and 39thEuropean Physical Society Conference on Plasma Physics (EPS/ICPP). – Stockholm, Sweden, 2012. –2.130 p.

46. Orazbayev S.A., Muratov M.M., Ramazanov T.S., Jumagulov M.N., Dosbolayev M.K., Silamiya M. and Boufendi L. The Diagnostics of dusty plasma in RF discharge by two different methods // Contrib. Plasma Phys. – 2013. – Vol. 53. – P.436–441.

47. Fortov V.E., Nefedov A.P., Vaulina O.S., Petrov O. F., Dranzhevski I. E., Lipaev A. M., and Semenov Y.P. Dynamics of dust grains in an electron–dust plasma induced by solar radiation under microgravity conditions // New J. Phys. – 2003. – Vol. 5. – 102 p.

48. Jaiswal S., Pustylnik M.Y., Zhdanov S., Thomas H.M., Lipaev A.M., Usachev A.D., Molotkov V.I., Fortov V.E., Thoma M.H., Novitskii O.V. Dust

density waves in a dc flowing complex plasma with discharge polarity reversal // Physics of Plasmas. – 2018. – Vol. 25, №8. –083705 p.

49. Zaehringer E., Schwabe M., Zhdanov S., Mohr D.P., Knapek C.A., Huber P., Semenov I.L., Thomas H.M. Interaction of a supersonic particle with a three-dimensional complex plasma // Physics of Plasmas. – 2018. – Vol. 25, №3. – 0833703 p.

50. Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N., Kodanova S.K. Experimental and Theoretical Investigation of Dusty Plasma Properties // Abstr. Int. Conf. on The Physics of Dusty and Burning Plasmas. – Odessa, 2007. – P. 110–112.

51. UsachevA.D., Zobnin, A.V., Shonenkov A.V., Lipaev A.M., Molotkov V.I., Petrov O.F., Fortov V.E., Pustyl'Nik M.Y, Fink M.A., Thoma M.A., Thomas H.M., Padalka G.I. Influence of dust particles on the neon spectral line intensities at the uniform positive column of dc discharge at the space apparatus "plasma Kristall-4" // Journal of Physics: Conference Series. – 2017. – Vol. 946. – 012143 p.

52. Killer C., Bockwoldt T., Schütt S., Himpel M., Melzer A., Piel A. Phase Separation of Binary Charged Particle Systems with Small Size Disparities using a Dusty Plasma // Physical Review Letters. – 2016. – Vol. 116. – 115002 p.

53. Melzer A., Trottenberg T., Piel A. Experimental determination of the charge on dust particles forming Coulomb lattices // Phys.Letters. A. – 1994. – Vol. 191. – P. 301–308.

54. Рамазанов Т.С., Джумагулова К.Н., Омарбакиева Ю.А., Петров О.Ф., Гавриков А.В., Липаев А.М. Исследование пылевой плазмы и плазменного кристалла в условиях микрогравитации на аппаратуре ПК-3 на борту МКС // Вестник НАН РК. - 2005. - №6. - С. 160-168.

55. Pierleoni C., Margo W.R., Ceperley D.M., Bernu B. Path integral Monte-Carlo simulation of hydrogen plasma // Physics of Strongly Coupled Plasma / ed. W.D. Kraeft, M. Shlanges. – London: World Scientific NJ. – 1996. – P. 11–26.

56. Bezkrovniy V., Filinov V.S., Kremp D., Bonitz M., Schlanges M., Kraeft W.D., Levashov P.R., Fortov V.E. Monte-Carlo results for the hydrogen Hugoniot // Phys. Rev. E. – 2004. – Vol. 70. –057401 p.

57. Myasnichenko V., Kirilov L., Mikhov R., Fidanova S., Sdobnyakov N. Simulated annealing method for metal nanoparticle structures optimization // Studies in Computational Intelligence. – 2019. –Vol. 793. – P. 277–289.

58. Tarasenko A. Diffusion on a one-dimensional sawtooth lattice with the nearest and the next nearest neighbor interactions // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2019. – Vol. 515. – P. 1–12.

59. Schleede J., Lewerentz L., Bronold F.X., Schneider R., Fehske H. Plasma flow around and charge distribution of a dust cluster in a rf discharge // Physics of Plasmas. – 2018. – Vol. 25. – 043702 p.

60. Kiyokawa S. Energy barrier of bcc-fcc phase transition via the Bain path in Yukawa system // Physics of Plasmas. – 2018. – Vol. 25. – 053703 p.

61. Baimbetov F.B., Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N., Kadyrsizov E.R., Petrov O.F., Gavrikov A.V. Modelling of dusty plasma properties by computer simulation methods // J.Phys.A: Math. And Gen. – 2006. – Vol. 39. – P. 4521–4525.

62. Donkó Z. Molecular dynamics simulations of strongly coupled plasmas // J. Phys. A: Math. Theor. – 2009. – 42. – 213029 p.

63. Hou X.N., Liu Y.H., Kravchenko O.V., Lapushkina T.A., Azarova O.A., Chen Z.Y., Huang F. Structures and dynamics in a two-dimensional dipolar dust particle system // Physics of Plasmas. – 2018. – Vol. 25. –053701 p.

64. Bezbaruah P., Das N. Anomalous transport of charged dust grains in a magnetized collisional plasma: A molecular dynamics study // Physics of Plasmas. – 2018. – Vol. 25, №5. – 053708 p.

65. Semyonov V., TimofeevA. Resonant energy transfer between degrees of freedom in a dusty plasma system // IEEE Transactions on Plasma Science. – 2018. – Vol. 46, №5. – P. 1855–1858.

66. Wang K., Huang D., Feng Y. Dynamical heterogeneities of cold 2D Yukawa liquids // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2018. – Vol. 51, №24. – 245201 p.

67. Charan H., Ganesh R. Strongly correlated classical plasmas under external forcing and dissipation – An example using Molecular Dynamics // Journal of Physics: Conference Series. – 2016. – Vol. 759. – 012061 p.

68. Kong W., Yang F., Liu S., Shi F. Study on two-dimensional equilibrium structure of magnetized complex plasmas based on a Langevin dynamics simulation // Physics of Plasmas. – 2016. – Vol. 23. – 103705 p.

69. Shahzad A., He M.G. Structural order and disorder in strongly coupled Yukawa liquids // Physics of Plasmas. – 2016. – Vol. 23. – 093708 p.

70. Rosenberg M., Kalman G.J., Hartmann P., Donkó Z. Waves in a quasi-two-dimensional superparamagnetic dusty plasma liquid in a trap // Physical Review E. – 2016. – Vol. 94. – 033203 p.

71. Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N. Shear viscosity of dusty plasma obtained on the basis of the Langevin dynamics // Contr. Plasma Phys. – 2008. – Vol. 48, №4. – P.357 – 360.

72. Баимбетов Ф.Б., Рамазанов Т.С., Джумагулова К.Н., Кадырсизов Е.Р., Фортов В.Е., Петров О.Ф. Исследование свойств пристеночной пылевой плазмы на основе методов компьютерного моделирования // Мат. Междунар. семинара «Экспериментальные возможности Токамака КТМ и программа исследований». – Астана, 2005. – С. 118 – 120.

73. Vaulina O.S., KhrustalyovYu.V., Petrov O.F., Numerical Study of Heat Capacity in Dissipative Two–Dimensional Yukawa Systems // Contrib. Plasma Phys. – 2011. – Vol. 51. – 495 c.

74. Ignatov A.M. Brownian motion of a plasma crystal // Plasma Physics Reports. – 2017. – Vol. 43. – P. 659–667.

75. Begum M., Das N. Effect of Ion Streaming on Diffusion of Dust Grains in Dissipative System // Plasma Physics Reports. – 2018. – Vol. 44. – P. 118-124.

76. Jambunathan R., Levin D.A. An octree-based PIC-DSMC code for modeling of electron kinetic properties in a plasma plume using MPI-CUDA parallelization // Journal of Computational Physics. – 2018. – Vol. 373. – P. 571–604.

77. Meierbachtol C.S., Svyatskiy D., Delzanno G.L., Vernon L.J., Moulton J.D. An electrostatic Particle-In-Cell code on multi-block structured meshes // Journal of Computational Physics. – 2017. – Vol. 350. – P. 796–823.

78. Gao D.N., Zhang H., Zhang J., Li Z.Z., Duan W. S. Effect of a damping force on dust acoustic waves simulated by particle-in-cell method // Physics of Plasmas. – 2017. – Vol. 24, № 4. – 043703 p.

79. Li Z. Z., Zhang H., Hong X. R., Duan W. S., Yang L. PIC simulation of compressive and rarefactive dust ion-acoustic solitary waves // Physics of Plasmas. – 2016. – Vol. 23, № 8. – 082111 p.

80. Nopoush M., Abbasi H. Hybrid (particle in cell-fluid) simulation of ion-acoustic soliton generation including super-thermal and trapped electrons // Physics of Plasmas. – 2011. – Vol. 18, №8. – P. 082106.

81. Tskhakaya D., Matyash K., Schneider R., Taccogna F.The particle-in-cell method // Contributions to Plasma Physics. – 2007. – Vol. 47, №8–9. – P. 563–594.

82. Ott T., Bonitz M., Hartmann P., and Donko Z.. Higher harmonics of the magnetoplasmon in strongly coupled Coulomb and Yukawa systems // Phys. Rev. E – 2011. – Vol. 83 – P. 046403

83. Ott T., Kahlert H., Reynolds A. and Bonitz M. Oscillation Spectrum of a Magnetized Strongly Coupled One-Component Plasma // Phys. Rev. Lett. – 2012. – Vol. 108. – P. 255002

84. Uchida G., Konopka U. and Morfill G. Wave Dispersion Relation of Two-Dimensional Plasma Crystals in a Magnetic Field // Phys. Rev. Lett. – 2004. – Vol. 93. – P. 55002

85. Farokhi B., Shahmansouri M. and Shukla P.K. Dust grain oscillations in two-dimensional hexagonal dusty plasma crystals in the presence of a magnetic field // Phys. Plasmas – 2009. – Vol. 16. – P. 063703

86. Ott T. and Bonitz M. Is Diffusion Anomalous in Two-Dimensional Yukawa Liquids? // Phys. Rev. Lett. – 2009. – Vol. 103. – P. 195001

87. Donko Z., Goree J., Hartmann P., and Liu B. Time-correlation functions and transport coefficients of two-dimensional Yukawa liquids // Phys. Rev. E – 2009. – Vol. 79. – P. 026401

88. Vaulina O. S. and Dranzhevski I. E. Transport of macroparticles in dissipative two-dimensional Yukawa systems // Phys. Scr. – 2006. – Vol. 73. – P.577

89. Nunomura S., Samsonov D., Zhdanov S., and Morfill G. Self-Diffusion in a Liquid Complex Plasma // Phys. Rev. Lett. – 2006. – Vol. 96. – P. 015003

90. Liu B. and Goree J. Superdiffusion in two-dimensional Yukawa liquids // Phys. Rev. E – 2007. – Vol. 75. – P. 016405

91. Liu B. and Goree J. Superdiffusion and Non-Gaussian Statistics in a Driven-Dissipative 2D Dusty Plasma // Phys. Rev. Lett. – 2008. – Vol. 100. – P.055003

92. Yan Feng, Goree J., Bin Liu, Intrator T. P. and Murillo M. S. Superdiffusion of two-dimensional Yukawa liquids due to a perpendicular magnetic field // Phys. Rev. E – 2014. – Vol. 90. – P. 013105

93. Evangelista L. R. and Lenzi E. K. Fractional Diffusion Equations and Anomalous Diffusion // Cambridge University Press. – 2018.

94. Hou L.-J., Piel A., and Shukla P. K. Self-Diffusion in 2D Dusty-Plasma Liquids: Numerical-Simulation Results // Phys. Rev. Lett. – 2009 – Vol. 102. – 085002 p.

95. Ott T. and Bonitz M. Diffusion in a Strongly Coupled Magnetized Plasm // Phys. Rev. Lett. 2011. – Vol. 107. – P. 135003

96. Wei K. and Fang Y., Communications in Theoretical Physics. – 2013. – Vol. 60. – 348 p.

97. Ott T., Baiko D. A., Kählert H., and Bonitz M. Wave spectra of a strongly coupled magnetized one-component plasma: Quasilocalized charge approximation versus harmonic lattice theory and molecular dynamics // Phys. Rev. E. – 2013. – Vol. 87. – 043102 p.

98. Ott T., Löwen H., and Bonitz M. Dynamics of two-dimensional one-component and binary Yukawa systems in a magnetic field // Phys. Rev. E – 2014. – Vol. 89. – P. 013105

99. Bonitz M., Donkó Z., Ott T., Kählert H., and Hartmann P. Nonlinear magnetoplasmons in strongly coupled Yukawa plasmas // Phys. Rev. Lett. – 2010. – Vol. 105. – P. 055002.

100. Kalman G. J. and Golden K. I. Response function and plasmon dispersion for strongly coupled Coulomb liquids // Phys. Rev. A. – 1990. – Vol. 41. – P. 5516 p.

101. Golden K. I. and Kalman G. J. Quasilocalized charge approximation in strongly coupled plasma physics // Phys. Plasmas. – 2000. – Vol. 7. –14 p.

102. Rabani E., Gezelter J.D., and Berne B.J. Calculating the hopping rate for self-diffusion on rough potential energy surfaces: Cage correlations // J. Chem. Phys. – 1997. – Vol. 107. –6867 p.

103. Donkó Z., Kalman G. J., and Golden K. I. Caging of Particles in One-Component Plasmas // Phys. Rev. Lett. – 2002 – Vol. 88 – P. 225001

104. Donkó Z., Hartmann P., and Kalman G. J. Molecular dynamics simulations of strongly coupled plasmas: localization and microscopic dynamics // Phys. Plasmas – 2003. – Vol. 10. – P. 1563

105. Машеева Р.У. Исследование коэффициента диффузии пылевой плазмы // Материалы 51-й международной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс», Новосибирск, 2013. – 86 с.

106. Машеева Р.У. Исследование динамических свойств плазмы сложного состава // Сборник тезисов Международной конференции студентов и молодых ученых, «Мир науки». – Алматы, 2013. –285 с.

107. Шаленов Е.О., Сейсембаева М.М., Машеева Р.У., Джумагулова К.Н. Сечения захвата электрона разными атомами на основе теории возмущений // Вестник КазНУ, серия физическая. – 2019. – №69 (2). – С. 88–92.

108. Kumar S., Das A. Spiral waves in driven strongly coupled Yukawa systems // Physical Review E. – 2018. – Vol. 97 (6). – 063202 p.

109. Джумагулова К.Н., Машеева Р. У. Колебания пылевых частиц в газоразрядной плазме // Известия НАН РК, серия физико-математическая. – 2013. – С.56–60.

110. Sanbonmatsu K. Y. and Murillo M. S. Shear Viscosity of Strongly Coupled Yukawa Systems on Finite Length Scales // Phys. Rev. Lett. – 2001. – Vol. 86. – P. 1215.

111. Saigo T. and Hamaguchi S. Shear viscosity of strongly coupled Yukawa system // Phys. Plasmas. 2002. – Vol. 9. 1210 p.

112. Dzhumagulova K.N., Masheeva R.U. and Donkó Z. Velocity Autocorrelation Functions of Dust Particles in External Magnetic Field // Book of Abstracts of 7-th ICPDP. – New Delhi, India, 2014. – 92 p.

113. Машеева Р.У. Движение заряженных частиц в магнитном поле // Сборник тезисов Международной конференции студентов и молодых ученых, «Мир науки». – Алматы, 2013. – С. 328.

114. Джумагулова К.Н., Машеева Р.У. Рамазанов Т.С., Джумагулов М.Н. Модель для исследования физических свойств системы заряженных частиц с учетом внешнего магнитного поля и силы трения // Математическое моделирование – 2019. – Том.31, №11. – С. 132-144.

115. Dzhumagulova K. N., Masheyeva R. U., Ramazanov T. S., Donkó Z., Xia G. Cage correlation functions of dust particles in a background gas and external magnetic field // Strongly Coupled Coulomb Systems, 2017, Kiel,Germany. – 142 p.

116. Машеева Р.У., Джумагулова К.Н. Влияние буферного газа на кейгеновую корреляционную функцию пылевых частиц // Сборник тезисов Международной конференции студентов и молодых ученых, «Фараби Әлемі». – Алматы, 2017.

117. Spreiter Q. and Walter M. Classical Molecular Dynamics Simulation with the Velocity Verlet Algorithm at Strong External Magnetic Fields // J. Comput. Phys. – 1999. – Vol. 152. – P. 102 - 109.

118. Dzhumagulova K. N., Masheeva R. U., Ramazanov T. S. and Donkó Z. Effect of magnetic field on the velocity autocorrelation and the caging of particles in two-dimensional Yukawa liquids // Physical Review E. – 2014. – Vol. 89. – 033104 p.

119. Dzhumagulova K. N., Masheyeva R. U., Ramazanov T.S., Donkó Z., Bonitz M., Ott T.Computer simulation of the cage correlation functions of Yukawa liquids // 15th International Conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas, – Almaty, 2015. – 98 p.

120. Dzhumagulova K.N., Masheyeva R.U. Mean squared displacement of dust particles in 2-dimensional strongly coupled Yukawa liquids exposed to an external magnetic field // XXIX IUPAP Conference on Computational Physics, CCP 2017. – Paris, 2017. – P.229.

121. Dzhumagulova K. N., Ramazanov T. S., and Masheeva R. U. Diffusion coefficient of three-dimensional Yukawa liquids // Phys. Plasmas. – 2013. – Vol. 20. –113702 p.

122. Машеева Р.У., Джумагулова К.Н., Рамазанов Т.С. Исследование связи

кейгеновой корреляционной функции и коэффициента диффузии для трехмерной Юкававской жидкости // Сборник трудов международной конференции «СДФФФО-9» – Алматы, 2016. – 72 с.

123. Джумагулова К.Н., Рамазанов Т.С., Машеева Р.У., Донко З. Влияние внешнего магнитного поля на колебания пылевых частиц // Известия НАН РК, серия физико-математическая. – 2015. – №3. – С. 87–90.

124. Джумагулова К.Н., Машеева Р.У., Рамазанов Т.С. Исследование влияния диссипации на динамические свойства магнитоактивной плазмы двумерной Юкава системы // 10-ая Международная научная конференция «Хаос и структуры в нелинейных системах. Теория и эксперимент» посвященная 75-летнему юбилею профессора З.Ж Жанабаева. – Казахстан, Алматы, 2017 г. – С. 19.

125. Dzhumagulova K.N., Masheyeva R.U., Ramazanov T.S., Donkó Z. Dynamical properties of dust particles in a background gas and external magnetic field // Book of Abstracts of 16 the International Conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas (PNP16) – Saint–Malo (France), 2018. – P. 52.

126. Машеева Р.У. Влияние внешнего магнитного поля на автокорреляционные функции скоростей пылевых частиц // Сборник тезисов Международной конференции студентов и молодых ученых, «Фараби Әлемі». – Алматы, 2014. – С. 280.

127. Джумагулова К.Н., Рамазанов Т.С., Машеева Р.У., Донко З. Влияние внешнего магнитного поля на автокорреляционные функции скоростей пылевых частиц // Вестник КазНУ, серия физическая – 2015. – Том 54, №3. – 151 с.

128. Машеева Р.У., Джумагулова К.Н., Рамазанов Т.С. Скейлинговые формулы для коэффициента диффузии пылевой компоненты плазмы сложного состава // Известия НАН РК. Серия физико–математическая. – 2013. - №2(288). – С. 75-79.

129. Джумагулова К.Н., Рамазанов Т.С., Машеева Р.У. Күрделі құрамды тозаңды плазма бөлшектерінің спектрлік функциясын зерттеу // Вестник КазНУ. – 2014. – Т. 3, №51. – 34 с.

130. Джумагулова К.Н, Машеева Р.У., Аханов Р. Исследование спектральной функций пылевых частиц // Известия НАН РК. Серия физико–математическая.–2014. – №3 (295). – С. 26–31.

131. Ohta H. and Hamaguchi S. Molecular dynamics evaluation of self-diffusion in Yukawa systems// Phys. Plasmas. – 2000. – Vol. 7. – 4506 p.

132. Ott T., Bonitz M., Hartmann P. and Donko Z. Higher harmonics of the magnetoplasmon in strongly coupled Coulomb and Yukawa systems // Phys. Rev. E. – 2011. – Vol. 83. – P. 046403.

133. Bonitz M., Donkó Z., Ott T., Kählert H., and Hartmann P. Nonlinear magnetoplasmons in strongly coupled Yukawa plasmas // Phys. Rev. Lett. – 2010. – Vol. 105. – P. 055002.

134. Donkó Z., Kalman G. J., Hartmann P. Dynamical correlations and collective excitations of Yukawa liquids // Condensed Matter. – 2008. – Vol. 20. – P.

413101.

135. Джумагулова К.Н., Машеева Р.У. Рамазанов Т.С., Донко З., Калимолдаев М.Н. Математическая модель для исследования локализации заряженных частиц при наличии внешнего магнитного поля // Математическое моделирование. – 2018. – Том. 30, №3. – С. 135-146.

136. Dzhumagulova K.N., Ramazanov T.S., Ussenov Y.A., and Masheeva R.U. Study of the Dust-Free Region Near an Electric Probe and the Dust Particles Oscillations in Dusty Plasma // Contrib. Plasma Phys. – 2013. – Vol. 53. №4–5. – P. 419 – 425.

137. Dzhumagulova K.N., Masheyeva R.U., Donkó Z. Effect of buffer gas induced friction on the cage correlation function of dust particles // 15th International Conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas (PNP). – Almaty, 2015. – P. 69.

138. Dzhumagulova K.N., Masheyeva R.U., Ramazanov T.S., Donkó Z., Bonitz M., Ott T. Cage correlation functions of three-dimensional Yukawa systems in external magnetic field // The International Conference on Phenomena in Ionized Gases. – Iasi, Romania, 2015. – P 1.22.

139. Джумагулова К.Н, Машеева Р.У. Влияние внешнего магнитного поля на кэйгиновые корреляционные функции в трехмерной Юкава системе // Сборник тезисов Международной конференции студентов и молодых ученых, «Фараби Әлемі». – Алматы, 2015. – С. 382.

140. Dzhumagulova K. N., Masheyeva R.U., Ramazanov T.S., Donkó Z. Influence of background gas and external magnetic field on the localization of particles in two dimensional Yukawa systems // International Journal of Mathematics and Physics. – 2018. – V. 9 (2). – P. 94–100.

141. Dzhumagulova K.N., Masheyeva R.U., Ott T., Hartmann P., Ramazanov T.S., Bonitz M., and Donko Z. Cage correlation and diffusion in strongly coupled three-dimensional Yukawa systems in magnetic fields // Physical Review E. – 2016. – Vol. 93. – 063209 p.

142. Hartmann P., Reyes J.C., Matthews L.S., Hyde T.W., Masheyeva R.U., Dzhumagulova K.N., Ramazanov T.S., Ott T., Bonitz M., Korolov I., Donkó Z. Diffusion in two-dimensional quasi-magnetized rotating dusty plasmas // Strongly Coupled Coulomb Systems. – Kiel, Germany, 2017. – P. 61.

143. Машеева Р.У., Джумагулова К.Н., Донко З., Рамазанов Т.С., Габдуллина Г.Л. Компьютерное моделирование и исследование локализации пылевых частиц во внешнем магнитном поле // Вестник КазНУ, Серия математика, механика, информатика – 2016. – №2 (89). – С. 65 – 74.

144. Джумагулова К.Н. Связь кейгеновой корреляционной функции и коэффициента диффузии трехмерной Юкава жидкости // Сборник тезисов Международной конференции студентов и молодых ученых, «Фараби Әлемі». – Алматы, 2016. – 304 с.

145. Hartmann P., Reyes J.C., Matthews L.S., Hyde T.W., Masheyeva R. U., Dzhumagulova K. N., Ramazanov T. S., Ott T., Kahlert H., Bonitz M., Korolov I., and Donkó Z. Diffusion in two-dimensional Quazi-magnetized Rotating Dusty

Plasmas // 8th International Conference on the physics of Dusty Plasmas. – Prague, Czech Republic, 2017.

146. Джумагулова К.Н., Рамазанов Т.С., Машеева Р.У., Донко З. Коэффициент диффузий трехмерной Юкава системы // Серия физико-математическая. – 2017. – Vol. 2, №312 – С. 25–29.

147. Dzhumagulova K. N., Masheyeva R. U., Ott T., Hartmann P., Ramazanov T. S., Bonitz M.,and Donko Z. Connection of the cage correlation functions with the diffusion coefficient of yukawa liquids // ESCAMPIG XXI II, Bratislava, Slovakia, 2016. – P. 306 – 307.

148. Джумагулова К.Н., Машеева Р.У. Исследование одновременного влияния внешнего магнитного поля и силы трения на динамику частиц двумерной юкава системы // Сборник тезисов Международной научной конференции студентов и молодых ученых, «Фараби әлемі». – Алматы, 2018. – С.262.

149. Donkó Z., Dzhumagulova K.N., Masheyeva R.U., Ramazanov T.S. Effect of Buffer Gas Induced Friction on the Caging of Particles in a Dusty Plasma // Contrib. Plasma Phys. – 2016. – Vol. 1 – 7. – 201500090 p.

150. Dzhumagulova K. N., Masheyeva R. U., Ramazanov T. S., Donkó Z., G. Xia, Kalimoldayev M. N. Simultaneous effect of an external magnetic field and gas-induced friction on the caging of particles in two-dimensional Yukawa systems // Contrib. Plasma Phys. – 2018. – Vol. 58 (2 – 3). – P. 217-225.

151. Fortov V.E., Vaulina O.S., Petrov O. F., Molotkov V. I., Lipaev A.M., Torchinsky V.M., Thomas H.M., Morfill G.E., Khrapak S.A., Semenov Yu.P., Ivanov A.I., Krikalev S.K., Kalery A.Yu., Zaletin S.V., and Gidzenko Yu.P. Transport of Microparticles in Weakly Ionized Gas-Discharge Plasmas under Microgravity Conditions // Phys. Rev. Lett. – 2003. – Vol. 90. –245005 p.

152. Джумагулова К.Н., Машеева Р.У., Рамазанов Т.С. Автоматизированный комплекс «Структурные и диссипативные свойства магнитоактивной плазмы» // Авторское свидетельство РК № 2952 от «22» апреля 2019 г.

153. Рамазанов Т. С., Джумагулова К.Н., Машеева Р.У. Автоматизированный комплекс «Magnetized Dusty Plasma» // Программа ЭВМ. – 2017. – №2633.

154. Машеева Р.У., Джумагулова К.Н., Шаленов Е.О., Автоматизированный комплекс для исследования свойств пылевой плазмы во внешнем магнитном поле // Recent Contribution to Physics. – 2019. – №3 (70). – С. 37–46.