

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН)

На правах рукописи

Колотинский Даниил Александрович

**Влияние плазменного окружения
на динамические свойства пылевых структур:
вычислительный и теоретический подходы**

Специальность 1.3.9 —
«Физика плазмы»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук,
ФГБУН Объединенный институт высоких
температур Российской академии наук,
старший научный сотрудник
Тимофеев Алексей Владимирович

Москва — 2025

Оглавление

	Стр.
Введение	5
Глава 1. Обзор литературы	13
1.1 Зарядка пылевых частиц	14
1.2 Силы, действующие на пылевые частицы	20
1.3 Учет плазменного окружения при моделировании свойств пылевых структур	31
1.4 Влияние плазменного окружения на свойства пылевых структур . .	33
1.5 Выводы к первой главе	36
Глава 2. Самосогласованный расчет зарядов пылевых частиц и сил, действующих на них, в потоке плазмы	38
2.1 Программный код OpenDust	39
2.1.1 Расчет динамики плазмы	41
2.1.2 Расчет сил и зарядов	45
2.2 Сравнение с теоретическими моделями и расчетами методами частиц в ячейках и молекулярной динамики	47
2.2.1 Уединенная пылевая частица в потоке бесстолкновительной плазмы	47
2.2.2 Уединенная пылевая частица в потоке столкновительной плазмы	50
2.3 Ускорение моделирования плазмы в OpenDust с помощью графических ускорителей	52
2.3.1 Логика использования графических ускорителей в OpenDust	56
2.3.2 Сравнение производительности и эффективности на центральной и графических процессорах	58
2.3.3 Масштабирование размеров физической системы	61
2.3.4 Эффективность одновременного использования нескольких графических процессоров	62
2.3.5 Сравнение производительности с аналогами	63
2.4 Выводы ко второй главе	67

Глава 3. Сравнение с экспериментом	68
3.1 Самоподдерживающееся неравновесное сосуществование центральной неупорядоченной двухслойной области и упорядоченной периферийной области пылевой подсистемы	68
3.1.1 Описание эксперимента	69
3.1.2 Сравнение модели с экспериментом	71
3.2 Влияние потока плазмы на заряд и взаимодействие двух вертикально упорядоченных пылевых частиц	75
3.2.1 Эффективное притяжение нижней пылевой частицы к верхней пылевой частице в горизонтальном направлении	75
3.2.2 Зарядка нижней пылевой частицы в системе из двух пылевых частиц в плазменном потоке	79
3.3 Выводы к третьей главе	82
Глава 4. Распределение средних кинетических энергий и перекачка энергии в упорядоченных структурах пылевых частиц с учетом плазменного окружения	86
4.1 Система невязанно связанных гармонических осцилляторов в термостате Ланжевена как модель упорядоченных структур пылевых частиц в плазме газового разряда	88
4.2 Стационарная динамика системы осцилляторов в контакте с ланжевенским термостатом	91
4.2.1 Критерий достижимости детального баланса	91
4.3 Эффекты вне взаимности	93
4.3.1 Теорема о равномерном распределении	93
4.3.2 Классификация матрицы переноса в рамках физики неэрмитовых систем	95
4.3.3 Перекачка энергии	99
4.3.4 Локализация распределения средних кинетических энергий	100
4.4 Распределение и перекачка энергии в экспериментальной системе двух пылевых частиц	102
4.5 Выводы к четвертой главе	105
Заключение	108
Словарь терминов	111

Список литературы	112
Список рисунков	127
Список таблиц	131

Введение

Пылевая плазма представляет собой ионизированный газ, содержащий микронные и субмикронные частицы конденсированного состояния [1; 2]. Эти частицы, называемые пылевыми, взаимодействуют как между собой, так и с окружающей плазмой. Изучение таких систем имеет не только фундаментальное значение благодаря их сложным динамическим и структурным свойствам, но и практическую значимость, например, в технологии литографии в жёстком ультрафиолете [3—5]. Взаимодействие пылевых частиц с плазмой обладает сложной физической природой, что требует разработки новых теоретических и вычислительных подходов для их адекватного описания.

Одной из ключевых особенностей плазменно-пылевых систем в условиях земной гравитации является наличие направленного плазменного потока, который оказывает значительное влияние на зарядку пылевых частиц и их межчастичное взаимодействие. Движущееся плазменное окружение приводит к эффективному нарушению третьего закона Ньютона при рассмотрении подсистемы пылевых частиц [6; 7]. Это связано с перекачкой энергии от неравновесного плазменного окружения к подсистеме пылевых частиц. Во всей системе "плазма + пылевые частицы" третий Закон Ньютона, конечно же, выполняется. В результате возникают нетривиальные эффекты в подсистеме пылевых частиц: нарушение теоремы о равномерном распределении средней кинетической энергии, появление особенностей перекачки энергии, особые виды структурных переходов и неустойчивостей.

В последние годы активно развиваются численные методы, позволяющие исследовать влияние плазменного окружения на свойства пылевых структур. Среди них особенно выделяются методы молекулярной динамики и частиц в ячейках, позволяющие самосогласованно рассчитывать заряды пылевых частиц и действующие на них силы [8—14]. Однако большинство существующих подходов либо не учитывают ряд ключевых эффектов, либо оказываются избыточно вычислительно затратными при моделировании реальных систем. Поэтому актуальной задачей остаётся разработка высокоэффективных вычислительных методов, способных учитывать влияние направленного плазменного потока на динамику и структурные свойства пылевой плазмы.

Дополнительно, эффективное невыполнение третьего закона Ньютона в подсистеме пылевых частиц роднит пылевую плазму с физикой активных [15] и коллоидных систем [16], метаматериалов [17] и оптически связанных наночастиц [18]. Это создаёт стимул для описания явлений, характерных для плазменно-пылевых структур, в рамках междисциплинарных теоретических подходов, одним из которых является физика неэрмитовых систем.

Целью данной работы является развитие теоретических и вычислительных подходов для описания влияния плазменного окружения на свойства пылевых структур, включая разработку высокоэффективного вычислительного инструмента для расчета зарядов пылевых частиц и сил, действующих на них в потоке газоразрядной плазмы, с использованием метода самосогласованного моделирования.

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

1. Разработать и реализовать модель самосогласованной динамики плазмы и пылевых частиц в ионном потоке с использованием метода асимметричной молекулярной динамики, позволяющую описывать динамические эффекты на временных масштабах нескольких десятков секунд.
2. Определить условия симметризации силовой матрицы, описывающей взаимодействие пылевых частиц в плазменном потоке, при которых обеспечивается достижимость детального равновесия в подсистеме частиц под воздействием стохастических флуктуаций окружающей среды.
3. Провести классификацию упорядоченных структур пылевых частиц по критерию достижимости детального равновесия и исследовать механизмы формирования различных режимов распределения средней кинетической энергии по степеням свободы.

Научная новизна:

1. Разработана модель самосогласованной динамики плазмы и пылевых частиц в ионном потоке, основанная на методе асимметричной молекулярной динамики, которая позволяет описывать процессы на временных масштабах нескольких десятков секунд.
2. Установлен критерий достижимости детального равновесия в подсистеме пылевых частиц при стохастическом воздействии окружающей среды, основанный на условии симметризации силовой матрицы, описывающей взаимодействие пылевых частиц в потоке плазмы.

3. Предложена классификация упорядоченных систем пылевых частиц по признаку достижимости детального равновесия, выявившая условия формирования различных типов распределения средней кинетической энергии по степеням свободы.

Теоретическая и практическая значимость. Теоретическая значимость работы заключается в развитии численных и аналитических подходов для самосогласованного описания динамических и структурных свойств пылевой плазмы в условиях направленного потока газоразрядной плазмы при широком диапазоне параметров системы, включая варьирующиеся скорости потока, концентрации заряженных компонентов, размеры пылевых частиц и частоты ион-нейтральных столкновений. В работе впервые предложено сочетание методов асимметричной молекулярной динамики с высокопроизводительными вычислениями на графических процессорах для учёта самосогласованной зарядки пылевых частиц, силы ионного увлечения и влияния ионной фокусировки. Разработаны методы анализа распределения и локализации средних кинетических энергий в упорядоченных системах пылевых частиц, что позволяет классифицировать неравномерность этих распределений и описать процессы перекачки энергии. Показано, что эти эффекты связаны с эффективным нарушением симметрии межчастичных взаимодействий (невзаимностью), приводящей к неэрмитовой структуре матрицы переноса, связывающей мощность перекачки энергии и интенсивность флуктуационных воздействий со стороны окружающей среды. Тем самым работа расширяет теоретическое понимание свойств открытых плазменно-пылевых систем, в которых реализуются аномальные эффекты распределения средних кинетических энергий и перекачки энергии, вызванные эффективным невзаимным характером взаимодействий. Полученные результаты вносят вклад в развитие фундаментальной теории неравновесных плазменных систем и взаимодействия пылевых частиц в условиях направленного потока плазмы.

Практическая значимость исследования состоит в создании программного кода *OpenDust*, который демонстрирует высокую вычислительную эффективность и позволяет моделировать взаимодействия пылевых частиц в плазменных потоках с учётом сложных физических явлений, включая нелинейное экранирование и изменение зарядов частиц. Код успешно работает как в условиях слабостолкновительной, так и умеренно столкновительной плазмы, при диапазоне скоростей ионного потока от субтермических до сверхзвуковых значений, что подтверждается его верификацией на ряде тестов и количественным срав-

нение с экспериментальными данными. Показано, что моделирование воспроизводит ключевые характеристики устойчивого сосуществования упорядоченной и неупорядоченной фаз в пылевой структуре, включая радиальный профиль распределения средних кинетических энергий. Этот инструмент может быть использован для анализа экспериментальных данных, диагностики плазменно-пылевых систем и оптимизации параметров плазменных установок. Кроме того, OpenDust может быть адаптирован для задач численного моделирования как в академических исследованиях, так и в инженерной практике — включая литографию и материалов. Полученные результаты могут применяться для прогнозирования структурных и динамических свойств пылевых систем, оценки устойчивости плазменных структур и разработки новых методов управления поведением частиц в промышленных и исследовательских условиях.

Методология и методы исследования. Методы исследования, используемые в данной работе, опираются на теоретические и численные подходы, направленные на моделирование и анализ сложных взаимодействий пылевых частиц в плазме. Основой методологии является самосогласованный расчет зарядов пылевых частиц и сил, действующих на них, с учетом нелинейных эффектов и ионной фокусировки. Моделирование выполнялось с использованием программного пакета OpenDust, специально разработанного для высокоэффективного численного моделирования обтекания систем пылевых частиц потоком плазмы. Для повышения вычислительной эффективности были использованы графические ускорители, что позволило значительно сократить время расчётов.

В рамках работы проводится анализ уравнений движения системы гармонических осцилляторов, взаимодействующих с термостатами Ланжевена, с применением теории линейного отклика. Особое внимание уделяется исследованию взаимосвязи между средними по времени квадратичными компонентами скоростей и смещений пылевых частиц. Изучение особенностей перекачки энергии и распределения кинетической энергии между степенями свободы системы осуществляется с применением формализма неэрмитовой физики, что позволяет более глубоко понять механизмы, стоящие за свойствами пылевых структур.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Разработанная модель самосогласованной динамики плазмы и пылевых частиц в ионном потоке для расчёта сил, зарядов пылевых частиц, распределения плотности ионов и динамики пылевых частиц на основе

метода асимметричной молекулярной динамики описывает явления на временных масштабах нескольких десятков секунд.

2. Критерий достижимости детального равновесия между подсистемой пылевых частиц и стохастическим воздействием окружающей среды определяется установленным условием симметризации силовой матрицы, описывающей взаимодействие пылевых частиц в ионном потоке.
3. Классификация упорядоченных систем пылевых частиц по признаку достижимости детального равновесия выявила условия, при которых реализуются принципиально различные типы распределения средней кинетической энергии по степеням свободы.

Достоверность полученных результатов обеспечивается тщательным сравнением с известными аналитическими подходами, такими как приближение OML и другими расчетными методами, включая коды Coptic [11], Sceptic [19—21] и Mad [8], а также экспериментом. Важным аспектом является согласованность наблюдаемых эффектов неравномерного распределения средних кинетических энергий между степенями свободы с экспериментами, такими как измерения кинетической энергии в плазменно-пылевых монослоях и цепочечных структурах.

Обоснованность использования метода асимметричной молекулярной динамики заключается в непосредственном сравнении полученных результатов с расчетами, выполненными с использованием гибридного метода частиц в ячейках, который является классическим подходом для описания взаимодействий в плазме. Такое сравнение позволяет подтвердить точность и применимость метода асимметричной молекулярной динамики при расчете сил, действующих на пылевые частицы, и их зарядов в потоке плазмы.

Полученные результаты работы были высоко оценены научным сообществом, что подтверждается множеством наград и грантов. Автор стал победителем конкурса для аспирантов и молодых ученых «PhD Student», получив индивидуальный грант Фонда развития теоретической физики и математики "Базис". Также автор является многократным победителем грантов Фонда поддержки молодых ученых ОИВТ РАН и награжден за лучший научный доклад на XXVII Международной научной конференции молодых ученых и специалистов в Дубне (2023).

Работа включает публикации в высокорейтинговых научных журналах по тематике пылевой плазмы, а также представлена на международных и всероссийских конференциях, что дополнительно подтверждает их достоверность.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на следующих конференциях:

- Международный научный семинар Non-Ideal Plasma Physics; Доклад: Self-consistent calculation of dust particles charges in multi-scale simulation of dust dynamics; Авторы: Колотинский Д.А., Тимофеев А.В. Место: Россия, Москва; Даты: 04.12.2024 - 05.12.2024
- 20th International Workshop CSPIER; Доклад: Generalised equipartition theorem as a natural measure of non-reciprocity in complex plasmas; Авторы: Колотинский Д.А., Тимофеев А.В. Место: Россия, Москва; Даты: 07.04.2024 - 09.04.2024
- 66-я конференция МФТИ; Доклад: Отклонение от обобщенной теоремы о равномерном распределении средней кинетической энергии как естественная мера невязимности в активной материи; Авторы: Колотинский Д.А., Тимофеев А.В. Место: Россия, Долгопрудный; Даты: 03.04.2024 - 04.04.2024
- Международный научный семинар Non-Ideal Plasma Physics; Доклад: Simulation of dust chains; Авторы: Колотинский Д.А., Тимофеев А.В. Место: Россия, Москва; Даты: 07.12.2023 - 08.12.2023
- Международная научная конференция Суперкомпьютерные дни в России; Доклад: Оптимизация под графические ускорители алгоритма расчета сил, действующих на микрочастицы конденсированного состояния в плазме; Авторы: Колотинский Д.А., Тимофеев А.В. Место: Россия, Москва; Даты: 25.09.2023 - 26.09.2023
- XXVII International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists; Доклад: Dynamical properties of dust particle chain structures study using numerical simulation; Авторы: Колотинский Д.А., Тимофеев А.В. Место: Россия, Дубна; Даты: 29.11.2023 - 31.11.2023
- 19th International Workshop Complex Systems of Charged Particles and Their Interactions with Electromagnetic Radiation; Доклад: Structural and dynamical properties of dust particle chain structures: numerical study; Авторы: Колотинский Д.А., Тимофеев А.В. Место: Россия, Москва; Даты: 10.04.2023 - 11.04.2023
- 65-я конференция МФТИ; Доклад: Численное исследование динамических и структурных свойств цепочек пылевых частиц в потоке плазмы газового разряда; Авторы: Колотинский Д.А., Тимофеев А.В. Место: Россия, Москва; Даты: 06.04.2023 - 07.04.2023

- Международная научная конференция Суперкомпьютерные дни в России; Доклад: Performance analysis of GPU-based code for complex plasma simulation; Авторы: Колотинский Д.А., Тимофеев А.В. Место: Россия, Москва; Даты: 25.09.2022 - 26.09.2022
- 9th International Conference on the Physics of Dusty Plasmas ICPDP; Доклад: Fast multi-GPU Python code for self-consistent calculation of forces, acting on dust particles in a plasma environment; Авторы: Колотинский Д.А., Тимофеев А.В. Место: Россия, Москва; Даты: 23.05.2022 - 27.05.2022
- Международный научный семинар Non-Ideal Plasma Physics; Доклад: Исследование распределения параметров плазмы газового разряда вокруг цепочечных структур пылевых частиц; Авторы: Колотинский Д.А., Тимофеев А.В. Место: Россия, Москва; Даты: 09.12.2021 - 10.12.2021
- 64-я конференция МФТИ; Доклад: Исследование устойчивости цепочечных структур пылевых частиц в плазме с конденсированной дисперсной фазой; Авторы: Колотинский Д.А., Тимофеев А.В. Место: Россия, Москва; Даты: 29.11.2021 - 03.12.2021

Личный вклад. Все представленные в диссертации результаты получены лично соискателем. Постановка задач, вошедших в диссертационную работу, выполнена под руководством А. В. Тимофеева. Выводы и положения, выносимые на защиту, сформулированы лично автором при участии научного руководителя.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 4 печатных изданиях, 4 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК,⁴ — в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus.

1. OpenDust: A fast GPU-accelerated code for the calculation of forces acting on microparticles in a plasma flow [Текст] / D. A. Kolotinskii, A. V. Timofeev // Computer Physics Communications. — 2023. — Т. 288. — С. 108746. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2023.108746>
2. Self-sustained non-equilibrium co-existence of fluid and solid states in a strongly coupled complex plasma system [Текст] / M. G. Hariprasad, P. Bandyopadhyay, V. S. Nikolaev, D. A. Kolotinskii, S. Arumugam, G. Arora, S. Singh, A. Sen, A. V. Timofeev // Scientific Reports. — 2022. — Т. 12, № 1. — С. 13882. — URL: <https://doi.org/10.1038/s41598-022-17939-w>.
3. Performance Analysis of GPU-Based Code for Complex Plasma Simulation [Текст] / D. A. Kolotinskii, A. V. Timofeev // Russian Supercomputing Days.

- Cham : Springer International Publishing, 2022. – С. 276-289. — URL: <https://doi.org/10.1007/978-3-031-22941-120>
4. Deviation of a system of nonreciprocally coupled harmonic oscillators from a conservative system [Текст] / D. A. Kolotinskii, A. V. Timofeev // Physical Review E. — 2025. — Т. 111. — №. 1. — С. 014132. — URL: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.111.014132>

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения. Полный объём диссертации составляет 131 страницу, включая 27 рисунков и 7 таблиц. Список литературы содержит 176 наименований.

Глава 1. Обзор литературы

Исследование пылевой плазмы представляет собой междисциплинарную задачу, объединяющую физику плазмы, статистическую механику и теорию неравновесных систем. Пылевые частицы, взаимодействуя как между собой, так и с плазменной средой, формируют разнообразные структуры, динамика которых определяется сложным балансом процессов зарядки, межчастичных сил и внешних воздействий. Одним из ключевых факторов, влияющих на свойства таких систем, является направленный поток плазмы, приводящий к нарушению симметрии взаимодействий и появлению новых физических эффектов. При этом для корректного описания динамических процессов в пылевых структурах необходим численный подход, способный объединить различные пространственно-временные масштабы в рамках единой модели — от процессов зарядки пылевых частиц и формирования кильватерного следа до динамики кластеров пылевых частиц.

Однако большинство существующих моделей либо ограничены в учёте самосогласованности взаимодействий, либо являются чрезвычайно ресурсоёмкими, что затрудняет проведение многомасштабного моделирования, в котором влияние плазменного окружения учитывается напрямую при расчёте динамики пылевых структур. В последние десятилетия значительное внимание уделяется моделированию пылевой плазмы с учётом её неравновесного плазменного окружения. Развитие методов молекулярной динамики и численного моделирования позволило исследовать процессы зарядки пылевых частиц, их коллективное поведение и влияние плазмы на формирование устойчивых структур. Тем не менее, многие аспекты, такие как роль невзаимных взаимодействий, механизмы теплопереноса и эффекты нарушения теоремы равномерного распределения, остаются предметом дискуссий и требуют дальнейших исследований. Таким образом, одной из ключевых нерешённых задач остаётся разработка эффективного инструмента, позволяющего выполнять самосогласованное многомасштабное моделирование пылевых структур с учётом динамики плазмы. Также остаётся открытым вопрос о том, при каких условиях могут проявляться те или иные термодинамические свойства упорядоченных структур пылевых частиц.

Данная глава посвящена анализу существующих теоретических и экспериментальных работ в области пылевой плазмы. Рассматриваются основные модели

зарядки пылевых частиц, механизмы их взаимодействия, а также влияние направленного плазменного потока на динамику и термодинамические свойства пылевых структур. Особое внимание уделяется численным методам, применяемым для моделирования плазменно-пылевых систем, и их пригодности для описания реальных экспериментальных условий.

1.1 Зарядка пылевых частиц

Зарядка пылевых частиц [22] в плазме газового разряда представляет собой сложный процесс, зависящий от множества факторов, таких как параметры плазмы, размер частиц, наличие столкновений и другие локальные условия. Основным механизмом зарядки связан с захватом электронов и ионов поверхностью пылевой частицы, а также, в некоторых случаях, с процессами электронной эмиссии, такими как термоэлектронная, фотоэлектронная и вторичная эмиссии [23]. Из-за значительно большей подвижности электронов их приток к поверхности частицы превышает приток ионов. В результате, если эмиссионные процессы отсутствуют, частица приобретает отрицательный заряд. Накопленный отрицательный заряд создаёт электрическое поле, которое отталкивает электроны и одновременно притягивает ионы. Процесс зарядки продолжается до тех пор, пока потоки электронов и ионов, достигающие поверхности частицы, не уравниваются. Это равновесие определяется плотностью плазмы, распределением электронов и ионов по скоростям, а также другими характеристиками среды.

Для описания этих процессов были разработаны различные теоретические модели, среди которых наиболее известны теория орбитального движения (ОМ — orbital motion) [24—27] и её упрощённая версия — приближение ограниченного орбитального движения (OML — orbital motion limited) [28—30]. ОМ используется для описания зарядки сферических объектов, таких как пылевые частицы, погружённые в плазму. В основе ОМ лежит модель взаимодействия электронов и ионов с заряженной поверхностью, описываемая через сохранение энергии и углового момента частиц. Теория применима для случаев, когда характерный размер пылевых частиц и дебаевский радиус экранирования много меньше длины свободного пробега в плазме, то есть, когда плазму можно считать приближённо бесстолкновительной. Основное предположение ОМ состоит

в том, что траектории электронов и ионов подчиняются законам сохранения, а их движение описывается нелинейным уравнением Пуассона, которое связывает распределение электрического потенциала и зарядов в плазме. Важным моментом является учёт углового момента частиц: он определяет, могут ли частицы достичь поверхности пылевой частицы или будут отклонены на определённом расстоянии. Для описания движения частиц в ОМ используется концепция эффективного потенциала, который складывается из экранированного электрического потенциала, создаваемого пылевой частицей, и центробежного потенциала, зависящего от углового момента ионов. Эффективный потенциал может иметь максимум, который определяет радиус поглощения. Этот радиус обозначает минимальное расстояние, на которое частица может подойти к пылевой поверхности, не будучи поглощённой. Если радиус поглощения существует, это ограничивает число частиц, достигающих поверхности, и, следовательно, влияет на результирующий заряд частицы. Теория ОМ требует решения нелинейных уравнений Пуассона–Больцмана или Власова–Пуассона для описания функции распределения ионов и электронов и электрического потенциала.

OML представляет собой упрощённую модель, разработанную для описания процесса зарядки небольших сферических частиц, погружённых в плазму. Эта модель пренебрегает наличием эффективных потенциальных барьеров и позволяет обойти трудоёмкое решение уравнения Пуассона. Результаты OML по заряду пылевой частицы согласуются с ОМ в случае, когда размер частицы намного меньше дебаевского радиуса.

С развитием исследований была предложена расширенная версия OML, учитывающая столкновения ионов с нейтральными молекулами, которые становятся значимыми при повышении давления в плазме [31]. Такие столкновения изменяют траектории ионов, снижая их угловой момент и усиливая их движение к поверхности частицы [32]. В расширенной модели добавляются поправки к стандартной OML, которые позволяют учитывать изменения ионных потоков и более точно описывать заряд в условиях высокой плотности газа или высокой частоты столкновений.

Влияние столкновений на зарядку пылевых частиц в плазме является ключевым фактором, который значительно усложняет теоретическое описание. В условиях плазмы реальных газовых разрядов классические модели, например, OML, часто оказываются недостаточными [33; 34]. Эти модели предполагают бесстолкновительное движение ионов и электронов, что упрощает расчёты, но

игнорирует важные эффекты, связанные со взаимодействием плазменных частиц с нейтральным газом. Однако в условиях высокой плотности нейтралов столкновения играют доминирующую роль, определяя потоки частиц к пылевым зернам и их конечный заряд [35]. В [36] авторы подчёркивают, что классическая модель OML неадекватно описывает процессы зарядки в столкновительной плазме, где ион-нейтральные взаимодействия существенно изменяют траектории ионов. Эти столкновения усиливают поток ионов к частицам, поскольку ионы с низкой кинетической энергией легче захватываются отрицательно заряженной пылевой частицей. Итоговый заряд пылевой частицы уменьшается (по абсолютному значению) по сравнению с предсказаниями OML. В условиях высокой частоты столкновений зарядка пылевых частиц может перейти в гидродинамический режим, где потоки ионов ограничиваются их подвижностью, а заряд частиц становится практически независимым от степени столкновительности плазмы. Для устранения разрывов между различными теоретическими описаниями зарядки в плазме с различной частотой столкновений была разработана интерполяционная модель, представленная в работе [37]. Эта модель объединяет слабостолкновительный и сильностолкновительный режимы зарядки, позволяя плавно описывать переход между ними. Результаты показывают, что в переходной области наблюдается минимум заряда частиц, связанный с конкуренцией между увеличением ионного потока из-за столкновений и его подавлением в условиях высокой плотности нейтралов. Данная модель существенно расширяет возможности описания зарядки пылевых частиц в плазме с широким диапазоном параметров.

Экспериментальное подтверждение важности столкновений представлено в работе [35], где были измерены заряды пылевых частиц в газовом разряде при различных давлениях. Результаты показали, что заряды частиц значительно ниже теоретических значений, предсказанных моделью OML. Это отклонение напрямую связано с влиянием ион-нейтральных столкновений, которые изменяют динамику ионов и приводят к снижению заряда частиц. Для описания зарядки частиц в широком диапазоне условий были предложены полуэмпирические интерполяционные формулы [38]. Они позволяют объединить слабостолкновительный и сильностолкновительный режимы в единую модель, основанную на экспериментальных данных и численных расчётах. Такие формулы оказались особенно полезны для расчётов в условиях, где свойства плазмы сильно варьируются.

Сравнение теоретических моделей с экспериментальными измерениями заряда пылевых частиц в разрядах при повышенном давлении подтвердило, что в большинстве случаев классическая OML переоценивает заряд частицы, игнорируя влияние столкновений. Эксперименты, основанные на анализе колебаний пылевых частиц или их траекторий, показали, что заряд частицы снижается при увеличении частоты столкновений и плотности газа [39—41]. Численное моделирование зарядки пылинок методом частиц в ячейках подтверждают эти наблюдения, демонстрируя хорошее совпадение с экспериментами и усовершенствованными теоретическими моделями зарядки.

В плотных системах, где частицы расположены близко друг к другу, возникает эффект, известный как «электронный каннибализм» [42; 43]. В таких условиях частицы начинают конкурировать за электроны, что приводит к снижению их заряда. Количественным показателем влияния плотной упаковки пылевых частиц на их заряды является параметр Хавнеса [44]. Это безразмерная величина, применяемая в физике пылевой плазмы, которая характеризует степень влияния заряженных пылевых частиц на параметры плазмы. В простейшем виде он задаётся как отношение суммарной плотности заряда на пылинках к плотности электронов в плазме. Если параметр Хавнеса намного меньше единицы, вклад пылевых частиц в суммарный заряд и динамику плазмы незначителен. Если же параметр Хавнеса сравним с единицей, пылинки начинают оказывать заметное влияние на локальный зарядовый баланс в плазме, что приводит к снижению их зарядов.

Дополнительную сложность создают возмущения ионных потоков, вызванные присутствием пылевых частиц [45; 46]. Заряженные пылевые частицы создают локальные искажения в плазме, включая формирование областей с избыточным положительным зарядом за частицами по направлению потока плазмы (ионный след). Эти локальные возмущения ионных потоков существенно влияют на процесс зарядки соседних пылевых частиц, изменяя их равновесный заряд [47]. Основным механизмом этого взаимодействия связан с отклонением ионов в электрическом поле частицы [48]. Когда ионы движутся через плазму вблизи заряженной частицы, они фокусируются за ней, создавая область с избыточным положительным зарядом. Это возмущение в свою очередь влияет на зарядку соседних частиц, которые находятся в потоке плазмы ниже первой частицы [49]. Такие эффекты особенно заметны в случае потока плазмы со сверхзвуковой или околосзвуковой скоростью, где концентрация ионов в следе значительно возрастает. Исследова-

ния показывают, что заряд частиц, расположенных ниже по потоку, существенно снижается по сравнению с зарядом одиночных частиц.

При тесном расположении кластеров пылевых частиц их взаимное влияние на заряды друг друга становится ещё более сложным. В работе [50] показано, что ионные следы соседних частиц могут сливаться, а общая возмущенная область с избыточным положительным зарядом отклоняется от линейной суперпозиции ионных следов отдельных частиц.

Для количественного описания эффектов взаимного влияния пылевых частиц на заряд друг друга используются подходы самосогласованного моделирования, в рамках которого динамика плазмы вокруг кластеров рассчитывается методом частиц в ячейках или с помощью молекулярной динамики [10]. Для учёта влияния пылевых частиц на заряды друг друга также применяется гибридный подход, который основывается на различии в частоте столкновений электронов и ионов с нейтральными частицами. Потоки электронов рассчитываются в рамках приближения OML, поскольку столкновения электронов с нейтрами обычно незначительны и практически не влияют на процесс зарядки. В то же время для расчёта ионных потоков используется самосогласованная модель, учитывающая столкновения ионов с нейтральными частицами, в частности, механизм резонансной перезарядки, который играет ключевую роль в условиях высокой плотности газа.

Этот гибридный подход объединяет аналитическую простоту теории OML для описания электронных потоков и численную точность самосогласованного расчёта для ионов. Такое сочетание позволяет, с одной стороны, более точно описывать процессы зарядки пылевых частиц в различных плазменных условиях, а с другой — обеспечивает эффективный расчётный алгоритм, пригодный для практических применений.

Флуктуации зарядов пылевых частиц в плазме обусловлены статистическим характером их взаимодействия с электронами и ионами. Эти флуктуации становятся особенно значимыми для частиц малого размера, где захват даже одного дополнительного электрона или иона приводит к существенным изменениям заряда. Согласно работам, таким как исследования [51] и [52], заряд пылевой частицы не остаётся постоянным, а изменяется с течением времени из-за случайного захвата ионов и электронов.

Основной причиной возникновения флуктуаций является дискретность зарядов [53; 54], так как захват отдельного электрона или иона изменяет заряд

частицы на значение элементарного заряда. Эти флуктуации имеют характерный временной масштаб, связанный с процессом зарядки, который определяется скоростью потоков ионов и электронов. Например, работа [53] показывает, что флуктуации заряда могут быть описаны как результат конкуренции между случайным захватом зарядов и восстановлением равновесного состояния, когда токи ионов и электронов выравниваются. В результате распределение зарядов может быть приближённо описано нормальным распределением с определёнными средним значением и дисперсией.

Процессы дискретной зарядки и разрядки пылевых частиц обладают асимметрией. Характерный временной масштаб зарядки и разрядки различен: захват электронов происходит на более коротких временных интервалах, тогда как процесс захвата ионов может быть растянутым из-за их более медленной динамики. Эти различия становятся особенно значимыми для малых частиц или в условиях разреженной плазмы, где среднее число захваченных зарядов невелико.

Для описания зарядки несферических пылевых частиц используется подход, который учитывает их сложную геометрию и взаимодействие с плазмой [55]. В отличие от сферических частиц, несферические агрегаты обладают неоднородным распределением потенциала и заряда по своей поверхности, что связано с экранированием определённых участков другими частями агрегата. Это делает классические теории зарядки, такие как OML, недостаточными для описания таких систем [56].

Основой модели является модифицированная OML [57], в рамках которого проводится расчёт потоков заряженных частиц к поверхности агрегата с учётом блокировки траекторий плазменных частиц другими частями структуры агрегата. Для этого каждая поверхность агрегата разбивается на элементы, для которых рассчитываются открытые и закрытые углы зрения, определяющие, сколько частиц может достичь данной области поверхности.

Расчёты показывают, что такие агрегаты приобретают заряды, зависящие не только от их общего размера, но и от структуры. Например, более «рыхлые» агрегаты с низкой компактностью заряжаются иначе, чем плотные структуры [58].

Изучение процессов зарядки пылевых частиц в плазме открывает новые горизонты в понимании комплексных взаимодействий, происходящих в плазменно-пылевых системах. Разнообразие факторов, таких как ион-нейтральные столкновения, взаимное влияние частиц, их геометрия и флуктуации, существенно усложняет процессы зарядки, требуя развития теорий и

методов, способных точно описывать эти явления и учитывать их при моделировании динамических и структурных свойств плазменно-пылевых систем. Применение гибридных подходов, таких как сочетание теории OML для электронов и самосогласованных моделей для ионов, а также численное моделирование, позволяют учитывать ключевые физические процессы и давать реалистичные прогнозы для реальных условий.

1.2 Силы, действующие на пылевые частицы

Пылевые частицы в плазме газового разряда испытывают влияние целого ряда сил, каждая из которых вносит вклад в их движение и устойчивость образующихся структур. Среди фундаментальных сил, действующих на пылевые частицы, можно выделить гравитационную силу, пропорциональную массе частицы, которая стремится сместить её вниз по направлению действия силы тяжести, а также электростатическую силу, обусловленную взаимодействием заряда частицы с локальным электрическим полем в плазме. Электростатическая сила обычно направлена против силы тяжести, что приводит к левитации пылевых частиц вблизи электрода в случае плазмы высокочастотного разряда или в страте в случае разряда постоянного тока.

Важную роль играет также сила трения, возникающая в результате столкновений пылевой частицы с нейтральными молекулами газа. Эта сила действует в направлении, противоположном скорости движения частицы, и зависит от плотности нейтрального газа. Особую роль играют силы электростатического взаимодействия пылевых частиц с соседствующими пылевыми частицами и зарядовыми неоднородностями плазменного окружения. Именно эти силы приводят к появлению широкого спектра динамических явлений, которые и привлекают исследователей к изучению пылевой плазмы.

Дополнительные силы могут возникать в зависимости от условий разряда и параметров окружающей среды. Например, термофоретическая сила проявляется при наличии температурных градиентов в плазме и направлена в сторону меньших температур [59—61]. Эта сила возникает вследствие неравномерного переноса энергии молекулами газа, сталкивающимися с частицей с разных сторон.

Корректное теоретическое описание всех сил, действующих на пылевые частицы в плазме газового разряда, представляет собой сложную задачу, поскольку оно требует знания распределения локальных параметров плазмы в области нахождения пылевых частиц. В этом литературном обзоре будут рассмотрены основные подходы к описанию сил, действующих на пылевые частицы в плазме газового разряда, начиная с классических теорий и заканчивая современными моделями.

Рассмотрим случай уединенной пылевой частицы в потоке плазмы газового разряда. Помимо силы тяжести, направленной вниз, и силы внешнего электростатического поля на пылевую частицу в потоке плазмы газового разряда также действует сила, связанная с взаимодействием частицы с ионами, известная как сила ионного увлечения. Эта сила возникает из-за передачи импульса от потока ионов, движущихся относительно заряженной частицы, и играет важную роль в формировании устойчивых пылевых структур, определяя равновесное положение частицы.

Сила ионного увлечения может быть разложена на две основные составляющие, которые описывают различные механизмы передачи импульса. Первая составляющая связана с непосредственными столкновениями ионов с поверхностью пылевой частицы. При этом ионы, попадая на поверхность частицы, передают ей часть своего импульса, что приводит к появлению направленной силы, действующей в сторону движения потока ионов. Вторая составляющая обусловлена электростатическим взаимодействием между ионами и заряженной частицей. Когда ионы движутся через электростатическое поле частицы, они отклоняются от своих траекторий, и это отклонение приводит к возникновению дополнительного импульса, передаваемого частице. Такой эффект может быть описан через сечение переноса импульса, зависящее от потенциала частицы, энергии ионов и их траекторий. Важно отметить, что вклад этих двух механизмов зависит от условий плазмы, а также размеров пылевой частицы.

Рассмотрим развитие теоретических подходов для описания силы ионного увлечения. Сначала будет рассматриваться случай бесстолкновительной плазмы. Отправной точкой для теоретического описания силы ионного увлечения является классическая теория, применимая к пробной отрицательно заряженной частице, находящейся в однородном потоке положительных ионов [62]. В рамках этой теории рассматривается сила, действующая на точечный отрицательный заряд от потока ионов с заданной функцией распределения по скоростям. Пробная части-

ца рассматривается как точечная, и сила взаимодействия с потоком ионов состоит только из обмена импульсом, возникающего из-за искривления траекторий движения ионов. Рассеяние ионов происходит в кулоновском потенциале пробной частицы, при этом экранирование кулоновского потенциала происходит на расстоянии, равном радиусу экранирования в плазме, что накладывает ограничения на вклад ионов, удалённых от частицы.

В дальнейшем, в работе [63], эта классическая теория была усовершенствована. В частности, рассматривается влияние того, что пылевая частица уже не является точечной и может поглощать ионы, что становится существенно важным, когда скорость потока ионов сравнительно мала. В этом случае сила ионного увлечения раскладывается на две составляющие: орбитальную составляющую и составляющую, связанную с прямыми столкновениями пылевой частицы с ионами, налетающими на неё. Для оценки орбитальной составляющей используется модификация классического подхода, заключающаяся в изменении предела интегрирования с учётом того, что ионы, сталкивающиеся с поверхностью пылевой частицы, не вносят вклад в орбитальную составляющую силы. Для оценки составляющей, связанной с прямыми столкновениями, применяется подход OML, который позволяет оценить силу, возникающую от столкновений ионов с поверхностью пылевой частицы.

Дальнейшее развитие теоретического описания силы ионного увлечения выявило значительные расхождения между результатами, представленными в работах Daugherty [64; 65], и подходом, предложенным [63]. Для точечной пылевой частицы оценки силы ионного увлечения, основанные на классической теории, не совпадали с результатами, полученными с использованием самосогласованного численного решения уравнения Пуассона-Власова, представленными в исследованиях [64; 65]. В этих работах потенциал взаимодействия ионов с экранированной отрицательно заряженной пробной частицей рассчитывался с учетом самосогласованного распределения зарядов в плазме, что привело к отличиям в итоговых значениях силы ионного увлечения.

В работе [66] подробно объяснены причины этих расхождений. Ключевым фактором является предположение классической теории, согласно которому радиус экранирования Дебая служит предельным расстоянием, за пределами которого ионы перестают вносить значимый вклад в силу взаимодействия. Это предположение корректно только при условии, что кулоновский радиус значительно меньше длины экранирования. Для слабозвязанной плазмы такой подход,

использованный в теории Barnes, даёт удовлетворительные результаты. Однако в пылевой плазме кулоновский радиус и радиус экранирования могут быть сопоставимы. В этих условиях стандартные подходы, основанные на классической теории, начинают давать существенные отклонения от реальных значений.

В [66] предложена усовершенствованная модель, которая учитывает влияние соизмеримости кулоновского радиуса и длины экранирования. В рамках этой модели были скорректированы пределы интегрирования при расчёте силы ионного увлечения. Это позволило учитывать вклад ионов, находящихся за пределами радиуса экранирования. В частности, было показано, что для характерных параметров плазмы, где радиус экранирования Дебая и кулоновский радиус для тепловых скоростей ионов равны друг другу, теория [63] занижает орбитальную составляющую силы ионного увлечения примерно в 25 раз.

В последующих исследованиях [67—69] модель [66] была существенно расширена для учета случаев, когда кулоновский радиус частицы может значительно превышать длину экранирования. Также была проведена детализированная оценка силы ионного увлечения, действующей на одиночную частицу в бесстолкновительной плазме с произвольной скоростью потока ионов. В этом исследовании традиционный подход, основанный на бинарных столкновениях, был объединен с теорией линейного отклика [70]. Показано, что для точечной частицы подход бинарных столкновений обеспечивает корректные результаты при условии, что радиус экранирования выбирается в соответствии с самосогласованной кинетической теорией.

В работах [19—21] предложен программный код SCEPTIC, который может использоваться для расчета силы ионного увлечения. Код SCEPTIC представляет собой численный инструмент для изучения взаимодействия сферической частицы с плазмой в условиях ее течения. Он рассчитан на моделирование потока бесстолкновительной плазмы и расчета силы, действующей на заряженную пылевую частицу в этом плазменном потоке. Основой метода является моделирование траекторий ионов и решение уравнения Пуассона для самосогласованного расчёта электрического потенциала вокруг пылевой частицы.

Расчёт силы ионного увлечения в SCEPTIC проводится путём интегрирования потоков ионов, электронного давления и тензора Максвелла по поверхности сферы, окружающей пылевую частицу. При этом радиус сферы влияет на соотношение этих трех составляющих, но не на результирующее значение силы ионного увлечения.

В работе [71] подробно рассматривается сравнение расчетов силы ионного увлечения, выполненных с использованием кода SCEPTIC, с аналитическими приближениями, представленными в предыдущих исследованиях. Сравнение численных и аналитических результатов показывает хорошее согласие для высоких температур ионов. Однако при низких температурах, где экранирование усиливается, возникает значительное расхождение. В работе [71] предлагается адаптация аналитической аппроксимации силы ионного увлечения, полученной Храпаком, которая позволяет описывать силу ионного увлечения и в случае низких температур ионов.

До настоящего момента обсуждение было сосредоточено на условиях бесстолкновительной плазмы и соответствующих расчетах силы ионного увлечения в таких системах. Однако в реальных условиях газоразрядной плазмы, используемой в экспериментах с пылевой плазмой, столкновения между ионами и нейтральными частицами оказывают значительное влияние на взаимодействие частиц. Основным механизмом этих столкновений является резонансная перезарядка, которая существенно изменяет характеристики силы ионного увлечения.

Ион-нейтральные столкновения приводят к переносу импульса между ионами и нейтральными частицами, что изменяет траектории ионов и влияет на их распределение вблизи пылевых частиц. Этот процесс значительно влияет на значение силы ионного увлечения.

В работе Швейгерта [72] для учета влияния ион-нейтральных столкновений на силу ионного увлечения поток ионов вокруг уединенной пылевой частицы моделировался с использованием метода Монте-Карло. Для расчета части силы ионного увлечения, связанной с искривлением траекторий ионов, взаимодействия между пылевой частицей и ионами рассчитывались через экранированный кулоновский потенциал и суммировались по траекториям движения ионов. Часть силы, связанная с прямыми столкновениями ионов с пылевой частицей, вычислялась путем суммирования импульсов ионов, пересекших её поверхность.

Показано, что учёт ион-нейтральных столкновений может увеличивать силу ионного увлечения по сравнению с бесстолкновительным случаем. Также показано, что при некоторых условиях, таких как высокая частота ион-нейтральных столкновений, возможно возникновение отрицательной силы ионного увлечения, направленной в противоположную сторону от потока ионов, что влияет на движение пылевых частиц в плазме. Отрицательная сила ионного увлечения напоминает поведение сверхтекучих жидкостей [73], где частицы могут двигаться,

не испытывая сопротивления со стороны потока. В работе Майорова обсуждается, что причиной возникновения отрицательной силы ионного увлечения может быть реактивная сила [74], связанная с передачей импульса ионов, ускоренных пылевой частицей, нейтральным атомам газа. Этот механизм был подтверждён с помощью молекулярно-динамического моделирования потока ионов вокруг пылевой частицы. В работе [75] было рассмотрено поведение силы ионного увлечения в широком диапазоне частот ион-нейтральных столкновений с использованием кода SCEPTIC [76], в который был включён учёт этих столкновений.

Наряду с подходами, в рамках которых для расчета силы ионного увлечения использовалось численное моделирование, развивались и аналитические подходы, позволяющие учесть влияние ион-нейтральных столкновений на силу ионного увлечения. Аналитический модель [77] для описания силы ионного увлечения в столкновительной плазме использует самосогласованный подход, который необходим для учёта взаимодействий ионов с пылевой частицей. В отличие от традиционных методов, таких как подход парных столкновений [66], самосогласованный подход включает все важные взаимодействия, включая столкновения с нейтральными частицами, и предполагает решение уравнения Пуассона в сочетании с кинетическим уравнением для ионов. Это позволяет учитывать изменяющееся распределение зарядов в плазме и зависимость силы от внешних факторов, таких как скорость потока и частота ион-нейтральных столкновений.

Для того чтобы учесть столкновения ионов и нейтральных частиц, применяется линеаризация кинетического уравнения для ионов с использованием члена Бхатнагара-Гросса-Крука [78]. Этот подход предполагает, что столкновения между ионами и нейтральными частицами можно моделировать через эффективный интеграл столкновений, который описывает их взаимодействие.

Для малых значений скорости потока ионов по сравнению с их тепловой скоростью и в условиях слабой или средней столкновительности плазмы данный подход даёт более точные результаты, чем бесстолкновительные модели, и в пределах логарифмической точности совпадает с результатами моделирования с использованием метода частиц в ячейках [75].

Для сильностолкновительного случая была разработана модель [79] для расчёта силы ионного увлечения, учитывающая нелинейные эффекты в приближении пренебрежимости диффузии ионов. Эта модель подтверждает возможность возникновения отрицательной силы ионного увлечения при высокой степени столкновительности плазмы.

После рассмотрения силы ионного увлечения, действующей на одиночную пылевую частицу в плазме, следует обратить внимание на более сложные взаимодействия, которые возникают в системах, состоящих из нескольких пылевых частиц. В таких системах силы, действующие на отдельные частицы, определяются не только внешними плазменными потоками, но и взаимодействием с соседними частицами. Пылевые частицы в плазме могут влиять друг на друга, создавая локальные изменения в электрическом поле, что, в свою очередь, изменяет их движение и распределение зарядов. Эти эффекты особенно заметны в плотных системах, где расстояния между частицами невелики и взаимодействие между ними становится доминирующим.

Пылевые частицы, являясь заряженными, взаимодействуют друг с другом посредством сил электрического взаимодействия. Однако окружающая плазма, являясь проводящей средой, экранирует это взаимодействие. Описание взаимодействия пылевых частиц в плазме восходит к работам Ленгмюра [28] и теории Дебая-Хюккеля, в рамках которой взаимодействие между пылевыми частицами описывается через экранированный кулоновский потенциал. Этот потенциал учитывает как заряд пылевой частицы, так и влияние окружающей плазмы, что приводит к ослаблению силы взаимодействия на больших расстояниях.

Продолжая рассмотрение взаимодействий пылевых частиц в плазме, важно учитывать факторы, влияющие на параметры экранирования. Одним из таких факторов являются характерные значения средних кинетических энергий ионов и электронов. В идеальной равновесной плазме электроны и ионы находятся в термодинамическом равновесии, и их температуры сравнимы. Однако в реальной плазме, в которой находятся пылевые частицы, обычно наблюдается нарушение равновесия между электронами и ионами, особенно в случае высокочастотных газовых разрядов или в плазмах с неравномерным распределением энергии. Это приводит к различиям в их средних кинетических энергиях, что оказывает влияние на экранирование.

Особое внимание стоит уделить так называемым захваченным ионам [29; 34; 74; 80—82], которые образуются в результате ион-нейтральных столкновений. Эти ионы задерживаются вблизи пылевой частицы и остаются вблизи нее продолжительное время, совершая движения по кеплеровским орбитам. Процесс образования захваченных ионов связан с резонансным процессом зарядового обмена между ионами и нейтральными атомами. Доля захваченных ионов не зависит от частоты ион-нейтральных столкновений.

Захваченные ионы оказывают значительное влияние на экранирование, так как они изменяют локальное распределение зарядов вблизи пылевой частицы [83—89]. В результате ион-нейтральных столкновений могут проявляться и более сложные эффекты. Например, в плазме газового разряда между одноименно заряженными пылевыми частицами может возникнуть притяжения из-за сил аналогичных модели гравитации Лессажа [90]. Этот эффект был предсказан Игнатовым и недавно получил экспериментальное подтверждение [91].

Направленный поток плазмы оказывает значительное влияние на экранирование пылевых частиц и распределение электрического потенциала вокруг них. Поток плазмы приводит к тому, что ионы, движущиеся вокруг пылевой частицы, притягиваются к ней и фокусируются за частицей по направлению потока. Это явление создает область с избыточным положительным зарядом, которая формируется непосредственно за пылевой частицей и называется ионным фокусом. Это фокусирование ионов изменяет локальную структуру поля вокруг частицы и приводит к образованию асимметричного распределения электрического потенциала, которое известно как кильватерный потенциал. Этот потенциал имеет важное значение для взаимодействий между пылевыми частицами, так как создаёт дополнительные силы притяжения и отталкивания, влияя на динамику частиц в потоке плазмы. Например, наличие кильватерного потенциала может приводить к притягиванию отрицательно заряженных пылевых частиц друг к другу в потоке плазмы или увеличению силы ионного увлечения при организации пылевых частиц в кластеры.

Задача корректного описания асимметричного электрического потенциала вокруг пылевых частиц в потоке плазмы стала основой для большого числа теоретических исследований и развития специализированных программных кодов. Первые подходы для описания распределения кильватерного потенциала были предложены ещё в 1995 году в предположении бесстолкновительной плазмы [92]. В работе [92] плазма моделировалась как холодная ионная жидкость с Больцмановским электронным газом, который самосогласованно реагирует на изменение потенциала. В этом подходе ионы характеризовались локальной концентрацией и скоростью потока, в то время как электроны описывались через заданную температуру и концентрацию. В работе [93] была развита модель, в рамках которой бесстолкновительная плазма описывалась с использованием функции диэлектрического отклика, а распределение кильватерного потенциала вычислялось с помощью соответствующего линейного формализма [94]. Эти подходы позволи-

ли впервые получить характерное асимметричное распределение кильватерного потенциала вокруг одиночной пылевой частицы в потоке плазмы.

В 1996 году в работе [95] для описания кильватерного потенциала было использовано моделирование методом Монте-Карло, с учётом ион-нейтральных столкновений. Однако для упрощения моделирования динамика ионов не рассчитывались в самосогласованном потенциале, и не учитывались ион-ионные взаимодействия. Несмотря на это, этот подход позволил воспроизвести ключевую особенность кильватерного потенциала — образование области с положительным потенциалом, которая притягивает другие отрицательно заряженные пылевые частицы.

В 1999 году [96] проведено моделирование потока плазмы вокруг одиночной пылевой частицы методом частиц в ячейках, в рамках которого рассчитывались как заряд пылевой частицы, так и распределение анизотропного электростатического потенциала. В 2000 году [97] предложена линейная теория для описания кильватерного потенциала, используя разложение кинетического уравнения Власова-Больцмана по сферическим гармоникам вблизи сдвинутого максвелловского распределения. Ряд последующих работ был посвящён исследованию зависимости кильватерного потенциала от различных параметров плазмы [98; 99]. Помимо метода частиц в ячейках и теории линейного отклика, для расчёта кильватерного потенциала в 2003 году в работе Владимирова и Майорова был использован молекулярно-динамический подход [9]. В этом подходе ионы взаимодействовали как между собой, так и с пылевыми частицами через экранированный кулоновский потенциал. Таким образом, уравнения Пуассона приближенно решались интегральным образом.

Ранее рассмотренные аналитические подходы для описания экранирования микрочастиц в плазме преимущественно основывались на предположении бесстолкновительной плазмы. В этих моделях поток ионов рассматривался как свободный, а функция распределения их скоростей аппроксимировалась сдвинутым максвелловским распределением или, в особых случаях, сдвинутой дельта-функцией, что соответствовало идеализированному холодному ионному потоку. Однако такие упрощения имели несколько ограничений, особенно в условиях реальных плазменных систем, где столкновения ионов с нейтральными частицами являются важным фактором.

Со временем стало очевидно, что в слабо ионизированных газовых разрядах, где потоки ионов могут быть значительными относительно нейтрального

газа, функции распределения ионов значительно отклоняются от сдвинутого распределения Максвелла [79; 100—103]. Это объясняется тем, что ионы сталкиваются с нейтральными молекулами намного чаще, чем с другими ионами, что препятствует достижению равновесия и делает описание столкновений необходимым для более точного моделирования. Кроме того, в некоторых экспериментах средняя длина свободного пробега ионов между столкновениями с нейтральными частицами может быть сопоставима с расстоянием между частицами, что ещё больше усложняет использование бесстолкновительных моделей.

В ответ на эти ограничения возникла необходимость в более сложных подходах, которые учитывают столкновения между частицами. В частности, была предложена самосогласованная линейная кинетическая теория [104; 105], которая включает как учёт ион-нейтральных столкновений. Этот подход позволяет более точно учитывать изменения в распределении ионов и их взаимодействие с нейтральными молекулами, что приводит к более правдоподобию описанию распределения кильватерного потенциала. В частности показано, что при учете ион-нейтральных столкновений остается всего один пик локального максимума кильватерного потенциала, в то время как остальные оказываются подавленными [106; 107].

Однако стоит отметить, что теория линейного отклика для расчёта кильватерного потенциала имеет ограниченную область применимости. Она применима лишь в тех случаях, когда влияние пылевой частицы на функцию распределения ионов не является слишком значительным. При нарушении этого условия линейная теория теряет свою точность, и начинают проявляться нелинейные эффекты. В частности, обзорная работа [108] подробно анализирует влияние этих нелинейных эффектов при расчёте кильватерного потенциала, сравнивая результаты, полученные с использованием линейного разложения и методом моделирования частиц в ячейках.

Также на распределение кильватерного потенциала может влиять форма и тип материала пылевых частиц [14; 109; 110].

Необходимость учёта множества факторов, таких как столкновения, нелинейные эффекты, форма и материал пылевых частиц, а также влияние этих факторов на форму кильватерного потенциала, от которой зависит характер взаимодействия пылевых частиц, привела к появлению большого числа программных кодов, разрабатываемых различными научными группами. Эти коды позволяют моделировать распределение кильватерного потенциала, учитывая напрямую

учитывая перечисленные факторы, что необходимо для описания экспериментов с конкретными параметрами плазменно-пылевых систем.

Первые коды метода частиц в ячейках для пылевой плазмы были реализованы на двумерных вычислительных решетках в прямоугольных, цилиндрических и сферических координатах (DUSTrz, DiP2D, SCEPTIC) [12—14; 19—21]. Такой двумерный подход позволяет уменьшить количество моделируемых частиц плазмы, но ограничивает возможность моделирования только пространственно симметричных систем вдоль направления потока плазмы. Например, моделирование зарядки одной пылевой частицы в потоке плазмы включало 7,2 миллиона частиц плазмы. Для такого моделирования на 36 процессорах Athlon с тактовой частотой 1,2 ГГц удалось достичь двух-трех шагов в секунду. Позже коды на основе метода частиц в ячейках были адаптированы для трёхмерных решеток, что позволило моделировать системы с произвольным расположением пылевых частиц (DiP3D, SORTIC) [11; 12]. Однако проведение подобного моделирования требует учёта большего числа частиц плазмы. Например, для расчёта межчастичных сил в потоке плазмы с низким числом Маха использовалось 100 миллионов частиц плазмы. 1000 шагов такого моделирования были выполнены за примерно 1 час на 128 процессорах, что соответствует примерно 0,28 шагам времени в секунду. В 2001 году было проведено первое самосогласованное трёхмерное моделирование молекулярной динамики кинетики плазмы вокруг одной неподвижной пылевой частицы. Из-за ограничений вычислительных ресурсов для моделирования физического процесса длительностью 3,36 нс использовались всего 19000 взаимодействующих частиц плазмы (ионы и электроны). В 2017 году был впервые применён ускоренный с помощью графических процессоров метод асимметричной молекулярной динамики с одинарной точностью для моделирования потока ионов вокруг одиночной пылевой частицы, при этом электроны моделировались как больцмановская жидкость (MAD) [8; 10]. Показано, что графический процессор с 1000 потоковыми процессорами может смоделировать 10 микросекунд динамики примерно 65000 ионов за менее чем пять минут вычислительного времени. В 2020 году подход асимметричной молекулярной динамики был использован для создания программного пакета DRIAD [10].

1.3 Учет плазменного окружения при моделировании свойств пылевых структур

В данном разделе будут рассмотрены методы, применяемые для учета влияния плазменного окружения при моделировании и теоретическом описании динамических и структурных свойств пылевой плазмы. Особое внимание будет уделено вопросам учета эффектов ионной фокусировки и затенения зарядов пылевых частиц, которые играют ключевую роль в формировании поведения плазменно-пылевых систем.

Самой простой моделью для описания эффективной невзаимности во взаимодействии пылевых частиц, вызванной эффектом ионной фокусировки, является модель точечного ионного фокуса, предложенная Швейгертом [95]. В оригинальной работе эта модель использовалась для анализа возникновения неустойчивости в бислойной структуре пылевых частиц, известной как неустойчивость Швейгерта. В модели точечного ионного фокуса под каждой пылевой частицей помещается виртуальная точечная, обладающая противоположным зарядом и нулевой массой. Такая виртуальная частица помещается на фиксированном расстоянии от пылевой частицы в направлении потока ионов. Она не взаимодействует с самой частицей или другими виртуальными частицами, но оказывает влияние на соседние пылевые частицы.

Идея состоит в том, что взаимодействие между пылевыми частицами в этой модели становится невзаимным, эффективно нарушается симметрия взаимодействий. Это позволяет на базовом уровне учесть основной характер взаимодействия пылевых частиц в плазменном потоке, не прибегая при этом к трудоемкому расчету кильватерного потенциала. Указанная модель успешно применялась для того, чтобы объяснить широкий спектр динамических и структурных эффектов в плазменно-пылевых системах.

Некоторым развитием подхода точечного ионного фокуса является метод, при котором кильватерный потенциал сначала рассчитывается с использованием различных подходов, например, методом частиц в ячейках или с применением теории линейного отклика. После этого полученный потенциал может быть аппроксимирован с помощью функциональных форм [50] или интерполирован, например, с использованием кубических сплайнов [111]. Такой подход позволяет более гибко учитывать распределение кильватерного потенциала вокруг

уединенной пылевой частицы, а также адаптировать его под различные условия плазменного окружения.

Этот потенциал затем используется в моделировании динамики пылевых частиц, где его градиент служит основой для вычисления сил, действующих на частицы. Кроме того, расчет кильватерного потенциала может быть использован для исследования стабильности или других упорядоченных свойств пылевых структур. Такой усовершенствованный метод, с одной стороны, дает более точное описание взаимодействий и позволяет учитывать влияние параметров плазмы на распределение потенциала, с другой стороны, он устраняет проблему сингулярности, характерную для модели точечного ионного фокуса, которая возникает в месте расположения виртуального заряда.

Описанные два подхода к учету эффекта ионной фокусировки при моделировании динамических и структурных свойств пылевой плазмы не требуют значительных вычислительных ресурсов. Например, в контексте динамических свойств они позволяют достигать времен, соответствующих характерным временным масштабам эффектов, проявляющихся в плазменно-пылевых экспериментах. Однако такие методы не учитывают несколько важных факторов. Во-первых, они не принимают во внимание влияние изменения зарядов пылевых частиц, вызванного изменением их пространственного расположения относительно друг друга, что происходит из-за изменения ионных потоков. Эти изменения зарядов могут существенно повлиять на динамику и структуру системы. Хорошим примером является недавняя работа [50], в которой показано, что учет самосогласованной зарядки в системе из трех пылевых частиц приводит к качественным изменениям в характере их равновесной конфигурации. Во-вторых, подход, при котором силы вычисляются на основе принципа суперпозиции потенциалов, не учитывает возможной нелинейности распределения потенциала в случае присутствия нескольких пылевых частиц, что подтверждается рядом исследований.

Самым точным подходом для учета указанных эффектов является численное моделирование плазмы вокруг исследуемой системы пылевых частиц с согласованным расчетом их зарядов и сил, действующих на них. Этот метод зарекомендовал себя как эффективный инструмент при изучении структурных свойств пылевых систем, например, равновесного расположения пылинок в цепочках [112; 113]. Однако из-за вычислительных ограничений данный подход применим только к моделированию структур небольших размеров.

Кроме того, данный метод использовался для попыток моделирования динамики пылевых частиц, предполагающего одновременное моделирование динамики плазмы и самих пылевых частиц [10]. Однако такой подход чрезвычайно ресурсоемкий из-за значительных различий во временных масштабах динамики плазмы и пылевых частиц. Характерное время эволюции плазмы гораздо меньше времени динамики пылевых частиц, что требует чрезвычайно большого количества расчетных шагов. Например, моделирование согласованной динамики всего двух пылевых частиц с учетом динамики плазмы в течение одной секунды физического времени заняло около суток вычислений. Между тем, для исследования динамических свойств пылевых структур требуется моделирование, охватывающее физическое время порядка нескольких минут, что делает данный подход практически неэффективным для таких задач.

Для преодоления указанных трудностей в настоящее время разрабатываются подходы, которые, с одной стороны, позволяют учитывать такие эффекты, как изменение зарядов пылевых частиц при изменении их пространственного расположения относительно друг друга и невозможность описания сил, действующих в системе пылевых частиц, с использованием принципа линейной суперпозиции кильватерных потенциалов. С другой стороны, эти методы направлены на повышение вычислительной эффективности моделирования, что делает их более применимыми для исследования сложных плазменно-пылевых систем. К таким подходам можно отнести, в частности, недавнюю работу по моделированию торсионов с помощью адаптивной модели точечного фокуса [114].

1.4 Влияние плазменного окружения на свойства пылевых структур

Как было отмечено в предыдущих разделах литературного обзора, наличие плазменного окружения, особенно при наличии направленного потока плазмы, существенно усложняет природу взаимодействия пылевых частиц и механизм их зарядки. В результате этого значительно изменяются динамические и структурные свойства пылевой плазмы. В частности, указанные эффекты приводят к возникновению различных типов неустойчивостей [115—123], специфического вида нелинейной динамики динамики [114; 124—128], структурных переходов [7;

111; 129—133], а также к особенностям в спектрах колебаний [133—137] и формированию цепочечных структур [112; 113; 136; 138—142].

В данном разделе особое внимание уделяется термодинамическим эффектам, проявляющимся в упорядоченных пылевых структурах, где частицы совершают малые колебания относительно своих положений равновесия.

Одним из наиболее простых экспериментальных примеров таких систем является система двух вертикально упорядоченных пылевых частиц [134—136]. В такой системе, расположенной вдоль направления плазменного потока газового разряда, за верхней частицей формируется область избыточного положительного заряда. Это приводит к тому, что силы эффективного взаимодействия между частицами становятся неравными, а следовательно, нарушается третий закон Ньютона — действие не равно противодействию [6]. Экспериментально это выражается в том, что средние энергии колебаний пылевых частиц различаются между собой, а также различны энергии горизонтальных и вертикальных колебаний [6; 129; 131; 134; 135; 143; 144]. Этот эффект неоднократно наблюдался в различных экспериментах.

Для теоретического описания неравномерного распределения кинетических энергий между двумя пылевыми частицами проводилось молекулярное моделирование их движения в термостате Ланжевена с учетом невзаимного характера взаимодействия. Помимо численного моделирования, развивались и аналитические методы. Один из таких подходов основан на теории линейного отклика, которая позволяет, используя передаточную функцию (или функцию Грина) [145; 146], определить, каким образом при заданных температурах термостата и параметрах взаимодействия распределяется кинетическая энергия между степенями свободы. Также был разработан аналитический метод, основанный на анализе уравнений связи корреляционных функций смещений и скоростей частиц [143; 144]. Данный теоретический подход использовался не только для систем из двух частиц, но и для более протяженных вертикальных цепочек пылевых частиц.

Помимо вертикальных цепочек, значительный интерес представляют горизонтально упорядоченные структуры, такие как плазменно-пылевой монослой, бислой или цепочка пылевых частиц, ориентированная перпендикулярно потоку плазмы [143; 147]. В таких системах также наблюдается неравномерное распределение средней кинетической энергии между пылевыми частицами, что в некоторых случаях может приводить к расплавлению упорядоченной структу-

ры. Возникновение данного эффекта в монослое связывается с неоднородностью распределения частиц, обусловленной горизонтальным конфайнментом [131]. Теоретически этот эффект был воспроизведен в моделировании с учетом ионного фокуса.

Помимо изучения распределения кинетических температур, важную роль играет исследование теплопереноса в таких упорядоченных системах. Экспериментально теплоперенос в плазменно-пылевом монослое изучается с помощью локального нагрева отдельных пылевых частиц путем воздействия лазерным излучением с последующим анализом их траекторий и восстановлением результирующих потоков тепла [148—150]. Из-за невзаимности взаимодействий тепловые потоки приобретают необычные свойства. Например, можно наблюдать обратный тепловой поток, при котором тепло перетекает от менее нагретой частицы к более нагретой [151].

Тепловые потоки также изучались в теоретических работах. В частности, анализировались потоки тепла через горизонтальные цепочки пылевых частиц с учетом невзаимности взаимодействий. Для теоретического описания использовалось уравнение Фоккера-Планка, полученное из уравнений Ланжевена, что позволило вывести систему уравнений для корреляторов скоростей и смещений частиц [143]. Эти уравнения позволили описать процессы теплопереноса и распределение кинетических температур в упорядоченных пылевых структурах.

Невзаимность взаимодействий между пылевыми частицами в плазменных системах роднит пылевую плазму с рядом других физических систем, в которых наблюдаются аналогичные механизмы межчастичных взаимодействий. В частности, схожие эффекты проявляются в активной материи [15], коллоидных системах [16], метаматериалах [17], характеризующихся искусственно созданной анизотропией взаимодействий, а также в оптически связанных ансамблях наночастиц [18], где лазерное управление взаимодействиями позволяет создавать системы с эффективной невзаимностью.

Одним из развивающихся фундаментальных подходов к описанию динамических свойств таких систем является физика неэрмитовых систем, которая учитывает несимметричные взаимодействия через рассмотрение неэрмитового оператора эволюции [152]. Неэрмитовость оператора приводит к появлению исключительных точек и нарушению ортогональности собственных векторов, что, в свою очередь, обуславливает различные типы локализации состояний в системе, включая неэрмитовый скин-эффект [153—155]. Эти особенности играют

ключевую роль в описании активной материи и метаматериалов [156], а также в понимании свойств оптических и акустических систем с контролируемыми потерями и усилением [157].

Несмотря на значительное сходство физики пылевой плазмы с вышеупомянутыми системами, термодинамические свойства упорядоченных пылевых структур до сих пор не рассматривались в контексте неэрмитовых систем. Механизмы теплопереноса и нарушение теоремы равнораспределения в упорядоченных пылевых структурах широко исследованы в литературе, однако пока не предложено единого подхода, который описывал бы эти явления с позиций неэрмитовой теории. При этом характерное для пылевой плазмы нарушение симметрии взаимодействий приводит к аномальному распределению кинетической энергии, что делает её естественным кандидатом для применения методов, разработанных в рамках физики неэрмитовых систем.

1.5 Выводы к первой главе

Анализ современных теоретических и экспериментальных исследований пылевой плазмы показывает, что динамика и структурные свойства пылевых частиц определяются сложным взаимодействием с окружающей плазмой. Важнейшими факторами, влияющими на поведение пылевой подсистемы, являются процессы зарядки частиц, межчастичные силы и эффекты, обусловленные направленным движением плазмы. Взаимодействие пылевых частиц в таких условиях приводит к появлению широкого спектра физических явлений, включая эффективное нарушение третьего закона Ньютона, возникновение неравномерного распределения кинетической энергии и аномальные механизмы теплопереноса. Полноценное исследование этих процессов требует многомасштабного численного подхода, способного одновременно учитывать как микроскопические эффекты зарядки и экранирования, так и описывать движение кластеров пылевых частиц.

Исследования термодинамических свойств пылевых структур в условиях направленного потока плазмы выявили, что такие системы могут демонстрировать специфические эффекты, связанные с невзаимностью взаимодействий. В частности, обнаружено нарушение теоремы равнораспределения, приводящее к неравномерному распределению кинетических температур, их локализации, а

также возможность появления обратных тепловых потоков, когда тепло передаётся от менее нагретого теплового резервуара к более нагретому. Эти явления наблюдаются в таких экспериментальных системах, как упорядоченные пары пылевых частиц, цепочечные, моно- и бислойные структуры. Однако для систематического анализа условий возникновения этих эффектов необходимо создание универсального инструмента моделирования, позволяющего напрямую связывать параметры плазмы и структуру пылевой системы с наблюдаемыми термодинамическими характеристиками.

Существенное внимание в литературе уделяется численному моделированию плазменно-пылевых систем. Методы молекулярной динамики, расчёта частиц в ячейках и самосогласованные модели зарядки позволяют исследовать процессы взаимодействия частиц с плазменным окружением. Однако они либо требуют значительных вычислительных ресурсов, либо обладают рядом ограничений, не позволяющих полноценно описывать эффекты, возникающие в условиях сильного влияния плазменного потока. Несмотря на разнообразие существующих численных подходов, до настоящего времени отсутствует возможность проведения многомасштабного самосогласованного моделирования динамики кластеров пылевых частиц с учётом неравновесного плазменного окружения.

Кроме того, несмотря на накопленные экспериментальные и теоретические результаты, на сегодняшний день отсутствует систематическая связь между термодинамическими свойствами упорядоченных пылевых структур и физикой неэрмитовых систем. Между тем невзаимные взаимодействия, характерные для пылевой плазмы в потоке газоразрядной плазмы, имеют много общего с эффектами, наблюдаемыми в неэрмитовых квантовых и классических системах, включая спектральные свойства операторов эволюции, нарушение ортогональности собственных мод и появление особых точек. В этом контексте дальнейшее изучение пылевых систем может внести вклад в развитие фундаментальной теории неэрмитовых эффектов в открытых системах.

Таким образом, создание эффективного численного кода, способного выполнять самосогласованные расчёты в широком диапазоне параметров и обеспечивать многомасштабное моделирование пылевой плазмы, представляет собой актуальную и до сих пор не решённую задачу. Решение этой задачи позволит не только воспроизводить известные экспериментальные результаты, но и предсказывать новые физические эффекты, связанные с нарушением симметрий, невзаимностью и неэрмитовой природой взаимодействий.

Глава 2. Самосогласованный расчет зарядов пылевых частиц и сил, действующих на них, в потоке плазмы

Взаимодействие пылевых частиц с плазмой в газовом разряде является ключевым аспектом физики пылевой плазмы, определяя процессы формирования, динамики и эволюции пылевых структур. Заряд пылевых частиц и силы, действующие на них со стороны плазменного окружения, играют решающую роль в формировании устойчивых кластеров и упорядоченных структур. Численные методы, способные описывать эти процессы с высокой точностью, необходимы как для фундаментальных исследований, так и для интерпретации экспериментальных данных.

Разработка вычислительных инструментов, позволяющих самосогласованно рассчитывать заряды и силы в пылевой плазме, представляет значительный интерес, поскольку методы, основанные на приближенных моделях, зачастую оказываются недостаточно точными для количественного описания сложных процессов взаимодействия пылевых частиц с ионами и электронами. Существующие самосогласованные подходы зачастую оказываются чрезмерно ресурсоёмкими, что существенно ограничивает их применение в задачах многомасштабного численного моделирования. Особую сложность представляет расчет сил и зарядов в кластерах пылевых частиц, где локальные параметры плазмы определяются коллективным плазменно-пылевыми взаимодействием.

Предложенный в данной работе подход впервые обеспечивает возможность эффективного самосогласованного расчёта зарядов и сил в пылевой плазме с высокой точностью и скоростью, достаточной для практического использования. Реализация разработанного численного метода позволяет одновременно моделировать как поведение плазменной, так и пылевой подсистемы в едином расчёте. Тем самым, данный подход впервые делает возможным выход на многомасштабное самосогласованное моделирование динамики пылевых частиц с учётом влияния окружающей плазмы.

В данной главе представлен программный код `OpenDust`, разработанный для самосогласованного расчета зарядов пылевых частиц и сил, действующих на них, в условиях газоразрядной плазмы. Основной расчетный метод основан на асимметричной молекулярной динамике, позволяющей учитывать траектории частиц плазмы и их взаимодействие с пылевыми частицами без необходимости

использования расчетной сетки. Такой подход обеспечивает высокую точность и вычислительную эффективность, что делает возможным моделирование реальных плазменно-пылевых систем в лабораторных условиях.

В разделе подробно рассматриваются особенности реализации OpenDust, включая расчет динамики плазмы, методы вычисления зарядов и сил, а также используемые граничные условия. Приводится сравнительный анализ OpenDust с теоретическими моделями и численными методами, демонстрирующий корректность и эффективность предложенного подхода. Кроме того, обсуждаются результаты тестирования на примерах одиночной пылевой частицы в потоках столкновительной и бесстолкновительной плазмы. Полученные результаты подтверждают точность и надежность метода, что делает его перспективным инструментом для дальнейших исследований в области пылевой плазмы.

2.1 Программный код OpenDust

В данном разделе представлен программный код OpenDust, предназначенный для быстрого и самосогласованного расчета сил, действующих на пылевые частицы, находящиеся в потоке слабосвязной классической плазмы. OpenDust основан на подходе молекулярной динамики для моделирования плазмы [8; 9; 158]. Этот подход подразумевает моделирование движения отдельных частиц плазмы, взаимодействующих друг с другом через экранированный кулоновский потенциал. Такой потенциал имеет короткодействующий характер, что позволяет существенно снизить вычислительную сложность моделирования для больших расчетных областей за счет введения радиуса обрезки взаимодействий на определенном расстоянии, приводя масштабируемость алгоритма к линейной [159—161].

Особенностью подхода молекулярной динамики, используемого в OpenDust, является отсутствие необходимости в расчетной сетке, что отличает его от широко применяемого в физике плазмы метода частиц в ячейках (Particle-In-Cell). В методе частиц в ячейках требуется численное решение уравнения Пуассона с заданными граничными условиями, что подразумевает использование больших расчетных областей или специфических граничных условий [162]. Кроме того, метод частиц в ячейках сталкивается с компромиссом между умень-

шением шумов за счет увеличения количества частиц в ячейке и необходимостью высокой разрешающей способности для описания мелкомасштабных явлений, что требует увеличения общего числа частиц. Подход молекулярной динамики, напротив, автоматически удовлетворяет граничным условиям за счет формы взаимодействия, что позволяет моделировать меньшие расчетные области с меньшим числом частиц при сохранении физической точности.

Примером эффективности метода молекулярной динамики в OpenDust может служить задача расчета сил между двумя пылевыми частицами в потоке бесстолкновительной плазмы. Эта задача ранее решалась с использованием методов молекулярной динамики [8] и частиц в ячейках [162] при одинаковых физических параметрах. Метод молекулярной динамики позволяет рассчитать силы за 5 минут вычислительного времени на графическом процессоре, в то время как метод частиц в ячейках требует 1 часа на 128 центральных процессорах. Это демонстрирует высокую эффективность подхода молекулярной динамики, что и обусловило его выбор для разработки OpenDust.

OpenDust реализован на языке Python, а его высокая производительность обеспечивается использованием GPU-ускоренной библиотеки OpenMM [163], которая ускоряет наиболее ресурсоемкий этап моделирования — расчет динамики частиц плазмы. Программный код превосходит все доступные аналоги по скорости самосогласованного моделирования плазменного потока вокруг пылевых частиц. Кроме того, OpenDust позволяет проводить моделирование для более крупных систем пылевых частиц, что ранее было невозможно. Удобный интерфейс на Python облегчает доступ исследователей к моделированию плазменно-пылевых систем.

Дальнейший текст раздела детализирует ключевые аспекты реализации и функциональности OpenDust. Рассматриваются подход асимметричной молекулярной динамики, использование открытых граничных условий, учет вклада плазменных частиц, находящихся вне расчетной области, методы расчета сил и зарядов пылевых частиц, а также структура кода.

2.1.1 Расчет динамики плазмы

OpenDust работает в трёхмерной декартовой системе координат с цилиндрической расчётной областью, заполненной плазмой, внутри которой может быть смоделирована система пылевых частиц. Геометрия области моделирования проиллюстрирована на рисунке 2.1. Высота цилиндра обозначена как H , а радиус — как R . Ось аппликат совпадает с осью цилиндра и направлена вверх, к верхней стороне цилиндра. Начало координат находится на оси цилиндра на расстоянии $\frac{H}{2}$ от его нижней стороны. В случае наличия потока плазмы его направление совпадает с направлением оси аппликат.

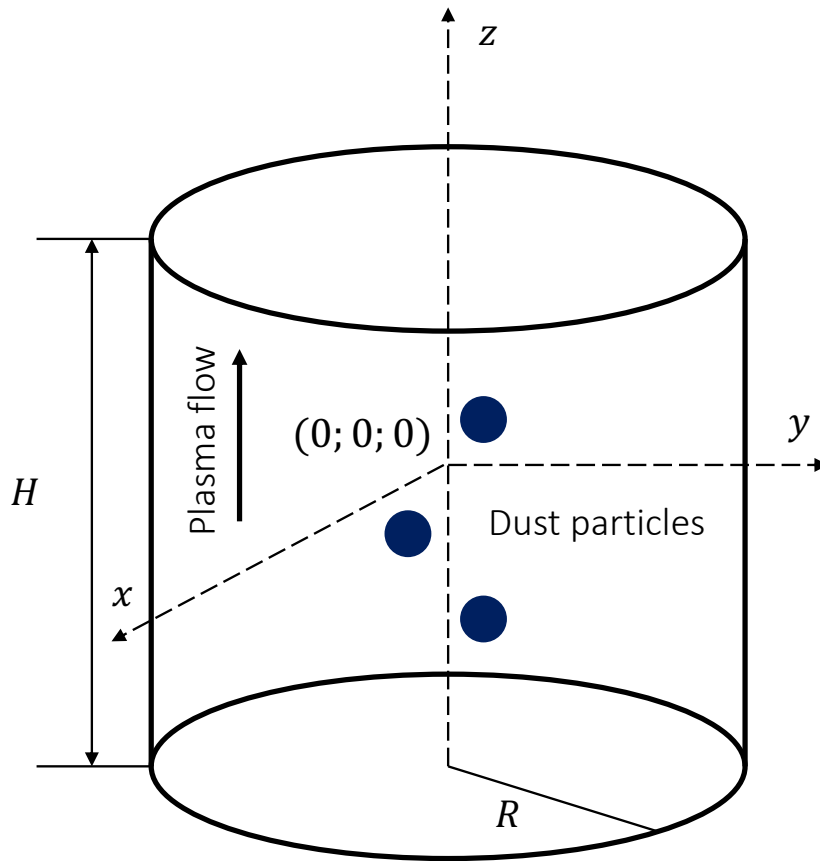


Рисунок 2.1 — Иллюстрация геометрии области моделирования, используемой в OpenDust.

Поток ионов описывается в виде дискретных частиц, имеющих то же соотношение заряда к массе, что и реальные ионы. Заряд таких дискретных частиц

может достигать нескольких сотен элементарных зарядов. Траектории движения этих частиц в заданном электрическом поле совпадают с траекториями движения реальных ионов. Подход с использованием дискретных частиц применяется для снижения вычислительных затрат и широко используется в моделировании плазмы [8; 162]. В дальнейшем под термином «ион» будет подразумеваться описанная дискретная частица.

Электроны в данной модели рассматриваются как больцмановская жидкость, управляемая множителем $\exp(e\Phi/k_B T_e)$, где e — элементарный заряд, k_B — постоянная Больцмана, T_e — температура электронов, Φ — электрический потенциал. В рамках данной модели выделяются два предельных случая. На больших расстояниях от заряженных пылевых частиц, где $|e\Phi| \ll k_B T_e$, линейное приближение уравнения Пуассона-Больцмана приводит к экранированным кулоновским потенциалам для ионов. На очень малых расстояниях от пылевой частицы, где $|e\Phi| \gg k_B T_e$, плотность электронов становится настолько малой, что их вклад можно игнорировать, и взаимодействие описывается неизменённым кулоновским потенциалом между пылевыми частицами и ионами.

Следуя подходу, описанному в работе Пиля [8], используется асимметричная модель взаимодействия пылевых частиц с ионами, позволяющая учесть плавный переход между указанными предельными случаями. Сила, действующая на ионы со стороны пылевых частиц, описывается кулоновским взаимодействием, тогда как сила, действующая на пылевые частицы со стороны ионов, рассматривается как экранированное кулоновское взаимодействие.

Ионы и пылевые частицы, находящиеся в расчетной области, испытывают удерживающую силу, обусловленную предположением о бесконечном равномерном распределении ионов за пределами области моделирования. Электрическое поле от этих ионов определяется следующим образом: сначала численно рассчитывается экранированный кулоновский потенциал равномерно распределенных ионов внутри цилиндрической расчетной области. Затем этот потенциал вычитается из постоянного однородного фонового потенциала, что позволяет получить потенциал внутри цилиндрической полости, находящейся в однородной экранированной кулоновской среде [10]. Этот потенциал рассчитывается в начале моделирования на достаточно плотной двумерной сетке:

$$\Phi_{ext}^{kp} = \Phi_0 - \frac{q_i}{4\pi\epsilon_0} \sum_l \frac{1}{|\mathbf{r}_i^l - \mathbf{r}_{grid}^{kp}|} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}_i^l - \mathbf{r}_{grid}^{kp}|}{r_{De}}\right), \quad (2.1)$$

$$\mathbf{r}_{grid}^{kp} = \left(\frac{k}{N_{grid}^x} R; 0; \frac{p}{N_{grid}^p} \frac{H}{2} \right), \quad (2.2)$$

где Φ_0 — постоянный однородный фоновый потенциал, q_i — заряд иона, $\mathbf{r}_i^l$ — радиус-вектор иона, $\mathbf{r}_{grid}^{kp}$ — радиус-вектор узла сетки, k — индекс узла сетки вдоль оси абсцисс, p — индекс узла вдоль оси аппликат, N_{grid}^x — количество узлов сетки вдоль оси абсцисс, N_{grid}^z — количество узлов вдоль оси аппликат.

Затем рассчитанный потенциал Φ_{ext} аппроксимируется двухмерным полиномом восьмой степени:

$$\begin{aligned} P(r, z) = & \alpha_0 + \alpha_1 r^2 + \alpha_2 z^2 + \\ & + \alpha_3 r^2 z^2 + \alpha_4 r^4 + \alpha_5 z^4 + \\ & + \alpha_6 r^4 z^2 + \alpha_7 r^2 z^4 + \alpha_8 r^6 + \alpha_9 z^6 + \\ & + \alpha_{10} r^4 z^4 + \alpha_{11} r^6 z^2 + \alpha_{12} r^2 z^6 + \alpha_{13} r^8 + \alpha_{14} z^8, \end{aligned} \quad (2.3)$$

где $\alpha_0, \dots, \alpha_{14}$ — параметры аппроксимации.

Удерживающее электрическое поле аналитически вычисляется как отрицательный градиент аппроксимированного потенциала:

$$\mathbf{E}_{ext}(x, y, z) = \left(-\frac{\partial P}{\partial r} \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}; -\frac{\partial P}{\partial r} \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}}; -\frac{\partial P}{\partial z} \right). \quad (2.4)$$

В OpenDust предусмотрены два типа потоков ионов. Первый тип — бесстолкновительный поток, в котором ионы имеют смещенное максвелловское распределение скоростей [11]. Траектории ионов рассчитываются с использованием алгоритма скоростной схемы Верле [164]. Второй тип — поток ионов, управляемый электрическим полем, с учетом их столкновений с нейтральными молекулами [105; 106]. Управляющее электрическое поле является однородным и направлено вдоль оси аппликат. Столкновения ионов характеризуются постоянной частотой и процесс резонансной перезарядки при взаимодействии с нейтральными молекулами. Траектории ионов в этом случае также рассчитываются с использованием скоростной схемы Верле [164; 165], а сами столкновения моделируются с помощью метода нулевых столкновений.

Для моделирования ионного потока через расчетную область в OpenDust применяются открытые граничные условия. Ионы, покидающие расчетную область или поглощаемые пылевыми частицами, заменяются вновь вводимыми ионами, которые генерируются в случайных позициях на цилиндрической границе области с использованием модифицированного алгоритма, сохраняющего

поток [19]. Эти граничные условия предполагают, что входящие в расчетную область ионы распределены таким образом, чтобы имитировать распределение ионов в области однородной стационарной плазмы. Из-за этого допущения пылевые частицы, исследуемые в модели, должны находиться достаточно далеко от границы области, чтобы их влияние на вновь вводимые ионы было незначительным.

Предполагается, что поток ионов через цилиндрическую расчетную область является стационарным и однородным, а функция распределения скоростей ионов задается следующим образом:

$$f(v_x, v_y, v_z) = \varphi_M(v_x)\varphi_M(v_y)\varphi(v_z), \quad (2.5)$$

где v_x, v_y, v_z — компоненты скорости в декартовой системе координат, $\varphi_M(v_x)$ и $\varphi_M(v_y)$ описывают максвелловские распределения для v_x и v_y соответственно, а $\varphi(v_z)$ задает распределение скоростей вдоль z -оси. Тогда интегральный поток ионов, входящих в расчетную область через границы цилиндра, можно выразить следующим образом:

$$J_{bottom} = \pi R^2 \int_0^\infty v_z \varphi(v_z) dv_z, \quad (2.6)$$

$$J_{top} = -\pi R^2 \int_{-\infty}^0 v_z \varphi(v_z) dv_z, \quad (2.7)$$

$$J_{side} = 2\pi RL \int_0^\infty v_r \varphi_M(v_r) dv_r, \quad (2.8)$$

где $J_{bottom}, J_{top}, J_{side}$ обозначают интегральные потоки ионов, проходящих через нижнюю, верхнюю и боковую границы цилиндрической области соответственно.

В алгоритме задания граничных условий OpenDust любой ион, покидающий расчетную область или поглощаемый пылевыми частицами, заменяется вновь введенным ионом на одной из границ цилиндра — нижней, верхней или боковой. Вероятности для каждого случая определяются следующим образом:

$$p_{bottom} = \frac{J_{bottom}}{J_{bottom} + J_{top} + J_{side}}, \quad (2.9)$$

$$p_{top} = \frac{J_{top}}{J_{bottom} + J_{top} + J_{side}}, \quad (2.10)$$

$$p_{side} = \frac{J_{side}}{J_{bottom} + J_{top} + J_{side}}. \quad (2.11)$$

Если новый ион вводится через нижнюю или верхнюю границу, его скорости v_x и v_y генерируются из максвелловского распределения, а v_z выбирается на основе кумулятивного распределения для нижней границы:

$$G_{bottom} = \int_0^{v_z} v'_z \varphi(v'_z) dv'_z, \quad (2.12)$$

и для верхней границы:

$$G_{top} = - \int_{v_z}^0 v'_z \varphi(v'_z) dv'_z, \quad (2.13)$$

Если ион вводится через боковую границу, то v_z определяется в соответствии с распределением $\varphi(v_z)$, а v_x и v_y вычисляются следующим образом:

$$v_x = - \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} v_r, \quad (2.14)$$

$$v_y = - \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} v_r, \quad (2.15)$$

где v_r — радиальная скорость, случайно выбираемая в соответствии с кумулятивным распределением:

$$G_{side} = \int_0^{v_r} v'_r \varphi_M(v'_r) dv'_r. \quad (2.16)$$

2.1.2 Расчет сил и зарядов

В OpenDust суммарная сила, действующая на пылевые частицы, представляет собой сумму четырех составляющих.

Первая составляющая — это электрическая сила, обусловленная взаимодействием пылевых частиц с экранированными ионами. Включает в себя как вклад от ионов внутри расчетной области, так и вклад от ионов, находящихся за ее пределами:

$$\mathbf{F}_{id}^o = \frac{q_i Q_d}{4\pi\epsilon_0} \sum_k \frac{1 + |\mathbf{r}_i^k - \mathbf{r}_d|/r_{De}}{|\mathbf{r}_i^k - \mathbf{r}_d|^3} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}_i^k - \mathbf{r}_d|}{r_{De}}\right) (\mathbf{r}_d - \mathbf{r}_i^k) + \mathbf{E}_{out} Q_d, \quad (2.17)$$

где ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, $\mathbf{r}_i^k$ — радиус-вектор иона, $\mathbf{r}_d$ — радиус-вектор пылевой частицы, r_{De} — дебаевский радиус электронов, Q_d —

заряд пылевой частицы, q_i — заряд иона, E_{out} — электрическое поле, создаваемое равномерно распределенными ионами за пределами расчетной области. Суммирование выполняется по всем ионам, находящимся внутри расчетной области.

Вторая составляющая — кулоновское взаимодействие между самими пылевыми частицами:

$$F_{dd^k} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{p \neq k} Q_d^k Q_d^p \frac{(\mathbf{r}_d^k - \mathbf{r}_d^p)}{|\mathbf{r}_d^k - \mathbf{r}_d^p|^3}, \quad (2.18)$$

где верхний индекс k указывает на пылевую частицу, на которую рассчитывается сила. Суммирование производится по всем пылевым частицам, включенным в расчет.

Третья составляющая — сила, возникающая в результате передачи импульса при столкновении ионов с пылевыми частицами:

$$F_{id}^c = \frac{m_i}{\delta t} \sum_k \mathbf{v}_i^k, \quad (2.19)$$

где $\mathbf{v}_i^k$ — скорость иона, m_i — масса иона, δt — временной шаг интегрирования. Суммирование проводится по всем ионам, пересекшим поверхность пылевой частицы в данный момент времени.

Четвертая составляющая — сила, возникающая при наличии внешнего электрического поля, приводящего в движение поток ионов:

$$F_{ext} = Q_d E_{ext}, \quad (2.20)$$

где E_{ext} — внешнее однородное электрическое поле.

Значение заряда пылевых частиц играет ключевую роль в расчете сил. В OpenDust реализованы три метода расчета зарядов. Первый вариант — это задание заранее определенного заряда, который остается постоянным на протяжении всего моделирования. Вторым вариантом — расчет зарядов пылевых частиц по теории ограниченного орбитального движения (OML) [30]. Этот метод применим в случае, если одиночная пылевая частица помещена в поток бесстолкновительной максвелловской плазмы. Третий метод является наиболее универсальным и предполагает вычисление электронного потока заряда с использованием OML, а поток ионов рассчитывается самосогласованно. В данном подходе каждый ион, пересекающий поверхность пылевой частицы, добавляется к ионному потоку заряда. Этот метод подходит для любых систем пылевых частиц, в которых электроны можно рассматривать как болцмановскую жидкость.

2.2 Сравнение с теоретическими моделями и расчетами методами частиц в ячейках и молекулярной динамики

Для того чтобы проиллюстрировать возможности OpenDust, представляются несколько тестовых примеров. Кроме того, тесты предназначены для проверки кода по сравнению с существующими численными расчетами методами частиц в ячейках и молекулярной динамики и аналитическими моделями. В частности, проводится сравнение с кодами COPTIC [11], SCEPTIC [71], MAD и DRIAD [8; 10].

2.2.1 Уединенная пылевая частица в потоке бесстолкновительной плазмы

В данном разделе рассматривается одиночная пылевая частица, находящаяся в потоке бесстолкновительной максвелловской плазмы. Вначале представлены результаты моделирования для одного фиксированного значения скорости плазменного потока. Используемые параметры приведены в таблице 1. Заряд пылевой частицы рассчитывался тремя различными методами, реализованными в OpenDust: с фиксированным значением заряда, на основе теории ограниченного орбитального движения (OML) и посредством самосогласованного расчета. В первом тесте заряд пылевой частицы был задан как $Q_d = 392500$ элементарных зарядов, что соответствует радиусу частицы $58.8e-6$ м согласно OML. Шаг по времени для ионов был выбран $3.5148e-10$ с в соответствии с [8].

На рисунке 2.2 представлено стационарное распределение плотности ионов. Пылевая частица показана в виде белой сферы, а поток ионов направлен вверх. Возмущение плотности ионов принимает характерную коническую форму, аналогично тому, что показано в [12], причем за пылевой частицей формируется область с избыточной плотностью положительно заряженных ионов.

В бесстолкновительном максвелловском потоке плазмы процесс зарядки одиночной пылевой частицы можно описать в рамках приближения OML [10]. Для проверки корректности вычисления заряда пылевой частицы в OpenDust проведено сравнение его временной зависимости, полученной самосогласованным расчетом и в рамках теории OML. Результаты сравнения представлены на рисунке

2.3. Как видно, обе зависимости хорошо совпадают, что подтверждает корректность реализованного метода расчета заряда.

Таблица 1 — Параметры, используемые для моделирования бесстолкновительного максвелловского потока плазмы вокруг одиночной пылевой частицы для первого тестового случая

Параметр	Значение	Единицы измерения
----------	----------	-------------------

Параметры плазмы

Температура электронов T_e	29011	К
Температура ионов T_i	290.11	К
Концентрация заряженных компонентов плазмы в квазинейтральной области n_{inf}	$1e14$	$1/m^3$
Масса иона m_i	$6.6335209e-26$	kg
Число Маха потока плазмы M	1	-

Параметры моделирования

Радиус цилиндрической расчетной области R	3	дебаевский радиус электронов
Высота цилиндрической расчетной области H	6	дебаевский радиус электронов
Число дискретных частиц N	2^{16}	-
Число шагов интегрирования n	3000	-
Шаг интегрирования	$3.5148e-10$	s

Параметры пылевой частицы

Радиус пылевой частицы r_d	$58.8e-6$	m
Положение пылевой частицы $(x_d; y_d; z_d)$	(0; 0; -1)	дебаевский радиус электронов

Кроме того, была рассчитана полная сила, действующая на одиночную пылевую частицу со стороны потока плазмы, известная как сила ионного увлечения. Как отмечено в Разделе 2, вычисленная сила ионного увлечения в OpenDust включает два вклада: электрическую силу взаимодействия между пылевой частицей

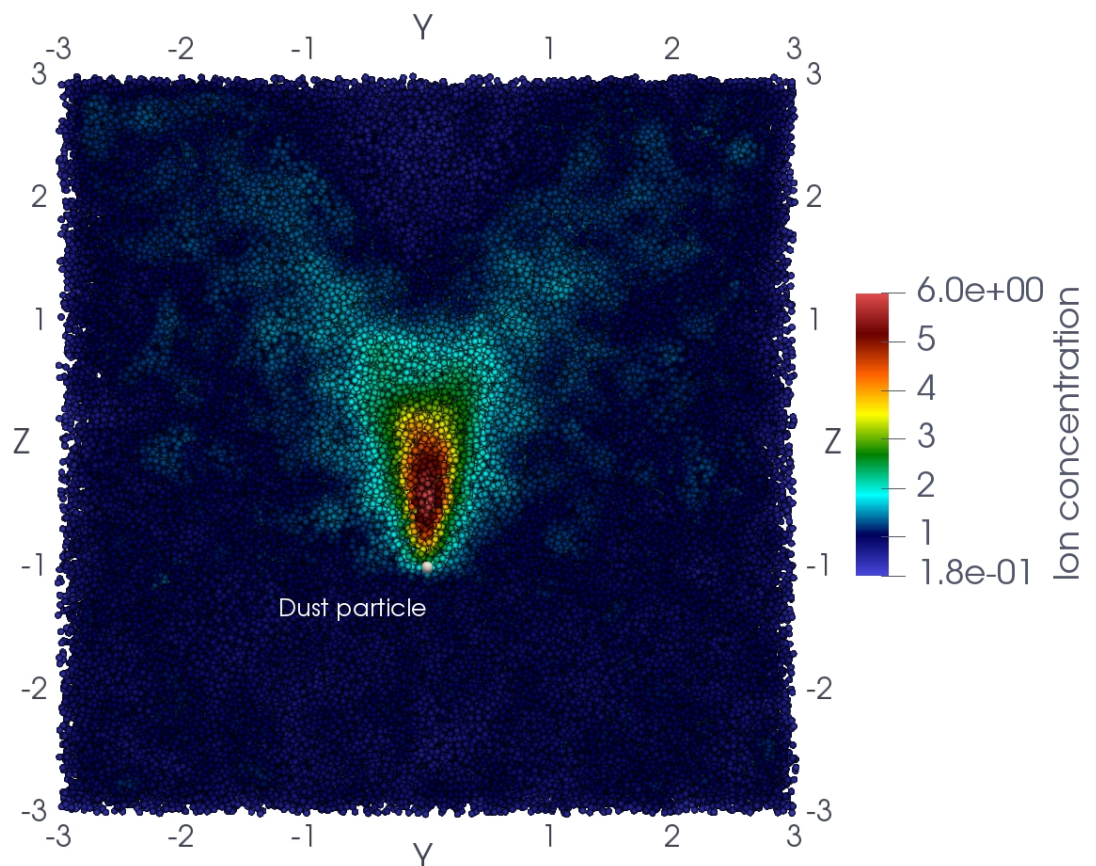


Рисунок 2.2 — Стационарное распределение плотности ионов вокруг одиночной пылевой частицы в потоке плазмы. Координаты даны в единицах электронного радиуса Дебая, а концентрация ионов нормирована на концентрацию ионов в невозмущенной области плазмы. Поток ионов направлен вверх.

и экранированными ионами (2.17), а также силу, возникающую за счет передачи импульса при столкновениях ионов с пылевой частицей (2.19). На рисунке 2.4 представлены зависимости полной силы и электрической составляющей от времени. Колебания полной силы оказываются более выраженными из-за вклада силы передачи импульса. Спустя примерно восемь микросекунд как полная сила, так и заряд пылевой частицы достигают стационарного значения.

Время, необходимое для проведения такого моделирования, зависит от используемых графических процессоров и варьируется от нескольких секунд до двух минут. В сравнении с этим, CPU-реализация метода частиц в ячейках Coptic [11] требует примерно одного часа вычислений.

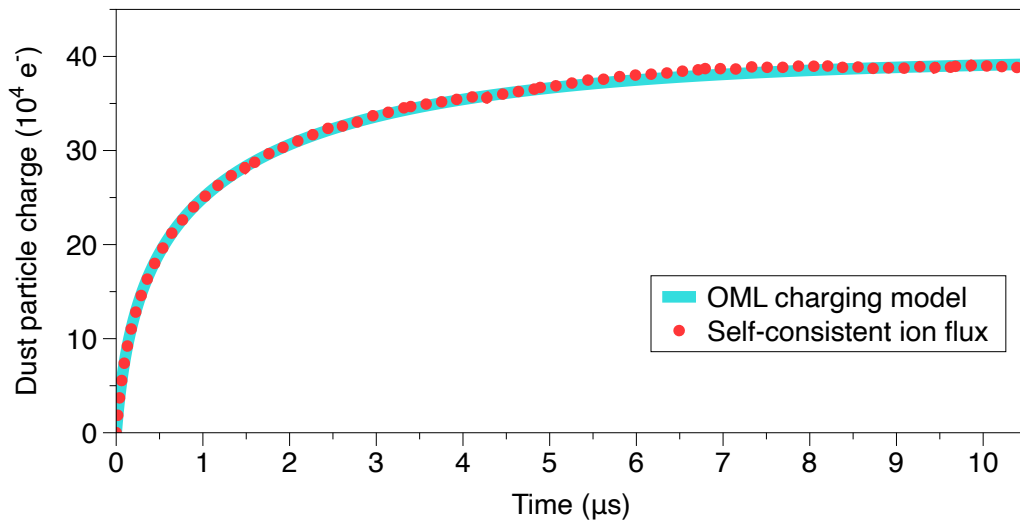


Рисунок 2.3 — Сравнение временной зависимости заряда пылевой частицы, рассчитанного самосогласованно и с использованием OML-аппроксимации.

Для верификации OpenDust была рассчитана зависимость стационарного значения силы ионного увлечения от скорости потока ионов. Данная зависимость была сопоставлена с двумя ранее проведенными расчетами силы ионного увлечения [8; 71]. В работе [71] расчеты проводились с использованием метода частиц в ячейках. В [8] сила ионного увлечения вычислялась в рамках асимметричной молекулярной динамики по подходу Пиля. Для всех трех случаев использовались идентичные параметры плазмы, представленные в Таблице 2. В ходе моделирования заряд пылевой частицы фиксировался и соответствовал стационарному значению в рамках OML для данной скорости потока. В указанных ссылках столкновения пылевых частиц с ионами не учитывались, поэтому усредненное значение силы, рассчитанное в OpenDust, учитывает только электрическое взаимодействие между пылевой частицей и экранированными ионами. Полученные результаты OpenDust демонстрируют хорошее согласие как с асимметричной молекулярной динамикой, так и с методом частиц в ячейках.

2.2.2 Уединенная пылевая частица в потоке столкновительной плазмы

В данном разделе представлены результаты моделирования одиночной пылевой частицы, находящейся в потоке столкновительной плазмы, создаваемого внешним электрическим полем. Типичное распределение плотности ионов во-

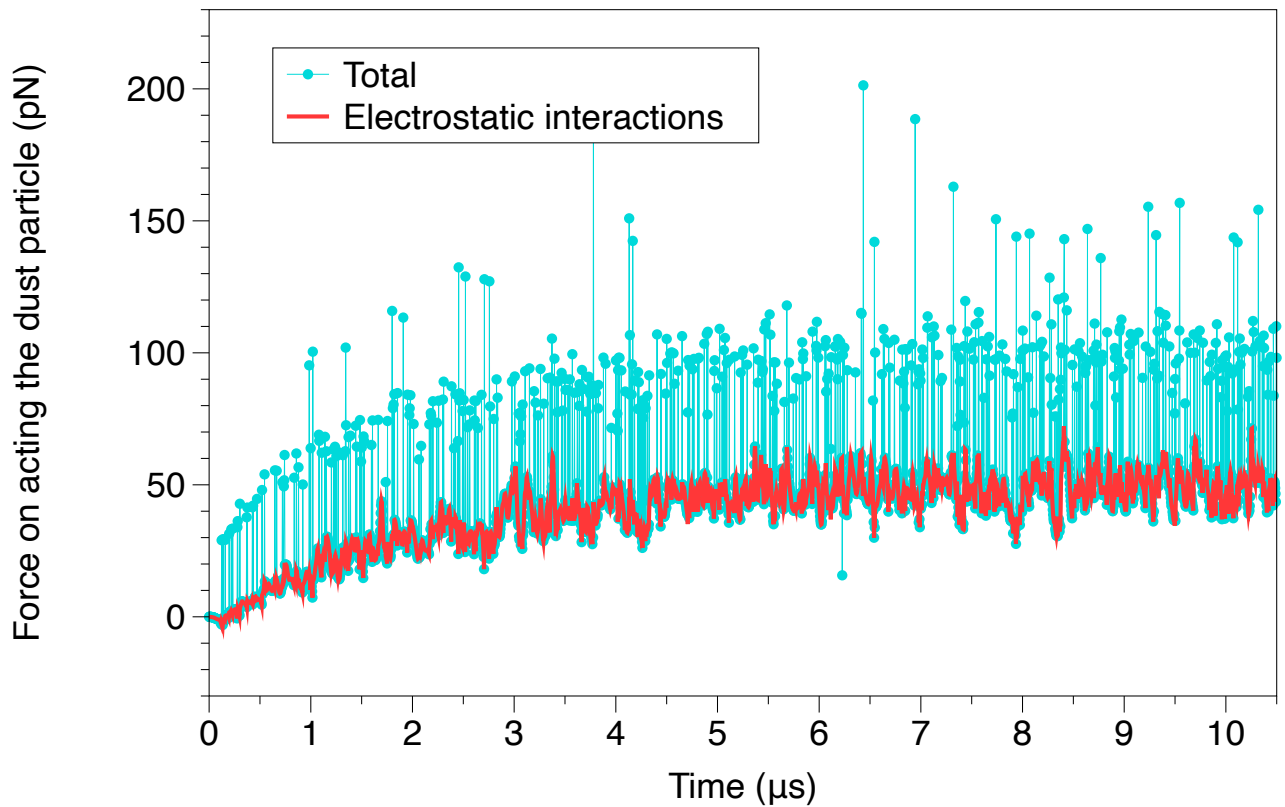


Рисунок 2.4 — Временная зависимость силы ионного увлечения. Голубая линия показывает полную силу, красная линия — электрическую компоненту силы, возникающую во взаимодействии пылевой частицы с экранированными ионами.

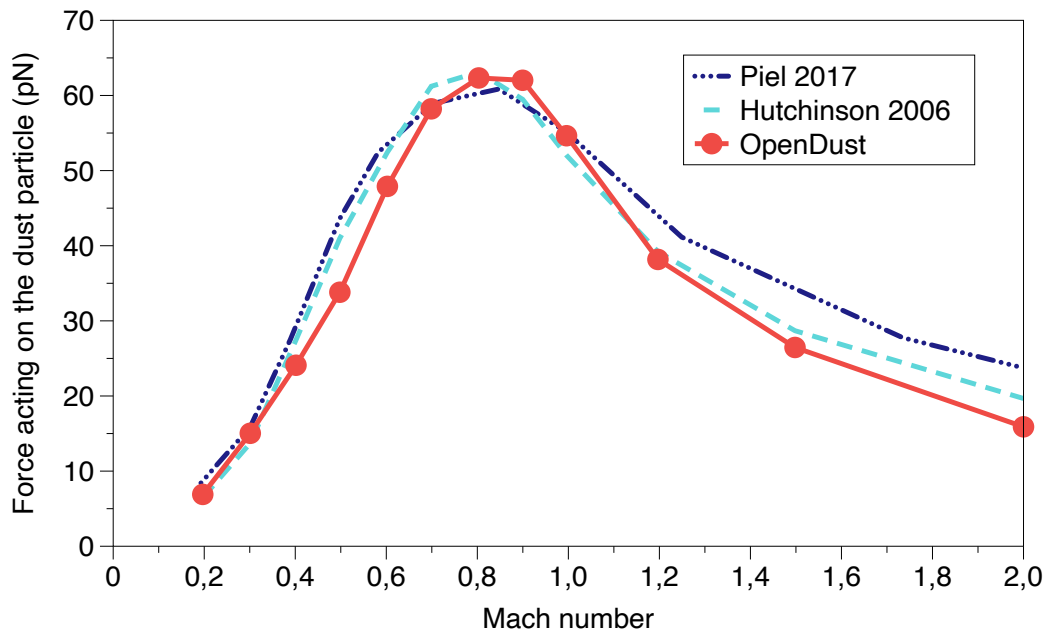


Рисунок 2.5 — Сравнение силы ионного увлечения с результатами предыдущих расчетов [8; 71]. Красные точки соответствуют данным OpenDust, линии служат для наглядности. Голубая пунктирная линия и синяя штрих-пунктирная линия показывают результаты, полученные в работах [71] и [8] соответственно.

круг пылевой частицы в таких условиях показано на рисунке 2.6. В отличие от бесстолкновительного случая, возмущение плотности ионов за пылевой частицей не формирует коническую структуру и оказывается более сглаженным. Этот результат согласуется с выводами предыдущих исследований [106].

Для проверки достоверности расчетов, выполненных в OpenDust, в качестве эталонных данных использовались результаты моделирования методом частиц в ячейках, представленные в работе [166]. В ходе расчетов определялись стационарные значения силы ионного увлечения и самосогласованного заряда пылевой частицы при различных частотах столкновений ионов с нейтральными атомами. Внешнее электрическое поле выбиралось таким образом, чтобы скорость потока ионов соответствовала одной скорости Бома для каждого значения частоты столкновений, что описывается следующим выражением:

$$E_{ext} = v_B v_{in} \frac{m_i}{q_i}, \quad (2.21)$$

где v_B — скорость Бома, v_{in} — частота столкновений ионов с нейтральными атомами, m_i — масса иона, q_i — заряд иона [105]. Используемые параметры моделирования приведены в таблице 2. Шаг интегрирования во времени выбирался так, чтобы он был по крайней мере в пять раз меньше характерного времени столкновений ионов с нейтральными частицами.

Сравнение результатов, полученных с помощью OpenDust, с данными из [166] для зависимости силы ионного увлечения и заряда пылевой частицы представлено на рисунке 2.7. Результаты OpenDust демонстрируют хорошее согласие с расчетами, выполненными методом частиц в ячейках, как для силы ионного увлечения, так и для заряда пылевой частицы.

2.3 Ускорение моделирования плазмы в OpenDust с помощью графических ускорителей

Эффективное моделирование динамики пылевой плазмы, в особенности возможность выхода на многомасштабное самосогласованное моделирование динамики пылевых частиц с учётом плазменного окружения, требует использования высокопроизводительных вычислительных методов, способных учитывать сложные межчастичные взаимодействия и влияние плазменного окружения. Высокая

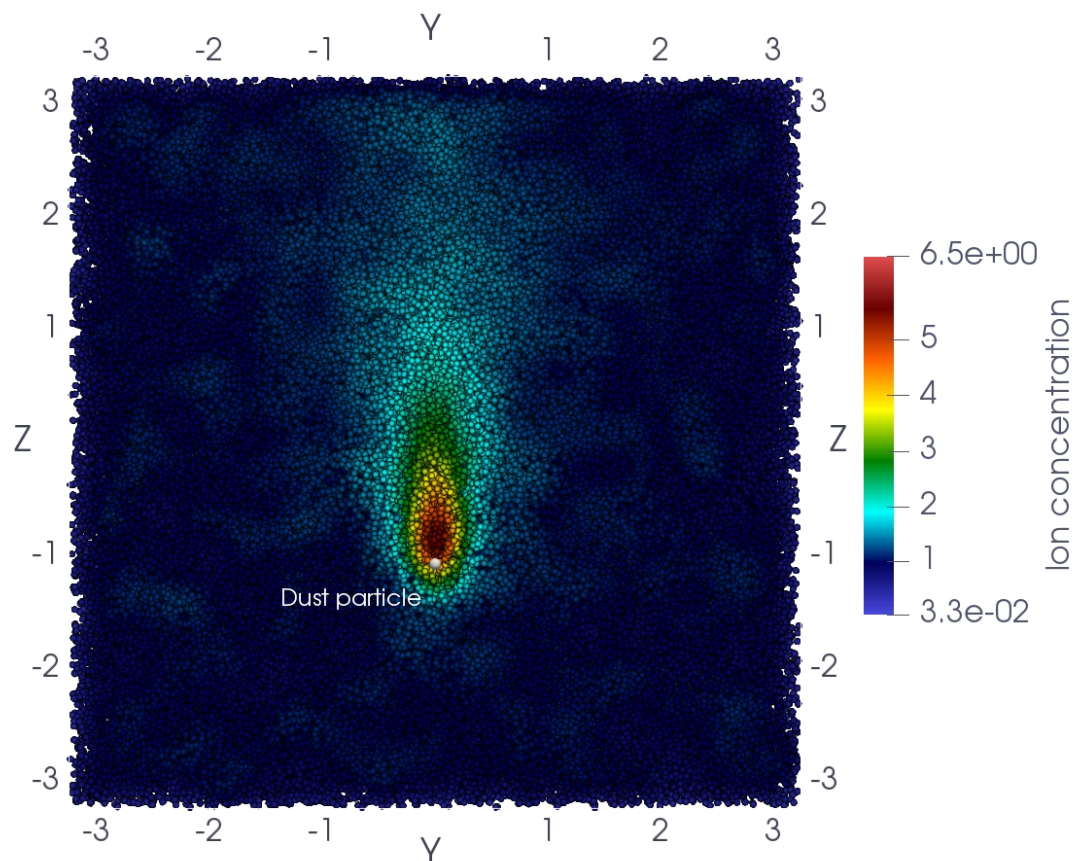


Рисунок 2.6 — Стационарное распределение плотности ионов вокруг одиночной пылевой частицы в столкновительном плазменном потоке, управляемом электрическим полем. Координаты представлены в единицах радиуса Дебая электронов, а концентрация ионов нормирована на значение в непотревоженной области плазмы. Поток ионов направлен вверх.

Таблица 2 — Параметры, используемые для моделирования столкновительного плазменного потока, управляемого электрическим полем, вокруг одиночной пылевой частицы

Параметр	Значение	Единицы измерения
----------	----------	-------------------

Параметры плазмы

Температура электронов T_e	30000	K
Температура ионов T_i	300	K
Концентрация заряженных частиц плазмы в квазинейтральной области n_{inf}	3.57e15	1/m ³
Масса иона m_i	1.673557e−27	kg
Внешнее электрическое поле E_{ext}	8.117 ... 2.647e6	V/m
Частота столкновений ионов с нейтральными частицами ν_{in}	4.94e6 ... 1.61e10	Hz

Параметры моделирования

Радиус цилиндрической расчетной области R	1.25	радиус Дебая электронов
Высота цилиндрической расчетной области H	6	радиус Дебая электронов
Количество дискретных частиц N	2 ¹⁷	-
Число временных шагов интегрирования n	200000	-
Временной шаг интегрирования δt	1e−11	s

Параметры пылевой частицы

Радиус пылевой частицы r_d	1e−5	m
Положение пылевой частицы $(x_d; y_d; z_d)$	(0; 0; 0)	радиус Дебая электронов

вычислительная сложность моделирования плазменных систем, связанная с необходимостью учета множества парных взаимодействий, накладывает жесткие требования к производительности кода. В связи с этим критически важной задачей

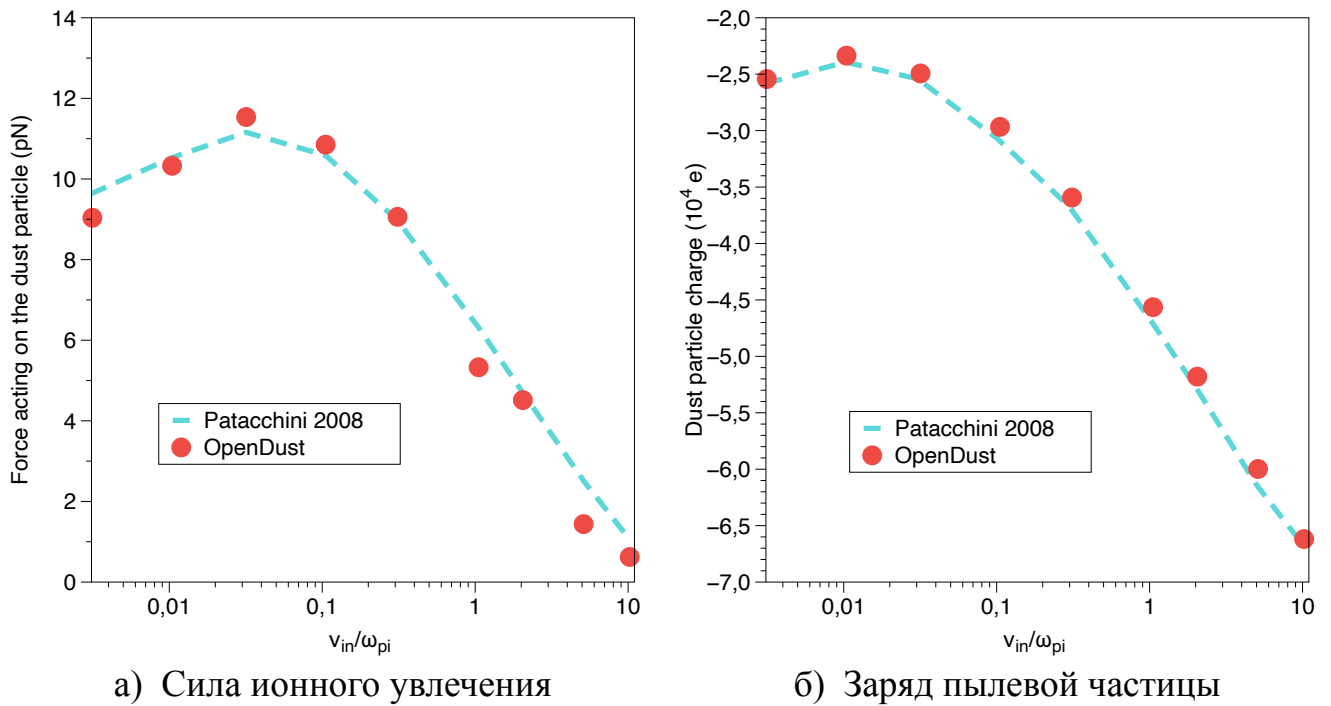


Рисунок 2.7 — Зависимость силы ионного увлечения (а) и заряда пылевой частицы (б) от частоты столкновений ионов с нейтральными атомами. Результаты OpenDust показаны синими точками, линии служат для наглядности. Красная пунктирная линия представляет данные из [166].

является оптимизация вычислений и использование графических процессоров (GPU), которые обеспечивают значительный прирост скорости по сравнению с традиционными центральными процессорами (CPU).

В данном разделе рассматривается реализация вычислений в OpenDust на графических ускорителях, включая особенности организации передачи данных между CPU и GPU, распределение нагрузки при использовании нескольких графических процессоров и методы повышения вычислительной эффективности. Проводится детальное сравнение производительности OpenDust на различных моделях GPU и CPU, что позволяет оценить преимущества использования графических ускорителей в задачах моделирования пылевой плазмы. Анализируется масштабируемость кода при увеличении размеров моделируемой системы и оценивается возможность применения функций отсечения взаимодействий для снижения вычислительной сложности.

Отдельное внимание уделяется сравнению OpenDust с существующими программными решениями для моделирования комплексной плазмы, такими как SCEPTIC, CORTIC, MAD и другие. Сравнительный анализ демонстрирует пре-

имущества OpenDust в скорости вычислений и его способность эффективно использовать ресурсы GPU, обеспечивая производительность, значительно превосходящую ранее разработанные коды.

Таким образом, цель данного раздела — показать, как использование GPU позволяет существенно ускорить вычисления в OpenDust, сделать возможным выход на многомасштабное самосогласованное моделирование динамики пылевых частиц с учётом плазменного окружения.

2.3.1 Логика использования графических ускорителей в OpenDust

В OpenDust для вычислений с использованием графического ускорителя реализована эффективная схема передачи данных между центральным процессором (CPU) и графическим процессором (GPU). Исходные координаты и скорости дискретных частиц изначально создаются на центральном процессоре, после чего они передаются на графический ускоритель. Вычисление траекторий движения этих частиц выполняется непосредственно на графическом процессоре. После завершения расчетов данные о координатах и скоростях копируются обратно с GPU на CPU, где затем обрабатываются для вычисления пространственного распределения параметров плазмы. Визуальное представление процесса передачи данных и обработки информации приведено на рисунке 2.8.

Процесс копирования массивов данных между CPU и GPU, а также их последующая обработка, занимают значительно меньше времени по сравнению с вычислениями траекторий. Поэтому при анализе эффективности и производительности основное внимание уделяется именно расчету траекторий дискретных частиц.

При использовании нескольких графических процессоров для параллельного расчета сил реализована схема передачи данных между устройствами, представленная на рисунке 2.9. В данном случае на каждом шаге численного интегрирования нагрузка распределяется между графическими процессорами следующим образом:

- Координаты пылевых частиц транслируются на все графические процессоры;
- Вычисление сил выполняется параллельно на всех доступных GPU;

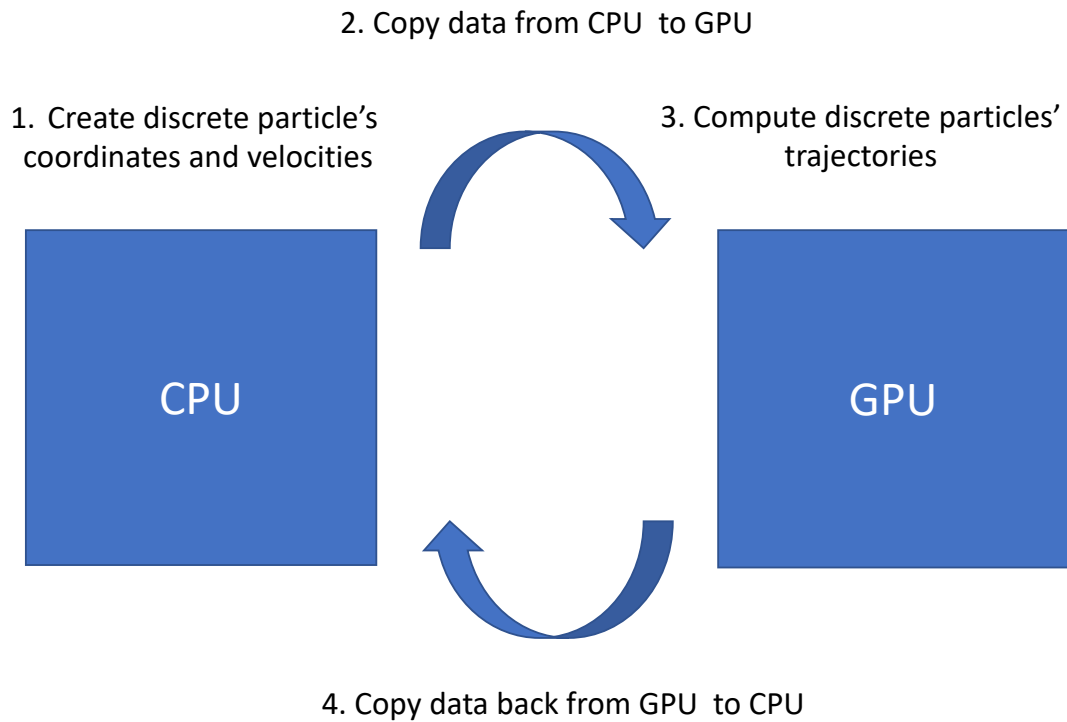


Рисунок 2.8 — Иллюстрация передачи данных дискретных частиц между GPU и CPU.

- Рассчитанные силы с каждого GPU передаются на один из графических процессоров;
- На этом графическом процессоре выполняется суммирование сил и производится интегрирование уравнений движения.

Подход с использованием нескольких графических процессоров позволяет существенно ускорить вычисления, обеспечивая эффективное масштабирование при моделировании сложных плазменно-пылевых систем.

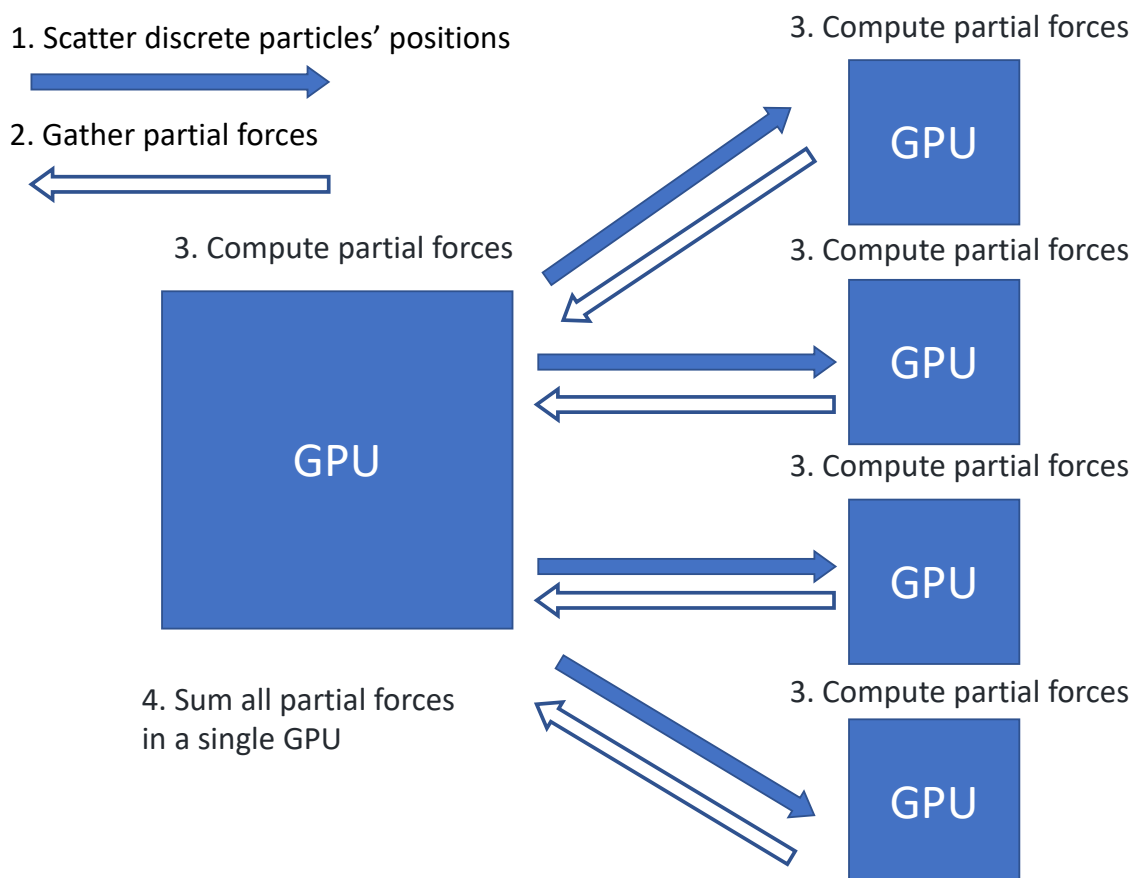


Рисунок 2.9 — Иллюстрация передачи данных между несколькими GPU для параллельного расчета сил.

2.3.2 Сравнение производительности и эффективности на центральном и графических процессорах

В качестве тестового примера для оценки производительности OpenDust используется тест из раздела 2.2.1. Основным фактором, ограничивающим быстродействие OpenDust, является моделирование динамики ионов, в частности, вычисление сил взаимодействия между ними. Поэтому для оценки производительности программы измеряется время расчета динамики ионов. Время расчета в OpenDust зависит в первую очередь от количества ионов и числа шагов интегрирования. Очевидно, что общее время вычислений линейно пропорционально количеству шагов интегрирования. Цель тестирования заключается в анализе изменения вычислительного времени при варьировании числа ионов.

В тесте используется цилиндрическая расчетная область высотой $6r_{De}$ и радиусом $3r_{De}$. В таких условиях экранированные кулоновские взаимодействия между подавляющим большинством ионов нельзя считать несущественными. Следовательно, необходимо учитывать силы взаимодействия между всеми парами ионов на каждом шаге интегрирования. Алгоритм вычисления этих взаимодействий масштабируется как $O(N^2)$, где N — число ионов или, более точно, количество суперионов.

Как отмечалось ранее, в OpenDust для численного интегрирования уравнений движения суперионов используется библиотека OpenMM, оптимизированная для работы на графических процессорах [163]. Таким образом, OpenDust наследует вычислительную эффективность OpenMM и поддерживает моделирование плазменных систем с применением GPU. В версии OpenDust 1.0.0 задействовано Cuda-ядро OpenMM, что позволяет запускать расчеты исключительно на графических процессорах NVIDIA.

Для оценки производительности OpenDust тестовые расчеты выполняются на различных моделях GPU: NVIDIA A30, NVIDIA Tesla V100 и NVIDIA Tesla A100. В дополнение к этому проводится моделирование на центральном процессоре, используя CPU-реализацию OpenMM, с целью сравнения эффективности работы CPU и различных GPU. В расчетах на CPU используются два процессора Intel Xeon Gold 6152 (2x22 ядра, 2.1 ГГц). Основные характеристики применяемых графических ускорителей и центрального процессора приведены в таблице 3.

Таблица 3 — Характеристики протестированных устройств.

Устройство	Пиковая производительность (TFLOPS)	Энергопотребление (Вт)	Цена (\$)
NVIDIA A30	10.32	165	5000
NVIDIA A100	19.5	400	31000
NVIDIA V100	15.7	300	13000
Intel Xeon Gold 6152	2.8	140	3600

Время измеряется для моделирования 3000 шагов интегрирования при различных количествах ионов. На рисунке 2.10 представлена зависимость времени моделирования от числа ионов N . Экспериментальные точки аппроксимируются

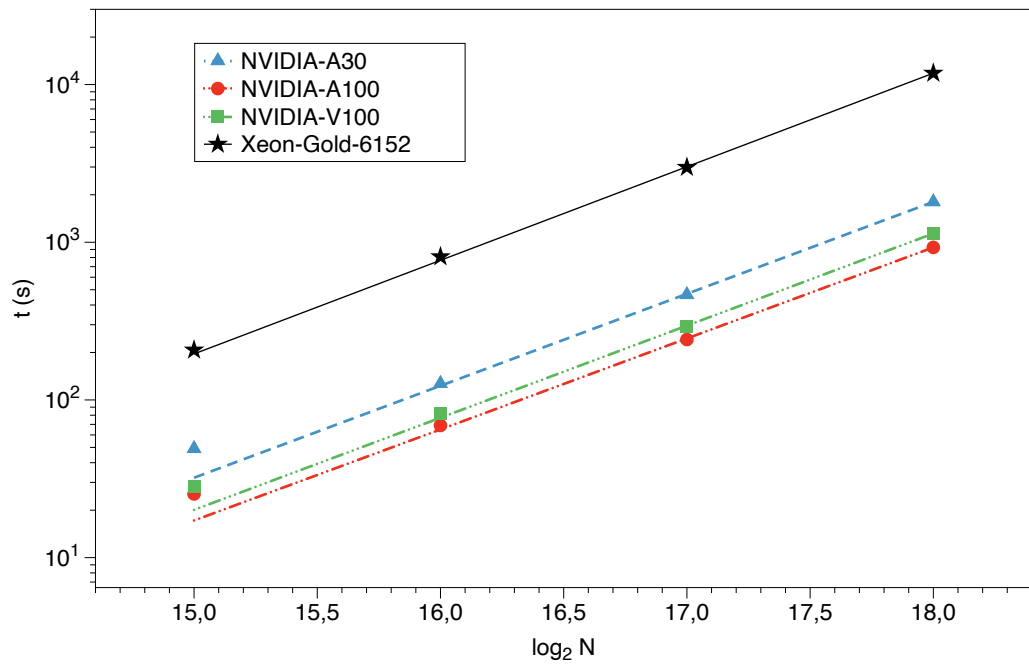


Рисунок 2.10 — Среднее время расчета динамики ионов при различных количествах ионов. Измеренные значения времени обозначены символами: NVIDIA A30 (синие треугольники), NVIDIA Tesla V100 (зеленые квадраты), NVIDIA Tesla A100 (красные круги), CPU (черные звезды). Аппроксимации временных зависимостей степенной функцией представлены линиями: NVIDIA A30 (синяя пунктирная линия), NVIDIA Tesla V100 (зеленая штрих-пунктирная линия), NVIDIA Tesla A100 (красная двойная штрих-пунктирная линия), CPU (черная сплошная линия). Полученные показатели степени для всех случаев близки к двум.

степенной функцией $t(N) = \alpha N^\beta$, где α и β являются параметрами подгонки. Как и ожидалось, полученные значения параметра β близки к двум, что соответствует квадратичному масштабированию алгоритма расчета парных сил $O(N^2)$. Время моделирования на центральном процессоре превышает аналогичные показатели на графических процессорах примерно на порядок. Графический ускоритель NVIDIA Tesla A100 демонстрирует производительность примерно в два раза выше, чем NVIDIA A30, и на 20% превосходит NVIDIA Tesla V100.

2.3.3 Масштабирование размеров физической системы

В случаях, когда необходимо моделирование одиночной пылевой частицы, может быть использована относительно небольшая расчетная область, описанная выше. Однако для моделирования системы с большим числом пылевых частиц может потребоваться увеличение размеров расчетной области. Увеличение области приводит к росту числа ионов в моделировании, что в свою очередь приводит к квадратичному увеличению количества вычисляемых взаимодействий. Однако, по мере увеличения расчетной области, становится возможным пренебречь значительным числом взаимодействий между ионами.

Для повышения эффективности вычислений в больших системах OpenDust использует функцию обрезки, которая обращается в ноль за пределами фиксированного порогового расстояния. Это позволяет уменьшить сложность алгоритма, снижая фактор масштабируемости.

Для исследования влияния этого метода были проведены две серии моделирования потока плазмы вокруг одиночной пылевой частицы. Первая серия полностью соответствует тесту производительности, рассмотренному ранее: размер расчетной области остается неизменным, а количество ионов варьируется. Во второй серии высота цилиндрической расчетной области изменяется пропорционально числу ионов, таким образом обеспечивая постоянную концентрацию ионов. Вычисления выполнялись на графическом ускорителе NVIDIA Tesla V100. Для моделирования использовалось пороговое расстояние, равное трем длинам экранирования Дебая для электронов. Было проверено, что результаты моделирования не изменяются при включении и выключении функции отсечения.

Измеренное время расчетов представлено на Рисунке 2.11. В логарифмическом масштабе временные точки обеих серий ложатся на прямые линии. Для первой серии характерна квадратичная зависимость, тогда как точки второй серии аппроксимируются степенной функцией:

$$t(N) = 0.00016N^{1.177}, \quad (2.22)$$

где N — количество ионов. Таким образом, использование радиуса обрезки позволяет существенно уменьшить сложность вычислений при моделировании крупных систем, практически достигая линейной зависимости от числа ионов.

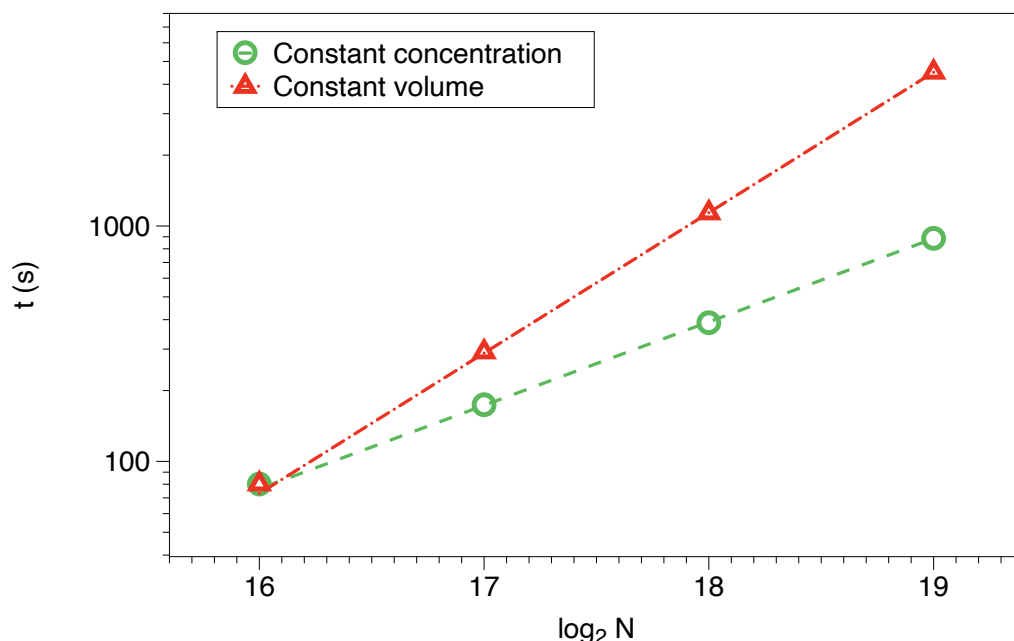


Рисунок 2.11 — Зависимость времени моделирования от числа ионов. Символами обозначены измеренные времена для серии моделирования с постоянным объемом (красные треугольники) и для серии с постоянной концентрацией (зеленые круги). Аппроксимации измеренных значений времени для обеих серий представлены соответственно красной штрих-пунктирной линией и зеленой пунктирной линией.

2.3.4 Эффективность одновременного использования нескольких графических процессоров

OpenDust предоставляет возможность запуска моделирования на нескольких графических процессорах. При запуске моделирования на нескольких GPU распределение вычислительной нагрузки между графическими ускорителями выполняется следующим образом:

- Координаты суперионов передаются на все используемые GPU;
- Вычисление сил выполняется параллельно;
- Рассчитанные силы передаются обратно на главный GPU;
- На главном GPU выполняется шаг интегрирования с учетом вычисленных сил.

Для оценки влияния количества используемых GPU на производительность были проведены измерения времени выполнения моделирования при разном числе графических процессоров и ионов. На рисунке 2.12 показаны ускорение и

эффективность моделирования в зависимости от числа GPU. В расчетах использовалась NVIDIA Tesla A100. Ускорение определяется как отношение времени моделирования на одном GPU ко времени моделирования на заданном числе графических процессоров. Эффективность, в свою очередь, представляет собой отношение ускорения к количеству используемых GPU.

Замеры проводились для двух значений числа ионов: 2^{15} и 2^{17} . В случае $N = 2^{15}$ ускорение достигает насыщения при шести графических процессорах, максимальное значение ускорения составляет 2.5. В случае $N = 2^{17}$ насыщение не наблюдается даже при использовании восьми GPU, а достигнутое ускорение составляет 5.5. Как видно на рисунке 2.12б, использование нескольких графических процессоров при $N = 2^{17}$ оказывается более эффективным, чем при $N = 2^{15}$.

Различие в поведении для двух значений N можно объяснить законом Амдала [167]. Время выполнения серийных операций, таких как передача данных, линейно зависит от числа суперионов, в то время как время выполнения параллелизуемой части (вычисление парных взаимодействий) имеет квадратичную зависимость. При увеличении количества суперионов доля времени, затрачиваемого на серийные операции, уменьшается по сравнению с параллелизуемыми вычислениями. Согласно закону Амдала, максимальное ускорение возрастает с увеличением доли параллелизуемых операций, что в данном случае приводит к более эффективному использованию графических ускорителей при увеличении числа частиц.

2.3.5 Сравнение производительности с аналогами

В настоящее время в научной литературе представлено значительное количество реализаций самосогласованного моделирования комплексной плазмы [8—14; 19]. Однако только работы [8—10; 12; 14; 19] позволяют моделировать плазменно-пылевые системы с произвольным расположением пылевых частиц, и лишь немногие из них [11; 13; 19] имеют открытый исходный код. Данные о производительности, необходимые для оценки эффективности моделирования комплексной плазмы, представлены в исследованиях [8; 9; 11; 19]. Для удобства информация о наличии исходного кода, методе реализации и доступности данных для анализа эффективности сведена в таблице 4.

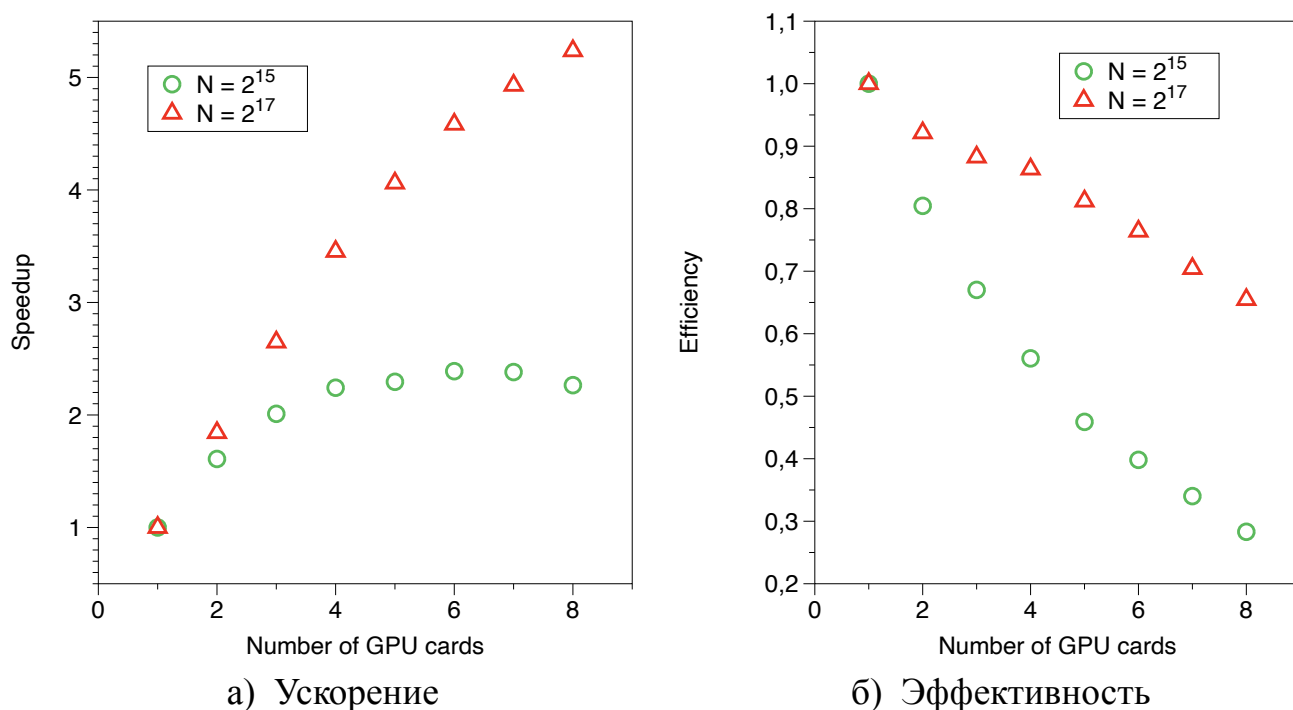


Рисунок 2.12 — Зависимость ускорения и эффективности моделирования от количества используемых графических процессоров. Красные треугольники и зеленые круги соответствуют моделированию с 2^{17} и 2^{15} ионов соответственно.

Сравнивая производительность OpenDust с предыдущими реализациями, мы рассматриваем только трёхмерные версии, поскольку OpenDust позволяет моделировать плазменно-пылевую систему с произвольным числом пылевых частиц. Кроме того, учитываются только те реализации, для которых имеются данные о производительности или доступен исходный код. В противном случае невозможно объективно оценить их эффективность. Таким образом, производительность OpenDust анализируется в сравнении с Coptic [11], MAD [8] и [13].

Коды MAD [8] и [13] основаны на том же методе молекулярной динамики, что и OpenDust. Поэтому для оценки их эффективности в задачах комплексной плазмы достаточно сравнить количество временных шагов, выполняемых за секунду, при фиксированном числе моделируемых частиц плазмы. Данные о производительности MAD [8], [13] и OpenDust приведены в таблице 5.

OpenDust и MAD демонстрируют более высокую производительность по сравнению с [9], поскольку в последнем случае сообщается о достижении предела вычислительного времени. OpenDust превосходит MAD примерно в пять раз по скорости вычислений. Кроме того, OpenDust позволяет дополнительно ускорить расчёты за счёт использования нескольких графических процессоров, что недоступно для MAD.

Таблица 4 — Обобщенная информация о предыдущих реализациях самосогласованного моделирования комплексной плазмы

Название кода/ базовая статья	Вычислительный метод	Размещение пылевых частиц	Исходный код	Данные о производи- тельности
– [9]	3-D МД	Произвольное	Недоступен	Частично доступен
SCEPTIC [19]	2-D PIC	Аксиально- симметричное	GitHub	Доступны
DiP2D [12]	2-D PIC	Аксиально- симметричное	Недоступен	Недоступны
DUSTrz [13]	2-D PIC	Аксиально- симметричное	Листинг	Недоступны
COPTIC [11]	3-D PIC	Произвольное	GitHub	Доступны
– [14]	3-D PIC	Произвольное	Недоступен	Недоступны
DiP3D [12]	3-D PIC	Произвольное	Недоступен	Недоступны
MAD [8]	3-D МД	Произвольное	Листинг в базовой статье	Доступны
DRIAD [10]	3-D МД	Произвольное	Недоступен	Недоступны

Сравнение производительности OpenDust и Coptic является менее очевидным, так как методы молекулярной динамики (MD) и метода частиц в ячейках (PIC) принципиально различаются. Сопоставить эффективность OpenDust и Coptic можно путём оценки времени вычислений, необходимого для решения тестовых задач физики комплексной плазмы. Одной из таких задач является расчёт межзерновых сил в бесстолкновительном потоке плазмы. Эта задача описана в разделе 4, случай 4.3, а сравнение результатов, полученных с использованием OpenDust и Coptic, представлено на рисунке 3.9. Расчёт одного значения в этом графике с помощью OpenDust на GPU NVIDIA V100 занимает около одной минуты. В то же время реализация Coptic на основе метода PIC требует для

Таблица 5 — Данные о производительности 3-D молекулярно-динамических симуляций комплексной плазмы

Название кода / базовая статья	Количество моделируемых частиц плазмы	Шагов в секунду	Число шагов	Вычислительное устройство
– [9]	19 000	Значение неизвестно, вычислительное время ограничено	1 000 – 10 000	Кластер CPU
MAD [8]	65 000	10	3 000	GPU с 2000 потоками
OpenDust	65 000	50	3 000	GPU NVIDIA V100

расчёта одной точки около часа вычислительного времени [162]. Таким образом, OpenDust оказывается в 60 раз быстрее Coptic при решении данной задачи.

Однако следует учитывать, что сложность вычислений в MD-подходе, использованном в OpenDust, возрастает квадратично с увеличением числа моделируемых частиц при учёте всех парных взаимодействий. Это может привести к значительному снижению производительности OpenDust при увеличении размера моделируемой системы по сравнению с PIC. Тем не менее, использование в OpenDust функции отсечки взаимодействий (cut-off switching function) позволяет существенно улучшить масштабируемость вычислений (2.22), что нивелирует этот недостаток.

Таким образом, OpenDust превосходит ранее разработанные коды для моделирования комплексной плазмы по результатам проведённых тестов. Более того, показано, что OpenDust способен достичь практически линейного масштабирования вычислительной сложности с увеличением размера моделируемой системы, преодолевая основное ограничение молекулярно-динамического подхода, связанное с квадратичной сложностью.

2.4 Выводы ко второй главе

В данной главе рассмотрены принципы самосогласованного расчета зарядов пылевых частиц и сил, действующих на них, в потоке плазмы газового разряда. Основное внимание уделено описанию разработанного программного кода OpenDust, который позволяет выполнять вычисления динамики плазмы вокруг кластера пылевых частиц.

Была проведена валидация результатов OpenDust путем сравнения с существующими теоретическими моделями и численными расчетами. В частности, рассмотрены случаи одиночной пылевой частицы в бесстолкновительном и столкновительном потоках плазмы. Проведенный анализ подтвердил точность предложенного подхода и его соответствие физическим реалиям плазменно-пылевых экспериментов.

Разработанный метод обладает высокой степенью гибкости, что позволяет адаптировать его к различным условиям плазмы, включая изменения плотности, температуры и направленного движения заряженных частиц. Эффективность численной реализации разработанного метода позволяет одновременно моделировать как поведение плазменной, так и пылевой подсистемы в едином расчёте. Тем самым, данный подход впервые делает возможным выход на многомасштабное самосогласованное моделирование динамики пылевых частиц с учётом влияния окружающей плазмы. Это открывает новые возможности для исследования динамики пылевых кластеров в условиях, характерных для лабораторных систем.

Применение OpenDust обеспечивает новый уровень детализации моделирования процессов зарядки пылевых частиц и взаимодействия с плазменным окружением. Это позволяет глубже понять механизмы формирования и эволюции структур в пылевой плазме, а также исследовать динамические свойства системы пылевых частиц.

Глава 3. Сравнение с экспериментом

В данной главе представлено количественное и качественное сравнение результатов численного моделирования с экспериментальными данными. Основное внимание уделяется интерпретации экспериментов, в которых наблюдается сосуществование в плазменно-пылевой структуре неупорядоченной двухслойной центральной области и упорядоченной однослойной периферии. Кроме того, рассматриваются эффекты, возникающие в системах из двух пылевых частиц под действием потока плазмы газового разряда, зафиксированные в экспериментах, и проводится их сопоставление с результатами моделирования, выполненного с использованием кода OpenDust.

3.1 Самоподдерживающееся неравновесное сосуществование центральной неупорядоченной двухслойной области и упорядоченной периферийной области пылевой подсистемы

В данном разделе объясняется наблюдаемое в эксперименте самоподдерживающееся неравновесное сосуществование центральной неупорядоченной двухслойной области и упорядоченной периферийной области пылевой подсистемы. Приведено подробное описание экспериментальной установки, параметров плазмы и характеристик пылевых частиц. Особое внимание уделено расчёту кильватерного потенциала, возникающего вследствие фокусировки ионного потока, и его включению в моделирование динамики пылевых частиц. Численные расчёты воспроизводят характерные особенности наблюдаемой структуры: двухслойную неупорядоченную область в центре и однослойную упорядоченную область на периферии. Профили средней кинетической энергии движения пылевых частиц в зависимости от расстояния до центра структуры, полученные в эксперименте и моделировании, демонстрируют количественное согласие. Проведённый анализ подтверждает применимость разработанного численного подхода для описания динамических свойств пылевых структур в условиях газоразрядной плазмы.

3.1.1 Описание эксперимента

Эксперимент проводился на установке DPEX-II представляющей собой L-образную вакуумную камеру с асимметричной конфигурацией электродов. Плазма создавалась в разряде постоянного тока в аргоне при рабочем давлении около 8 Па и напряжении 450 В. Электронная температура и плотность плазмы в условиях эксперимента оценивались с помощью одиночных и двойных зондов, а также эмиссионных зондов, и составляли $T_e \sim 2 - 4$ эВ и $n_e \sim 0.8 - 2 \times 10^{15}, \text{м}^{-3}$ соответственно. Схема экспериментальной установки приведена на рисунке 3.1.

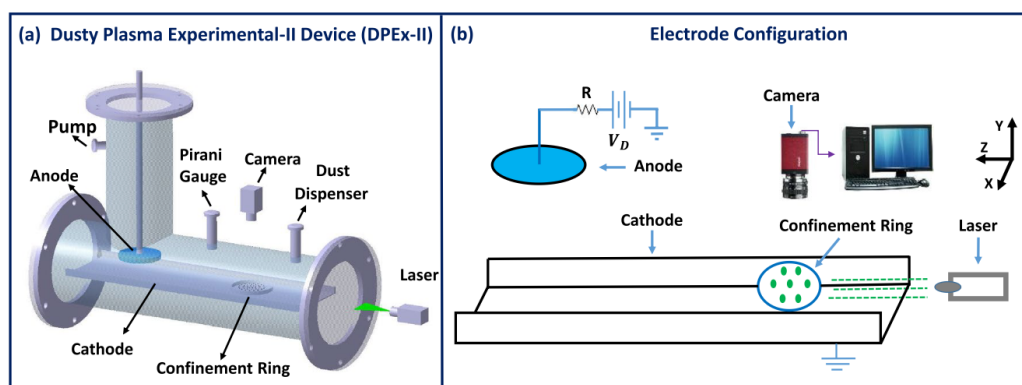


Рисунок 3.1 — Схема экспериментальной установки (а) и конфигурации электродов вместе с приборами для диагностики (б).

В качестве пылевых частиц использовались моно-дисперсные частицы меламина-формальдегида диаметром 10.66, $\mu\text{м}$, инжектированные в плазму с помощью диспенсера. В условиях эксперимента они приобретали отрицательный заряд и левитировали в катодной области за счёт баланса гравитационной силы и электрического поля. Горизонтальная локализация достигалась за счёт электрического поля, формируемого специальным ограничительным кольцом на катоде. В результате формировалась структура из более чем 2000 частиц с радиально-неоднородной конфигурацией: в центре формировалась двухслойная (многослойная) неупорядоченная структура, окружённая однослойной упорядоченной оболочкой.

В центральной части наблюдалось плавление структуры: частицы двигались хаотически, не обладая устойчивыми положениями равновесия, тогда как на периферии сохранялась кристаллическая упорядоченность. Такое сосуществование упорядоченной и неупорядоченной областей являлось устойчивым во времени и поддерживалось за счёт неоднородного притока энергии со стороны

плазмы газового разряда. Вид экспериментальной структуры и ее анализ с помощью диаграммы Вороного приведены на рисунке 3.2.

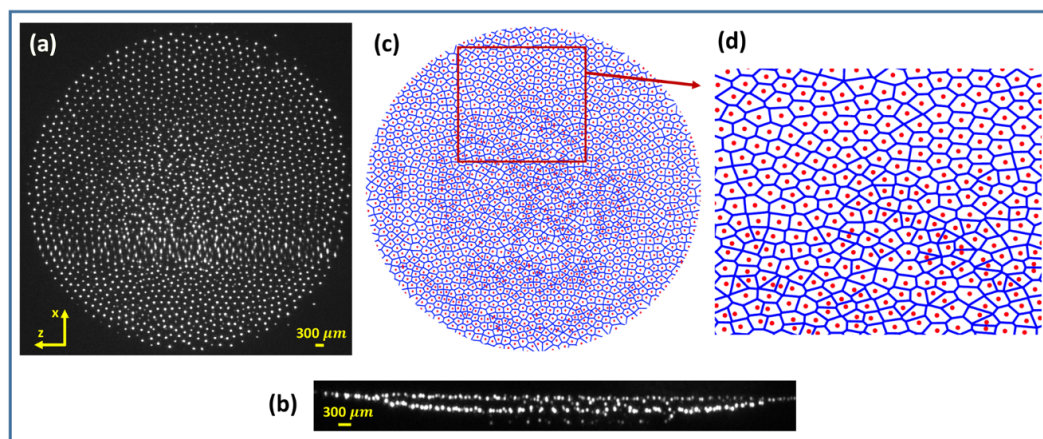


Рисунок 3.2 — Вид экспериментальной структуры пылевых частиц сверху (a) и сбоку (b). Диаграмма Вороного пылевой структуры (a) и ее увеличения в области сосуществования упорядоченной и неупорядоченной областей (b).

Пространственный профиль средней кинетической энергии частиц определялся из анализа траекторий отдельных пылевых частиц, реконструированных с помощью лазерной подсветки и видеоанализа. Максимальная кинетическая температура достигала $T_d \approx 30$ эВ в центре структуры и спадала до $T_d \approx 3$ эВ на периферии, демонстрируя устойчивый температурный градиент. Радиальный профиль кинетических температур пылевых частиц приведен на рисунке 3.3.

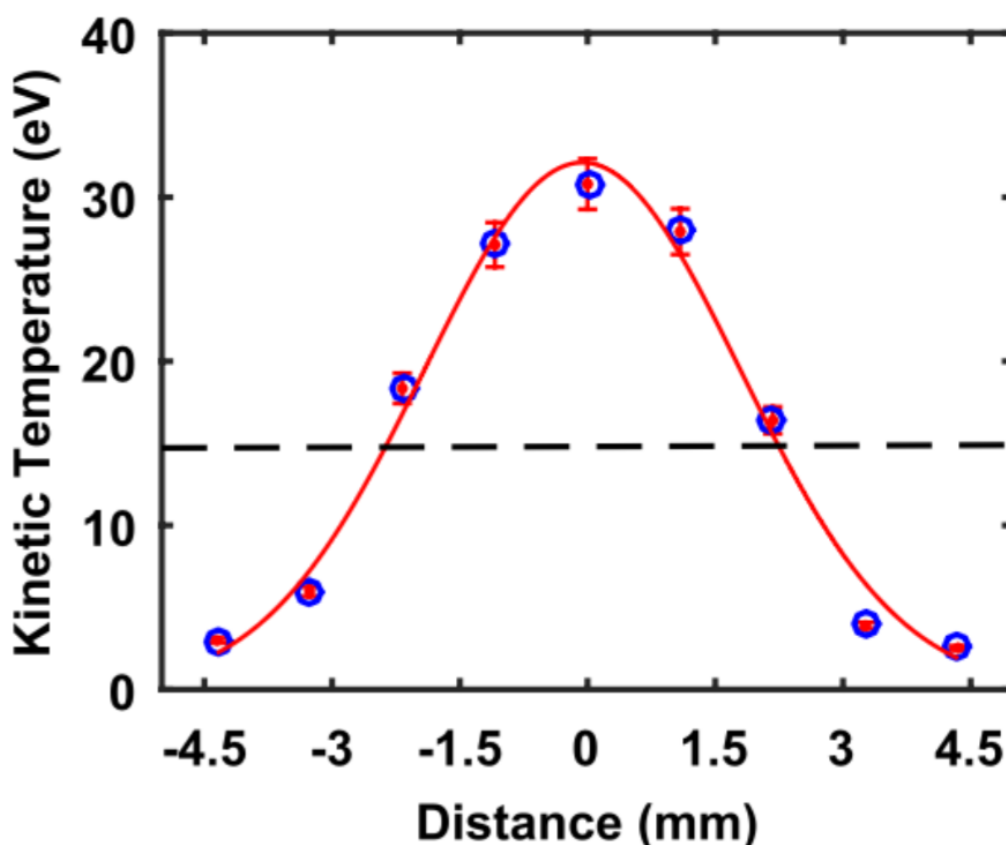


Рисунок 3.3 — Радиальный профиль распределения кинетических температур в экспериментальной пылевой структуре. Нулевая координата по оси абсцисс соответствует центру структуры, где кинетическая температура пылевых частиц достигает своего максимума.

3.1.2 Сравнение модели с экспериментом

Для количественного описания взаимодействия пылевых частиц в экспериментальной структуре оценивался их заряд на основе расчёта заряда одиночной пылевой частицы в потоке плазмы, а также рассчитывалось распределение электростатического потенциала вокруг неё. Расчёт кильватерного потенциала проводился независимо с использованием программного кода COPTIC и OpenDust, при этом полученные результаты по обоим методам хорошо совпадали. Далее полученные значения заряда пылевой частицы и рассчитанный кильватерный потенциал использовались при моделировании динамики пылевых частиц. Заряд фиксировался на всём протяжении расчётов и считался одинаковым для всех частиц системы. Расчитанное распределение электростатического кильватерного потенциала на трёхмерной сетке интерполировалось с использованием

двумерных кубических сплайнов. Переход к двумерному описанию потенциала становился возможным благодаря его радиальной симметрии, что позволяло выполнить дополнительное усреднение. Тепловая карта типичного распределения кильватерного потенциала приведена на рисунке 3.4. Силы взаимодействия между пылевыми частицами рассчитывались в моделировании численным дифференцированием сплайнов в точке положения частицы, на которую действовала сила от соседней частицы.

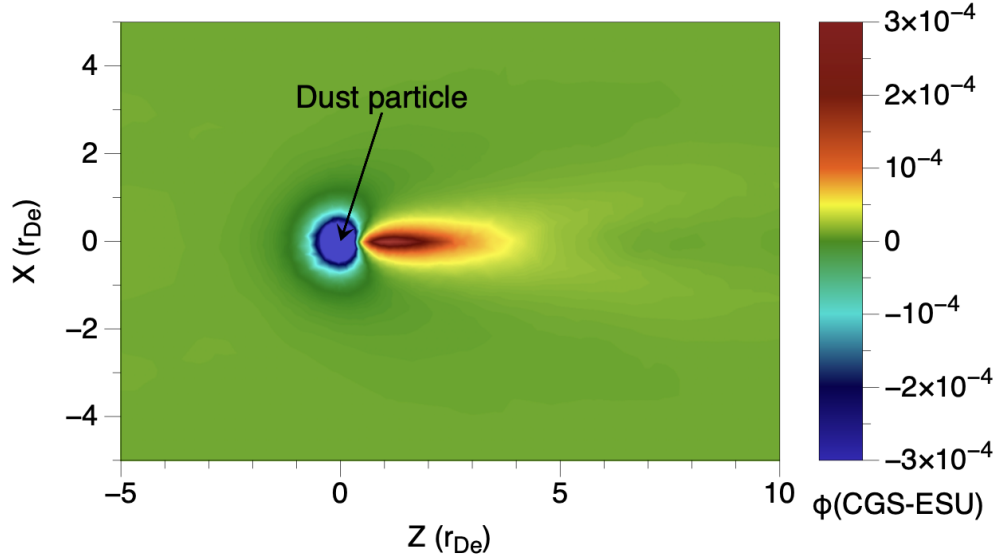


Рисунок 3.4 — Типичный вид анизотропного распределения электростатического потенциала вокруг уединенной пылевой частицы в газоразрядной плазме. Поток ионов направлен слева направо.

Для расчёта заряда выбирались параметры плазмы, оценённые из эксперимента. В условиях эксперимента ключевые параметры плазмы, от которых зависят как распределение кильватерного потенциала, так и значение заряда пылевой частицы, известны лишь в определённом приближённом диапазоне. Температура электронов находится в пределах $T_e \sim 2\text{--}4$ эВ, зарядовая плотность в квазинейтральной области составляет $n_e \sim 0.8\text{--}2 \times 10^{15}$, м⁻³. Частота ион-нейтральных столкновений ν_{in} , необходимая для расчёта как заряда, так и кильватерного потенциала, оценивалась по выражению [108]:

$$\nu_{in} = \frac{P\sigma_{in}\omega_{pi}}{e\sqrt{\frac{k_B T_n n_e}{\epsilon_0}}}, \quad (3.1)$$

где ω_{pi} — ионная плазменная частота, σ_{in} — сечение ион-нейтральных столкновений при заданной скорости потока. Из этого выражения видно, что ν_{in} также зависит от плотности n_e , значение которой, как указано выше, известно лишь в

диапазоне. Эти параметры существенно влияют как на заряд пылевой частицы, так и на форму и амплитуду кильватерного потенциала. В качестве иллюстрации на рисунке 3.5 представлена зависимость продольного профиля кильватерного потенциала вдоль направления плазменного потока для различных значений отношения частоты ион-нейтральных столкновений к плазменной частоте и одном значении внешнего электрического поля, ускоряющего поток плазмы.

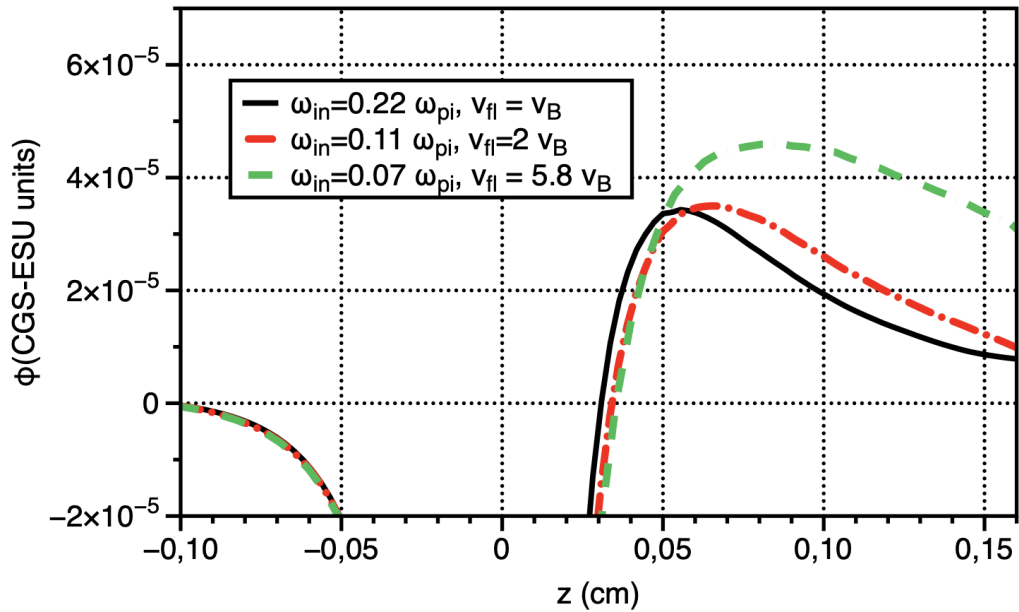


Рисунок 3.5 — Профили рассчитанных распределений потенциала вокруг одиночной пылевой частицы с зарядом $Q = 15000e$ вдоль направления внешнего электрического поля E_{ext} . Три кривые соответствуют разным значениям частоты ион-нейтральных столкновений.

Значение электрического поля определялось из условия равновесия: сила, действующая на пылевую частицу со стороны поля, должна компенсировать силу тяжести. При этом расчётный заряд в указанных условиях оказывался на 20–30% ниже, чем предсказано теорией OML, в силу учёта ион-нейтральных столкновений.

С учётом чувствительности заряда и кильватерного потенциала к варьирующимся параметрам плазмы использовался итерационный подход, заключавшийся в следующем. Из экспериментального диапазона выбирались допустимые значения параметров плазмы. Для них рассчитывалась частота ион-нейтральных столкновений. Затем определялись заряд пылевой частицы и соответствующее продольное электрическое поле, необходимое для его балансировки. На основании этих данных строилось распределение кильватерного потенциала. Получен-

ные значения заряда и потенциала использовались при численном моделировании динамики пылевых частиц в структуре. В ходе моделирования рассчитывался усреднённый по времени радиальный профиль кинетических энергий пылевых частиц, который сравнивался с экспериментальными данными. Описанная процедура повторялась с варьированием параметров плазмы в пределах экспериментально допустимого диапазона до достижения наилучшего соответствия с экспериментом. В результате наилучшее согласие наблюдалось при значениях $n_e = 2 \times 10^{15}, \text{м}^{-3}$ и $T_e = 2.6 \text{ эВ}$. Сравнение экспериментального и расчётного профиля средней кинетической энергии пылевых частиц представлено на рисунке 3.6. Также на рисунке 3.7 представлен вид плазменно-пылевой структуры, полученной в моделировании, которая хорошо соответствует реальной структуре, наблюдавшейся в эксперименте 3.2: в центральной области формируется двухслойная неупорядоченная зона, а на периферии — однослойная упорядоченная область.

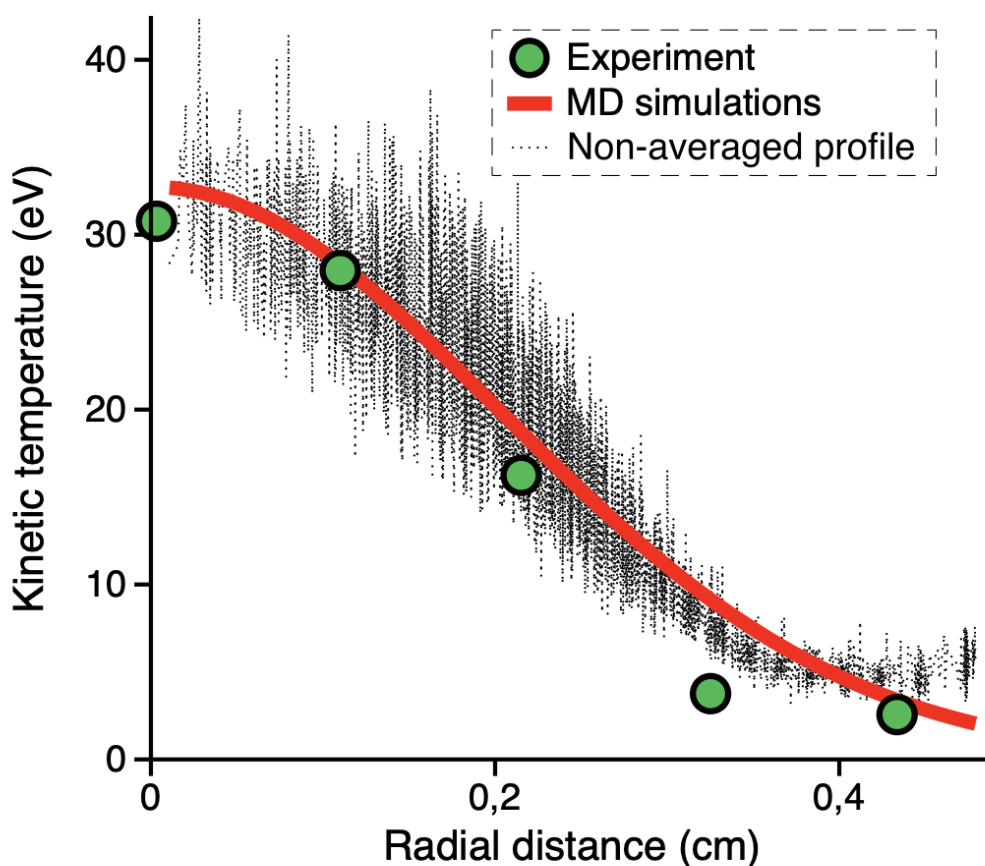


Рисунок 3.6 — Сравнение радиальных профилей средних кинетической энергии, полученных в данной работе экспериментально и в моделировании.

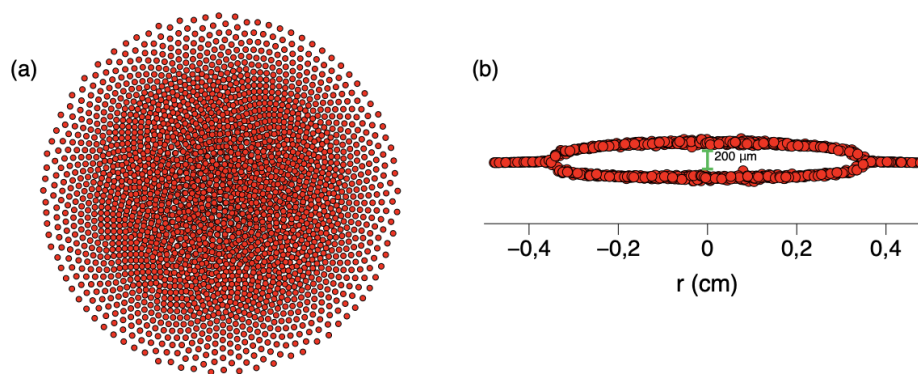


Рисунок 3.7 — Вид плазменно-пылевой структуры, полученной в моделировании: (a) вид сверху и (b) вид сбоку.

Таким образом, достигнутое согласие с экспериментом демонстрирует прогностическую силу предложенного подхода и дополнительно валидирует разработанный программный код OpenDust.

3.2 Влияние потока плазмы на заряд и взаимодействие двух вертикально упорядоченных пылевых частиц

Наличие плазменного окружения, особенно при наличии направленного потока плазмы, существенно усложняет как процесс зарядки пылевых частиц, так и характер их взаимодействия. В этом разделе приводится качественное сравнение результатов моделирования взаимодействия и зарядки двух пылевых частиц, упорядоченных по вертикали в потоке плазмы, с экспериментальными наблюдениями для такой системы.

3.2.1 Эффективное притяжение нижней пылевой частицы к верхней пылевой частице в горизонтальном направлении

Одной из характерных особенностей экспериментальной системы двух пылевых частиц, упорядоченных по вертикали, является наблюдаемое в горизонтальном направлении эффективное притяжение нижней частицы (расположенной

по потоку плазмы) к верхней. Далее приведём результаты экспериментов, которые наглядно подтверждают и позволяют надёжно установить этот эффект.

В экспериментальной работе [134] исследуется динамика упорядоченной пары пылевых частиц в потоке плазмы высокочастотного газового разряда. В этой системе частицы совершают малые колебания около своих равновесных положений под действием флуктуаций стохастической окружающей среды. На основе временных рядов их смещений в вертикальном и горизонтальном направлениях анализируются колебательные спектры.

По результатам спектрального анализа авторы работы [134] восстанавливают характер взаимодействия частиц при малых отклонениях от равновесных положений в рамках гармонического приближения. В частности, определяется производная силы, действующей на нижнюю частицу со стороны верхней, и она оказывается отрицательной. Это означает, что при небольшом горизонтальном смещении нижней пылевой частицы на неё действует возвращающая сила, стремящаяся вернуть её в положение строго под верхней частицей.

Таким образом, результаты эксперимента [134] подтверждают наличие эффективного притяжения нижней пылевой частицы к верхней при горизонтальных отклонениях, значительно меньших вертикального расстояния между ними. Однако этот эксперимент не даёт информации о характере взаимодействия при больших смещениях, сравнимых с межчастичным расстоянием по вертикали.

Явный ответ на этот вопрос дают наблюдения за так называемыми торсионами — вертикально упорядоченными парами пылевых частиц, которые совершают вращательные движения вокруг общей вертикальной оси. Такие структуры самопроизвольно формируются в плазменно-пылевом монослое при снижении мощности газового разряда. Впервые на них обратил внимание Носенко в 2015 году [124].

Согласно экспериментальным наблюдениям, в торсионе верхняя частица выступает в роли лидера: она вращается с той же угловой скоростью, но с опережением по фазе относительно нижней частицы. Нижняя частица, в свою очередь, запаздывает по фазе и может быть смещена в горизонтальном направлении на расстояния, сравнимые с вертикальным межчастичным расстоянием. Механизм вращения объясняется тем, что нижняя частица отталкивает верхнюю, а верхняя — наоборот, эффективно притягивает нижнюю. Именно это притяжение и поддерживает устойчивое вращение всей системы.

Таким образом, наблюдения за торсионами дают прямое экспериментальное подтверждение того, что эффективное притяжение нижней пылевой частицы к верхней проявляется не только при малых отклонениях, но и на расстояниях порядка межчастичного расстояния по вертикали.

Далее обратимся к результатам моделирования, выполненного с использованием кода OpenDust. Параметры, использованные при моделировании, приведены в таблице 7

На рисунке 3.8 представлена тепловая карта распределения радиального электрического поля вокруг пылевой частицы, полученная в цилиндрических координатах. Цветовая шкала показывает направление и величину радиальной проекции электрического поля. В тех областях, где эта проекция положительна, отрицательно заряжённая пылевая частица будет испытывать силу, направленную в сторону верхней частицы, то есть притягиваться к ней в горизонтальном направлении.

Если рассматривать ситуацию, когда вторая пылевая частица располагается в потоке ниже первой, то из распределения поля на тепловой карте видно, что она попадает именно в область с положительной радиальной проекцией электрического поля. Следовательно, такая частица действительно будет испытывать горизонтальное притяжение к верхней, что согласуется с экспериментальными наблюдениями и дополнительно подтверждает наличие описанного механизма взаимодействия.

В реальном эксперименте две пылевые частицы могут находиться в плазменном потоке, который характеризуется различной скоростью. Чтобы проверить, действительно ли моделирование в OpenDust воспроизводит эффективное притяжение нижней частицы к верхней в широком диапазоне условий, были выполнены расчёты горизонтальной силы, действующей на нижнюю частицу, при разных скоростях плазменного потока. Такой подход позволяет не только продемонстрировать качественное согласие с экспериментальными наблюдениями, но и оценить диапазон скоростей, при которых эффект притяжения сохраняется.

Для этого была смоделирована система из двух взаимодействующих пылевых частиц. В моделируемой конфигурации верхняя частица фиксировалась в положении $x = 0, z = -0.5r_{De}$, а нижняя размещалась на расстоянии $\Delta z = 1.0r_{De}$ по вертикали и $\Delta x = 0.5r_{De}$ по горизонтали. Используемые параметры приведены в таблице 6. Заряды пылевых частиц задавались фиксированными, а плазменный поток принимался бесстолкновительным и максвелловским (это было

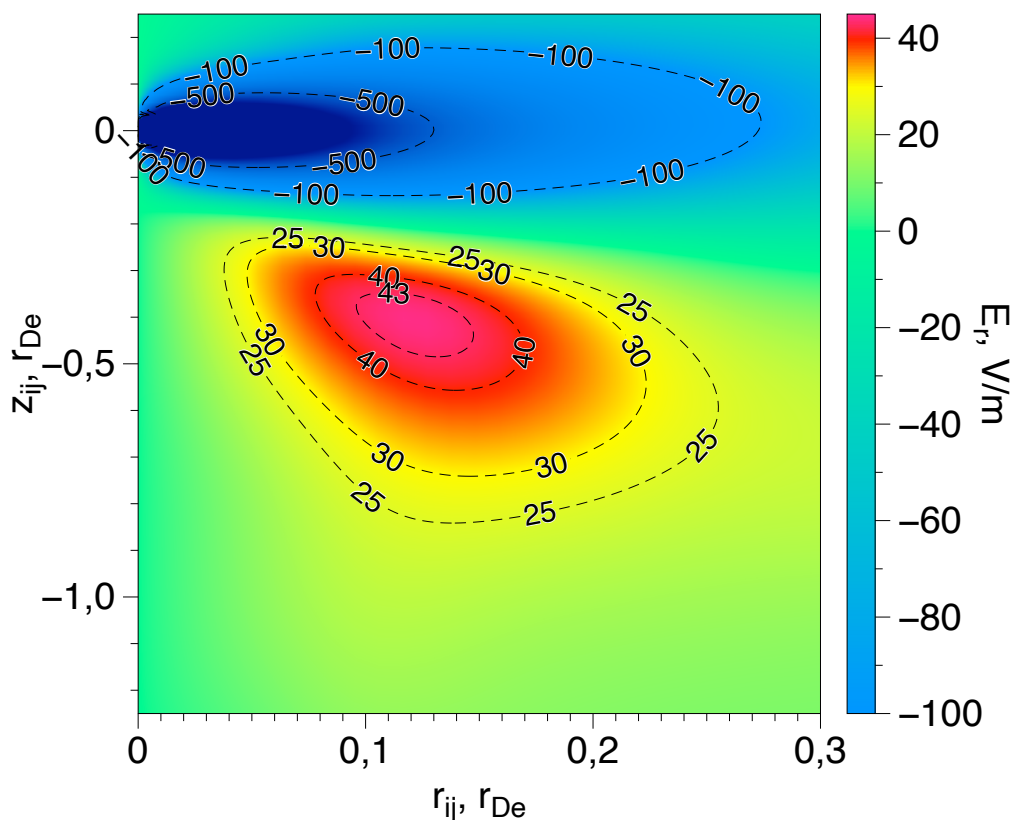


Рисунок 3.8 — Тепловая карта распределения радиального электрического поля вокруг пылевой частицы в цилиндрических координатах. В областях, где радиальная проекция электрического поля положительна, отрицательно заряженная пылевая частица испытывает силу, направленную к верхней частице, то есть притягивается к ней в горизонтальном направлении.

сделано намеренно, чтобы сравниться дополнительно с другими подходами). При вычислении полной силы на каждую частицу учитывались как ионно-пылевые силы, так и силы взаимодействия между самими пылевыми частицами согласно выражению (2.18).

На рисунке 3.9 показана зависимость восстанавливающей горизонтальной силы, действующей на нижнюю частицу, от числа Маха плазменного потока. В отсутствие потока две одноимённо заряженные частицы отталкивались бы в горизонтальном направлении. Однако при наличии плазменного потока появляется выраженный эффект: нижняя частица начинает испытывать горизонтальное притяжение к верхней, что связано с фокусировкой ионов позади верхней частицы по направлению потока, в то время как верхняя частица продолжает отталкиваться от нижней.

Полученные с помощью OpenDust результаты демонстрируют качественное совпадение с экспериментальными наблюдениями: притяжение нижней

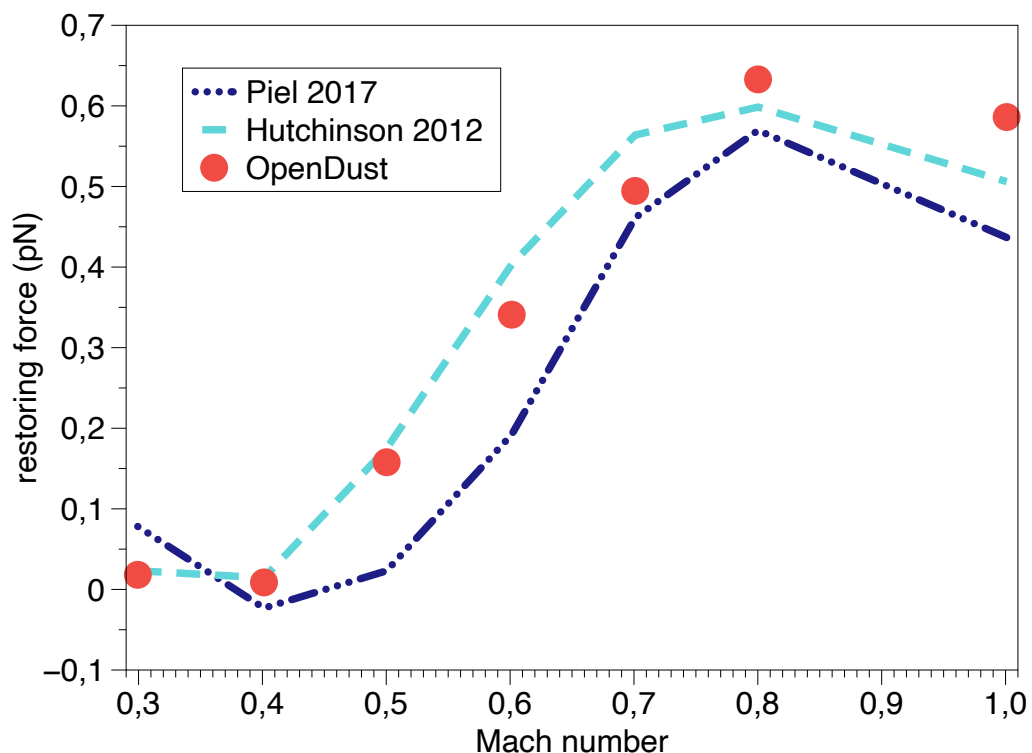


Рисунок 3.9 — Восстанавливающая горизонтальная сила, действующая на нижнюю пылевую частицу. Результаты OpenDust представлены красными точками, светло-голубая пунктирная линия и темно-синяя штрих-пунктирная линия соответствуют данным из [162] и [8].

частицы к верхней проявляется в широком диапазоне скоростей плазменного потока. Более того, сопоставление с расчётами из работ [8; 162] показало и количественное согласие, что дополнительно подтверждает корректность реализованного в OpenDust подхода.

3.2.2 Зарядка нижней пылевой частицы в системе из двух пылевых частиц в плазменном потоке

В данном подразделе рассматриваются особенности зарядки нижней пылевой частицы в системе из двух вертикально упорядоченных пылевых частиц, находящихся в плазменном потоке. В отличие от изолированной частицы, её заряд определяется не только локальными параметрами плазмы, но и влиянием верхней частицы за счёт перераспределения ионных потоков. В результате заряд нижней

частицы по абсолютной величине оказывается меньше, чем заряд одиночной пылевой частицы.

Далее приведём результаты экспериментов, которые подтверждают уменьшение заряда нижней пылевой частицы по сравнению с зарядом одиночной частицы и демонстрируют влияние верхней частицы на процесс её зарядки.

Основным методом, позволяющим судить о зарядах пылевых частиц в вертикально упорядоченных структурах, является анализ частот их горизонтальных колебаний. Эти колебания связаны с движением частиц в электрической ловушке, которая удерживает их от разлёта в горизонтальном направлении. Частоты могут быть определены, например, по спектрам колебаний, как это выполнено в работе [134].

В экспериментах, где горизонтальная ловушка создаётся стеклянной коробкой, расположенной на нижнем электроде в плазме высокочастотного газового разряда, поле ловушки предполагается практически однородным по высоте пылевой структуры. В таких условиях различия частот горизонтальных колебаний напрямую связываются с изменением зарядов частиц. Так, в системе из двух пылевых частиц, рассмотренной в работе [134], частота колебаний нижней частицы снижается до 0.75 частоты верхней, что указывает на уменьшение её заряда примерно до 75 % от заряда верхней. К аналогичным качественным выводам приводит и анализ экспериментов с вертикальными цепочечными структурами пылевых частиц — заряд нижней частицы снижается под действием верхней [10].

Далее приведены результаты моделирования с помощью кода OpenDust. Основной целью является анализ зависимости заряда нижней пылевой частицы от её положения относительно верхней.

Параметры, использованные при моделировании, приведены в таблице 7. Одна пылевая частица фиксирована в пространстве, а заряд второй определяется как функция от её положений относительно верхней.

Результаты моделирования представлены в виде тепловой карты 3.10, на которой по вертикальной оси отложено расстояние между частицами вдоль направления плазменного потока, а по горизонтальной — их радиальное смещение. Цветовая шкала отражает рассчитанные значения заряда исследуемой частицы: области с более тёплыми оттенками соответствуют меньшему по модулю (менее отрицательному) заряду, а более холодные оттенки указывают на увеличение его отрицательной величины. Положение фиксированной верхней частицы обо-

значено на рисунке, что позволяет наглядно сопоставить изменение заряда с пространственным расположением нижней частицы.

Анализ полученных данных показывает, что по мере приближения нижней частицы к верхней её заряд становится менее отрицательным. Максимальное относительное уменьшение достигает примерно 0.75 по сравнению с зарядом изолированной частицы. Подобное поведение объясняется фокусировкой ионного потока в области между частицами, которая приводит к увеличению потока ионов на нижнюю частицу и, как следствие, снижению её отрицательного заряда.

Важным результатом проведённого моделирования является его согласованность с имеющимися экспериментальными данными. Кроме того, полученные в OpenDust зависимости количественно совпадают с результатами численного моделирования, выполненного с использованием пакетов DiP3D и DRIAD [10; 49], что подтверждает корректность выбранного подхода и демонстрирует его надёжность для анализа процессов зарядки в многокомпонентных плазменно-пылевых системах.

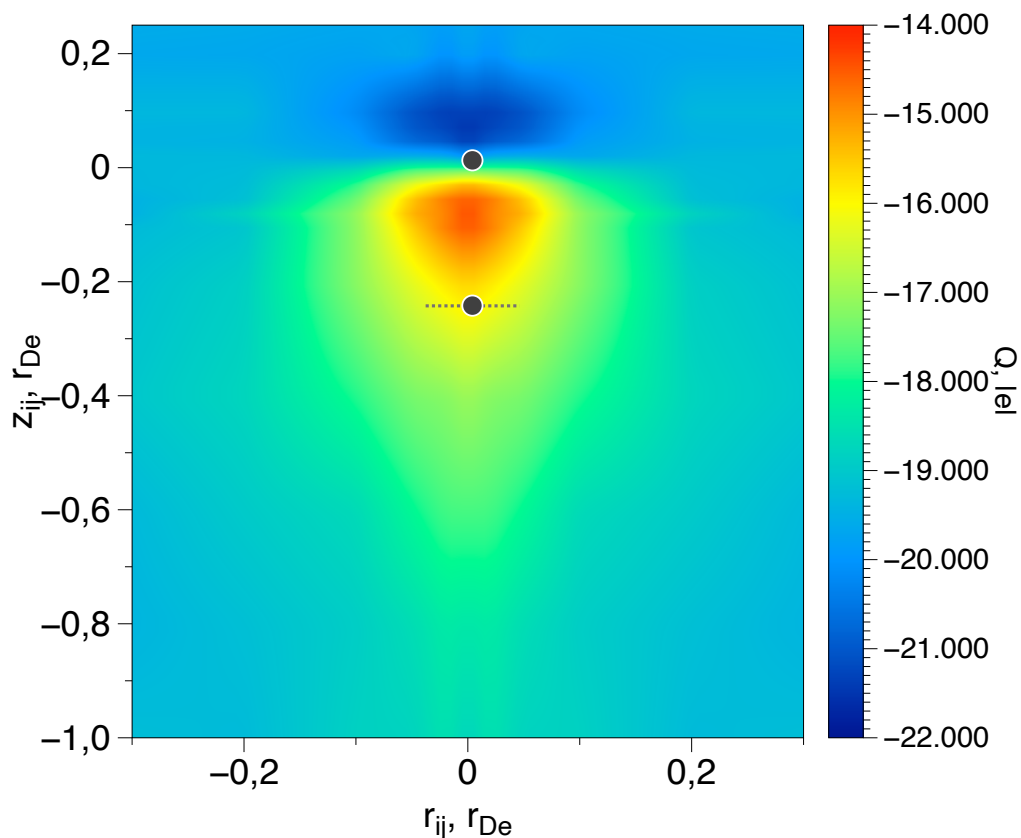


Рисунок 3.10 — Тепловая карта распределения заряда пылевой частицы в зависимости от её положения относительно второй частицы, представленное в цилиндрических координатах.

Эффект снижения абсолютного значения заряда нижней частицы имеет существенные последствия при построении силовой матрицы взаимодействий между частицами. Так как обе частицы находятся во внешнем электрическом поле, производная силы по координате может менять знак по сравнению с тем случаем, когда заряд считается постоянным. В частности, в упорядоченных структурах пылевых частиц, где частицы совершают малые колебания относительно положения равновесия, такой эффект может приводить к изменению знака элементов силовой матрицы. Это явление согласуется с экспериментальными наблюдениями, представленными в работе [134], и подчёркивает необходимость самосогласованного учёта зарядки пылевых частиц при анализе взаимодействий.

Как будет обсуждаться в Главе 4, изменение производных сил, обусловленное вариацией зарядов, оказывает непосредственное влияние на свойства упорядоченных структур, включая распределение кинетических температур и особенности перекачки энергии.

3.3 Выводы к третьей главе

В настоящей главе проведено детальное сопоставление результатов самосогласованного численного моделирования с данными экспериментов по динамике пылевых структур в газоразрядной плазме. Основной акцент был сделан на анализе и интерпретации наблюдаемого в эксперименте устойчивого сосуществования двух различных областей в плазменно-пылевой подсистеме: центральной неупорядоченной двухслойной зоны и однослойной упорядоченной периферии.

В ходе моделирования была воспроизведена пространственная структура пылевой системы, а также рассчитаны радиальные профили кинетической энергии пылевых частиц. Эти профили оказались в хорошем количественном согласии с экспериментальными измерениями, что подтвердило корректность выбранного численного подхода и его способность описывать ключевые процессы в плазменно-пылевой системе. Самосогласованное включение кильватерного потенциала, рассчитанного на основе параметров эксперимента, позволило адекватно учесть вклад фокусировки ионных потоков в характер взаимодействий между пылевыми частицами. Именно это стало критически важным для воспроизведения наблюдаемой в эксперименте пространственной неоднородности.

Результаты моделирования показали, что формирование неупорядоченной области в центре и упорядоченной периферии связано с неоднородным распределением кинетической энергии частиц и особенностями межчастичного взаимодействия в плазме с направленным потоком. Анализ продемонстрировал, что в центральной области система оказывается в условиях повышенного притока энергии, что приводит к плавлению структуры, тогда как на периферии поддерживается кристаллический порядок.

Таким образом, проведённые исследования и полученные в ходе моделирования результаты позволили дать физическое объяснение наблюдаемому в эксперименте самоподдерживающемуся неравновесному сосуществованию центральной неупорядоченной двухслойной области и упорядоченной однослойной периферийной области пылевой подсистемы.

Результаты этой главы подтверждают положение 1, выносимое на защиту: «Разработанная модель самосогласованной динамики плазмы и пылевых частиц в ионном потоке для расчёта сил, зарядов пылевых частиц, распределения плотности ионов и динамики пылевых частиц на основе метода асимметричной молекулярной динамики описывает явления на временных масштабах нескольких десятков секунд. »

Таблица 6 — Параметры, используемые для моделирования бесстолкновительного максвелловского плазменного потока вокруг двух пылевых частиц

Параметр	Значение	Единицы измерения
----------	----------	-------------------

Параметры плазмы

Температура электронов T_e	29011	К
Температура ионов T_i	290.11	К
Концентрация заряженных частиц плазмы в квазинейтральной области n_{inf}	$1e14$	$1/m^3$
Масса иона m_i	$6.6335209e-27$	kg
Число Маха плазменного потока M	0.3 ... 1.0	-

Параметры моделирования

Радиус цилиндрической расчетной области R	3	дебаевский радиус электронов
Высота цилиндрической расчетной области H	6	дебаевский радиус электронов
Число дискретных частиц N	2^{17}	-
Число шагов интегрирования n	50000	-
Шаг интегрирования	$1e-9$	s

Параметры пылевых частиц

Радиус пылевой частицы r_d	$12e-6$	m
Заряды пылевых частиц Q_d	40900	элементарных зарядов
Координаты первой пылевой частицы $(x_d; y_d; z_d)$	(0; 0; -0.5)	дебаевский радиус электронов
Координаты второй пылевой частицы $(x_d; y_d; z_d)$	(0.5; 0; 0.5)	дебаевский радиус электронов

Таблица 7 — Параметры моделирования зарядки пылевых частиц

Параметр	Значение	Единицы измерения
Температура электронов T_e	58022	К
Температура нейтралов T_n	290	К
Концентрация заряженных частиц n	1×10^{14}	м^{-3}
Масса иона m_i	6.63×10^{-26}	кг
Давление нейтралов P	18.13	Па
Внешнее электрическое поле E_z	2614	В/м
Скорость ионного потока v_{i0}	1138	м/с
Дебаевский радиус r_{De}	0.00166	м
Плазменная частота ионов ω_{pi}	2.09×10^6	рад/с
Частота ион-нейтральных столкновений ν_{in}	5.55×10^6	с^{-1}
Скорость Бома v_B	3475	м/с
Радиус пылевой частицы r_d	4.445×10^{-6}	м

Глава 4. Распределение средних кинетических энергий и перекачка энергии в упорядоченных структурах пылевых частиц с учетом плазменного окружения

Одним из проявлений влияния эффективной невзаимности взаимодействий между пылевыми частицами в потоке плазмы газового разряда являются специфические свойства распределения средних кинетических энергий и перекачки энергии в упорядоченных пылевых структурах. Под упорядоченными структурами здесь понимаются системы, в которых пылевые частицы совершают малые колебания вокруг своих равновесных положений под действием внешних флуктуаций, возникающих как в результате взаимодействия с нейтральным газом, так и вследствие хаотического дрожания плазменного окружения. Благодаря возможности прямого наблюдения траекторий движения пылевых частиц методами оптической микроскопии, распределение средних кинетических энергий, а также перекачки энергии могут быть исследованы в эксперименте посредством анализа динамики частиц.

Как показано в предыдущих главах, разработанный программный код OpenDust позволяет рассчитывать заряды пылевых частиц и силы, действующие на них, с учётом влияния плазмы и взаимного расположения частиц в кластерах произвольной формы. Это также даёт возможность определять, как силы изменяются при малых смещениях частиц, то есть находить производные сил, необходимые для построения силовой матрицы. Такая матрица описывает поведение системы при малых отклонениях от равновесия. Благодаря этому становится возможным самосогласованно исследовать динамику и указанные свойства упорядоченных структур пылевых частиц без использования упрощённых моделей.

Ключевую роль в формировании силовой матрицы играет не только распределение электростатического потенциала вокруг пылевых частиц, как это предполагается в ряде теоретических моделей, но и изменение зарядов самих частиц при их смещении. Этот эффект вносит существенный вклад в значения производных сил и, соответственно, в характеристики колебательной динамики системы. Так, в экспериментальной работе, посвящённой паре вертикально выстроенных пылевых частиц [134], показано, что учёт изменения заряда нижней частицы при смещении верхней приводит к существенной модификации силовой матрицы.

Таким образом, реализованная возможность самосогласованного расчёта производных сил является необходимым элементом для корректного построения матрицы взаимодействий, анализ которой проводится в данной главе с целью классификации свойств распределения средних кинетических энергий и перекачки энергии в упорядоченных структурах пылевых частиц.

Как показано в литературном обзоре, в системах упорядоченных пылевых структур наблюдается неравномерное распределение кинетической энергии пылевых частиц, которое обусловлено не только различием внешних случайных сил, действующих на отдельные частицы, но и эффективной невзаимностью их взаимодействий. Такое неоднородное распределение средних кинетических энергий проявляется в различных пылевых структурах — от упорядоченных пар пылевых частиц до моно- и бислоев. Помимо неравномерного распределения средней кинетической энергии, наблюдается также её локализация. Например, в случае плазменно-пылевого монослоя максимальные значения средней кинетической энергии концентрируются в центральной части структуры.

Дополнительно, невзаимность взаимодействий существенно влияет на перекачку энергии в упорядоченных пылевых структурах, делая их поведение принципиально отличным от классических систем. Экспериментально перекачка энергии в таких структурах может быть исследован путём локальной стохастической раскачки отдельных пылевых частиц, например, с использованием лазерного излучения.

Несмотря на активное изучение аномального распределения средних кинетических энергий, а также особенностей перекачки энергии в упорядоченных структурах пылевых частиц, до настоящего времени не был выработан единый теоретический подход, позволяющий классифицировать, при каких параметрах невзаимности взаимодействий проявляются те или иные свойства. В данной главе показано, что такой подход может быть сформулирован в рамках физики неэрмитовых систем, которая уже активно применяется для описания других физических объектов с нарушенной симметрией взаимодействий, таких как метаматериалы и системы оптически связанных наночастиц. При этом важную роль играет развитый в предыдущих главах метод самосогласованного расчёта сил и их производных, позволяющий определять силовую матрицу в пылевых структурах. В совокупности с неэрмитовой классификацией, это обеспечивает надёжную основу для количественного анализа и прогнозирования свойств упорядоченных систем пылевых частиц в различных условиях.

4.1 Система невязанно связанных гармонических осцилляторов в термостате Ланжевена как модель упорядоченных структур пылевых частиц в плазме газового разряда

Упорядоченные системы пылевых частиц, находящиеся в плазме газового разряда, могут быть описаны системой уравнений, аналогичной системе связанных гармонических осцилляторов. В случае, когда смещения пылевых частиц от их равновесных положений малы, силы, действующие на частицы, могут быть разложены в ряд по малым смещениям. Таким образом, динамика пылевой структуры сводится к анализу системы линейных дифференциальных уравнений.

Однако, в отличие от классических систем гармонических осцилляторов, где взаимодействия подчиняются третьему закону Ньютона, в присутствии неравновесного плазменного окружения результирующая силовая матрица может стать несимметричной. При этом важно подчеркнуть, что речь идёт не о фундаментальном нарушении третьего закона Ньютона, а о кажущемся его нарушении, которое наблюдается, если рассматривать только подсистему пылевых частиц, игнорируя плазменное окружение как активную среду. Это обусловлено тем, что поток ионов в плазме создаёт асимметричное взаимодействие между частицами, и реакция со стороны плазмы не учитывается в балансе сил внутри этой подсистемы, что и приводит к кажущемуся нарушению закона равенства сил. Таким образом, система приобретает свойства невязанности, что приводит к появлению новых эффектов в её динамике.

Для описания таких систем можно записать их уравнения движения в матричной форме с учётом взаимодействия с термостатами Ланжевена, которые моделируют взаимодействие с хаотичным окружением:

$$\hat{M}\ddot{\vec{q}}(t) + \hat{F}\dot{\vec{q}}(t) + \hat{L}\vec{q}(t) = \vec{\eta}(t), \quad (4.1)$$

где $\hat{M}$ и $\hat{L}$ — диагональные матрицы масс и трения, t — время, $\vec{\eta}$ — вектор независимых флуктуационных гауссовых сил со средним, равным нулю, для которых выполняются условия $\eta_i(t)\eta_i(t') = 2\gamma_i T_i \delta(t - t')$ и $\eta_i(t)\eta_j(t') = 0$. Здесь γ_i — диагональные элементы матрицы $\hat{L}$, а δ — дельта-функция.

Интересным вопросом является возможность симметризации такой системы. Рассмотрим простейший случай двух связанных гармонических осцилляторов без учета слагаемых, связанных с термостатами. Уравнения движения такой

системы принимают вид:

$$m_1 \ddot{q}_1 + f_{11} q_1 + f_{12} q_2 = 0, \quad (4.2)$$

$$m_2 \ddot{q}_2 + f_{21} q_1 + f_{22} q_2 = 0, \quad (4.3)$$

где q_1, q_2 — одномерные смещения осцилляторов с массами m_1, m_2 , соответственно; $f_{11}, f_{12}, f_{21}, f_{22}$ — диагональные и недиагональные элементы матрицы взаимодействий.

Если матрица взаимодействий симметрична, т.е. $f_{12} = f_{21}$, то система является взаимной, удовлетворяет третьему закону Ньютона и для нее можно записать стандартные выражения для кинетической и потенциально энергии, сумма которых будет сохраняться в процессе ее динамики. Однако, если $f_{12} \neq f_{21}$, система становится невзаимной.

Тем не менее, даже в этом случае можно выполнить преобразование системы так, чтобы она могла быть приведена к симметричной форме [168]. Для этого разделим уравнения (4.2, 4.3) на модули соответствующих элементов матрицы взаимодействий $|f_{12}|$ и $|f_{21}|$ и введём новые эффективные массы $\tilde{m}_1 = \frac{m_1}{|f_{12}|}$, $\tilde{m}_2 = \frac{m_2}{|f_{21}|}$. Тогда уравнения движения запишутся в следующем симметричном виде:

$$\tilde{m}_1 \ddot{q}_1 + \frac{f_{11}}{|f_{12}|} q_1 + \text{sign}(f_{12}) q_2 = 0, \quad (4.4)$$

$$\tilde{m}_2 \ddot{q}_2 + \text{sign}(f_{21}) q_1 + \frac{f_{22}}{|f_{21}|} q_2 = 0. \quad (4.5)$$

Таким образом, несмотря на невзаимность взаимодействий в системе с двумя степенями свободы, она является симметризуемой. Однако, её кинетическая энергия, входящая в сохраняющийся Гамильтониан, теперь выражается через эффективные массы и элементы преобразованной матрицы взаимодействий.

В связи с этим возникает следующий важный вопрос: можно ли аналогичный подход использовать для более сложных систем с большим числом степеней свободы?

В отличие от систем с двумя степенями свободы, системы с произвольным числом степеней свободы не всегда остаются симметризуемыми при наличии невзаимных взаимодействий [7]. Для наглядности рассмотрим систему с тремя

степенями свободы, взаимодействия в которой описываются следующей невязимной матрицей:

$$\hat{F} = \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} \end{bmatrix}. \quad (4.6)$$

Чтобы симметризовать эту матрицу, можно масштабировать элементы её строк путём соответствующего преобразования масс системы. Умножая первую строку на $\frac{f_{31}}{f_{13}}$, а вторую на $\frac{f_{32}}{f_{23}}$, получаем преобразованную матрицу взаимодействий:

$$\hat{F} = \begin{bmatrix} \frac{f_{31}}{f_{13}}f_{11} & \frac{f_{31}}{f_{13}}f_{12} & f_{31} \\ \frac{f_{32}}{f_{23}}f_{21} & \frac{f_{32}}{f_{23}}f_{22} & f_{32} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} \end{bmatrix}, \quad (4.7)$$

Она окажется симметричной, если выполнено условие $f_{21}f_{13}f_{32} = f_{23}f_{31}f_{12}$. Таким образом, в отличие от системы с двумя степенями свободы, система с тремя или более степенями свободы остаётся симметризуемой только при выполнении определённых условий на матрицу взаимодействий.

В общем случае для системы с $n \geq 3$ степенями свободы, описываемой уравнением

$$\hat{M}\ddot{\vec{q}}(t) + \hat{F}\vec{q}(t) = 0, \quad (4.8)$$

условие её симметризуемости определяется возможностью одновременной симметризации матриц взаимодействий $\hat{F}$ и масс $\hat{M}$ [169; 170]. В случае диагональной матрицы масс это условие сводится к следующему набору ограничений:

$$d_i f_{ij} = d_j f_{ji}; 1 \leq i < j \leq n, \quad (4.9)$$

где d_i — переменные положительные величины. Данный результат можно получить по аналогии с рассмотренным выше случаем $n = 3$. Симметризация системы приводит к преобразованию матриц масс и взаимодействий, в результате которого их строки масштабируются. Это преобразование эквивалентно умножению этих матриц слева на диагональную матрицу $\hat{D}$, содержащую на главной диагонали элементы d_i , т.е. $\hat{M} \rightarrow \hat{D}\hat{M}$ и $\hat{F} \rightarrow \hat{D}\hat{F}$.

Таким образом, невязимность взаимодействий не всегда приводит к невозможности симметризовать систему, однако для этого требуется выполнения дополнительных условий.

4.2 Стационарная динамика системы осцилляторов в контакте с ланжевеновским термостатом

После преобразования Фурье уравнений движения (4.1) они приобретают вид

$$-\omega^2 \hat{M} \vec{q}(\omega) + \hat{F} \vec{q}(\omega) - i\omega \hat{L} \vec{q}(\omega) = \vec{\eta}(\omega), \quad (4.10)$$

где ω - координата в частотном пространстве. Обратная матрица $\hat{G} = \left(-\omega^2 \hat{M} + \hat{F} - i\omega \hat{L}\right)^{-1}$ является функцией Грина, который обеспечивает решение системы уравнений (4.1) [146]. Потоки энергии между термостатами и соответствующими степенями свободы J_i выражаются через элементы этой функции Грина [146]

$$J_i \stackrel{def}{=} \langle \dot{q}_i \eta_i - \gamma_i \dot{q}_i^2 \rangle = \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^n \gamma_i \gamma_k \left(T_i \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 [\hat{G}_{ik} \hat{G}_{ki}^*] d\omega - T_k \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 |\hat{G}_{ik}|^2 d\omega \right). \quad (4.11)$$

4.2.1 Критерий достижимости детального баланса

Для систем с симметричной (взаимной) матрицей взаимодействия коэффициенты при температурах (4.11) будут равны в силу симметрии матрицы функций Грина. В этом случае равенство температур термостатов друг другу приводит к обнулению каждого из потоков энергии от термостата к i -й степени свободы системы, т.е. к детальному равновесию или балансу (ДБ). В общем случае условие ДБ, согласно выражению (4.11), образует систему n линейных уравнений относительно n неизвестных T_i . Эта система имеет бесконечное число решений, если ее матрица сингулярна, или единственное решение $T_i = 0$ в противном случае. Для симметризуемой системы невязанно связанных гармонических осцилляторов эта матрица сингулярна, поскольку существует преобразование от изначально невязанной системы к взаимно обратимой. Однако температуры термостатов в ДБ уже не обязательно равны друг другу.

Для систем, которые не являются симметризуемыми, эта матрица не может быть сингулярной. Чтобы показать это, рассмотрим соотношения, которые уста-

навливаются между средними по времени для всех возможных одновременных корреляторов переменных $\dot{q}_i, q_i$ [143; 144]

$$\langle q_i \dot{q}_i \rangle = 0, \quad (4.12)$$

$$\langle q_i \dot{q}_j \rangle = -\langle q_j \dot{q}_i \rangle, \quad (4.13)$$

$$\sum_{k=1}^n f_{ik} \langle q_k \dot{q}_i \rangle + \gamma_i \langle \dot{q}_i^2 \rangle = \langle \dot{q}_i \eta_i \rangle, \quad (4.14)$$

$$\sum_{k=1}^n f_{ik} \langle q_k \dot{q}_j \rangle + \gamma_i \langle \dot{q}_i \dot{q}_j \rangle + \sum_{k=1}^n f_{jk} \langle q_k \dot{q}_i \rangle + \gamma_j \langle \dot{q}_j \dot{q}_i \rangle = 0 \quad (4.15)$$

$$\langle \dot{q}_i \dot{q}_j \rangle - \sum_{k=1}^n f_{ik} \langle q_k q_j \rangle - \gamma_i \langle \dot{q}_i q_j \rangle = 0. \quad (4.16)$$

Число неизвестных в этой системе уравнений, а именно квадратичных членов на $\dot{q}_i, q_i$, равно числу уравнений. Это означает, что они могут быть выражены явно через ненулевые корреляторы $\langle \dot{q}_i \eta_i \rangle$. Когда потоки энергии от всех термостатов к системе равны нулю, уравнения (4.14) принимают следующий вид

$$\sum_{k=1}^n f_{ik} \langle q_k \dot{q}_i \rangle = 0, \quad (4.17)$$

что означает, что правая часть линейной системы уравнений (4.12-4.16) является нулевым столбцом. В этом случае для однородной системы существование ненулевого решения эквивалентно равенству нулю определителя ее матрицы. Во-первых, это возможно, если строки матрицы, соответствующие уравнениям (4.17), линейно зависимы. Можно показать, что это условие совпадает с условием консервативности линейной динамической системы (4.9). Во-вторых, эта матрица будет сингулярной, если ее остальные строки, соответствующие уравнениям (4.12, 4.13) и (4.15, 4.16), линейно зависимы. Однако, если предположить их линейную зависимость, то матрица будет сингулярной и в том случае, если потоки от термостатов к динамической системе не равны нулю, а значит, согласно теореме Кронекера-Капелли, будет иметь либо нулевые решения, либо бесконечное число решений, что невозможно. Таким образом, полученное противоречие доказывает, что для систем невязанно связанных гармонических осцилляторов, которые являются несимметризуемыми, ДБ невозможен.

Этот результат позволяет построить критерий достижимости ДБ между подсистемой пылевых частиц и стохастическим воздействием окружающей среды.

В случае, если силовая матрица, которая описывает динамику упорядоченной системы пылевых частиц, не является симметризуемой, достижение детального баланса невозможно. В случае же симметризуемости силовой матрицы возможны два варианта. Если диагональная матрица $\hat{D}$ имеет отрицательные элементы, это означает, что набор температур термостатов, который приводит к достижению ДБ, должен включать отрицательные температуры, а это невозможно для физической системы, поскольку все значения температур термостатов, описывающие интенсивность воздействия стохастической среды, должны быть положительными. Таким образом, достижимость ДБ для упорядоченной системы пылевых частиц возможна тогда и только тогда, когда матрица взаимодействий симметризуема с помощью диагональной матрицы $\hat{D}$ со всеми положительными элементами.

4.3 Эффекты вне взаимности

В данном разделе рассматриваются эффекты, возникающие в системах механических осцилляторов, взаимодействующих несимметричным образом, после их длительного контакта с системой термостатов Ланжевена. Обсуждается, какие из этих эффектов проявляются уже в системах с несимметричной силовой матрицей, в которых достигается ДБ, а какие являются характерными исключительно для систем, в которых достижение ДБ невозможно.

4.3.1 Теорема о равнораспределении

Одна из фундаментальных теорем классической статистической механики — это теорема об равнораспределении энергии. Одним из её следствий является равенство средних по времени кинетических энергий различных степеней свободы в консервативных эргодических механических системах. Однако система связанных линейных механических осцилляторов не является эргодической из-за своей интегрируемости и невозможности передачи энергии между различными модами [171]. В то же время, если рассматривать такую систему в контакте с тер-

мостатом Ланжевена, что соответствует помещению системы в газ при заданной температуре, начинает действовать теорема о равнораспределении. Она позволяет сделать вывод, что через определённое время средние кинетические энергии связанных осцилляторов выравниваются, принимая значение половину температуры стохастической окружающей среды. Это равнораспределение выполняется в системах с симметричной матрицей взаимодействия, но её асимметрия приводит к нарушению равнораспределения.

Для невзаимных систем, в которых достигается ДБ, можно сформулировать некоторое обобщение данного следствия теоремы об равнораспределении энергии. Для этого рассмотрим систему связанных осцилляторов, контактирующую с термостатами Ланжевена, температуры которых могут быть различными (4.1). Так как в системе достигается ДБ, её матрица взаимодействия $\hat{F}$ может быть приведена к симметричному виду путём умножения системы на диагональную положительно определённую матрицу $\hat{D}$. Замена температур термостатов $\hat{T} \rightarrow \hat{D}\hat{T}$ и масс $\hat{M} \rightarrow \hat{D}\hat{M}$ на эффективные приводит систему к симметричной форме, для которой уже выполняются выводы о равнораспределении кинетической энергии. Таким образом, для систем связанных линейных механических осцилляторов с асимметричной матрицей взаимодействия, в которых достигается ДБ, выполняется некоторое обобщение теоремы об равнораспределении. Согласно этому обобщению, можно подобрать такой набор температур термостатов, при котором средние кинетические энергии степеней свободы будут равны половинам температур соответствующих термостатов. В этом случае соотношение между температурами термостатов, как и между средними кинетическими энергиями, определяется отношением элементов диагональной матрицы $\hat{D}$, на которую необходимо умножить систему, чтобы получить симметричную матрицу взаимодействия.

В случае невзаимных систем, в которых достижение ДБ невозможно, подобное обобщение теоремы о равнораспределении становится невозможным. Это означает, что нельзя подобрать такой набор температур термостатов, при котором средняя кинетическая энергия степеней свободы совпадала бы с половинами температур соответствующих термостатов. Чтобы это показать, необходимо использовать флуктуационно-диссипативную теорему (FDT). Действительно, согласно FDT, поток энергии между осциллятором и его термостатом выражается

как [144]:

$$J_i = \gamma_i (T_i - T_i^{eff}), \quad (4.18)$$

$$T_i^{eff} = \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^n \gamma_k T_k \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 |\hat{G}_{ik}|^2 d\omega, \quad (4.19)$$

где T_i^{eff} — две средние кинетические энергии i -го осциллятора. Заметим, что уравнение (4.18) представляет собой уравнение (4.11) с подставленным значением $\langle \dot{q}_i \eta_i \rangle = \gamma_i T_i$ согласно FDT. Следовательно, невозможность выбора подходящего набора температур термостатов в неконсервативной системе напрямую следует из невозможности достигнуть ДБ.

4.3.2 Классификация матрицы переноса в рамках физики неэрмитовых систем

Введем матрицу переноса $\hat{S}$, которая определяет связь между потоками энергии от термостатов к системе осцилляторов и температурами термостатов. Обозначим ее элементы как коэффициенты, стоящие при температурах в выражении (4.11), как

$$s_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \sum_{k \neq i}^n \gamma \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 [\hat{G}_{ik} \hat{G}_{ki}^*] d\omega, & i = j, \\ -\frac{1}{\pi} \gamma \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 |\hat{G}_{ij}|^2 d\omega, & i \neq j, \end{cases} \quad (4.20)$$

предполагая, что все γ_i одинаковы и равны γ . Тогда потоки энергии от термостата к системе выражаются через матрицу переноса $\hat{S}$, которая образуется элементами s_{ij} и вектором температур термостатов

$$\vec{J} = \gamma \hat{S} \vec{T}. \quad (4.21)$$

В соответствии с FDT, выражение (4.21) для элементов матрицы переноса может быть записано в следующем виде:

$$s_{ij} = \delta_{ij} - \frac{1}{\pi} \gamma_j \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 |\hat{G}_{ij}|^2 d\omega, \quad (4.22)$$

где δ_{ij} — символ Кронекера. Таким образом, связь между двумя средними кинетическими энергиями осцилляторов $\vec{T}^{eff}$ и температурами термостатов $\vec{T}$

выражается через $\hat{S}$ -матрицу:

$$\vec{T}^{eff} = (\hat{I} - \hat{S}) \vec{T}, \quad (4.23)$$

где $\hat{I}$ — единичная матрица.

В случае симметричной матрицы взаимодействий матрица функции Грина также является симметричной, что приводит к тому, что матрицы $(\hat{I} - \hat{S})$ и $\hat{S}$ являются эрмитовыми (симметричными) и, следовательно, имеют действительные собственные значения. Если же исходная матрица взаимодействий асимметрична, но система симметризуема, её можно привести к симметричному виду умножением на диагональную матрицу $\hat{D}$. В результате преобразованные температуры термостатов в конечной системе $\vec{T}_{fi}$ будут связаны с начальными температурами $\vec{T}_{in}$ умножением на матрицу $\vec{T}_{fi} = \hat{D} \vec{T}_{in}$. Обозначим матрицу переноса начальной системы как $\hat{S}_{in}$, а матрицу симметризованной системы как $\hat{S}_{fi}$, которая является симметричной. Тогда вектор потоков энергии запишется как:

$$\vec{J} = \hat{L} \hat{S}_{fi} \vec{T}_{fi} = \hat{L} \hat{S}_{fi} \hat{D} \vec{T}_{in} = \hat{L} \hat{S}_{in} \vec{T}_{in}, \quad (4.24)$$

и

$$\hat{S}_{in} = \hat{S}_{fi} \hat{D}. \quad (4.25)$$

Следовательно, матрица $\hat{S}_{in}$ представляет собой произведение симметричной матрицы $\hat{S}_{fi}$ на диагональную матрицу $\hat{D}$. Для неё выполняется следующее равенство:

$$\hat{D} \hat{S}_{in} = \hat{S}_{in}^T \hat{D}, \quad (4.26)$$

где $\hat{D}$ является эрмитовой. Таким образом, матрица переноса консервативной невзаимной системы является квази-эрмитовой [152], а её собственные значения всегда действительны. Это означает, что при изменении параметров динамической системы в области её консервативности не могут появляться мнимые собственные значения, а также исключительные точки (EPs) в матрице переноса $\hat{S}$.

Однако ситуация меняется в области несимметризуемости силовой матрицы. В этом случае матрица переноса перестает быть квази-эрмитовой, что делает возможным появление мнимых собственных значений, исключительных точек (EPs) и неортогональности собственных векторов [152]. На рисунке 4.1 представлена схема полученных взаимосвязей между неэрмитовостью матрицы переноса и

характеристиками консервативности (симметризуемости) и взаимности соответствующей динамической системы.

Чтобы продемонстрировать возможность возникновения исключительных точек (EPs) и мнимых собственных значений в матрице переноса, рассмотрим одномерную цепочку связанных осцилляторов с невзаимным взаимодействием ближайших соседей и полу-бесконечными граничными условиями. В этом случае матрица взаимодействий имеет следующий вид:

$$\hat{F} = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.14 & 0.06\xi \\ 0.06 & 1.0 & 0.14 \\ 0.14\xi & 0.06 & 1.0 \end{bmatrix}, \quad (4.27)$$

где ξ — параметр, изменяющийся от 0 до 1. Значение $\xi = 0$ соответствует открытым граничным условиям, а $\xi = 1$ — периодическим. Предположим также, что все массы равны единице, а коэффициенты трения одинаковы и составляют 0.1. В случае открытых граничных условий такая невзаимная система остается консервативной (если не учитывать трение). Однако при связывании концов цепи система теряет свою консервативность.

На рисунке 4.2 показаны зависимости действительной и мнимой частей собственных значений матрицы переноса в зависимости от параметра ξ . Видно, что при малых значениях ξ все собственные значения остаются действительными, что соответствует области малой неконсервативности. Однако при достижении некоторого критического значения ξ наблюдается исключительная точка (EP), в которой два собственных значения сливаются. При дальнейшем увеличении ξ собственные значения матрицы переноса приобретают мнимые компоненты.

Следует отметить, что сама динамическая система во всем диапазоне изменения параметра ξ остается устойчивой (с учетом трения), то есть не имеет неограниченно растущих решений. Таким образом, долгосрочная динамика системы осцилляторов, находящейся в контакте с термостатами, действительно определяется её функцией Грина, а следовательно, и матрицей переноса.

Как известно, наличие исключительных точек в системе может приводить к ряду наблюдаемых эффектов [152]. В частности, вблизи EPs можно ожидать значительного роста чувствительности долгосрочной динамики системы при изменении её параметров и температур термостатов.

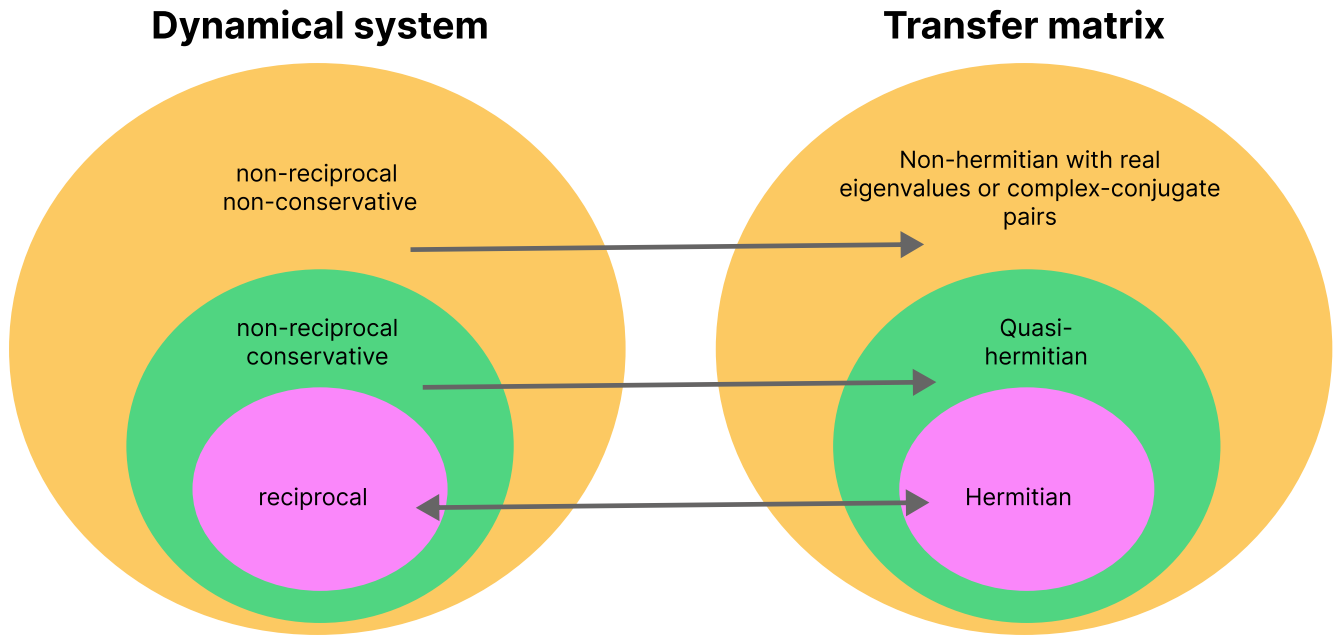


Рисунок 4.1 — Соответствие между условиями консервативности (симметризуемости) и взаимности динамической системы и неэрмитовостью её матрицы переноса.

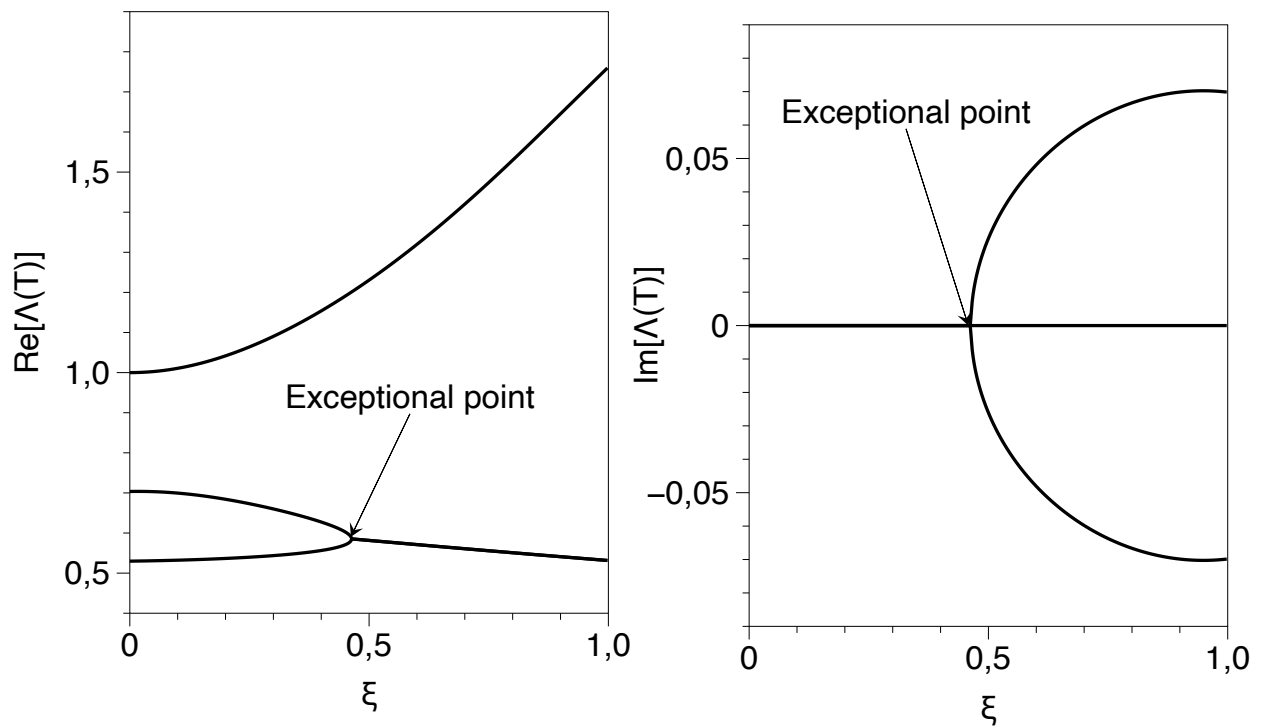


Рисунок 4.2 — Зависимость спектра собственных значений $\Lambda(\hat{S})$ матрицы переноса от степени связи между концами одномерной цепи осцилляторов ξ . а) — действительная часть собственных значений, б) — мнимая часть.

4.3.3 Перекачка энергии

Рассмотрим процесс обмена энергиями между наборами тепловых резервуаров, связанных через систему осцилляторов с невзаимными связями. В данном случае предполагается, что энергия, поступающая или уходящая из конкретного теплового резервуара, вызывает медленное изменение его температуры. Физически такая система может быть представлена как набор изолированных газовых систем с определенной температурой, находящихся в контакте с соответствующим осциллятором. Таким образом, энергия может передаваться в резервуар или выходить из него только через взаимодействие с соответствующим осциллятором. Скорость изменения температуры в такой системе определяется через потоки энергии между тепловыми резервуарами и соответствующими осцилляторами:

$$\frac{d\vec{T}}{dt} = \kappa \vec{J} = \kappa \gamma \hat{S} \vec{T}, \quad (4.28)$$

где κ — кинетический коэффициент, связывающий скорость изменения температуры резервуаров с соответствующими тепловыми потоками. Также предполагается, что коэффициенты трения всех термостатов равны γ .

В случае, если система осцилляторов является взаимной, все собственные значения матрицы $\hat{S}$ являются действительными и неположительными, а система со временем приходит к термодинамическому равновесию, при котором температуры всех резервуаров становятся равными, то есть лежат в ядре матрицы $\hat{S}$. Если же система невзаимна, но в ней возможно достижения ДБ, то в этом случае матрица $\hat{S}$ также имеет максимальное собственное значение, равное нулю, а система стремится к установившемуся распределению температур, определяемому обобщенной теоремой о равномерном распределении энергии, обсужденной ранее. Неравномерность установившегося распределения температур приводит к возможности обратной перекачки энергии, что проявляется даже в простейшем случае системы осцилляторов с двумя степенями свободы при возможности достижения в ней ДБ. Этот эффект позволяет использовать систему из двух связанных осцилляторов в качестве аналога «демона Максвелла» [151].

Однако, если система осцилляторов является не только невзаимной, но и несимметризуемой, характер решений уравнения (4.28) существенно изменяется. Во-первых, матрица $\hat{S}$ перестает быть вырожденной, а ее максимальное собственное значение становится больше нуля, что приводит к экспоненциальному росту

решений. Чтобы предотвратить бесконечный рост температуры в системе, необходимо вводить дополнительное рассеяние энергии из резервуаров.

Во-вторых, важной особенностью системы тепловых резервуаров, связанных через несимметризуемую систему осцилляторов, является появление колебательных решений. Это связано с тем, что в области, где матрица $\hat{S}$ перестает быть квазиэрмитовой, могут возникать комплексные собственные значения. Таким образом, система тепловых резервуаров, связанная посредством системой осцилляторов с несимметризуемой силовой матрицей может приводить к колебательному характеру изменения их температур, что невозможно в невзаимных системах с симметризуемой силовой матрицей.

Экспериментальная проверка и исследование данного эффекта могут быть реализованы, например, в системе невзаимно взаимодействующих пылевых частиц в потоке плазмы, где роль эффективной температуры термостатов обеспечивается за счет случайного лазерного воздействия. При этом изменения этих температур могут регулироваться в соответствии с измеряемыми потоками энергий, анализируемыми по траекториям движения пылевых частиц.

4.3.4 Локализация распределения средних кинетических энергий

Рассмотрим систему из $n = 10$ связанных линейных механических осцилляторов с невзаимной матрицей взаимодействия:

$$\hat{F} = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.16 & 0.0 & \dots & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.04 & 1.0 & 0.16 & \dots & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.04 & 1.0 & \dots & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \dots & 1.0 & 0.16 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \dots & 0.4 & 1.0 & 0.16 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \dots & 0.0 & 0.4 & 1.0 \end{bmatrix}. \quad (4.29)$$

Эта матрица соответствует Гамильтониану модели Хатано-Нельсона с жестким связыванием при открытых граничных условиях (ОВС) [172—174]. Собственные векторы такой матрицы локализованы из-за неэрмитового скин-эффекта [154—156; 175; 176]. Чтобы понять влияние этого факта на долговременные свойства под действием системы термостатов Ланжевена, мы

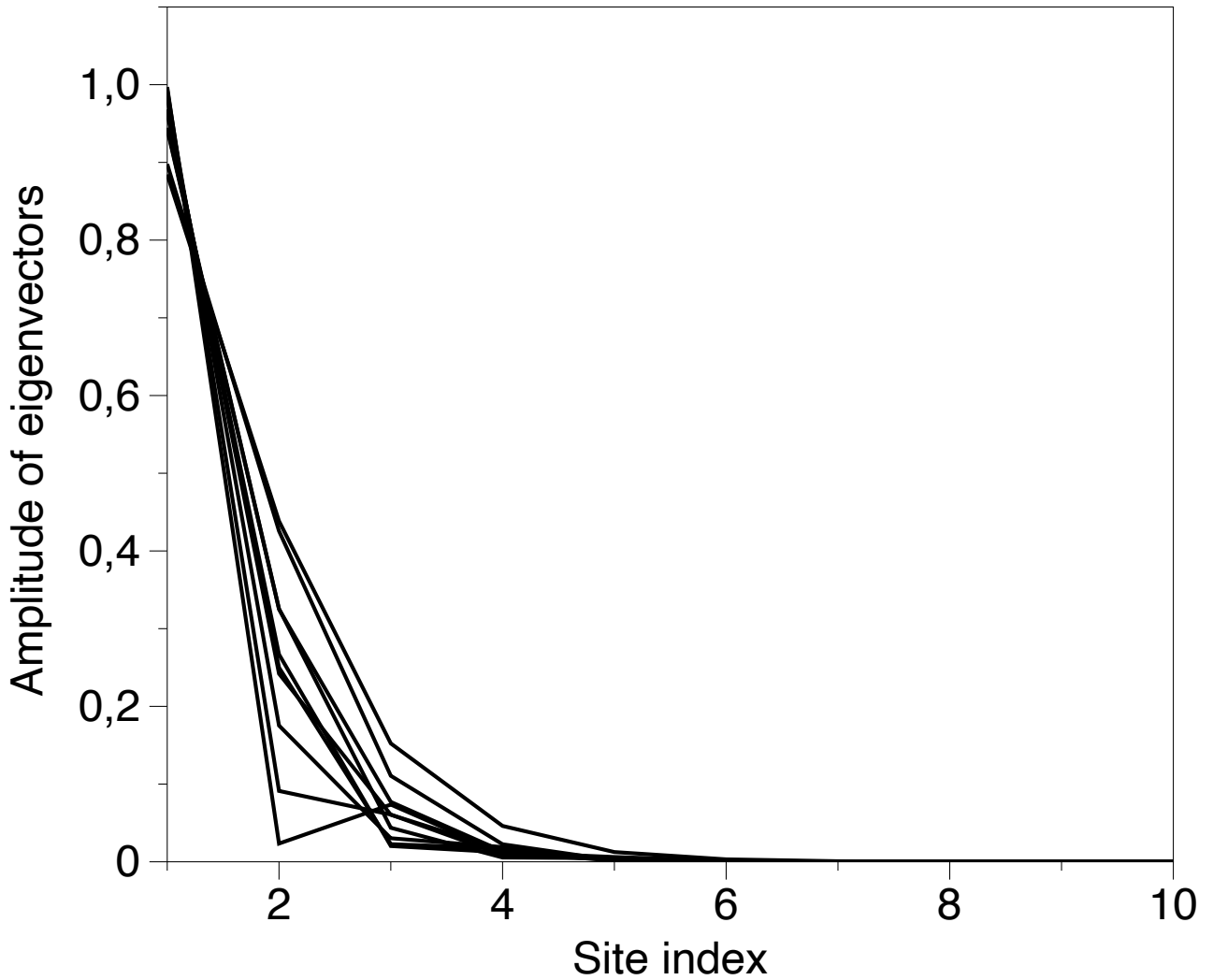


Рисунок 4.3 — Локализация собственных векторов матрицы передачи $\hat{S}$ вблизи границы цепочки.

анализируем поведение собственных векторов матрицы $\hat{I} - \hat{S}$. Эта матрица связывает средние кинетические энергии осцилляторов с температурами термостатов в соответствии с (4.23). Зависимость модуля компонент его собственных векторов от узлов системы показана на рисунке 4.3 (коэффициент трения $\gamma = 0.01$). Согласно этому рисунку, наблюдается локализация собственных векторов матрицы $\hat{I} - \hat{S}$ на левой границе системы. Таким образом, для матрицы $\hat{I} - \hat{S}$ возникает неэрмитов скин-эффект. Он приводит к экспоненциальному усилению средних кинетических энергий осцилляторов при соединении системы с термостатической средой [157].

Обсудим теперь связь возникающего неэрмитовского эффекта с условиями невзаимности системы связанных линейных механических осцилляторов. Рассматриваемая модель с матрицей взаимодействия невзаимна, но ее силовая

матрица симметризуема. Элементы d_i диагональной матрицы $\hat{D}$, симметризующей динамическую систему, выражаются следующим образом

$$d_i = \left(\frac{0.4}{0.16} \right)^{(i-1)}. \quad (4.30)$$

Матрица переноса $\hat{S}$ является произведением симметричной матрицы и матрицы $\hat{D}$. В случае, если бы матрица $\hat{D}$ была матрицей тождества, то есть мы имели бы дело с взаимно обратимой системой, неэрмитовый скин-эффект не проявился бы. Однако умножение симметричной матрицы на диагональную матрицу $\hat{D}$ с экспоненциальной неоднородностью ее элементов приводит к резкому отклонению матрицы $\hat{S}$ от нормальности, что, согласно [153], приводит к усилению скин-эффекта. Таким образом, проявление неэрмитового скин-эффекта в долговременной динамике в контакте с термостатом возможно уже в системах с не взаимной симметризуемой матрицей взаимодействия.

4.4 Распределение и перекачка энергии в экспериментальной системе двух пылевых частиц

В данном разделе рассматривается экспериментальная система из двух пылевых частиц, упорядоченных по вертикали в плазме газового разряда, исследованная в работе [134]. В этой системе частицы совершают малые колебания около своих положений равновесия под действием флуктуаций стохастической окружающей среды. На основе временных рядов смещений пылевых частиц в вертикальном и горизонтальном направлениях анализируются их колебательные спектры.

По результатам спектрального анализа авторы работы [134] восстанавливают параметры линейных стохастических уравнений (4.1), описывающих динамику обеих частиц как в вертикальной, так и в горизонтальной проекциях. Предполагается, что движения в вертикальном и горизонтальном направлениях независимы. В частности, определяются элементы силовой матрицы f_{11} , f_{12} , f_{21} , f_{22} для вертикальных и горизонтальных колебаний, а также эффективные температуры термостатов, описывающие воздействие стохастического окружения.

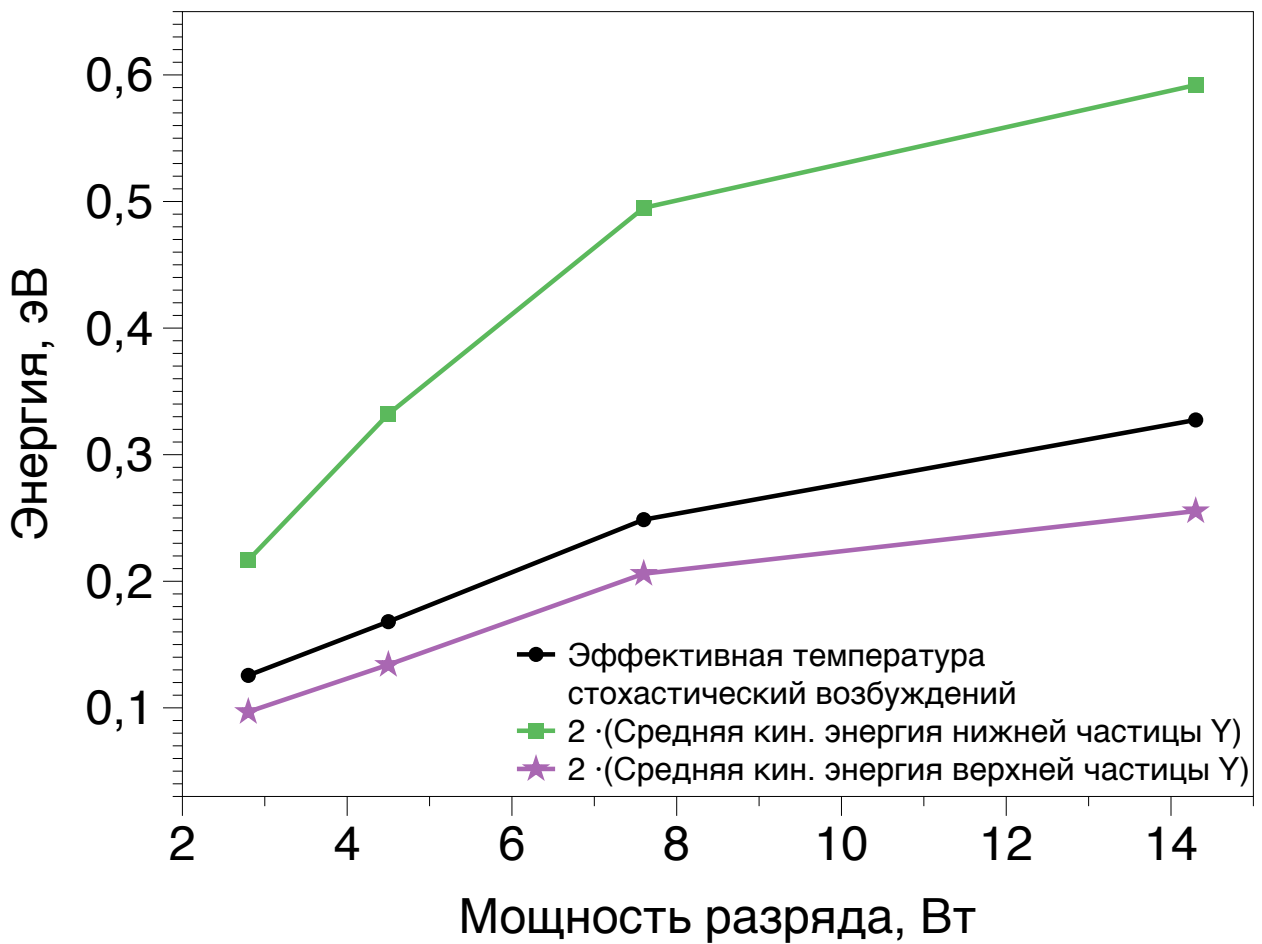


Рисунок 4.4 — Средние кинетические энергии и эффективные температуры термостатов для вертикальных колебаний пары пылевых частиц в зависимости от мощности разряда при давлении 70 мТорр.

Анализ показывает, что вертикальные и горизонтальные колебания характеризуются существенно различными силовыми матрицами. Для вертикальных колебаний знаки элементов f_{12} и f_{21} совпадают, что соответствует возможности достижения детального баланса согласно разработанному критерию. Для горизонтальных колебаний эти знаки противоположны, и достижение детального баланса невозможно. Таким образом, два случая оказываются качественно различными.

Эксперимент также показывает, что термостаты, действующие на обе частицы, имеют одинаковые эффективные температуры — как для вертикальных, так и для горизонтальных колебаний. При этом разработанная теория предсказывает два различных сценария распределения средних кинетических энергий. В случае, когда достижение детального баланса возможно (вертикальные колебания), удвоенная средняя кинетическая энергия одной степени свободы оказывается меньше

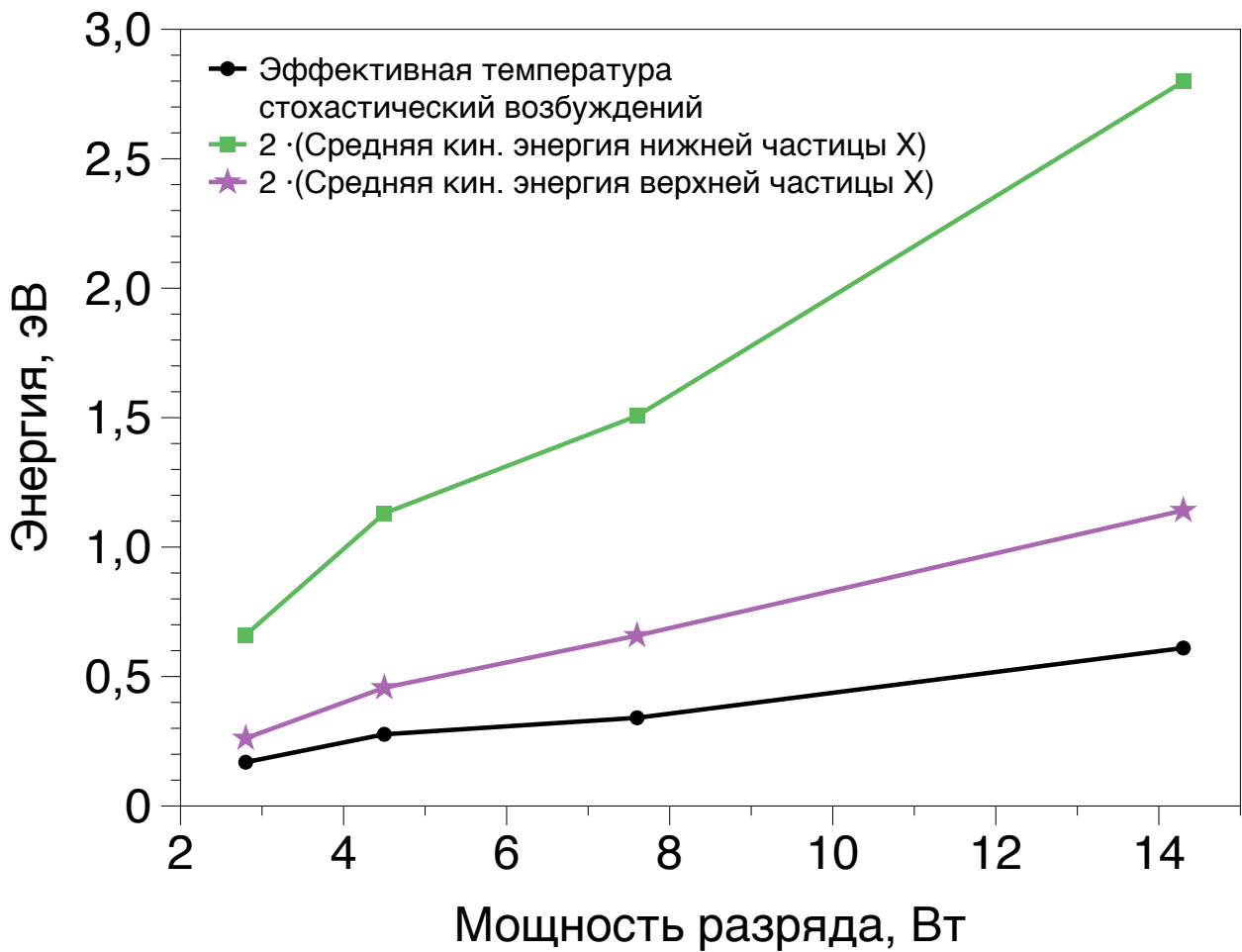


Рисунок 4.5 — Средние кинетические энергии и эффективные температуры термостатов для горизонтальных колебаний пары пылевых частиц в зависимости от мощности разряда при давлении 70 мТорр.

эффективной температуры термостата, а другой — больше. В случае же системы, где детальный баланс недостижим (горизонтальные колебания), удвоенные средние кинетические энергии обеих частиц превышают эффективную температуру термостата. Этот теоретический вывод хорошо согласуется с экспериментальными данными.

На рисунках 4.4 и 4.5 представлены зависимости удвоенных средних кинетических энергий и эффективных температур действующих термостатов для вертикальных (4.4) и горизонтальных (4.5) колебаний при давлении 70 мТорр в зависимости от мощности разряда. Согласно выражению (4.18), эти зависимости свидетельствуют о том, что перекачка энергии в двух случаях имеет качественно различные режимы.

В режиме горизонтальных колебаний энергия в среднем поступает от неравновесной плазменной среды и отводится в стохастическую среду через обе

пылевые частицы. В режиме вертикальных колебаний наблюдается иной механизм: энергия подкачивается как от неравновесной плазменной среды, так и от стохастической среды к верхней пылевой частице, а от нижней частицы откачивается обратно в стохастическую среду. Таким образом, система при вертикальных колебаниях ведёт себя как своеобразный «микрохолодильник», который за счёт энергии, поступающей из неравновесной плазменной среды [151], осуществляет перекачку энергии через пару частиц. При этом, как и положено, общая энтропия системы возрастает.

4.5 Выводы к четвертой главе

В данной главе исследованы свойства упорядоченных систем пылевых частиц, находящихся в неравновесной плазме. Особое внимание уделено влиянию эффективной невзаимности межчастичных взаимодействий на распределение кинетической энергии, перекачку энергии и условия детального баланса. Для этого использовался формализм функции Грина, а также система уравнений, связывающая одновременные корреляторы комбинации переменных смещений и скоростей частиц. Принималось, что взаимодействие пылевых частиц с нейтральным газом, а также возможными случайными флуктуациями плазмы, описывается как взаимодействия с системой термостатов. Асимметрия силовой матрицы, возникающая из-за эффективной невзаимности взаимодействий, рассматривалась в контексте самосогласованного моделирования, где её элементы зависят от влияния плазменного окружения.

Ключевым результатом является сформулированный критерий достижимости детального баланса: он определяется возможностью симметризации силовой матрицы с помощью диагональной матрицы с положительными элементами. Если такая симметризация невозможна, то детальный баланс в системе принципиально не может быть достигнут.

Также получена классификация распределения средней кинетической энергии и потоков энергии, возникающих в упорядоченной системе пылевых частиц в зависимости от типа несимметричности силовой матрицы.

Системы с симметричной матрицей взаимодействия (взаимными взаимодействиями)

- Матрица переноса $\hat{S}$, описывающая связь между температурами термостатов и потоками энергии, является вырожденной и эрмитовой, а ее наибольшее собственное значение и наименьшее сингулярное значение равны нулю;
- Взаимодействие тепловых резервуаров через систему осцилляторов приводит к выравниванию температур, что соответствует детальному балансу.

Система с асимметричной симметризуемой матрицей взаимодействия (эффективно невзаимными взаимодействиями)

- Матрица переноса $\hat{S}$ является квази-эрмитовой и вырожденной, что приводит к неравномерному распределению кинетических температур даже при одинаковых температурах термостатов;
- В таких системах возможны эффекты обратного потока энергий, а также проявления неэрмитового скин-эффекта, приводящего к локализации распределения температур;
- Взаимодействие между термостатами через систему осцилляторов приводит к установлению неравномерного, но стационарного распределения температур.

Система с асимметричной несимметризуемой матрицей взаимодействия (эффективно невзаимными взаимодействиями)

- Матрица переноса $\hat{S}$ становится неэрмитовой и невырожденной, а ее спектр может включать комплексные собственные значения и особенные точки (EPs);
- В таких системах возможно нарушение условия детального баланса, приводящее к отсутствию термодинамического равновесия;
- Динамика температуры тепловых резервуаров может приобретать осцилляционный характер, что является следствием неэрмитовой природы системы.

Кроме того, было показано, что экспериментальная система из двух пылевых частиц, упорядоченных по вертикали в плазме газового разряда, позволяет проверить теоретические предсказания о двух качественно различных режимах распределения средних кинетических энергий и перекачки энергии, определяемых характером невзаимности силовой матрицы.

В вертикальной проекции, где в системе возможно достижение детального баланса, наблюдается распределение кинетических энергий, при котором удво-

енная энергия верхней частицы меньше эффективной температуры воздействия стохастической окружающей среды, нижней — больше.

В горизонтальной проекции, где детальный баланс не достижим, эксперимент подтвердил теоретический сценарий, при котором удвоенные средние кинетические энергии обеих частиц превышают эффективную температуру термостата.

Результаты этой главы подтверждают положения 2 и 3, выносимы на защиту:

«Критерий достижимости детального равновесия между подсистемой пылевых частиц и стохастическим воздействием окружающей среды определяется установленным условием симметризации силовой матрицы, описывающей взаимодействие пылевых частиц в ионном потоке. »

«Классификация упорядоченных систем пылевых частиц по признаку достижимости детального равновесия выявила условия, при которых реализуются принципиально различные типы распределения средней кинетической энергии по степеням свободы. »

Заключение

Предложена новая модель самосогласованной динамики плазмы и пылевых частиц в ионном потоке для расчёта сил, зарядов пылевых частиц, распределения плотности ионов и динамики пылевых частиц. Корректность метода подтверждена путём сравнения с существующими теоретическими моделями и экспериментальными данными. С помощью разработанного самосогласованного подхода описан эксперимент, в котором формировалась структура из тысяч пылевых частиц с устойчивым сосуществованием упорядоченных и неупорядоченных областей и выраженным градиентом их кинетической энергии. Сравнение радиальных профилей кинетической энергии, рассчитанных с использованием разработанного подхода, с экспериментальными данными показало хорошее согласие, что подтверждает прогностическую силу предложенного метода. Показана высокая степень гибкости разработанного подхода, что позволяет адаптировать его к различным условиям плазмы, включая изменения плотности, температуры и направленного движения заряженных частиц.

Универсальность предложенного метода подтверждается его применимостью к широкому диапазону параметров, характерных как для лабораторных, так и для прикладных условий, что делает его перспективным инструментом для решения различных задач в области физики плазмы. При этом основным преимуществом разработанного подхода является его высокая вычислительная эффективность, что позволяет описывать явления на временах, на два порядка превышающих доступные для моделирования методом PIC. Такое ускорение вычислений впервые делает возможным выход на многомасштабное моделирование динамики кластеров пылевых частиц с самосогласованным учётом неравновесного плазменного окружения, что является необходимым условием для изучения влияния плазмы на динамические свойства пылевых структур.

В рамках разработанного самосогласованного подхода показано, что на динамические свойства упорядоченных систем пылевых частиц существенное влияние оказывает не только распределение электростатического потенциала вокруг частиц, как предполагается во многих теоретических моделях, но и изменение их зарядов при малых смещениях. Этот эффект оказывает заметное воздействие на производные сил, в результате чего характер несимметричности силовой матрицы, описывающей взаимодействие пылевых частиц в ионном пото-

ке, существенно изменяется. Таким образом, свойства силовой матрицы зависят одновременно как от распределения электростатического потенциала, так и от производных зарядов частиц при их смещениях.

Теоретический анализ показал, что характер распределения средних кинетических энергий и процессы перекачки энергии в упорядоченных системах пылевых частиц в неравновесной плазме существенно определяются степенью несимметричности матрицы взаимодействия. Установлено, что критерий достижимости детального равновесия между подсистемой пылевых частиц и стохастическим воздействием плазменного окружения определяется условием симметризации силовой матрицы. Проведённая классификация упорядоченных систем по признаку достижимости детального равновесия выявила условия, при которых реализуются принципиально различные типы распределения средней кинетической энергии по степеням свободы. Показана взаимосвязь между характером перекачки энергии и распределением средней кинетической энергии в системе двух пылевых частиц с достижимостью детального равновесия.

Дополнительно выявлены условия, при которых возможно экспоненциальное усиление средней кинетической энергии пылевых частиц на границах упорядоченных структур. Установлено, что данный эффект связан с неэрмитовостью матрицы переноса, которая связывает средние кинетические энергии степеней свободы системы с эффективными температурами внешнего стохастического воздействия. Полученные результаты впервые демонстрируют, что поведение упорядоченных пылевых структур в условиях направленного плазменного потока может быть естественным образом описано в рамках формализма неэрмитовых систем. Это, в свою очередь, открывает перспективу для междисциплинарного синтеза между физикой плазмы и современной теорией открытых систем, в которых нарушение симметрии и неконсервативность играют ключевую роль в формировании наблюдаемых эффектов.

Полученные результаты вносят вклад в развитие методов моделирования пылевой плазмы и углубляют понимание процессов зарядки пылевых частиц, а также динамических свойств пылевой плазмы. Разработанные подходы открывают новые возможности для исследования невзаимных систем и могут быть использованы при изучении сложных плазменно-пылевых структур как в теоретических, так и в экспериментальных исследованиях.

Таким образом, проведённое исследование демонстрирует реализацию многомасштабного подхода — от разработки численного инструмента и его

оптимизации до анализа фундаментальных эффектов, связанных с невязимностью взаимодействий в пылевой плазме. Полученные результаты обладают высокой степенью универсальности и могут быть применены не только в фундаментальной науке, но и в ряде перспективных технологических направлений, включая литографию в микроэлектронике, плазменную обработку материалов, диагностику плазменных процессов и разработку новых плазменных устройств. Разработанный подход также может быть расширен для моделирования других типов плазменно-пылевых систем, включая задачи астрофизики и промышленных применений. Дальнейшее развитие методов моделирования с учётом неэрмитовых эффектов представляется важным и актуальным направлением будущих исследований.

Словарь терминов

ОМ : теория орбитального движения (orbital motion)

OML : теория ограниченного орбитального движения (orbital motion limited)

GPU : графический процессор

CPU : центральный процессор

ЕР : особая точка, в которой несколько собственных значений матрицы сливаются в одно (exceptional point)

ДБ : детальный баланс

с.с : степень свободы

FDT : флуктуационно-диссипационная теорема (fluctuation–dissipation theorem)

Список литературы

1. V. Fortov, A. Ivlev, S. Khrapak, A. Khrapak, G. Morfill. Complex (dusty) plasmas: Current status, open issues, perspectives // *Phys. Rep.* — 2005 — T. 421, № 1/2 — С. 1—103.
2. J. Beckers, J. Berndt, D. Block, M. Bonitz, P. Bruggeman, L. Couëdel, G. L. Delzanno, Y. Feng, R. Gopalakrishnan, F. Greiner [и др.]. Physics and applications of dusty plasmas: The Perspectives 2023 // *Phys. Plasmas* — 2023 — T. 30, № 12 — С. 1—51.
3. P. Krainov, V. Ivanov, D. Astakhov, V. Medvedev, V. Kvon, A. Yakunin, M. Van de Kerkhof. Dielectric particle lofting from dielectric substrate exposed to low-energy electron beam // *Plasma Sources Sci. Technol.* — 2020 — T. 29, № 8 — С. 085013.
4. T.-T.-N. Nguyen, M. Sasaki, T. Tsutsumi, K. Ishikawa, M. Hori. Formation of spherical Sn particles by reducing SnO₂ film in floating wire-assisted H₂/Ar plasma at atmospheric pressure // *Sci. Rep.* — 2020 — T. 10, № 1 — С. 1—12.
5. M. Shoyama, H. Yoshioka, S. Matsusaka. Charging and levitation of particles using UV irradiation and electric field // *IEEE Trans. Ind. Appl.* — 2021 — T. 58, № 1 — С. 776—782.
6. A. V. Ivlev, J. Bartnick, M. Heinen, C.-R. Du, V. Nosenko, H. Löwen. Statistical mechanics where Newton's third law is broken // *Phys. Rev. X* — 2015 — T. 5, № 1 — С. 011035.
7. N. P. Kryuchkov, A. V. Ivlev, S. O. Yurchenko. Dissipative phase transitions in systems with nonreciprocal effective interactions // *Soft Matter* — 2018 — T. 14, № 47 — С. 9720—9729.
8. A. Piel. Molecular dynamics simulation of ion flows around microparticles // *Phys. Plasmas* — 2017 — T. 24, № 3 — С. 033712.
9. S. Vladimirov, S. Maiorov, O. Ishihara. Molecular dynamics simulation of plasma flow around two stationary dust grains // *Phys. Plasmas* — 2003 — T. 10, № 10 — С. 3867—3873.

10. L. S. Matthews, D. L. Sanford, E. G. Kostadinova, K. S. Ashrafi, E. Guay, T. W. Hyde. Dust charging in dynamic ion wakes // *Phys. Plasmas* — 2020 — T. 27, № 2 — C. 023703.
11. I. Hutchinson. Nonlinear collisionless plasma wakes of small particles // *Phys. Plasmas* — 2011 — T. 18, № 3 — C. 032111.
12. W. J. Miloch. Wake effects and Mach cones behind objects // *Plasma Phys. Controlled Fusion* — 2010 — T. 52, № 12 — C. 124004.
13. M. Lampe, G. Joyce. Grain-grain interaction in stationary dusty plasma // *Phys. Plasmas* — 2015 — T. 22, № 2 — C. 023704.
14. G. Sukhinin, A. Fedoseev, M. Salnikov, A. Rostom, M. Vasiliev, O. Petrov. Plasma anisotropy around a dust particle placed in an external electric field // *Phys. Rev. E* — 2017 — T. 95, № 6 — C. 063207.
15. C. Bechinger, R. Di Leonardo, H. Löwen, C. Reichhardt, G. Volpe, G. Volpe. Active particles in complex and crowded environments // *Rev. Mod. Phys.* — 2016 — T. 88, № 4 — C. 045006.
16. D. Geiss, K. Kroy, V. Holubec. Brownian molecules formed by delayed harmonic interactions // *New J. Phys.* — 2019 — T. 21, № 9 — C. 093014.
17. M. Brandenbourger, X. Locsin, E. Lerner, C. Coulais. Non-reciprocal robotic metamaterials // *Nat. Commun.* — 2019 — T. 10, № 1 — C. 4608.
18. J. Rieser, M. A. Ciampini, H. Rudolph, N. Kiesel, K. Hornberger, B. A. Stickler, M. Aspelmeyer, U. Delić. Tunable light-induced dipole-dipole interaction between optically levitated nanoparticles // *Science* — 2022 — T. 377, № 6609 — C. 987—990.
19. I. H. Hutchinson. Ion collection by a sphere in a flowing plasma: I. Quasineutral // *Plasma Phys. Controlled Fusion* — 2002 — T. 44, № 9 — C. 1953.
20. I. Hutchinson. Ion collection by a sphere in a flowing plasma: 2. Non-zero Debye length // *Plasma Phys. Controlled Fusion* — 2003 — T. 45, № 8 — C. 1477.
21. I. H. Hutchinson. Ion collection by a sphere in a flowing plasma: 3. Floating potential and drag force // *Plasma Phys. Controlled Fusion* — 2004 — T. 47, № 1 — C. 71.
22. O. Havnes. Charges on dust particles // *Adv. Space Res.* — 1984 — T. 4, № 9 — C. 75—83.

23. B. Draine, E. Salpeter. On the physics of dust grains in hot gas // *Astrophys. J.* — 1979 — T. 231 — C. 77—94.
24. Y. L. Al’Pert. Space physics with artificial satellites // *Am. J. Phys.* — 1966 — T. 34, № 6 — C. 544—544.
25. Laframboise J. G. Theory of Spherical and Cylindrical Langmuir Probes in a Collisionless, Maxwellian Plasma at Rest. [Текст] : дис. ... канд. / Laframboise James Gerald.
26. R. Kennedy, J. Allen. The floating potential of spherical probes and dust grains. II: Orbital motion theory // *J. Plasma Phys.* — 2003 — T. 69, № 6 — C. 485—506.
27. G. Delzanno, A. Bruno, G. Sorasio, G. Lapenta. Exact orbital motion theory of the shielding potential around an emitting, spherical body // *Phys. Plasmas* — 2005 — T. 12, № 6 —.
28. H. M. Mott-Smith, I. Langmuir. The theory of collectors in gaseous discharges // *Phys. Rev.* — 1926 — T. 28, № 4 — C. 727.
29. J. Laframboise, L. Parker. Probe design for orbit-limited current collection // *Phys. Fluids* — 1973 — T. 16, № 5 — C. 629—636.
30. J. Allen. Probe theory-the orbital motion approach // *Phys. Scr.* — 1992 — T. 45, № 5 — C. 497.
31. Z. Zakrzewski, T. Kopiczynski. Effect of collisions on positive ion collection by a cylindrical Langmuir probe // *Plasma Physics* — 1974 — T. 16, № 12 — C. 1195.
32. J.-S. Chang, J. Laframboise. Probe theory for arbitrary shape in a large Debye length, stationary plasma // *Phys. Fluids* — 1976 — T. 19, № 1 — C. 25—31.
33. A. Zobnin, A. Nefedov, V. Sinel’Shchikov, V. Fortov. On the charge of dust particles in a low-pressure gas discharge plasma // *J. Exp. Theor. Phys.* — 2000 — T. 91 — C. 483—487.
34. M. Lampe, R. Goswami, Z. Sternovsky, S. Robertson, V. Gavrilishchaka, G. Ganguli, G. Joyce. Trapped ion effect on shielding, current flow, and charging of a small object in a plasma // *Phys. Plasmas* — 2003 — T. 10, № 5 — C. 1500—1513.

35. S. Khrapak, S. V. Ratynskaia, A. Zobnin, A. Usachev, V. Yaroshenko, M. Thoma, M. Kretschmer, H. Höfner, G. Morfill, O. Petrov [и др.]. Particle charge in the bulk of gas discharges // *Phys. Rev. E* — 2005 — Т. 72, № 1 — С. 016406.
36. S. Khrapak, G. Morfill, A. Khrapak, L. D'yachkov. Charging properties of a dust grain in collisional plasmas // *Phys. Plasmas* — 2006 — Т. 13, № 5 — С. 052114.
37. S. Khrapak, G. Morfill. An interpolation formula for the ion flux to a small particle in collisional plasmas // *Phys. Plasmas* — 2008 — Т. 15, № 11 — С. 114503.
38. M. Gatti, U. Kortshagen. Analytical model of particle charging in plasmas over a wide range of collisionality // *Phys. Rev. E* — 2008 — Т. 78, № 4 — С. 046402.
39. S. Ratynskaia, S. Khrapak, A. Zobnin, M. Thoma, M. Kretschmer, A. Usachev, V. Yaroshenko, R. Quinn, G. Morfill, O. Petrov [и др.]. Experimental Determination of Dust-Particle Charge in a Discharge Plasma at Elevated Pressures // *Phys. Rev. Lett.* — 2004 — Т. 93, № 8 — С. 085001.
40. S. Khrapak, P. Tolias, S. Ratynskaia, M. Chaudhuri, A. Zobnin, A. Usachev, C. Rau, M. Thoma, O. Petrov, V. Fortov [и др.]. Grain charging in an intermediately collisional plasma // *Europhys. Lett.* — 2012 — Т. 97, № 3 — С. 35001.
41. H. Thomas, M. Schwabe, M. Pustyl'nik, C. Knappek, V. Molotkov, A. Lipaev, O. Petrov, V. Fortov, S. Khrapak. Complex plasma research on the International Space Station // *Plasma Phys. Controlled Fusion* — 2018 — Т. 61, № 1 — С. 014004.
42. W. Xu, N. D'Angelo, R. L. Merlino. Dusty plasmas: The effect of closely packed grains // *J. Geophys. Res.:Space Phys.* — 1993 — Т. 98, A5 — С. 7843—7847.
43. S. Khrapak, H. Thomas, G. Morfill. Multiple phase transitions associated with charge cannibalism effect in complex (dusty) plasmas // *Europhys. Lett.* — 2010 — Т. 91, № 2 — С. 25001.
44. A. Barkan, N. D'angelo, R. L. Merlino. Charging of dust grains in a plasma // *Phys. Rev. Lett.* — 1994 — Т. 73, № 23 — С. 3093.
45. P. K. Shukla, B. Eliasson. Colloquium: Fundamentals of dust-plasma interactions // *Rev. Mod. Phys.* — 2009 — Т. 81, № 1 — С. 25—44.

46. R. Merlino. Dusty plasmas: From Saturn's rings to semiconductor processing devices // *Adv. Phys.:X* — 2021 — T. 6, № 1 — C. 1873859.
47. J. Carstensen, F. Greiner, D. Block, J. Schablinski, W. J. Miloch, A. Piel. Charging and coupling of a vertically aligned particle pair in the plasma sheath // *Phys. Plasmas* — 2012 — T. 19, № 3 — C. 033702.
48. D. Block, W. Miloch. Charging of multiple grains in subsonic and supersonic plasma flows // *Plasma Phys. Controlled Fusion* — 2014 — T. 57, № 1 — C. 014019.
49. W. Miloch, D. Block. Dust grain charging in a wake of other grains // *Phys. Plasmas* — 2012 — T. 19, № 12 — C. 123703.
50. K. Vermillion, R. Banka, A. Mendoza, B. Wyatt, L. Matthews, T. Hyde. Interacting dust grains in complex plasmas: Ion wake formation and the electric potential // *Phys. Plasmas* — 2024 — T. 31, № 7 — C. 073701.
51. T. Matsoukas, M. Russell. Particle charging in low-pressure plasmas // *J. Appl. Phys.* — 1995 — T. 77, № 9 — C. 4285—4292.
52. C. Cui, J. Goree. Fluctuations of the charge on a dust grain in a plasma // *IEEE Trans. Plasma Sci.* — 1994 — T. 22, № 2 — C. 151—158.
53. L. S. Matthews, B. Shotorban, T. W. Hyde. Cosmic dust aggregation with stochastic charging // *Astrophys. J.* — 2013 — T. 776, № 2 — C. 103.
54. T. Matsoukas, M. Russell. Fokker-Planck description of particle charging in ionized gases // *Phys. Rev. E* — 1997 — T. 55, № 1 — C. 991.
55. L. S. Matthews, T. W. Hyde. Effect of dipole–dipole charge interactions on dust coagulation // *New J. Phys.* — 2009 — T. 11, № 6 — C. 063030.
56. X. Wang, J. Schwan, H.-W. Hsu, E. Grün, M. Horányi. Dust charging and transport on airless planetary bodies // *Geophys. Res. Lett.* — 2016 — T. 43, № 12 — C. 6103—6110.
57. L. S. Matthews, V. Land, T. W. Hyde. Charging and coagulation of dust in protoplanetary plasma environments // *Astrophys. J.* — 2011 — T. 744, № 1 — C. 8.
58. L. S. Matthews, D. A. Coleman, T. W. Hyde. Multipole expansions of aggregate charge: How far to go? // *IEEE Trans. Plasma Sci.* — 2015 — T. 44, № 4 — C. 519—524.

59. H. Rothermel, T. Hagl, G. Morfill, M. Thoma, H. Thomas. Gravity compensation in complex plasmas by application of a temperature gradient // *Phys. Rev. Lett.* — 2002 — T. 89, № 17 — C. 175001.
60. O. Arp, D. Block, M. Klindworth, A. Piel. Confinement of Coulomb balls // *Phys. Plasmas* — 2005 — T. 12, № 12 — C. 122102.
61. L. Couëdel, M. Mikikian, L. Boufendi, A. A. Samarian. Residual dust charges in discharge afterglow // *Phys. Rev. E* — 2006 — T. 74, № 2 — C. 026403.
62. Трубников Б. А. Вопросы теории плазмы [Текст]. Т. 1. — 1963. — 98 с.
63. M. S. Barnes, J. H. Keller, J. C. Forster, J. A. O'Neill, D. K. Coultas. Transport of dust particles in glow-discharge plasmas // *Phys. Rev. Lett.* — 1992 — T. 68, № 3 — C. 313.
64. J. Daugherty, D. Graves. Derivation and experimental verification of a particulate transport model for a glow discharge // *J. Appl. Phys.* — 1995 — T. 78, № 4 — C. 2279—2287.
65. M. Kilgore, J. Daugherty, R. Porteous, D. Graves. Ion drag on an isolated particulate in a low-pressure discharge // *J. Appl. Phys.* — 1993 — T. 73, № 11 — C. 7195—7202.
66. S. Khrapak, A. Ivlev, G. Morfill, H. Thomas. Ion drag force in complex plasmas // *Phys. Rev. E* — 2002 — T. 66, № 4 — C. 046414.
67. S. Khrapak, A. Ivlev, G. Morfill, S. Zhdanov, H. Thomas. Scattering in the attractive Yukawa potential: Application to the ion-drag force in complex plasmas // *IEEE Trans. Plasma Sci.* — 2004 — T. 32, № 2 — C. 555—560.
68. S. Khrapak. Accurate momentum transfer cross section for the attractive Yukawa potential // *Phys. Plasmas* — 2014 — T. 21, № 4 — C. 044506.
69. I. Semenov, S. Khrapak, H. Thomas. Momentum transfer cross-section for ion scattering on dust particles // *Phys. Plasmas* — 2017 — T. 24, № 3 — C. 033710.
70. S. Khrapak, A. Ivlev, S. Zhdanov, G. Morfill. Hybrid approach to the ion drag force // *Phys. Plasmas* — 2005 — T. 12, № 4 — C. 042308.
71. I. Hutchinson. Collisionless ion drag force on a spherical grain // *Plasma Phys. Controlled Fusion* — 2006 — T. 48, № 2 — C. 185.

72. I. V. Schweigert, A. L. Alexandrov, F. M. Peeters. Negative ion-drag force in a plasma of gas discharge // *IEEE Trans. Plasma Sci.* — 2004 — T. 32, № 2 — C. 623—626.
73. S. Vladimirov, S. Khrapak, M. Chaudhuri, G. Morfill. Superfluidlike motion of an absorbing body in a collisional plasma // *Phys. Rev. Lett.* — 2008 — T. 100, № 5 — C. 055002.
74. S. Maierov. Influence of the trapped ions on the screening effect and frictional force in a dusty plasma // *Plasma Phys. Rep.* — 2005 — T. 31 — C. 690—699.
75. L. Patacchini, I. H. Hutchinson. Fully Self-Consistent Ion-Drag-Force Calculations for Dust in Collisional Plasmas with an External Electric Field // *Phys. Rev. Lett.* — 2008 — T. 101, № 2 — C. 025001.
76. I. Hutchinson, C. Haakonsen. Collisional effects on nonlinear ion drag force for small grains // *Phys. Plasmas* — 2013 — T. 20, № 8 — C. 083701.
77. A. Ivlev, S. Khrapak, S. Zhdanov, G. Morfill, G. Joyce. Force on a charged test particle in a collisional flowing plasma // *Phys. Rev. Lett.* — 2004 — T. 92, № 20 — C. 205007.
78. P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, M. Krook. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems // *Phys. Rev.* — 1954 — T. 94, № 3 — C. 511.
79. A. Ivlev, S. Zhdanov, S. Khrapak, G. Morfill. Kinetic approach for the ion drag force in a collisional plasma // *Phys. Rev. E* — 2005 — T. 71, № 1 — C. 016405.
80. M. Lampe, V. Gavrilishchaka, G. Ganguli, G. Joyce. Effect of trapped ions on shielding of a charged spherical object in a plasma // *Phys. Rev. Lett.* — 2001 — T. 86, № 23 — C. 5278.
81. I. B. Bernstein, I. N. Rabinowitz. Theory of electrostatic probes in a low-density plasma // *Phys. Fluids* — 1959 — T. 2, № 2 — C. 112—121.
82. J. Goree. Ion trapping by a charged dust grain in a plasma // *Phys. Rev. Lett.* — 1992 — T. 69, № 2 — C. 277.
83. T. Bystrenko, A. Zagorodny. Effects of bound states in the screening of dust particles in plasmas // *Phys. Lett. A* — 2002 — T. 299, № 4 — C. 383—391.
84. X.-Z. Tang, G. Luca Delzanno. Orbital-motion-limited theory of dust charging and plasma response // *Phys. Plasmas* — 2014 — T. 21, № 12 — C. 123708.

85. S. Ratynskaia, U. de Angelis, S. Khrapak, B. Klumov, G. Morfill. Electrostatic interaction between dust particles in weakly ionized complex plasmas // *Phys. Plasmas* — 2006 — T. 13, № 10 — C. 104508.
86. S. Khrapak, G. Morfill. Basic processes in complex (dusty) plasmas: Charging, interactions, and ion drag force // *Contrib. Plasma Phys.* — 2009 — T. 49, № 3 — C. 148—168.
87. I. Semenov, S. Khrapak, H. Thomas. Approximate expression for the electric potential around an absorbing particle in isotropic collisionless plasma // *Phys. Plasmas* — 2015 — T. 22, № 5 — C. 053704.
88. C. Su, S. Lam. Continuum theory of spherical electrostatic probes // *Phys. Fluids* — 1963 — T. 6, № 10 — C. 1479—1491.
89. A. Filippov. Distribution of Electrons and Ions Near an Absorbing Spherical Body in a Nonequilibrium Plasma // *J. Exp. Theor. Phys.* — 2021 — T. 132 — C. 148—158.
90. A. Ignatov. Lesage gravity in dusty plasmas // *Plasma Phys. Rep.* — 1996 — T. 22, № 7 — C. 585—589.
91. A. V. Zobnin, A. M. Lipaev, R. A. Syrovatka, A. D. Usachev, V. N. Naumkin, O. F. Petrov, M. H. Thoma, O. V. Novitsky, S. N. Ryzhikov. Observation of Le Sage gravity analog in complex plasma // *Phys. Rev. E* — 2024 — T. 110, № 3 — C. 035203.
92. F. Melandsø, J. Goree. Polarized supersonic plasma flow simulation for charged bodies such as dust particles and spacecraft // *Phys. Rev. E* — 1995 — T. 52, № 5 — C. 5312.
93. S. V. Vladimirov, M. Nambu. Attraction of charged particulates in plasmas with finite flows // *Phys. Rev. E* — 1995 — T. 52, № 3 — C. R2172.
94. O. Ishihara, S. V. Vladimirov. Wake potential of a dust grain in a plasma with ion flow // *Phys. Plasmas* — 1997 — T. 4, № 1 — C. 69—74.
95. V. Schweigert, I. Schweigert, A. Melzer, A. Homann, A. Piel. Alignment and instability of dust crystals in plasmas // *Phys. Rev. E* — 1996 — T. 54, № 4 — C. 4155.
96. G. Lapenta. Simulation of charging and shielding of dust particles in drifting plasmas // *Phys. Plasmas* — 1999 — T. 6, № 5 — C. 1442—1447.

97. G. Lapenta. Linear theory of plasma wakes // *Phys. Rev. E* — 2000 — T. 62, № 1 — C. 1175.
98. D. Winske, W. Daughton, D. Lemons, M. Murillo. Ion kinetic effects on the wake potential behind a dust grain in a flowing plasma // *Phys. Plasmas* — 2000 — T. 7, № 6 — C. 2320–2328.
99. G. Lapenta. Nature of the force field in plasma wakes // *Phys. Rev. E* — 2002 — T. 66, № 2 — C. 026409.
100. T. Grozdanov, R. Janev. Charge-exchange collisions of multiply charged ions with atoms // *Phys. Rev. A* — 1978 — T. 17, № 3 — C. 880.
101. M. Zeuner, J. Meichsner. Ion kinetics in collisional rf-glow discharge sheaths // *Vacuum* — 1995 — T. 46, № 2 — C. 151–157.
102. D. Else, R. Kompaneets, S. Vladimirov. On the reliability of the Bhatnagar–Gross–Krook collision model in weakly ionized plasmas // *Phys. Plasmas* — 2009 — T. 16, № 6 — C. 062106.
103. M. Lampe, T. Röcker, G. Joyce, S. Zhdanov, A. Ivlev, G. Morfill. Ion distribution function in a plasma with uniform electric field // *Phys. Plasmas* — 2012 — T. 19, № 11 — C. 113703.
104. R. Kompaneets, G. E. Morfill, A. V. Ivlev. Interparticle attraction in 2D complex plasmas // *Phys. Rev. Lett.* — 2016 — T. 116, № 12 — C. 125001.
105. R. Kompaneets, G. E. Morfill, A. V. Ivlev. Wakes in complex plasmas: A self-consistent kinetic theory // *Phys. Rev. E* — 2016 — T. 93, № 6 — C. 063201.
106. S. Sundar, H. Kählert, J.-P. Joost, P. Ludwig, M. Bonitz. Impact of collisions on the dust wake potential with Maxwellian and non-Maxwellian ions // *Phys. Plasmas* — 2017 — T. 24, № 10 — C. 102130.
107. Sukhinin G., Salnikov M., Fedoseev A. The effect of the type of ion–neutral collisions on ion cloud formation [Текст] // *AIP Conference Proceedings*. T. 1925. — AIP Publishing. 2018.
108. P. Ludwig, W. J. Miloch, H. Kählert, M. Bonitz. On the wake structure in streaming complex plasmas // *New J. Phys.* — 2012 — T. 14, № 5 — C. 053016.
109. M. Salnikov, G. Sukhinin. Influence of the Dust Particle Shape on the Wake Formation in a Complex Plasma // *IEEE Trans. Plasma Sci.* — 2021 — T. 49, № 9 — C. 2583–2588.

110. G. Sukhinin, A. Fedoseev, M. Salnikov. The influence of dust particle geometry on its charge and plasma potential // *Contrib. Plasma Phys.* — 2019 — T. 59, № 4/5 — C. e201800153.
111. D. Kolotinskii, V. Nikolaev, A. Timofeev. Effect of structural inhomogeneity and nonreciprocal effects in the interaction of macroparticles on the dynamic properties of a dusty plasma monolayer // *JETP Letters* — 2021 — T. 113, № 8 — C. 510—517.
112. K. S. Ashrafi, R. Yousefi, M. Chen, L. S. Matthews, T. W. Hyde. Dust as probes: Determining confinement and interaction forces // *Phys. Rev. E* — 2020 — T. 102, № 4 — C. 043210.
113. A. Fedoseev, M. Salnikov, M. Vasiliev, O. Petrov. Structural properties of a chain of dust particles in a field of external forces // *Phys. Rev. E* — 2022 — T. 106, № 2 — C. 025204.
114. C. Carmichael, J. Martinez-Ortiz, P. Adamson, L. Matthews, T. Hyde. Energy amplification in plasma crystals due to multiple torsions // *Phys. Plasmas* — 2024 — T. 31, № 12 — C. 123702.
115. A. Ivlev, S. Zhdanov, M. Lampe, G. Morfill. Mode-coupling instability in a fluid two-dimensional complex plasma // *Phys. Rev. Lett.* — 2014 — T. 113, № 13 — C. 135002.
116. L. Couëdel, V. Nosenko, A. Ivlev, S. Zhdanov, H. Thomas, G. Morfill. Direct observation of mode-coupling instability in two-dimensional plasma crystals // *Phys. Rev. Lett.* — 2010 — T. 104, № 19 — C. 195001.
117. S. Zhdanov, A. Ivlev, G. Morfill. Mode-coupling instability of two-dimensional plasma crystals // *Phys. Plasmas* — 2009 — T. 16, № 8 — C. 083706.
118. L. Couëdel, V. Nosenko, S. Zhdanov, A. V. Ivlev, I. Laut, E. V. Yakovlev, N. P. Kryuchkov, P. V. Ovcharov, A. M. Lipaev, S. O. Yurchenko. Experimental studies of two-dimensional complex plasma crystals: waves and instabilities // *Physics-Uspekhi* — 2019 — T. 62, № 10 — C. 1000.
119. A. Ivlev, R. Kompaneets. Instabilities in bilayer complex plasmas: Wake-induced mode coupling // *Phys. Rev. E* — 2017 — T. 95, № 5 — C. 053202.
120. I. Schweigert, V. Schweigert, V. Bedanov, A. Melzer, A. Homann, A. Piel. Instability and melting of a crystal of microscopic particles in a radio-frequency discharge plasma // *J. Exp. Theor. Phys.* — 1998 — T. 87 — C. 905—915.

121. A. Melzer. Connecting the wakefield instabilities in dusty plasmas // *Phys. Rev. E* — 2014 — T. 90, № 5 — C. 053103.
122. A. Melzer, V. Schweigert, I. Schweigert, A. Homann, S. Peters, A. Piel. Structure and stability of the plasma crystal // *Phys. Rev. E* — 1996 — T. 54, № 1 — C. R46.
123. N. P. Kryuchkov, E. V. Yakovlev, E. A. Gorbunov, L. Couëdel, A. M. Lipaev, S. O. Yurchenko. Thermoacoustic instability in two-dimensional fluid complex plasmas // *Phys. Rev. Lett.* — 2018 — T. 121, № 7 — C. 075003.
124. V. Nosenko, S. K. Zhdanov, H. Thomas, J. Carmona-Reyes, T. Hyde. Spontaneous formation and spin of particle pairs in a single-layer complex plasma crystal // *Europhys. Lett.* — 2015 — T. 112, № 4 — C. 45003.
125. C. Carmichael, J. M. Ortiz, P. Adamson, L. Matthews, T. Hyde. Rotating particle pair produces hot complex plasma crystals // *Phys. Rev. E* — 2024 — T. 110, № 2 — C. 025205.
126. V. Nosenko, S. Zhdanov, H. Thomas, J. Carmona-Reyes, T. Hyde. Dynamics of spinning particle pairs in a single-layer complex plasma crystal // *Phys. Rev. E* — 2017 — T. 96, № 1 — C. 011201.
127. E. G. Kostadinova, R. Banka, J. L. Padgett, C. D. Liaw, L. S. Matthews, T. W. Hyde. Fractional Laplacian spectral approach to turbulence in a dusty plasma monolayer // *Phys. Plasmas* — 2021 — T. 28, № 7 — C. 073705.
128. G. Norman, A. Timofeev. Kinetic temperature of dust particle motion in gas-discharge plasma // *Phys. Rev. E* — 2011 — T. 84, № 5 — C. 056401.
129. S. Singh, P. Bandyopadhyay, K. Kumar, M. Hariprasad, S. Arumugam, A. Sen. Transition of a 2D crystal to a non-equilibrium two-phase coexistence state // *Phys. Plasmas* — 2023 — T. 30, № 4 — C. 043704.
130. S. Singh, P. Bandyopadhyay, K. Kumar, A. Sen. Experimental investigation of a triple point in a dusty plasma // *Phys. Plasmas* — 2023 — T. 30, № 12 — C. 123701.
131. V. Nikolaev, A. Timofeev. Nonhomogeneity of phase state in a dusty plasma monolayer with nonreciprocal particle interactions // *Phys. Plasmas* — 2021 — T. 28, № 3 — C. 033704.

132. M. Hariprasad, P. Bandyopadhyay, V. Nikolaev, D. Kolotinskii, S. Arumugam, G. Arora, S. Singh, A. Sen, A. Timofeev. Self-sustained non-equilibrium co-existence of fluid and solid states in a strongly coupled complex plasma system // *Sci. Rep.* — 2022 — T. 12, № 1 — C. 13882.
133. E. A. Lisin, E. A. Kononov, E. A. Sametov, M. M. Vasiliev, O. F. Petrov. Alignments of a microparticle pair in a glow discharge // *Molecules* — 2021 — T. 26, № 24 — C. 7535.
134. E. Lisin, O. Petrov, E. Sametov, O. Vaulina, K. Statsenko, M. Vasiliev, J. Carmona-Reyes, T. Hyde. Experimental study of the nonreciprocal effective interactions between microparticles in an anisotropic plasma // *Sci. Rep.* — 2020 — T. 10, № 1 — C. 13653.
135. A. K. Mukhopadhyay, J. Goree. Experimental measurement of velocity correlations for two microparticles in a plasma with ion flow // *Phys. Rev. E* — 2014 — T. 90, № 1 — C. 013102.
136. A. Samarian, S. Vladimirov. Dust particle alignments in a plasma sheath // *Contrib. Plasma Phys.* — 2009 — T. 49, № 4/5 — C. 260—280.
137. E. Sametov, D. Kolotinskii, E. Lisin, A. Timofeev. Influence of wake field inhomogeneity on the vibrational spectra of two dust particles in a plasma with an ion flow // *Phys. Plasmas* — 2024 — T. 31, № 12 — C. 123705.
138. M. Salnikov, A. Fedoseev, G. Sukhinin. Plasma parameters around a chain-like structure of dust particles in an external electric field // *Molecules* — 2021 — T. 26, № 13 — C. 3846.
139. I. Lisina, O. Vaulina. Formation of chain-like structures of dust particles with anisotropic pair interaction // *Phys. Scr.* — 2014 — T. 89, № 10 — C. 105604.
140. A. Fedoseev, V. Litvinenko, E. Vasilieva, M. Vasiliev, O. Petrov. Vacancy formation in a 1D chain of dust particles in a DC discharge // *Sci. Rep.* — 2024 — T. 14, № 1 — C. 13252.
141. A. Fedoseev, M. Salnikov, M. Vasiliev, O. Petrov. Parameters of dust particle chains levitated vertically in a gas discharge plasma // *Phys. Plasmas* — 2024 — T. 31, № 6 — C. 063703.
142. M. Sal'nikov, A. Fedoseev, M. Vasil'ev, O. Petrov. Numerical Study of Structural Parameters of Dust Particle Chains of Different Lengths // *Plasma Phys. Rep.* — 2024 — T. 50, № 10 — C. 1280—1287.

143. A. Ignatov. Heat Conduction of Linear Chain of Dust Particles // *Plasma Phys. Rep.* — 2023 — T. 49, № 3 — C. 370—379.
144. O. S. Vaulina, I. I. Lisina, E. A. Lisin. Kinetic energy in a system of particles with a nonreciprocal interaction // *Europhys. Lett.* — 2015 — T. 111, № 5 — C. 50003.
145. E. Sametov, E. Lisin, O. Vaulina. Method of spectral response to stochastic processes for measuring the nonreciprocal effective interactions // *Phys. Rev. E* — 2023 — T. 108, № 5 — C. 055207.
146. L. Defaveri, C. Olivares, C. Anteneodo. Heat flux in chains of nonlocally coupled harmonic oscillators: Mean-field limit // *Phys. Rev. E* — 2022 — T. 105, № 5 — C. 054149.
147. А. ИГНАТОВ. УСТОЙЧИВОСТЬ ЛИНЕЙНОГО ПЛАЗМЕННОГО КРИСТАЛЛА // *Физика плазмы* — 2020 — Т. 46, № 3 — С. 213—218.
148. S. Nunomura, D. Samsonov, S. Zhdanov, G. Morfill. Heat transfer in a two-dimensional crystalline complex (dusty) plasma // *Phys. Rev. Lett.* — 2005 — T. 95, № 2 — C. 025003.
149. V. Nosenko, J. Goree, A. Piel. Laser method of heating monolayer dusty plasmas // *Phys. Plasmas* — 2006 — T. 13, № 3 — C. 032106.
150. V. Nosenko, S. Zhdanov, A. Ivlev, G. Morfill, J. Goree, A. Piel. Heat transport in a two-dimensional complex (dusty) plasma at melting conditions // *Phys. Rev. Lett.* — 2008 — T. 100, № 2 — C. 025003.
151. S. A. Loos, S. Arabha, A. Rajabpour, A. Hassanali, É. Roldán. Nonreciprocal forces enable cold-to-hot heat transfer between nanoparticles // *Sci. Rep.* — 2023 — T. 13, № 1 — C. 4517.
152. Y. Ashida, Z. Gong, M. Ueda. Non-hermitian physics // *Adv. Phys.* — 2020 — T. 69, № 3 — C. 249—435.
153. Y. O. Nakai, N. Okuma, D. Nakamura, K. Shimomura, M. Sato. Topological enhancement of nonnormality in non-Hermitian skin effects // *Phys. Rev. B* — 2024 — T. 109, № 14 — C. 144203.
154. L. Li, C. H. Lee, S. Mu, J. Gong. Critical non-Hermitian skin effect // *Nat. Commun.* — 2020 — T. 11, № 1 — C. 5491.

155. S. Rafi-Ul-Islam, Z. B. Siu, H. Sahin, C. H. Lee, M. B. Jalil. Unconventional skin modes in generalized topoelectrical circuits with multiple asymmetric couplings // *Phys. Rev. Res.* — 2022 — T. 4, № 4 — C. 043108.
156. X. Zhang, T. Zhang, M.-H. Lu, Y.-F. Chen. A review on non-Hermitian skin effect // *Adv. Phys.:X* — 2022 — T. 7, № 1 — C. 2109431.
157. A. Metelmann, A. A. Clerk. Nonreciprocal photon transmission and amplification via reservoir engineering // *Phys. Rev. X* — 2015 — T. 5, № 2 — C. 021025.
158. L. G. Silvestri, L. J. Stanek, G. Dharuman, Y. Choi, M. S. Murillo. Sarkas: a fast pure-python molecular dynamics suite for plasma physics // *Comput. Phys. Commun.* — 2022 — T. 272 — C. 108245.
159. R. Hockney, J. Eastwood. *Computer Simulations Using Particles* (Bristol: Adam Hilger) // — 1988 — —.
160. L. Greengard. Fast algorithms for classical physics // *Science* — 1994 — T. 265, № 5174 — C. 909—914.
161. E. Pollock, J. Glosli. Comments on P3M, FMM, and the Ewald method for large periodic Coulombic systems // *Comput. Phys. Commun.* — 1996 — T. 95, № 2/3 — C. 93—110.
162. I. Hutchinson. Intergrain forces in low-Mach-number plasma wakes // *Phys. Rev. E* — 2012 — T. 85, № 6 — C. 066409.
163. P. Eastman, J. Swails, J. D. Chodera, R. T. McGibbon, Y. Zhao, K. A. Beauchamp, L.-P. Wang, A. C. Simmonett, M. P. Harrigan, C. D. Stern [и др.]. OpenMM 7: Rapid development of high performance algorithms for molecular dynamics // *PLoS Comput. Biol.* — 2017 — T. 13, № 7 — C. e1005659.
164. Scott R. *Computer Simulation of Liquids*. [Текст]. — 1991.
165. H. C. Andersen. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature // *J. Chem. Phys.* — 1980 — T. 72, № 4 — C. 2384—2393.
166. I. Hutchinson, L. Patacchini. Computation of the effect of neutral collisions on ion current to a floating sphere in a stationary plasma // *Phys. Plasmas* — 2007 — T. 14, № 1 — C. 013505.
167. Amdahl G. Amdahl's law [Текст]. — 1967.

168. S. A. Loos, S. H. Klapp. Irreversibility, heat and information flows induced by non-reciprocal interactions // *New J. Phys.* — 2020 — T. 22, № 12 — C. 123051.
169. C. Liu. A method of symmetrization of asymmetric dynamical systems // *Shock Vib.* — 2005 — T. 12, № 4 — C. 309—315.
170. A. Bhaskar. Taussky's theorem, symmetrizability and modal analysis revisited // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* — 2001 — T. 457, № 2014 — C. 2455—2480.
171. J. Ford. Equipartition of energy for nonlinear systems // *J. Math. Phys.* — 1961 — T. 2, № 3 — C. 387—393.
172. N. Hatano, D. R. Nelson. Vortex pinning and non-Hermitian quantum mechanics // *Phys. Rev. B* — 1997 — T. 56, № 14 — C. 8651.
173. A. Maddi, Y. Aurégan, G. Penelet, V. Pagneux, V. Achilleos. Exact analog of the Hatano-Nelson model in one-dimensional continuous nonreciprocal systems // *Phys. Rev. Res.* — 2024 — T. 6, № 1 — C. L012061.
174. K. Kawabata, K. Shiozaki, M. Ueda, M. Sato. Symmetry and topology in non-Hermitian physics // *Phys. Rev. X* — 2019 — T. 9, № 4 — C. 041015.
175. N. Okuma, M. Sato. Non-Hermitian topological phenomena: A review // *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* — 2023 — T. 14, № 1 — C. 83—107.
176. P. Morigini, O. Arandes, E. J. Bergholtz. Anomalous skin effects in disordered systems with a single non-Hermitian impurity // *Phys. Rev. Res.* — 2023 — T. 5, № 3 — C. 033058.

Список рисунков

2.1	Иллюстрация геометрии области моделирования, используемой в OpenDust.	41
2.2	Стационарное распределение плотности ионов вокруг одиночной пылевой частицы в потоке плазмы. Координаты даны в единицах электронного радиуса Дебая, а концентрация ионов нормирована на концентрацию ионов в невозмущенной области плазмы. Поток ионов направлен вверх.	49
2.3	Сравнение временной зависимости заряда пылевой частицы, рассчитанного самосогласованно и с использованием OML-аппроксимации.	50
2.4	Временная зависимость силы ионного увлечения. Голубая линия показывает полную силу, красная линия — электрическую компоненту силы, возникающую во взаимодействии пылевой частицы с экранированными ионами.	51
2.5	Сравнение силы ионного увлечения с результатами предыдущих расчетов [8; 71]. Красные точки соответствуют данным OpenDust, линии служат для наглядности. Голубая пунктирная линия и синяя штрих-пунктирная линия показывают результаты, полученные в работах [71] и [8] соответственно.	51
2.6	Стационарное распределение плотности ионов вокруг одиночной пылевой частицы в столкновительном плазменном потоке, управляемом электрическим полем. Координаты представлены в единицах радиуса Дебая электронов, а концентрация ионов нормирована на значение в непо потревоженной области плазмы. Поток ионов направлен вверх.	53
2.7	Зависимость силы ионного увлечения (а) и заряда пылевой частицы (b) от частоты столкновений ионов с нейтральными атомами. Результаты OpenDust показаны синими точками, линии служат для наглядности. Красная пунктирная линия представляет данные из [166].	55
2.8	Иллюстрация передачи данных дискретных частиц между GPU и CPU.	57
2.9	Иллюстрация передачи данных между несколькими GPU для параллельного расчета сил.	58

- 2.10 Среднее время расчета динамики ионов при различных количествах ионов. Измеренные значения времени обозначены символами: NVIDIA A30 (синие треугольники), NVIDIA Tesla V100 (зеленые квадраты), NVIDIA Tesla A100 (красные круги), CPU (черные звезды). Аппроксимации временных зависимостей степенной функцией представлены линиями: NVIDIA A30 (синяя пунктирная линия), NVIDIA Tesla V100 (зеленая штрих-пунктирная линия), NVIDIA Tesla A100 (красная двойная штрих-пунктирная линия), CPU (черная сплошная линия). Полученные показатели степени для всех случаев близки к двум. 60
- 2.11 Зависимость времени моделирования от числа ионов. Символами обозначены измеренные времена для серии моделирования с постоянным объемом (красные треугольники) и для серии с постоянной концентрацией (зеленые круги). Аппроксимации измеренных значений времени для обеих серий представлены соответственно красной штрих-пунктирной линией и зеленой пунктирной линией. 62
- 2.12 Зависимость ускорения и эффективности моделирования от количества используемых графических процессоров. Красные треугольники и зеленые круги соответствуют моделированию с 2^{17} и 2^{15} ионов соответственно. 64
- 3.1 Схема экспериментальной установки (а) и конфигурации электродов вместе с приборами для диагностики (b). 69
- 3.2 Вид экспериментальной структуры пылевых частиц сверху(а) и сбоку (b). Диаграмма Вороного пылевой структуры (а) и ее увеличения в области сосуществования упорядоченной и неупорядоченной областей (b). 70
- 3.3 Радиальный профиль распределения кинетических температур в экспериментальной пылевой структуре. Нулевая координата по оси абсцисс соответствует центру структуры, где кинетическая температура пылевых частиц достигает своего максимума. 71
- 3.4 Типичный вид анизотропного распределения электростатического потенциала вокруг уединенной пылевой частицы в газоразрядной плазме. Поток ионов направлен слева направо. 72

3.5	Профили рассчитанных распределений потенциала вокруг одиночной пылевой частицы с зарядом $Q = 15000e$ вдоль направления внешнего электрического поля E_{ext} . Три кривые соответствуют разным значениям частоты ион-нейтральных столкновений.	73
3.6	Сравнение радиальных профилей средних кинетической энергии, полученных в данной работе экспериментально и в моделировании. .	74
3.7	Вид плазменно-пылевой структуры, полученной в моделировании: (а) вид сверху и (b) вид сбоку.	75
3.8	Тепловая карта распределения радиального электрического поля вокруг пылевой частицы в цилиндрических координатах. В областях, где радиальная проекция электрического поля положительна, отрицательно заряженная пылевая частица испытывает силу, направленную к верхней частице, то есть притягивается к ней в горизонтальном направлении.	78
3.9	Восстанавливающая горизонтальная сила, действующая на нижнюю пылевую частицу. Результаты OpenDust представлены красными точками, светло-голубая пунктирная линия и темно-синяя штрих-пунктирная линия соответствуют данным из [162] и [8].	79
3.10	Тепловая карта распределения заряда пылевой частицы в зависимости от её положения относительно второй частицы, представленное в цилиндрических координатах.	81
4.1	Соответствие между условиями консервативности (симметризуемости) и взаимности динамической системы и неэрмитовостью её матрицы переноса.	98
4.2	Зависимость спектра собственных значений $\Lambda(\hat{S})$ матрицы переноса от степени связи между концами одномерной цепи осцилляторов ξ . а) – действительная часть собственных значений, б) – мнимая часть. .	98
4.3	Локализация собственных векторов матрицы передачи $\hat{S}$ вблизи границы цепочки.	101
4.4	Средние кинетические энергии и эффективные температуры термостатов для вертикальных колебаний пары пылевых частиц в зависимости от мощности разряда при давлении 70 мТорр.	103

4.5	Средние кинетические энергии и эффективные температуры термостатов для горизонтальных колебаний пары пылевых частиц в зависимости от мощности разряда при давлении 70 мТорр.	104
-----	--	-----

Список таблиц

1	Параметры, используемые для моделирования бесстолкновительного максвелловского потока плазмы вокруг одиночной пылевой частицы для первого тестового случая	48
2	Параметры, используемые для моделирования столкновительного плазменного потока, управляемого электрическим полем, вокруг одиночной пылевой частицы	54
3	Характеристики протестированных устройств.	59
4	Обобщенная информация о предыдущих реализациях самосогласованного моделирования комплексной плазмы	65
5	Данные о производительности 3-D молекулярно-динамических симуляций комплексной плазмы	66
6	Параметры, используемые для моделирования бесстолкновительного максвелловского плазменного потока вокруг двух пылевых частиц . . .	84
7	Параметры моделирования зарядки пылевых частиц	85