

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

На правах рукописи

Колотинский Даниил Александрович

**Развитие теоретических и вычислительных подходов
описания влияния плазменного окружения на свойства
пылевых структур**

Специальность 1.3.9 —
«Физика плазмы»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук, доцент
Тимофеев Алексей Владимирович

Москва — 2025

Оглавление

	Стр.
Введение	4
Глава 1. Обзор литературы	12
1.1 Зарядка пылевых частиц	13
1.2 Силы, действующие на пылевые частицы	19
1.3 Учет плазменного окружения при моделировании свойств пылевых структур	30
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
2.1.3 Структура кода	47
2.2 Сравнение с теоретическими моделями, расчетами и экспериментом	51
2.2.1 Уединенная пылевая частица в потоке бесстолкновительной плазмы	52
2.2.2 Уединенная пылевая частица в потоке столкновительной плазмы	55
2.2.3 Две пылевые частицы в потоке бесстолкновительной плазмы	60
2.2.4 Зарядка пылевой частицы в системе из двух пылевых частиц в плазменном потоке	61
2.3 Выводы ко второй главе	66
Глава 3. Эффективность и производительность OpenDust на графических ускорителях	68
3.1 Логика использования графических ускорителей в OpenDust . . .	69

3.2	Сравнение производительности и эффективности на центральном и графических процессорах	70
3.3	Масштабирование размеров физической системы	73
3.4	Эффективность одновременного использования нескольких графических процессоров	75
3.5	Сравнение производительности с аналогами	76
3.6	Выводы к третьей главе	80
Глава 4. Термодинамические свойства упорядоченной системы пылевых частиц с учетом плазменного окружения		
4.1	Модель невязанно связанных гармонических осцилляторов в термостате Ланжевена	84
4.2	Стационарная динамика системы осцилляторов в контакте с ланжевенским термостатом	87
4.2.1	Детальный баланс	87
4.2.2	Критерий и мера неконсервативности	90
4.3	Термодинамические эффекты вне взаимности и консервативности	93
4.3.1	Теорема о равнораспределении	93
4.3.2	Классификация матрицы переноса в рамках физики неэрмитовых систем	95
4.3.3	Перенос тепла	97
4.3.4	Локализация распределения кинетических температур	100
4.4	Выводы к четвертой главе	102
Заключение		104
Словарь терминов		107
Список литературы		108
Список рисунков		124
Список таблиц		127

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, согласно которому действие равно противодействию [6; 7]. В результате возникают нетривиальные эффекты: нарушение теоремы о равномерном распределении кинетической энергии, появление обратных тепловых потоков, 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 вычислительный инструмент для расчёта зарядов микронных и субмикронных пылевых частиц и сил, действующих на них в потоке газоразрядной плазмы, в широком диапазоне параметров, характерных для условий наземных экспериментов, с использованием метода самосогласованного моделирования.
2. Повысить эффективность использования графических ускорителей в методе асимметричной молекулярной динамики для расчёта зарядов и сил в кластерах пылевых частиц в плазме газового разряда, с целью обеспечения возможности первого самосогласованного многомасштабного моделирования динамики пылевых частиц с учётом плазмы.
3. Исследовать термодинамические эффекты, такие как обратные потоки тепла, неравномерное распределение кинетических температур и их локализация, с помощью подхода на основе неэрмитовой физики для объяснения наблюдаемых явлений в упорядоченных системах пылевых частиц под воздействием плазменного окружения.

Научная новизна:

1. Разработан оригинальный программный код OpenDust для расчета зарядов микронных и субмикронных пылевых частиц и сил, действующих на них, в потоке газоразрядной плазмы, в широком диапазоне параметров — скоростей плазменного потока, частот ион-нейтральных столкновений, размеров пылевых частиц и концентраций заряженных компонентов — соответствующих условиям наземных плазменно-пылевых экспериментов.
2. Показано, что использование графических ускорителей для самосогласованного моделирования пылевой плазмы в рамках метода асим-

метричной молекулярной динамики позволяет рассчитывать заряды и силы в кластерах пылевых частиц в потоке газоразрядной плазмы, превосходя по скорости расчета все известные реализации в десятки раз и впервые обеспечивая возможность выхода на многомасштабное моделирование динамики пылевых частиц с учетом влияния плазмы.

3. Было выполнено оригинальное исследование для объяснения свойств, наблюдаемых в упорядоченных системах пылевых частиц, таких как обратные потоки тепла, неравномерное распределение кинетических температур и их локализация, с использованием формализма неэрмитовой физики для описания матрицы переноса.

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 кинетических температур и их локализации в упорядоченных системах пылевых частиц, что позволяет объяснить наблюдаемые термодинамические эффекты, такие как обратные потоки тепла и неравномерное распределение температур. Показано, что эти эффекты связаны с эффективным нарушением симметрии межчастичных взаимодействий (невзаимностью), приводящей к неэрмитовой структуре матрицы переноса, описывающей связь между средними кинетическими энергиями колебательных степеней свободы системы и интенсивностью флуктуационных воздействий со стороны окружающей среды. Тем самым работа расширяет теоретическое понимание термодинамики открытых плазменно-пылевых систем, в которых реализуются аномальные эффекты распределения температур и переноса тепла, вызванные 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 подтверждено результатами тестирования на различных моделях. 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, обработку материалов и анализ запылённости в плазменных реакторах. 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 тепловых потоков и распределения кинетической энергии между степенями свободы системы осуществляется с применением формализма неэрмитовой физики, что поз-

воляет более глубоко понять механизмы, стоящие за термодинамическими свойствами пылевых структур.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Разработанный программный код OpenDust позволяет самосогласованно рассчитывать заряды и силы в кластерах пылевых частиц, обтекаемых потоком газоразрядной плазмы, в широком диапазоне параметров — скоростей плазменного потока, частот ион-нейтральных столкновений, размеров пылевых частиц и концентраций заряженных компонентов — соответствующих условиям наземных плазменно-пылевых экспериментов.
2. Эффективное использование графических ускорителей в рамках метода асимметричной молекулярной динамики обеспечивает ускорение расчёта зарядов и сил в кластерах пылевых частиц в потоке газоразрядной плазмы в десятки раз по сравнению с известными реализациями, что делает возможным многомасштабное самосогласованное моделирование динамики пылевых частиц с учётом влияния плазмы.
3. Явления, наблюдаемые в упорядоченных системах пылевых частиц в присутствии потока плазмы — такие как обратные потоки тепла, неравномерное распределение кинетических температур и их локализация — объясняются неэрмитовостью матрицы переноса, которая связывает кинетические температуры степеней свободы системы с интенсивностью стохастических воздействий со стороны окружающей среды.

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]. Важным аспектом является согласованность наблюдаемых эффектов неравномерного распределения кинетических температур 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 мето-

да 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 невзаимности 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 состо-

- яния 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 3 печатных изданиях, 3 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 3 — 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. 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>
3. 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 объем диссертации составляет 127 страниц, включая 22 рисунка и 7 таблиц. Список литературы содержит 179 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 равнораспределения, 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. Основной механизм 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 (ОМЛ — 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.

ОМЛ 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 ОМЛ по заряду пылевой частицы согласуются с ОМ в случае, когда размер частицы намного меньше дебаевского радиуса.

С развитием исследований была предложена расширенная версия ОМЛ, 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 ОМЛ, 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 форму-

лы 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]. Основной механизм 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 околосвуковой скоростью, где концентрация ионов в следе значительно возрастает. Исследования 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 ОМЛ, поскольку столкновения электронов с нейтралами 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 ОМЛ 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 ОМЛ 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 частица 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 длина 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 длина 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 длина 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 Швейгерт [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 разработана 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 позволили 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 ли-

нейного 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 решалось 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 сдвинутой 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 длина столкновений ионов 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 правдоподобному 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, COPIC) [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 бальцмановская 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 Швейгерт [95]. В оригинальной работе эта модель использовалась для анализа возникновения неустойчивости в бислойной структуре пылевых частиц, известной как неустойчивость Швейгерт. 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 структуры. 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 равномерного распределения 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 не взаимностью взаимодействий. В частности, обнаружено нарушение теоремы равномерного распределения, 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 молекулярной динамике, позволяющей учитывать индивидуальные 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 и системы из двух пылевых частиц 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 уменьшением 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 пламенно-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 аппликата 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 аппликата.

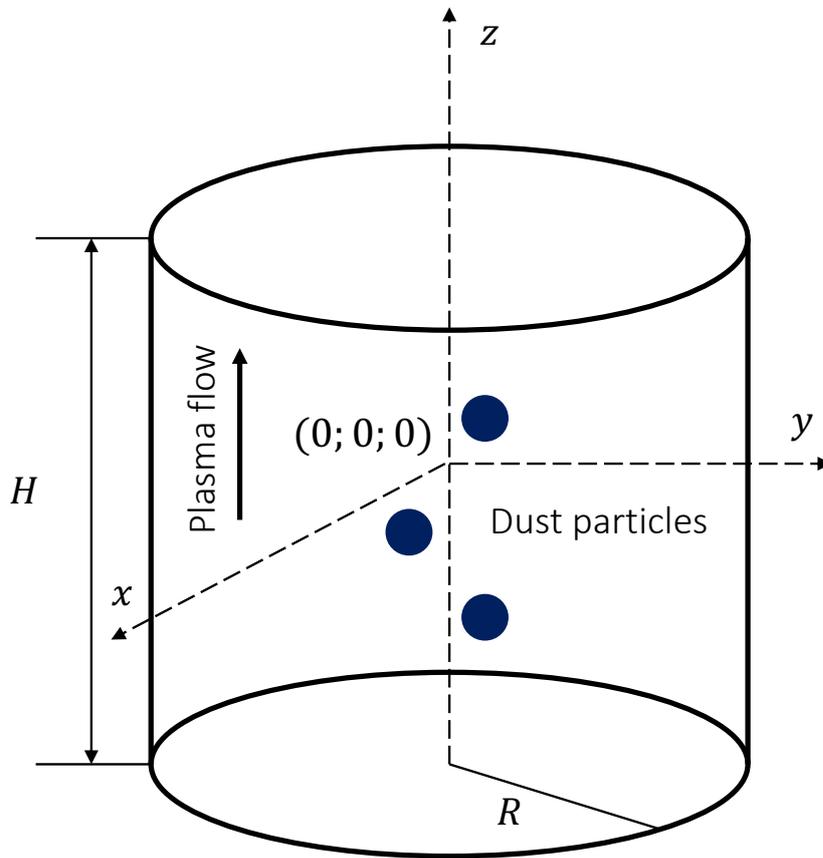


Рисунок 2.1 — Иллюстрация геометрии области моделирования, используемой в OpenDust.

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:

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

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

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:

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

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], а сами столкновения моделируются с помощью термостата Андерсона [165].

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, \mathbf{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:

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

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:

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

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:

$$\mathbf{F}_{ext} = Q_d \mathbf{E}_{ext}, \quad (2.20)$$

где \mathbf{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.

2.1.3 Структура кода

OpenDust разработан с целью облегчить исследования в области пылевой плазмы, предоставляя исследователям эффективный и удобный инструмент для моделирования потока плазмы вокруг пылевых частиц и расчета сил, действующих на них. Этот программный код ориентирован на широкий круг пользователей: от экспериментаторов до теоретиков, от студентов, впервые изучающих физику пылевой плазмы, до опытных исследователей.

OpenDust полностью написан на Python и основан оптимизированной под GPU библиотеке для молекулярной динамики OpenMM [163]. OpenMM используется для расчета траекторий ионов, что обычно является «бутылочным горлышком» при моделировании потока плазмы вокруг пылевых частиц. Поэтому OpenDust унаследовал от OpenMM высокооптимизированный бэк-энд с возможностью работы с GPU. Кроме того, OpenDust опирается на широко используемые математические пакеты Python, такие как CuPy [166], NumPy [167] и SciPy [168], которые оптимизированы и тщательно документированы.

Основным классом пакета является `OpenDust`. Этот класс хранит информацию о моделируемой системе и имеет основной метод `simulate()` для выполнения расчетов. При каждом моделировании должен быть определен объект класса `OpenDust`. Для построения объекта класса `OpenDust` необходимы четыре вспомогательных объекта. Взаимодействие между основными и вспомогательными объектами показано на рисунках 2.2 и 2.3. Вспомогательные классы логически разделяют процесс запуска моделирования: определение параметров плазмы, моделирования, пылевых частиц и формата вывода. OpenDust оперирует параметрами в единицах СИ.

Класс `PlasmaParametersInSIUnitsMaxwell` или класс `PlasmaParametersInSIUnitsFieldDriven` используются для определения параметров плазмы в случае бесстолкновительного максвелловского потока плазмы или в случае столкновительного потока плазмы под действием электрического поля соответственно. Для обоих классов пользователи должны задать значе-

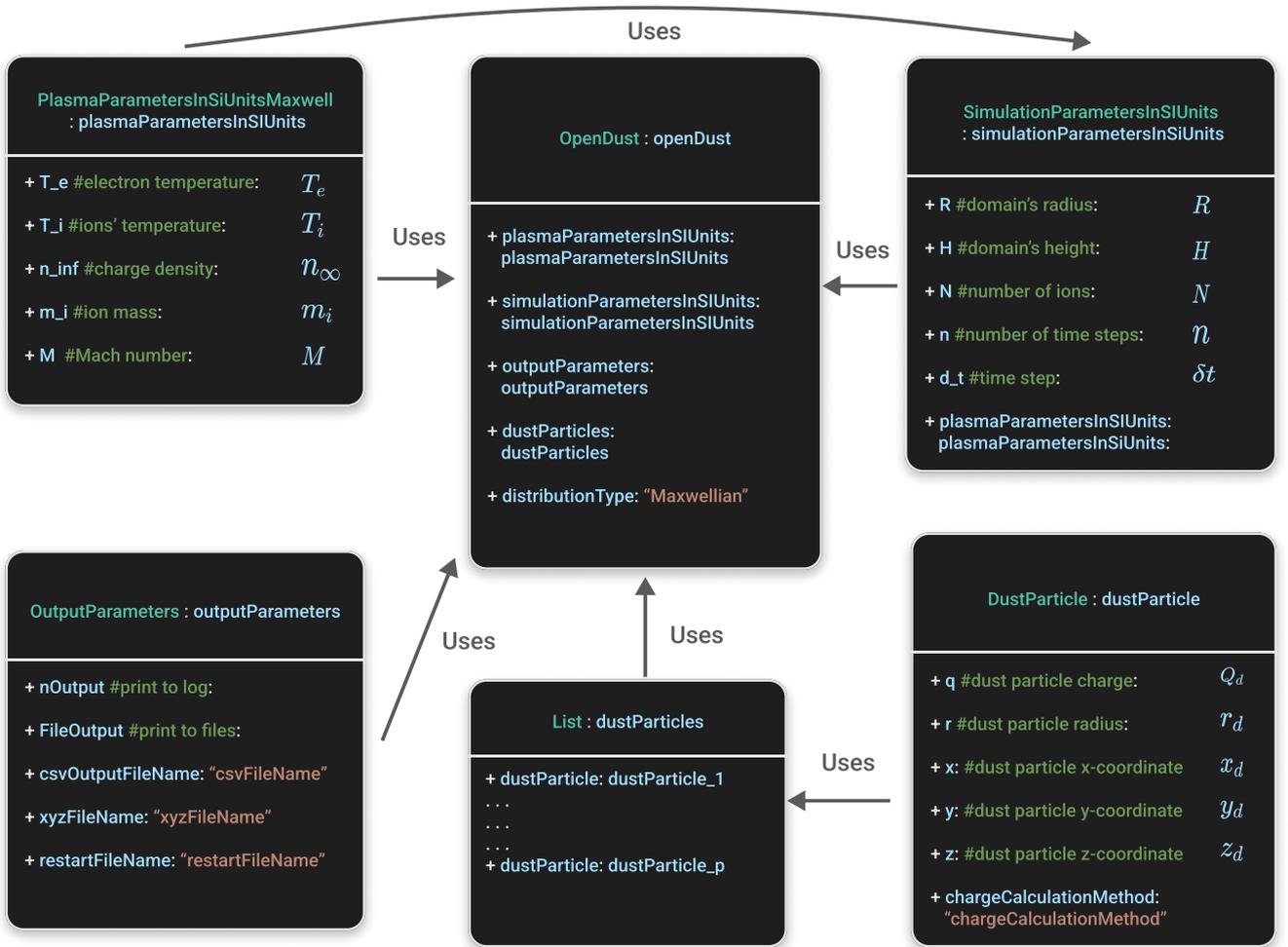


Рисунок 2.2 — Диаграмма взаимодействия объектов класса `OpenDust` для случая бесстолкновительного максвелловского потока плазмы.

ние электронной температуры T_e , концентрацию ионов в квазинейтральной области n_∞ , массу ионов m_i . Класс `PlasmaParametersInSIUnitsMaxwell` требует дополнительно определения числа Маха плазменного потока M , а класс `PlasmaParametersInSIUnitsFieldDriven` требует значения движущего электрического поля E_{ext} и частоты ионно-нейтральных столкновений ν_{in} .

`OpenDust` предлагает как консольный, так и файловый вывод во время моделирования. Параметры вывода могут быть определены с помощью класса `OutputParameters`. Конструктор класса `OutputParameters` принимает пять позиционных аргументов: `nOutput`, `nFileOutput`, `csvOutputFileName`, `xyzOutputFileName`, `restartFileName`. В процессе моделирования часть информации выводится в консоль каждый `nOutput` шаг по времени интегрирования, а позиции ионов записываются в файл каждый `nFileOutput` шаг по времени интегрирования. Значения по умолчанию для `nOutput` и `nFileOutput` равны десяти. Позиции ионов могут быть записаны в файлы форматов `.xyz` или `.csv`.

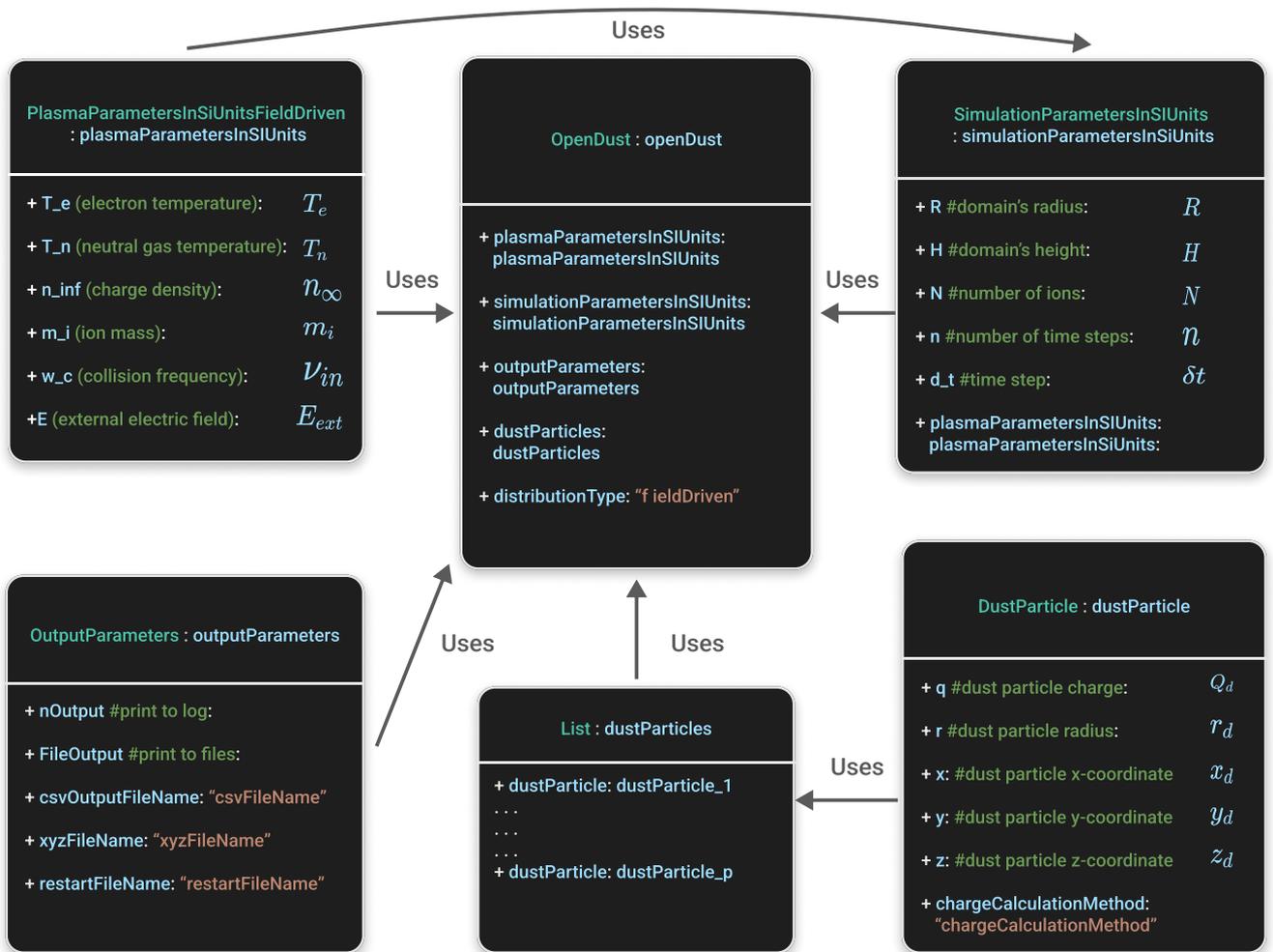


Рисунок 2.3 — Диаграмма взаимодействия объектов класса `OpenDust` для случая столкновительного потока плазмы, управляемого полем.

Данные в этих форматах можно легко визуализировать, например, с помощью программ `ParaView` или `Ovito` с открытым исходным кодом. Абсолютные пути к файлам `.xyz` и `.csv` могут быть указаны с помощью `xyzOutputFileName` и `csvOutputFileName` соответственно. Пользователи также могут задать имя файла, из которого может быть перезапущено моделирование `restartFileName`. По умолчанию имя выходного файла представляет собой пустую строку, что означает, что данные не записываются.

Параметры пылевых частиц определяются с помощью Python-списка объектов класса `DustParticle`. Если в моделировании нет частиц пыли, то список Python следует оставить пустым. Для каждой частицы пыли должен быть создан отдельный объект класса `DustParticle`. Для создания объекта класса `DustParticle` необходимо задать начальный заряд Q_d , радиус r_d и три координаты положения x_d , y_d , z_d частицы пыли. Метод расчета зарядов пылевых частиц может быть задан с помощью параметра `chargeCalculationMethod`. До-

ступны три варианта: постоянный заряд «given», расчет заряда из OML «oml» и самосогласованный расчет заряда «consistent». Метод вычисления заряда должен быть одинаковым для всех объектов класса `DustParticle`, используемых в моделировании.

Когда все четыре вспомогательных объекта определены, можно построить объект класса `OpenDust`. Конструктор класса `OpenDust` требует еще один необходимый аргумент `distributionType`, который описывает, используется ли случай бесстолкновительного максвелловского потока плазмы «Maxwellian» или случай столкновительного потока плазмы, движимый полем, «fieldDriven». Необходимо обратить внимание, что «Maxwellian» может использоваться только с объектами класса `PlasmaParametersInSIUnitsMaxwell`, а «fieldDriven» только с объектами класса `PlasmaParametersInSIUnitsFieldDriven`.

Моделирование можно запустить с помощью метода `simulate()` объекта класса `OpenDust`. `simulate()` принимает три необязательных ключевых аргумента, `deviceIndex`, `cutOff`, и `toRestartFileName`. С помощью аргумента `deviceIndex` можно задать индексы устройств GPU, необходимых для вычислений. Значение аргумента `deviceIndex` представляет собой строку индексов устройств, разделенных запятыми, по умолчанию «0», т.е. используется только одно GPU-устройство. Аргумент `cutOff` может быть `True` или `False`, по умолчанию `False`. Аргумент `cutOff` описывает, использовать ли радиус обрезки для расчета ион-ионных взаимодействий или нет. Значением по умолчанию аргумента `toRestartFileName` является пустая строка. Если аргумент не является пустой строкой, то `OpenDust` попытается перезапустить моделирование, используя файл перезапуска `toRestartFileName`.

При инициализации объекта класса `OpenDust` создаются его атрибуты `t` и `dustParticles`. После завершения моделирования плазменного потока эти атрибуты могут быть использованы для анализа зависящих от времени зарядов пылевых частиц и действующих на них сил. Диаграмма зависимости для этих атрибутов представлена на рисунке 2.4. `t(n)` - одномерный массив `numpy`, в котором хранятся дискретные моменты времени, в которых вычисляется состояние системы. Длина массива равна количеству временных шагов интегрирования `n`. Единицами измерения временных шагов являются секунды. `dustParticles` - список Python, каждый элемент которого представляет собой объект класса `OpenDust.DustParticle`, связанный с отдельной пылевой частицей. Объект класса `OpenDust.DustParticle` имеет пять атри-

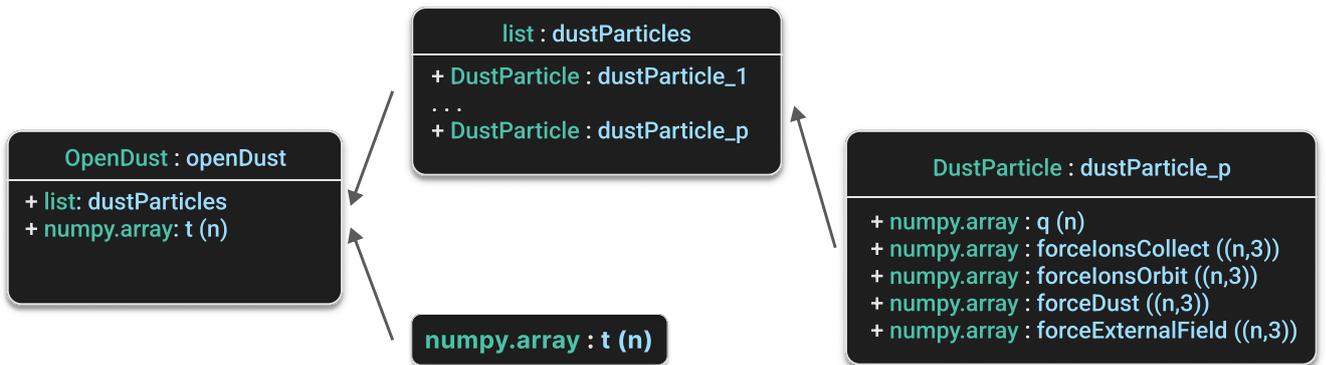


Рисунок 2.4 — Диаграмма зависимости атрибутов `t` и `dustParticles`.

бутов: заряд пылевой частицы $q(n)$, сила от электрического взаимодействия между ионами и пылевой частицей $forceIonsOrbit((n,3))$. (2.17), сила электрического взаимодействия пылинка-пылинка $forceDust((n,3))$ (2.18), сила, обусловленная передачей импульса при прямых столкновениях ионов с пылевой частицей $forceIonsCollect((n,3))$. (2.19), сила от внешнего однородного электрического поля $forceExternalField((n,3))$ (2.20). $q(n)$ - это одномерный массив `numpy`, а $forceIonsOrbit((n,3))$, $forceDust((n,3))$, $forceIonsCollect((n,3))$, $forceExternalField((n,3))$ - двумерные массивы `numpy`. В первом измерении массивов атрибутов хранится временной ряд заряда и силы. Второе измерение массивов сил используется для хранения трех пространственных компонент сил.

2.2 Сравнение с теоретическими моделями, расчетами и экспериментом

Для того чтобы проиллюстрировать возможности `OpenDust`, представляются несколько тестовых примеров. Эти тесты можно найти в каталоге `example` репозитория `OpenDust`. Кроме того, тесты предназначены для проверки кода по сравнению с предыдущими расчетами пылевой плазмы, аналитическими теориями и экспериментом.

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 2.5 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 2.6. Как видно, обе зависимости хорошо совпадают, что подтверждает корректность реализованного метода расчета заряда.

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 и экранированными ионами (2.17), а также силу, возникающую за счет передачи импульса при столкновениях ионов с пылевой частицей (2.19). На рисунке 2.7 представлены зависимости полной силы и электрической составляющей от времени. Колебания полной силы оказываются более выраженными из-за вклада силы передачи импульса. Спустя примерно восемь

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

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

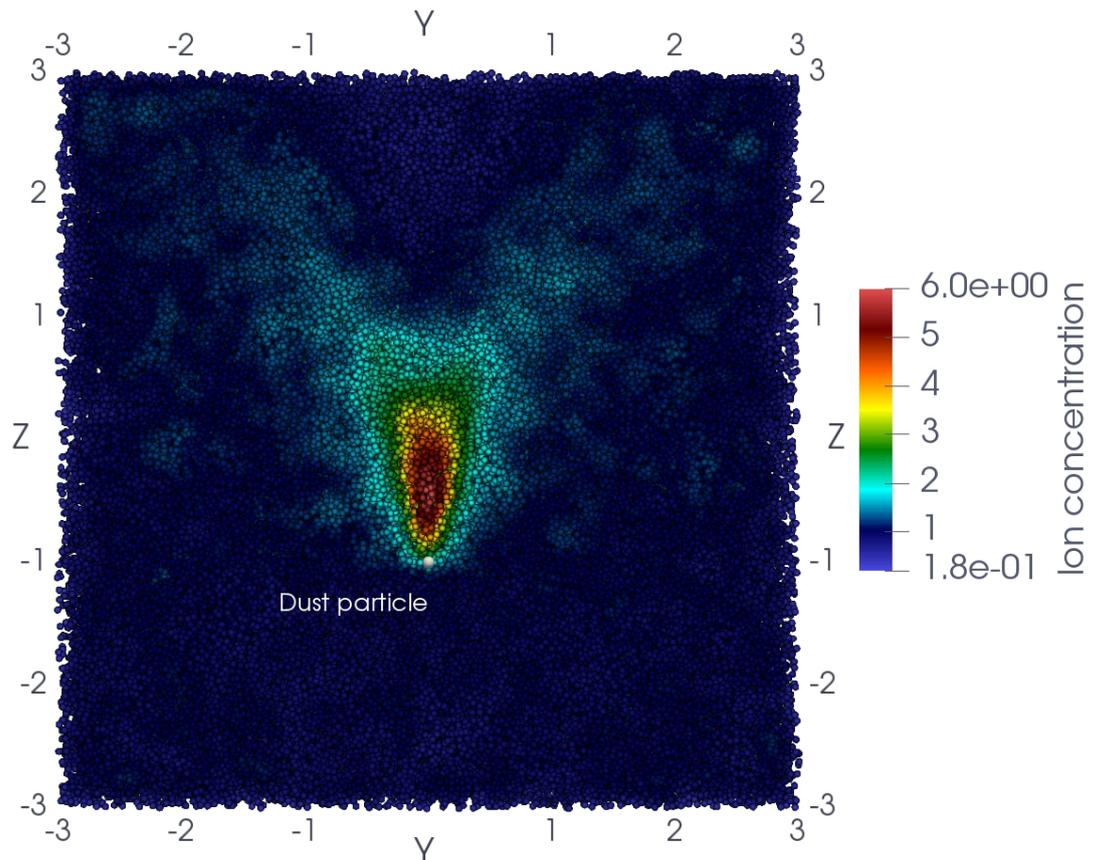


Рисунок 2.5 — Стационарное распределение плотности ионов вокруг одиночной пылевой частицы в потоке плазмы. Координаты даны в единицах электронного радиуса Дебая, а концентрация ионов нормирована на концентрацию ионов в невозмущенной области плазмы. Поток ионов направлен вверх.

до двух минут. В сравнении с этим, CPU-реализация метода частиц в ячейках Coptic [11] требует примерно одного часа вычислений.

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

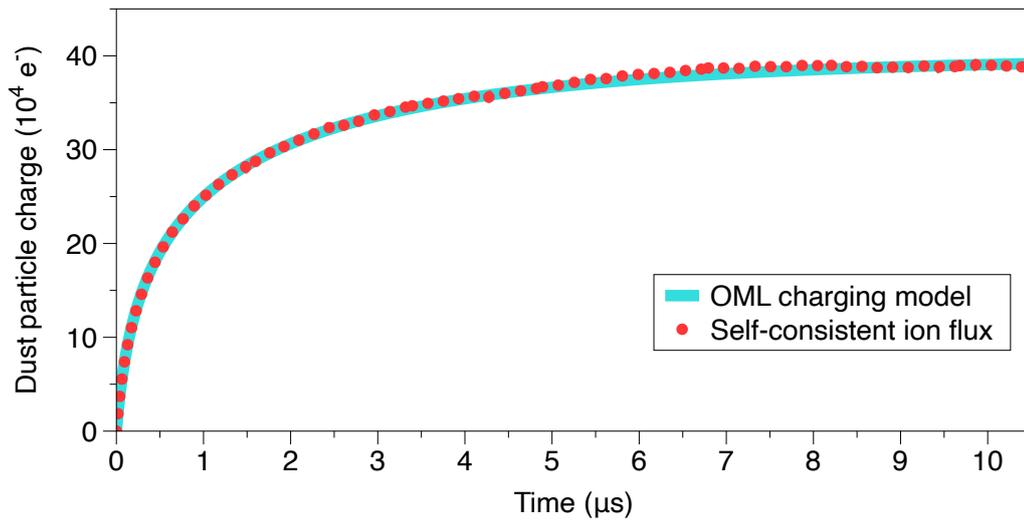


Рисунок 2.6 — Сравнение временной зависимости заряда пылевой частицы, рассчитанного самосогласованно и с использованием OML-аппроксимации.

указанных ссылок 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 вокруг пылевой частицы в таких условиях показано на рисунке 2.9. 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 [169]. В ходе расчетов определялись

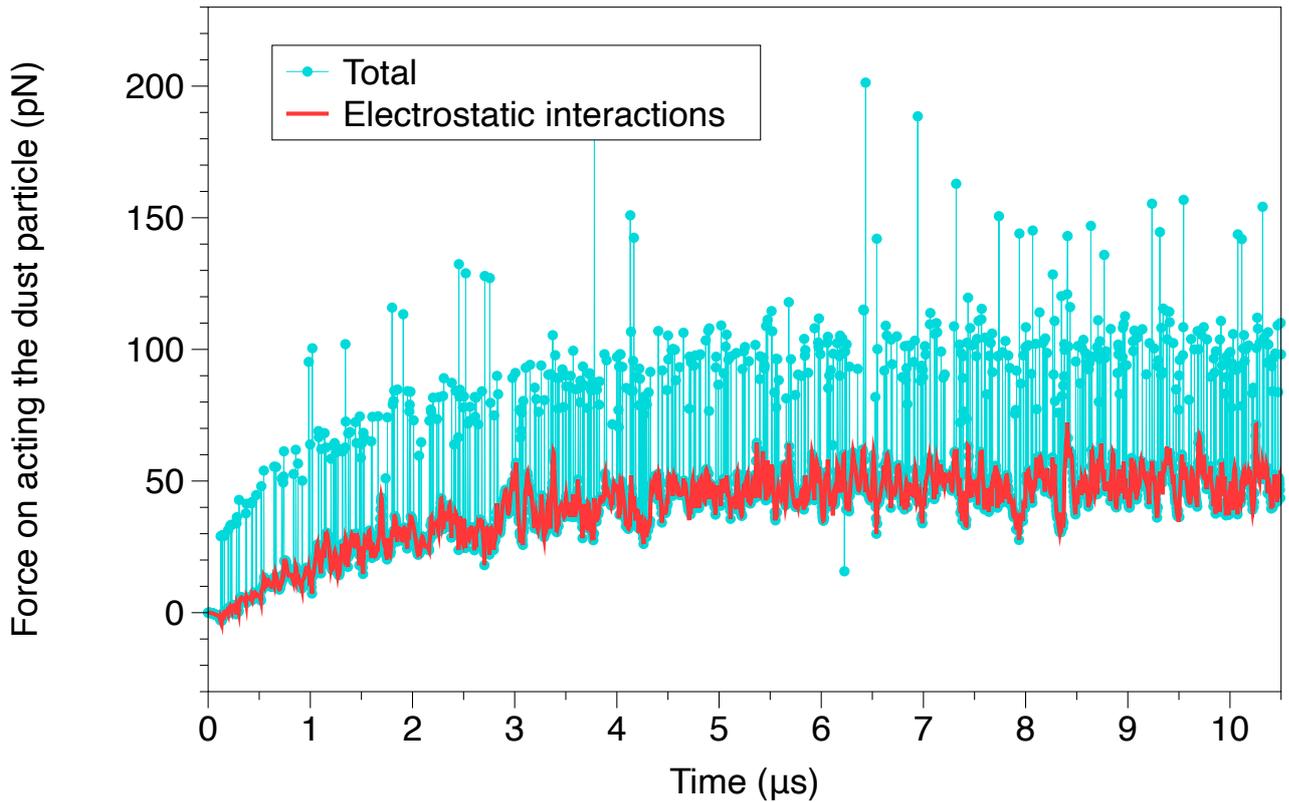


Рисунок 2.7 — Временная зависимость силы ионного увлечения. Голубая линия показывает полную силу, красная линия — электрическую компоненту силы, возникающую во взаимодействии пылевой частицы с экранированными ионами.

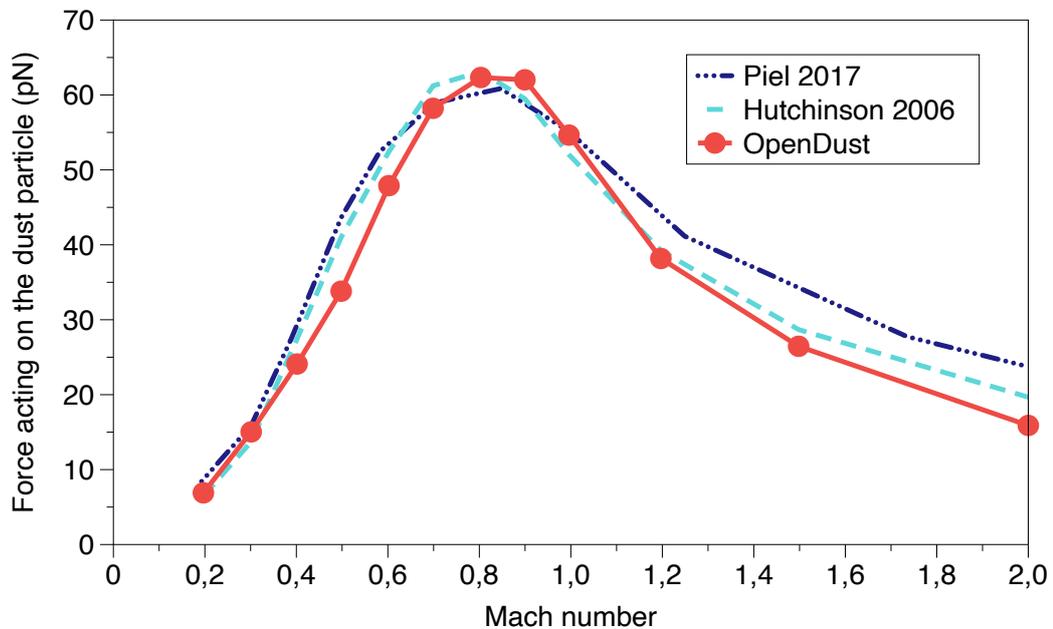


Рисунок 2.8 — Сравнение силы ионного увлечения с результатами предыдущих расчетов [8; 71]. Красные точки соответствуют данным OpenDust, линии служат для наглядности. Голубая пунктирная линия и синяя штрих-пунктирная линия показывают результаты, полученные в работах [71] и [8] соответственно.

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:

$$\mathbf{E}_{ext} = v_B \mathbf{v}_{in} \frac{m_i}{q_i}, \quad (2.21)$$

где v_B — скорость Бома, \mathbf{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 [169] для зависимости силы ионного увлечения и заряда пылевой частицы представлено на рисунке 2.10. Результаты OpenDust демонстрируют хорошее согласие с расчетами, выполненными методом частиц в ячейках, как для силы ионного увлечения, так и для заряда пылевой частицы.

Ранее были рассмотрены результаты моделирования обтекания одиночной пылевой частицы плазменным потоком. В данном разделе рассматривается случай двух взаимодействующих пылевых частиц. Технически запуск скрипта для моделирования одиночной пылевой частицы и группы частиц осуществляется одинаково. В случае одной пылевой частицы список `dust-Particles` содержит лишь один объект класса `Dust-Particle`. Добавление дополнительных пылевых частиц в систему осуществляется простым расширением данного списка.

Для проверки корректности моделирования системы из нескольких пылевых частиц с помощью OpenDust были проведены сравнения рассчитанных сил, действующих в системе из двух пылевых частиц, с результатами, представленными в работе [8]. В данной системе верхняя частица фиксируется в положении $x = 0, z = -0.5r_{De}$, а нижняя частица располагается на расстоянии $\Delta z = 1.0r_{De}$ по вертикали и $\Delta x = 0.5r_{De}$ по горизонтали от верхней частицы. Используемые параметры приведены в таблице 3. Заряды пылевых частиц фиксированы, а поток плазмы считается бесстолкновительным и максвелловским. В случае моделирования системы из нескольких пылевых частиц для вычисления полной силы, действующей на каждую частицу, к силам ион-пылевого взаимодействия

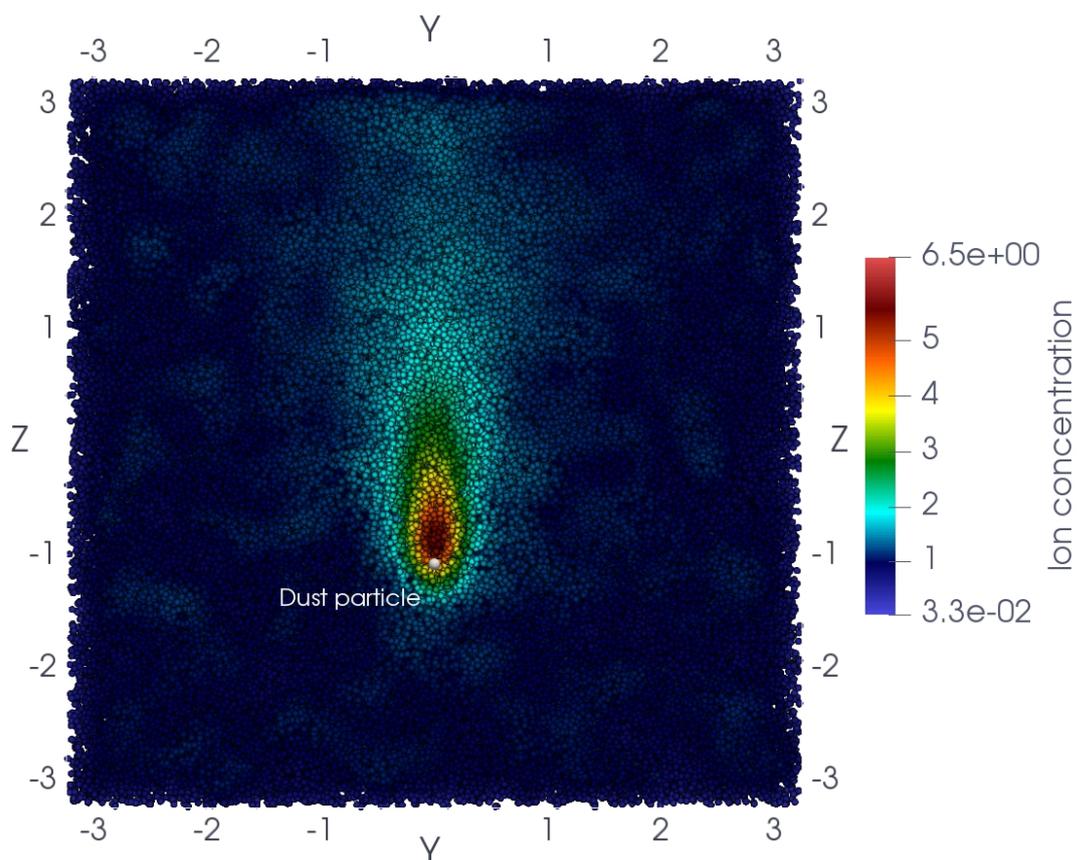


Рисунок 2.9 — Стационарное распределение плотности ионов вокруг одиночной пылевой частицы в столкновительном плазменном потоке, управляемом электрическим полем. Координаты представлены в единицах радиуса Дебая электронов, а концентрация ионов нормирована на значение в непоколебленной области плазмы. Поток ионов направлен вверх.

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

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

Параметры плазмы

Температура электронов T_e	30000	К
Температура ионов T_i	300	К
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

добавляются также силы взаимодействия между самими пылевыми частицами, определяемые выражением (2.18).

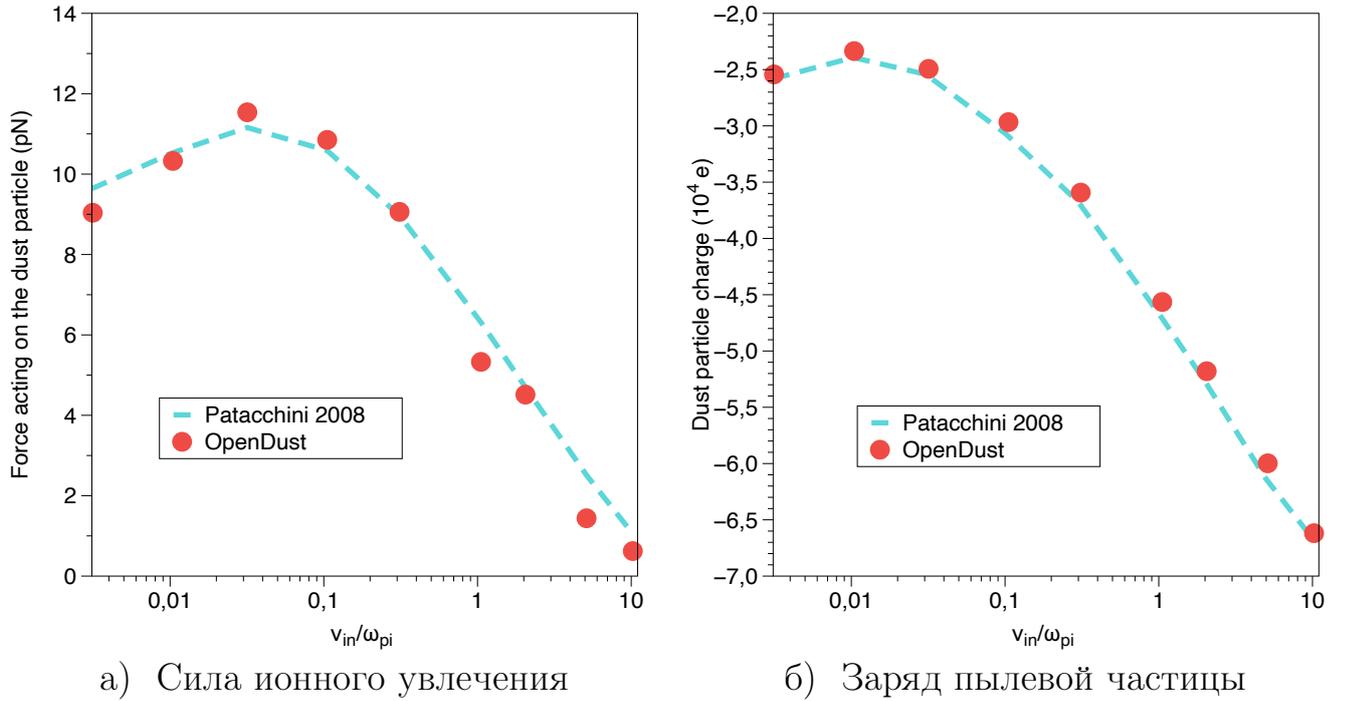


Рисунок 2.10 — Зависимость силы ионного увлечения (а) и заряда пылевой частицы (б) от частоты столкновений ионов с нейтральными атомами. Результаты OpenDust показаны синими точками, линии служат для наглядности. Красная пунктирная линия представляет данные из [169].

2.2.3 Две пылевые частицы в потоке бесстолкновительной плазмы

Ранее были рассмотрены результаты моделирования обтекания одиночной пылевой частицы плазменным потоком. В данном разделе рассматривается случай двух взаимодействующих пылевых частиц. Технически запуск скрипта для моделирования одиночной пылевой частицы и группы частиц осуществляется одинаково. В случае одной пылевой частицы список `dust-Particles` содержит лишь один объект класса `Dust-Particle`. Добавление дополнительных пылевых частиц в систему осуществляется простым расширением данного списка.

Для проверки корректности моделирования системы из нескольких пылевых частиц с помощью OpenDust были проведены сравнения рассчитанных сил, действующих в системе из двух пылевых частиц, с результатами, представленными в работе [8]. В данной системе верхняя частица фиксируется в положении $x = 0, z = -0.5r_{De}$, а нижняя частица располагается на расстоянии $\Delta z = 1.0r_{De}$ по вертикали и $\Delta x = 0.5r_{De}$ по горизонтали от верхней частицы. Используемые

параметры приведены в таблице 3. Заряды пылевых частиц фиксированы, а поток плазмы считается бесстолкновительным и максвелловским. В случае моделирования системы из нескольких пылевых частиц для вычисления полной силы, действующей на каждую частицу, к силам ион-пылевого взаимодействия добавляются также силы взаимодействия между самими пылевыми частицами, определяемые выражением (2.18).

Взаимосвязь между восстанавливающей горизонтальной силой, действующей на нижнюю пылевую частицу, и числом Маха потока ионов представлена на рисунке 2.11. Полученные в OpenDust результаты сравниваются с ранее выполненными расчетами [8; 162]. В условиях отсутствия плазменного потока две одноименно заряженные макрочастицы отталкиваются друг от друга в горизонтальном направлении. Однако при наличии потока плазмы наблюдается эффект, при котором нижняя частица испытывает эффективное притяжение к верхней, в то время как верхняя частица, наоборот, отталкивается от нижней. Этот феномен объясняется фокусировкой ионов за верхней частицей в направлении движения потока плазмы. Полученные в OpenDust результаты хорошо согласуются с референсными расчетами [8; 162], а также с экспериментальными наблюдениями, подтверждающими наличие эффективного притяжения нижней частиц к верхней по потоку [133; 135].

2.2.4 Зарядка пылевой частицы в системе из двух пылевых частиц в плазменном потоке

В данном разделе рассмотрена система из двух пылевых частиц, расположенных одна над другой вдоль направления потока плазмы газового разряда. Моделирование проведено с использованием кода OpenDust с учётом ион-нейтральных столкновений при фиксированном наборе параметров плазмы. Основной целью является анализ зависимости заряда нижней пылевой частицы от её положения относительно верхней.

Параметры, использованные при моделировании, приведены в таблице 4. Верхняя частица фиксирована в пространстве, а заряд нижней определяется как функция её вертикального положения.

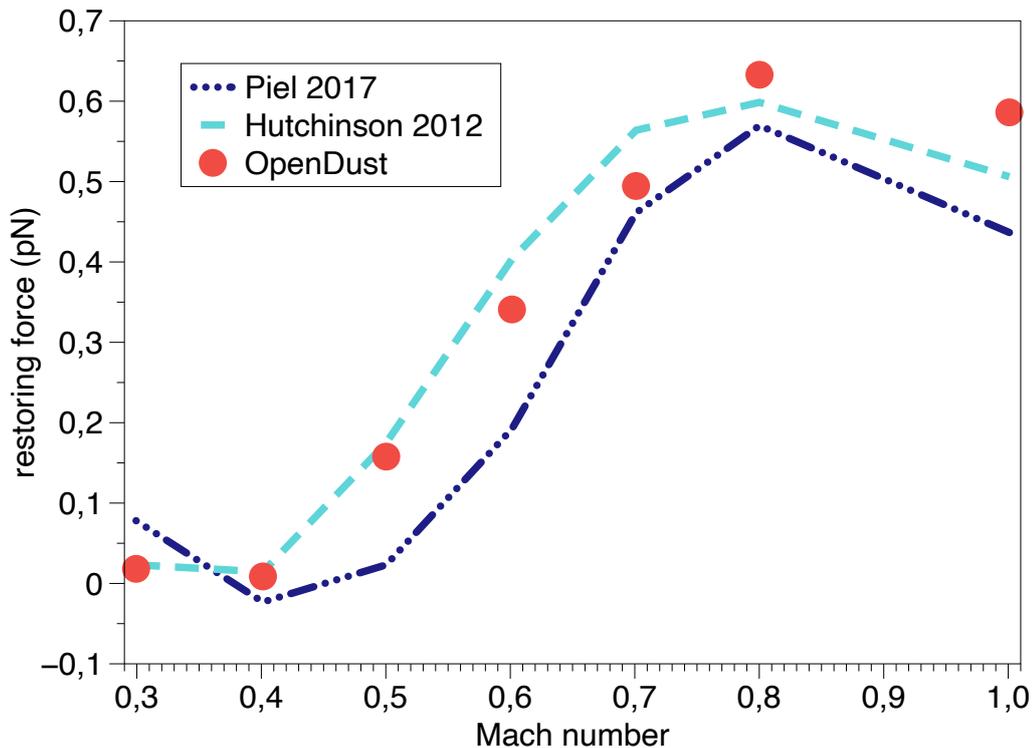


Рисунок 2.11 — Восстанавливающая горизонтальная сила, действующая на нижнюю пылевую частицу. Результаты OpenDust представлены красными точками, светло-голубая пунктирная линия и темно-синяя штрих-пунктирная линия соответствуют данным из [162] и [8].

На рисунке 2.12 показана зависимость относительного заряда нижней пылевой частицы от расстояния до верхней. Заряд нормирован на значение, которое частица имела бы при отсутствии соседней (изолированная частица в тех же условиях).

Результаты моделирования показывают, что при приближении нижней частицы к верхней её заряд становится менее отрицательным. Максимальное относительное уменьшение заряда составляет ~ 0.75 по сравнению с уединённой частицей. Такой эффект связан с фокусировкой ионного потока в области между частицами. Такое снижение значения заряда нижней пылевой частицей согласуется с экспериментальными результатами и численным моделированием, проведённым с использованием пакета DiP3D и DRIAD [10; 49; 134].

Важно отметить, что в достаточно широкой области положений нижней частицы наблюдается рост её заряда при приближении к верхней. Этот эффект 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

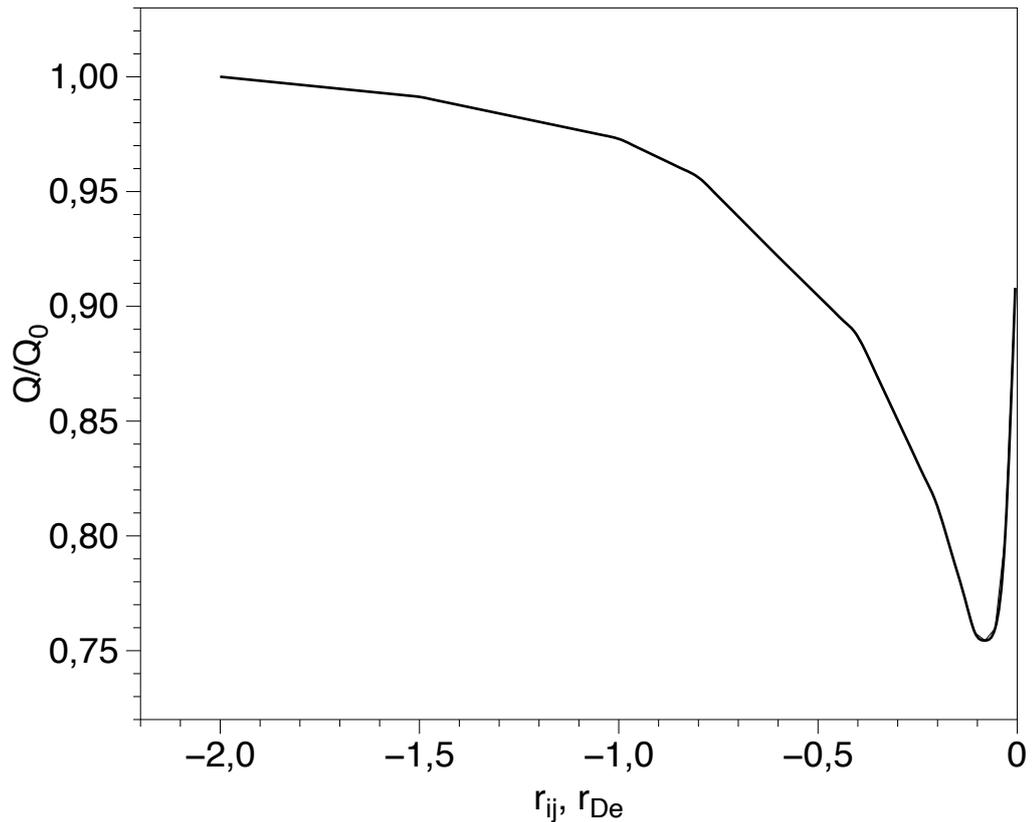


Рисунок 2.12 — Относительное значение заряда нижней пылевой частицы в зависимости от её вертикального положения относительно верхней частицы. Заряд нормирован на значение для уединённой частицы.

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 термодинамические свойства упорядоченных структур, включая распределение кинетических температур и особенности теплопереноса.

Таблица 3 — 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 4 — 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

2.3 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, а также система из двух пылевых частиц. 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.

Результаты этой главы подтверждают положение 1, выносимое на защиту: «Разработанный программный код `OpenDust` позволяет самосогласованно рассчитывать заряды и силы в кластерах пылевых частиц, обтекаемых потоком газоразрядной плазмы, в широком диапазоне параметров — скоростей плазменного потока, частот ион-нейтральных столкновений, размеров пылевых частиц

и концентраций заряженных компонентов — соответствующих условиям наземных плазменно-пылевых экспериментов.»

Глава 3. Эффективность и производительность OpenDust на графических ускорителях

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. В предыдущей главе был представлен программный код OpenDust, разработанный для самосогласованного расчета зарядов пылевых частиц и сил, действующих на них в потоке плазмы газового разряда. Высокая 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 является оптимизация вычислений и использование графических процессоров (GPU), которые обеспечивают значительный прирост скорости по сравнению с традиционными центральными процессорами (CPU).

В данной главе 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 SCERTIC, SCOPTIC, MAD и другие. Сравнительный анализ демонстрирует преимущества OpenDust в скорости вычислений и его способность эффективно использовать ресурсы GPU, обеспечивая производительность, значительно превосходящую ранее разработанные коды.

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

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 3.1.

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 3.2. 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;
- Рассчитанные силы с каждого GPU передаются на один из графических процессоров;

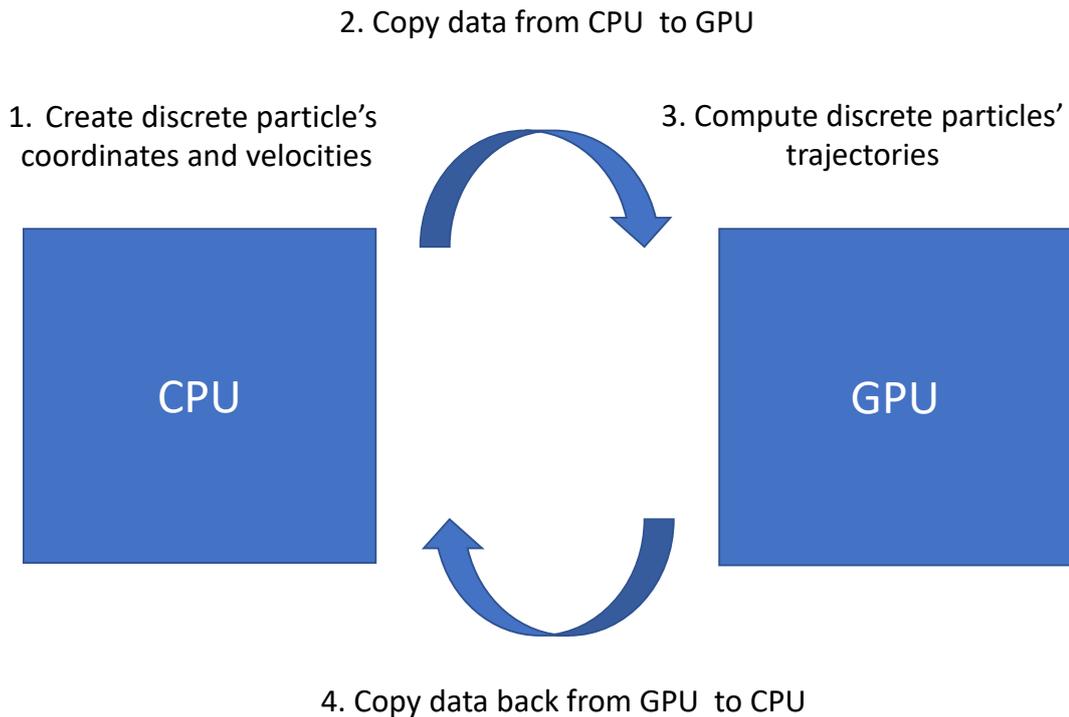


Рисунок 3.1 — Иллюстрация передачи данных дискретных частиц между GPU и CPU.

- 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.

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 част-

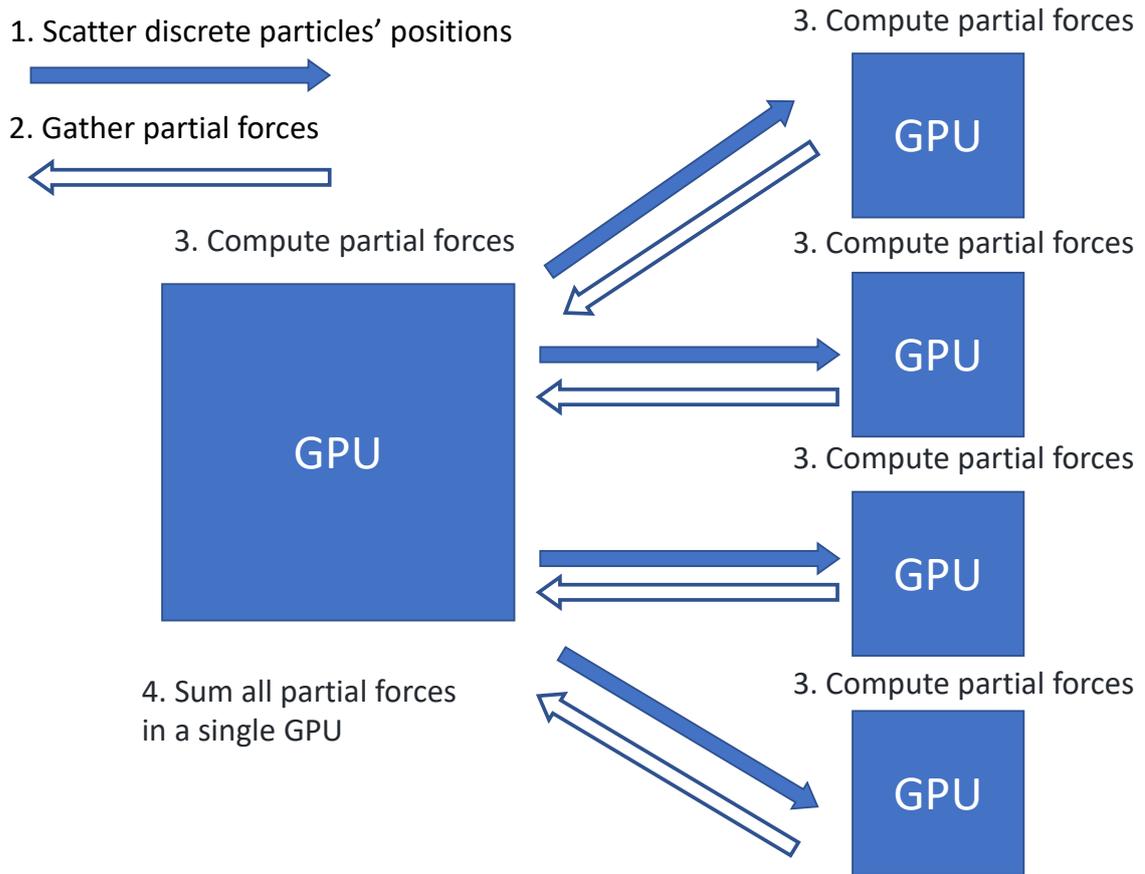


Рисунок 3.2 — Иллюстрация передачи данных между несколькими GPU для параллельного расчета сил.

ности, вычисление сил взаимодействия между ними. Расчет динамики ионов выполняется в методе `simulate` объекта класса `OpenDust`. Для оценки производительности программы измеряется время выполнения данного метода. 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 5.

Таблица 5 — 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 работы процедуры `simulate` измеряется для 3000 шагов интегрирования при различных количествах ионов. На Рисунке 3.3 представлена зависимость времени моделирования от числа ионов N . Экспериментальные точки аппроксимируются 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

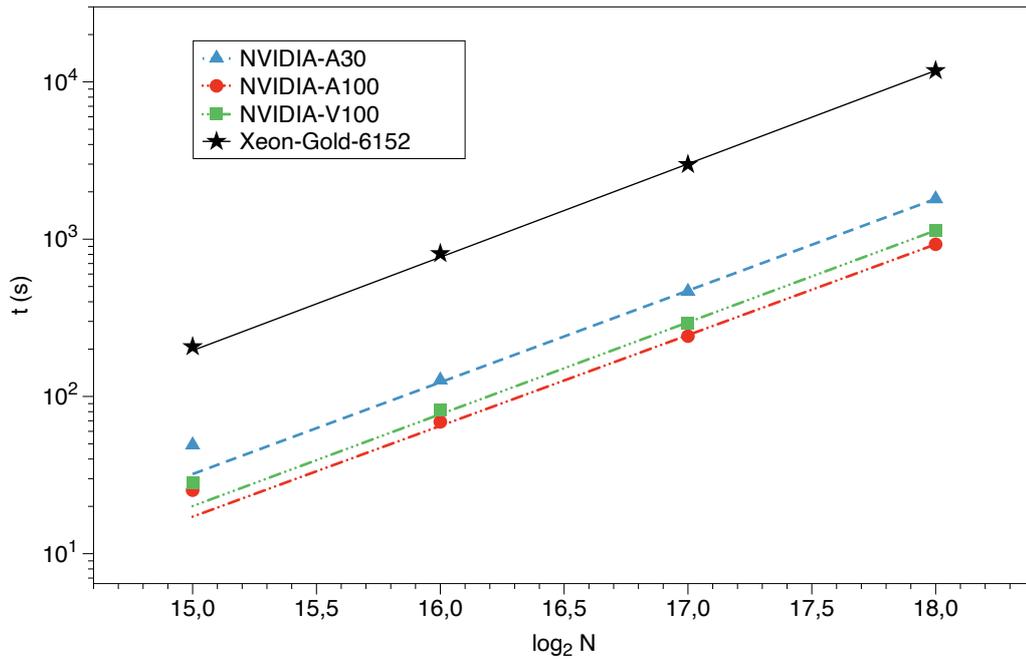


Рисунок 3.3 — Среднее время выполнения процедуры `simulate` при различных количествах ионов. Измеренные значения времени обозначены символами: NVIDIA A30 (синие треугольники), NVIDIA Tesla V100 (зеленые квадраты), NVIDIA Tesla A100 (красные круги), CPU (черные звезды). Аппроксимации временных зависимостей 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.

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.

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. Увеличе-

ние области приводит к росту числа ионов в симуляции, 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 3.4. 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:

$$t(N) = 0.00016N^{1.177}, \quad (3.1)$$

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.

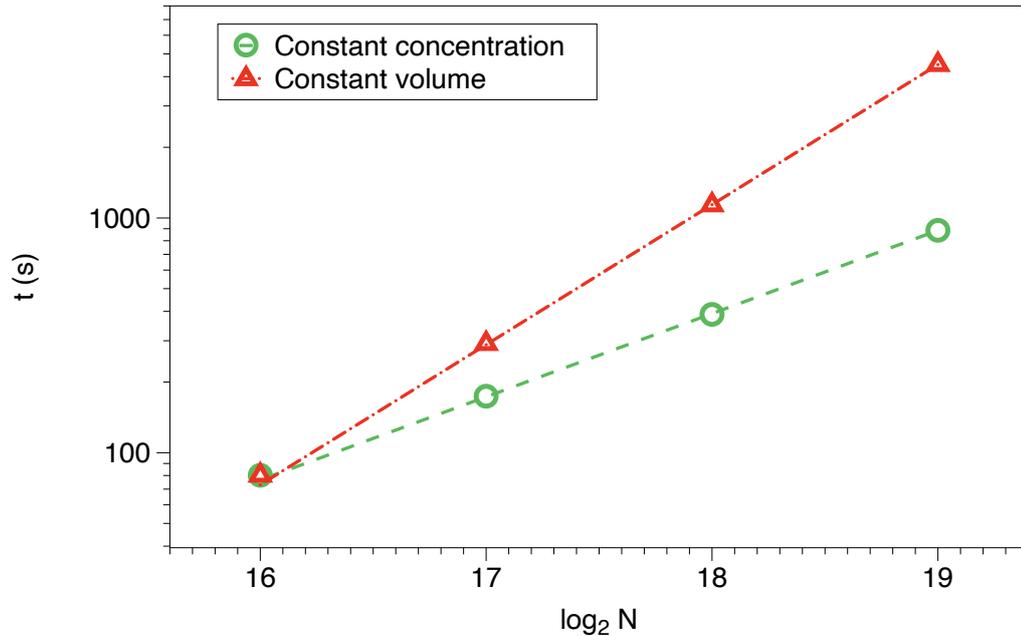


Рисунок 3.4 — Зависимость времени моделирования от числа ионов. Символами обозначены измеренные времена для серии моделирования с постоянным объемом (красные треугольники) и для серии с постоянной концентрацией (зеленые круги). Аппроксимации измеренных значений времени для обеих серий представлены соответственно красной штрих-пунктирной линией и зеленой пунктирной линией.

3.4 Эффективность одновременного использования нескольких графических процессоров

OpenDust предоставляет возможность запуска моделирования на нескольких графических процессорах. Количество используемых GPU задается с помощью параметра `deviceIndex` в функции `simulate()`. Этот параметр представляет собой строку, содержащую перечень индексов графических устройств. Например, для использования восьми графических процессоров необходимо установить `deviceIndex = "0,1,2,3,4,5,6,7"`.

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 3.5 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 3.5б, 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 [170]. 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.

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

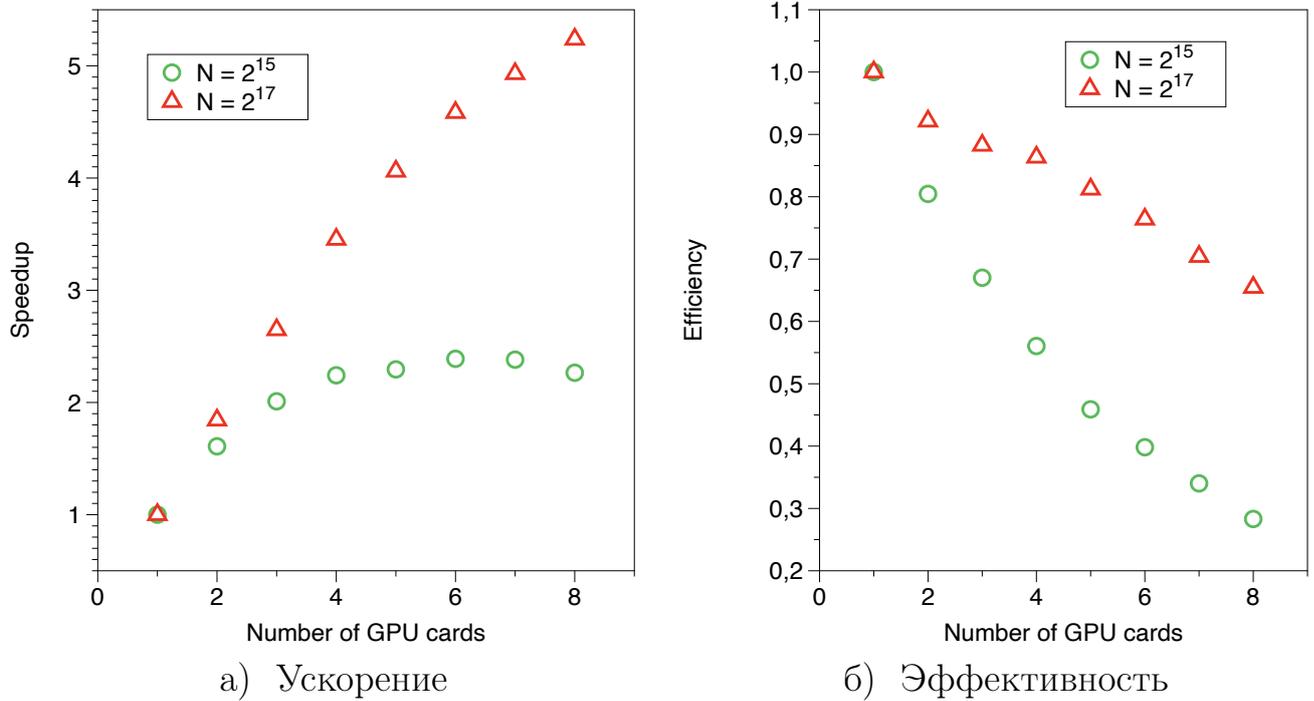


Рисунок 3.5 — Зависимость ускорения и эффективности моделирования от количества используемых графических процессоров. Красные треугольники и зеленые круги соответствуют моделированию с 2^{17} и 2^{15} ионов соответственно.

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 6.

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 7.

Таблица 6 — Обобщенная информация о предыдущих реализациях самосогла-
сованного 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

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.

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

Таблица 7 — 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

расчёт межзвёздных 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 2.11. 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 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 (3.1), 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.

3.6 Выводы к третьей главе

В данной главе была проведена оценка эффективности вычислительного инструмента OpenDust при использовании графических ускорителей. Рассмотрены ключевые аспекты применения GPU для моделирования плазменного окружения вокруг пылевых частиц, а также преимущества графических процессоров по сравнению с центральными процессорами, включая масштабируемость вычислений при увеличении размера системы.

Разработанная в OpenDust схема передачи данных между CPU и GPU позволила минимизировать временные затраты на обмен информацией и максимально задействовать вычислительные ресурсы графических ускорителей. Анализ производительности показал значительное преимущество GPU над CPU при расчётах динамики пылевой плазмы. Дополнительно была проведена оценка масштабируемости вычислений, подтвердившая эффективность использования OpenDust для обработки больших массивов данных. Исследование производительности многопроцессорных конфигураций GPU продемонстрировало возможность значительного сокращения времени расчётов за счёт параллельной обработки информации. Проведённое сравнение с существующими программными решениями показало, что OpenDust, благодаря использованию метода асимметричной молекулярной динамики, превосходит по скорости все известные реализации в десятки раз.

Таким образом, представленные в главе исследования подтвердили, что применение графических ускорителей позволяет существенно ускорить вычисления зарядов и сил пылевых частиц в плазме газового разряда, сохраняя при этом высокую точность моделирования. Разработанные алгоритмы и подходы делают OpenDust перспективным инструментом для дальнейших исследований в области пылевой плазмы. Ускорение расчетов OpenDust на основе GPU дает

впервые возможность выхода на многомасштабное самосогласованное моделирование динамики пылевых частиц с учётом плазменного окружения.

Результаты этой главы подтверждают положение 2, выносимое на защиту: «Эффективное использование графических ускорителей в рамках метода асимметричной молекулярной динамики обеспечивает ускорение расчёта зарядов и сил в кластерах пылевых частиц в потоке газоразрядной плазмы в десятки раз по сравнению с известными реализациями, что делает возможным многомасштабное самосогласованное моделирование динамики пылевых частиц с учётом влияния плазмы. »

Глава 4. Термодинамические свойства упорядоченной системы пылевых частиц с учетом плазменного окружения

Одним из проявлений влияния эффективной не взаимности взаимодействий между пылевыми частицами в потоке плазмы газового разряда являются специфические термодинамические свойства упорядоченных пылевых структур. 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. Термодинамические свойства таких структур включают в себя распределение средних кинетических энергий между степенями свободы, а также особенности теплопереноса через систему. Благодаря возможности прямого наблюдения траекторий движения пылевых частиц методами оптической микроскопии, эти характеристики 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 термодинамические 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 и к перераспределению кинетических температур.

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 условий возникновения различных термодинамических свойств в упорядоченных пылевых системах.

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 кинетических температур проявляется в различных пылевых структурах — от упорядоченных пар пылевых частиц до моно- и бислоев. Помимо неравномерного распределения кинетической температуры, наблюдается также её локализация. Например, в случае плазменно-пылевого монослоя максимальные значения кинетической температуры концентрируются в центральной части структуры. Дополнительно, невзаимность взаимодействий существенно влияет на теплопроводность упорядоченных пылевых структур, делая их поведение принципиально отличным от классических систем. В частности, наблюдаются обратные потоки тепла, при которых тепло передается от менее нагретой частицы к более нагретой, что противоречит интуитивному представлению о теплопереносе. Экспериментально передача тепла в таких структурах может быть исследована путём локального нагрева отдельных пылевых частиц, например, с использованием лазерного излучения.

Несмотря на активное изучение аномальных термодинамических эффектов 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 термодинамические 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

точно определять силовую матрицу в пылевых структурах. В совокупности с неэрмитовой классификацией термодинамических режимов, это обеспечивает надёжную основу для количественного анализа и прогнозирования поведения упорядоченных систем пылевых частиц в различных условиях.

4.1 Модель невязанно связанных гармонических осцилляторов в термостате Ланжевена

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. Это обусловлено тем, что поток ионов в плазме создаёт асимметричное взаимодействие между частицами, нарушая действие 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 $\langle \eta_i(t)\eta_i(t') \rangle = 2\gamma_i T_i \delta(t-t')$ и $\langle \eta_i(t)\eta_j(t') \rangle = 0$. Здесь γ_i — диагональные элементы матрицы \hat{L} , а δ — дельта-функция.

Интересным вопросом является влияние такой невязанности на свойства динамических уравнений, описывающих систему. В частности, возникает необ-

ходимость разобраться, как это сказывается на консервативности системы, если исключить влияние термостатов. Здесь под консервативностью понимается возможность задать Гамильтониан системы таким образом, чтобы его изменение соответствовало мощности внешних сил в согласии с [143].

Для иллюстрации подхода, основанного на анализе матрицы взаимодействий с целью выявления консервативности невзаимной динамической системы, рассматривается простейший случай двух связанных гармонических осцилляторов. 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 классической взаимной (reciprocal), удовлетворяет третьему закону Ньютона и её динамика описывается уравнениями Гамильтона с сохраняющейся энергией. Однако, если $f_{12} \neq f_{21}$, система становится невзаимной (non-reciprocal).

Тем не менее, даже в этом случае можно выполнить преобразование системы так, чтобы она могла быть приведена к взаимной форме [171]. 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 остаётся консервативной во всей области динамической устойчивости. Однако, её 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 взаимной 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 консервативности определяется возможностью одновременной симметризации матриц взаимодействий \hat{F} и масс \hat{M} [172; 173]. 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 $\hat{F} \rightarrow \hat{D}\hat{F}$. Все элементы матрицы \hat{D} , выполняющей симметризацию системы, предполагаются положительными, так как их отрицательные значения привели бы к динамической неустойчивости системы.

Таким образом, невзаимность взаимодействий не всегда приводит к нарушению консервативности системы, однако её сохранение требует 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 $\hat{G} = (-\omega^2 \hat{M} + \hat{F} - i\omega \hat{L})^{-1}$ является функцией Грина, который обеспечивает решение системы уравнений (4.1) [146]. Потoki тепла между термостатами и соответствующие степени 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 Детальный баланс

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 тепловых потоков от термостата к i -й степени свободы системы, т.е. к детальному балансу (ДБ), в ее устойчивом состоянии. 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 консервативной системы невзаимно связанных гармонических осцилляторов эта матрица сингулярна, поскольку существует преобразование от изначально невзаимной системы к взаимно обратимой. Однако температуры термостатов в ДБ уже не обязательно равны друг другу.

Для систем, которые не являются консервативными, эта матрица не может быть сингулярной. Чтобы показать это, рассмотрим соотношения, которые устанавливаются 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 тепловые потоки 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

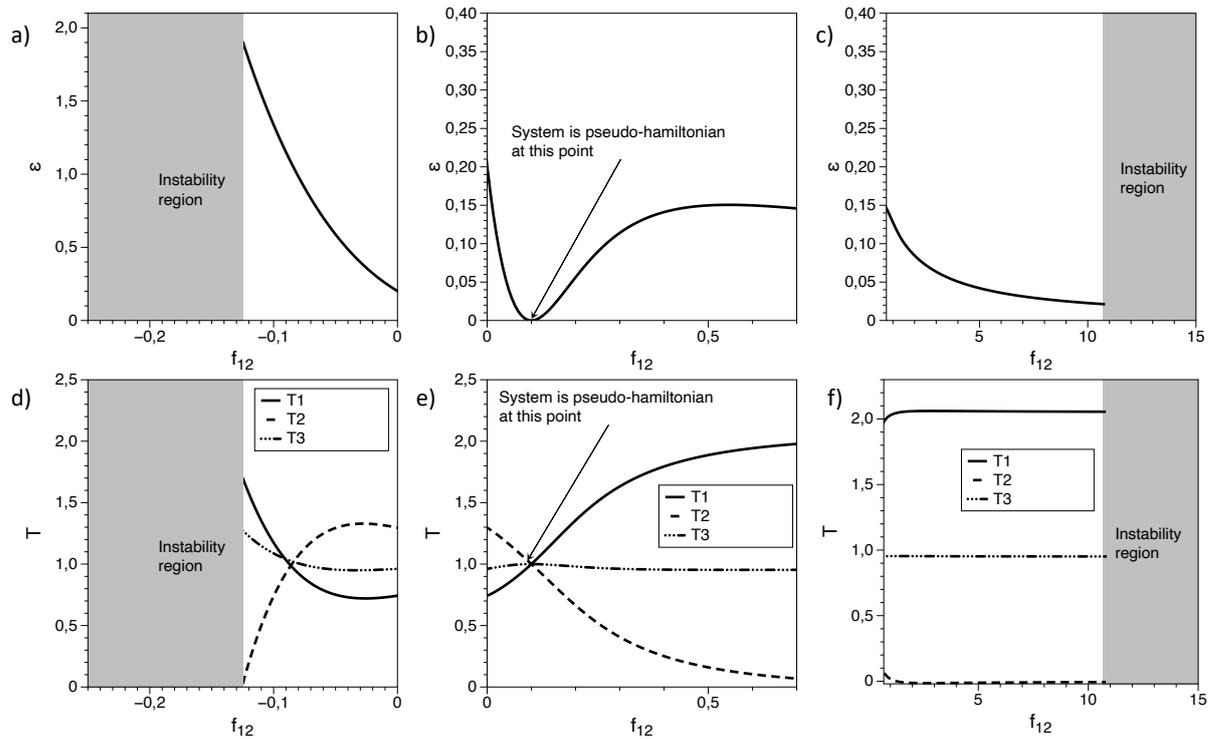


Рисунок 4.1 — а)-с) - зависимость меры невязанности от коэффициента взаимодействия f_{12} . d)-f) - зависимость температур термостатов, минимизирующих тепловые потоки (4.19), от коэффициента взаимодействия f_{12} . Серым цветом на рисунках обозначена зона динамической неустойчивости системы (без учета трения).

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 неконсервативными, ДБ невозможен.

4.2.2 Критерий и мера неконсервативности

Этот результат позволяет построить меру, которая естественным образом позволяет описать отклонение невязанной системы от консервативной или симметризуемой. Обозначим коэффициенты, стоящие при температурах в выражении (4.11), как

$$s_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \sum_{k \neq i}^n \gamma \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 [\hat{G}_{ik} \hat{G}_{ki}^*] d\omega, & i = j, \\ -\frac{1}{\pi} \gamma \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 |\hat{G}_{ij}|^2 d\omega, & i \neq j, \end{cases} \quad (4.18)$$

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

$$\vec{J} = \gamma \hat{S} \vec{T}. \quad (4.19)$$

Будем минимизировать сумму квадратов тепловых потоков $\sqrt{\sum_{k \neq i}^n \frac{J_i^2}{\gamma^2}}$ по вектору температур со следующим ограничением $\sum_{i=1}^n T_i^2 = 1$ и обозначим этот минимум как ε

$$\varepsilon = \min_{\sum_{i=1}^n T_i^2 = 1} \sqrt{\sum_{k \neq i}^n \frac{J_i^2}{\gamma^2}}. \quad (4.20)$$

Важно отметить, что параметр ε не определяется на основе произвольно заданных температур термостата T_i . Вместо этого, ε определяется путем определения набора температур термостата, который минимизирует сумму квадратов тепловых потоков в системе. Этот минимум - не что иное, как наименьшее сингулярное значение матрицы переноса \hat{S} .

Для консервативной системы значение этого минимума равно нулю, а точка минимума описывает распределение температуры между тепловыми ваннами под ДБ. Таким образом, условие $\varepsilon = 0$ является критерием консервативности. Заметим, что термин «консервативность» относится именно к системе связанных осцилляторов без учета случайных сил и сил трения, которые по своей сути делают всю систему термостат-осциллятор неконсервативной. Поэтому условие консервативности $\varepsilon = 0$ не зависит от трения, вызванного термостатом, и определяется коллективным характером невязанного взаимодействия между

осцилляторами. Для неконсервативных невязимных систем значение этого минимума описывает минимально возможное значение суммы квадратов потоков тепла между термостатом и системой. Таким образом, величина этого минимума ε может быть использована как мера отклонения невязимной системы от консервативной.

Теперь рассмотрим примеры оценки отклонения от консервативности невязимной системы. Как было показано выше, система из трех с.с. может быть симметричной вплоть до одного из взаимодействий. Поэтому без потери общности мы будем рассматривать симметричную систему, варьируя ее несимметричность изменением одной компоненты матрицы взаимодействия f_{12} . Кроме того, будем считать, что все массы равны единице, коэффициенты трения термостата равны 0.1, диагональные элементы матрицы взаимодействия одинаковы и равны единице, а все недиагональные элементы матрицы взаимодействия, кроме одного, равны 0.1. Такая система остается устойчивой при значениях f_{12} от -0.125 до 10.9 (без учета трения).

На рисунке 4.1(a)-(c) показана зависимость введенной меры неконсервативности от значений f_{12} . Для разрешения всех масштабов зависимость разбита на три отдельных рисунка, в целом образующих весь диапазон доступных значений f_{12} . На рисунке 4.1(d)-(f) показана зависимость температур термостатов, минимизирующих тепловые потоки (4.19), от коэффициента взаимодействия f_{12} . На рисунке 4.1(b) мера невязимности обращается в ноль, достигая минимума в точке, где линейная динамическая система консервативна. По мере увеличения значения f_{12} относительно точки, где система консервативна, мера неконсервативности сначала достигает максимума 0.15, а при дальнейшем увеличении снижается почти до нуля. Это связано с тем, что система становится по термодинамическим свойствам близкой к системе с двумя с.с, для которой система консервативна при любых матрицах взаимодействия. При смещении влево от точки, где система консервативна, мера неконсервативности резко возрастает. Интересно отметить, что температура термостата, соответствующая второму с.с, обращается в ноль в точке, находящейся вблизи левой границы области устойчивости системы. Приближаясь к правой границе области устойчивости, температура термостата, соответствующая второму с.с, пересекает значение нуля и остается вблизи него.

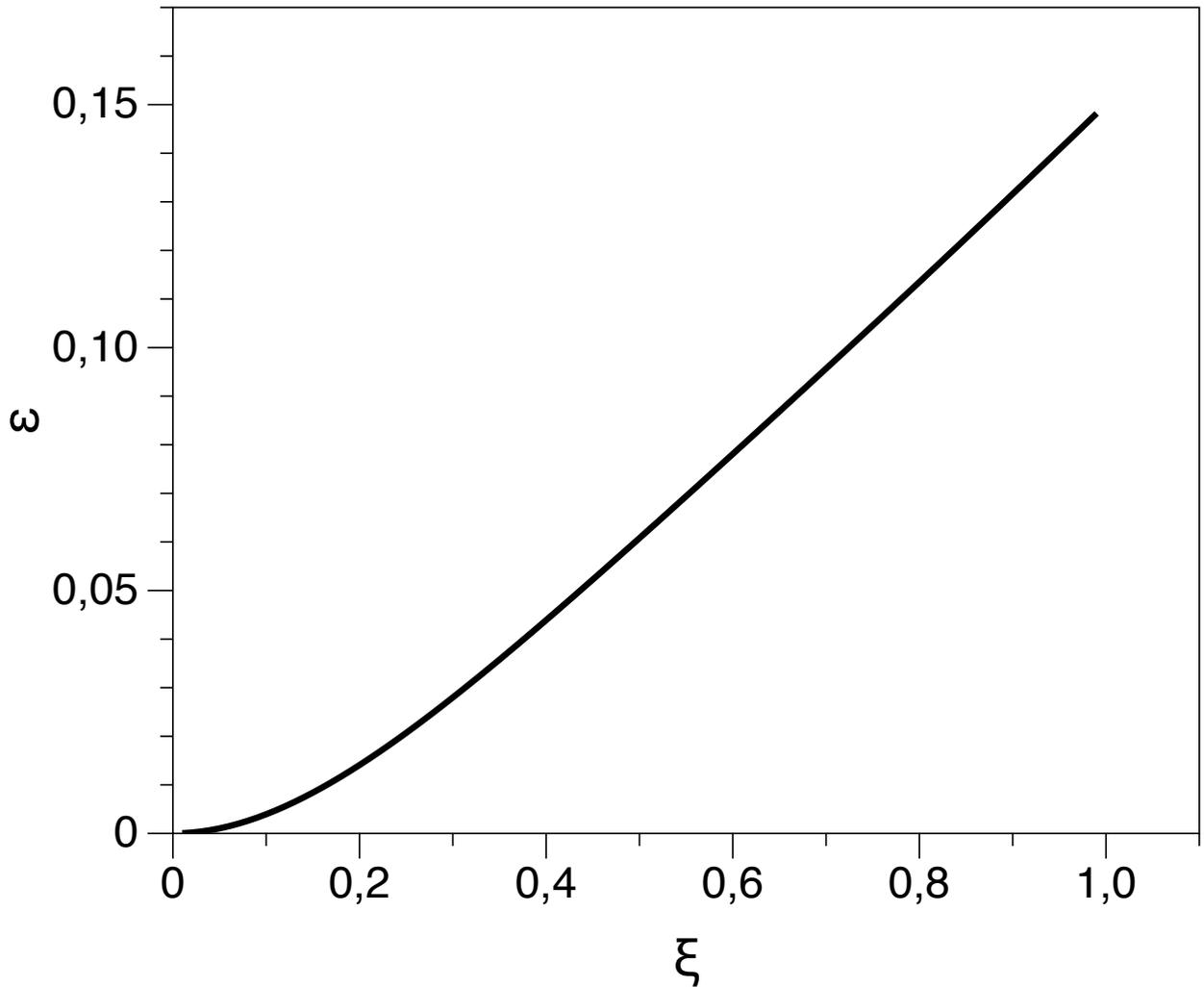


Рисунок 4.2 — Зависимость меры невязности от масштабного параметра ξ для линейной цепочки невязно связанных осцилляторов с четырьмя степенями свободы.

Такое поведение температур термостатов, минимизирующих тепловые потоки, вблизи точек динамической устойчивости системы мы связываем с появлением полюсов функции Грина в области комплексных частот.

Важный вопрос, касающийся введенной меры неконсервативности, состоит в том, какие ее значения следует считать большими, а какие - малыми. Этот вопрос нетривиален, дается лишь частичный ответ. Чтобы ответить на него, необходимо задать некое эталонное значение, по которому можно судить о величине меры неконсервативности. Например, такой эталон может быть привязан к значению меры неконсервативности, при котором проявляются свойства, нехарактерные для консервативных систем. Эти свойства обсуждаются в следующем разделе, в частности, связь между характеристиками матрицы переноса \hat{S} и степенью неконсервативности системы.

4.3 Термодинамические эффекты вне взаимности и консервативности

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 консервативных системах с взаимными взаимодействиями, а какие являются характерными исключительно для неконсервативных систем.

4.3.1 Теорема о равномерном распределении

Одна из фундаментальных теорем классической статистической механики — это теорема об равномерном распределении 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 [174]. В то же время, если рассматривать такую систему в контакте с термостатом Ланжевена, что соответствует помещению системы в газ при заданной температуре, начинает действовать теорема об равномерном распределении. Она позволяет сделать вывод, что через определённое время средние кинетические энергии связанных осцилляторов выравниваются, принимая значение температуры окружающей среды. Это равномерное распределение выполняется в системах с симметричной матрицей взаимодействия, но её асимметрия приводит к нарушению равномерного распределения.

Для консервативных невзаимных систем можно сформулировать некоторое обобщение данного следствия теоремы об равномерном распределении энергии. Для этого рассмотрим систему связанных осцилляторов, контактирующую с термостатами Ланжевена, температуры которых могут быть различными (4.1). Так как система является консервативной, её матрица взаимодействия \hat{F} может быть приведена к симметричному виду путём умножения системы на диагональ-

ную 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 равномерном распределении кинетической энергии. Таким образом, для консервативных систем связанных линейных механических осцилляторов с асимметричной матрицей взаимодействия выполняется некоторое обобщение теоремы об равномерном распределении. Согласно этому обобщению, можно подобрать такой набор температур термостатов, при котором средние кинетические энергии степеней свободы будут равны температурам 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 неконсервативных систем подобное обобщение теоремы о равномерном распределении становится невозможным. Это означает, что нельзя подобрать такой набор температур термостатов, при котором средняя кинетическая энергия степеней свободы совпадала бы с температурами соответствующих термостатов. Чтобы это показать, необходимо использовать ранее полученный вывод о невозможности детального баланса в неконсервативной системе и теорему флуктуационно-диссипативного соотношения (FDT). Действительно, согласно FDT, поток тепла между осциллятором и его термостатом выражается через их разность температур [144]:

$$J_i = \gamma_i (T_i - T_i^{eff}), \quad (4.21)$$

$$T_i^{eff} = \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^n \gamma_k T_k \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 |\hat{G}_{ik}|^2 d\omega, \quad (4.22)$$

где T_i^{eff} — средняя кинетическая энергия i -го осциллятора. Заметим, что уравнение (4.21) 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 занулить все потоки тепла. Введённая мера неконсервативности таким образом показывает отклонение в неконсервативной системе от сформулированного обобщения теоремы об равномерном распределении энергии.

4.3.2 Классификация матрицы переноса в рамках физики неэрмитовых систем

Матрица переноса \hat{S} определяет связь между тепловыми потоками между системой осцилляторов и термостатами. В соответствии с FDT, выражение (4.19) для элементов матрицы переноса может быть записано в следующем виде:

$$s_{ij} = \delta_{ij} - \frac{1}{\pi} \gamma_j \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 |\hat{G}_{ij}|^2 d\omega, \quad (4.23)$$

где δ_{ij} — символ Кронекера. Таким образом, связь между средними кинетическими энергиями осцилляторов \vec{T}^{eff} и температурами термостатов \vec{T} выражается через \hat{S} -матрицу:

$$\vec{T}^{eff} = (\hat{I} - \hat{S}) \vec{T}, \quad (4.24)$$

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 остается консервативной, её можно привести к симметричному виду умножением на диагональную матрицу \hat{D} . В результате 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 тепловой поток запишется как:

$$\vec{J} = \hat{L} \hat{S}_{fi} \vec{T}_{fi} = \hat{L} \hat{S}_{fi} \hat{D} \vec{T}_{in} = \hat{L} \hat{S}_{in} \vec{T}_{in}, \quad (4.25)$$

и

$$\hat{S}_{in} = \hat{S}_{fi} \hat{D}. \quad (4.26)$$

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

$$\hat{D} \hat{S}_{in} = \hat{S}_{in}^T \hat{D}, \quad (4.27)$$

где \hat{D} является эрмитовой и положительно определённой. 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 неконсервативности, индикатором которой является ненулевая мера неконсервативности системы. 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 4.3 представлена схема полученных взаимосвязей между неэрмитовостью матрицы переноса и характеристиками консервативности 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:

$$\hat{F} = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.14 & 0.06\xi \\ 0.06 & 1.0 & 0.14 \\ 0.14\xi & 0.06 & 1.0 \end{bmatrix}, \quad (4.28)$$

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 4.4 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

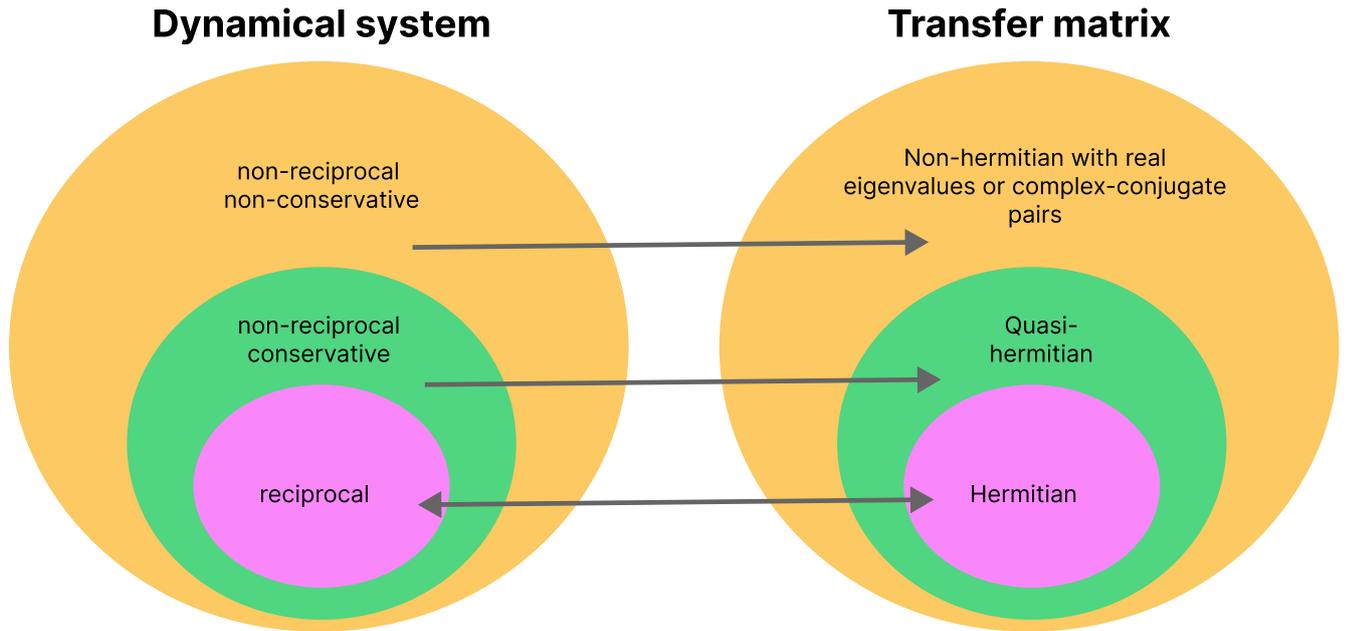


Рисунок 4.3 — Соответствие между условиями консервативности и взаимности динамической системы и неэрмитовостью её матрицы переноса.

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.

4.3.3 Перенос тепла

Рассмотрим процесс теплообмена между наборами тепловых резервуаров, связанных через систему осцилляторов с невзаимными связями. В данном случае предполагается, что тепло, поступающее или уходящее из конкретного

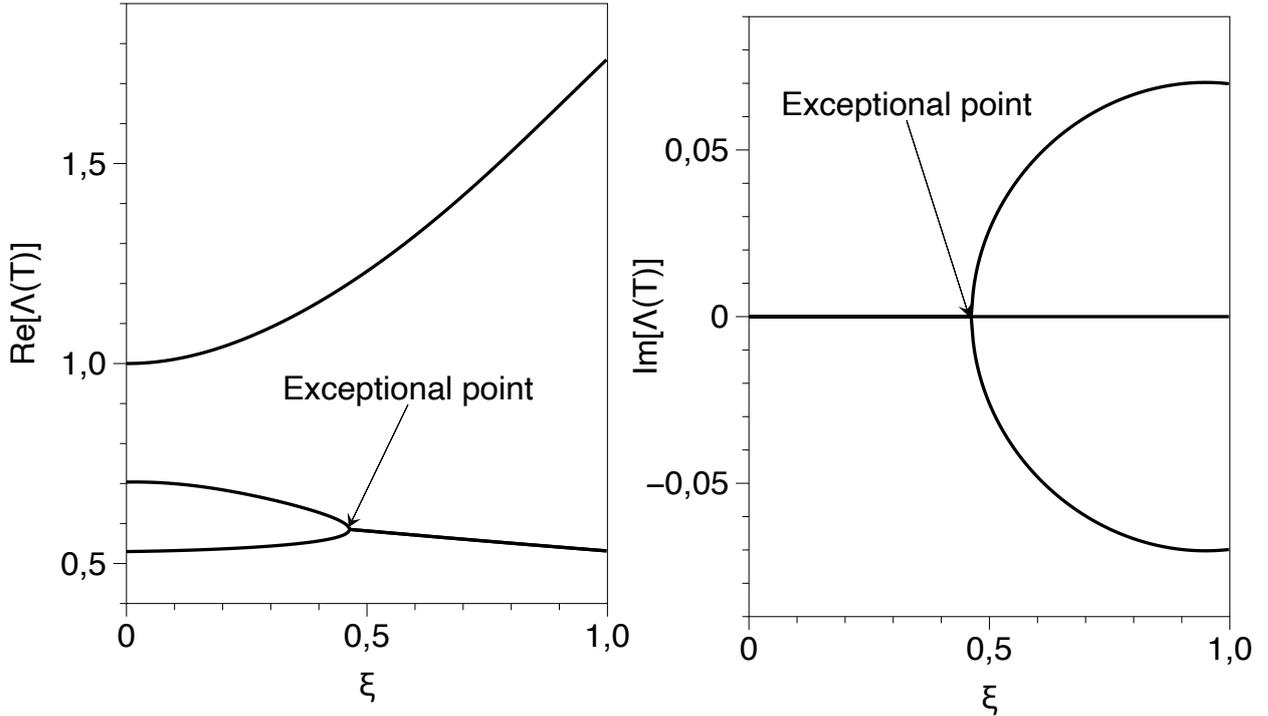


Рисунок 4.4 — Зависимость спектра собственных значений $\Lambda(\hat{S})$ матрицы переноса от степени связи между концами одномерной цепи осцилляторов ξ . а) — действительная часть собственных значений, б) — мнимая часть.

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, тепло может передаваться в резервуар или выходить из него только через взаимодействие с соответствующим осциллятором. Скорость изменения температуры в такой системе определяется через тепловые потоки между тепловыми резервуарами и соответствующими осцилляторами:

$$\frac{d\vec{T}}{dt} = \kappa \vec{J} = \kappa \gamma \hat{S} \vec{T}, \quad (4.29)$$

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 остается консервативной, 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 обратного теплообмена, что проявляется даже в простейшем случае системы осцилляторов с двумя степенями свободы, которая всегда является консервативной. Этот эффект позволяет использовать консервативную систему из двух связанных осцилляторов в качестве аналога «демона Максвелла» [151].

Однако, если система осцилляторов является не только невзаимной, но и неконсервативной, характер решений уравнения (4.29) 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 тепла из резервуаров.

Во-вторых, важной особенностью системы тепловых резервуаров, связанных через неконсервативную 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, связка тепловых резервуаров посредством неконсервативной системы осцилляторов может приводить к колебательному характеру изменения их температур, что невозможно в консервативных невзаимных системах, включая часто рассматриваемую систему невзаимных осцилляторов с двумя степенями свободы.

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 тепловыми потоками, анализируемыми по траекториям движения пылевых частиц.

4.3.4 Локализация распределения кинетических температур

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

$$\hat{F} = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.16 & 0.0 & \dots & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.04 & 1.0 & 0.16 & \dots & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.04 & 1.0 & \dots & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \dots & 1.0 & 0.16 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \dots & 0.4 & 1.0 & 0.16 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \dots & 0.0 & 0.4 & 1.0 \end{bmatrix}. \quad (4.30)$$

Эта матрица соответствует Гамильтониану модели Хатано-Нельсона с жестким связыванием при открытых граничных условиях (ОВС) [175–177]. Собственные векторы такой матрицы локализованы из-за неэрмитова скин-эффекта [154–156; 178; 179]. Чтобы понять влияние этого факта на долговременные свойства под действием системы термостатов Ланжевена, мы анализируем поведение собственных векторов матрицы $\hat{I} - \hat{S}$. Эта матрица связывает средние кинетические энергии осцилляторов с температурами термостатов в соответствии с (4.24). Зависимость модуля компонент его собственных векторов от узлов системы показана на рисунке 4.5 (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 и неконсервативности системы связанных линейных механических осцилляторов. Рассматриваемая модель с матрицей взаимодействия невзаимна, но консервативна. Элементы d_i диагональной матрицы \hat{D} , симметризирующей динамическую систему, выражаются следующим образом

$$d_i = \left(\frac{0.4}{0.16} \right)^{(i-1)}. \quad (4.31)$$

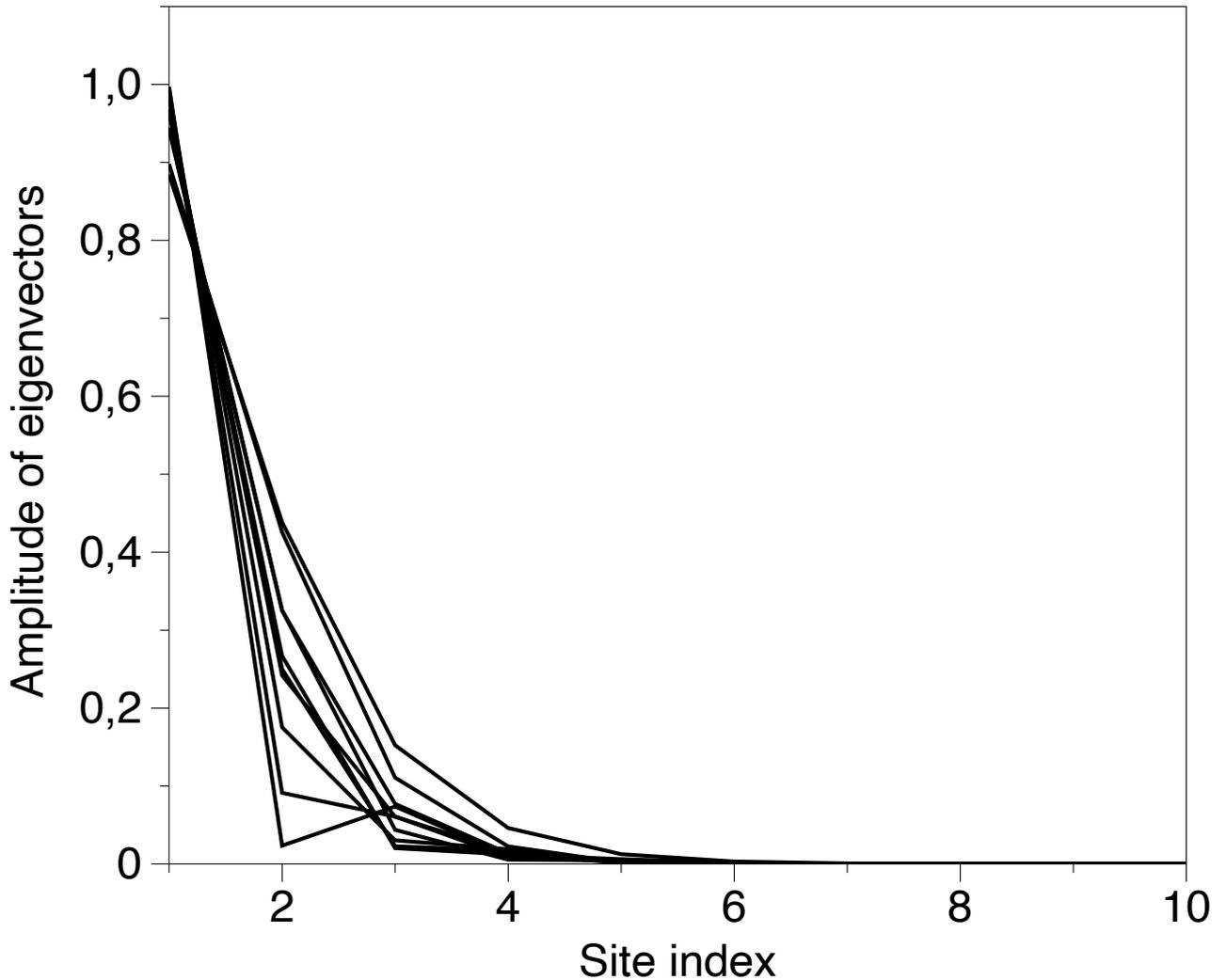


Рисунок 4.5 — Локализация собственных векторов матрицы передачи \hat{S} вблизи границы цепочки.

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, негермитианский 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 консервативных системах с невзаимной матрицей взаимодействия. При возникновении взаимодействия между двумя граничными осцилляторами неэрмитовый скин-эффект уменьшается, а мера неконсервативности, наоборот, увеличивается.

4.4 Выводы к четвертой главе

В данной главе исследованы термодинамические свойства упорядоченных систем пылевых частиц, находящихся в неравновесной плазме. Особое внимание уделено влиянию невзаимности межчастичных взаимодействий на распределение кинетической энергии, теплоперенос 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.

Основные результаты главы можно сформулировать следующим образом:

Системы с симметричной матрицей взаимодействия (взаимными взаимодействиями)

- Матрица переноса \hat{S} , описывающая связь между температурами термостатов и тепловыми потоками, 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 теплопереноса, а также проявления неэрмитовского 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 особые 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, в главе введена мера отклонения от консервативности, которая позволяет количественно оценить степень невзаимности взаимодействий и их влияние на термодинамические свойства системы. Данная мера дает возможность классифицировать системы и прогнозировать их поведение в условиях взаимодействия с термостатами.

Применение полученных результатов к пылевой плазме позволяет объяснить ряд экспериментально наблюдаемых эффектов, включая нарушение теоремы о равномерном распределении, локализацию кинетических температур, а также появление обратных потоков тепла в упорядоченных структурах пылевых частиц. Эти явления связаны с неэрмитовой природой матрицы переноса, описывающей связь между кинетическими температурами степеней свободы системы и эффективными температурами термостатов.

Результаты этой главы подтверждают положение 3, выносимое на защиту: «Явления, наблюдаемые в упорядоченных системах пылевых частиц в присутствии потока плазмы — такие как обратные потоки тепла, неравномерное распределение кинетических температур и их локализация — объясняются неэрмитовостью матрицы переноса, которая связывает кинетические температуры степеней свободы системы с интенсивностью стохастических воздействий со стороны окружающей среды. »

Заключение

Разработан новый вычислительный инструмент OpenDust, позволяющий самосогласованно рассчитывать заряды пылевых частиц и силы, действующие на них в потоке газоразрядной плазмы. Корректность метода подтверждена путём сравнения с существующими теоретическими моделями и экспериментальными данными. 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 OpenDust является его высокая вычислительная эффективность по сравнению с существующими аналогами.

Эффективность OpenDust обеспечивается за счёт глубокой программной оптимизации алгоритма асимметричной молекулярной динамики для работы на современных графических ускорителях. Разработаны и адаптированы алгоритмы, позволяющие максимально задействовать вычислительные ресурсы GPU, что обеспечило значительное увеличение скорости моделирования по сравнению с мировыми аналогами. Продемонстрирована высокая масштабируемость метода, позволяющая эффективно проводить расчёты даже для систем с большим числом частиц. Сравнение с существующими реализациями показало, что OpenDust превосходит их в десятки раз по вычислительной производительности. 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 этой парадигмы показано, как с использованием самосогласованного подхода могут быть исследованы термодинамические свойства упорядоченных структур пылевых частиц — в частности, распределение кинетических температур по степеням свободы, а также характер теплопереноса в системе. Особенность данного описания заключается в том, что ключевую

роль в формировании силовой матрицы играет не только распределение электростатического потенциала вокруг пылевых частиц, как это предполагается во многих теоретических моделях, но и изменение зарядов самих частиц при их малых смещениях, что оказывает существенное влияние на результирующие силы.

В результате проведённого анализа показано, что термодинамические свойства упорядоченных систем пылевых частиц в неравновесной плазме существенно зависят от не взаимности взаимодействий. В частности, установлено, что такие эффекты, как неравномерное распределение кинетических температур, обратные потоки тепла и их локализация, обусловлены неэрмитовостью матрицы переноса, связывающей кинетические температуры степеней свободы системы с эффективными температурами внешнего стохастического воздействия.

Таким образом, 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 их динамических и термодинамических свойств. Разработанные подходы открывают новые возможности для исследования не взаимных 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 не взаимностью 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 промыш-

ленных применений. Дальнейшее развитие методов моделирования с учётом неэрмитовых эффектов представляется важным и актуальным направлением будущих исследований.

Словарь терминов

ОМ : теория орбитального движения (orbital motion)

ОМЛ : теория ограниченного орбитального движения (orbital motion limited)

GPU : графический процессор

CPU : центральный процессор

EP : 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. Complex (dusty) plasmas: Current status, open issues, perspectives [Текст] / V. Fortov [и др.] // Phys. Rep. — 2005. — Т. 421, № 1/2. — С. 1—103.
2. Physics and applications of dusty plasmas: The Perspectives 2023 [Текст] / J. Beckers [и др.] // Phys. Plasmas. — 2023. — Т. 30, № 12.
3. Dielectric particle lofting from dielectric substrate exposed to low-energy electron beam [Текст] / P. Krainov [и др.] // Plasma Sources Sci. Technol. — 2020. — Т. 29, № 8. — С. 085013.
4. Formation of spherical Sn particles by reducing SnO₂ film in floating wire-assisted H₂/Ar plasma at atmospheric pressure [Текст] / T.-T.-N. Nguyen [и др.] // Sci. Rep. — 2020. — Т. 10, № 1. — С. 1—12.
5. *Shoyama, M.* Charging and levitation of particles using UV irradiation and electric field [Текст] / M. Shoyama, H. Yoshioka, S. Matsusaka // IEEE Trans. Ind. Appl. — 2021.
6. Statistical mechanics where Newton's third law is broken [Текст] / A. V. Ivlev [и др.] // Phys. Rev. X. — 2015. — Т. 5, № 1. — С. 011035.
7. *Kryuchkov, N. P.* Dissipative phase transitions in systems with nonreciprocal effective interactions [Текст] / N. P. Kryuchkov, A. V. Ivlev, S. O. Yurchenko // Soft Matter. — 2018. — Т. 14, № 47. — С. 9720—9729.
8. *Piel, A.* Molecular dynamics simulation of ion flows around microparticles [Текст] / A. Piel // Phys. Plasmas. — 2017. — Т. 24, № 3. — С. 033712.
9. *Vladimirov, S.* Molecular dynamics simulation of plasma flow around two stationary dust grains [Текст] / S. Vladimirov, S. Maiorov, O. Ishihara // Phys. Plasmas. — 2003. — Т. 10, № 10. — С. 3867—3873.
10. Dust charging in dynamic ion wakes [Текст] / L. S. Matthews [и др.] // Phys. Plasmas. — 2020. — Т. 27, № 2. — С. 023703.
11. *Hutchinson, I.* Nonlinear collisionless plasma wakes of small particles [Текст] / I. Hutchinson // Phys. Plasmas. — 2011. — Т. 18, № 3. — С. 032111.

12. *Miloch, W. J.* Wake effects and Mach cones behind objects [Текст] / W. J. Miloch // Plasma Phys. Controlled Fusion. — 2010. — Т. 52, № 12. — С. 124004.
13. *Lampe, M.* Grain-grain interaction in stationary dusty plasma [Текст] / M. Lampe, G. Joyce // Phys. Plasmas. — 2015. — Т. 22, № 2. — С. 023704.
14. Plasma anisotropy around a dust particle placed in an external electric field [Текст] / G. Sukhinin [и др.] // Phys. Rev. E. — 2017. — Т. 95, № 6. — С. 063207.
15. Active particles in complex and crowded environments [Текст] / C. Bechinger [и др.] // Rev. Mod. Phys. — 2016. — Т. 88, № 4. — С. 045006.
16. *Geiss, D.* Brownian molecules formed by delayed harmonic interactions [Текст] / D. Geiss, K. Kroй, V. Holubec // New J. Phys. — 2019. — Т. 21, № 9. — С. 093014.
17. Non-reciprocal robotic metamaterials [Текст] / M. Brandenbourger [и др.] // Nat. Commun. — 2019. — Т. 10, № 1. — С. 4608.
18. Tunable light-induced dipole-dipole interaction between optically levitated nanoparticles [Текст] / J. Rieser [и др.] // Science. — 2022. — Т. 377, № 6609. — С. 987—990.
19. *Hutchinson, I. H.* Ion collection by a sphere in a flowing plasma: I. Quasineutral [Текст] / I. H. Hutchinson // Plasma Phys. Controlled Fusion. — 2002. — Т. 44, № 9. — С. 1953.
20. *Hutchinson, I.* Ion collection by a sphere in a flowing plasma: 2. Non-zero Debye length [Текст] / I. Hutchinson // Plasma Phys. Controlled Fusion. — 2003. — Т. 45, № 8. — С. 1477.
21. *Hutchinson, I. H.* Ion collection by a sphere in a flowing plasma: 3. Floating potential and drag force [Текст] / I. H. Hutchinson // Plasma Phys. Controlled Fusion. — 2004. — Т. 47, № 1. — С. 71.
22. *Havnes, O.* Charges on dust particles [Текст] / O. Havnes // Adv. Space Res. — 1984. — Т. 4, № 9. — С. 75—83.
23. *Draine, B.* On the physics of dust grains in hot gas [Текст] / B. Draine, E. Salpeter // Astrophys. J. — 1979. — Т. 231. — С. 77—94.

24. Space physics with artificial satellites [Текст] / Y. L. Al’Pert [и др.] // Am. J. Phys. — 1966. — Т. 34, № 6. — С. 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. — The school where the thesis was written.
26. *Kennedy, R.* The floating potential of spherical probes and dust grains. II: Orbital motion theory [Текст] / R. Kennedy, J. Allen // J. Plasma Phys. — 2003. — Т. 69, № 6. — С. 485—506.
27. Exact orbital motion theory of the shielding potential around an emitting, spherical body [Текст] / G. Delzanno [и др.] // Phys. Plasmas. — 2005. — Т. 12, № 6.
28. *Mott-Smith, H. M.* The theory of collectors in gaseous discharges [Текст] / H. M. Mott-Smith, I. Langmuir // Phys. Rev. — 1926. — Т. 28, № 4. — С. 727.
29. *Laframboise, J.* Probe design for orbit-limited current collection [Текст] / J. Laframboise, L. Parker // Phys. Fluids. — 1973. — Т. 16, № 5. — С. 629—636.
30. *Allen, J.* Probe theory—the orbital motion approach [Текст] / J. Allen // Phys. Scr. — 1992. — Т. 45, № 5. — С. 497.
31. *Zakrzewski, Z.* Effect of collisions on positive ion collection by a cylindrical Langmuir probe [Текст] / Z. Zakrzewski, T. Kopiczynski // Plasma Physics. — 1974. — Т. 16, № 12. — С. 1195.
32. *Chang, J.-S.* Probe theory for arbitrary shape in a large Debye length, stationary plasma [Текст] / J.-S. Chang, J. Laframboise // Phys. Fluids. — 1976. — Т. 19, № 1. — С. 25—31.
33. On the charge of dust particles in a low-pressure gas discharge plasma [Текст] / A. Zobnin [и др.] // J. Exp. Theor. Phys. — 2000. — Т. 91. — С. 483—487.
34. Trapped ion effect on shielding, current flow, and charging of a small object in a plasma [Текст] / M. Lampe [и др.] // Phys. Plasmas. — 2003. — Т. 10, № 5. — С. 1500—1513.

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

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

58. *Matthews, L. S.* Multipole expansions of aggregate charge: How far to go? [Текст] / L. S. Matthews, D. A. Coleman, T. W. Hyde // IEEE Trans. Plasma Sci. — 2015. — Т. 44, № 4. — С. 519—524.
59. Gravity compensation in complex plasmas by application of a temperature gradient [Текст] / H. Rothermel [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2002. — Т. 89, № 17. — С. 175001.
60. Confinement of Coulomb balls [Текст] / O. Agr [и др.] // Phys. Plasmas. — 2005. — Т. 12, № 12.
61. Residual dust charges in discharge afterglow [Текст] / L. Couëdel [и др.] // Phys. Rev. E. — 2006. — Т. 74, № 2. — С. 026403.
62. *Трубников, Б. А.* Вопросы теории плазмы [Текст]. Т. 1 / Б. А. Трубников. — 1963. — 98 с.
63. Transport of dust particles in glow-discharge plasmas [Текст] / M. S. Barnes [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 1992. — Т. 68, № 3. — С. 313.
64. *Daugherty, J.* Derivation and experimental verification of a particulate transport model for a glow discharge [Текст] / J. Daugherty, D. Graves // J. Appl. Phys. — 1995. — Т. 78, № 4. — С. 2279—2287.
65. Ion drag on an isolated particulate in a low-pressure discharge [Текст] / M. Kilgore [и др.] // J. Appl. Phys. — 1993. — Т. 73, № 11. — С. 7195—7202.
66. Ion drag force in complex plasmas [Текст] / S. Khrapak [и др.] // Phys. Rev. E. — 2002. — Т. 66, № 4. — С. 046414.
67. Scattering in the attractive Yukawa potential: Application to the ion-drag force in complex plasmas [Текст] / S. Khrapak [и др.] // IEEE Trans. Plasma Sci. — 2004. — Т. 32, № 2. — С. 555—560.
68. *Khrapak, S.* Accurate momentum transfer cross section for the attractive Yukawa potential [Текст] / S. Khrapak // Phys. Plasmas. — 2014. — Т. 21, № 4.
69. *Semenov, I.* Momentum transfer cross-section for ion scattering on dust particles [Текст] / I. Semenov, S. Khrapak, H. Thomas // Phys. Plasmas. — 2017. — Т. 24, № 3.
70. Hybrid approach to the ion drag force [Текст] / S. Khrapak [и др.] // Phys. Plasmas. — 2005. — Т. 12, № 4.

71. *Hutchinson, I.* Collisionless ion drag force on a spherical grain [Текст] / I. Hutchinson // Plasma Phys. Controlled Fusion. — 2006. — Т. 48, № 2. — С. 185.
72. *Schweigert, I. V.* Negative ion-drag force in a plasma of gas discharge [Текст] / I. V. Schweigert, A. L. Alexandrov, F. M. Peeters // IEEE Trans. Plasma Sci. — 2004. — Т. 32, № 2. — С. 623—626.
73. Superfluidlike motion of an absorbing body in a collisional plasma [Текст] / S. Vladimirov [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Т. 100, № 5. — С. 055002.
74. *Maiorov, S.* Influence of the trapped ions on the screening effect and frictional force in a dusty plasma [Текст] / S. Maiorov // Plasma Phys. Rep. — 2005. — Т. 31. — С. 690—699.
75. *Patacchini, L.* Fully Self-Consistent Ion-Drag-Force Calculations for Dust in Collisional Plasmas with an External Electric Field [Текст] / L. Patacchini, I. H. Hutchinson // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Т. 101, № 2. — С. 025001.
76. *Hutchinson, I.* Collisional effects on nonlinear ion drag force for small grains [Текст] / I. Hutchinson, C. Haakonsen // Phys. Plasmas. — 2013. — Т. 20, № 8.
77. Force on a charged test particle in a collisional flowing plasma [Текст] / A. Ivlev [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2004. — Т. 92, № 20. — С. 205007.
78. *Bhatnagar, P. L.* A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems [Текст] / P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, M. Krook // Phys. Rev. — 1954. — Т. 94, № 3. — С. 511.
79. Kinetic approach for the ion drag force in a collisional plasma [Текст] / A. Ivlev [и др.] // Phys. Rev. E. — 2005. — Т. 71, № 1. — С. 016405.
80. Effect of trapped ions on shielding of a charged spherical object in a plasma [Текст] / M. Lampe [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2001. — Т. 86, № 23. — С. 5278.
81. *Bernstein, I. B.* Theory of electrostatic probes in a low-density plasma [Текст] / I. B. Bernstein, I. N. Rabinowitz // Phys. Fluids. — 1959. — Т. 2, № 2. — С. 112—121.

82. *Goree, J.* Ion trapping by a charged dust grain in a plasma [Текст] / J. Goree // Phys. Rev. Lett. — 1992. — Т. 69, № 2. — С. 277.
83. *Bystrenko, T.* Effects of bound states in the screening of dust particles in plasmas [Текст] / T. Bystrenko, A. Zagorodny // Phys. Lett. A. — 2002. — Т. 299, № 4. — С. 383—391.
84. *Tang, X.-Z.* Orbital-motion-limited theory of dust charging and plasma response [Текст] / X.-Z. Tang, G. Luca Delzanno // Phys. Plasmas. — 2014. — Т. 21, № 12.
85. Electrostatic interaction between dust particles in weakly ionized complex plasmas [Текст] / S. Ratynskaia [и др.] // Phys. Plasmas. — 2006. — Т. 13, № 10.
86. *Khrapak, S.* Basic processes in complex (dusty) plasmas: Charging, interactions, and ion drag force [Текст] / S. Khrapak, G. Morfill // Contrib. Plasma Phys. — 2009. — Т. 49, № 3. — С. 148—168.
87. *Semenov, I.* Approximate expression for the electric potential around an absorbing particle in isotropic collisionless plasma [Текст] / I. Semenov, S. Khrapak, H. Thomas // Phys. Plasmas. — 2015. — Т. 22, № 5.
88. *Su, C.* Continuum theory of spherical electrostatic probes [Текст] / C. Su, S. Lam // Phys. Fluids. — 1963. — Т. 6, № 10. — С. 1479—1491.
89. *Filippov, A.* Distribution of Electrons and Ions Near an Absorbing Spherical Body in a Nonequilibrium Plasma [Текст] / A. Filippov // J. Exp. Theor. Phys. — 2021. — Т. 132. — С. 148—158.
90. *Ignatov, A.* Lesage gravity in dusty plasmas [Текст] / A. Ignatov // Plasma Phys. Rep. — 1996. — Т. 22, № 7. — С. 585—589.
91. Observation of Le Sage gravity analog in complex plasma [Текст] / A. V. Zobnin [и др.] // Phys. Rev. E. — 2024. — Т. 110, № 3. — С. 035203.
92. *Melandsø, F.* Polarized supersonic plasma flow simulation for charged bodies such as dust particles and spacecraft [Текст] / F. Melandsø, J. Goree // Phys. Rev. E. — 1995. — Т. 52, № 5. — С. 5312.
93. *Vladimirov, S. V.* Attraction of charged particulates in plasmas with finite flows [Текст] / S. V. Vladimirov, M. Nambu // Phys. Rev. E. — 1995. — Т. 52, № 3. — R2172.

94. *Ishihara, O.* Wake potential of a dust grain in a plasma with ion flow [Текст] / O. Ishihara, S. V. Vladimirov // Phys. Plasmas. — 1997. — Т. 4, № 1. — С. 69–74.
95. Alignment and instability of dust crystals in plasmas [Текст] / V. Schweigert [и др.] // Phys. Rev. E. — 1996. — Т. 54, № 4. — С. 4155.
96. *Lapenta, G.* Simulation of charging and shielding of dust particles in drifting plasmas [Текст] / G. Lapenta // Phys. Plasmas. — 1999. — Т. 6, № 5. — С. 1442–1447.
97. *Lapenta, G.* Linear theory of plasma wakes [Текст] / G. Lapenta // Phys. Rev. E. — 2000. — Т. 62, № 1. — С. 1175.
98. Ion kinetic effects on the wake potential behind a dust grain in a flowing plasma [Текст] / D. Winske [и др.] // Phys. Plasmas. — 2000. — Т. 7, № 6. — С. 2320–2328.
99. *Lapenta, G.* Nature of the force field in plasma wakes [Текст] / G. Lapenta // Phys. Rev. E. — 2002. — Т. 66, № 2. — С. 026409.
100. *Grozdanov, T.* Charge-exchange collisions of multiply charged ions with atoms [Текст] / T. Grozdanov, R. Janev // Phys. Rev. A. — 1978. — Т. 17, № 3. — С. 880.
101. *Zeuner, M.* Ion kinetics in collisional rf-glow discharge sheaths [Текст] / M. Zeuner, J. Meichsner // Vacuum. — 1995. — Т. 46, № 2. — С. 151–157.
102. *Else, D.* On the reliability of the Bhatnagar–Gross–Krook collision model in weakly ionized plasmas [Текст] / D. Else, R. Kompaneets, S. Vladimirov // Phys. Plasmas. — 2009. — Т. 16, № 6.
103. Ion distribution function in a plasma with uniform electric field [Текст] / M. Lampe [и др.] // Phys. Plasmas. — 2012. — Т. 19, № 11.
104. *Kompaneets, R.* Interparticle attraction in 2D complex plasmas [Текст] / R. Kompaneets, G. E. Morfill, A. V. Ivlev // Phys. Rev. Lett. — 2016. — Т. 116, № 12. — С. 125001.
105. *Kompaneets, R.* Wakes in complex plasmas: A self-consistent kinetic theory [Текст] / R. Kompaneets, G. E. Morfill, A. V. Ivlev // Phys. Rev. E. — 2016. — Т. 93, № 6. — С. 063201.

106. Impact of collisions on the dust wake potential with Maxwellian and non-Maxwellian ions [Текст] / S. Sundar [и др.] // Phys. Plasmas. — 2017. — Т. 24, № 10.
107. *Sukhinin, G.* The effect of the type of ion–neutral collisions on ion cloud formation [Текст] / G. Sukhinin, M. Salnikov, A. Fedoseev // AIP Conference Proceedings. Т. 1925. — AIP Publishing. 2018.
108. On the wake structure in streaming complex plasmas [Текст] / P. Ludwig [и др.] // New J. Phys. — 2012. — Т. 14, № 5. — С. 053016.
109. *Salnikov, M.* Influence of the Dust Particle Shape on the Wake Formation in a Complex Plasma [Текст] / M. Salnikov, G. Sukhinin // IEEE Trans. Plasma Sci. — 2021. — Т. 49, № 9. — С. 2583–2588.
110. *Sukhinin, G.* The influence of dust particle geometry on its charge and plasma potential [Текст] / G. Sukhinin, A. Fedoseev, M. Salnikov // Contrib. Plasma Phys. — 2019. — Т. 59, № 4/5. — e201800153.
111. *Kolotinskii, D. A.* Effect of structural inhomogeneity and nonreciprocal effects in the interaction of macroparticles on the dynamic properties of a dusty plasma monolayer [Текст] / D. A. Kolotinskii, V. S. Nikolaev, A. V. Timofeev // JETP Letters. — 2021. — Т. 113, № 8. — С. 510–517.
112. Dust as probes: Determining confinement and interaction forces [Текст] / K. S. Ashrafi [и др.] // Phys. Rev. E. — 2020. — Т. 102, № 4. — С. 043210.
113. Structural properties of a chain of dust particles in a field of external forces [Текст] / A. Fedoseev [и др.] // Phys. Rev. E. — 2022. — Т. 106, № 2. — С. 025204.
114. Energy amplification in plasma crystals due to multiple torsions [Текст] / C. Carmichael [и др.] // Phys. Plasmas. — 2024. — Т. 31, № 12.
115. Mode-coupling instability in a fluid two-dimensional complex plasma [Текст] / A. Ivlev [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2014. — Т. 113, № 13. — С. 135002.
116. Direct observation of mode-coupling instability in two-dimensional plasma crystals [Текст] / L. Couëdel [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2010. — Т. 104, № 19. — С. 195001.

117. *Zhdanov, S.* Mode-coupling instability of two-dimensional plasma crystals [Текст] / S. Zhdanov, A. Ivlev, G. Morfill // Phys. Plasmas. — 2009. — Т. 16, № 8.
118. Experimental studies of two-dimensional complex plasma crystals: waves and instabilities [Текст] / L. Couëdel [и др.] // Physics-Uspekhi. — 2019. — Т. 62, № 10. — С. 1000.
119. *Ivlev, A.* Instabilities in bilayer complex plasmas: Wake-induced mode coupling [Текст] / A. Ivlev, R. Kompaneets // Phys. Rev. E. — 2017. — Т. 95, № 5. — С. 053202.
120. Instability and melting of a crystal of microscopic particles in a radio-frequency discharge plasma [Текст] / I. Schweigert [и др.] // J. Exp. Theor. Phys. — 1998. — Т. 87. — С. 905—915.
121. *Melzer, A.* Connecting the wakefield instabilities in dusty plasmas [Текст] / A. Melzer // Phys. Rev. E. — 2014. — Т. 90, № 5. — С. 053103.
122. Structure and stability of the plasma crystal [Текст] / A. Melzer [и др.] // Phys. Rev. E. — 1996. — Т. 54, № 1. — R46.
123. Thermoacoustic instability in two-dimensional fluid complex plasmas [Текст] / N. P. Kryuchkov [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2018. — Т. 121, № 7. — С. 075003.
124. Spontaneous formation and spin of particle pairs in a single-layer complex plasma crystal [Текст] / V. Nosenko [и др.] // Europhys. Lett. — 2015. — Т. 112, № 4. — С. 45003.
125. Rotating particle pair produces hot complex plasma crystals [Текст] / C. Carmichael [и др.] // Phys. Rev. E. — 2024. — Т. 110, № 2. — С. 025205.
126. Dynamics of spinning particle pairs in a single-layer complex plasma crystal [Текст] / V. Nosenko [и др.] // Phys. Rev. E. — 2017. — Т. 96, № 1. — С. 011201.
127. Fractional Laplacian spectral approach to turbulence in a dusty plasma monolayer [Текст] / E. G. Kostadinova [и др.] // Phys. Plasmas. — 2021. — Т. 28, № 7.

128. *Norman, G.* Kinetic temperature of dust particle motion in gas-discharge plasma [Текст] / G. Norman, A. Timofeev // Phys. Rev. E. — 2011. — Т. 84, № 5. — С. 056401.
129. Transition of a 2D crystal to a non-equilibrium two-phase coexistence state [Текст] / S. Singh [и др.] // Phys. Plasmas. — 2023. — Т. 30, № 4.
130. Experimental investigation of a triple point in a dusty plasma [Текст] / S. Singh [и др.] // Phys. Plasmas. — 2023. — Т. 30, № 12.
131. *Nikolaev, V.* Nonhomogeneity of phase state in a dusty plasma monolayer with nonreciprocal particle interactions [Текст] / V. Nikolaev, A. Timofeev // Phys. Plasmas. — 2021. — Т. 28, № 3.
132. Self-sustained non-equilibrium co-existence of fluid and solid states in a strongly coupled complex plasma system [Текст] / M. Hariprasad [и др.] // Sci. Rep. — 2022. — Т. 12, № 1. — С. 13882.
133. Alignments of a microparticle pair in a glow discharge [Текст] / E. A. Lisin [и др.] // Molecules. — 2021. — Т. 26, № 24. — С. 7535.
134. Experimental study of the nonreciprocal effective interactions between microparticles in an anisotropic plasma [Текст] / E. Lisin [и др.] // Sci. Rep. — 2020. — Т. 10, № 1. — С. 13653.
135. *Mukhopadhyay, A. K.* Experimental measurement of velocity correlations for two microparticles in a plasma with ion flow [Текст] / A. K. Mukhopadhyay, J. Goree // Phys. Rev. E. — 2014. — Т. 90, № 1. — С. 013102.
136. *Samaritan, A.* Dust particle alignments in a plasma sheath [Текст] / A. Samaritan, S. Vladimirov // Contrib. Plasma Phys. — 2009. — Т. 49, № 4/5. — С. 260—280.
137. Influence of wake field inhomogeneity on the vibrational spectra of two dust particles in a plasma with an ion flow [Текст] / E. Sametov [и др.] // Phys. Plasmas. — 2024. — Т. 31, № 12.
138. *Salnikov, M.* Plasma parameters around a chain-like structure of dust particles in an external electric field [Текст] / M. Salnikov, A. Fedoseev, G. Sukhinin // Molecules. — 2021. — Т. 26, № 13. — С. 3846.

139. *Lisina, I.* Formation of chain-like structures of dust particles with anisotropic pair interaction [Текст] / I. Lisina, O. Vaulina // Phys. Scr. — 2014. — Т. 89, № 10. — С. 105604.
140. Vacancy formation in a 1D chain of dust particles in a DC discharge [Текст] / A. Fedoseev [и др.] // Sci. Rep. — 2024. — Т. 14, № 1. — С. 13252.
141. Parameters of dust particle chains levitated vertically in a gas discharge plasma [Текст] / A. Fedoseev [и др.] // Phys. Plasmas. — 2024. — Т. 31, № 6.
142. Numerical Study of Structural Parameters of Dust Particle Chains of Different Lengths [Текст] / M. Sal'nikov [и др.] // Plasma Phys. Rep. — 2024. — Т. 50, № 10. — С. 1280—1287.
143. *Ignatov, A.* Heat Conduction of Linear Chain of Dust Particles [Текст] / A. Ignatov // Plasma Phys. Rep. — 2023. — Т. 49, № 3. — С. 370—379.
144. *Vaulina, O. S.* Kinetic energy in a system of particles with a nonreciprocal interaction [Текст] / O. S. Vaulina, I. I. Lisina, E. A. Lisin // Europhys. Lett. — 2015. — Т. 111, № 5. — С. 50003.
145. *Sametov, E.* Method of spectral response to stochastic processes for measuring the nonreciprocal effective interactions [Текст] / E. Sametov, E. Lisin, O. Vaulina // Phys. Rev. E. — 2023. — Т. 108, № 5. — С. 055207.
146. *Defaveri, L.* Heat flux in chains of nonlocally coupled harmonic oscillators: Mean-field limit [Текст] / L. Defaveri, C. Olivares, C. Anteneodo // Phys. Rev. E. — 2022. — Т. 105, № 5. — С. 054149.
147. *Игнатов, А.* Устойчивость линейного плазменного кристалла [Текст] / А. Игнатов // Физика плазмы. — 2020. — Т. 46, № 3. — С. 213—218.
148. Heat transfer in a two-dimensional crystalline complex (dusty) plasma [Текст] / S. Nunomura [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2005. — Т. 95, № 2. — С. 025003.
149. *Nosenko, V.* Laser method of heating monolayer dusty plasmas [Текст] / V. Nosenko, J. Goree, A. Piel // Phys. Plasmas. — 2006. — Т. 13, № 3.
150. Heat transport in a two-dimensional complex (dusty) plasma at melting conditions [Текст] / V. Nosenko [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Т. 100, № 2. — С. 025003.

151. Nonreciprocal forces enable cold-to-hot heat transfer between nanoparticles [Текст] / S. A. Loos [и др.] // Sci. Rep. — 2023. — Т. 13, № 1. — С. 4517.
152. *Ashida, Y.* Non-hermitian physics [Текст] / Y. Ashida, Z. Gong, M. Ueda // Adv. Phys. — 2020. — Т. 69, № 3. — С. 249—435.
153. Topological enhancement of nonnormality in non-Hermitian skin effects [Текст] / Y. O. Nakai [и др.] // Phys. Rev. B. — 2024. — Т. 109, № 14. — С. 144203.
154. Critical non-Hermitian skin effect [Текст] / L. Li [и др.] // Nat. Commun. — 2020. — Т. 11, № 1. — С. 5491.
155. Unconventional skin modes in generalized topoelectrical circuits with multiple asymmetric couplings [Текст] / S. Rafi-Ul-Islam [и др.] // Phys. Rev. Res. — 2022. — Т. 4, № 4. — С. 043108.
156. A review on non-Hermitian skin effect [Текст] / X. Zhang [и др.] // Adv. Phys.:X. — 2022. — Т. 7, № 1. — С. 2109431.
157. *Metelmann, A.* Nonreciprocal photon transmission and amplification via reservoir engineering [Текст] / A. Metelmann, A. A. Clerk // Phys. Rev. X. — 2015. — Т. 5, № 2. — С. 021025.
158. Sarkas: a fast pure-python molecular dynamics suite for plasma physics [Текст] / L. G. Silvestri [и др.] // Comput. Phys. Commun. — 2022. — Т. 272. — С. 108245.
159. *Hockney, R.* Computer Simulations Using Particles (Bristol: Adam Hilger) [Текст] / R. Hockney, J. Eastwood. — 1988.
160. *Greengard, L.* Fast algorithms for classical physics [Текст] / L. Greengard // Science. — 1994. — Т. 265, № 5174. — С. 909—914.
161. *Pollock, E.* Comments on P3M, FMM, and the Ewald method for large periodic Coulombic systems [Текст] / E. Pollock, J. Glosli // Comput. Phys. Commun. — 1996. — Т. 95, № 2/3. — С. 93—110.
162. *Hutchinson, I.* Intergrain forces in low-Mach-number plasma wakes [Текст] / I. Hutchinson // Phys. Rev. E. — 2012. — Т. 85, № 6. — С. 066409.
163. OpenMM 7: Rapid development of high performance algorithms for molecular dynamics [Текст] / P. Eastman [и др.] // PLoS Comput. Biol. — 2017. — Т. 13, № 7. — e1005659.

164. *Scott, R.* Computer Simulation of Liquids. [Текст] / R. Scott. — 1991.
165. *Andersen, H. C.* Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature [Текст] / H. C. Andersen // J. Chem. Phys. — 1980. — Т. 72, № 4. — С. 2384—2393.
166. CuPy: A NumPy-Compatible Library for NVIDIA GPU Calculations [Текст] / R. Okuta [и др.] // Proceedings of Workshop on Machine Learning Systems (LearningSys) in The Thirty-first Annual Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS). — 2017.
167. Array programming with NumPy [Текст] / C. R. Harris [и др.] // Nature. — 2020. — СЕНТ. — Т. 585, № 7825. — С. 357—362.
168. SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python [Текст] / P. Virtanen [и др.] // Nat. Methods. — 2020. — Т. 17. — С. 261—272.
169. *Hutchinson, I.* Computation of the effect of neutral collisions on ion current to a floating sphere in a stationary plasma [Текст] / I. Hutchinson, L. Patacchini // Phys. Plasmas. — 2007. — Т. 14, № 1. — С. 013505.
170. *Amdahl, G.* Amdahl's law [Текст] / G. Amdahl. — 1967.
171. *Loos, S. A.* Irreversibility, heat and information flows induced by non-reciprocal interactions [Текст] / S. A. Loos, S. H. Klapp // New J. Phys. — 2020. — Т. 22, № 12. — С. 123051.
172. *Liu, C.* A method of symmetrization of asymmetric dynamical systems [Текст] / C. Liu // Shock Vib. — 2005. — Т. 12, № 4. — С. 309—315.
173. *Bhaskar, A.* Taussky's theorem, symmetrizability and modal analysis revisited [Текст] / A. Bhaskar // Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. — 2001. — Т. 457, № 2014. — С. 2455—2480.
174. *Ford, J.* Equipartition of energy for nonlinear systems [Текст] / J. Ford // J. Math. Phys. — 1961. — Т. 2, № 3. — С. 387—393.
175. *Hatano, N.* Vortex pinning and non-Hermitian quantum mechanics [Текст] / N. Hatano, D. R. Nelson // Phys. Rev. B. — 1997. — Т. 56, № 14. — С. 8651.
176. Exact analog of the Hatano-Nelson model in one-dimensional continuous nonreciprocal systems [Текст] / A. Maddi [и др.] // Phys. Rev. Res. — 2024. — Т. 6, № 1. — С. L012061.

177. Symmetry and topology in non-Hermitian physics [Текст] / K. Kawabata [и др.] // Phys. Rev. X. — 2019. — Т. 9, № 4. — С. 041015.
178. *Okuma, N.* Non-Hermitian topological phenomena: A review [Текст] / N. Okuma, M. Sato // Annu. Rev. Condens. Matter Phys. — 2023. — Т. 14, № 1. — С. 83–107.
179. *Molignini, P.* Anomalous skin effects in disordered systems with a single non-Hermitian impurity [Текст] / P. Molignini, O. Arandes, E. J. Bergholtz // Phys. Rev. Res. — 2023. — Т. 5, № 3. — С. 033058.

Список рисунков

2.1	Иллюстрация геометрии области моделирования, используемой в OpenDust.	41
2.2	Диаграмма взаимодействия объектов класса OpenDust для случая бесстолкновительного максвелловского потока плазмы.	48
2.3	Диаграмма взаимодействия объектов класса OpenDust для случая столкновительного потока плазмы, управляемого полем.	49
2.4	Диаграмма зависимости атрибутов <code>t</code> и <code>dustParticles</code>	51
2.5	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.	54
2.6	Сравнение временной зависимости заряда пылевой частицы, рассчитанного самосогласованно и с использованием OML-аппроксимации.	55
2.7	Временная зависимость силы ионного увлечения. Голубая линия показывает полную силу, красная линия — электрическую компоненту силы, возникающую во взаимодействии пылевой частицы с экранированными ионами.	56
2.8	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.	56
2.9	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.	58

- 2.10 Зависимость силы ионного увлечения (a) 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 [169]. 60
- 2.11 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]. 62
- 2.12 Относительное значение заряда нижней пылевой частицы в зависимости от её вертикального положения относительно верхней частицы. Заряд нормирован на значение для уединённой частицы. 63
- 3.1 Иллюстрация передачи данных дискретных частиц между GPU и CPU. 70
- 3.2 Иллюстрация передачи данных между несколькими GPU для параллельного расчета сил. 71
- 3.3 Среднее время выполнения процедуры `simulate` 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. 73
- 3.4 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. 75

- 3.5 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. 77
- 4.1 а)-с) - зависимость меры невязанности от коэффициента взаимодействия f_{12} . d)-f) - зависимость температур термостатов, минимизирующих тепловые потоки (4.19), от коэффициента взаимодействия f_{12} . Серым цветом на рисунках обозначена зона динамической неустойчивости системы (без учета трения). 89
- 4.2 Зависимость меры невязанности от масштабного параметра ξ для линейной цепочки невязанно связанных осцилляторов с четырьмя степенями свободы. 92
- 4.3 Соответствие между условиями консервативности и невязанности динамической системы и неэрмитовостью её матрицы переноса. . . . 97
- 4.4 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
- 4.5 Локализация собственных векторов матрицы передачи \hat{S} вблизи границы цепочки. 101

Список таблиц

1	Параметры, используемые для моделирования бесстолкновительного максвелловского потока плазмы вокруг одионочной пылевой частицы для первого тестового случая	53
2	Параметры, используемые для моделирования столкновительного плазменного потока, управляемого электрическим полем, вокруг одионочной пылевой частицы	59
3	Параметры, используемые для моделирования бесстолкновительного максвелловского плазменного потока вокруг двух пылевых частиц	64
4	Параметры моделирования зарядки пылевых частиц	65
5	Характеристики протестированных устройств.	72
6	Обобщенная информация о предыдущих реализациях самосогласованного моделирования комплексной плазмы	78
7	Данные о производительности 3-D молекулярно-динамических симуляций комплексной плазмы	79