

МОДЕЛЬ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСТЕМЫ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ С УЧЕТОМ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ И СИЛЫ ТРЕНИЯ

© 2019 г. *К.Н. Джумагулова, Т.С. Рамазанов, Р.У. Машеева, М.Н. Джумагулов*

НИИЭТФ, Казахский национальный университет имени аль-Фараби
anna_m@mail.ru

Работа была выполнена в рамках Гранта AP05132665 Министерства Образования и Науки Республики Казахстан.

DOI: 10.1134/S0234087919110108

В представленной работе получена модифицированная численная схема Верле. Данная схема предназначена для решения уравнений движения заряженных частиц, погруженных во внешнюю стационарную среду и однородное магнитное поле, для примера, заряженных частиц конденсированного вещества в буферной плазме (пылевая плазма). Влияние окружающей среды на динамику частиц описывается силой трения. Также на динамику частиц влияет межчастичное взаимодействие и внешнее однородное магнитное поле. Для получения схемы Верле координаты и скорости частиц разлагаются в ряд Тейлора с учетом силы Лоренца и силы трения. Учитывались все члены разложения в ряд Тейлора, дающие одинаковый порядок точности. В полученной численной схеме временной шаг моделирования не зависит от величины магнитного поля, а определяется только внутренними физическими свойствами рассматриваемой системы, что является важным при моделировании ансамбля заряженных частиц с учетом электромагнитных полей. В работе решалась тестовая задача, для которой были сравнены траектории частиц, полученные на основе обычной и модифицированной схемы Верле для разных значений как параметра трения, так и параметра магнитного поля. На основе анализа зависимости максимального относительного отклонения координаты от временного шага показана независимость шага по времени от магнитного поля в схеме разложения Тейлора, в то время как в инверсной схеме Верле имеется такая зависимость.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, алгоритм Верле, внешнее однородное магнитное поле, пылевая плазма.

MODEL FOR INVESTIGATION THE PHYSICAL PROPERTIES OF THE SYSTEM OF CHARGED PARTICLES TAKING INTO ACCOUNT THE EXTERNAL MAGNETIC FIELD AND FRICTION FORCE

K.N. Dzhumagulova, T.S. Ramazanov, R.U. Masheyeva, M.N. Jumagulov

ИЕТР, Al Farabi Kazakh National University, Kazakhstan

ranna_m@mail.ru

In the present work, a modified Verlet numerical scheme was obtained. This scheme is intended to solve the equations of motion of charged particles immersed in an external stationary environment and a uniform magnetic field, for example, charged particles of a condensed substance in a buffer plasma (dusty plasma). The influence of the environment on the particle dynamics is described by friction force. The particle dynamics are also affected by interparticle interaction and an external uniform magnetic field. To obtain the Verlet scheme, the coordinates and velocities of the particles are decomposed into a Taylor series, taking into account the Lorentz force and the friction force. All Taylor series expansion terms that give the same order of accuracy were taken into account. In the obtained numerical scheme, the time step of modeling does not depend on the magnitude of the magnetic field, but is determined only by the internal physical properties of the system under consideration, which is important when modeling an ensemble of charged particles with taking into account electromagnetic fields. The paper solved a test problem for which particle trajectories obtained based on the conventional and modified Verlet scheme for different values, both the friction parameter and the magnetic field parameter, were compared. Based on the analysis of the dependence of the maximum relative deviation of the coordinate on the time step, the time step is independent of the magnetic field in the Taylor expansion scheme, while in the inverse Verlet scheme there is such dependence.

Key words: molecular dynamics method, Verlet algorithm, external homogenous magnetic field, dusty plasma.

1. Введение

Изучение влияния внешнего магнитного поля на свойства заряженных частиц всегда представляло большой интерес. Заряженные частицы также могут быть погружены во внешнюю стационарную среду, например, можно рассмотреть заряженные частицы конденсированного вещества в буферной плазме, т.е. пылевую плазму [1-3]. Во многих случаях влияние окружающей среды на динамику частиц может быть описано силой трения:

$$F_{fr}(t) = -v\mathfrak{V}(t), \quad (1)$$

где v – коэффициент трения, $\mathfrak{V}(t)$ – скорость частицы относительно стационарной фоновой среды. В настоящее время построение математической модели для исследования одновременного влияния силы внешнего магнитного поля и силы трения является весьма актуальной проблемой [3].

Для исследования физических свойств многочастичной системы часто

используется метод компьютерного моделирования молекулярной динамики. В [4-7] представлены результаты исследования влияния внешнего магнитного поля на физические свойства системы заряженных частиц на основе метода молекулярной динамики. Компьютерное моделирование пылевой плазмы с учетом влияния окружающей среды, обусловившей трение в системе, было выполнено на основе метода ланжевеновой динамики [8-11], являющегося модификацией метода молекулярной динамики.

В [12] был предложен способ получения устойчивой численной схемы для моделирования МД в присутствии некоторой силы, зависящей от скорости частицы. Как известно, основной трудностью в разработке разностной схемы для исследования физических свойств плазмы в электромагнитных полях является выбор временного шага моделирования Δt . Временной шаг моделирования должен быть выбран достаточно малым для корректного отслеживания винтового движения частицы: частица с зарядом q/m выполняет ларморовское вращение с частотой $\omega_c = qB/m$, когда на нее действует магнитное поле \mathbf{B} . Условие для выбора шага следующее:

$$\omega_c \Delta t \ll 2\pi. \quad (2)$$

Когда магнитное поле слабое, то есть когда шкала времени τ_{int} , которая определяется взаимодействиями внутри самой системы, мала по сравнению с ларморовской частотой $2\pi/\omega_c$, выбор шага Δt подавляется τ_{int} и автоматически выполняется условие: $\Delta t \ll \tau_{\text{int}} \ll 2\pi/\omega_c$. При сильном магнитном поле, подчиняясь условию (2), придется выполнить огромное количество мелких шагов по времени, что, в свою очередь, увеличивает время вычисления. Численный алгоритм, предложенный в [12], позволяет моделировать систему заряженных частиц под воздействием сильного статического внешнего магнитного поля без выполнения условия (2), то есть шаг по времени Δt не зависит от параметра магнитного поля, а определяется только внутренними физическими свойствами рассматриваемой системы. Это свойство данного метода является важным для моделирования ансамбля заряженных частиц с учетом электромагнитных полей. В разд. 1, 2 данной работы описаны общая схема Верле и ее явный вид. В разд. 3 выполнены все шаги, описанные в [12], для получения новой модифицированной схемы Верле (СВ), учитывающей как влияние внешнего магнитного поля, так и влияние силы трения, вызванной наличием окружающей среды. Тестовая задача описана в разд. 5, чтобы показать преимущество полученной модифицированной схемы Верле (МСВ).

2. Схема Верле для моделирования заряженных частиц с учетом внешнего магнитного поля и влияния окружающей среды

Рассмотрим систему, состоящую из N заряженных частиц. Векторы $\mathbf{r}_i(t), \mathbf{v}_i(t), \mathbf{a}_i(t)$ описывают координату, скорость и ускорение i -й частицы в момент времени t соответственно. Компоненты векторов – x, y, z соответственно. Решается $6N$ уравнений движения первого порядка для всех N частиц системы:

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i(t), \quad (3)$$

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{a}_i(t) = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i}, \quad (4)$$

где m – масса i -й частицы, $i = 1, \dots, N$, \mathbf{F}_i – сила, действующая на частицу i со стороны остальных частиц; \mathbf{a}_i может быть функцией координаты и скорости всех частиц.

Для решения дифференциальных уравнений (3), (4), используются разные численные схемы, самой распространенной из них является алгоритм Верле:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \Delta t \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \mathbf{a}(t) + O((\Delta t)^3), \quad (5)$$

$$\mathbf{a}(t + \Delta t) = \mathbf{a}(\mathbf{r}_1(t + \Delta t), \dots, \mathbf{r}_N(t + \Delta t), \mathbf{v}_1(t + \Delta t), \dots, \mathbf{v}_N(t + \Delta t), t + \Delta t), \quad (6)$$

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2} \Delta t (\mathbf{a}(t) + \mathbf{a}(t + \Delta t)) + O((\Delta t)^3). \quad (7)$$

Очевидно, когда ускорение зависит от скорости, схема (5)-(7) неявна. Как было показано в [12], в случае статического однородного внешнего магнитного поля, действующего на систему, численную схему Верле можно модифицировать для получения явного вида. Мы выполним это с учетом силы трения. Тогда в однородном магнитном поле ускорение каждой частицы, испытывающей к тому же и торможение при движении в фоновом газе, можно записать в следующем виде:

$$\mathbf{a}(t) = \mathbf{a}^C(t) - \omega_c \mathbf{e}_z \times \mathbf{v}(t) - \nu \mathbf{v}(t), \quad (8)$$

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

$$\mathbf{a}^C(t) = \mathbf{a}^C(\mathbf{r}_1(t), \dots, \mathbf{r}_N(t); t), \quad (9)$$

$\omega_c = qB/m$ – ларморовская циклотронная частота, $\mathbf{e}_z = (0, 0, 1)$ – единичный вектор, направленный вдоль оси z . Для упрощения обозначений мы будем рассматривать систему, где все частицы имеют одно и то же отношение заряда к массе. Далее мы опишем два разных приближения, учитывающих магнитное поле и силу трения в схеме Верле, которые мы в согласии с [12] назвали “инверсия $\mathbf{e}_z \times \mathfrak{G}$,” и “разложение в ряд Тейлора”.

3. Инверсия $\mathbf{e}_z \times \mathfrak{G}$

Подставляя ускорение (8) в уравнения (5)-(7) и переписав уравнение (7) в явном виде для $\mathfrak{G}(t + \Delta t)$, имеем следующие уравнения явной схемы Верле с ускорением, заданным в (9):

$$r_x(t + \Delta t) = r_x(t) + \Delta t \mathfrak{G}_x(t) + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \left[a_x^C(t) - v \mathfrak{G}_x(t) + \omega_c \mathfrak{G}_y(t) \right] + O((\Delta t)^3), \quad (10)$$

$r_y(t + \Delta t)$ получается из (10) заменой $x \rightarrow y$ и $\omega_c \rightarrow -\omega_c$,

$$r_z(t + \Delta t) = r_z(t) + \Delta t \mathfrak{G}_z(t) + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \left[a_z^C(t) - v \mathfrak{G}_z(t) \right] + O((\Delta t)^3), \quad (11)$$

$$\mathfrak{G}_x(t + \Delta t) = \frac{1}{K} \left[\mathfrak{G}_x(t) + \frac{1}{2} \Delta t \left(A(t) + \frac{\omega_c}{1 + v \Delta t / 2} B(t) \right) \right] + O((\Delta t)^3), \quad (12)$$

$\mathfrak{G}_y(t + \Delta t)$ получается из (12) заменой $x \rightarrow y$ и $\omega_c \rightarrow -\omega_c$,

$$\mathfrak{G}_z(t + \Delta t) = \frac{1}{1 + v \Delta t / 2} \left[\mathfrak{G}_z(t) + \frac{1}{2} \Delta t \left(a_z^C(t) + a_z^C(t + \Delta t) \right) \right] + O((\Delta t)^3). \quad (13)$$

В (12)

$$K = 1 + \frac{\omega_c^2 (\Delta t)^2}{4 + 2v \Delta t} + \frac{v \Delta t}{2}, \quad A(t) = a_x^C(t) + a_x^C(t + \Delta t) + \omega_c \mathfrak{G}_y(t) - v \mathfrak{G}_x(t),$$

$$B(t) = \mathfrak{G}_y(t) + \frac{\Delta t}{2} a_y(t) + \frac{\Delta t}{2} a_y(t + \Delta t) - \frac{\Delta t}{2} \omega_c \mathfrak{G}_x(t) - \frac{\Delta t}{2} v \mathfrak{G}_y(t).$$

При $v \rightarrow 0$ уравнения (10)-(13) преобразуются в следующий вид:

$$r_x(t + \Delta t) = r_x(t) + \Delta t \mathfrak{G}_x(t) + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \left[a_x^C(t) + \omega_c \mathfrak{G}_y(t) \right] + O((\Delta t)^3), \quad (14)$$

$r_y(t + \Delta t)$ получается из (14) заменой $x \rightarrow y$ и $\omega_c \rightarrow -\omega_c$,

$$r_z(t + \Delta t) = r_z(t) + \Delta t \mathfrak{G}_z(t) + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 a_z^C(t) + O((\Delta t)^3), \quad (15)$$

$$\vartheta_x(t + \Delta t) = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}(\omega_c \Delta t)^2} \left\{ \begin{aligned} & \left[\vartheta_x(t) + \frac{1}{2} \Delta t \left(a_x^C(t) + a_x^C(t + \Delta t) \right) + \right. \\ & \left. + \frac{(\Delta t)^2 \omega_c}{4} \left(a_y^C(t) + a_y^C(t + \Delta t) \right) \right] \\ & \left. + \frac{(\Delta t)^2 \omega_c}{4} \left(a_y^C(t) + a_y^C(t + \Delta t) \right) \right\} + O((\Delta t)^3), \quad (16) \end{aligned}$$

$$\vartheta_z(t + \Delta t) = \vartheta_z(t) + \frac{1}{2} \Delta t \left(a_z^C(t) + a_z^C(t + \Delta t) \right) + O((\Delta t)^3). \quad (17)$$

Уравнения (14)-(17) были получены в [12] для случая без учета силы трения. Как будет показано ниже, схема (10)-(13) будет устойчива только для случая слабых магнитных полей. При сильных магнитных полях она становится неустойчивой относительно шага по времени и требует выполнения большого количества вычислений с малым временным шагом.

4. Разложение в ряд Тейлора

Напомним, что в [12] была также получена схема на основе разложения координат $\mathbf{r}(t + \Delta t)$ и скоростей $\vartheta(t + \Delta t)$ частиц в ряд Тейлора с последующим корректным выбором всех членов не выше $O((\Delta t)^2)$, устойчивая к изменению шага по времени при больших внешних магнитных полях. Временной шаг в этой схеме не зависит от периода ларморовских осцилляций. Эта схема была успешно использована в [13,14]. В нашей работе мы вводим в схему Верле силу трения, выполняя для этого все этапы по выводу устойчивой схемы, описанные в [12]. Мы применили данную технику для случая, когда моделируемые частицы находятся в однородной стационарной среде, приводящей к появлению силы трения, действующей на движущиеся частицы. Приведем теперь вывод соответствующих численных уравнений.

Предполагаем, что магнитное поле достаточно сильное, т.е. $\Omega \Delta t \ll 2\pi$ не выполняется. Разложение в ряд Тейлора $\mathbf{r}(t + \Delta t)$ записывается:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \Delta t \vartheta(t) + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(\Delta t)^n}{n!} \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \mathbf{a}(t), \quad (18)$$

аналогичное разложение для скорости записывается следующим образом:

$$\vartheta(t + \Delta t) = \vartheta(t) + \Delta t \mathbf{a}(t) + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(\Delta t)^n}{n!} \frac{d^{n-1}}{dt^{n-1}} \mathbf{a}(t), \quad (19)$$

где $\mathbf{a}(t)$ приведено в (8).

Общий член в (18)

$$\frac{(\Delta t)^n}{n!} \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \mathbf{a}(t). \quad (20)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \mathbf{a}(t) &= \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \mathbf{a}^C(t) - \omega_c \mathbf{e}_z \times \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \mathfrak{G} - \nu \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \mathfrak{G} = \\ &= \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \mathbf{a}^C(t) - \omega_c \mathbf{e}_z \times \frac{d^{n-3}}{dt^{n-3}} \mathbf{a}(t) - \nu \frac{d^{n-3}}{dt^{n-3}} \mathbf{a}(t). \end{aligned} \quad (21)$$

В [12] было показано, что

$$\frac{(\Delta t)^n}{n!} \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \mathbf{a}(t) = O((\Delta t)^n) O((\Delta t)^{-n+1}) = O((\Delta t)^1), \quad (22)$$

и ряд Тейлора (18) больше не сортируется по возрастанию Δt , так как каждый член порядка

$$\frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \mathbf{a}(t) = \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} \mathbf{a}^C(t) - (i\omega_c + \nu) \left\{ \frac{d^{n-3}}{dt^{n-3}} \mathbf{a}^C(t) - (i\omega_c + \nu) \begin{bmatrix} \frac{d^{n-4}}{dt^{n-4}} \mathbf{a}^C(t) \dots - \\ (i\omega_c + \nu)(\mathbf{a}^C(t) - \\ -(i\omega_c + \nu)\mathfrak{G}) \end{bmatrix} \right\}.$$

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

$$m: R^3 \rightarrow C; \quad \mathbf{b} \mapsto b = b_x + ib_y, \quad (23)$$

где $\mathbf{b} \in R^3$ – произвольный трехмерный вектор; « m » сопоставляет векторное произведение $\mathbf{e}_z \times \mathbf{b}$ в простое умножение: $\mathbf{e}_z \times \mathbf{b} \mapsto -b_y + ib_x = ib$. Компонента z уравнения (18) не зависит от магнитного поля, поэтому компонента $b_z = 0$ и можно определить обратное отображение

$$m^{-1}: C \rightarrow R^3; \quad b = \Re b + i\Im b \mapsto \mathbf{b} = (\Re b, \Im b, 0). \quad (24)$$

Перепишем уравнение (21) с учетом указанного отображения как:

$$\frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} a(t) = \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} a^C(t) - (i\omega_c + \nu) \frac{d^{n-3}}{dt^{n-3}} a(t), \quad (25)$$

Рекурсивно подставляем (25) в себя $n - 3$ раз и в итоге получаем:

$$\begin{aligned} \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} a(t) = & \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} a^C(t) - \\ & -(i\omega_c + \nu) \left\{ \frac{d^{n-3}}{dt^{n-3}} a^C(t) - (i\omega_c + \nu) \left[\frac{d^{n-4}}{dt^{n-4}} a^C(t) \dots - \right. \right. \\ & \left. \left. (i\omega_c + \nu)(a^C(t) - (i\omega_c + \nu)\vartheta) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (26)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} a(t) = & (-i\omega_c - \nu)^{n-1} \vartheta + (-i\omega_c - \nu)^{n-2} a^C(t) + \\ & + \sum_{k=1}^{n-2} (-i\omega_c - \nu)^{n-2-k} \frac{d^k}{dt^k} a^C = \\ & = (-i\omega_c - \nu)^{n-1} \vartheta + (-i\omega_c - \nu)^{n-2} a^C(t) + O((\Delta t)^{3-n}). \end{aligned} \quad (27)$$

Общий член (20) записывается как:

$$\frac{(\Delta t)^n}{n!} \frac{d^{n-2}}{dt^{n-2}} a(t) = \frac{((-i\omega_c - \nu)\Delta t)^n}{n!} \left(\frac{\vartheta(t)}{-i\omega_c - \nu} + \frac{a^C(t)}{(-i\omega_c - \nu)^2} \right) + O((\Delta t)^3). \quad (28)$$

Полученный результат в конечном итоге подставляется в разложение Тейлора (18):

$$\begin{aligned} r(t + \Delta t) = & r(t) + \Delta t \vartheta(t) + \\ & + \sum_{n=2}^{\infty} \left[\frac{((-i\omega_c - \nu)\Delta t)^n}{n!} \left(\frac{\vartheta(t)}{-i\omega_c - \nu} + \frac{a^C(t)}{(-i\omega_c - \nu)^2} \right) + O((\Delta t)^3) \right] = \\ & = r(t) + \Delta t \vartheta(t) + [\exp((-i\omega_c - \nu)\Delta t) - 1 + (i\omega_c + \nu)\Delta t] \times \\ & \times \left(\frac{\vartheta(t)}{-i\omega_c - \nu} + \frac{a^C(t)}{(-i\omega_c - \nu)^2} \right) + O((\Delta t)^3). \end{aligned} \quad (29)$$

После применения m^{-1} можно получить формулы для x и y компонент.

Компонента z остается неизменной:

$$r_x(t + \Delta t) = r_x(t) - \frac{1}{(\omega_c^2 + v^2)} \left[(v\vartheta_x(t) + \omega_c\vartheta_y(t)) \cdot (EC - 1) + \right. \\ \left. + \frac{1}{(\omega_c^2 + v^2)^2} \left[C(\omega_c\Delta t)((v^2 - \omega_c^2)a_x^C(t) + 2v\omega_c a_y^C(t)) + \right. \right. \\ \left. \left. S(\omega_c\Delta t)((v^2 - \omega_c^2)a_y^C(t) - 2v\omega_c a_x^C(t)) \right] \right] + O((\Delta t)^3). \quad (30)$$

$r_y(t + \Delta t)$ получается из (30) заменой $x \rightarrow y$ и $\omega_c \rightarrow -\omega_c$,

$$r_z(t + \Delta t) = r_z(t) + \Delta t \vartheta_z(t) + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \left[a_z^C(t) - v\vartheta_z(t) \right] + O((\Delta t)^3), \quad (31)$$

где использовались следующие обозначения:

$$S(\omega_c\Delta t) \equiv \exp(-v\Delta t) \sin(\omega_c\Delta t) - \omega_c\Delta t \equiv ES - \omega_c\Delta t, \quad (32)$$

$$C(\omega_c\Delta t) \equiv \exp(-v\Delta t) \cos(\omega_c\Delta t) - 1 + v\Delta t \equiv EC - 1 + v\Delta t, \quad (33)$$

$$\vartheta_x(t + \Delta t) = (\vartheta_x(t)EC + \vartheta_y(t)ES) + \frac{1}{\omega_c^2 + v^2} \times \\ \times [(\omega_c ES - vEC)a_x^C(t) + va_x^C(t) - (\omega_c EC + vES)a_y^C(t) + \omega_c a_y^C(t)] + \frac{1}{(\omega_c^2 + v^2)^2} \times \\ \times \{ (v^2 - \omega_c^2)EC - 2v\omega_c ES + (\omega_c^2 - v^2) + (\omega_c^2 + v^2)v\Delta t \} \frac{d}{dt} a_x^C(t) + \\ + \{ (v^2 - \omega_c^2)ES + 2v\omega_c EC - 2v\omega_c + (\omega_c^2 + v^2)\omega_c\Delta t \} \frac{d}{dt} a_y^C(t), \quad (34)$$

$\vartheta_y(t + \Delta t)$ получается из (34) заменой $x \rightarrow y$ и $\omega_c \rightarrow -\omega_c$,

$$\vartheta_z(t + \Delta t) = \frac{1}{1 + v\Delta t/2} \left[\vartheta_z(t) + \frac{1}{2} \Delta t (a_z^C(t) + a_z^C(t + \Delta t)) \right] + O((\Delta t)^3). \quad (35)$$

Система уравнений (30)–(35) представляет собой численную схему для решения уравнений движения частиц, находящихся во внешнем однородном стационарном магнитном поле и фоновой среде. Выбор шага интегрирования для нее не ограничивается условием $\omega_c\Delta t \ll 2\pi$. В данных уравнениях нет ссылок на ускорения, вызванные действием силы Лоренца и силы трения, они оказались полностью встроенными в эти уравнения. Ссылки есть только на \mathbf{a}^C , обусловленную как взаимодействием частиц, так и внешними

силами, не зависящими от скорости частиц. Выбор шага по времени сейчас зависит только от временного масштаба, обусловленного \mathbf{a}^C . При $v \rightarrow 0$ уравнения (30)–(35) перейдут в соответствующие уравнения, представленные в [12] для случая без фонового окружения. Что свидетельствует о достоверности полученных конечно-разностных уравнений.

5. Тестовая задача

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

$$\mathbf{a}(t) = -(\mathbf{r}/|\mathbf{r}|^3) - \omega_c \mathbf{e}_z \times \mathfrak{V}(t) - v\mathfrak{V}(t). \tag{36}$$

Решаем уравнения движения численно от $t=0$ до $t=20$ в широком диапазоне изменения параметров ω_c , Δt и v обоими методами, инверсным алгоритмом СВ (10)–(13) и алгоритмом разложения в ряд Тейлора МСВ (30)–(35).

На рис.1 приведены траектории, вычисленные при разных значениях ω_c и v на основе уравнений (30)–(35), а также даны траектории, вычисленные по МСВ, в которой не учитывается сила трения ($v=0$). Как видно из этих графиков, при $v=0.001$ траектории, вычисленные по (30)–(35) и [12], практически совпадают, с увеличением v появляются заметные отличия. Также видно, что с увеличением магнитного поля помимо вращения вокруг силового центра электрического поля появляются ларморовские вращения.

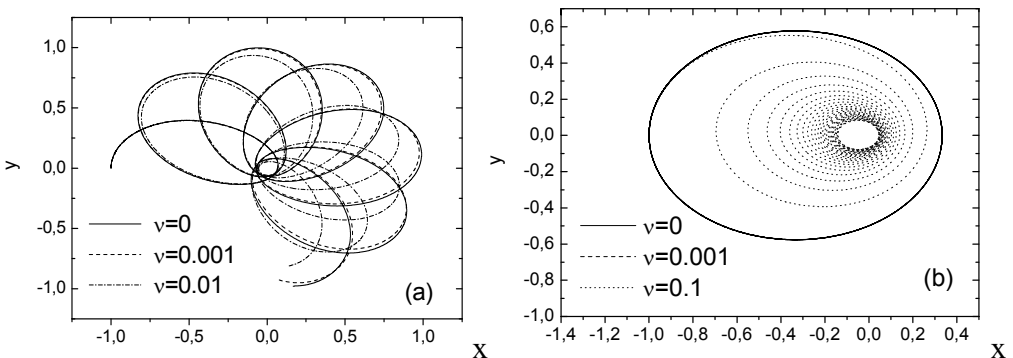


Рис.1. Траектории движения заряженной частицы с ускорением (36): а) $\omega_c = 1$, б) $\omega_c = 0.001$.

На рис.2(a) приведены траектории, вычисленные при разных значениях шага по времени Δt на основе уравнений СВ (10)–(13), а также на рис.2(b) – по МСВ (30)–(35). В первом случае из рис.2(a) видно, что увеличение шага по времени приводит к неустойчивости решений уравнений движения частицы. Наоборот, из рис.2(b) видно, что алгоритм МСВ обладает устойчивостью к изменению шага по времени, при $\Delta t=0.1$ траектория становится более ломаной в связи с меньшим количеством расчетных точек на ларморовской окружности, однако отклонение этого решения от траектории, вычисленной при $\Delta t=0.001$, остается в пределах допустимой погрешности. Таким образом, решения, вычисленные по алгоритму (10)–(13), сильно зависят от Δt , в то время как решения по алгоритму МСВ более устойчивы относительно изменения временного шага.

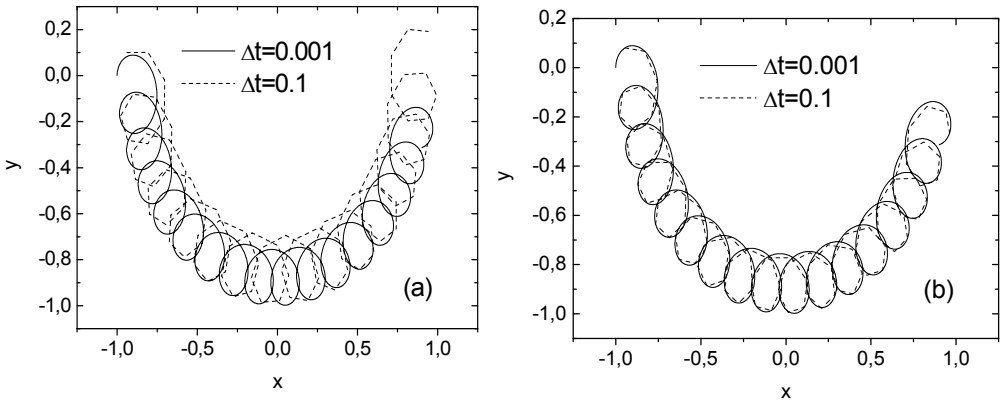


Рис.2. Траектории движения заряженной частицы с ускорением (36), $\omega_c = 10$, $\nu = 0.001$, (а) – алгоритм (10)-(13), (б) – алгоритм (30)-(35).

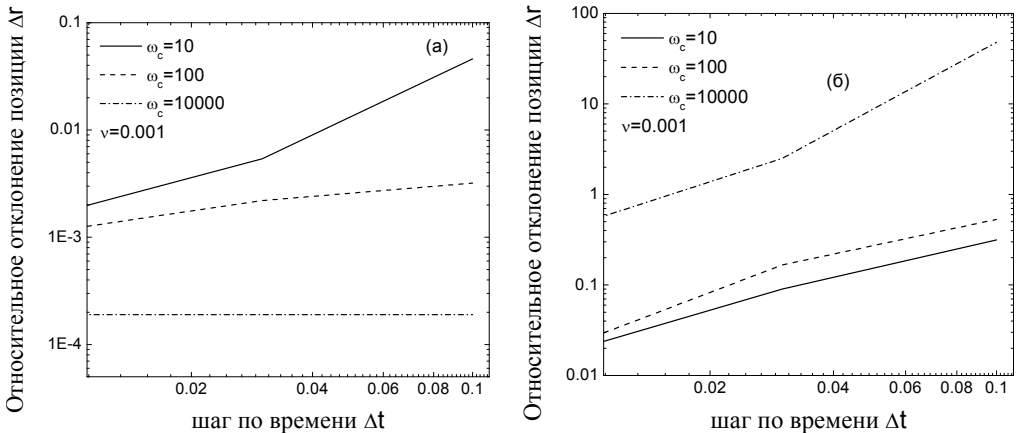


Рис.3. Относительное отклонение позиции частицы, заданное выражением (37). (а) вычисления по схеме разложения в ряд Тейлора, (б) инверсный алгоритм. Коэффициент трения $\nu = 0.001$.

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

$$\Delta r = \max_{0 \leq t \leq 20} \left| \frac{|\mathbf{r}_{\omega_c, \Delta t}(t)| - |\mathbf{r}_{\omega_c, ex}(t)|}{|\mathbf{r}_{\omega_c, ex}(t)|} \right|. \quad (37)$$

Зависимости максимального относительного отклонения модуля радиус-вектора от временного шага для двух схем приведены на рис.3 для случая $\nu = 0.001$ и на рис.4 для случая $\nu = 0.1$.

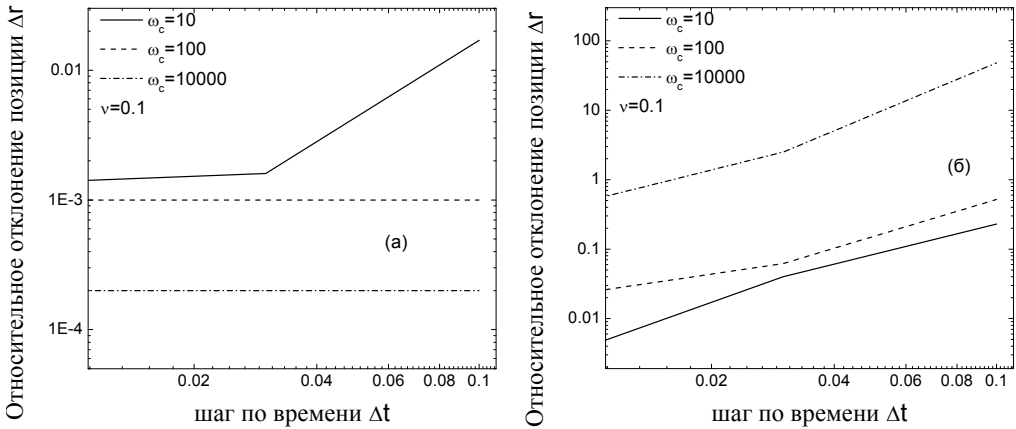


Рис.4. Относительное отклонение позиции частицы, заданное выражением (37). (а): вычисления по схеме разложения в ряд Тейлора, (б): инверсный алгоритм. Коэффициент трения $\nu = 0.10$.

6. Заключение

В работе получен модифицированный алгоритм Верле для решения уравнений движения частиц, учитывающий влияние сил трения и внешнего магнитного поля. Для этого координата $\mathbf{r}(t + \Delta t)$ и скорость частиц $\mathbf{v}(t + \Delta t)$ разлагаются в ряд Тейлора с учетом силы Лоренца и силы трения. Анализ зависимости максимального относительного отклонения координаты от временного шага показал, что в сильном магнитном поле величина временного шага не оказывает существенного влияния на относительное отклонение координаты. Таким образом, в схеме разложения Тейлора выбор шага по времени не зависит от магнитного поля, как это было для классической схемы Верле со скоростью.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *V.E. Fortov, A.V. Ivlev, S.A. Khrapak, A.G. Khrapak, and G.E. Morfill.* Complex (dusty) plasmas: Current status, open issues, perspectives // *Phys. Rep.*, 2005, v.421, p.1.
2. *V.E. Fortov, G.E. Morfill.* Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space. – CRC Press, 2009, 440 p.
3. *E. Bonnetier, L. Jakabčín, S. Labbé and A. Replumaz.* Numerical simulation of a class of models that combine several mechanisms of dissipation: Fracture, plasticity, viscous dissipation // *J. Comp. Phys.*, 2014, v.271, p.397.
4. *T. Ott, M. Bonitz, P. Hartmann, and Z. Donkò.* Effect of correlations on heat transport in a magnetized strongly coupled plasma // *Phys. Rev. E.*, 2011, v.83, p.046403.
5. *T. Ott, H. Loewen and M. Bonitz.* Magnetic field blocks two-dimensional crystallization in strongly coupled plasmas // *Phys. Rev. Lett.*, 2013, v.111, p.065001.
6. *G. Uchida, U. Konopka, and G. Morfill.* Wave dispersion relation of two-dimensional plasma crystals in a magnetic field // *Phys. Rev. Lett.*, 2004, v.93, p.155002.
7. *T. Ott, H. Loewen, M. Bonitz.* Dynamics of two-dimensional one-component and binary Yukawa systems in a magnetic field // *Phys. Rev. E*, 2014, v.89, p.013105.
8. *F.B. Baimbetov, T.S. Ramazanov, K.N. Dzhumagulova, E.R. Kadyrsizov, O.F. Petrov and A.V. Gavrikov.* Modelling of dusty plasma properties by computer simulation methods // *J. Phys. Math. Gen.*, 2006, v.39, p.4521-4525.
9. *K.N. Dzhumagulova, T.S. Ramazanov, Y.A. Ussenov, M.K. Dosbolayev, and R.U. Masheyeva.* Study of the dustfree region near an electric probe and the dust particles oscillations in dusty plasma // *Contrib. Plasma Phys.*, 2013, v.53, p. 419.
10. *K.N. Dzhumagulova, T.S. Ramazanov, and R.U. Masheyeva.* Velocity autocorrelation functions and diffusion coefficient of dusty component in complex plasmas // *Contrib. Plasma Phys.*, v.52, 2012, p.182.
11. *K.N. Dzhumagulova, T.S. Ramazanov, and R.U. Masheyeva.* Diffusion coefficient of three-dimensional Yukawa liquids // *Phys. Plasmas.*, 2013, v. 20, p.113702.
12. *Q. Spreiter and M. Walter.* Classical molecular dynamics simulation with the Velocity Verlet algorithm at strong external magnetic fields // *J. Comput. Phys.*, 1999, v.152, p.102.
13. *K.N. Dzhumagulova, R.U. Masheyeva, T.S. Ramazanov, and Z. Donkò,* Effect of magnetic field on the velocity autocorrelation and the caging of particles in two-dimensional Yukawa liquids // *Phys. Rev. E.*, 2014, v.89, p.033104.
14. *T. Ott, M. Bonitz and Z. Donkò.* Effect of correlations on heat transport in a magnetized strongly coupled plasma // *Phys. Rev. E.*, 2015, v.92, p.063105.
15. *M. Bonitz, Z. Donkò, T. Ott, H. Kahlert, and P. Hartmann,* Nonlinear magnetoplasmons in strongly coupled Yukawa plasmas // *Phys. Rev. Lett.* 2010, v.105, p.055002.

Поступила в редакцию 20.05.2019

После доработки 20.05.2019

Принята к публикации 01.07.2019