

УДК 531.19+533.9

РАСХОДИМОСТЬ ФАЗОВЫХ ТРАЕКТОРИЙ КУЛОНОВСКОЙ СИСТЕМЫ

С. А. Майоров

Целью работы является исследование показателя Ляпунова для системы классических кулоновских частиц в зависимости от числа частиц в системе, степени неидеальности плазмы и точности интегрирования уравнений Ньютона. Рассмотрен случай идеальной и слабонеидеальной плазм.

Введение

В цикле работ по исследованию фундаментальных свойств классической кулоновской плазмы методом динамики многих частиц [1 – 2] исследовались различные предположения, закладываемые в основу теории для определения термодинамических характеристик, распределений микрополей, экранирования и пр. Обнаруженное замедление рекомбинации в системе из ограниченного числа частиц привело к поиску причин такого замедления в общих свойствах гамильтоновых систем (неустойчивость траекторий, необратимость численного решения, перемешивание фазового объема). Настоящая работа продолжает этот цикл и посвящена исследованию скорости расходимости первоначально близких фазовых траекторий классической кулоновской системы.

Вопрос о возникновении хаоса в динамических системах привлекает внимание также в связи с проблемой перехода от обратимых уравнений динамики к необратимым кинетическим уравнениям. Компьютерное моделирование из первопринципов позволяет получить результаты для систем, состоящих из многих частиц и взаимодействующих по закону Кулона (плазма, звездные скопления). Моделирование из первопринципов дает возможность изучения возникновения хаоса в нелинейных динамических системах. Вопросы хаотичности, фазового перемешивания, устойчивости (регулярности) движения

для системы кулоновских частиц мало изучены. Прогресс в изучении динамического хаоса на основе теоремы Колмогорова–Арнольда–Мозера (теория КАМ) для кулоновской системы частиц имеет ограниченную применимость из-за неинтегрируемости системы. В настоящей работе на основе численного моделирования и аналитических оценок исследуется скорость расходимости первоначально близких фазовых траекторий в зависимости от числа частиц в системе, показателя неидеальности плазмы, точности расчета. Критерием подобия характеристик равновесной плазмы является показатель неидеальности [3], поэтому можно в зависимости от показателя неидеальности получить значение показателя Ляпунова.

Неустойчивость траекторий частиц в плазме по Ляпунову (расходимость первоначально близких траекторий за бесконечный промежуток времени) в работе [4] использовалась для объяснения аномальной задержки рекомбинации в системе классических кулоновских частиц. Авторы этой работы основывались на вычисленных ими максимальных собственных числах якобиевой матрицы для системы с различным числом частиц. Ими сделан вывод о стремлении к нулю показателя Ляпунова при увеличении числа частиц в системе, т.е. о принципиальном различии свойств систем с конечным и бесконечным числом частиц. Нерегулярность, хаос, локальная неустойчивость в кулоновской системе многих частиц, по мнению авторов работы [4], является следствием конечности числа частиц. Этот вывод вызывает сомнение. Ведь и в реальных системах траектории по Ляпунову неустойчивы: за бесконечно большой промежуток времени траектории близких частиц с незначительными различиями в скоростях расходятся, но это не препятствует рекомбинации. Кроме того, теория устойчивости Ляпунова применяется к системе в состоянии равновесия, а для двухкомпонентной плазмы, в которой частицы могут "падать" друг на друга, она не применима. Для исследования устойчивости макроскопических характеристик (внутренней энергии, давления) надо анализировать уравнения относительно этих переменных. Из неустойчивости по Ляпунову траекторий (реальных или вычисленных) не следует делать вывод о неустойчивости (или устойчивости) макроскопических характеристик. Ошибочность метода [4] показана в работе [5] на примере системы невзаимодействующих осцилляторов. Приведенный там пример показывает, что к результату анализа на устойчивость линеаризованной задачи следует относиться с осторожностью.

Как показали длительные расчеты [6, 7] с повышенной точностью и увеличенным числом частиц, рекомбинация в системе классических кулоновских частиц все-таки есть, хотя и сильно замедленная по сравнению с общепринятыми значениями для скорости

тройной рекомбинации. В работе [7] выявлена причина замедления рекомбинации – ослабление взаимодействия связанных и свободных электронов и, как следствие, замедление дрейфа вниз по энергетической оси для связанных электронов. Но в работах [8, 9] эта замедленная рекомбинация объясняется свойством численного решения – неустойчивостью вычисляемых траекторий, потерей динамической памяти и обратимости численного решения. Таким образом, наблюдаемая в вычислительном эксперименте рекомбинация, по утверждению авторов [8, 9], происходит из-за ошибок округления и погрешностей разностных схем, которые в используемой схеме Рунге–Кутты нарушают обратимость во времени. Но это утверждение не согласуется с результатами расчетов с различной точностью [7]. Известный эффект "схемной вязкости" приводит к увеличению рекомбинационного потока, что впервые было продемонстрировано в работе [10]. При увеличении точности расчета "схемный" рекомбинационный поток исчезает, а в вычислительном эксперименте [7] с увеличением точности рекомбинационный поток сохраняется. Следовательно, не ошибки аппроксимации являлись причиной рекомбинации. Как известно, стохастизация движения является следствием свойств динамики многих частиц, а не ошибок численного решения [11]. Поэтому численное решение [7] не меняет стохастического характера динамики многих частиц (хотя при определенных условиях погрешности вычислительных схем могут быть причиной стохастического поведения регулярной системы [12]).

Важным аспектом моделирования из первопринципов является соответствие результатов моделирования свойствам реальной системы. В применении к задачам моделирования свойств плазмы представляет интерес вопрос о переносе свойств систем, состоящих из нескольких тысяч частиц, на реальные плазменные системы, в которых число частиц имеет порядок числа Авогадро. В настоящей работе приведено исследование скорости расходимости фазовых траекторий в зависимости от числа частиц в системе. Показано, что расходимость фазовых траекторий носит экспоненциальный характер и показатель Ляпунова слабо зависит от числа частиц и точности расчета (конечно, при условии аппроксимации дифференциальных уравнений разностными).

О вычислении скорости расходимости первоначально близких фазовых траекторий

Показатели Ляпунова. Показатели Ляпунова являются важнейшей количественной характеристикой гамильтоновых и диссипативных систем. Характеристические

показатели Ляпунова определяют меру стохастичности гамильтоновых систем. Максимальный из них σ_1 широко используется в качестве критерия стохастичности. Пусть динамика системы, состоящей из $2n$ частиц, определяется уравнениями

$$dx_k/dt = V_k(x), \quad k = 1, 2, \dots, 2n.$$

Различие между векторами двух фазовых траекторий $\Delta x = x_2(t) - x_1(t)$, близких в начальный момент, может быть определено из линеаризованного уравнения

$$d\Delta x/dt = G\Delta x, \quad G = dV/dx,$$

где G – матрица Якоби. Средняя скорость экспоненциальной расходимости первоначально близких фазовых траекторий определяется следующим образом [11]:

$$\sigma_1 = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{d(t)}{d(0)} \quad \text{при } d(0) \rightarrow 0, \quad (1)$$

где $d(t) = |x_1(t) - x_2(t)| = d(0) \exp(\sigma_1 t)$ – расстояние между близкими в начальный момент времени $t = 0$ фазовыми траекториями. Решение линейного уравнения для Δx может быть записано в виде:

$$\Delta x(t) = T(t)\Delta x(0), \quad T(t) = \exp\left[\int_0^t G(x(\tau)d\tau\right].$$

Разлагая для малых времен τ матричную экспоненту $T(\tau)$ в ряд, получаем для собственных значений матрицы перехода $1 + \tau\lambda_i$, где λ_i – собственные значения якобиевой матрицы. Для линейной системы максимальное собственное число λ_1 якобиевой матрицы определяет скорость экспоненциального разбегания траекторий $\sigma_1 = \lambda_1$. При этом вектор расхождения траекторий становится коллинеарным соответствующему собственному вектору.

В нелинейной системе ситуация усложняется. Максимальное собственное значение не определяет асимптотическую скорость роста, так как собственные векторы меняются во времени. Условием преобладания роста за счет максимального собственного значения является следующее: $\tau_0(\lambda_1 - \lambda_2) \gg 1$, где τ_0 – характерное время изменения матрицы Якоби. В системе многих частиц спектр собственных значений достаточно плотен и это условие обычно не выполняется. Следовательно, скорость экспоненциального расхождения траекторий определяется неким усреднением. Величина максимального мультиплицирования расхождения за время линейности $\tau_0\lambda_1$ также является

характеристикой системы. Но в нелинейной системе нельзя отождествлять собственные значения якобиевой матрицы со скоростью расхождения траекторий.

При вычислении расстояний между точками фазовых траекторий в евклидовой норме d_2 проводились нормировки на характерное межоионное расстояние $r_{ii} = N_i^{-1}$, наиболее вероятную тепловую скорость $v_T = (2T_e/m_e)^{1/2}$ и число частиц в системе. Фазовая точка характеризуется положением как в координатном, так и в импульсном пространстве. В работе отдельно вычисляются расстояния между точками фазовых траекторий в координатном и в импульсном пространствах:

$$d_2(r_1, r_2) = \frac{1}{r_{ii}} \sqrt{\frac{1}{2n} \sum_{k=1}^{2n} (r_{1,k} - r_{2,k})^2}, \quad d_2(v_1, v_2) = \frac{1}{v_T} \sqrt{\frac{1}{2n} \sum_{i=k}^{2n} (v_{1,k} - v_{2,k})^2}.$$

Вычисление расстояния между точками фазовых траекторий в координатном и импульсном пространствах в чебышевской норме d_1 проводилось следующим образом:

$$d_1(r_1, r_2) = \max_{\kappa} \frac{1}{r_{ii}} \sqrt{(r_{1,k} - r_{2,k})^2}, \quad d_1(v_1, v_2) = \max_{\kappa} \frac{1}{v_T} \sqrt{(v_{1,k} - v_{2,k})^2}.$$

Подобие в кулоновской системе. При вычислении расстояний между фазовыми траекториями возникает необходимость во введении безразмерных переменных. Обычным способом введения безразмерного времени для плазмы является использование ленгмюровского периода $T_L = 2\pi/\omega_p$, где $\omega_p = (4\pi e^2 N_e/m_e)^{1/2}$ – плазменная частота. Однако для системы кулоновских частиц есть еще ряд характерных времен: $\tau_{ei} = r_{ii}/v_T = N_i^{-1/3}/(2T_e/m_e)^{1/2}$ – время пролета электроном характерного межоионного расстояния r_{ii} ; a/v_T – время пролета электроном характерного размера системы (a – величина ребра куба); время эволюции системы, столкновительные времена. Использование различных способов обезразмеривания при вычислении расстояний между точками фазовой траектории приводит к разным вкладам от координатной и импульсной составляющих и может исказить получаемую картину, если характеристики системы в импульсном и координатном пространствах различны.

Из теории размерности для кулоновской системы следует, что критерием подобия является показатель неидеальности $\Gamma = e^2/(r_i T_e)$, где $r_i = (3/4\pi N_i)^{1/3}$ – радиус сферы с объемом, приходящимся на один ион. Следовательно, для равновесной системы с максвелловским распределением частиц по скоростям показатель Ляпунова системы из N_p частиц может быть представлен в виде: $\sigma_1 = t_c \sigma_1^0(N_p, \Gamma)$, где $\sigma_1^0(N_p, \Gamma)$ – безразмерный показатель Ляпунова, t_c – характерное время.

О методе динамики многих частиц. Используемая здесь методика исследования свойств классической кулоновской плазмы на основе численного интегрирования уравнений динамики многих частиц подробно описана в работах [11, 13]. Суть ее такова. Рассматривается временная эволюция системы из $n(1+z)$ положительно и отрицательно заряженных частиц (ионы и электроны), заключенных в куб с упруго отражающими стенками. Траектории n положительно и nz отрицательно заряженных частиц определяются путем численного решения уравнений Ньютона:

$$d^2 r_k / dt^2 = F_k / m_k, \quad F_k \sum_{l \neq k}^{2n} f_{kl}, \quad k = 1, 2, \dots, n(z+1), \quad (2)$$

здесь $\mathbf{r}_k(t)$ – радиус-вектор k -той частицы, каждая из которых характеризуется массой m_k и зарядом q_k . Сила кулоновского взаимодействия $\mathbf{f}_{kl} = q_k q_l (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l) / |\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l|^3$ между частицами на расстояниях между частицами менее r_0 принимается равной силе взаимодействия однородно заряженных взаимно проникаемых сфер диаметром r_0 [13]:

$$\mathbf{f}_{kl} = q_k q_l [(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l) / |\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l|^3] G(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l| / r_0),$$

$$G(x) = 8 - 9x + 2x^3, \quad \text{при } x < 1 \quad (3)$$

$$G(x) = 1, \quad \text{при } x > 1.$$

Модификация кулоновской силы на близких расстояниях устраняет особенность потенциала в нуле и уменьшает жесткость уравнений, обусловленную близкими соударениями. Значение r_0 выбиралось значительно меньше среднего межчастичного расстояния и проводились дополнительные расчеты с целью проверки того, чтобы оно не оказывало влияние на исследуемые характеристики. Обычно это проверялось путем сравнения результатов расчетов с различными r_0 .

Начальные условия. В начальный момент времени все частицы равномерно разбрасывались внутри куба, длина ребра которого выбиралась такой, чтобы обеспечить нужную плотность плазмы. При вычислении показателя Ляпунова начальное распределение скоростей выбиралось максвелловским, хотя в общем случае оно может задаваться произвольной функцией распределения. Минимальная вариация начальных координат частиц производилась путем изменения положения центра координат относительно куба с частицами.

О численном интегрировании уравнений динамики частиц. Для численного интегрирования системы уравнений Ньютона при изучении фундаментальных свойств

плазмы наиболее подходящим является метод типа частица-частица [13], в котором учитываются взаимодействие каждой частицы с каждой. При реализации этого метода был разработан алгоритм, использующий специфику классической кулоновской плазмы для значительного сокращения числа арифметических операций. В его основе лежало определение для каждой частицы ближайших частиц и учет взаимодействия между ними по вычислительной схеме более высокого порядка точности. В дальнейшем метод был усовершенствован: у каждой частицы определялось по две ближайших частицы каждого знака [11]. Сделано это было для более точного расчета процесса рекомбинации. Затем был введен этап предикции для вычисления средних сил, их аппроксимация линейной функцией времени, контроль точности на каждом шагу и автоматический выбор шага по времени. Эти усовершенствования позволили в несколько раз повысить точность расчета, особенно для неидеальной плазмы, и увеличить число частиц в системе до 10000.

О программном коде. Код для IBM PC PLASMIC, реализующий описанный алгоритм на языке FORTRAN-90, путем выбора характеристик частиц, начальных и граничных условий, может использоваться для исследования различных физических объектов. В частности, исследовалась плазма водорода, плазма многозарядных ионов, ионная плазма, твердотельная плазма и система тяготеющих (гравитирующих) масс. Кроме того, имеется возможность задания различных воздействий на частицы, имитирующих как реальные процессы (упругие столкновения с тяжелыми частицами, воздействие внешних полей), так и модельные – термостат, рандомизацию. Код имеет обширную диагностику для изучения свойств плазмы на основе анализа траекторий отдельных частиц. Она включает в себя расчет термодинамических характеристик, функций распределения по кинетической, потенциальной и полной энергиям электронов, ионов и пар частиц, по проекциям скоростей, распределений микрополей и их корреляционных функций, вычисление кинетических коэффициентов; предусмотрена возможность визуализации траекторий отдельных частиц.

Оценки скорости расходимости траекторий

Модель жестких сфер. Грубая оценка значения показателя Ляпунова для плазмы может быть получена из аналогии с известным значением показателя Ляпунова для жестких сфер с максвелловским распределением [15, 16]:

$$\sigma_1 \approx \frac{V_0}{l} \ln\left(1 + \frac{l}{2R}\right) = \frac{3v_T R^2}{\pi^{1/2} r_i^3} \ln\left(1 + \frac{2r_i^3}{3R^3}\right), \quad (4)$$

где $l = 1/\pi R^2 N$ – длина свободного пробега, $V_0 = 4v_T/\pi^{1/2}$ – средняя относительная скорость частиц, R – радиус твердых сфер, N – их плотность. Выражение (4) определяет рост расстояния между первоначально близкими точками фазовых траекторий в виде:

$$d(t) = d(0)[1 + l/2R]^{V_0 t/l}.$$

Каждое столкновение частиц приводит к увеличению расстояния между фазовыми траекториями в $1 + l/(2R)$ раз. Для оценки показателя Ляпунова в плазме будем учитывать рассеяние электронов на ионах. Подставим в (4) вместо относительной скорости частиц тепловую скорость электронов $v_T = (2T_e/m_e)^{1/2}$, плотности рассеивающихся частиц – плотность ионов N_i . Длина свободного пробега электронов со скоростью v согласно [17] равна $l = m^2 v^4 / (8\pi e^4 N_i \Lambda)$, где Λ – кулоновский логарифм. Радиус кулоновских частиц определим из соотношения между длиной свободного пробега, плотностью и радиусом частиц: $R = 1/(\pi N l)^{1/2}$. В результате получаем:

$$\sigma_1 = 8\pi e^4 N_i \Lambda_2 / (m^2 v_T^3) \sim \omega_p \Gamma^{3/2} \Lambda^2, \quad (5)$$

где $\Lambda_2 = \Lambda \ln(1 + l/2R) \sim 3\Lambda^2$ – фактор, учитывающий одновременно множественность кулоновских столкновений и расхождение траекторий при столкновении твердых сфер.

Непосредственное использование приближения твердых сфер для плазмы может приводить к неверному результату. Поэтому, например, в работе [15] для согласия с результатами моделирования однокомпонентной неидеальной плазмы в (4) в качестве радиуса сфер подставлялось значение $R = r_i$. В этом случае получаем $\sigma_1 \sim \omega_p \Gamma^{1/2} \sim v_T/r_i$. Аналогичный результат для идеальной плазмы получается при решении задачи усреднения квадратов отклонений частиц [18].

Случай идеальной плазмы, средний показатель Ляпунова. Для идеальной плазмы можно провести более точное вычисление. Рассмотрим траекторию электрона при небольшой вариации его первоначального положения. Будем использовать приближение последовательных парных столкновений. При этом учтем взаимодействие пробной частицы только со своим ближайшим соседом, т.е. прицельный параметр ρ налетающего на ион электрона будет меньше среднего межчастичного расстояния: $\rho < \rho_{max} = r_i = (3/4\pi N_i)^{1/3}$. Помимо упрощения вычислений в таком подходе имеется и некоторый физический смысл – обоснованность учета столкновений с прицельными параметрами, меньшими примерно половины характерного межчастичного расстояния $r_{ii} = N_i^{-1/3}$, обсуждается в работе [13], там же приведены результаты моделирования, находящиеся

в согласии с аналитической моделью при таком обрезании учитываемых прицельных параметров.

Оценим среднюю скорость расхождения двух траекторий пробного электрона, взаимодействующего с полевыми частицами – ионами. Пусть начальная вариация координат равна d_0 при одинаковой начальной скорости u . Угол рассеяния электрона на неподвижном однократно заряженном ионе равен $\theta = 2\text{arctg}(\rho_{\perp}/\rho)$, где $\rho_{\perp} = e^2/mv^2$ – значение прицельного параметра, при котором электрон отклоняется на прямой угол. При вариации прицельного параметра на величину d_0 через промежуток времени t после столкновения траектории разойдутся на величину порядка $d(\rho, u, t) = d_0(1 + tud\theta/d\rho)$. Полагая, что каждое столкновение происходит после пролета характерного межоионного расстояния r_{ii} , получаем для расстояния между траекториями после столкновения $d = d_0(1 + r_{ii}d\theta/d\rho)$. Из сравнения с (1) получаем $\sigma_1 = vd\theta/d\rho$. Усреднив по прицельным параметрам для электрона с энергией T_e получаем:

$$\sigma_1 = \frac{4\pi\rho_{\perp}vT}{\rho_{max}^2} \ln \frac{\rho_{max}}{\rho_{\perp}} \sim \omega_p \Gamma^{1/2} \Lambda. \quad (6)$$

Проведенное усреднение соответствует, видимо, усреднению собственных чисел, и (6) является оценкой КС – энтропии. Энтропия Колмогорова является важнейшим показателем хаотичности системы и для систем большой размерности равна средней сумме положительных показателей Ляпунова [19, 20].

Случай идеальной плазмы, среднеквадратичное отклонение. Оценка (6) может быть уточнена для времен $t \gg \tau_{ei}$. При каждом столкновении отклонение происходит в случайном направлении, поэтому мы имеем задачу о случайном блуждании в пространстве скоростей. Для независимых парных столкновений средний квадрат суммарного отклонения есть сумма квадратов отклонений в каждом столкновении. Вычислим средний квадрат производной угла рассеяния электрона на неподвижном однократно заряженном ионе при изменении прицельного параметра от ρ_{min} до ρ_{max} :

$$\langle (d\theta/d\rho)^2 \rangle = 4(\rho_{\perp}/\rho_{max})^2 [1/(\rho_{\perp}^2 + \rho_{min}^2) - 1/(\rho_{\perp}^2 + \rho_{max}^2)]. \quad (7)$$

При $\rho_{min} = 0$ и $\rho_{max} \gg \rho_{\perp}$ получаем $\langle (d\theta/d\rho)^2 \rangle = (2/\rho_{max})^2$. Отсюда следует, что среднеквадратичная вариация угла рассеяния целиком определяется только близкими столкновениями с $\rho \sim \rho_{\perp}$ и $\theta \sim 1$. Через промежуток времени t произойдет $t u \rho_{max}^2 N_i$ столкновений и расстояние между траекториями при начальной вариации d_0 составит $d(t) = d_0(1 + 2\pi vt/r_{ii})$. Из сравнения с (1) получаем $\sigma_1 = 2\pi v/r_{ii}$. Полученное значение σ_1 нужно еще усреднить по функции распределения электронов по скоростям. Но

анализ результатов расчетов показал, что наибольший вклад в расходимость траекторий вносят частицы с энергией порядка температуры. Поэтому подставив вместо скорости наиболее вероятную тепловую скорость электронов v_T , получаем следующую зависимость показателя Ляпунова только от времени пролета электроном межионного расстояния τ_{ei} [18]:

$$\sigma_1 = 2\pi/\tau_{ei}. \quad (8)$$

Эта оценка не учитывает рассеяния на флуктуациях, которые также важны и определяются плазменной частотой.

Случай идеальной плазмы, максимальный показатель Ляпунова линеаризованной системы уравнений. Для идеальной плазмы можно оценить значение максимального показателя Ляпунова в зависимости от числа частиц в системе и параметра неидеальности в линейном приближении. Максимальная скорость расхождения траекторий частиц будет обусловлена столкновением самой быстрой в ансамбле частицы при определенном параметре $\rho \ll \rho_\perp$. Порядок величины энергии самой быстрой частицы ϵ_n в системе, состоящей из n частиц с максвелловским распределением, определяется условием $\int_{\epsilon_n}^{\infty} f(\epsilon) d\epsilon = 1/n$, откуда получаем $\epsilon_n \sim T \ln n$. Максимальное значение $d\theta/d\rho$ при $\rho \ll \rho_\perp$ равно $2/\rho_\perp$. Отсюда для показателя Ляпунова линеаризованной системы получаем:

$$\sigma_1 \sim v d\theta/d\rho \sim \ln n / (\tau_{ei} \Gamma). \quad (9)$$

Условием применимости (9) является наличие при случайной выборке быстрой частицы в ρ_\perp окрестности иона. В противном случае значение ρ_\perp в (9) следует заменить на минимальное расстояние $\rho_{min} = (3/4\pi n N_i)^{1/3}$. В этом случае получаем более сильную зависимость от числа частиц:

$$\sigma_1 \sim n^{1/3} \ln n / \tau_{ei}. \quad (10)$$

В работе [4] реализован, видимо, именно этот случай. При достаточно большом числе частиц (порядка 1000) расчеты [4] показали замедление зависимости σ_1 от числа частиц, т.е. переход от (10) к (9). Анализ асимптотического поведения $\sigma_1(n)$ при $n \rightarrow \infty$ привел авторов работы [4] к выводу, что показатель Ляпунова стремится к нулю при

увеличении числа частиц. Еще раз отметим, что даже правильно вычисленное максимальное собственное число оператора перехода линеаризованной системы не совпадает обычно с показателем Ляпунова.

Результаты моделирования динамики многих частиц

Был проведен ряд расчетов динамики многих частиц плазмы водорода. Изменялось число частиц в системе $N_p = 2n$, время расчета t_0/τ_{ei} , проводились расчеты с различной точностью, рассматривалась плазма с различными значениями параметра неидеальности Γ .

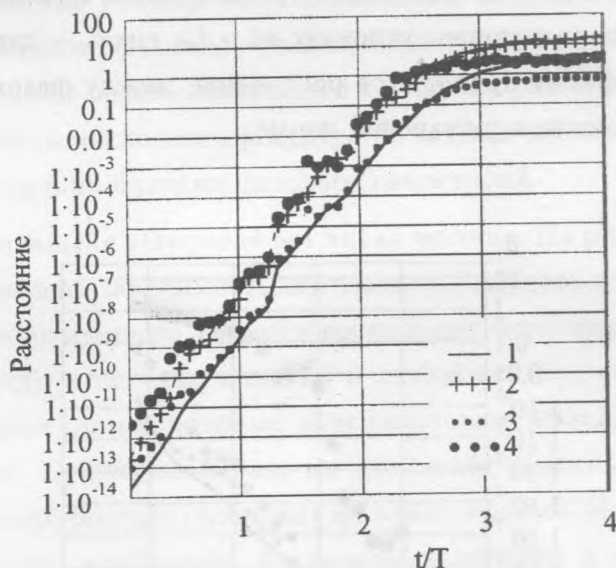


Рис. 1. Зависимости от времени t/T расстояний между близкими в начальный момент фазовыми траекториями в координатном (кривые 1, 3) и скоростном подпространствах, вычисленные по среднеквадратичному (кривые 1, 2) и по максимальному отклонению.

Экспоненциальность расхождения первоначально близких траекторий. На рис. 1 приведены зависимости расстояний между близкими в начальный момент траекториями в координатном и скоростном подпространствах, вычисленные в евклидовой норме по среднеквадратичному отклонению и в чебышевской норме по максимальному отклонению от времени. Рассматривалась система из $2n = 4000$ сфер с диаметром $r_0/r_{ii} = 0.05$ при условии слабой неидеальности $\Gamma = 0.2 (\rho_{\perp} \gg r_0)$. Вариация начального

положения фазовых точек соответствует погрешности ошибок округления (15 десятичных разрядов). Результаты расчета показывают, что характер временной зависимости расхождения первоначально близких фазовых траекторий близок к экспоненциальному для малых расстояний между фазовыми точками. Показатель экспоненты (показатель Ляпунова) практически не зависит ни от нормы определения расстояния между траекториями, ни от выбора подпространства (координатного или импульсного). При достижении расстояния между фазовыми траекториями в координатном пространстве, соответствующего расхождению частиц на величину порядка размера системы, оно выходит на постоянное значение. Если длина свободного пробега меньше размера системы, то ее значение также может являться ограничением экспоненциального роста. В скоростном пространстве расстояние между фазовыми траекториями выходит на насыщение при времени расчета, удовлетворяющем условию: $vt > l_{st}$, где l_{st} – длина свободного пробега. На следующих графиках приводится расстояние между фазовыми траекториями в координатном пространстве в римановой норме.

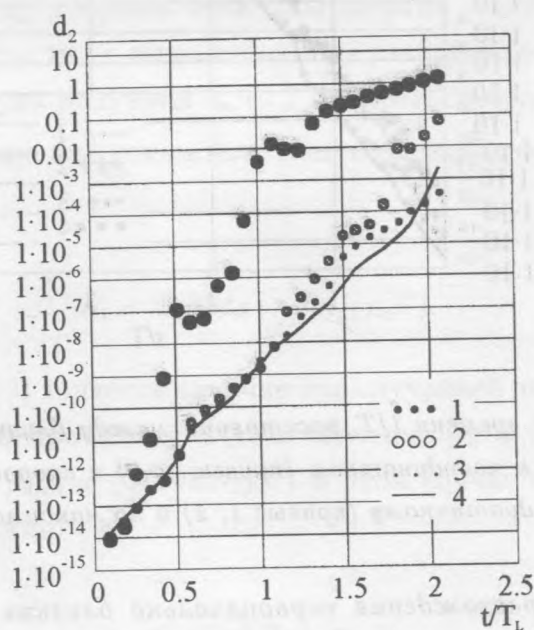


Рис. 2. Зависимости $d_2(t)$ для расчетов с различной точностью.

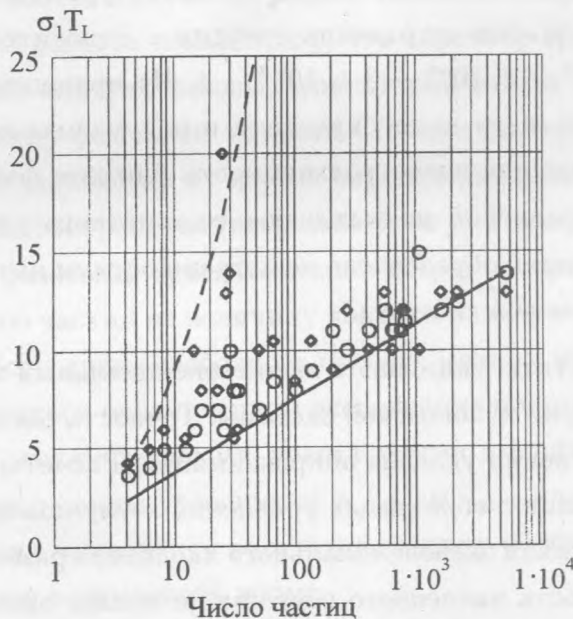
Зависимость показателя Ляпунова от точности интегрирования уравнений динамики. На рис. 2 для той же системы частиц приведены зависимости $d_2(t)$. Расчеты

выполнены с различными шагами интегрирования уравнений динамики, обеспечивающими выполнение закона сохранения энергии с относительной точностью порядка 10^{-2} (кривая 1), 10^{-4} – 2, 10^{-6} – 3 и 10^{-8} – 4. Из приведенных данных следует, что обычно используемые шаги интегрирования и получаемая при этом точность хорошо воспроизводят экспоненциальную расходимость близких фазовых траекторий. Ошибки аппроксимации уравнений не вызывают ее заметного увеличения. Следовательно, расходимость траекторий обусловлена не погрешностями интегрирования уравнений, а свойствами гамильтоновой системы.

Численные результаты указывают на экспоненциальный характер разбегания близких фазовых траекторий кулоновской системы. Точность расчета не меняет этой характеристики при выполнении условия аппроксимации. Расчеты с увеличенной точностью улучшали аппроксимацию обратимых уравнений и улучшали обратимость численного решения, но они не меняли экспоненциального характера разбегания траекторий. Следовательно, необратимость численного решения не меняет экспоненциального характера расхождения первоначально близких фазовых траекторий.

Зависимость показателя Ляпунова от числа частиц. На рис. 3 для системы с теми же параметрами приведена зависимость показателя Ляпунова от числа частиц. Она не тривиальна из-за одновременного влияния нескольких факторов. В основном, ее смысл заключается в том, что в системе должны в любой момент времени присутствовать частицы с теми параметрами, которые обуславливают максимальную скорость расхождения траекторий. В противном случае возникает зависимость от числа частиц, которая определяется грубостью разбиения фазового объема. Имеется также некоторая зависимость от среднего микрополя, т.е. краевых эффектов и плазменных колебаний. Сплошная и штрихованная линии – оценки скорости расходимости по формулам (9) и (10) соответственно. Увеличение разброса значений σ_1 вблизи $N_p = 30$ и 1000 обусловлено появлением в системе столкновений с прицельными параметрами $\rho < \rho_{\perp}$ и $\rho < r_0$.

Влияние размера кулоновских сфер. Кулоновский потенциал на близких расстояниях между частицами при моделировании заменялся на потенциал взаимодействия взаимно проницаемых заряженных сфер (3). Результаты расчетов демонстрируют сильную зависимость σ_1 от радиуса сфер. Есть две видимых причины. Первая состоит в увеличении погрешностей при расчете близких столкновений, т.е. появлении вычислительной стохастизации. Вторая заключается в реальном влиянии на σ_1 размера сфер. Скорость расхождения первоначально близких фазовых траекторий в основном определяют близ-

Рис. 3. Зависимость $\sigma_1 T_L$ от числа частиц.

кие столкновения, при которых электрон отклоняется на угол порядка единицы. Модификация потенциала при $\rho < r_0$ приводит к увеличению производной угла рассеяния по прицельному параметру: $d\theta/d\rho \sim \pi/r_0$, в то время как для кулоновского взаимодействия $d\theta/d\rho = 2/\rho_{\perp}$ при $\rho \ll \rho_{\perp}$. Влияние этого увеличения, как следует из (7), имеет тот же порядок, что и кулоновское взаимодействие с $\rho > \rho_{\perp}$. Следовательно, используемая на близких расстояниях модификация потенциала (3) приводит к удвоению значения σ_1 . Этот эффект является единственным обнаруженным при моделировании случаем значительного влияния r_0 на кинетическую характеристику при выполнении условия $r_0 \ll \rho_{\perp}$.

Зависимость от показателя неидеальности. Проведенные вычисления $\sigma_1(\Gamma)$ показали очень слабую зависимость от показателя неидеальности в области слабонеидеальной плазмы. Однако полученные данные не могут являться окончательным ответом на вопрос о характере зависимости $\sigma_1(\Gamma)$. В идеальной плазме зависимость от степени неидеальности согласно (8) исчезает, если время измеряется в характерных единицах пролета межчастичного расстояния (а не ленгмюровского периода). Аналогичный результат получен в [16], где методом частиц вычислялся показатель Ляпунова в сильно неидеальной однокомпонентной плазме. Поэтому требуется изменение методики расчета для получения надежных данных (отказ от модификации кулоновского потенциала

на близких расстояниях, введение процедуры перенормировки фазовых расстояний).

Об особенностях вычисления показателя Ляпунова в двухкомпонентной плазме. При расчетах σ_1 широко используется процедура перенормировки, смысл которой заключается в периодическом уменьшении расстояния между фазовыми точками. Тем самым улучшается возможность набора необходимой статистики при выполнении условия инфинитизимальности расстояния между фазовыми точками с учетом конечности мантиссы чисел в компьютере [11, 12, 15]. Как показали пробные расчеты, для двухкомпонентной плазмы эта процедура не применима из-за больших ошибок при коррекции координат частиц во время близких столкновений. В частности, она приводила иногда к захвату частиц, т.е. вычислительной рекомбинации.

Моделирование расходимости фазовых траекторий, с вычислительной точки зрения, является одной из наиболее трудоемких задач из-за большого вклада близких столкновений, при которых погрешности аппроксимации максимальны, и необходимости рассмотрения систем с большим числом частиц.

Заключение

Перемешивание фазового объема гамильтоновой системы большой размерности – это физическое свойство системы многих классических кулоновских частиц, и численное интегрирование сохраняет это свойство. При выполнении условий аппроксимации результат не зависит от шага разностной схемы и точности решения. Обратимость численного решения не имеет прямого отношения к экспоненциальному характеру разбегания близких траекторий и не зависит от свойства обратимости разностной схемы. Нет зависимости между экспоненциальным законом разбегания и ошибками округления и погрешностью аппроксимации.

Выражаю признательность коллегам в Институте общей физики РАН за интерес к работе и полезные дискуссии.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. УФН, **164**, N 3, 297 (1994).
- [2] Maiorov S. A., Tkachev A. N., and Yakovlenko S. I. Physica Scripta, **51**, 498 (1995).
- [3] Эбелинг В., Крефт В., Кремп В. Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле. М., Мир, 1979.

- [4] Жидков А. Г., Галеев Р. Х. Физика плазмы, **19**, N 9, 1181 (1993).
- [5] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Физика плазмы, **20**, N 12, 1107 (1994).
- [6] Майоров С. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 5 – 6, 3 (1997).
- [7] Майоров С. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 5 – 6, 10 (1997).
- [8] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. ДАН СССР, **290**, N 1, 106 (1997).
- [9] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, N 1, 46 (1998);
Препринт ИОФАН N 7, М., 1997.
- [10] Майоров С. А., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, N 11, 44 (1994).
- [11] Лихтенберг А., Либерман М. Регулярная и стохастическая динамика. М., Мир, 1984.
- [12] Заславский Г. М., Сагдеев Р. З., Усиков Д. А., Черников А. А. Слабый хаос и квазирегулярные структуры. М., Наука, 1991.
- [13] Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М., Мир, 1987.
- [14] Майоров С. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 9 – 10, 99 (1997).
- [15] Крылов Н. С. Работы по обоснованию статистической физики. Изд. АН СССР, М.-Л., 1950.
- [16] Ueshima Y., Nishihara K., et al. Phys. Rev., **E 55**, 3439 (1997).
- [17] Трубников Б. А. В сб. Вопросы теории плазмы, вып. 1, М., Госатомиздат, с. 98, 1963.
- [18] Майоров С. А. Тезисы докладов 25 Звенигородской конференции по физике плазмы и УТС, с. 198 (1998).
- [19] Песин Ю. Б. УМН, **32**, N 4, 55 (1977).
- [20] Шустер Г. Детерминированный хаос: Введение. М., Мир, 1988.