

01;04

Стохастическое воздействие и релаксация классической кулоновской плазмы

© А.Н. Ткачев, С.И. Яковленко

Институт общей физики РАН, Москва

Поступило в Редакцию 5 мая 1997 г.

Показано, что динамическое перемешивание фазовых траекторий в системе классических кулоновских частиц не приводит к рекомбинации, описываемой кинетическими уравнениями. Рассмотрено влияние неточности вычислительного метода и перестановок скоростей частиц на рекомбинационную релаксацию. Неточность численного интегрирования динамических уравнений приводит к потере обратимости решения и аномально медленной (при точных расчетах) рекомбинации. Если перестановки скоростей частиц производятся с частотой, превышающей частоту кулоновских столкновений, рекомбинационная релаксация идет в соответствии с кинетической теорией.

Введение

В работах, подытоженных в [1,2], на основе анализа результатов компьютерного моделирования и путем рассмотрения различных кинетических моделей был сделан вывод о том, что диссипативные процессы (в частности, рекомбинация) при численном моделировании динамики многих классических кулоновских частиц имеют место лишь в той мере, в которой на систему частиц оказывается внешнее (по отношению к динамическим уравнениям) воздействие стохастического характера. В данной работе более подробно рассмотрено влияние двух видов стохастического воздействия: неточности вычислительного метода и перестановки скоростей частиц.

О численном моделировании

Рассматривалась временная эволюция системы из n электронов и n ионов, заключенных в куб с абсолютно жесткими стенками, ограничивающими движение частиц (подробнее см. [1,2]). Длина ребра куба

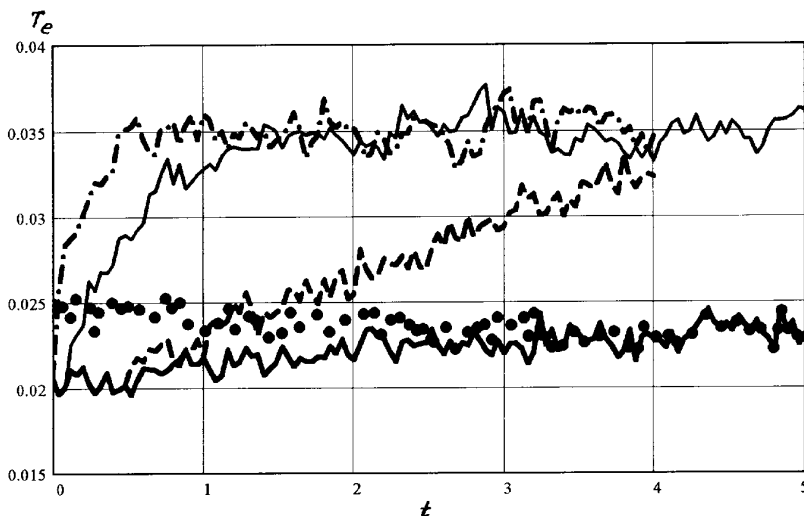
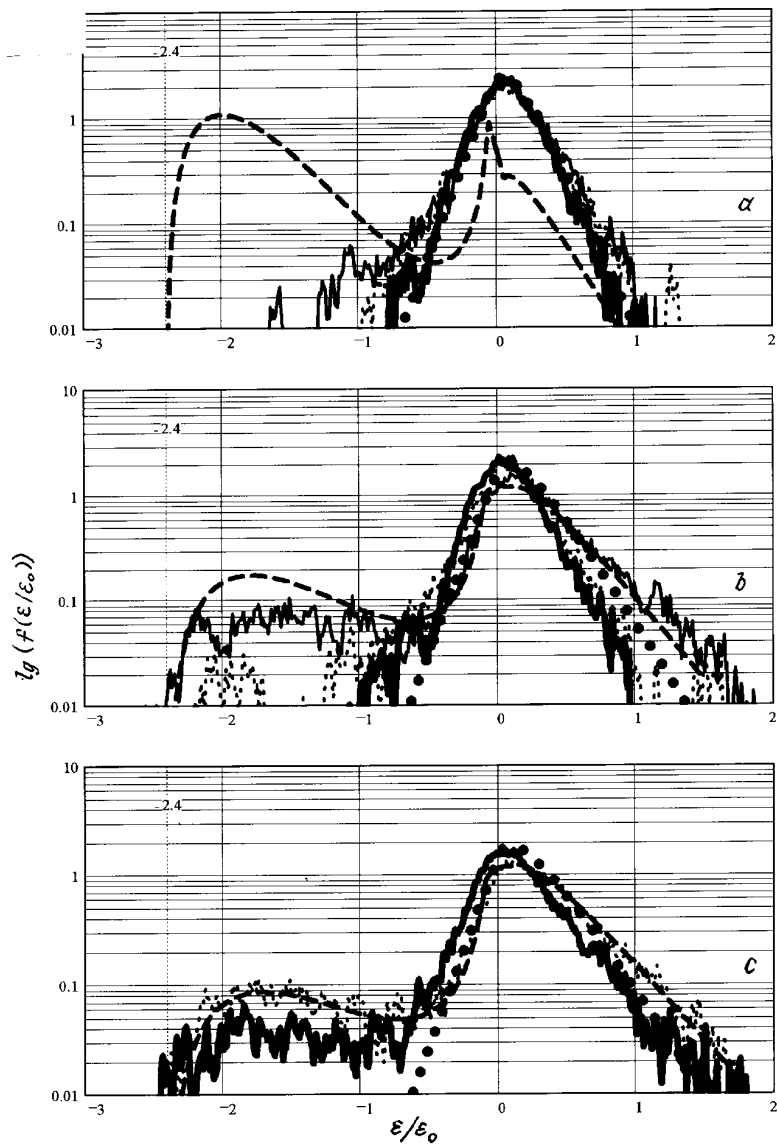


Рис. 1. Изменение температуры электронов. Начальные параметры: $2n = 1024$, $N_e = 10^{14} \text{ см}^{-3}$ ($T_L = 10^{-11} \text{ с}$); $K_e(0) = 0.031n \text{ эВ}$, $K_i(0) = 0.041n \text{ эВ}$, $U(0) = -0.0091n \text{ эВ}$, $n_-(0) = 107$. Время измеряется в единицах ленгмюровского периода, температура — в эВ. Жирная кривая соответствует эволюции в отсутствие внешнего воздействия, движению в положительном направлении времени, пунктир — обратному движению; штриховая кривая соответствует перестановочной стохастизации через интервалы времени, кратные $\tau_p = 0.5$; сплошная кривая — $\tau_p = 0.1$; штрих-пунктир — $\tau_p = 0.01$.

a бралась такой, чтобы обеспечить задаваемую плотность заряженных частиц: $N_e = N_i = n/a^3$. Частицы считались проникаемыми сферами радиуса $r_0 = 0.05N_e^{1/3}$, соответственно энергия ионизации со дна ямы составляла $\varepsilon_1 = (2.4/20)e^2N_e^{1/3}$, где e — заряд электрона. Масса иона полагалась равной массе протона.

Если измерять величины, имеющие размерность длины в единицах межчастичного расстояния $N_e^{1/3}$, а величины, имеющие размерность времени, — в единицах ленгмюровского периода ($T_L = 2\pi/\omega_L$, где $\omega_L^{-1} = \sqrt{\frac{m_e}{4\pi e^2 N_e}}$, m_e — масса электрона), то при достаточно малой начальной кинетической энергии частиц через время порядка одной



десятой ленгмюровского периода плазма приходит метастабильное состояние в соответствии с некоторой универсальной зависимостью кинетической энергии частиц от времени [3]. Поэтому здесь прослеживалась эволюция системы до установления метастабильного состояния, затем полученные в результате предварительного расчета координаты и скорости частиц задавались в качестве начальных условий. В ряде расчетов осуществлялась перестановочная стохастизация [4], т. е. векторы скоростей одних электронов обменивались со скоростями других электронов случайным образом. При численном решении использовался метод выделения ближайших соседей (подробнее см. [1,2]) с модификациями, описанными в [5]).

Рис. 2. Функции распределения электронов по полной энергии ϵ для различных интервалов времени. Распределения получены усреднением по отрезку времени длиной, соответствующей ленгмюровскому периоду. Энергия измеряется в единицах $\epsilon_0 = 20e^2N_e^{1/3}$, что соответствует расстоянию касания заряженных сфер; отмечена энергия дна ямы: а) отсутствие перестановочной стохастизации. При $(t = 5)$ осуществлен реверс системы. Жирная линия — усреднение по 1-му ленгмюровскому периоду; пунктир — по 5-му периоду; сплошная линия — по 10-му; жирный пунктир — микрополевое распределение [1,2]:

$$Y(y) = \frac{2c}{\sqrt{\pi}} \begin{cases} \sqrt{y} \exp(-y), & y > \alpha\gamma, \\ C_3 \exp(C_1y + C_2y^2/2), & |y| \leq \alpha\gamma, \\ C_4 \exp(\beta y/\gamma), & y < -\alpha\gamma, \end{cases}$$

где $\alpha = 1.5$, $\beta = 0.4$; константы обеспечивают непрерывность функции и ее нормировку на единицу; штриховая линия соответствует больцмановскому распределению [5]. Микрополевое и больцмановское распределения построены для температуры $T_e = 0.023$ эВ, соответствующей точке реверса; б) перестановочная стохастизация через интервалы времени, кратные $\tau_p = 0.5$. Жирная линия — усреднение по 1-му ленгмюровскому периоду; пунктир — по 3-му периоду; сплошная линия — по 4-му. Микрополевое и больцмановское распределения построены для температуры $T_e = 0.033$ эВ, соответствующей последнему моменту времени расчета; в) перестановочная стохастизация через интервалы времени, кратные $\tau_p = 0.1$. Жирная линия — усреднение по 1-му ленгмюровскому периоду; пунктир — по 5-му периоду. Микрополевое и больцмановское распределения построены для температуры $T_e = 0.036$ эВ, соответствующей последнему моменту времени расчета.

При рассмотрении эволюции системы вычислялись: ε_ε — относительное изменение полной энергии системы (эта величина в какой-то мере характеризует погрешность счета); $K_i(t)$, $K_e(t)$ — кинетические энергии электронов и ионов; $U(t)$ — потенциальная энергия системы; $n_-(t)$ — число связанных электронов (с энергией $\varepsilon < 1.5 e^2 (2N_e)^{1/3} / T_e$). В данной работе температура электронов вычислялась как две трети их кинетической энергии. Степень идеальности плазмы характеризуется величиной $\gamma = \frac{e^2 (2N_e)^{1/3}}{T_e}$.

О динамическом перемешивании фазовых траекторий

Для серии расчетов были вычислены расстояния между точками изначально близких траекторий системы частиц в фазовом пространстве. Расчеты показали, что на интервале времени, близком к половине ленгмюровского периода, наблюдается экспоненциальная расходимость траекторий как ионов, так и электронов. Далее рост расходимости замедляется ввиду ограниченности как координат, так и скоростей частиц.

Расчеты с разным числом частиц показывают, что для достаточно большого $n > 50$ наклоны кривых, построенных в полулогарифмическом масштабе, на участке экспоненциального роста довольно близки. При этом показатель экспоненты, определяющей расходимость электронных траекторий, пропорционален величине $L \approx 15 \pm 1$. Это максимальный показатель Ляпунова [6,7], измеренный в единицах обратного ленгмюровского периода. Он характеризует время динамического перемешивания поступательных степеней свободы.

Были также проведены расчеты с повышенной на порядок температурой. При этом показатель Ляпунова остался практически прежним. Таким образом, найденное значение показателя Ляпунова $L \approx 15 \pm 1$ является универсальной динамической характеристикой классической кулоновской плазмы.

Потеря обратимости численного решения

Точность решения динамических уравнений в наших расчетах довольно высока: $\varepsilon_\varepsilon \sim 10^{-6}$. Для того, чтобы вызванное этой погрешностью изменение состояния системы привело к расхождению фазовой

траектории на величину порядка самого ее изменения, необходимо время $\tau \sim (1/L)\ln(10^6) \sim 1$. Именно за это время фазовая капля размером, определяемым погрешностью счета, растекается по всей доступной динамическим уравнениям части энергетической поверхности в фазовом пространстве.

Это подтверждают и численные расчеты. Для изначально близких траекторий энергия системы все расчетное время сохраняется с высокой точностью $\varepsilon \sim 10^{-4}\%$, а другие грубые параметры $K_i(t)$, $K_e(t)$, $U(t)$, $n_-(t)$ начинают отличаться на величину порядка их характерного изменения лишь при $t \approx 1$.

Неточность численного решения динамических уравнений сопровождается потерей обратимости численных расчетов. Это было непосредственно продемонстрировано с помощью реверса системы (изменения в некоторый момент времени направления скоростей всех частиц на обратные). Расчеты показали, что значения грубых параметров $K_i(t)$, $K_e(t)$, $U(t)$, $n_-(t)$ при обратном движении начинают отличаться от тех значений, которые имели место до реверса на временном интервале порядка единицы. Пример необратимого поведения кинетической энергии приведен на рис. 1 (пунктирная кривая).

Необратимое отращивание рекомбинационного "хвоста"

Как показывают расчеты, за времена $t \sim 1$, на которых произошло полное перемешивание фазовых траекторий, диссипативный процесс рекомбинации практически еще не начался. Однако согласно имеющимся представлениям, уже за время $\tau_e \approx \frac{3}{4\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{m_e T_e^{3/2}}}{e^3 N_e \Lambda} \approx 0.5 T_L$ должна была бы установиться рекомбинационная функция распределения электронов по полной энергии и сформироваться соответствующий рекомбинационный поток. (Здесь $\Lambda(\gamma)$ — кулоновский логарифм). Кроме того, должен иметь место интенсивный рекомбинационный нагрев электронов.

Однако численные расчеты дают распределение, которое радикально отличается как от рекомбинационного, так и от больцмановского распределений, а рекомбинационный нагрев аномально мал. Дело в том, что отращивание рекомбинационного "хвоста" у распределения электронов по энергии имеет место лишь в той мере, в которой утрачивается обратимость численного решения. Это показывают расчеты функций

распределения (см. рис. 2, *a*) для различных временных интервалов *до* и *после* реверса системы. После реверса количество связанных электронов $n_-(t)$ не возвращается к начальному значению, а продолжает расти.

Необратимый рост количества связанных электронов соответствует рекомбинационной релаксации, которая при точных расчетах идет аномально медленно. Для представленных расчетов оценки дают замедление рекомбинации в несколько десятков раз по сравнению с временем рекомбинации $\tau_{\text{теор}} \approx 0.57/(\lambda \cdot \gamma^{9/2}) \approx 16$, следующим из кинетической теории. Примерно во столько же раз наблюдаемое в расчетах время установления рекомбинационного распределения превосходит τ_e .

Рекомбинация при перестановочной стохастизации

Как было показано в работе [4], перестановка скоростей различных электронов тоже приводит к отрачиванию рекомбинационного хвоста функции распределения. Приведенные здесь результаты более подробных расчетов (рис. 1, 2) показывают, что рекомбинационная релаксация идет со скоростью, соответствующей кинетической теории, лишь если перестановочная стохастизация производится через интервалы свободного движения системы τ_p , существенно меньшие τ_e . При достаточно большом $\tau_p = 0.5T_L \approx \tau_e$ релаксация идет в несколько раз медленнее, чем это следует из кинетической теории. В этом случае (как и при релаксации за счет утраты обратимости численного решения) скорость рекомбинации существенно зависит от интенсивности внешнего стохастического воздействия (частоты перестановок). При уменьшении интервалов свободного движения до $\tau_p = 0.1 T_L \approx (1/5)\tau_e$ характерное время рекомбинации достигает значения $\tau_{\text{теор}}$, определяемого кинетической теорией, и дальнейшего существенного ускорения рекомбинации не происходит даже при очень сильном уменьшении интервала свободного движения — до $\tau_p = 0.01T_L \approx (1/50)\tau_e$.

При сильном стохастическом воздействии за время порядка времени рекомбинации устанавливается больцмановское распределение (см. рис. 2, *c*). Установление больцмановского распределения происходит не столько за счет процесса образования связанных пар, сколько за счет рекомбинационного нагрева электронов. Это связано с большим энерговыделением на акт рекомбинации.

Заключение

Подведем некоторые итоги.

1. Показатель Ляпунова для классической кулоновской плазмы имеет значение $L \approx 15/T_L$. Следовательно динамическое перемешивание фазовых траекторий осуществляется за время порядка нескольких десятых ленгмюровского периода. Заметная потеря обратимости численного решения и расхождение грубых параметров плазмы для изначально близких состояний возникают на порядок позднее, т. е. на временах порядка ленгмюровского периода.

2. Динамическое перемешивание фазовых траекторий имеет место не на всей энергетической поверхности, а лишь на той ее части, которая отвечает движению свободных частиц. Этот эффект в какой-то мере аналогичен отсутствию перемешивания между некоторыми торами в фазовом пространстве системы слабо связанных гармонических осцилляторов (следствие известной КАМ-теоремы) [6]).

3. Некоторые виды стохастического воздействия на динамику системы (в частности, неточности численного решения и перестановочная стохастизация) перемешивают траектории системы, расположенные в различных областях энергетической поверхности, что приводит к рекомбинации.

Изложенное выше подтверждает концепцию внешней стохастизации, подытоженную в [1,2]. Мы полагаем, что перемешиванию поступательных и ионизационных степеней свободы препятствуют коллективные колебания плазмы [8]. Они порождают аномальный дрейф электронов по энергетической оси [1,2]. Впрочем, этот вопрос нуждается в дополнительном исследовании.

Список литературы

- [1] Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // УФН. 1994. Т. 164. № 3. С. 298–307.
- [2] Mayorov S.A., Tkachev A.N., Yakovlenko S.I. // Physica Scripta. 1995. V. 51. P. 498–516.
- [3] Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. № 22. С. 90–94.
- [4] Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // Письма в ЖТФ. 1991. Т. 17. № 23. С. 33–37.

- [5] *Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // Кр. сообщения по физике. ФИАН. 1996. № 9–10. С. 3–12.
- [6] *Лихтенберг А., Либман М.* // Регулярная и стохастическая динамика. М.: Мир, 1984.
- [7] *Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // Физика плазмы. 1994. Т. 20. № 12. С. 1107–1108.
- [8] *Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // Кр. сообщения по физике. ФИАН. 1995. № 11–12. С. 67–72.