

DOI: 10.51790/2712-9942-2022-3-3-1

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ТРАЕКТОРИЙ ЧАСТИЦ, ДВИЖУЩИХСЯ ПОД ДЕЙСТВИЕМ НЕСИММЕТРИЧНОГО ПОТЕНЦИАЛА

В. А. Галкин^а, Д. А. Моргун^б

Сургутский филиал Федерального государственного учреждения «Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук», г. Сургут, Российская Федерация

^а ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-9721-4026>, val-gal@yandex.ru

^б ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0692-1583>, morgun_da@office.niisi.tech

Аннотация: в работе моделируется движение частицы в поле с несимметричным потенциалом. Рассматриваются вопросы визуализации потенциала, способов наглядного отображения траектории частицы. Приводятся результаты визуализации, полученные с помощью библиотеки MathGL. Затрагиваемая тематика актуальна при математическом моделировании задач гидродинамики, фильтрации, задач о взаимодействии заряженных частиц с веществом.

Ключевые слова: визуализация траекторий частиц, гидродинамика, несимметричный потенциал.

Благодарности: исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 20-07-00236.

Для цитирования: Галкин В. А., Моргун Д. А. Моделирование и визуализация траекторий частиц, движущихся под действием несимметричного потенциала. *Успехи кибернетики*. 2022;3(3):8–13. DOI: 10.51790/2712-9942-2022-3-3-1.

MODELING AND VISUALIZATION OF PARTICLE TRAJECTORIES DRIVEN BY AN ASYMMETRIC POTENTIAL

V. A. Galkin^а, D. A. Morgun^б

Surgut Branch of Federal State Institute “Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences”, Surgut, Russian Federation

^а ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-9721-4026>, val-gal@yandex.ru

^б ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0692-1583>, morgun_da@office.niisi.tech

Abstract: the study simulates the motion of a particle in an asymmetric potential field. We considered the potential visualization and approaches to the particle trajectory rendering. The visualizations with the MathGL library are presented. This study is relevant for the simulation problems in hydrodynamics, filtration, of and charged particles to matter interaction.

Keywords: visualization of particle trajectories, hydrodynamics, asymmetric potential.

Acknowledgements: this study is supported by the Russian Foundation for Basic Research, project No. 20-07-00236.

Cite this article: Galkin V. A., Morgun D. A. Modeling and Visualization of Particle Trajectories Driven by an Asymmetric Potential. *Russian Journal of Cybernetics*. 2022;3(3):8–13. DOI: 10.51790/2712-9942-2022-3-3-1.

Моделирование траекторий частиц, движущихся в поле сил с непрерывным потенциалом, широко применяется при решении задач взаимодействия пучков заряженных частиц с веществом. Известно, что при облучении кристаллов (кремний, германий, алмаз и др.) пучками быстрых заряженных частиц могут наблюдаться ориентационные эффекты: эффект каналирования, эффект теней [1]. Ориентационные эффекты известны и изучаются давно, см., например, обзор 1998 года [2] или работу 2003 года [3]. Интерес к ориентационным эффектам вызван различными возможностями их практического применения. Например, эффект каналирования применяется для отклонения пучков заряженных частиц изогнутыми кристаллами или для определения расположения примесных атомов в кристаллической решетке. Этот интерес не угасает и в настоящее время. Так, в работе 2008 года [4] экспериментально изучается отклонение пучка протонов изогнутым кристаллом кремния, а в работе 2012

года [5] приводятся результаты математического моделирования того же эксперимента. Для ряда практических задач эффект каналирования может играть отрицательную роль. Например, может вносить существенную погрешность в работу детекторов заряженных частиц, которые используются в установках, описанных в [6–9].

При каналировании налетающая на кристалл частица влетает в кристаллическую решетку под небольшим углом к кристаллографическим плоскостям¹ или осям², и в результате взаимодействия потенциала частицы с усредненным потенциалом атомной плоскости (оси) движение частицы ориентируется вдоль направления плоскостного (осевого) канала, и частица проходит в кристалле-мишени значительно большее расстояние, чем при других углах влета.

Следует упомянуть также возможное приложение исследуемых ориентационных эффектов к задачам электродинамики. При движении электронов по кристаллической решетке в присутствии ускоряющего электрического поля происходит постоянное рассеяние электронов на неоднородностях решетки, приводящее к потере ими импульса. Превращение энергии движения электронов в энергию колебания решетки приводит к ее нагреву и формирует электрическое сопротивление. Известно (с 1968 года), что в бездефектных кристаллах при низких температурах на первый план выходят электрон-электронные столкновения, в результате которых импульс не передается решетке, а поток электронов движется по гидродинамическим законам [10]. В перспективе это может стать одним из механизмов достижения сверхпроводимости. Исследования в данном направлении актуальны и публикуются до сих пор [11].

Рассмотрим несимметричный потенциал следующего вида:

$$\Phi(x_1, x_2, x_3) = -\frac{3}{2} + (\sin x_1 \cos x_2 + \sin x_2 \cos x_3 + \sin x_3 \cos x_1). \quad (1)$$

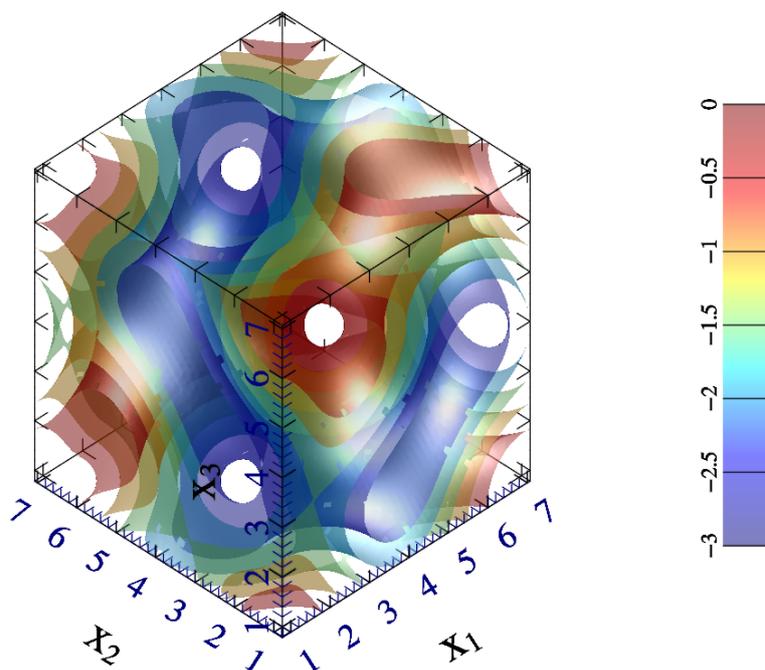


Рис. 1. Визуализация эквипотенциалей для $\Phi(x_1, x_2, x_3)$

Обозначим $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$, $\vec{v} = (v_1, v_2, v_3)$,

$$v_1 = \sin x_2 - \cos x_3, \quad v_2 = \sin x_3 - \cos x_1, \quad v_3 = \sin x_1 - \cos x_2. \quad (2)$$

Поле скоростей (2) удовлетворяет стационарному уравнению Эйлера $(\vec{v} \cdot \nabla \vec{v}) = -\nabla \Phi$ и уравнению неразрывности для несжимаемой жидкости $\nabla \cdot \vec{v} = 0$.

¹ Плоскостное каналирование.

² Осевое каналирование.

Будем численно решать задачу Коши:

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{v}, \quad (3)$$

используя метод Эйлера и задавая различные начальные условия \vec{x}_0 .

Как видно из выражения (1) и рис. 1, потенциал меняется периодически по каждому из направлений координат x_1 , x_2 , x_3 , с периодом 2π . Изображение эквипотенциалей на рис. 1 позволяет составить представление о структуре потенциала. Отметим, что потенциал (1) периодически меняется в любом направлении, за исключением отдельных прямых, вдоль которых значения потенциала постоянны, причем потенциал вдоль этих прямых принимает свои максимальные или минимальные значения. На рис. 1 можно видеть четыре «дыры» между поверхностями эквипотенциалей. Соответственно, прямые с максимальным значением потенциала окружены эквипотенциалами красного цвета, а с минимальным — синего.

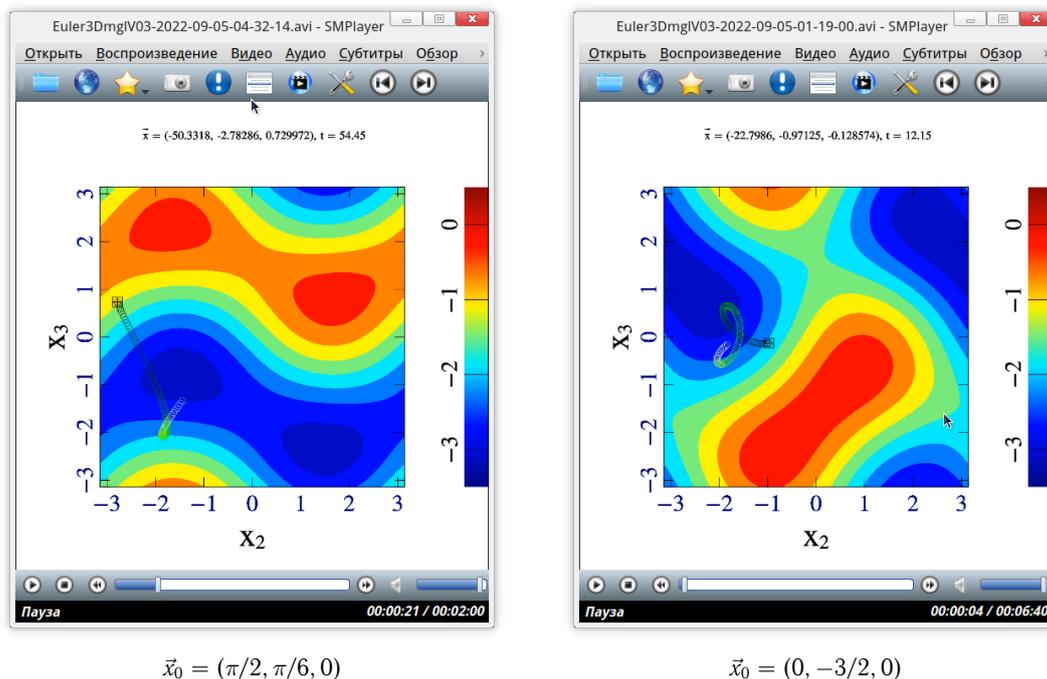


Рис. 2. Скриншоты из видеороликов визуализации фрагмента траектории на фоне контуров потенциала Φ на срезе по координате, по которой происходит углубление траектории частицы (здесь — по x_1), для двух разных траекторий

На рисунках 2–7 приведена визуализация результатов расчетов. Визуализация построена средствами библиотеки MathGL [12].

Как видно из рисунков, траектория частицы выглядит как некая геометрическая фигура, которая плавно вращается и одновременно удаляется от начальной точки \vec{x}_0 (или «углубляется» в расчетную область). При разных начальных значениях характер таких фигур разный: от остроугольных треугольников до округлых лепестков.

Хорошо показал себя следующий метод визуального анализа. Изображаются контуры потенциала в сечении, соответствующем текущей координате траектории по тому направлению, по которому происходит углубление траектории в расчетную область. На этом графике контуров изображается текущая точка траектории, а также «хвост» из нескольких предыдущих точек траектории. Из последовательности построенных таким образом изображений формируется видеоролик, который позволяет отследить траекторию на фоне потенциала в динамике, см. рис. 2.

Траектории, изображенные на рисунках 3 и 4 для $\vec{x}_0 = (\pi/6, \pi/6, 0)$ и $\vec{x}_0 = (\pi/2, \pi/6, 0)$ соответственно, имеют качественно схожий характер и отличаются тем, что углубление траектории в расчетную область происходит в первом случае в сторону отрицательных значений координаты x_2 , а

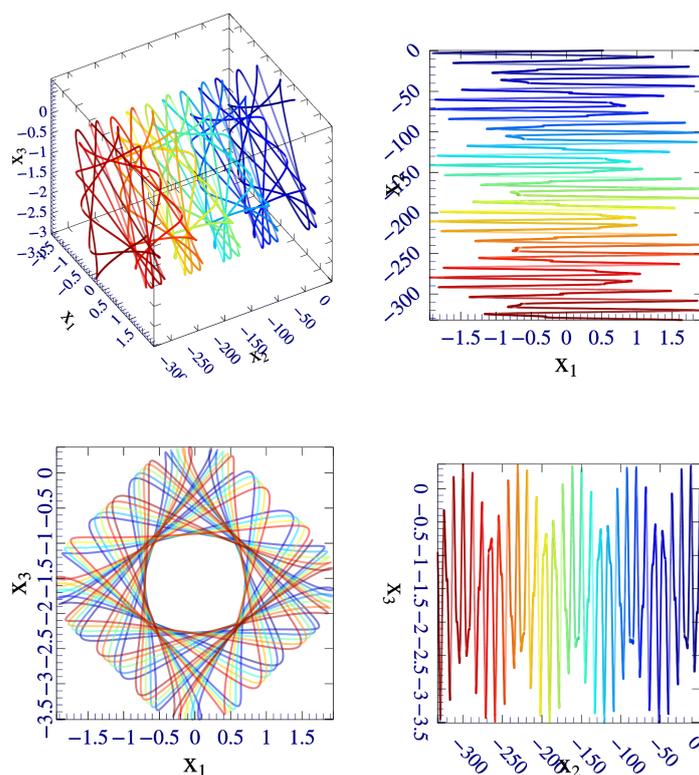


Рис. 3. Решение задачи (3) для начальных условий $\vec{x}_0 = (\pi/6, \pi/6, 0)$. $T_{max} = 300$, $dt = 10^{-5}$. Цвет траектории меняется от темно-синего при $t = 0$ до темно-красного при $t = T_{max}$

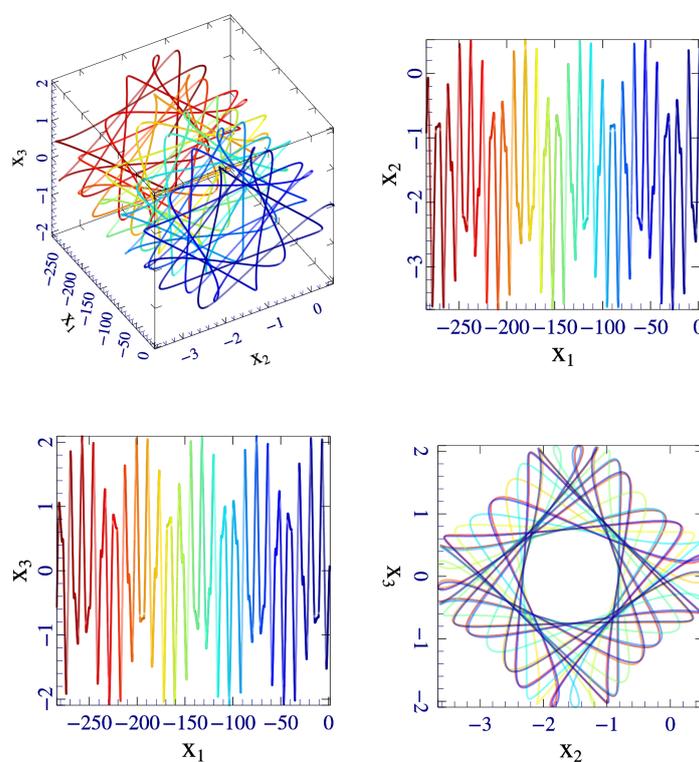


Рис. 4. Решение задачи (3) для начальных условий $\vec{x}_0 = (\pi/2, \pi/6, 0)$. $T_{max} = 300$, $dt = 10^{-5}$. Цвет траектории меняется от темно-синего при $t = 0$ до темно-красного при $t = T_{max}$

во втором случае — в отрицательные значения координаты x_1 . Проекция траектории на плоскость, перпендикулярную к направлению углубления, в обоих случаях напоминает прецессирующий треугольник со слегка закругленными углами. Колебания координат в такой плоскости — поперечные колебания — не выходят за пределы некоторой области, размеры которой не превышают периодов потенциала (1). Кроме того, такие траектории не попадают в центральную область и, можно сказать, своим движением описывают своего рода «стенки трубы».

Для начальных условий $\vec{x}_0 = (0, -3/2, 0)$ характер поперечных колебаний меняется: они приобретают форму прецессирующих округлых лепестков. Поперечные колебания в этом случае имеют меньший размах, а траектория своим движением теперь описывает не «трубу», а скорее заполненный цилиндр, рис. 5.

Если траектория попадает в окрестность прямой, вдоль которой потенциал принимает максимальное или минимальное значение («дыры» на рис. 1), то характер траектории существенно отличается от рассмотренных выше случаев. Здесь не получается выделить «направление углубления» траектории и «поперечные колебания», здесь траектория может существенно выходить за границы периодов (1) по любому из направлений, см. рис. 6.

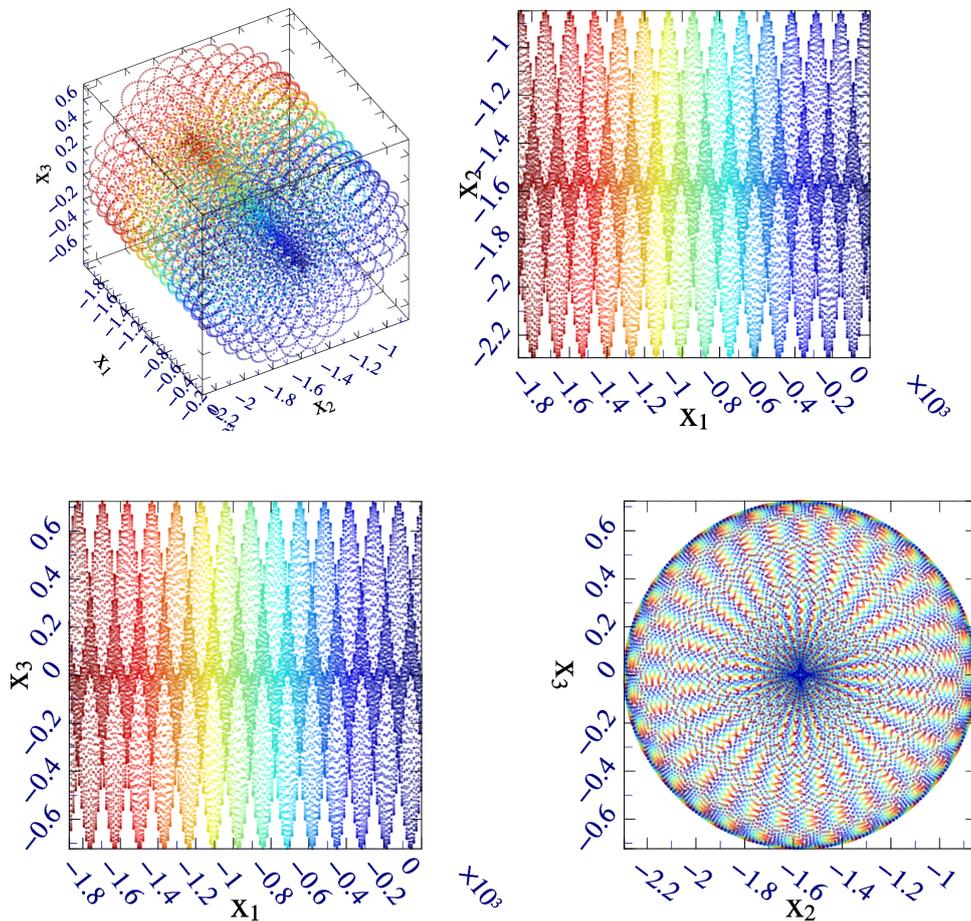


Рис. 5. Решение задачи (3) для начальных условий $\vec{x}_0 = (0, -3/2, 0)$. $T_{\max} = 1000$, $dt = 10^{-5}$. Цвет траектории меняется от темно-синего при $t = 0$ до темно-красного при $t = T_{\max}$

Заключение

Как показывают представленные в работе результаты моделирования, применение данного несимметричного потенциала позволяет получать эффекты, сходные с известными ориентационными эффектами взаимодействия пучков заряженных частиц с кристаллами. Возможность применения данного потенциала для моделирования как динамики частиц, так и гидродинамики делает рассматриваемую тему весьма интересной и актуальной. Структура потенциала, сложная для визуального анализа, требует дальнейших исследований в области визуализации решений для задач такого рода.

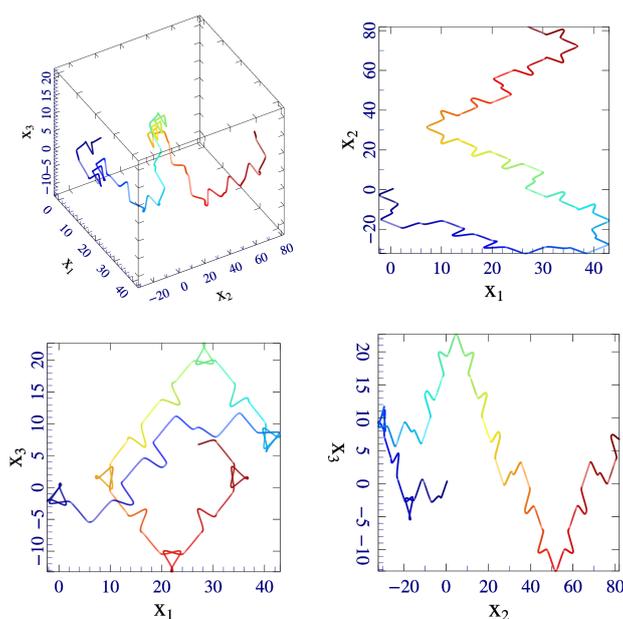


Рис. 6. Решение задачи (3) для начальных условий $\vec{x}_0 = (\pi/6, \pi/6, \pi/8)$. $T_{max} = 300$, $dt = 10^{-5}$. Цвет траектории меняется от темно-синего при $t = 0$ до темно-красного при $t = T_{max}$

ЛИТЕРАТУРА

1. Кошечев В. П., Моргун Д. А., Панина Т. А., Штанов Ю. Н. *Компьютерное моделирование стохастической динамики эффекта каналирования*. Сургут: ООО «Печатный мир», 2017. 170 с. ISBN 978-5-6040248-5-0.
2. Таратин А. М. Каналирование частиц в изогнутом кристалле. *Физика элементарных частиц и атомного ядра*. 1998;29(5):1062–1118. Режим доступа: <http://www1.jinr.ru/Archive/PePan/1998-v29/v-29-5/1.htm>.
3. Кадменский А. Г., Самарин В. В., Тулинов А. Ф. Регулярное и стохастическое движение в кристалле при каналировании. Эволюция потока частиц в толстом кристалле. *Физика элементарных частиц и атомного ядра*. 2003;34(4):822–868. Режим доступа: <http://www1.jinr.ru/Archive/PePan/v-34-4/1.htm>.
4. Scandale W., Vomiero A., Baricordi S. et al. High-Efficiency Deflection of High-Energy Protons through Axial Channeling in a Bent Crystal. *Phys. Rev. Lett.* 2008;101(16):164801. Режим доступа: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.101.164801>.
5. Кошечев В. П., Моргун Д. А., Панина Т. А., Штанов Ю. Н. Влияние квантовых флуктуаций на движение релятивистских протонов в кристаллах. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2012;12:57–59.
6. Galkin V. A. et al. Emulsion Sheet Doublets as Interface Trackers for the OPERA Experiment. *Journal of Instrumentation*. 2008;3(7):P07005–P07005. DOI: <https://doi.org/10.1088/1748-0221/3/07/p07005>.
7. Galkin V. A. et al. The OPERA Experiment in the CERN to Gran Sasso Neutrino Beam. *Journal of Instrumentation*. 2009;4(4):P04018–P04018. DOI: <https://doi.org/10.1088/1748-0221/4/04/p04018>.
8. *Introduction to Charged-Particle Detectors*. Режим доступа: <https://www.ortec-online.com/-/media/ametektortec/other/introduction-charged-particle-detectors.pdf?la=en>.
9. *Charged Particle Detection*. Режим доступа: <https://www.mirion.com/learning-center/nuclear-measurement-fundamental-principles/nuclear-measurement-fundamental-principle-charged-particle-detection>.
10. Гуржи Р. Н. Гидродинамические эффекты в твердых телах при низких температурах. *Успехи физических наук*. 1968;94(4):689–718. Режим доступа: <https://ufn.ru/ru/articles/1968/4/d/>.
11. Aharon-Steinberg A., Völkl T., Kaplan A. et al. Direct Observation of Vortices in an Electron Fluid. *Nature*. 2022;607:74–80. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41586-022-04794-y>.
12. *MathGL*. Режим доступа: http://mathgl.sourceforge.net/doc_ru/index.html.