

01,03

Кинетика ионов в нейтральном газе при резком включении электрического поля. Ч. II. Различные модели взаимодействия

© А.Я. Эндер,¹ И.А. Эндер,² А.Б. Герасименко¹¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
e-mail: andrei.ender@mail.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 27 апреля 2009 г.)

Новый метод расчета матричных элементов интеграла столкновений в уравнении Больцмана использован для исследования поведения примеси ионов при резком включении электрического поля. Для пяти моделей взаимодействия изучены особенности поведения подвижности и проиллюстрирована эволюция функции распределения при различных значениях напряженности электрического поля. В случае кулоновского взаимодействия исследована начальная стадия убегания ионов. Рассмотрены два способа улучшения сходимости полиномиальных разложений функции распределения.

Введение

В первой части настоящей работы [1] рассмотрен стандартный моментный метод решения уравнения Больцмана, основанный на разложении функции распределения (ФР) по сферическим полиномам Эрмита с весовым максвеллианом, температура которого совпадает с температурой фонового газа. Подробно изучены возможности такого метода при привлечении очень большого количества (десятки тысяч) матричных элементов (МЭ) интеграла столкновений.

Исследовалась задача о построении ФР ионов при резком включении электрического поля для модели резонансной перезарядки с постоянной частотой столкновений (СЕМ-модель). Построенные в [1] аналитические решения как самого нестационарного уравнения Больцмана, так и соответствующей моментной системы, позволили доказать сходимость моментного метода при умеренных и не слишком сильных электрических полях.

Расчет эволюции ФР проводился с помощью нестационарного моментного метода. В данной второй части статьи этот метод применяется к следующим моделям взаимодействия.

1. Псевдомаксвелловские молекулы, полное сечение рассеяния Σ обратно пропорционально относительной скорости ($\Sigma = C/g$), угловая часть сечения изотропна.

2. СЕМ-модель, полное сечение также обратно пропорционально относительной скорости, угловая часть сечения — резонансная перезарядка — соответствует рассеянию на 180° .

Для этих двух моделей частота столкновений не зависит от скорости и их называют модели „ $\tau = \text{const}$ “.

3. HS-модель — модель твердых шаров, полное сечение не зависит от скорости, угловая часть сечения — изотропное рассеяние.

4. CEHS-модель, полное сечение не зависит от скорости, угловая часть сечения — резонансная перезарядка.

Для моделей HS и CEHS длина свободного пробега не зависит от скорости и их называют модели „ $\lambda = \text{const}$ “.

5. Кулоновское взаимодействие, потенциал взаимодействия $V \sim 1/r$. Сечение рассеяния определяются по формуле Резерфорда

$$\sigma(g, \theta) = \frac{e^4}{m_i^2 g^4 \sin^2 \frac{\theta}{2}}. \quad (1)$$

Здесь e и m_i — заряд и масса иона. Для этой модели характерны очень быстрое убывание сечения рассеяния с ростом относительной скорости и расходимость при малых углах рассеяния. Для устранения этой расходимости используется экранированный кулоновский потенциал с радиусом экранирования, равным дебаевскому радиусу:

$$\lambda_D = \left(\frac{kT}{4\pi n e^2} \right)^{1/2}.$$

Здесь n — концентрация плазмы.

В результате интеграл столкновений оказывается пропорциональным кулоновскому логарифму

$$\ln \Lambda = \ln(12\pi n \lambda_D^3).$$

В наших расчетах значение кулоновского логарифма выбиралось равным пяти. При расчетах МЭ в случае кулоновского взаимодействия в качестве единицы измерения времени выбиралась величина

$$\tau = 16(kT/m_i)^{3/2}/(J_1 n), \quad J_1 = 8\pi e^4 \ln \Lambda / m_i^2. \quad (2)$$

В этой статье, как и в [1], в качестве единицы измерения скорости выберем тепловую скорость $v_T = \sqrt{2kT/m_i}$, а за единицу измерения времени — среднее время между столкновениями τ . Для безразмерной хаотической скорости используем обозначение \mathbf{c} , а для безразмерных средней скорости и времени сохраним

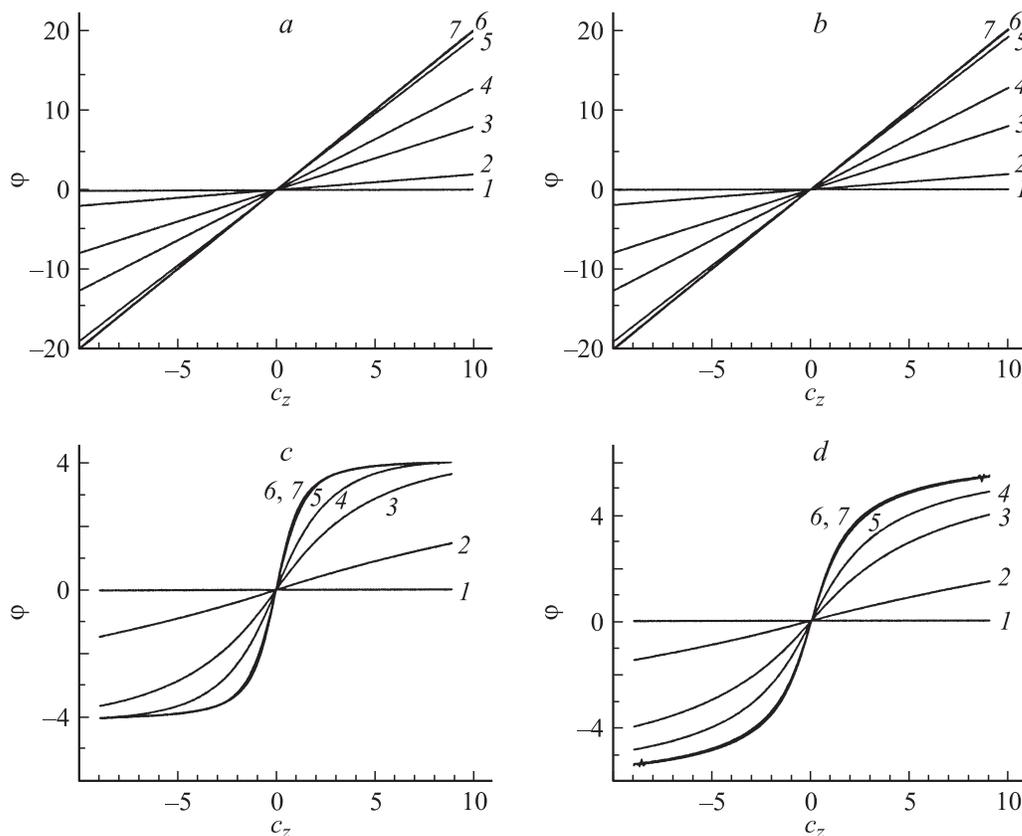


Рис. 1. Эволюция универсальной φ при $c_p = 0$. K -нормировка. a — СЕМ-модель, b — псевдомаксвелловские молекулы, c — СЕНС-модель, d — HS-модель. 1 — $t = 0$, 2 — 0.5 , 3 — 1 , 4 — 3 , 5 — 5 , 6 — 6 , 7 — 9.5 , 8 — 12 , 9 — 24 . Кривые 5–9 на графике совпадают.

прежние обозначения: \mathbf{u} и t . Безразмерную напряженность электрического поля, как и в [1], определим следующим образом:

$$\epsilon = \frac{eE\tau}{m_i v_T}. \quad (3)$$

Для моделей с постоянной частотой столкновений ($\tau = \text{const}$) для безразмерного электрического поля имеем

$$\epsilon = \frac{eE\tau}{\sqrt{2kTm_i}}, \quad (4)$$

а для моделей с $\lambda = \text{const}$

$$\epsilon = \frac{eE\lambda}{2kT}. \quad (5)$$

Перед началом решения моментной системы для всех этих моделей были рассчитаны матрицы линейных МЭ ($\Lambda_{r,r_1,l}$) вплоть до очень больших значений индексов. Такие расчеты оказались возможными благодаря разработанным ранее авторами рекуррентным процедурам [1–3] и составленному пакету программ. Следует подчеркнуть, что эти программы позволяют проводить расчеты для произвольных масс сталкивающихся частиц. В данной статье рассматривается случай равных масс.

Будем изучать все описанные модели взаимодействия, последовательно в слабых, умеренных и сильных полях.

1. Слабое электрическое поле

Во всем диапазоне слабых полей ($\epsilon < 0.1$) для всех исследованных моделей подвижность практически не зависит от ϵ и совпадает с ее значением, полученным методом Чепмена–Энскога. Этого, однако, нельзя сказать о функции распределения, которая оказывается более чувствительной к величине ϵ . В методе Чепмена–Энскога при очень малом ϵ ФР ищется в виде

$$f(\mathbf{c}) = M(\mathbf{c})(1 + \epsilon\varphi(\mathbf{c})). \quad (6)$$

Функция $\varphi(\mathbf{c})$ может быть определена по численно найденному значению $f(\mathbf{c})$ следующим образом:

$$\varphi(\mathbf{c}) = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{f(\mathbf{c})}{M(\mathbf{c})} - 1 \right). \quad (7)$$

Существует область очень малых значений ϵ , где построенная таким образом φ не зависит от ϵ . Будем ее называть универсальной чепмен-энскоговской поправкой.

На рис. 1 представлена эволюция универсальной φ для четырех моделей. Для всех моделей масштаб (единица измерения времени) выбирался таким, чтобы при $\epsilon \rightarrow 0$ и $t \rightarrow \infty$ подвижность выходила на единицу. Такая нормировка названа нами K -нормировкой.

Коэффициент перехода A от стандартной к K -нормировке для различных моделей взаимодействия.

СЕМ-модель	PMM	СЕНС-модель	НС-модель	Coulomb
1	2	0.4826	0.9578	0.28128

Примечание. PMM — псевдомаксвелловские молекулы.

Напомним, что для СЕМ-модели при $t \rightarrow \infty$ подвижность $K \equiv 1$ при всех значениях ϵ . Для всех других моделей будем поступать следующим образом: сначала при выбранной нами стандартной нормировке и при достаточно малых значениях ϵ решаем нестационарную задачу. В широком диапазоне малых ϵ предельное — стационарное — значение K будет постоянным. Зная это значение K , легко найти новую единицу частоты, при выборе которой стационарное значение K окажется равным единице. При переходе к этой новой единице частоты все стандартные МЭ надо умножить на одну и ту же константу, которую будем обозначать A . Соответственно изменяется и единица измерения времени τ , и величина безразмерного электрического поля.

В таблице представлены значения коэффициента A для различных моделей взаимодействия. Из таблицы видно, что на коэффициент A сильно влияет угловая зависимость сечения рассеяния. Так, для моделей с $\tau = \text{const}$ переход от рассеяния на 180° к изотропному рассеянию приводит к увеличению коэффициента A в два раза. Примерно в два раза (точнее — в 1.985 раза) увеличивается A при переходе от СЕНС-модели к НС-модели.

Подчеркнем, что такой переход к K -нормировке будет использоваться нами не только в случае слабого поля, но и при всех других значениях ϵ .

Из рис. 1, a, b видно, что в K -нормировке расчеты для СЕМ-модели и псевдомаксвелловских молекул совпадают. Это определяется одинаковой зависимостью сечения от скорости.

На рис. 1, c, d представлено сравнение еще двух моделей с одинаковой зависимостью сечения рассеяния от скорости, а именно СЕНС- и НС-моделей. Характерным для этих моделей является недиагональный вид матрицы взаимодействия. Здесь несмотря на похожее поведение φ нет полной тождественности решений. Для обеих моделей при больших значениях времени характерно стремление к насыщению при больших c_z , однако величина этого насыщения примерно в 1.5 раза меньше для СЕНС-модели, чем для НС-модели. Тем не менее значительно важнее подчеркнуть сходство между этими решениями: во-первых, очень похожий характер поведения решений при малых временах, во-вторых, в отличие от максвелловских моделей универсальная $\varphi(c_z)$ не стремится к бесконечности с ростом c_z , а выходит на насыщение. Это обеспечивает выполнение критерия Греда для ФР в стационарном состоянии для этих моделей.

Из аналитического решения моментной системы для СЕМ-модели следует, что

$$\varphi = 2cP_1(\cos\theta) = 2c_z,$$

это совпадает с рис. 1, a .

Универсальная чепмен-энскоговская поправка φ определяется только теми моментами $C_{r,l}$ в разложении ФР по сферическим полиномам Эрмита, которые пропорциональны ϵ , назовем это подмножество $C_{r,l}^{(1)}$. При численном решении моментной системы подмножество $C_{r,l}^{(1)}$ ищется следующим образом. Решается задача при двух значениях ϵ , лежащих в области очень малых ϵ (они выбирались $\epsilon_1 = 10^{-3}$ и $\epsilon_2 = 10^{-4}$), затем все $C_{r,l}$ делятся на соответствующие ϵ . Те из них, у которых $C_{r,l}/\epsilon$, не зависят от ϵ и принадлежат к искомому подмножеству $C_{r,l}^{(1)}$. Заодно находятся и группы $C_{r,l}$ с порядками ϵ^2, ϵ^3 и т.д.

Если в случае моделей с диагональной матрицей взаимодействия только один момент, C_{01} , дает вклад в универсальную φ , то для других моделей дают вклад в φ все моменты $C_{r,l}$. При этом все $C_{r,l}$ с $l \neq 1$ никакого влияния на φ не оказывают.

Если в слабом поле для вычисления подвижности достаточно обрезать систему моментных уравнений при $R_0 = 1, 2$, то при построении ФР приходится выбирать значение R_0 достаточно большим.

На рис. 2 проведено исследование влияния R_0 — предела суммирования по r на φ в подпространстве $l = 1$. Из рис. 2 видно, что даже при $R_0 = 128$ в построении чепмен-энскоговской поправки φ удается продвинуться до 8.5 тепловых скоростей. Расчеты показали, что с ростом R_0 от 128 до 250 происходит расширение области $|c_z|$, в которой наблюдается хорошая сходимость, до $|c_z| = 9.8$.

В приближении Чепмена–Энскага поправка φ пропорциональна $P_1(\cos\theta)$. В результате на оси симметрии $\varphi(c_z)$ оказывается нечетной функцией. Естественно поставить вопрос — до каких значений ϵ функция φ сохраняет это свойство. Уже при $\epsilon = 10^{-2}$ симметрия относительно точки 0 исчезает. При $t = 10$ имеем $\varphi(8) = 5.59$, а $\varphi(-8) = -5.08$. Связано это с тем, что теперь нельзя пренебречь φ_0 и φ_2 . Еще более существенное отклонение от универсальной φ наблюдается

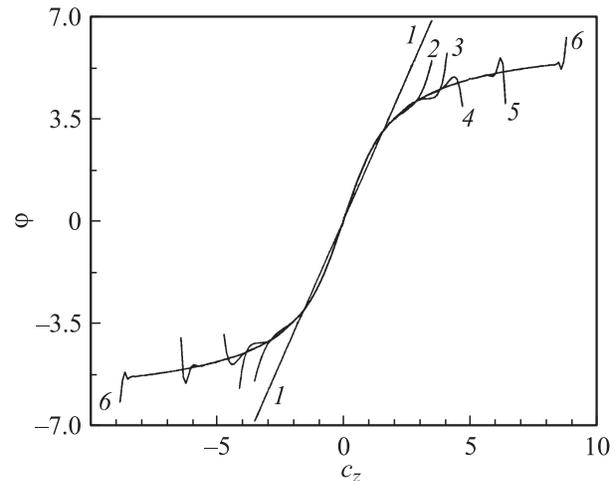


Рис. 2. Восстановление $\varphi(c_z)$ для НС-модели при различных R_0 . K -нормировка. 1 — $R_0 = 0$, 2 — 2, 3 — 4, 4 — 8, 5 — 32, 6 — 128.

при $\epsilon = 5 \cdot 10^{-2}$: теперь при $t = 10$ имеем $\varphi(8) = 6.75$, а $\varphi(-8) = -4.32$. Это значит, что вклад от φ_0 и φ_2 стал еще больше, возможно, влияние и других φ_l при $l > 2$.

2. Умеренное и сильное электрическое поле

Будем условно считать границей перехода от слабого электрического поля к умеренному значению $\epsilon = 0.1$, а нижней границей области сильного поля $\epsilon = 1$. Приведем результаты расчетов для разных моделей. Сначала проследим за эволюцией подвижностей, а затем рассмотрим функции распределения.

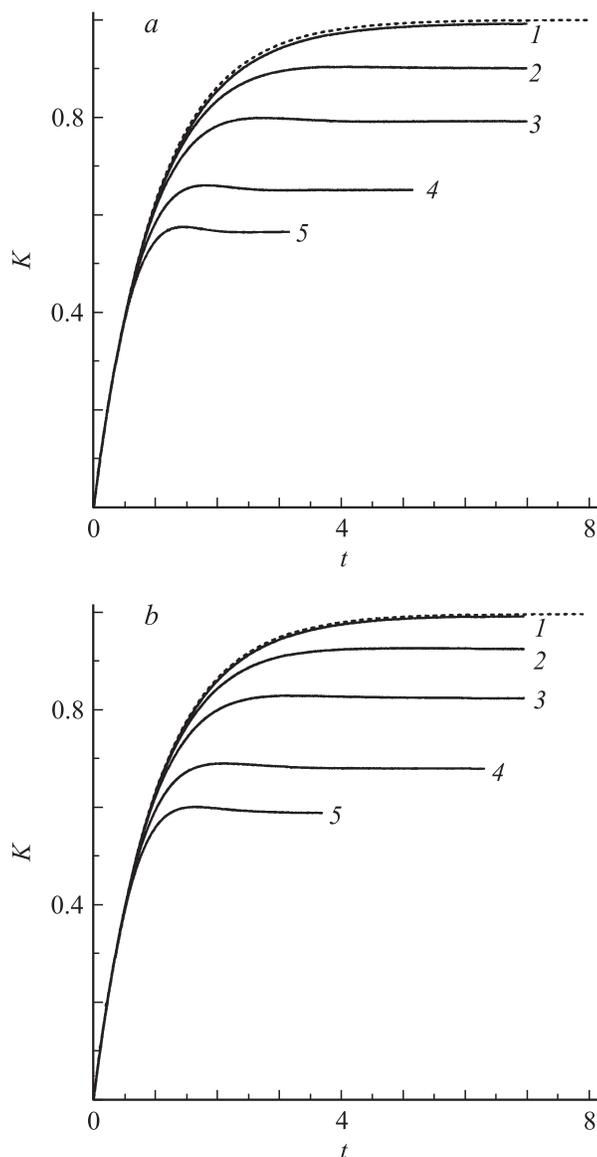


Рис. 3. Подвижность $K(t)$ для нескольких значений ϵ . *a*: SEHS-модель, *b*: HS-модель, K -нормировка. Штриховая кривая — SEM-модель. 1 — $\epsilon = 0.1$, 2 — 0.5, 3 — 1, 4 — 2, 5 — 3.

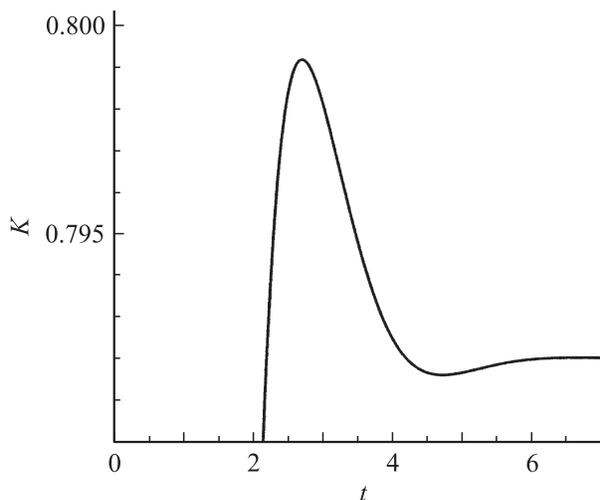


Рис. 4. $K(t)$ для $\epsilon = 1$ в увеличенном масштабе. SEHS-модель, K -нормировка.

2.1. Подвижность

Для моделей с $\tau = \text{const}$ характерна пропорциональность дрейфовой скорости $u_d(t)$ величине электрического поля ϵ , т.е. независимость от ϵ подвижности K .

Для псевдомаксвелловских молекул в стандартной нормировке стационарное значение подвижности оказывается равным двум, а процесс выхода на стационарное состояние сильно затянут по сравнению с SEM-моделью. В K -нормировке не только стационарное значение K равно единице, но и зависимость $K(t)$ полностью совпадает с аналогичной зависимостью для SEM-модели.

Перейдем к моделям с $\lambda = \text{const}$. Рассмотрим HS- и SEHS-модели.

Как видно из рис. 3, в K -нормировке подвижность при малых ϵ выходит на стационарное значение, равное единице. Однако с ростом ϵ стационарное значение подвижности уменьшается.

При достаточно больших значениях ϵ наблюдается новое и интересное явление. В отличие от моделей с диагональной матрицей взаимодействия на зависимостях $K(t)$ появляется немонотонность. На рис. 4 для SEHS-модели представлена зависимость $K(t)$ для $\epsilon = 1$ в увеличенном масштабе. Подвижность с ростом времени сначала достигает максимума, а затем проходит через минимум. Аналогичная картина наблюдается и в случае HS-модели. Можно предположить, что процесс включения поля сопровождается возбуждением быстрозатухающих колебаний. С ростом ϵ положение максимума смещается в сторону меньших значений времени, а величина перепада от максимума до минимума возрастает.

До сих пор нами рассматривалась зависимость подвижности от времени. Теперь остановимся на поведении стационарной подвижности. На рис. 5 приведены зависимости подвижности в стационарном состоянии от ϵ в K -нормировке. Можно отметить для обеих моделей

достаточно сильную зависимость K от напряженности электрического поля, подвижность монотонно убывает.

В работе [4] получено аналитическое решение стационарного уравнения Больцмана для СЕНС-модели в случае холодного фонового газа. В этом случае температура фонового газа стремится к нулю, что соответствует очень сильному полю. При этом максвеллиан фона заменяется δ -функцией, и столкновительный оператор сильно упрощается. В [4] построена ФР и подвижность ионов. В наших обозначениях такая подвижность имеет вид

$$K(\epsilon) = \sqrt{\frac{2}{\pi\epsilon}}. \quad (8)$$

На рис. 6 показано, что стационарная подвижность $K(\epsilon)$, построенная моментным методом, выходит на предельную подвижность, определяемую формулой (8).

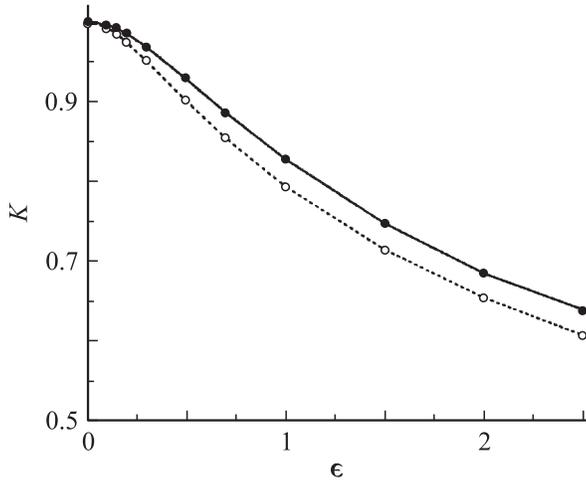


Рис. 5. Стационарная подвижность $K(\epsilon)$. Сплошная кривая — HS-модель, штриховая кривая — СЕНС-модель.

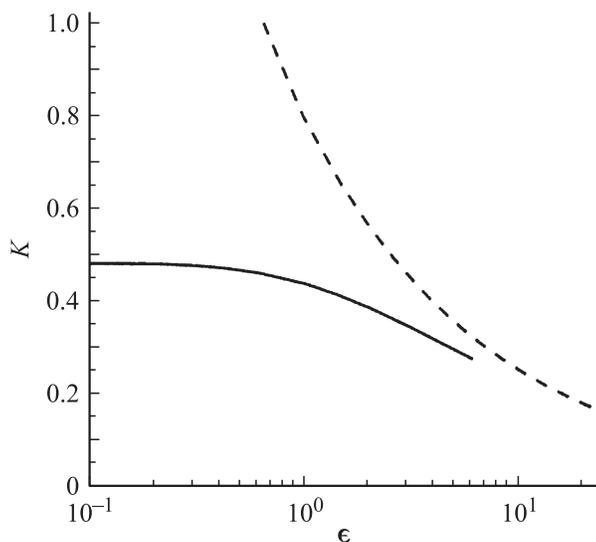


Рис. 6. Стационарная подвижность $K(\epsilon)$ для СЕНС-модели. Сравнение с решением Переля. Стандартная нормировка. Штриховая кривая — подвижность для холодного газа.

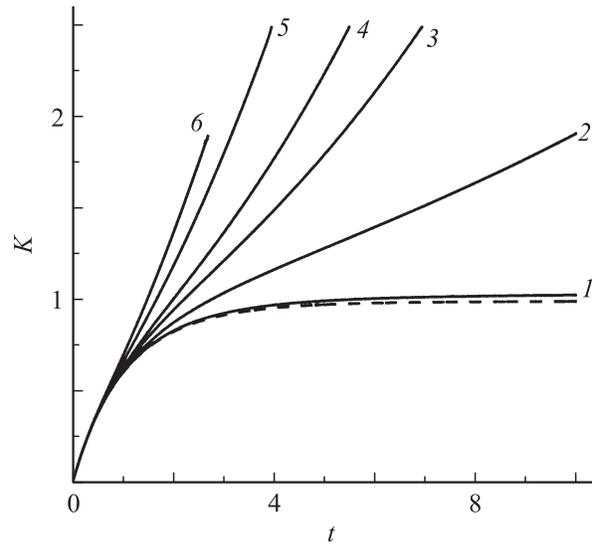


Рис. 7. Зависимости $K(t)$ для кулоновского взаимодействия при различных значениях ϵ . Штриховая кривая соответствует СЕМ-модели. 1 — $\epsilon = 0.1$, 2 — 0.5, 3 — 0.8, 4 — 1, 5 — 1.5, 6 — 2.

Подчеркнем, что для рассмотренных выше четырех моделей подвижность при больших t выходит на насыщение. Совершенно иначе обстоит дело в случае кулоновского взаимодействия. На рис. 7 показано поведение подвижности при разных ϵ . Если для моделей с $\lambda = \text{const}$ функции $K(t)$ оказываются все время ниже универсальной подвижности для СЕМ-модели (см. рис. 3), то для кулоновского взаимодействия подвижность оказывается все время выше. Более того, как показали расчеты, уже при $\epsilon = 0.3$ она имеет тенденцию к неограниченному возрастанию; при меньших значениях ϵ этот эффект почти не проявляется, а при $\epsilon > 0.3$ — еще более ярко выражен. Как отмечалось в [1], этот эффект связан с убеганием ионов и является следствием очень сильного убывания сечения рассеяния с ростом относительной скорости ($\sigma \sim g^{-4}$).

Таким образом, изучена эволюция подвижности для различных законов взаимодействия — от самого жесткого потенциала взаимодействия (модели твердых шаров) до самого мягкого (кулоновского взаимодействия). В области слабого электрического поля в K -нормировке подвижность ведет себя очень похоже при всех сечениях рассеяния. В случае кулоновского взаимодействия имеет место убегание ионов, и этот процесс усиливается с ростом ϵ .

2.2. Функция распределения

Приведем результаты расчетов ФР для описанных выше моделей. Все расчеты проводились в K -нормировке.

СЕМ-модель подробно изучалась в [1], там исследовалась эволюция отношения ФР к ФР в стационарном состоянии. Такое представление решения позволило выявить интересные процессы, в частности, в области

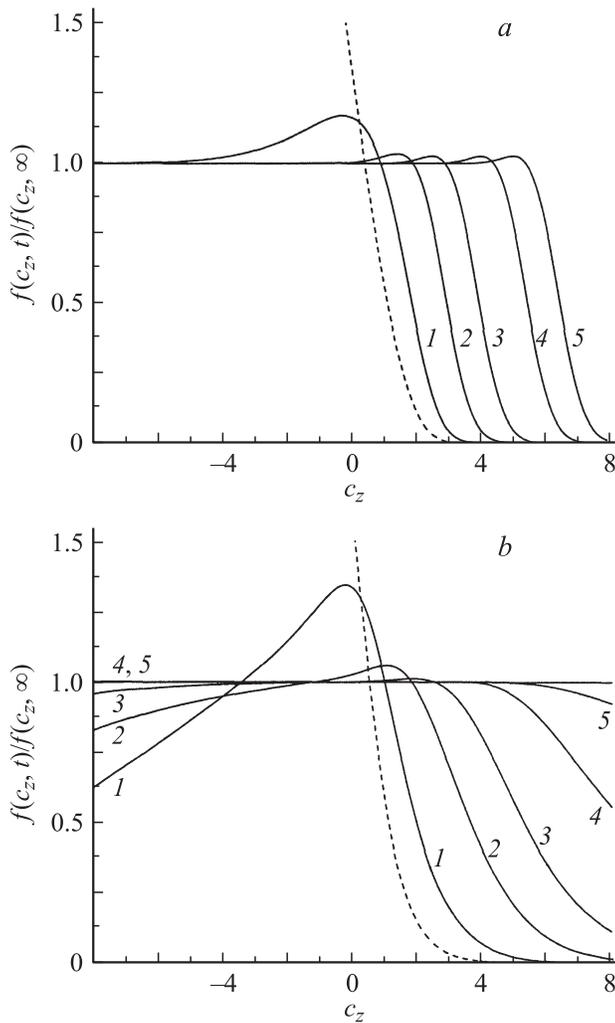


Рис. 8. Сравнение относительных функций распределения на оси симметрии в различные моменты времени для (а) СЕМ- и (б) HS-моделей при $\epsilon = 0.5$ в К-нормировке. $L_0 = 64$, $N_0 = 128$. 1 — $t = 1$, 2 — 3, 3 — 5, 4 — 8, 5 — 10.5. Штриховая кривая соответствует $t = 0$.

больших скоростей. Для СЕМ-модели такое отношение строилось просто, поскольку имелось аналитическое решение для стационарного состояния. Для других моделей при построении относительной ФР использовалось в качестве стационарной ФР численное решение для достаточно большого времени.

В случае HS-модели релаксация ФР в диапазоне скоростей $c_p = 0$, $-8 \leq c_z \leq 8$ происходит значительно более равномерно, чем для СЕМ-модели. Так, при $\epsilon = 0.5$ (рис. 8) в области отрицательных скоростей ко времени $t = 1$ для СЕМ-модели процесс релаксации уже закончился и ФР вышла на стационарное состояние, а для HS-модели релаксация в области $c_z < 0$ заканчивается только при $t = 8$. Ко времени $t = 11$ в случае HS-модели релаксация завершается во всем диапазоне скоростей. В случае СЕМ-модели выход на стационарное состояние в области положительных скоростей заканчивается только ко времени $t = 15$.

При $\epsilon = 1.5$ для HS-модели не удается построить ФР при $t = 10$. Решения при $t = 3$ и 5 практически совпадают при $|c_z| < 6$. В качестве $f(c_z, \infty)$ выбиралась ФР при $t = 5$.

Еще более сильно проявляются все перечисленные эффекты при $\epsilon = 2$ (рис. 9). Здесь уже в качестве стационарной рассматривается ФР при $t = 3.5$.

На рис. 10 показана стационарная ФР при разных значениях ϵ . Видно, как с ростом напряженности поля происходит все больший разогрев ионов и все меньшее их число оказывается в области отрицательных скоростей, температура ионов повышается.

Таким образом, при больших значениях ϵ восстанавливать ФР по моментам с помощью стандартного моментного метода трудно. Ниже будут намечены пути преодоления этих трудностей.

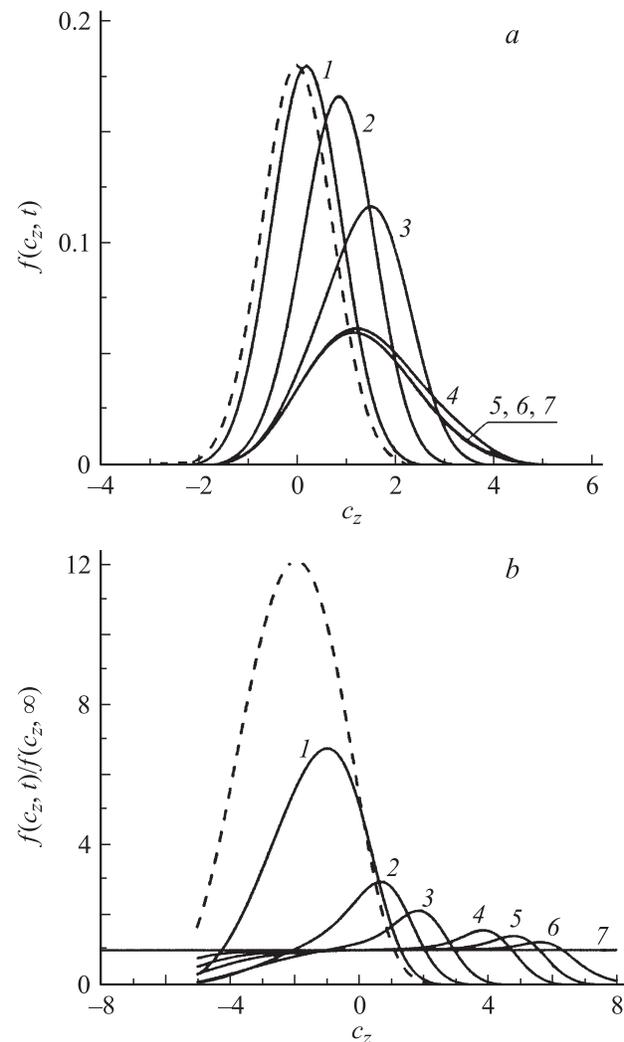


Рис. 9. Функция распределения на оси симметрии в различные моменты времени для HS-модели при $\epsilon = 2$ в К-нормировке. $L_0 = 128$, $N_0 = 128$. а — $f(c_z, t)$, б — $f(c_z, t)/f(c_z, \infty)$. 1 — $t = 0.1$, 2 — 0.5, 3 — 1, 4 — 2, 5 — 2.5, 6 — 3, 7 — 3.5. Штриховая кривая соответствует $t = 0$. Кривые 5–7 на рис. 9, а совпадают.

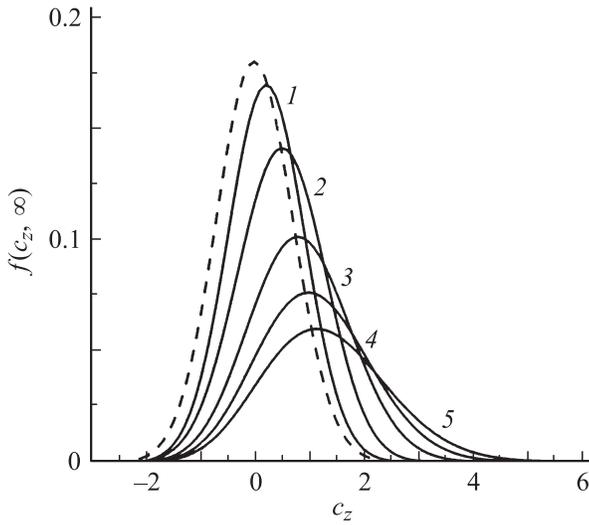


Рис. 10. Стационарная функция распределения $f(c_z, \infty)$ при различных значениях ϵ для HS-модели в K -нормировке. $L_0 = 128$, $N_0 = 128$. 1 — $\epsilon = 0.2$, 2 — 0.5, 3 — 1, 4 — 1.5, 5 — 2. Штриховая кривая соответствует $t = 0$.

Если для СЕМ-модели распределение по скоростям в поперечном направлении (по c_p) в процессе релаксации остается максвелловским, то для других моделей происходит разогрев ионов в поперечном направлении. Поэтому наряду с представлением ФР на оси симметрии строились зависимости ФР от угла поворота ψ в плоскости (c_x, c_z) при нескольких значениях модуля скорости

$$c = \sqrt{c_x^2 + c_z^2}.$$

Большое число таких зависимостей представлено в [5]. Были выполнены подробные расчеты для трех моделей: HS-модели, СЕМ-модели и кулоновского взаимодействия. Установлена сильная зависимость функции $f(\psi)$ от модели взаимодействия. Для всех моделей с ростом модуля скорости c на зависимостях $f(\psi)$ наблюдается обострение максимума при $\psi = 0$, т.е. в направлении поля.

Для кулоновского взаимодействия исследовался вопрос, как эффект убегания проявляется на эволюции ФР. Было установлено, что в отличие от других моделей в этом случае величина максимума на зависимости $f(\psi)$ в области больших скоростей со временем не выходит на насыщение, а постоянно растет.

При использовании стандартного моментного метода для кулоновского взаимодействия было установлено, что довольно быстро (на не очень больших временах) разложение ФР не сходится. Для улучшения сходимости был осуществлен переход к другому базису — вместо разложения около весового максвеллиана с температурой атомов использовался максвеллиан с более высокой температурой (более подробно об этом см. ниже). Были проведены расчеты процесса убегания ионов с использованием такого модифицированного моментного метода.

Из этих расчетов следует, что функция распределения в области очень больших скоростей при $\psi = 0$ соизмерима с ФР в области тепловых скоростей. Несмотря на то что с помощью модифицированного моментного метода удалось продвинуться по времени только на единицу, получена важная дополнительная информация об убегании ионов. Так, например, при $\epsilon = 1$ за время от $t = 3$ до 4 при $c = 5$ максимальное значение ФР возрастает почти на порядок.

3. Способы улучшения сходимости

Рассмотрим два способа улучшения сходимости разложения ФР по моментам. Первый — это разложение ФР по сферическим полиномам Эрмита, но с измененной температурой весового максвеллиана, и второй — разложение ФР только по сферическим гармоникам.

3.1. Модифицированный моментный метод

Рассмотрим возможность улучшения сходимости моментного метода путем изменения базиса — повышения температуры весового максвеллиана. Ранее о необходимости изменения базиса говорилось в работах [6–8]. Однако в этих работах построение МЭ в новом базисе проводилось путем вычисления сложных интегралов и приводило к большим затратам машинного времени [7] при не всегда удовлетворительной точности. При этом удавалось строить МЭ только с достаточно малыми индексами ($l \leq 7$, $r \leq 10$).

Рассмотрим разложения ФР в двух базисах с температурами весовых максвеллианов T_0 и T_1 и с коэффициентами разложения соответственно C_j^0 и C_j^1 . Векторы C^0 и C^1 при переходе от базиса T_0 к базису T_1 связаны соотношением

$$C_j^1 = \sum_{k=0}^{\infty} D_{j,k} (W_1, W_0) C_k^0. \quad (9)$$

Матрица перехода $D_{r,k,l}$ для данной ситуации имеет следующий вид [3]:

$$D_{r,k,l} = \frac{(-1)^{r+k} k!}{r!} \frac{T_0^{r+l/2}}{T_1^{k+l/2}} \frac{(T_1 - T_0)^{k-r}}{(k-r)!}. \quad (10)$$

Обозначим отношение температур базисов через $RT = T_1/T_0$ назовем модифицированным моментным методом такой метод, в котором параметр RT отличен от единицы. Вообще говоря, этот параметр может изменяться со временем. Если максвеллиан в интеграле столкновений разложить по новому базису, то можно получить для МЭ $\bar{\Lambda}_{r,r_1,l}$ в новом базисе при несовпадении температур T_1 и T_0 следующие формулы:

$$\bar{\Lambda}_{r,r_1,l}(T_1) = \frac{1}{g_{r,l}} \sum_k \left(1 - \frac{T_0}{T_1}\right)^k K_{r_1,l,k,0}^{r,l}(T_1). \quad (11)$$

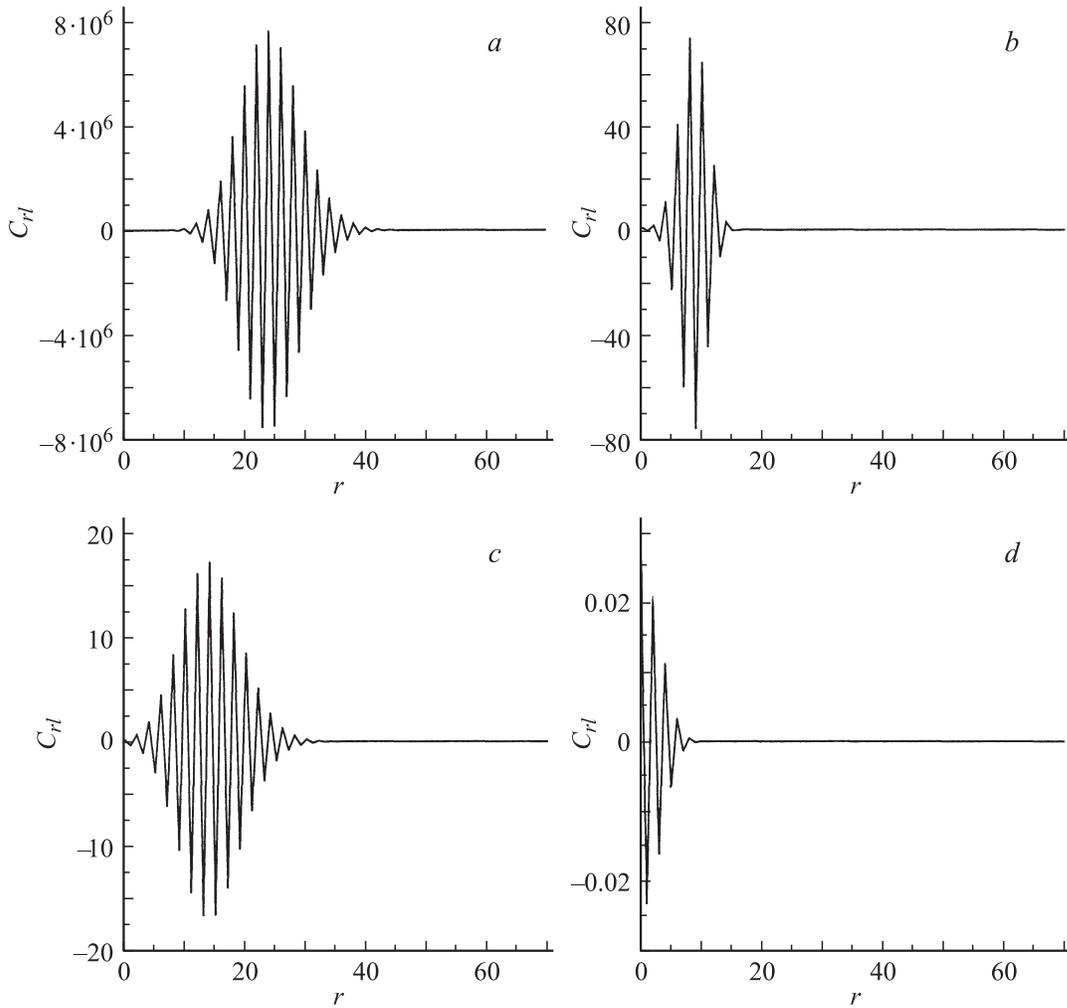


Рис. 11. Зависимость моментов C_{rl} от r для СЕМ-модели в двух базисах с температурами T_0 и T_1 ; $RT = 1.5$, $L_0 = 37$, $R_0 = 70$. a — Bas0, $l = 0$; b — Bas1, $l = 0$; c — Bas0, $l = 10$; d — Bas1, $l = 10$.

Определения нормировочных множителей $g_{r,l}$ и МЭ интеграла столкновений $K_{r_1,l,k,0}^{r,l}$ даны в [1]. Отметим, что в наших программах расчета МЭ, основанных на рекуррентных соотношениях, обязательно считаются все нелинейные МЭ $K_{r_1,l,k,0}^{r,l}$. Расчет $\bar{\Lambda}_{r,r_1,l}(T_1)$ по формуле (11) значительно проще и позволяет продвинуться значительно дальше, чем расчеты с использованием прямого численного интегрирования.

Для любых максвелловских молекул выражение (11) упрощается, поскольку МЭ отличны от нуля только, если $k = r - r_1$:

$$\bar{\Lambda}_{r,r_1,l}(T_1) = \left(1 - \frac{T_0}{T_1}\right)^{r-r_1} K_{r_1,l,r-r_1,0}^{r,l}(T_1).$$

В случае резонансной перезарядки для максвелловских молекул (СЕМ-модель) матричные элементы $K_{r_1,l,k,0}^{r,l}$ принимают вид:

$$K_{r_1,l,k,0}^{r,l} = \delta_{l0}\delta_{kr}\delta_{r_10} - \delta_{r_1r}\delta_{k0}.$$

В предыдущем разделе был использован упрощенный модифицированный метод, в котором матричные эле-

менты интеграла столкновений вообще не пересчитывались. Моментная система решалась в исходном базисе и строились моменты C_{rl}^0 . Затем по формуле (9) можно определить моменты C_{rl}^1 в новом базисе T_1 . Такой переход приводит к улучшению сходимости при восстановлении ФР по ее моментам. При этом отношение T_1/T_0 следует выбирать тем больше, чем больше произведение ϵt .

В качестве примера рассмотрим СЕМ-модель при $\epsilon = 1$ и $t = 5$. При этом моменты C_{rl} в базисе T_0 становятся очень большими. На рис. 11 представлены моменты, в базисе T_0 (Bas0) и T_1 (Bas1) при $RT = 1.5$. Видно, что в подпространстве $l = 0$ переход в новый базис сопровождается изменением максимального значения C_{rl} на ~ 5 порядков, в подпространстве $l = 10$ — на ~ 3 порядка. В обоих подпространствах происходит смещение распределения C_{rl} в область малых r — координата максимума сильно уменьшается, например, при $l = 0$, она изменяется от 24 до 9.

Таким образом, даже сравнительно небольшое изменение температуры базиса приводит к очень сильному

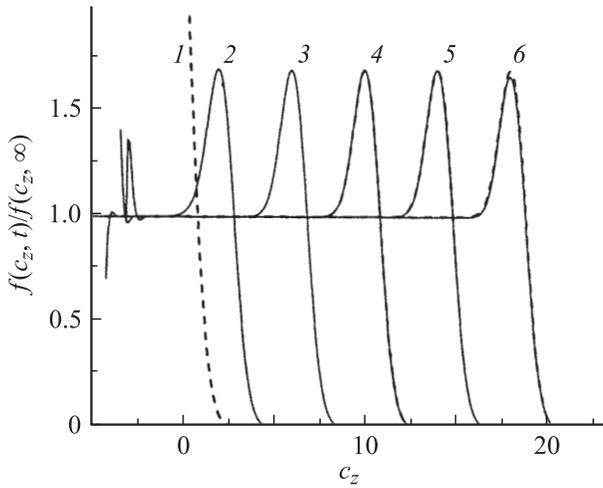


Рис. 12. СЕМ-модель. $\epsilon = 2$. Сплошные кривые: 1 — $t = 0$, 2 — 1, 3 — 3, 4 — 5, 5 — 7, 6 — 9. Штриховые линии соответствуют точным аналитическим решениям. $b = 1.5$.

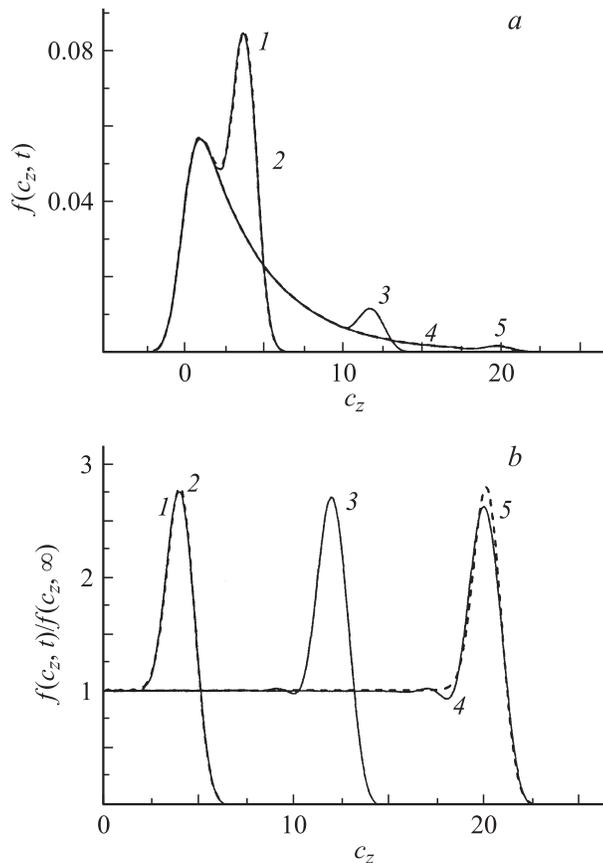


Рис. 13. СЕМ-модель. $\epsilon = 4$. Сплошные кривые: 1 — $t = 1$, 3 — 3, 5 — 5. Штриховые кривые: 2 — $t = 1$, 4 — 5. Штриховые линии соответствуют точным аналитическим решениям.

уменьшению максимума на зависимости C_{rl} от r , что, как было показано выше на примере кулоновского взаимодействия, приводит к облегчению восстановления ФР по ее моментам.

Рассмотрим на примере СЕМ-модели возможности модифицированного моментного метода, когда температура T_1 весового максвеллиана меняется на каждом временном шаге. При этом на каждом временном шаге моменты $C_j(t)$ пересчитывались по формулам (9) и (10). Зависимость $T_1(t)$ выбиралась в виде

$$T_1 = T_0(1 + bt),$$

где константа b подбиралась эмпирически.

На рис. 12 представлена эволюция ФР при $\epsilon = 2$. Коэффициент b был равен 1.5. Аналогичный расчет стандартным моментным методом продемонстрирован в первой части статьи [1]. Видно, что переход к такому модифицированному методу позволяет значительно увеличить количество шагов по времени с одновременным уменьшением числа членов разложения ФР (R_0 и L_0).

На рис. 13 представлена эволюция ФР при $\epsilon = 4$. При столь сильных полях стандартный моментный метод расходится. Использование модифицированного моментного метода увеличило предел сходимости примерно в 3.5 раза: от $\epsilon t = 5$ до 18.

3.2. Разложение функции распределения по сферическим гармоникам

При переходе к моментному представлению уравнения Больцмана при разложении по сферическим полиномам Эрмита можно остановиться на этапе разложения по сферическим гармоникам, не проводя разложения по полиномам Сонина. При таком разложении не возникает ограничений, связанных с критерием Грэда, и ФР представляется в виде

$$f(\mathbf{c}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l \sum_{i=0}^1 f_{l,m}^i(c) Y_{l,m}^i(\Theta, \varphi). \quad (12)$$

Здесь $Y_{l,m}^i(\Theta, \varphi)$ — сферические гармоники (см. [1]).

В [3] было показано, что в самом общем, нелинейном, случае интеграл столкновений можно записать так:

$$I(\mathbf{c}) = \sum_{l,m,i} Y_{l,m}^i(\Theta, \varphi) I_{l,m}^i(c) \quad (13)$$

и

$$I_{l,m}^i(c) = \sum_{l_1, m_1, i_1, l_2, m_2, i_2} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} G_{l_1, m_1, i_1, l_2, m_2, i_2}^{l, m, i}(c, c_1, c_2) \times f_{l_1, m_1}^{i_1}(c_1) f_{l_2, m_2}^{i_2}(c_2) dc_1 dc_2. \quad (14)$$

Нелинейные ядра $G_{l_1, m_1, i_1, l_2, m_2, i_2}^{l, m, i}$ могут отличаться от нуля только, если $|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2$, $l + l_1 + l_2$ — четное число (обобщенная теорема Гекке), $m = |m_1 \pm m_2|$ и $i + i_1 + i_2$ — четное число. Показано также, что

$$G_{l_1, m_1, i_1, l_2, m_2, i_2}^{l, m, i}(c, c_1, c_2) = \sum_{m_1, i_1, m_2, i_2}^{m, i} (l, l_1, l_2) G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2), \quad (15)$$

где $\sum_{m_1, i_1, m_2, i_2}^{m, i} (l, l_1, l_2)$ — числовые коэффициенты, которые легко выражаются через коэффициенты Клебша—Гордона [3].

Каждое ядро $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$ представляется в виде

$$G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) = G_{l_1, l_2}^{(+l)}(c, c_1, c_2) - G_{l_1, l_2}^{(-l)}(c, c_1, c_2). \quad (16)$$

Если обобщить (14) на случай двухкомпонентной смеси и положить функцию, на которой происходит рассеяние, равной максвелловскому распределению, то перейдем к линейному ядру. В этом случае имеем $l_2 = m_2 = i_2 = 0$, обобщенная теорема Гекке переходит в обычную ($l_1 = l, m_1 = m, i_1 = i$), числовые коэффициенты $\sum_{m, i, 0, 0}^{m, i} (l, l, 0) = 1$ и из (14), (15) получаем

$$I_{l, m}^i(c) = -k(c)f_{l, m}^i(c) + \int_0^\infty L_l^{(+)}(c, c_1)f_{l, m}^i(c_1)dc_1. \quad (17)$$

Гекке [9] построил разложение по сферическим гармоникам линейаризованного ядра Гильберта [10] для модели твердых шаров и получил формулы для $L_l^{+}(c, c_1)$ и $k(c)$. В наших обозначениях они имеют вид

$$k(c) = \frac{e^{-c^2}}{\pi^{1/2}} + (1/2c + c)\Phi(c), \quad (18)$$

$$L_l^{+}(c, c_1) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/2} e^{-c^2} 4\pi \left[\frac{1}{2l+1} \frac{m_i^{2l+1}}{(cc_1)^{l+1}} + \frac{1}{cc_1} \int_{|u| < mi} ue^{u^2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \Phi(u) P_l(u/c) P_l(u/c_1) du \right]. \quad (19)$$

Здесь $\Phi(c)$ — интеграл вероятности, а $mi = \min(c, c_1)$.

В [3] показано, что ядра $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$ в (15) выражаются через МЭ следующим образом:

$$G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) = M(c) \sum_r \sum_{r_1} \sum_{r_2} c^l S_{l+1/2}^r(c^2) \times K_{r_1 l_1, r_2 l_2}^{r l} \frac{c_1^{l_1} S_{l_1+1/2}^{r_1 l_1}(c_1^2)}{\sigma_{r_1 l_1}} \frac{c_2^{l_2} S_{l_2+1/2}^{r_2 l_2}(c_2^2)}{\sigma_{r_2 l_2}}. \quad (20)$$

Здесь $S_{l_2+1/2}^{r_2 l_2}(c_2^2)$ — полиномы Сонина, а $\sigma_{r l}$ — их нормировочные множители.

Формулы (20) позволяют рассчитать ядра $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$ для произвольного закона взаимодействия в линейном ($l_2 = 0, l_1 = l$ или $l_1 = 0, l_2 = l$) и нелинейном случаях, конечно, если известны МЭ с большими индексами. Напомним, что рекуррентные соотношения, с помощью которых строятся МЭ, справедливы как для МЭ полного интеграла столкновений, так и по отдельности для МЭ приходного и уходного членов. Нетрудно видеть, что линейное приходное ядро $L_l^{+}(c, c_1)$ представляется в виде

$$L_l^{+}(c, c_1) = M(c) \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{r_1=0}^{\infty} \frac{1}{\sigma_{r_1 l}} c^l S_{l+1/2}^r(c^2) \times K_{r_1 l, 00}^{r l+} c_1^{l_1} S_{l_1+1/2}^{r_1 l_1}(c_1^2). \quad (21)$$

Продемонстрируем на модели твердых шаров в случае слабого поля преимущества расчета ФР при разложении только по гармоникам.

Как отмечалось выше, при расчете чепмен-энскоговской добавки $\varphi(\mathbf{c})$ с помощью нестационарного моментного метода удалось продвинуться до $c = 9.8$, даже учитывая 250 членов разложения по полиномам Сонина. При этом наметилась тенденция к насыщению для стационарной ФР (см. рис. 2). При малых ϵ ФР $f(\mathbf{c}) = M(c)(1 + \epsilon\varphi_1(c)P_1(\cos\Theta))$ и в пространственно-однородном случае уравнение Больцмана сводится к следующему уравнению для $\varphi_1(c)$:

$$\frac{\partial \varphi_1(c, t)}{\partial t} - 2c = \int_0^\infty \frac{M(c_1)}{M(c)} L_l^{+}(c, c_1) \varphi_1(c_1, t) c_1^2 dc_1 - k(c) \varphi_1(c, t). \quad (22)$$

Наши аналитические исследования уравнения (22) при $t \rightarrow \infty$ показали, что для модели твердых шаров, когда $k(c)$ и $L_l^{+}(c, c_1)$ определяются формулами (18) и (19), в стандартной нормировке $\varphi_1(c, \infty) = 6$.

Нестационарное уравнение (22) решалось методом Рунге–Кутта четвертого порядка. Предварительно в скоростных точках c и c_1 вычислялось матричное представление ядра Гекке (19). Результаты расчетов представлены на рис. 14. Как видно из рисунка, подход с помощью ядер позволяет легко увеличить область сходимости ФР от 10 тепловых скоростей до 100.

Выражение (21) дает принципиальную возможность строить линейные ядра для произвольного потенциала взаимодействия. Однако прямой расчет по формуле (21) приводит к проблемам, связанным с обрезанием ряда. Ранее такая проблема была рассмотрена в [11] и [12] для линейных ядер в случае псевдомаквелловских молекул и твердых шаров с использованием асимптотических разложений. Этот подход позволяет вычислять ядра с высокой степенью точности, что демонстрируется сравнением с аналитическим выражением Гекке (19).

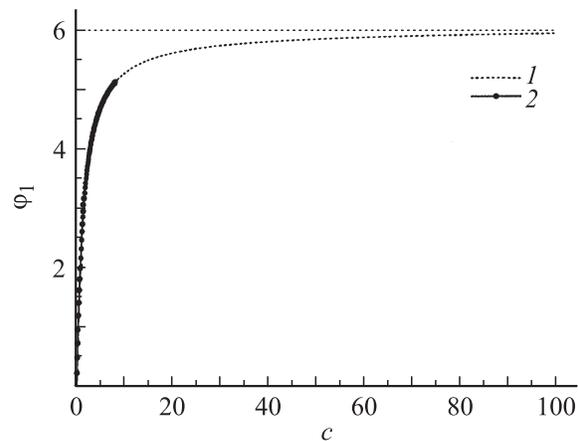


Рис. 14. Стационарная чепмен-энскоговская функция $\varphi_1(c)$ для модели твердых шаров. 1 — решение уравнения (22) с ядром Гекке (19), 2 — решение моментной системы (13) из [1].

Отметим, что при рассмотрении диффузии в нейтральном газе (без электрического поля) чепмен-энскоговская поправочная функция φ_d связана с φ_1 равенством

$$\varphi_d(c, t) = -\frac{1}{2} \varphi_1(c, t). \quad (23)$$

Отсюда при $t \rightarrow \infty$ получаем соотношение Эйнштейна между коэффициентом диффузии и подвижностью. Кроме того, это означает, что, решая пространственно-однородную задачу в слабом электрическом поле, можно одновременно решить диффузионную задачу. Ранее $\varphi_d(c, \infty)$ была построена в [13]. Стационарное решение строилось путем решения интегрального уравнения. Расчеты в [13] были выполнены до $c = 6$. Было построено отношение полученного нами стационарного решения к решению [13]. С точностью до четвертой значащей цифры, а именно с такой точностью приведены данные в [13], наши расчеты совпали.

Заключение

Моментный метод решения уравнения Больцмана получил дальнейшее развитие в связи с новыми результатами по вычислению матричных элементов с большими значениями индексов.

Продемонстрированы возможности моментного метода при наличии большого количества МЭ для решения кинетических задач, описывающих поведение ионов в электрическом поле.

В нестационарном процессе построены не только коэффициенты переноса и физические моменты, но и функция распределения по скоростям.

Намечены реальные пути преодоления ограничений стандартного моментного метода, в частности, связанные с критерием Греда.

Работа поддержана EOARD N FA8655-03-D-0001/0017 (CRDF Project N RUM1-1500-ST-04), грантом РФФИ № 09-08-01017-а и научной программой СПбНЦ РАН.

Список литературы

- [1] Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 2. С. 8–17.
- [2] Ender A.Ya., Ender I.A. // Phys. Fluids. 1999. Vol. 11. P. 2720–2730.
- [3] Эндер А.Я., Эндер И.А. Интеграл столкновений уравнения Больцмана и моментный метод. СПб: Изд-во СПбГУ 2003. 224 с.
- [4] Каган Ю.М., Перель В.И. // ДАН СССР. 1954. Т. 98. С. 575–578.
- [5] Ender A.Y., Ender I.A., Gerasimenko A.B. // Open Plasma Physics J. 2009. Vol. 2. P. 24–62.
- [6] Mason E.A., McDaniel E.W. // Transport Properties of Ions in Gases. NY: Wiley, 1988. 489 p.
- [7] White R.D., Ness K.F., Robson R.E. // Appl. Surface Sci. 2002. Vol. 192. P. 26–49.
- [8] Kumar K., Skullerud H.R., Robson R.E. // Aust. J. Phys. 1980. Vol. 33. P. 343–448.
- [9] Hecke E. // Math. Zs. 1922. Bd. 12. S. 274–286.
- [10] Hilbert D. // Math. Ann. 1912. Bd. 72. S. 562–577.
- [11] Бакалейников Л.А., Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 9. С. 6–15.
- [12] Тропп Э.А., Бакалейников Л.А., Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 9. С. 12–23.
- [13] Tompson R.V., Loyalka S.K. // Phys. Fluids. 1987. Vol. 30. P. 2073–2075.