Metóda Monte Carlo vo fyzike nízkoteplotnej plazmy

Ľubomír Host
Prof. RNDr. Viktor Martišovitš, DrSc.

28. marca 2005

- Úvod
- Cieľ práce
- Rezonančná výmena náboja
- Metóda Monte Carlo
- Výsledky
- Záver
- Literatúra

Rezonančná výmena náboja

Reakcia:

$$A^{\pm} + A(nl) \longrightarrow A(n'l') + A^{\pm} \qquad (1)$$

Reakcia je spojená s procesom prechodu valenčného elektrónu cez potenciálovú bariéru v príťažlivom poli susedných častíc.

– vzácne plyny: $\mathrm{He} - \mathrm{He}^{+},\ \mathrm{Ne} - \mathrm{Ne}^{+},\ \mathrm{Ar} - \mathrm{Ar}^{+}$ [5]

Metóda Monte Carlo

– numerická metóda riešenia matematických úloh pomocou modelovania náhodných veličín a štatistického odhadu ich charakteristík

Implementácia

Súčasné simulovanie dostatočne veľkej skupiny iónov – vysoké nároky na operačnú pamäť, pretože treba uchovávať informáciu o polohe a rýchlosti každého iónu z predchádzajúceho kroku

– na základe predpokladov však možno simulovať postupne: jeden ión za druhým

Aproximácia studeného plynu

Teoretický model rezonančnej výmeny náboja v aproximácii studeného plynu je založený na nasledujúcich predpokladoch:

- atómy (molekuly) neutrálneho plynu sa nepohybujú
- koncentrácia iónov v neutrálnom plyne je malá
- po zrážke iónu s neutrálnou molekulou má ión nulovú rýchlosť (symetrická nábojová výmena)
- nábojová výmena nastáva okamžite
- elektrické pole, koncentrácia molekúl neutrálneho plynu a iónov je nezávislá od polohy

Boltzmannova kinetická rovnica v aproximácii studeného plynu vyzerá

$$\frac{\partial f(v,t)}{\partial t} + a(t)\frac{\partial f(v,t)}{\partial v} = -n|v|\sigma f(v,t) + \qquad (2)$$
$$+ \frac{n}{V}\delta\left(\frac{v}{V}\right)\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |v'|\sigma f(v',t)dv'$$

Normalizácia:

$$\tau = t\sqrt{n\sigma a}, \qquad u = v/V, \qquad V = \sqrt{a/n\sigma} \qquad (3)$$

$$\frac{\partial \varphi(u,\tau)}{\partial \tau} + \frac{\partial \varphi(u,\tau)}{\partial u} = -|u|\varphi(u,\tau) + \qquad (4)$$
$$+ \delta(u)\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |u'|\varphi(u',\tau)du'$$

$$\varphi(u,\tau) = \frac{f(v,t)}{n_+}\frac{dv}{du} \qquad (5)$$

Časová závislosť driftovej rýchlosti iónov je daná vzťahom

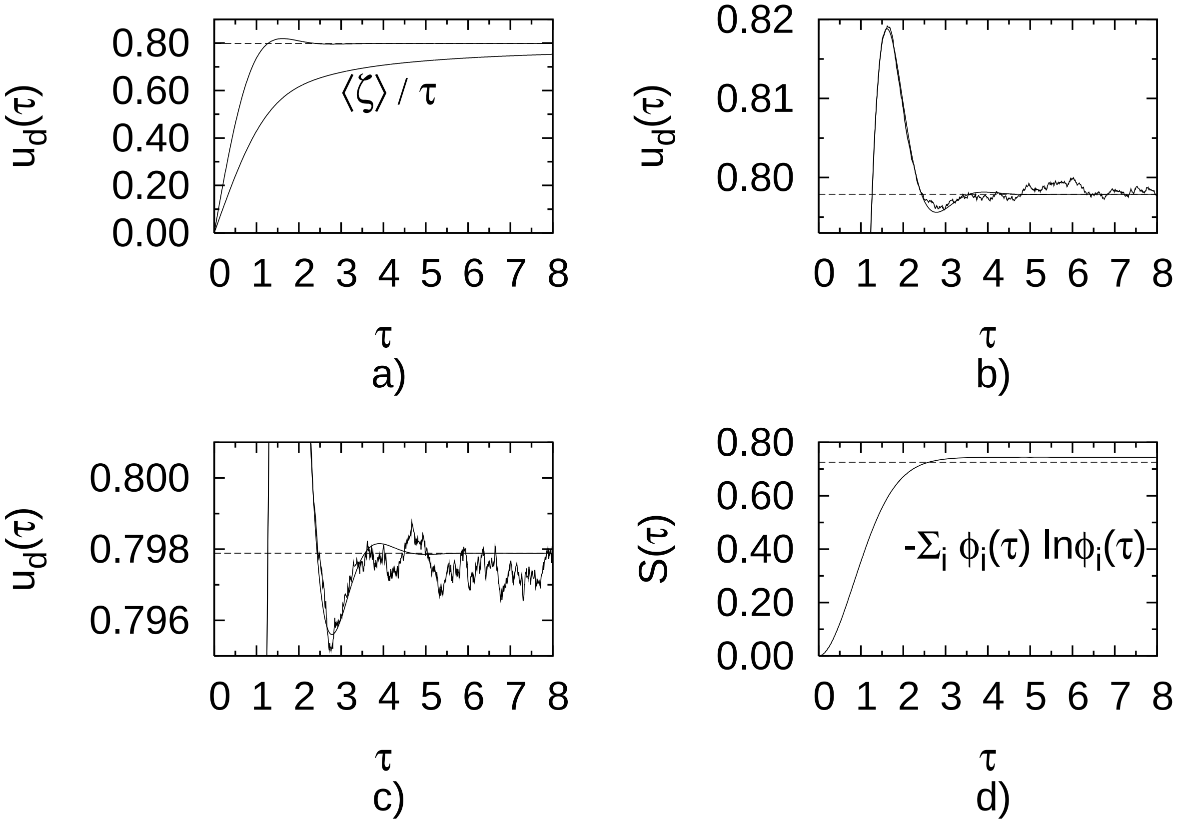
$$u_d(\tau) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} u\varphi(u,\tau)du \qquad (6)$$

$$u_d(\tau) = \int\limits_0^{\tau} u u_d(\tau-u)e^{-\frac{1}{2}u^2}du + \int\limits_0^{\infty} u\varphi(u-\tau,0)e^{\tau(\frac{1}{2}\tau-u)}du \qquad (7)$$

V prípade, že v čase $\tau = 0$ sú ióny v pokoji (majú nulové rýchlosti), je distribučná funkcia $\varphi(u,0) = \delta(u)$. Ustálená hodnota driftovej rýchlosti a rovnovážna distribučná funkcia potom sú

$$u_d(\infty) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \qquad v_d(\infty) = \sqrt{\frac{2}{\pi}\frac{eE\langle\lambda\rangle}{m}} \tag{8}$$

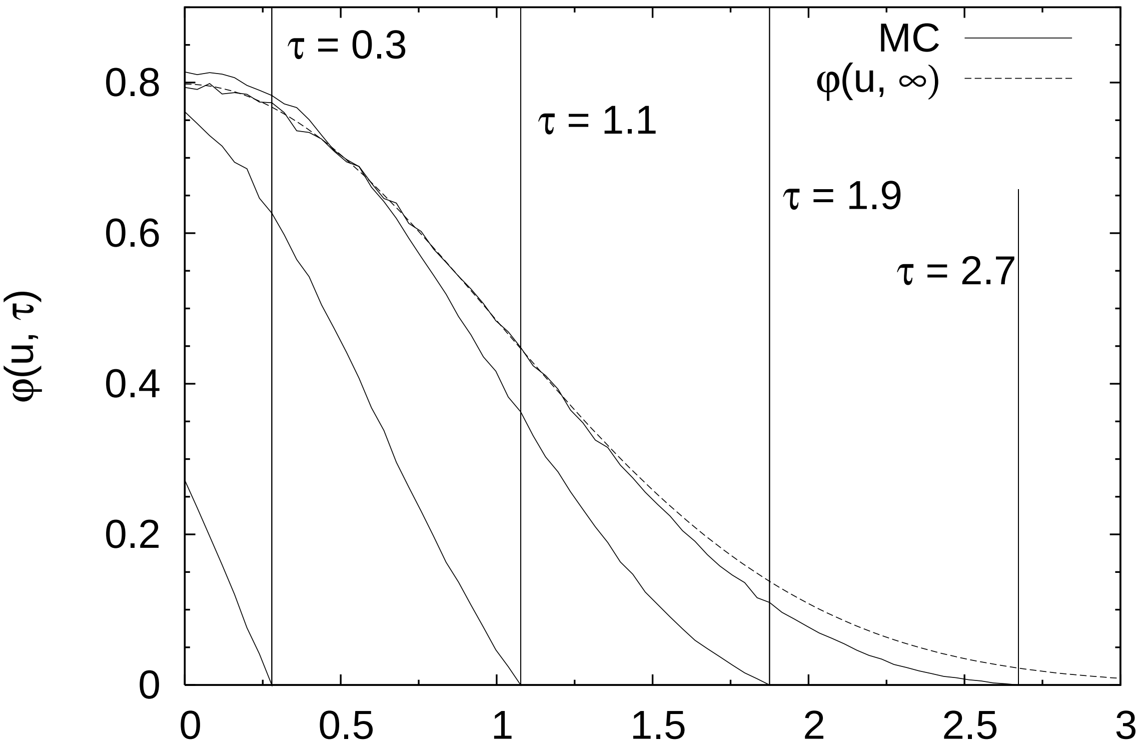
$$\varphi(u,\infty) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\Theta(u)e^{-\frac{1}{2}u^2} \tag{9}$$



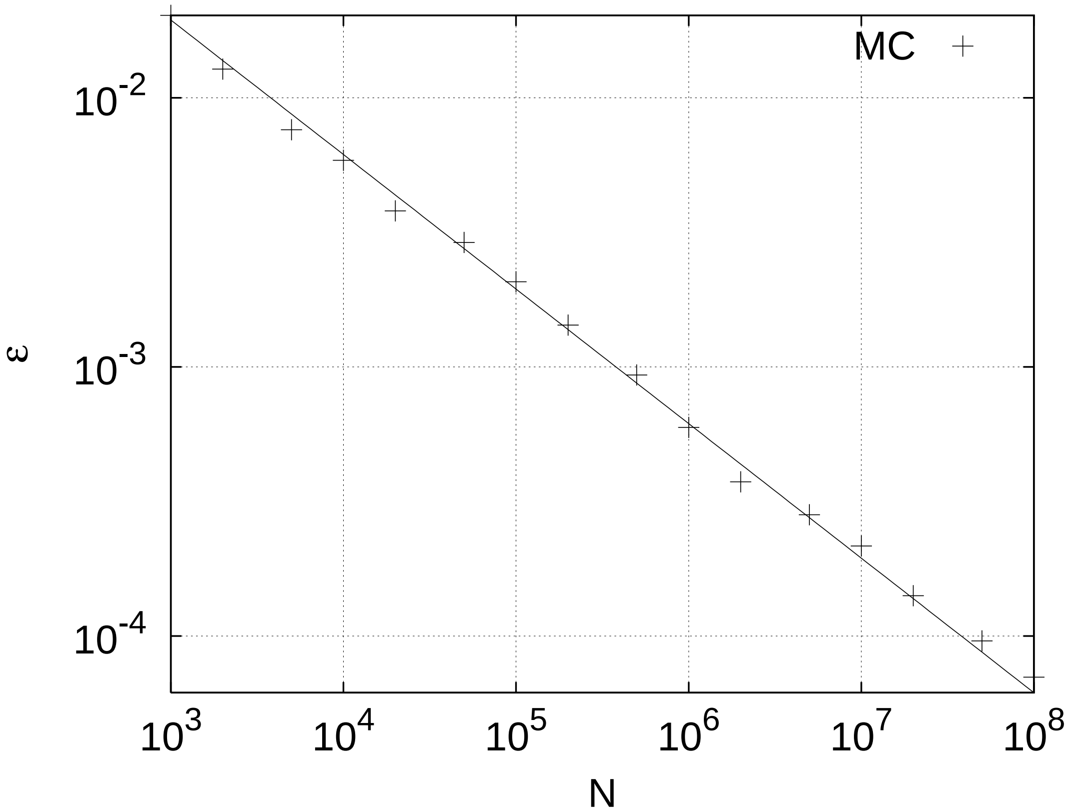
Obr. 1: a,b,c) Časový priebeh driftovej rýchlosti. d) Časový priebeh entropie iónového zväzku. Počet simulovaných iónov $N = 1.0 \times 10^6$.

Rovnovážna hodnota entropie

$$S(\infty) = \lim_{\tau\to\infty} S(\tau) = -\int\limits_{-\infty}^{\infty} \varphi(u,\infty)\ln\varphi(u,\infty)\,\mathrm{d}u =$$
$$= \ln\sqrt{\frac{\pi}{2}} + \frac{1}{2} \qquad (10)$$



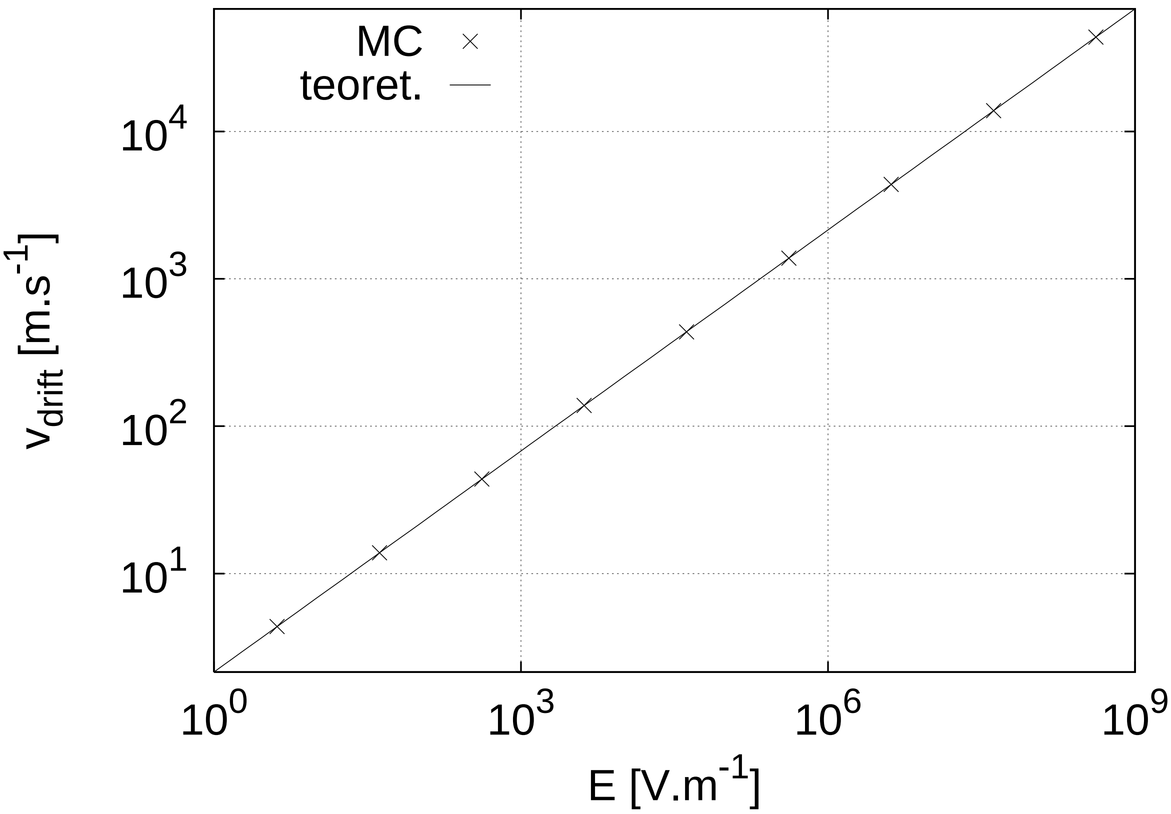
Obr. 2: Distribučná funkcia rýchlosti iónov pri teplote $T = 0$ K v niekoľkých časových okamihoch. Počet simulovaných iónov $N = 1.0 \times 10^6$



Obr. 3: Závislosť relatívnej chyby ε metódy Monte Carlo od počtu simulovaných iónov.

$$\varepsilon \;=\; \lim_{\tau\to\infty} \frac{\int\limits_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} |u_d(t) - u_d(\infty)| dt}{\Delta\tau \; u_d(\infty)} \tag{11}$$

$$\varepsilon \;\sim\; N^{-\frac{1}{2}} \sim t^{-\frac{1}{2}} \tag{12}$$



Obr. 4: Závislosť driftovej rýchlosti iónov hélia od intenzity elektrického poľa pri teplote $T = 0$ K. $\lambda = 3.0 \times 10^{-7}$ m

$$v_d = \sqrt{\frac{2}{\pi}\frac{eE\langle\lambda\rangle}{m}} \qquad (13)$$

Uvážení tepelného pohybu molekúl

$$f(v_x)dv_x = \frac{1}{\sqrt{\pi}v_T}\exp\left(-\frac{v_x^2}{v_T^2}\right)dv_x \tag{14}$$

Zavedenie bezrozmerných parametrov vychádza z pohybových rovníc:

$$x = \frac{1}{2}at^2 + v_0t \tag{15}$$

$$v = at + v_0 \tag{16}$$

$$x = K_x\xi, \qquad v = K_vu, \qquad t = K_t\tau \tag{17}$$

$$K_x = \langle\lambda\rangle \tag{18}$$

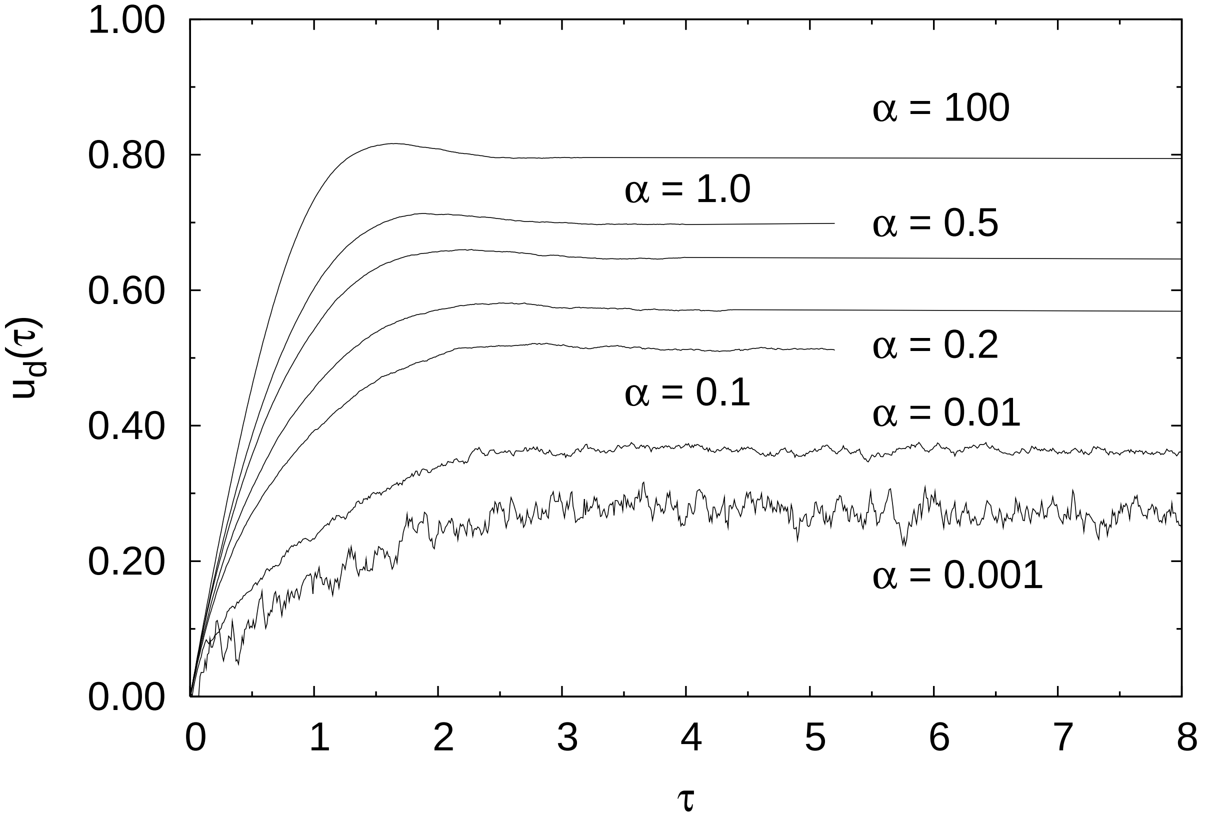
$$K_v = v_T = \sqrt{\frac{2kT_g}{m_g}} \tag{19}$$

$$K_t = \frac{K_x}{K_v} \tag{20}$$

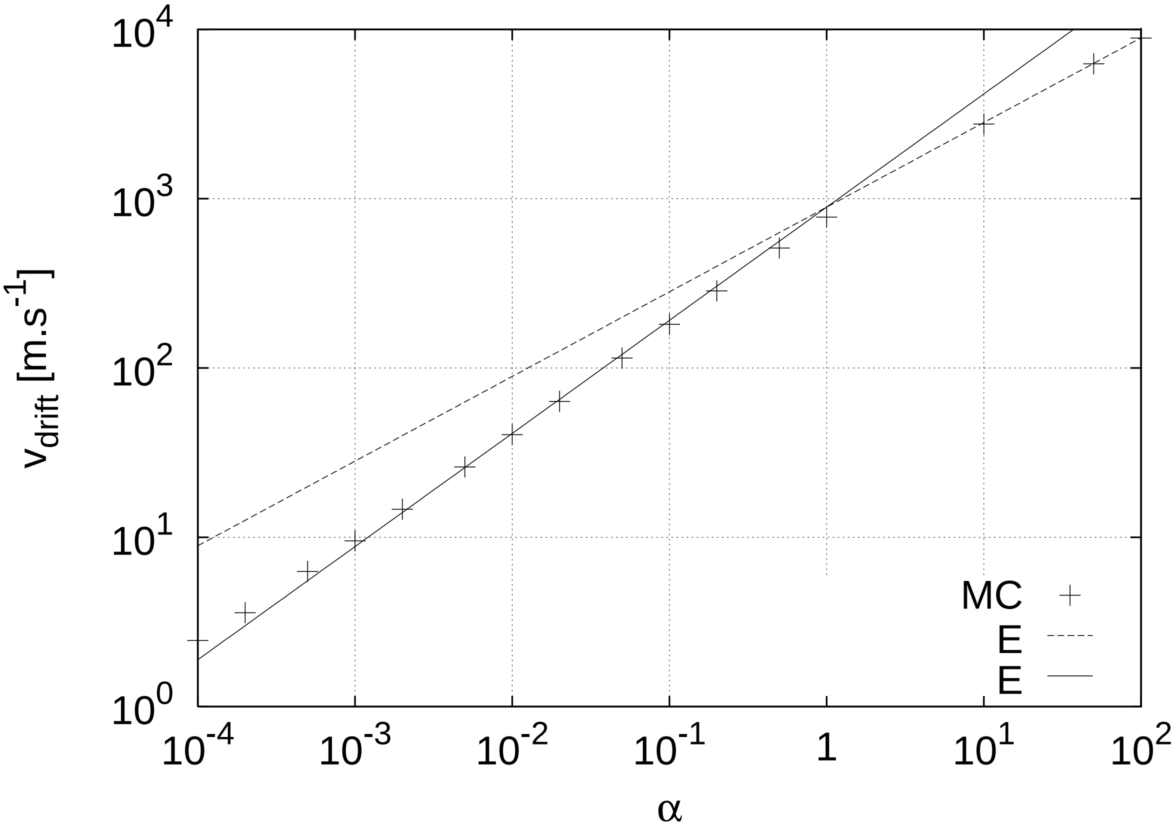
$$\alpha = \frac{aK_t^2}{K_x} = \frac{a\langle\lambda\rangle}{v_T^2} \tag{21}$$

$$\xi = \frac{1}{2}\alpha\tau^2 + u_0\tau \tag{22}$$

$$u = \alpha\tau + u_0 \tag{23}$$



Obr. 5: Časový priebeh driftovej rýchlosti pre rôzne intenzity elektrického poľa pri teplote $T = 300$ K. Počet simulovaných iónov hélia $N = 5.0 \times 10^5$.



Obr. 6: Závislosť driftovej rýchlosti od intenzity elektrického poľa. Naznačená smernica $v_{drift} = 891.05\ \alpha^{1/2}\ \mathrm{m.\ s}^{-1}$ a fitovaná smernica $v_{drift} = 891.05\ \alpha^{0.668}\ \mathrm{m.\ s}^{-1}$. Počet simulovaných iónov hélia $N = 5.0 \times 10^5$.

V prípade slabého poľa driftová rýchlosť iónov závisí ako

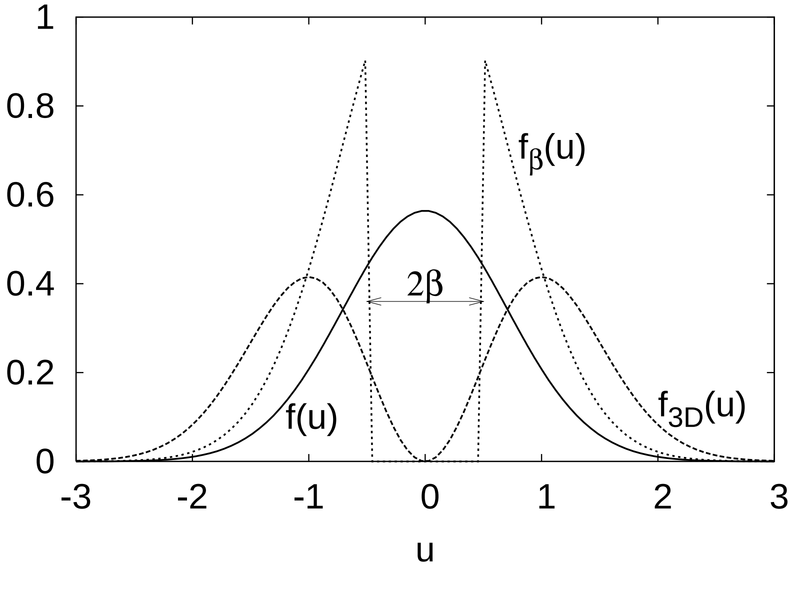
$$v_d(0) = \frac{A}{\sqrt{mkT}} eE\langle\lambda\rangle, \tag{24}$$

kde konštanta $A = 0.330 \div 0.341$ [5].

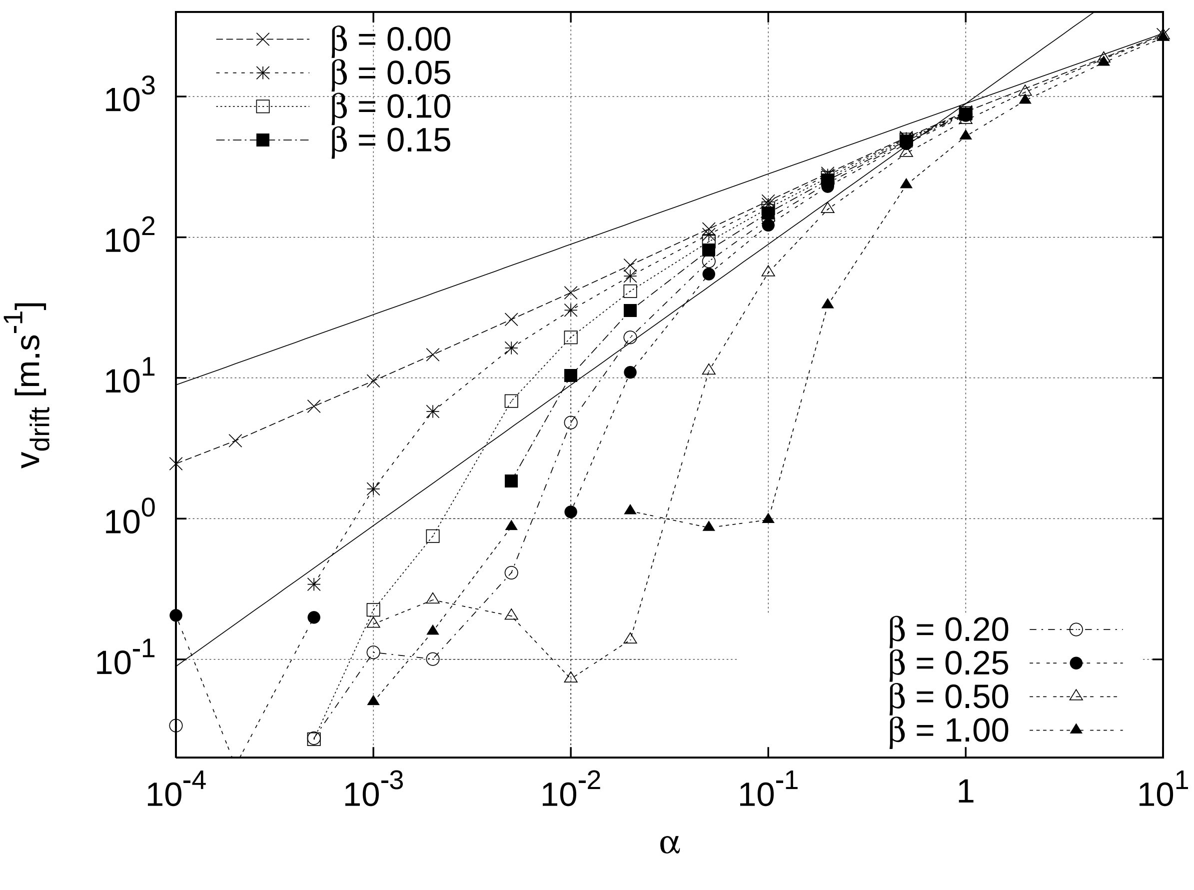
$$f(v_x)dv_x = \frac{1}{\sqrt{\pi}v_T}\exp\left(-\frac{v_x^2}{v_T^2}\right)dv_x \tag{25}$$

$$f_\beta(v_x)dv_x = \begin{cases} 0, & |v_x| < \beta v_T \\ \dfrac{1}{\mathrm{erfc}(\beta)}\ \dfrac{1}{\sqrt{\pi}v_T} \\ \qquad \exp\left(-\dfrac{v_x^2}{v_T^2}\right)dv_x, & |v_x| > \beta v_T \end{cases} \tag{26}$$

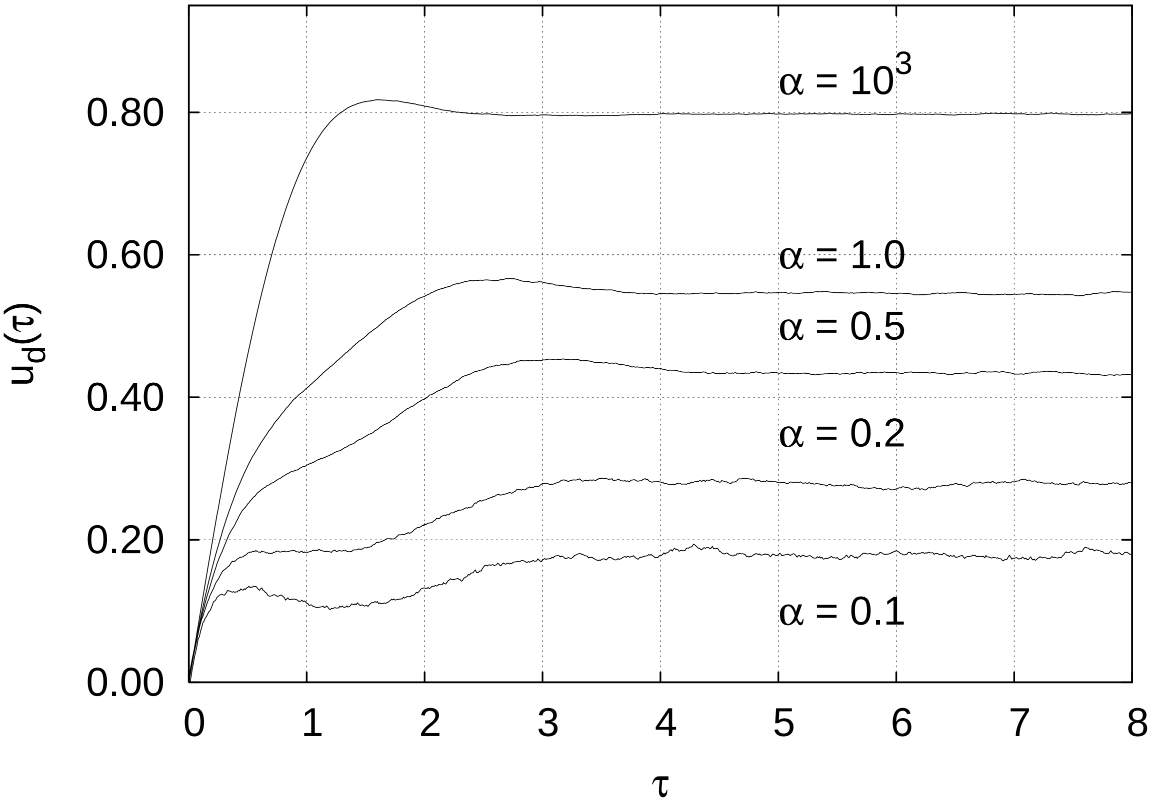
$$f_{3D}(v)dv = \frac{4\pi}{(\sqrt{\pi}v_T)^3}\exp\left(-\frac{v^2}{v_T^2}\right)v^2dv \tag{27}$$



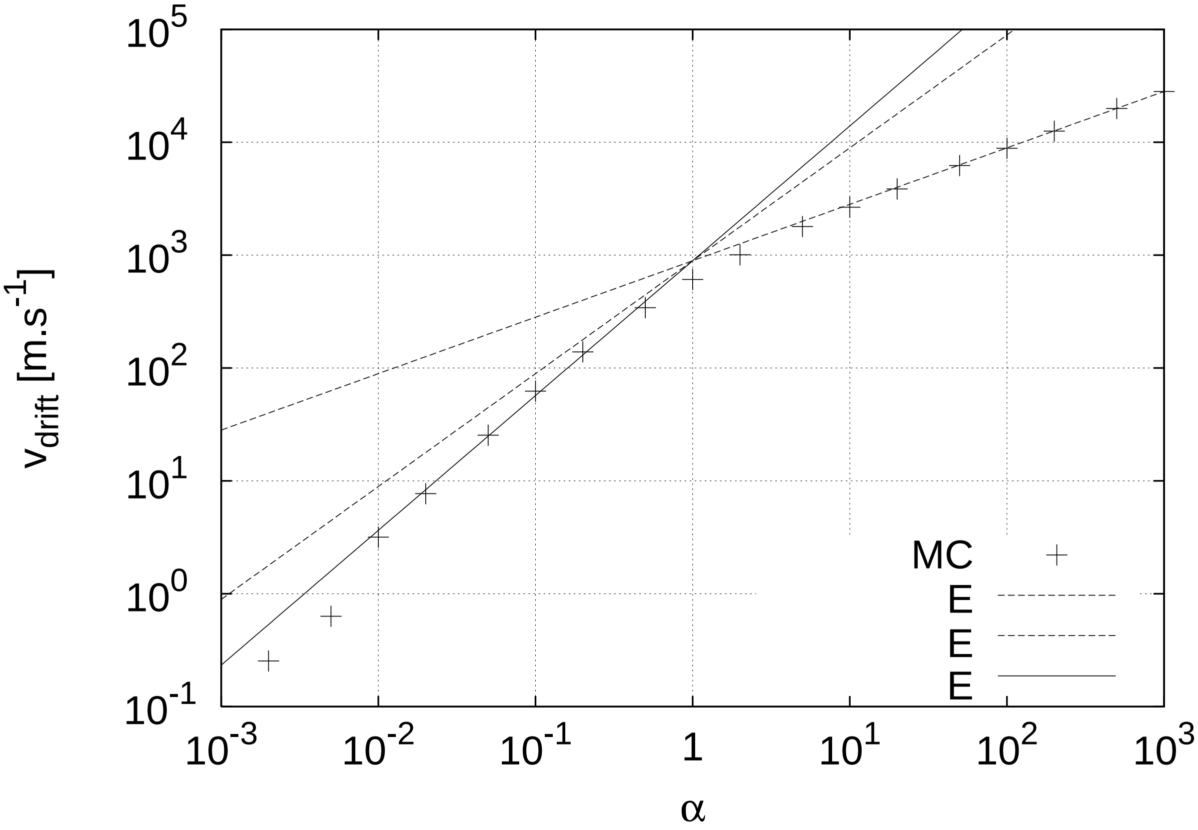
Obr. 7: Porovnanie distribučných funkcií. Zobrazené distribučné funkcie sú normalizované, $u = v/v_T$. $f_\beta(u)$ vykreslené pre $\beta = 0.5$.



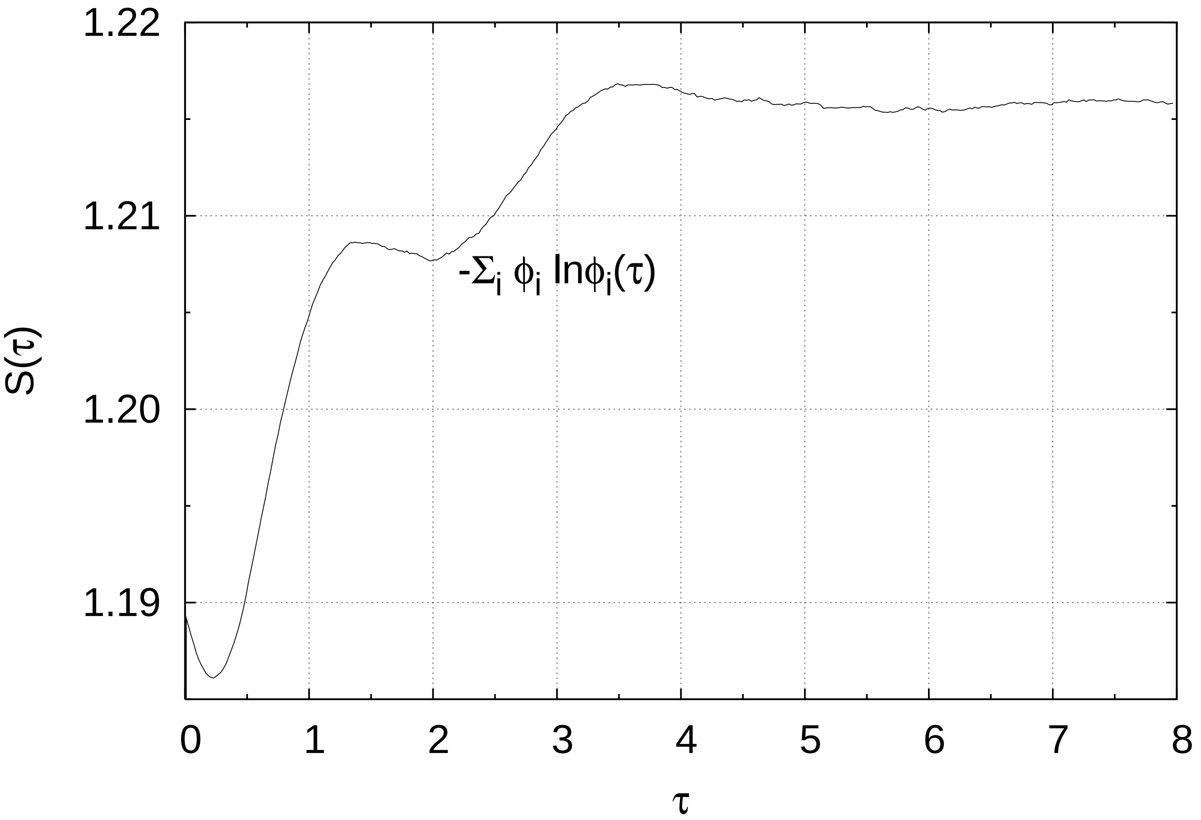
Obr. 8: Závislosť driftovej rýchlosti iónov hélia od intenzity elektrického poľa pri teplote $T = 300$ K pri rôznych hodnotách koeficientu β.



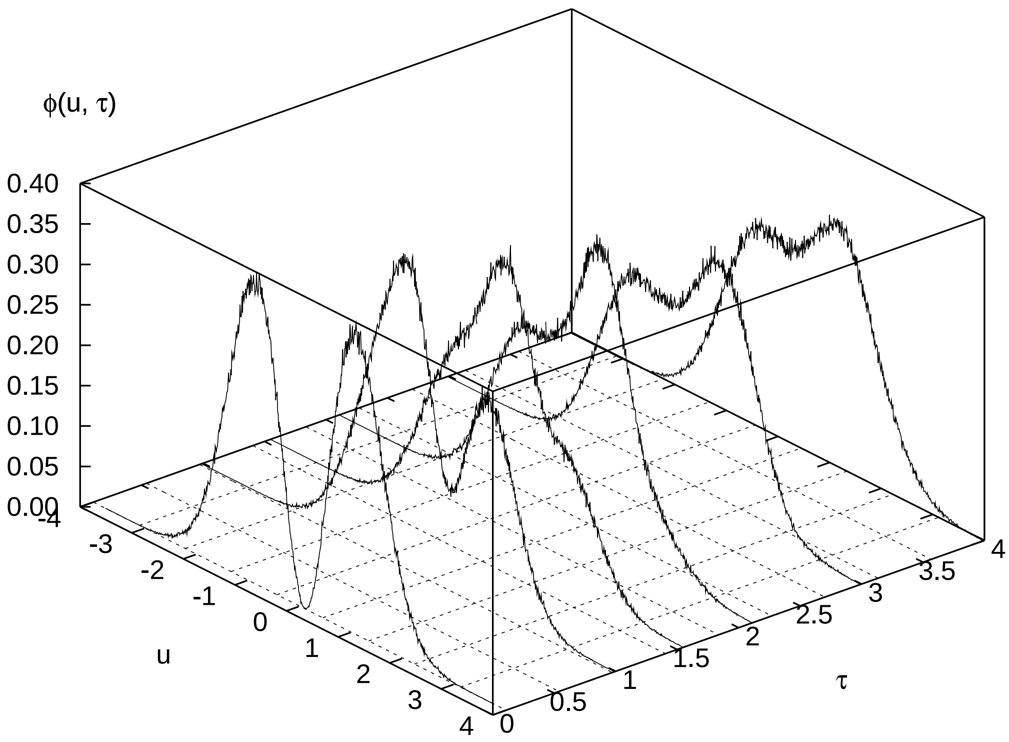
Obr. 9: Časový priebeh driftovej rýchlosti iónov hélia pre rôzne intenzity elektrického poľa pri teplote $T = 300$ K ak sa použije rozdeľovacia funkcia (27) – $f_{3D}(v)$. Počet simulovaných iónov $N = 5.0 \times 10^5$.



Obr. 10: Závislosť driftovej rýchlosti iónov hélia od intenzity elektrického poľa. $T = 300$ K, $\lambda = 3.0 \times 10^{-7}$ m.



Obr. 11: Časový vývoj entropie pre $\alpha = 1.0$. $T = 300$ K, $\lambda = 3.0 \times 10^{-7}$ m.



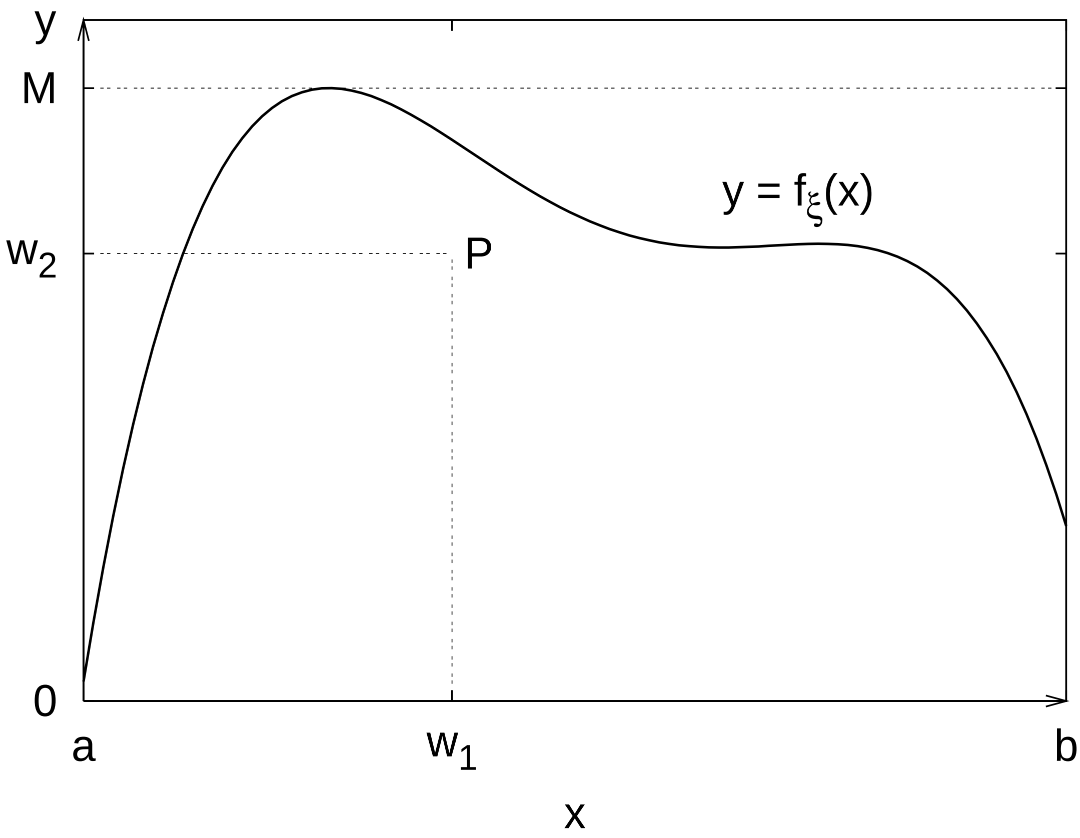
Obr. 12: Distribučná funkcia iónov hélia ($\mathrm{He} - \mathrm{He}^{+}$) pri teplote $T = 300$ K. $\alpha = 1.0$, počet simulovaných iónov $N = 5.0 \times 10^{5}$. Bezrozmerná škála.

Generovanie náhodných čísel metódou inverznej funkcie

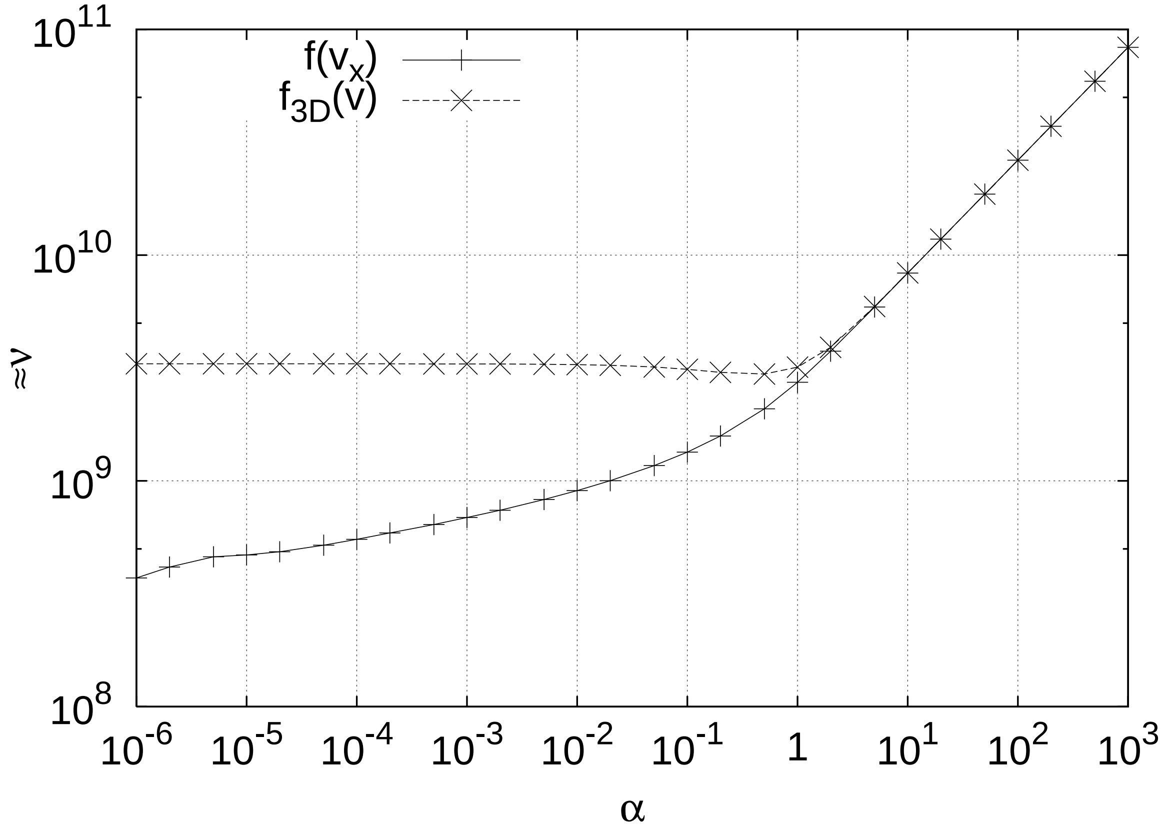
Náhodná voľná dráha sa generuje metódou inverznej funkcie

$$
\begin{aligned}
f(x) &= \frac{1}{\lambda}\exp(-x/\lambda) && (28)\\
F(x) &= \int\limits_0^x \frac{1}{\lambda}\exp(-\xi/\lambda)d\xi = \\
&= 1-\exp(-x/\lambda) && (29)\\
x_i &= -\lambda\log(1-R_i), \qquad R_i \in \mathsf{R}(0,1) && (30)
\end{aligned}
$$

Generovanie náhodných čísel von Neumannovou metódou výberu



Obr. 13: Generovanie náhodných čísel von Neumannovou metódou výberu.



Obr. 14: Závislosť zrážkovej frekvencie ν od intenzity elektrického poľa (koeficient α). Porovnanie vplyvu distribučnej funkcie na závislosť ν od α.

$\mathbf{sgn\ a \neq sgn\ v_0\ \wedge\ v_0 \leq \sqrt{2\lambda|a|}}$:

$$t = \frac{|v_0| + \sqrt{2|a|\lambda - v_0^2}}{|a|} \tag{31}$$

ostatné prípady:

$$t = \frac{2\lambda}{|v_0| + \sqrt{v_0^2 + 2a\lambda \,\mathrm{sgn}\, v_0}} \tag{32}$$

Záver

Dosiahnuté výsledky:

- odladenie algoritmu a porovnanie numerických výsledkov s analytickým riešením
- nezávisle potvrdenie už dosiahnutých výsledkov v aproximácii studeného plynu [1]
- nájdenie zákonov podobnosti pre rezonančnú výmenu náboja pri započítaní tepelného pohybu molekúl
- objav anomálneho správania sa driftovej rýchlosti iónov v slabých poliach a analýza možných príčin
- časový vývoj driftovej rýchlosti, entropie a distribučnej funkcie v silných a slabých poliach

Literatúra

[1] Martišovitš V., Šimko T.: *Transient phenomena at non-hydrodynamic ion transport in gases*, Zborník 11th Symposium on Element. Processes and Chem. Reactions in Low Temperature Plasma, Low Tatras 1998, Book of Invited Papers, (Ed. Morvová M., Hensel K.), JSMF, 110 – 135.

[2] Dřímal J., Trunec D.: *Úvod do metódy Monte Carlo*, Přírodovědecká fakulta UJEP, Brno 1989.

[3] Buslenko N. P., Šrejder J. A.: *Stochastické početní metody Monte Carlo*, Státni nakladatelství technické literatury, Praha 1965.

[4] Kruer W. L.: *The physics of laser plasma interactions*, Frontiers in physics 73, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., USA and Canada 1988.

[5] McDaniel E. W., Mason E. A.: *The mobility and diffusion of ions in gases*, John Wiley and Sons, New York – London – Sydney – Toronto 1973.

[6] Hronec J.: *Diferenciálne rovnice II. – Parciálne diferenciálne rovnice*, Vydavateľstvo Slovenskej akadémie vied, Bratislava 1958.

[7] ZAJAC R., PIŠÚT J.: *Štatistická fyzika*, Matematicko-fyzikálna fakulta Univerzity Komenského, Bratislava 1995.

[8] VON ENGEL A.: *Electric plasmas: Their nature and uses*, Taylor & Francis Ltd, London and New York 1983.

[9] BARTSCH H. J.: *Matematické vzorce*, Mladá fronta, Praha 1996.

Internetové odkazy

[10] `http://www.gnu.org`

[11] `http://www.debian.org`

[12] `http://www.vim.org`

[13] `http://gcc.gnu.org/`

[14] `http://www.gnu.org/directory/gdb.html`

[15] `http://freshmeat.net/projects/libcfgplus`

[16] `http://platon.sk/projects/libcfg+`