

УДК 533.9

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ МЕТОДА КРУПНЫХ ЧАСТИЦ ДАВИДОВА ДЛЯ РАСЧЕТА ПРОДОЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ

Чечейбаев А.Б., Чечейбаев Б.

КНУ им. Баласагына

Согласно работе [1], пылевая плазма представляет собой ионизованный газ, содержащий заряженные частицы конденсированного вещества. Пыль и пылевая плазма широко распространены в космосе, в планетных кольцах, хвостах комет, в межпланетных и межзвездных облаках и др. В последние три десятилетия пылевая плазма активно исследуется в лабораторных условиях, как теоретическая база для разработки новых нанотехнологий.

Одним из мощных методов исследования современных проблем науки и техники является вычислительный эксперимент, реализуемый на современных персональных компьютерах и многопроцессорных вычислительных комплексах. Одним из ярких методов вычислительного эксперимента является метод крупных частиц, разработанный крупным советским и российским ученым Ю.М. Давыдовым [2 и др.]. С помощью метода крупных частиц успешно решены и решаются сложные нелинейные проблемы газовой динамики, гидродинамики, физики плазмы, нефтегазового дела,

машиностроения, магнитной гидродинамики, экологии, механики катастроф и т.д. [2 и др.]

Изложим ниже алгоритм метода крупных частиц для расчета продольных колебаний пылевой плазмы на базе физической и математической модели, изложенной в фундаментальной статье академика В.Е. Фортова и его коллег [1].

Рассматривается динамика пылевых частиц в плазме. Математическая модель состоит из соответствующих уравнений закона сохранения массы и импульса, уравнения Пуассона.

Уравнения для пылевой компоненты:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_d}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (n_d \cdot u_d) &= 0, \\ \frac{\partial u_d}{\partial t} + u_d \cdot \frac{\partial u_d}{\partial x} &= -\frac{e \cdot Z_d}{m_d} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{1}{m_d \cdot n_d} \cdot \frac{\partial p_d}{\partial x} - \sum_{j=e,p,n,g} u_{d,j} \cdot (u_d - u_j) \end{aligned} \quad (1)$$

Уравнения для электронной компоненты:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (n_e \cdot u_e) &= Q_{Ie} - Q_{Le}, \\ \frac{\partial u_e}{\partial t} + u_e \cdot \frac{\partial u_e}{\partial x} &= \frac{e}{m_e} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{1}{m_e \cdot n_e} \cdot \frac{\partial p_e}{\partial x} - \frac{u_e}{n_e} \cdot \tilde{Q}_{Le} - \sum_{j=p,n,g} u_{e,j} \cdot (u_e - u_j) \end{aligned} \quad (2)$$

Уравнения для компоненты «положительный ион»:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (n_p \cdot u_p) &= Q_{Ip} - Q_{Lp}, \\ \frac{\partial u_p}{\partial t} + u_p \cdot \frac{\partial u_p}{\partial x} &= -\frac{e}{m_p} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{1}{m_p \cdot n_p} \cdot \frac{\partial p_p}{\partial x} - \frac{u_p}{n_p} \cdot \tilde{Q}_{Lp} - \sum_{j=e,n,g} u_{p,j} \cdot (u_p - u_j) \end{aligned} \quad (3)$$

Уравнения для компоненты «отрицательный ион»:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (n_n \cdot u_n) &= Q_{In} - Q_{Ln}, \\ \frac{\partial u_n}{\partial t} + u_n \cdot \frac{\partial u_n}{\partial x} &= \frac{e}{m_n} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{1}{m_n \cdot n_n} \cdot \frac{\partial p_n}{\partial x} - \frac{u_n}{n_n} \cdot \tilde{Q}_{Ln} - \sum_{j=e,p,g} u_{n,j} \cdot (u_n - u_j), \end{aligned} \quad (4)$$

где n_d , n_e , n_p , n_n – концентрации пылевых частиц, электронов, положительных ионов и отрицательных ионов соответственно; $u_{d,e}$,

$u_{d,n}, \dots$ - эффективные частоты столкновений; u_d, u_e, u_p, u_n - соответствующие скорости движения; m_d, m_e, m_p, m_n - соответствующие массы частицы каждой компоненты; p_d, p_e, p_p, p_n - давления соответствующих компонент;

ϕ - электрический потенциал; e - элементарный заряд; Q_{Ie}, Q_{Ip}, Q_{In} - рождение соответствующих компонент; Q_{Le}, Q_{Lp}, Q_{Ln} - гибель соответствующих компонент. Здесь рождение: ионизация плазмы, термоэмиссия, вторичная электронная эмиссия [1]. Гибель: объемная рекомбинация, уход на стенки камеры, поглощение пылевыми частицами и т.д. В правых частях уравнений (1) – (4) учтена электрическая сила в поле волны, давления пылевой компоненты и компонент плазмы, а также передача импульса за счет столкновений пылевых частиц с электронами и ионами и нейтральными частицами характеризующаяся эффективными частотами [1].

Уравнения для кинетики заряда пылевых частиц:

$$\frac{\partial z_d}{\partial t} + u_d \cdot \frac{\partial z_d}{\partial x} = \sum_j I_j \quad (5)$$

Согласно статье [1], кинетика заряда пылевых частиц описывается в рамках двух подходов – теории приближения ограниченного орбитального движения и теории диффузионного режима. Здесь мы будем пренебрегать некоторыми способами зарядки, например, фотоэлектронной эмиссией и вторичной электронной эмиссией, которые менее существенны при рассмотрении задач динамики низкотемпературной плазмы.

Уравнения (1) - (5) необходимо дополнить уравнением состояния, которое в простейшем случае записывается так [1]:

$$p_j = \text{Const}_j \cdot n_j^{\sigma_j}, \quad (6)$$

где показатель степени $\sigma_j = 1$ соответствует изотермическим колебаниям j - й компоненты, а $\sigma_j = 5/3$ – адиабатическим.

Уравнение Пуассона в системе СГС имеет следующий вид:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -4\pi e \cdot [n_p - n_n - n_e + Z_d \cdot n_d] \quad (7)$$

В рамках теории приближения ограниченного орбитального движения (OML - Orbit motion limited [1]), т.е. при $a \leq \lambda_D \leq l_{i(e)}$, потоки электронов и ионов на поверхность пылевой частицы вычисляется так:

$$I_e = \sqrt{8 \cdot \pi} \cdot a^2 \cdot n_e \cdot u_{Te} \cdot \exp \left[\frac{e \cdot \phi_s}{T_e} \right], \quad (8)$$

$$I_i = \sqrt{8 \cdot \pi} \cdot a^2 \cdot n_i \cdot u_{Ti} \cdot \exp \left[1 - \frac{e \cdot \phi_s}{T_i} \right], \quad (9)$$

где $u_{Te} = \sqrt{\frac{T_e}{m_e}}$, $u_{Ti} = \sqrt{\frac{T_i}{m_i}}$, $\phi_s = -\frac{T_e}{e}$ – связанный с зарядом стационарный потенциал поверхности пылевой частицы; T_e – температура электрона в энергетических единицах; λ_D – радиус Дебая; l_i , l_e – длины свободного пробега ионов и электронов.

В рамках теории зарядки в диффузионном режиме, т.е. при $l_{i(e)} \ll \lambda_D$ имеем:

$$I_p = 4\pi r^2 \left[n_p \cdot \mu_p \cdot \frac{d\phi}{dr} + D_p \cdot \frac{dn_p}{dr} \right], \quad (10)$$

$$I_e = -4\pi r^2 \left[n_e \cdot \mu_e \cdot \frac{d\phi}{dr} + D_e \cdot \frac{dn_e}{dr} \right], \quad (11)$$

$$I_n = -4\pi r^2 \left[n_n \cdot \mu_n \cdot \frac{d\phi}{dr} + D_n \cdot \frac{dn_n}{dr} \right], \quad (12)$$

где μ_e , μ_n , μ_p – подвижности частиц плазмы, D_e , D_n , D_p – коэффициенты диффузии частиц плазмы.

В случае, если выполняется условие $l_i \leq \lambda_D \leq l_e$, то для расчета потока электронов I_e применяем теорию OML, а для оценки потока ионов I_i будем использовать теорию диффузионного приближения.

Согласно [1], дебаевский радиус рассчитывается так:

$$\lambda_{Dn} = \sqrt{\frac{T_i}{4 \cdot \pi \cdot e^2 \cdot n_n}}, \quad \lambda_{De} = \sqrt{\frac{T_e}{4 \cdot \pi \cdot e^2 \cdot n_e}}, \quad \lambda_{Dp} = \sqrt{\frac{T_i}{4 \cdot \pi \cdot e^2 \cdot n_p}}. \quad (13)$$

Тогда линеаризованный дебаевский радиус:

$$\lambda_D = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\lambda_{De}^2 + \lambda_{Dn}^2 + \lambda_{Dp}^2}}}. \quad (14)$$

Оценочные формулы для длин свободного пробега:

$$l_{ee} = \frac{(k_B \cdot T_e)^2}{4 \cdot \pi \cdot e^4 \cdot n_e \cdot L_e}, \quad l_{ii} = \frac{(k_B \cdot T_i)^2}{4 \cdot \pi \cdot e^4 \cdot n_e \cdot Z_i^2 \cdot L_i}, \quad l_{ei} = \frac{(k_B \cdot T_e)^2}{4 \cdot \pi \cdot e^4 \cdot n_e \cdot Z_i \cdot L_e}, \quad (15)$$

где Z_i - средний заряд ионов.

Приведем ниже алгоритм метода крупных частиц Давыдова для расчета системы (1) – (6).

На эйлеровом этапе вычисляем значения скоростей для потоков пылевых частиц, электронов, положительных и отрицательных ионов для ячейки с индексом i в момент времени $t = t^k$:

$$\begin{aligned} (u_d)_i^{k+1} &= (u_d)_i^k - \Delta t \cdot (u_d)_i^k \cdot \frac{(u_d)_{i+\frac{1}{2}}^k - (u_d)_{i-\frac{1}{2}}^k}{\Delta x} - \Delta t \cdot \frac{e \cdot (Z_d)_i^k \phi_{i+\frac{1}{2}}^k - \phi_{i-\frac{1}{2}}^k}{m_d \Delta x} - \\ &- \frac{\Delta t}{m_d \cdot (n_d)_i^k} \cdot \frac{(p_d)_{i+\frac{1}{2}}^k - (p_d)_{i-\frac{1}{2}}^k}{\Delta x} - \Delta t \sum_{j=e,p,n,g} (u_{d,j})_i^k \cdot [(u_d)_i^k - (u_j)_i^k], \\ (u_e)_i^{k+1} &= (u_e)_i^k - \Delta t \cdot (u_e)_i^k \cdot \frac{(u_e)_{i+\frac{1}{2}}^k - (u_e)_{i-\frac{1}{2}}^k}{\Delta x} + \frac{\Delta t \cdot e \phi_{i+\frac{1}{2}}^k - \phi_{i-\frac{1}{2}}^k}{m_e \Delta x} - \\ &- \frac{\Delta t}{m_e (n_e)_i^k} \frac{(p_e)_{i+\frac{1}{2}}^k - (p_e)_{i-\frac{1}{2}}^k}{\Delta x} - \frac{\Delta t (u_e \tilde{Q}_{Le})_i^k}{(n_e)_i^k} - \Delta t \sum_{j=p,n,g} (u_{e,j})_i^k [(u_e)_i^k - (u_j)_i^k] \\ (u_p)_i^{k+1} &= (u_p)_i^k - \Delta t \cdot (u_p)_i^k \cdot \frac{(u_p)_{i+\frac{1}{2}}^k - (u_p)_{i-\frac{1}{2}}^k}{\Delta x} - \frac{\Delta t \cdot e \phi_{i+\frac{1}{2}}^k - \phi_{i-\frac{1}{2}}^k}{m_p \Delta x} - \\ &- \frac{\Delta t}{m_p (n_p)_i^k} \frac{(p_p)_{i+\frac{1}{2}}^k - (p_p)_{i-\frac{1}{2}}^k}{\Delta x} - \frac{\Delta t (u_p \tilde{Q}_{Lp})_i^k}{(n_p)_i^k} - \Delta t \sum_{j=e,n,g} (u_{p,j})_i^k [(u_p)_i^k - (u_j)_i^k] \\ (u_n)_i^{k+1} &= (u_n)_i^k - \Delta t \cdot (u_n)_i^k \cdot \frac{(u_n)_{i+\frac{1}{2}}^k - (u_n)_{i-\frac{1}{2}}^k}{\Delta x} + \frac{\Delta t \cdot e \phi_{i+\frac{1}{2}}^k - \phi_{i-\frac{1}{2}}^k}{m_n \Delta x} - \end{aligned} \quad (16)$$

$$-\frac{\Delta t}{m_n(n_n)_i^k} \frac{(p_n)_{i+\frac{1}{2}}^k - (p_n)_{i-\frac{1}{2}}^k}{\Delta x} - \frac{\Delta t (u_n \tilde{Q}_{Ln})_i^k}{(n_n)_i^k} - \Delta t \sum_{j=e,n,g} (u_{n,j})_i^k [(u_n)_i^k - (u_j)_i^k]$$

Далее, используя, например, алгоритм Томаса [5], численно решаем уравнение Пуассона. Для уравнения Пуассона ставятся краевые условия – задаются значения электрического потенциала на краях области интегрирования.

На лагранжевом и заключительном этапах метода крупных частиц Давыдова определяются «потoki масс» - потоки частиц - составляющих пылевой плазмы и определяются новые значения концентраций в момент времени $t = t^{k+1}$:

$$(n_d)_i^{k+1} \cdot \Delta x = (n_d)_i^k \cdot \Delta x + (\Delta M_d)_{i-\frac{1}{2}}^k - (\Delta M_d)_{i+\frac{1}{2}}^k, \quad (17)$$

$$(n_e)_i^{k+1} \cdot \Delta x = (n_e)_i^k \cdot \Delta x + (\Delta M_e)_{i-\frac{1}{2}}^k - (\Delta M_e)_{i+\frac{1}{2}}^k + [(Q_{Ie})_i^k - (Q_{Le})_i^k] \Delta x \Delta t,$$

$$(n_p)_i^{k+1} \cdot \Delta x = (n_p)_i^k \cdot \Delta x + (\Delta M_p)_{i-\frac{1}{2}}^k - (\Delta M_p)_{i+\frac{1}{2}}^k + [(Q_{Ip})_i^k - (Q_{Lp})_i^k] \Delta x \Delta t,$$

$$(n_n)_i^{k+1} \cdot \Delta x = (n_n)_i^k \cdot \Delta x + (\Delta M_n)_{i-\frac{1}{2}}^k - (\Delta M_n)_{i+\frac{1}{2}}^k + [(Q_{In})_i^k - (Q_{Ln})_i^k] \Delta x \Delta t,$$

где потоки частиц вычисляются, например, так:

$$(\Delta M_e)_{i-\frac{1}{2}}^k = \langle n_e \rangle_{i-\frac{1}{2}}^k \cdot \langle u_e \rangle_{i-\frac{1}{2}}^k \cdot \Delta t, \quad (\Delta M_e)_{i+\frac{1}{2}}^k = \langle n_e \rangle_{i+\frac{1}{2}}^k \cdot \langle u_e \rangle_{i+\frac{1}{2}}^k \cdot \Delta t, \quad (18)$$

здесь индексы $i - \frac{1}{2}$ и $i + \frac{1}{2}$ относятся к границе эйлеровых ячеек.

Значения концентраций и скоростей на границах ячеек могут быть вычислены при использовании, например, формул порядка точности, учитывающих направление потока частиц. Здесь могут быть применены функции Давыдова D_i^k , принимающие значения нуль или единица в зависимости от того, втекают или вытекают компоненты пылевой плазмы в эйлерову ячейку через заданную ее границу [2 и др.]. Далее, используя уравнения состояния типа политропы (6), находим новые значения давлений компонент.

Таким образом, мы вкратце описали алгоритм метода крупных частиц Давыдова для расчета продольных колебаний пылевой плазмы при использовании в кинетике зарядки пылевых частиц теории приближения ограниченного орбитального движения и теории зарядки в диффузионном режиме.

ЛИТЕРАТУРА

1. Фортов В.Е. Храпак А.Г., Храпак С.А., Молотков В.И., Петров О.Ф. Пылевая плазма. // Успехи физических наук, 2004. Т. 174. №5. – С. 495-544.
2. Ю.М. Давыдов. Крупных частиц метод. В кн.: Математическая энциклопедия. Т. 3. – Москва: Советская энциклопедия, 1982. – С. 125-129.
3. Ю.М. Давыдов, Б. Чечейбаев, И.М. Давыдова, и др. Исследование актуальных проблем механики и машиностроения. // Под ред. Ю.М. Давыдова, в 5-ти томах. – М.: НАПН РФ, 1995. - 1658 с.
4. Овчинников К.Н., Силин В.П., Урютин С.А. Филаментация и вынужденное рассеяние Мандельштама-Бриллюэна в турбулентной плазме. // ЖЭТФ, 1998, том 113, вып. 2, с. 629-645.
5. Joe D. Hoffman. Numerical methods for engineers and scientists. 2nd edition. - New-York: Marcel Dekker Inc. – 384 p.
6. Chung P.M., Talbot L., Touryan K.J. Electric probes in stationary and flowing plasmas: theory and application. – New York: Springer-Verlag, 1975.