

Metóda Monte Carlo vo fyzike nízkoteplotnej plazmy

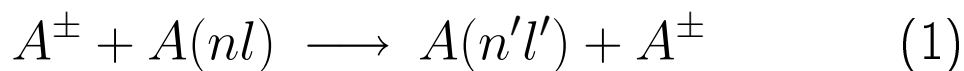
Ľubomír Host
Prof. RNDr. Viktor Martišoviš, DrSc.

28. marca 2005

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

Rezonančná výmena náboja

Reakcia:



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

– vzácne plyny: He – He⁺, Ne – Ne⁺, Ar – 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

$$\frac{\partial f(v, t)}{\partial t} + a(t) \frac{\partial f(v, t)}{\partial v} = -n|v|\sigma f(v, t) + \quad (2)$$

$$+ \frac{n}{V} \delta\left(\frac{v}{V}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} |v'|\sigma f(v', t) dv'$$

Normalizácia:

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

$$\frac{\partial \varphi(u, \tau)}{\partial \tau} + \frac{\partial \varphi(u, \tau)}{\partial u} = -|u|\varphi(u, \tau) + \quad (4)$$

$$+ \delta(u) \int_{-\infty}^{+\infty} |u'|\varphi(u', \tau) du'$$

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

Časová závislosť driftovej rýchlosti iónov je daná vzťahom

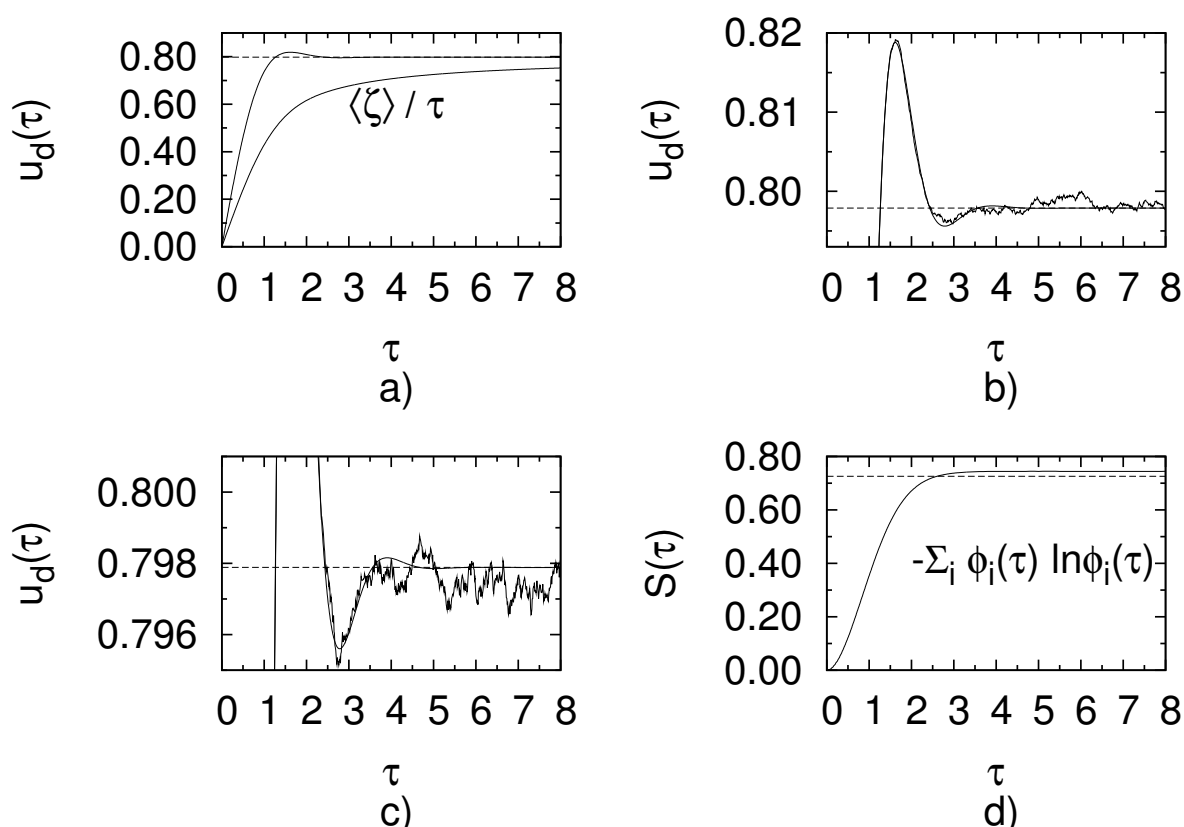
$$u_d(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} u\varphi(u, \tau) du \quad (6)$$

$$u_d(\tau) = \int_0^{\tau} uu_d(\tau-u)e^{-\frac{1}{2}u^2} du + \int_0^{\infty} u\varphi(u-\tau, 0)e^{\tau(\frac{1}{2}\tau-u)} du \quad (7)$$

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

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

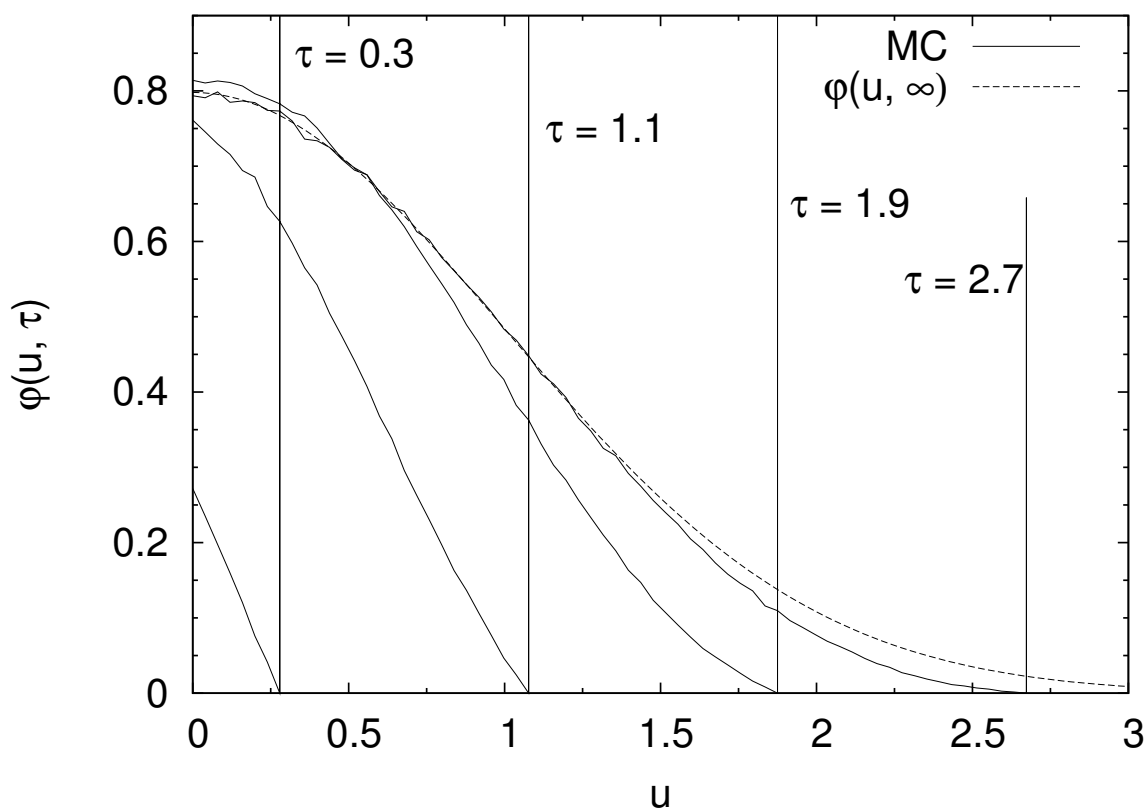
$$\varphi(u, \infty) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \Theta(u) e^{-\frac{1}{2}u^2} \quad (9)$$



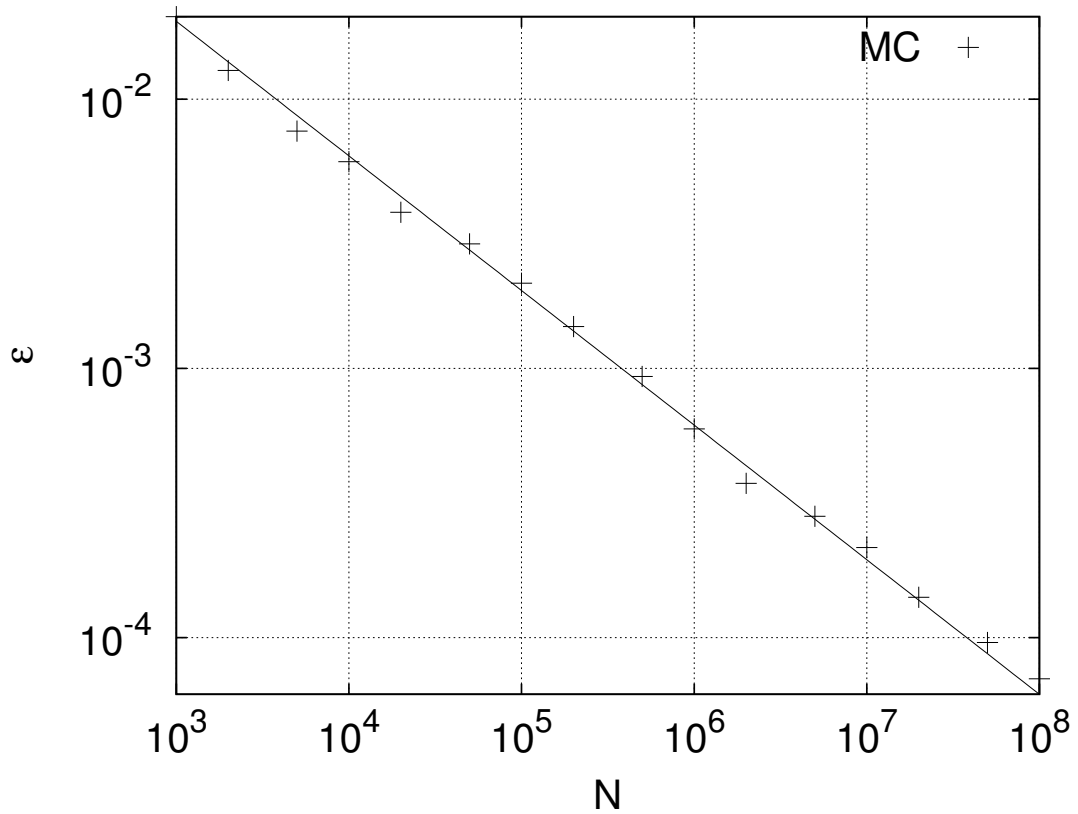
Obr. 1: a,b,c) Časový priebeh driftovej rýchlosti. d) Časový priebeh entropie iónového zväzku. Počet simulovaných iónov $N = 1.0 \times 10^6$.

Rovnovážna hodnota entropie

$$\begin{aligned}
 S(\infty) &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} S(\tau) = - \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(u, \infty) \ln \varphi(u, \infty) du = \\
 &= \ln \sqrt{\frac{\pi}{2}} + \frac{1}{2} \tag{10}
 \end{aligned}$$



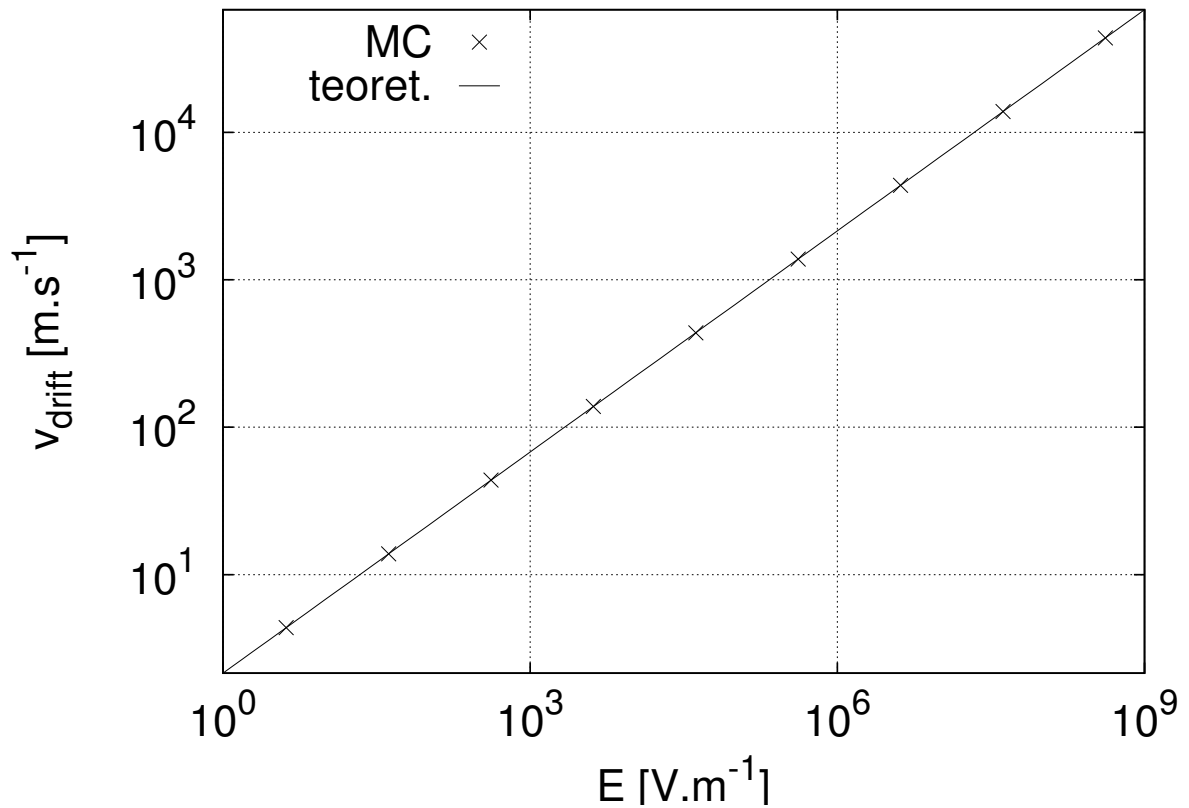
Obr. 2: Distribučná funkcia rýchlosti iónov pri teplote $T = 0$ K v niekoľkých časových okamihoch. Počet simulovaných iónov $N = 1.0 \times 10^6$



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

$$\varepsilon = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} |u_d(t) - u_d(\infty)| dt}{\Delta\tau u_d(\infty)} \quad (11)$$

$$\varepsilon \sim N^{-\frac{1}{2}} \sim t^{-\frac{1}{2}} \quad (12)$$



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

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

Uváženie tepelného pohybu molekúl

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

Zavedenie bezrozmerných parametrov vychádza z pohybových rovníc:

$$x = \frac{1}{2}at^2 + v_0t \quad (15)$$

$$v = at + v_0 \quad (16)$$

$$x = K_x\xi, \quad v = K_vu, \quad t = K_t\tau \quad (17)$$

$$K_x = \langle\lambda\rangle \quad (18)$$

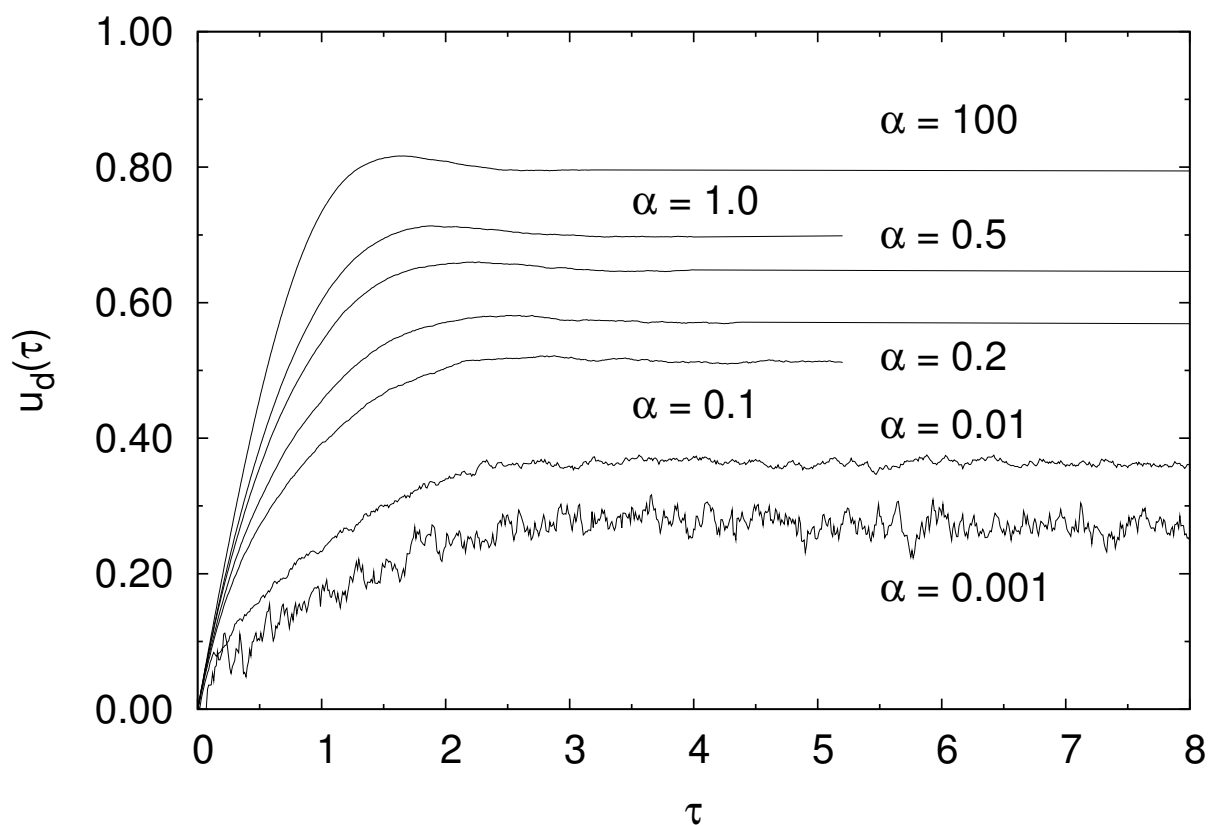
$$K_v = v_T = \sqrt{\frac{2kT_g}{m_g}} \quad (19)$$

$$K_t = \frac{K_x}{K_v} \quad (20)$$

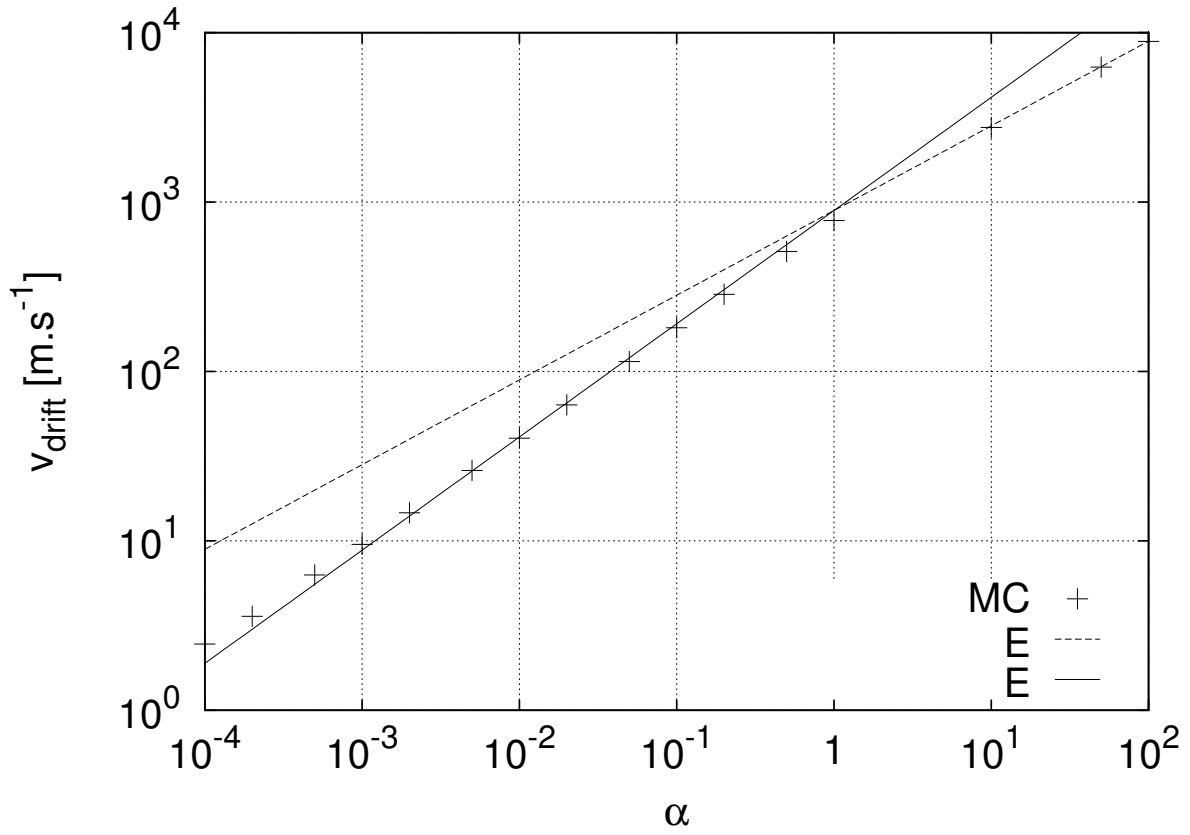
$$\alpha = \frac{aK_t^2}{K_x} = \frac{a\langle\lambda\rangle}{v_T^2} \quad (21)$$

$$\xi = \frac{1}{2}\alpha\tau^2 + u_0\tau \quad (22)$$

$$u = \alpha\tau + u_0 \quad (23)$$



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 $v_{drift} = 891.05 \alpha^{1/2}$ m. s⁻¹ a fitovaná smernica $v_{drift} = 891.05 \alpha^{0.668}$ m. s⁻¹. Počet simulovaných iónov hélia $N = 5.0 \times 10^5$.

V prípade slabého poľa driftová rýchlosť iónov závisí ako

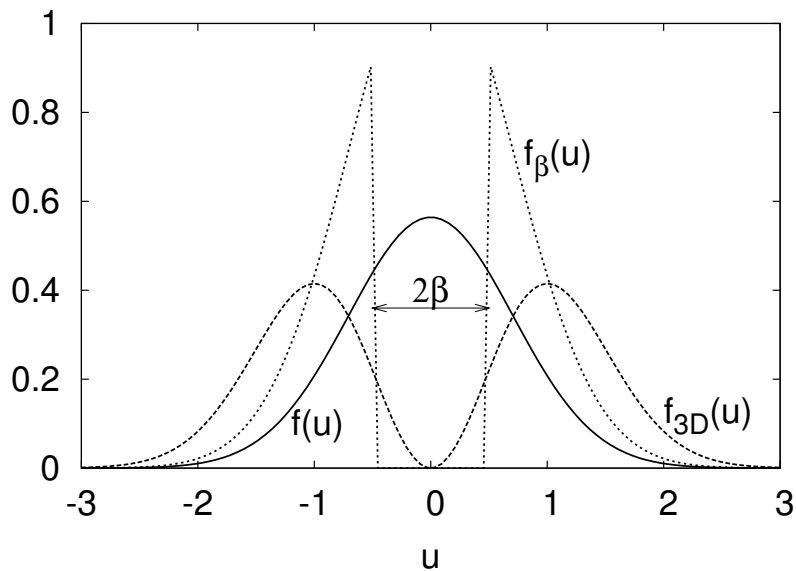
$$v_d(0) = \frac{A}{\sqrt{mkT}} eE \langle \lambda \rangle, \quad (24)$$

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

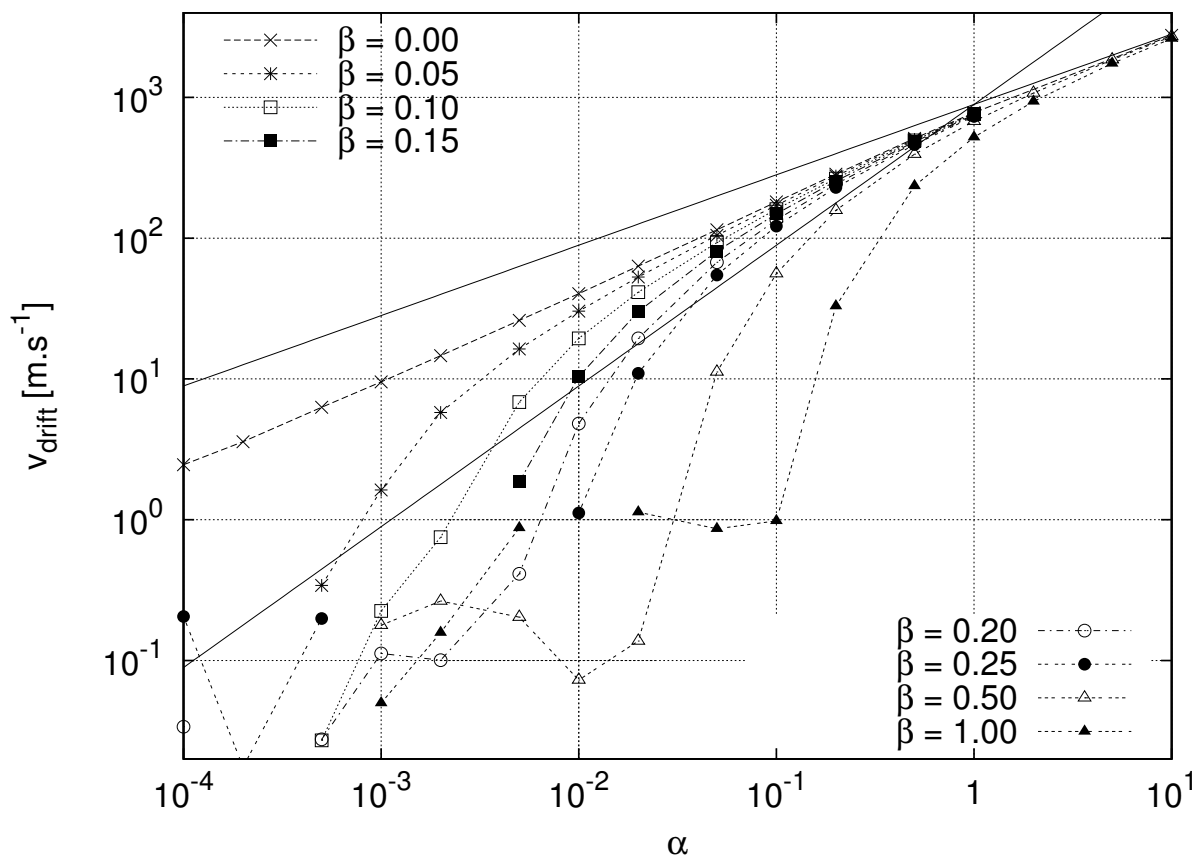
$$f(v_x)dv_x = \frac{1}{\sqrt{\pi}v_T} \exp\left(-\frac{v_x^2}{v_T^2}\right) dv_x \quad (25)$$

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

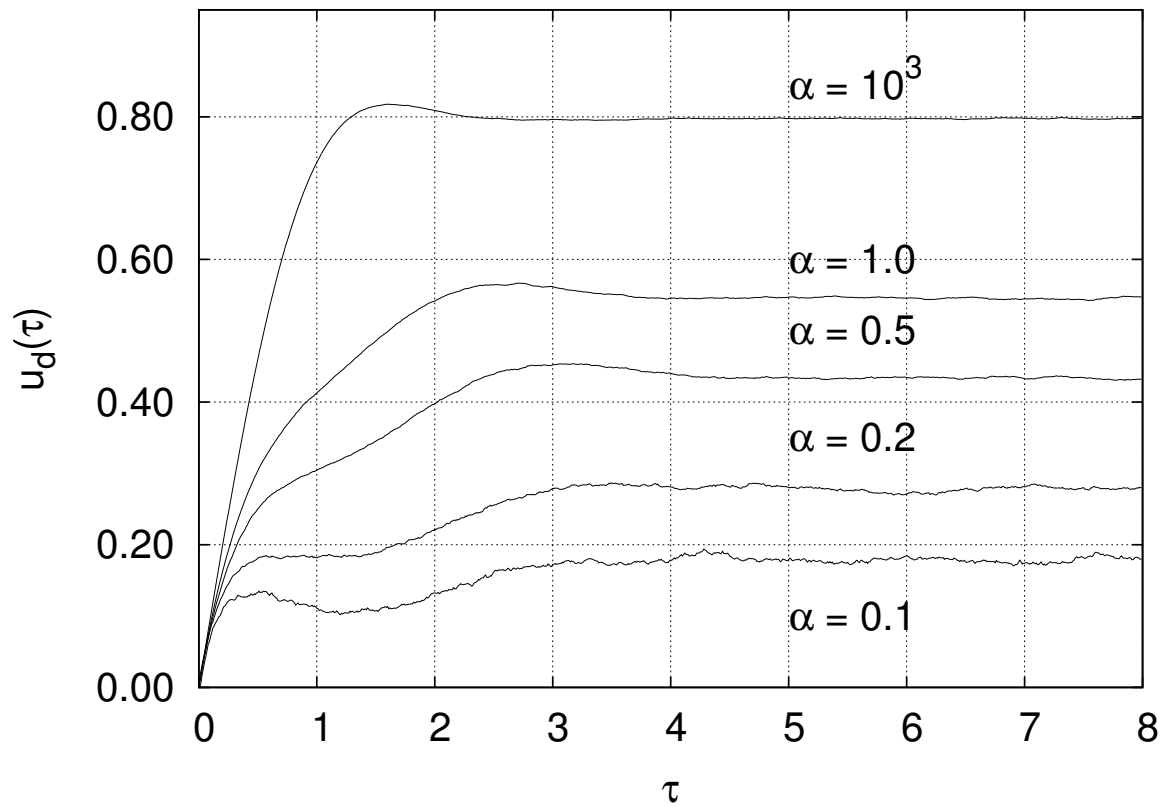
$$f_{3D}(v)dv = \frac{4\pi}{(\sqrt{\pi}v_T)^3} \exp\left(-\frac{v^2}{v_T^2}\right) v^2 dv \quad (27)$$



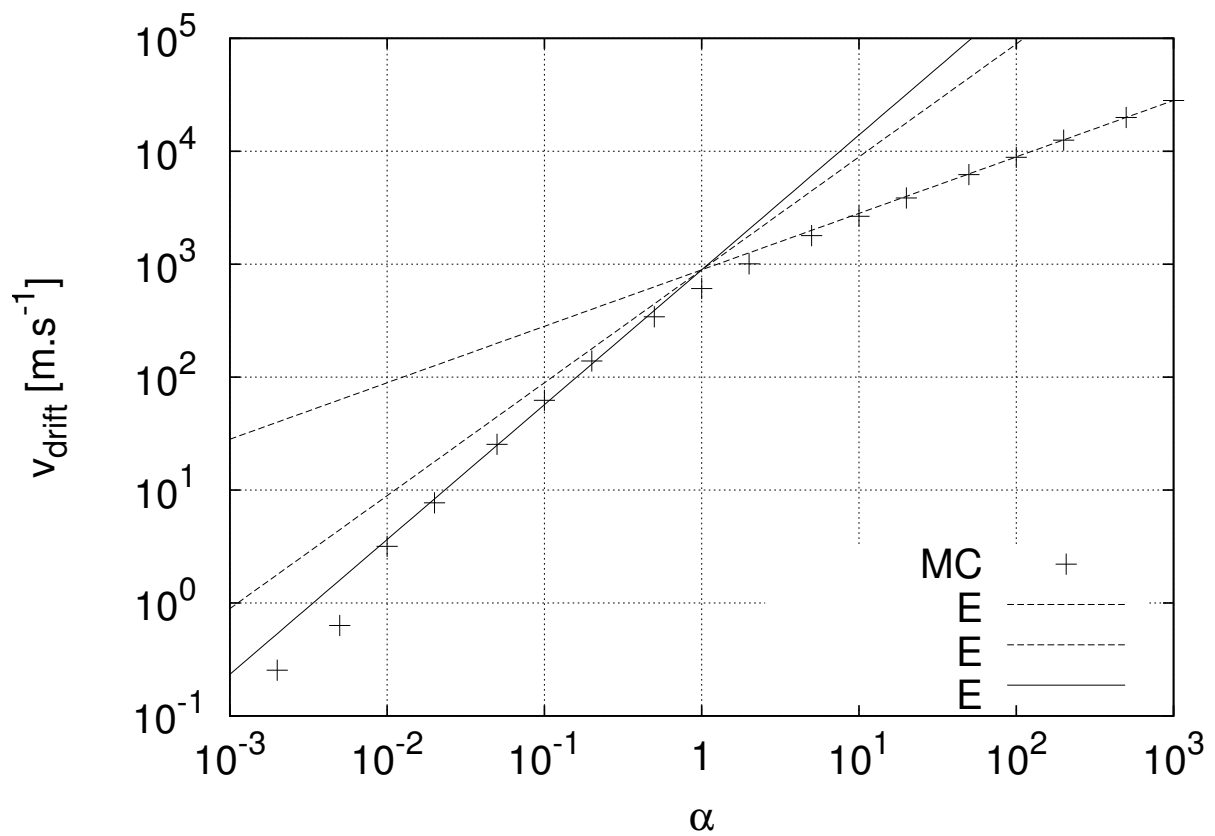
Obr. 7: Porovnanie distribučných funkcií. Zobrazené distribučné funkcie sú normalizované, $u = v/v_T$. $f_\beta(u)$ vykreslené pre $\beta = 0.5$.



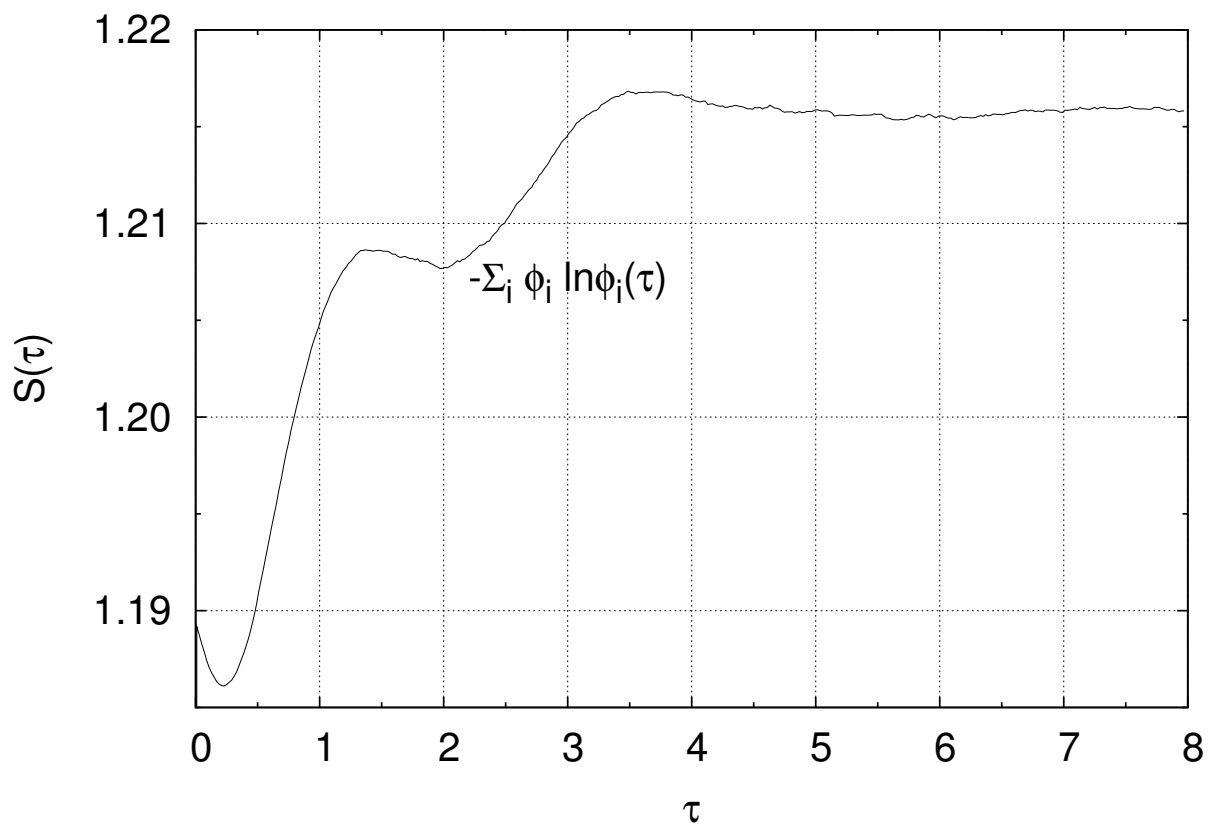
Obr. 8: Závislosť driftovej rýchlosti iónov hélia od intenzity elektrického poľa pri teplote $T = 300 \text{ K}$ pri rôznych hodnotách koeficientu β .



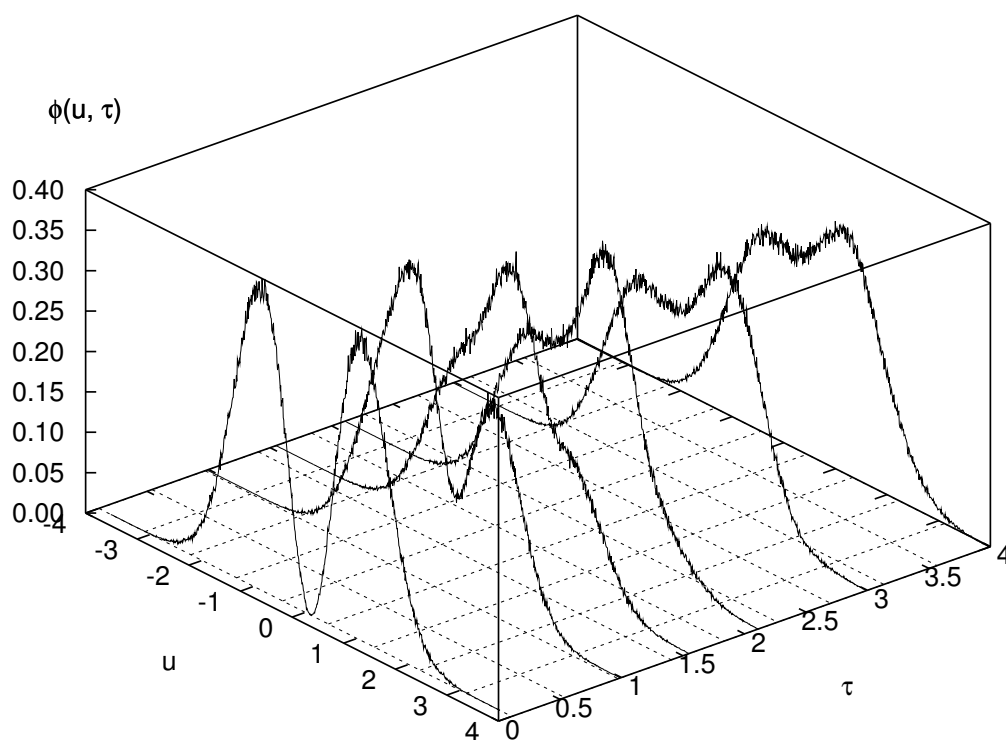
Obr. 9: Časový priebeh driftovej rýchlosti iónov hélia pre rôzne intenzity elektrického poľa pri teplote $T = 300$ K ak sa použije rozdeľovacia funkcia (27) – $f_{3D}(v)$. Počet simulovaných iónov $N = 5.0 \times 10^5$.



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



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 ($\text{He} - \text{He}^+$) pri teplote $T = 300 \text{ K}$. $\alpha = 1.0$, počet simulovaných iónov $N = 5.0 \times 10^5$. Bezrozmerná škála.

Generovanie náhodných čísel metódou inverznej funkcie

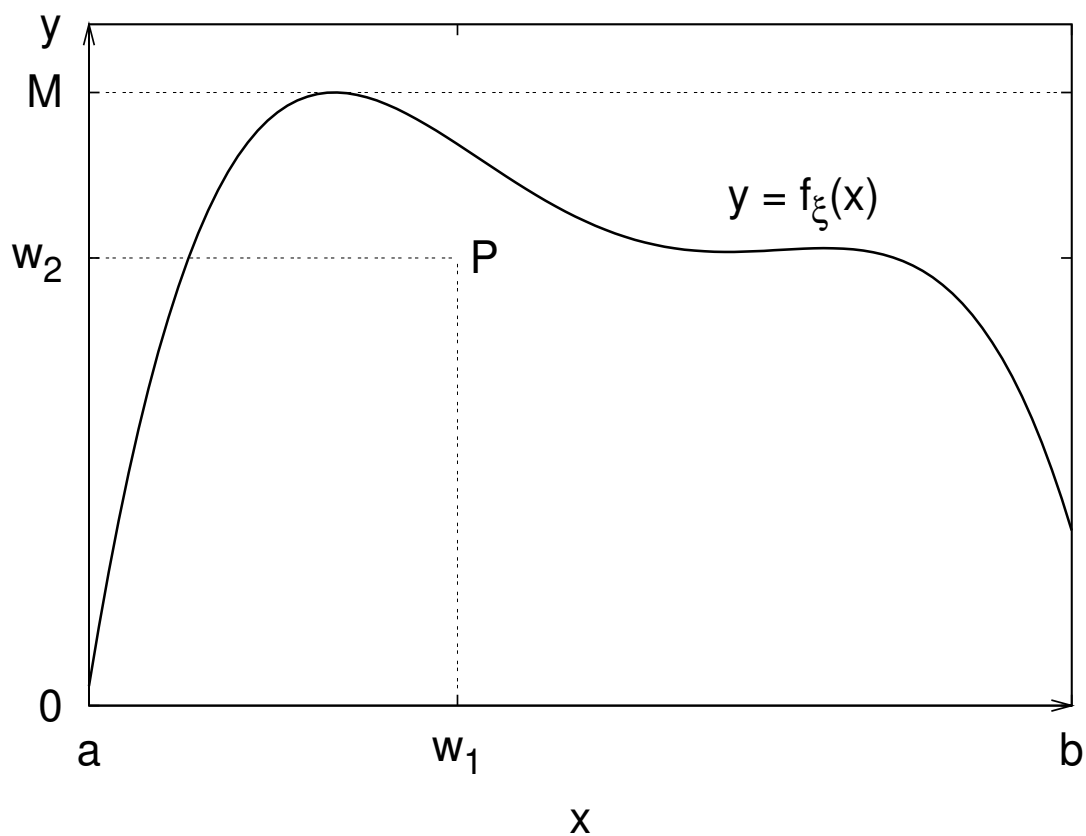
Náhodná voľná dráha sa generuje metódou inverznej funkcie

$$f(x) = \frac{1}{\lambda} \exp(-x/\lambda) \quad (28)$$

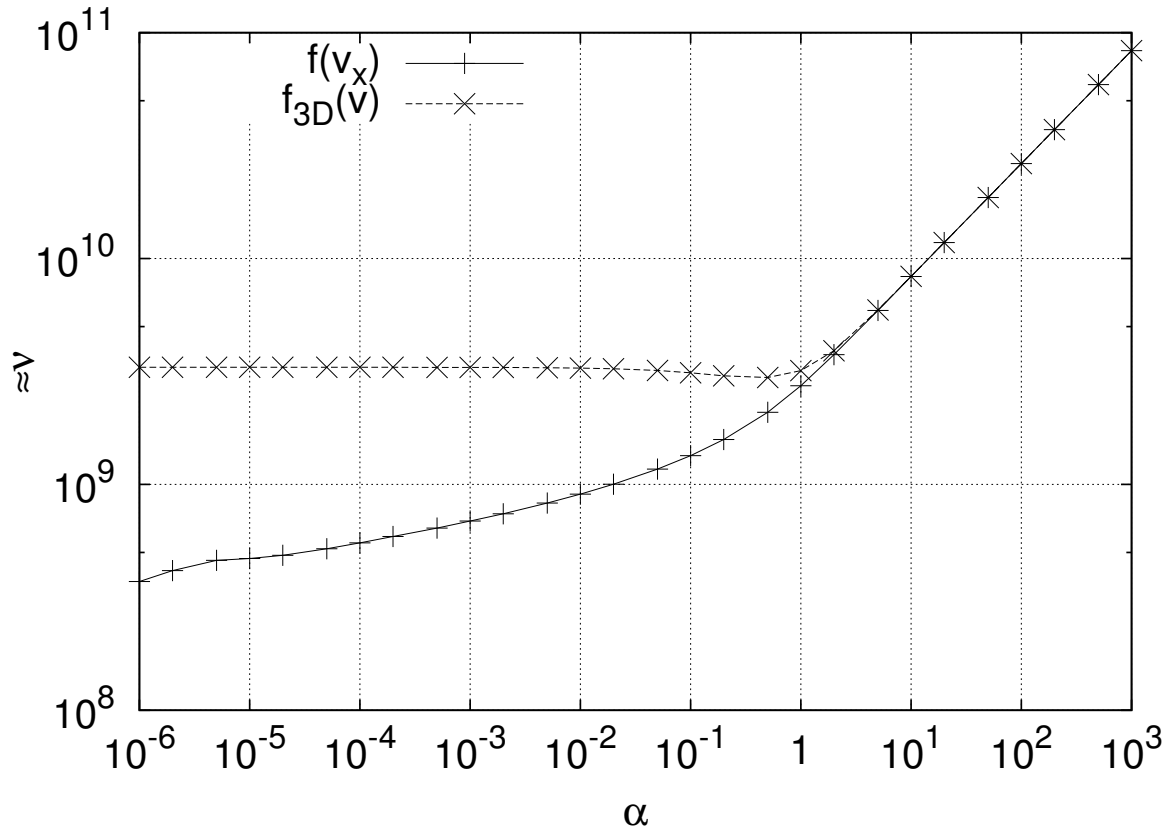
$$\begin{aligned} F(x) &= \int_0^x \frac{1}{\lambda} \exp(-\xi/\lambda) d\xi = \\ &= 1 - \exp(-x/\lambda) \end{aligned} \quad (29)$$

$$x_i = -\lambda \log(1 - R_i), \quad R_i \in \mathbb{R}(0, 1) \quad (30)$$

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 .

$\text{sgn } \mathbf{a} \neq \text{sgn } \mathbf{v}_0 \wedge \mathbf{v}_0 \leq \sqrt{2\lambda|\mathbf{a}|}$:

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

ostatné prípady:

$$t = \frac{2\lambda}{|v_0| + \sqrt{v_0^2 + 2a\lambda \text{sgn } v_0}} \quad (32)$$

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. 21
- [2] DŘÍMAL J., TRUNEC D.: *Úvod do metody Monte Carlo*, Přírodovědecká fakulta UJEP, Brno 1989.
- [3] BUSLENKO N. P., ŠREJDER J. A.: *Stochastické početní metody Monte Carlo*, Státní nakladatelství technické literatury, Praha 1965.
- [4] KRUEER 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. 2, 11
- [6] HRONEC J.: *Diferenciálne rovnice II. – Parciálne diferenciálne rovnice*, Vydavateľstvo Slovenskej akadémie vied, Bratislava 1958.

- [7] ZAJAC R., PIŠŮT 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/libcfigplus>
- [16] <http://platon.sk/projects/libcfig+>