

На правах рукописи

Панин  
Илья Александрович

**Прецизионный расчет электронного переноса в  
неидеальной плазме**

Специальность 05.13.18 – математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва  
2009

Работа выполнена в Институте математического моделирования РАН

Научный руководитель – доктор физико-математических наук,  
член-корреспондент РАН  
Калиткин Николай Николаевич

Официальные оппоненты – доктор физико-математических наук,  
профессор Лебо Иван Германович

– доктор физико-математических наук,  
профессор Гончаров Виктор Анатольевич.

Ведущая организация – Физический факультет Московского государственного университета (МГУ)

Защита состоится « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2009 года в \_\_\_\_\_ часов на заседании диссертационного совета Д002.058.01 при институте Институт математического моделирования РАН по адресу: 125047, Москва, Миусская пл., 4а.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИММ РАН.

Автореферат разослан « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2009г.

Ученый секретарь диссертационного совета  
доктор физико-математических наук

Змитренко Н.В.

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы.** Потребность в знании свойств неидеальной плазмы, таких как проводимость и теплопроводность достаточно часто возникает при решении как теоретических, так и чисто практических задач. С неидеальной плазмой приходится иметь дело при моделировании процессов, происходящих в мощных газоразрядных лампах, сильноточных газовых разрядах, лазерах, в соплах реактивных двигателей при сгорании топлива, МГД-генераторах, при решении задач плазмохимии.

**Цель работы.** Построение математической модели и алгоритмов для прецизионного расчета электронных транспортных коэффициентов плазмы в широком диапазоне температур и плотностей. Реализация в виде программного комплекса. Это является важной частью общей проблемы – обеспечение магнитогазодинамических программ точными данными о теплофизических свойствах веществ.

**Научная новизна.** Существенно уточнено значение дебаевского радиуса при больших плотностях плазмы. Число приближений Чепмена-Энскога в расчетах было доведено до пяти; это значительно повысило точность (до 0.1% для проводимости и до 0.5% для теплопроводности). Проведено исследование сходимости приближений Чепмена-Энскога. По точности и по области применимости (диапазон температур 1 эВ – 10 КэВ и плотностей от  $10^{16}$  до  $10^{24}$  см<sup>-3</sup>), модель превосходит мировой уровень. Построен новый метод вычисления интегралов с особенностями, дающий асимптотически точную апостериорную оценку погрешности, а также высокоточный алгоритм расчета интегральной экспоненты.

**Практическая ценность работы.** Созданная модель и комплекс программ обеспечивают физическое наполнение базы данных по теплофизическим свойствам газо-плазменных смесей в огромном диапазоне температур и плотностей.

**Апробация работы.** Результаты докладывались и обсуждались на международной конференции «IX Харитоновские тематические научные

чтения» (Саров, 2007), на III Международной конференции по лазерным мишеням и приложениям (ФИАН, октябрь 2007), на сессии по неидеальной плазме (Москва, декабрь 2006), на семинаре в НИИ Механики МГУ им. М.В.Ломоносова (май 2007) и на XI Всероссийском школе-семинаре «Современные проблемы математического моделирования» (Абрау, 2005).

По материалам диссертации сделан доклад на совместном семинаре Института математического моделирования РАН и кафедры математического моделирования Московского физико-технического института (март 2008), а также доклад на семинаре кафедры математики физического факультета МГУ им. М.В.Ломоносова (сентябрь 2009).

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и приложения. Общий объем диссертации 67 страниц, 11 рисунков, 10 таблиц. Список литературы включает 43 наименования.

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 7 работ. Их список представлен в конце автореферата.

### **Краткое содержание работы.**

**Введение** включает обоснование актуальности темы, содержит формулировку основных целей работы и краткое содержание глав. Затем делается обзор существующих моделей электронного переноса в плазме, а также экспериментальных данных. Обсуждаются недостатки существующих моделей и пути их улучшения.

**В первой главе** рассматривается рассеяние на заряженных и нейтральных частицах. Вначале вводятся обозначения. Рассматривается многокомпонентная плазма, состоящая из разных сортов ионов с зарядами  $z_j$ , электронов и нейтральных атомов. Средний объем на одну тяжелую частицу (ион или атом) обозначен как  $V$ . Тогда средняя концентрация тяжелых частиц есть  $n = V^{-1}$ . Относительные концентрации ионов, электронов и различных сортов атомов равны

$$x_i = n_i/n, \quad x_e = n_e/n, \quad x_{aj} = n_{aj}/n. \quad (1)$$

Атомы мы различаем по сортам; но ионы разных элементов, имеющие одинаковый заряд, не различаются, ибо они вносят одинаковый вклад в рассеяние. Условие сохранения числа тяжелых частиц и условие электронейтральности имеют следующий вид:

$$\sum_i x_i + \sum_j x_{aj} = 1, \quad x_e = \sum_i z_i x_i. \quad (2)$$

Вводится также средний квадрат заряда иона  $\xi$  и средний заряд иона  $\zeta$ :

$$\xi = \sum_i z_i^2 x_i, \quad \zeta = \xi/x_e \quad (3)$$

Температура среды обозначена как  $T$ . Вводится также радиус сферизованной атомной ячейки  $R$ ; он определяется из соотношения  $4\pi R^3/3 = V$ .

Затем рассматривается потенциал взаимодействия заряженных частиц.

Истинный потенциал взаимодействия зарядов в плазме неизвестен. Дебай предложил модельный потенциал, который неплохо описывает это взаимодействие на больших расстояниях:

$$U(r) = \frac{z_1 z_2}{r} \exp(-r/D). \quad (4)$$

Обычно в (4) подставляют классический дебаевский радиус, который для однотемпературной плазмы равен

$$D \rightarrow D_0 = \left[ \frac{VT}{4\pi x_e (1 + \zeta)} \right]^{1/2}; \quad (5)$$

Для задач переноса существенны в основном далекие столкновения; этим объясняется применимость (4) к транспортной проблеме.

Для плазмы при большой плотности ( $V$  мало) или низкой температуре может оказаться  $D_0 \ll R$ . Это физически неразумно, поскольку для экранировки требуется достаточно много частиц. Поэтому целесообразно пользоваться следующим обобщением классического дебаевского радиуса [2]:

$$D = \left[ D_0^{3/2} + \left( \frac{10}{27} R \right)^{3/2} \right]^{2/3}. \quad (6)$$

Это выражение обеспечивает переход дебаевской поправки на взаимодействие в томас-фермиевское выражение при высоких плотностях. Данное выражение применимо практически для любой плазмы, от разреженной до сверхплотной. Использование (6) в (4) существенно расширяет область применимости дебаевского потенциала. В диссертации оно впервые используется в расчетах электронного переноса.

Затем приводятся выражения для сечения рассеяния. Сечение рассеяния следует вычислять согласно законам квантовой механики: классический подход к электронам слишком неточен. Применение первого борновского приближения к рассеянию на потенциале (4) дает простые формулы для дифференциального сечения. Для электрон–ионных столкновений получаем

$$d\sigma_{ei} = 8\pi z^2 \left[ \psi \left( 2 \sin \frac{\theta}{2} \right) \right]^2 \sin \theta d\theta, \quad \psi(\alpha) = D^2 / (1 + v^2 D^2 \alpha^2), \quad (7)$$

где  $\theta$  – угол рассеяния,  $v$  – скорость электрона (ион по сравнению с электроном можно считать неподвижным).

В квантовой механике одинаковые частицы неразличимы. Поэтому при столкновении двух электронов мы видим два рассеянных электрона, но не знаем, какой из них откуда прилетел. Это приводит к интерференционному эффекту для электрон–электронного рассеяния. Дифференциальное сечение принимает следующий вид:

$$d\sigma_{ee} = 2\pi \left\{ \left[ \psi \left( \sin \frac{\theta}{2} \right) \right]^2 + \left[ \psi \left( \cos \frac{\theta}{2} \right) \right]^2 - \psi \left( \sin \frac{\theta}{2} \right) \psi \left( \cos \frac{\theta}{2} \right) \right\} \sin \theta d\theta. \quad (8)$$

Ион–ионные столкновения описываются аналогично, но их роль невелика: они вносят существенный вклад только в ионную вязкость. Область применимости сечений (7)-(8) намного шире, чем дают традиционные оценки теоретической физики.

Интегралы столкновений с сечениями (7)-(8) вычисляются почти до конца: коэффициенты разложения  $\delta f$  по полиномам Сонина выражаются через

интегральную экспоненту. Это кардинально упрощает задачу. Заметим, что обычно считают борновское приближение плохо применимым к кулоновским столкновениям. Однако на самом деле плохо вычисляется лишь фаза рассеяния. Сечение же рассеяния зависит лишь от модуля амплитуды рассеяния, точность которого достаточно хороша.

Далее рассматривается рассеяние на нейтральных частицах.

Потенциалы взаимодействия электронов с атомами и молекулами почти неизвестны. Теоретические методы их расчета дают лишь порядки величин. Однако задача облегчается тем, что вклад в электронный перенос дают лишь так наз. транспортные сечения рассеяния:

$$\sigma_{tr}(v) = \int_0^{\pi} (1 - \cos \theta) d\sigma(v, \theta); \quad (9)$$

дифференциальное сечение само по себе не требуется. Транспортные сечения рассеяния электронов экспериментально измерены для 20-30 атомов и примерно такого же количества молекул. Погрешность этих данных колеблется в пределах 5-20%. Для использования в расчетах их нужно было аппроксимировать, и прежде всего нужно было выбрать в каких переменных это сделать. После ряда проб и ошибок были подобраны переменные,  $\ln \sigma_{tr}$  в зависимости от  $v$ , в которых графики выглядят наиболее просто, соответственно их легче аппроксимировать. Аппроксимация наиболее ходовых веществ кубическим сплайном с наименьшим количеством узлов методом наименьших квадратов была выполнена в работе [3]. Ее весьма удобно использовать в расчетах. Максимальная погрешность аппроксимации  $\sim 5\%$ , и среднеквадратичная  $\sim 2\%$ . Это несколько лучше отдельных экспериментальных точек, но поскольку среднеквадратичный сплайн производит усреднение ошибки, такая точность соответствует максимальной точности, которую можно извлечь из экспериментов.

Для того, чтобы проверить необходимость такой точной аппроксимации, для водорода было проведено сравнение с более простой аппроксимацией (прямая). Проверка показала, что аппроксимация прямой дает результат

отличный при некоторых температурах на 7-8%. Это означает, что транспортные сечения нужно аппроксимировать очень аккуратно.

**Во второй главе** выводится пятое приближение Чепмена-Энскога.

Техника расчетов транспортных коэффициентов в приближениях Чепмена-Энскога хорошо разработана в [1]; проводимость  $\eta$  и коэффициент теплопроводности  $\lambda$  в  $k$ -м приближении определяются следующими формулами:

$$\eta_k = \eta_0 \frac{x_e Q_{2k}}{Q_{1k}}, \quad \eta_0 = \frac{3T^{3/2}}{\sqrt{8\pi}}, \quad k \geq 1; \quad (10)$$

$$\lambda_k = \lambda_0 \frac{x_e Q_{3k}}{Q_{2k}}, \quad \lambda_0 = \frac{75T^{5/2}}{8\sqrt{2\pi}}, \quad k \geq 2. \quad (11)$$

Здесь используются определители

$$Q_{pk} = \begin{vmatrix} q^{pp} & \dots & q^{pk} \\ \dots & \dots & \dots \\ q^{kp} & \dots & q^{kk} \end{vmatrix} \text{ при } p \leq k; \quad Q_{21} = 1, \quad Q_{32} = 1. \quad (12)$$

Матричные элементы этих определителей выражаются через суммы так называемых интегралов рассеяния

$$q^{km} = q^{mk} = \sum_{s \geq 1} b_s^{km} \omega^s + \sqrt{2} x_e \sum_{s, l \geq 2} b_{ls}^{km} \Omega_{ee}^{ls} \left( \frac{2}{b} \right). \quad (13)$$

Безразмерные коэффициенты  $b_s^{km}$  и  $b_{ls}^{km}$  известны для первых пяти и более приближений Чепмена-Энскога. Первая сумма в (13) состоит из интегралов рассеяния электронов на тяжелых частицах – ионах и атомах:

$$\omega^s = \xi \cdot \Omega_{ei}^{1s} \left( \frac{1}{b} \right) + \frac{4T^2}{\pi} \sum_j x_j \omega_j^s; \quad (14)$$

сумма здесь берется по нейтральным частицам. Интегралы рассеяния на нейтральных частицах в (14) являются свертками транспортных сечений с максвелловской функцией распределения электронов по скоростям:



$$\omega_j^s(T) = \int_0^\infty \sigma_{tr,j}(v) e^{-\gamma^2} \gamma^{2s+3} d\gamma, \quad \gamma = \frac{v}{\sqrt{2T}} \quad (15)$$

Дебаевские интегралы столкновений аналогичны (15), но в них подставляются транспортные сечения, полученные из дифференциальных сечений (7). При этом вычисления интегралов и суммирование по ионам разных зарядов проводятся аналитически и дают единый интеграл столкновений с ионами – первое слагаемое в (14). Аргументом этого интеграла является не параметр неидеальности  $\Gamma$ , как в классических теориях, а квантовый *параметр рассеяния*

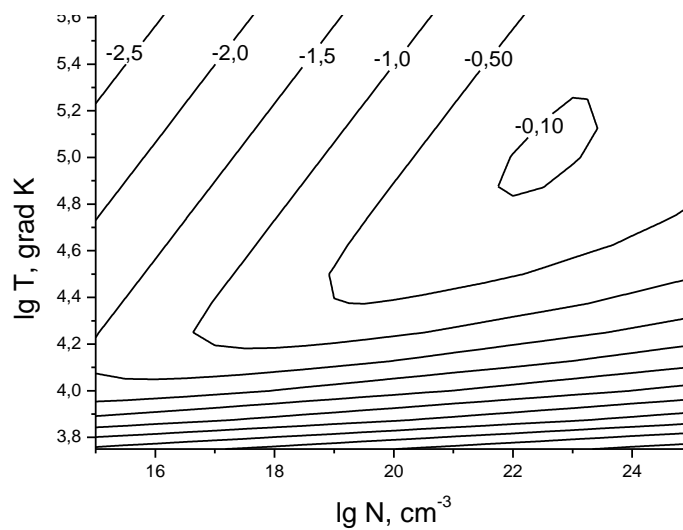
$$b = 8D^2T; \quad (16)$$

(не путать его с коэффициентами  $b_s^{km}$ ,  $b_{ls}^{km}$ ) он имеет физический смысл квадрата отношения обобщенного дебаевского радиуса (6) к дебройлевской длине волны электрона.

Вторая сумма в (13) описывает электрон-электронные столкновения. Они также являются свертками максвелловского распределения электронов, но уже не с транспортными сечениями, а с более сложными:

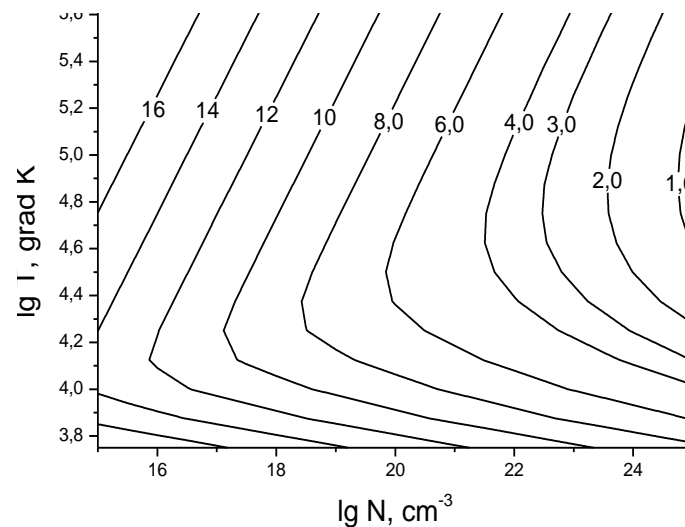
$$\int (1 - \cos^l \theta) d\sigma(v, \theta), \quad l > 1.$$

Здесь выкладки также выполняются аналитически, и аргументом интегралов является фактически тот же квантовый параметр  $b$ .



**Рис. 1.** Изолинии классического параметра  $\Gamma$  для водорода. Около линий указаны значения  $\lg \Gamma$ .  $N$  – концентрация тяжелых частиц.

Для сравнения на рис.1 приведены изолинии классического параметра неидеальности  $\Gamma$ , а на рис.2 показаны изолинии квантового параметра  $b$ . На рис.1 изолиния  $\lg \Gamma = -2$  показывает границу хорошей применимости спитцеровского выражения. В области  $\lg \Gamma > -1$  оно оказывается неприменимо. Видно, что даже для разреженной плазмы ( $\lg N = 17$ ) кулоновский логарифм невелик и может стать меньше 10. Для больших плотностей ( $\lg N = 22$ ) кулоновский логарифм близок к нулю, и классическая теория проводимости дает абсурдные результаты. А на рис.2 видно, что параметр  $b$  остается большим всюду. Он равен 100 даже при огромной плотности ( $\lg N = 24$ ). Это обеспечивает хорошую применимость квантовой теории.



**Рис. 2.** Изолинии полуквантового параметра рассеяния для водорода. Около линий указаны значения  $\lg(2b^2)$ .  $N$  – концентрация тяжелых частиц.

Далее подробно рассматриваются дебаевские интегралы рассеяния.

Дебаевские интегралы рассеяния конечны, так что при их вычислении не нужно применять искусственных процедур обрезания. Все они выражаются через интегральную экспоненту. Удобнее воспользоваться следующим выражением:

$$\varepsilon(y) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-t} dt}{y+t} = -e^y Ei(-y). \quad (17)$$

Асимптотики интегральной экспоненты при  $y \rightarrow 0$  или  $y \rightarrow \infty$ , а также аппроксимации для ее вычисления с 8 знаками приведены в [4]. Для

вычисления с 15 верными знаками в диссертации был разработан специальный алгоритм, описанный в этой главе.

Для вычисления первых пяти приближений Чепмена-Энскога нужны интегралы  $\Omega^{ls}(y)$  для следующих значений индексов. Для электрон-ионных столкновений  $l=1, 1 \leq s \leq 9$ ; напомним, что для электрон-ионных столкновений  $y=1/b$ . Для электрон-электронных столкновений нужны  $l=2, 2 \leq s \leq 8$  и  $l=4, 4 \leq s \leq 6$ , при этом для электрон-электронных столкновений  $y=2/b$ .

Для  $l=1$  и  $2$  в диссертации удалось доказать следующую рекуррентную формулу, значительно облегчающую нахождение выражений для интегралов  $\Omega^{ls}(y)$ :

$$\frac{\Omega^{ls}(y)}{y^s} = -\frac{d}{dy} \left[ \frac{\Omega^{l,s-1}(y)}{y^{s-1}} \right] \equiv (-1)^{s-l} \frac{d^{s-l}}{dy^{s-l}} \left[ \frac{\Omega^l(y)}{y^l} \right], \quad s \geq l+1 \quad (18)$$

Будем предполагать, что та же формула (18) справедлива и для  $l>2$ . Тогда для вычисления нам необходимы лишь первые члены рекуррентного ряда с  $s=l$ . Были вычислены следующие 3 начальные члена:

$$\Omega^{11}(y) = (1+y)\varepsilon(y) - 1, \quad (19)$$

$$\Omega^{22}(y) = -2y^2\varepsilon^2(y) + (4+8y)\varepsilon(y) - 6, \quad (20)$$

$$\Omega^{44}(y) = -8y^4\varepsilon^2(y) + (48+64y+16y^2+24y^3)\varepsilon(y) - (56+8y+16y^2). \quad (21)$$

Из (19), (20), (21) получаются все необходимые нам интегралы столкновений заряженных частиц. Заметим, что для  $l=1$  и  $2$  можно получить следующие некуррентные выражения:

$$\begin{aligned} \Omega_{ei}^{1s}(y) = & \left[ (s-1)! \sum_{r=0}^{s-1} \frac{(-y)^r}{r!} - (-y)^s \right] \varepsilon(y) - (-y)^{s-1} + \\ & + \sum_{r=0}^{s-3} (-y)^r \left[ (s-1)! \sum_{p=r+1}^{s-1} \frac{(p-r-1)!}{p!} - (s-r-1)! \right] \end{aligned} \quad (22)$$

$$\Omega_{ee}^{2s}(y) = -10(s-1)! + 2(-y)^s [g_s(y) - 5g_{s-1}(y) + 5g_{s-2}(y)], \quad (23)$$

где  $g_p(y) = \frac{d^p}{dy^p} \varepsilon^2(y)$ , причем  $\frac{d\varepsilon(y)}{dy} = \varepsilon(y) - \frac{1}{y}$ .

Формулы (17)-(23) позволяют вычислить все необходимые интегралы рассеяния электронов на ионах и электронах. При этом интегралы рассеяния электронов на различных ионах отличаются лишь множителями  $z_i^2$ . Поэтому при суммировании интегралов столкновения электронов со всеми ионами перед интегралом  $\Omega_{ei}^{1s}(1/b)$  появляется общий множитель  $\xi = \sum z_i^2 x_i$ ; это видно в (14).

Заметим, что в рекуррентной формуле (18) интегралы рассеяния вычисляются через многократное дифференцирование. При этом требуются весьма высокие производные. Такая операция в численных расчетах приводит к большой потере значащих цифр. Аналитическое дифференцирование, приводящее к (22), (23), лишь частично уменьшает потерю точности: в этих формулах остается суммирование знакопеременных слагаемых. Именно для того, чтобы в расчетах оставалось достаточное количество верных знаков, в диссертации был разработан алгоритм вычисления интегральной экспоненты с особенно высокой точностью. Он основан на представлении интегральной экспоненты в виде сходящегося ряда при небольших аргументах  $x$ , и асимптотически сходящейся дробью при больших  $x$ . Показано, что в качестве границы между этими представлениями целесообразно взять  $x=1$ . При этом использование 18 членов ряда и 220 цепной дроби обеспечивает относительную погрешность менее  $2 \cdot 10^{-15}$ , что превосходит потребности практики.

Столкновения с атомами приводят к интегралам рассеяния (15). Это несобственные интегралы на полупрямой. Входящие в них транспортные сечения довольно сложно зависят от скорости, поэтому интегралы можно найти только численными методами. Однако сечения при больших скоростях убывают, а весовой множитель в интеграле убывает экспоненциально. Поэтому принципиальных трудностей при вычислении не возникает, и можно пользоваться различными квадратурными формулами.

В диссертации используются квадратуры на квазиравномерных сетках. Вычисления проводятся с гарантированной точностью. Для удобства переходим в интегралах (15) от аргумента  $v$  к аргументу  $v^2$ , вводим на полупрямой квазиравномерную сетку [5] и вычисляем интеграл по

квадратурной формуле средних или трапеций. Кубическая сплайн-аппроксимация сечений [3] обеспечивает непрерывность второй производной, поэтому данные квадратурные формулы имеют второй порядок точности, независимо от расположения узлов квадратурной формулы по отношению к узлам сплайна. Далее сетку однократно сгущается и делается апостериорная оценка численной погрешности методом Ричардсона. Если погрешность мала, расчет интеграла (15) оканчивается; если она велика, сгущение сетки повторяется до тех пор, пока не будет достигнута требуемая точность. Для этих интегралов достаточно получить 4-6 верных знаков.

**В третьей главе** рассматривается вопрос сходимости приближений Чепмена-Энскога. Вначале рассматривается случай так называемого лоренцева газа, то есть газа, в котором отсутствуют столкновения электронов между собой.

В приближении лоренцева газа проводимость  $\eta$  и коэффициент электронной теплопроводности  $\lambda$  выражаются только через транспортные сечения рассеяния. Если рассеивающий газ состоит из смеси  $j$ -х сортов частиц с концентрациями  $x_j$ , то проводимость и теплопроводность точно выражаются через квадратуры [1]:

$$\eta = \frac{\sqrt{2}x_e}{3\sqrt{\pi}T^{5/2}} \int_0^{\infty} \frac{\exp(-v^2/2T)v^3 dv}{\sum_j x_j \sigma_{tr,j}(v)}, \quad (24)$$

$$\lambda = \frac{x_e}{3\sqrt{2\pi}T^{5/2}} \int_0^{\infty} \frac{\exp(-v^2/2T)v^5 dv}{\sum_j x_j \sigma_{tr,j}(v)}. \quad (25)$$

На верхнем пределе интегралы сходятся хорошо благодаря быстро убывающей экспоненте в числителе. Для вычисления таких интегралов вновь применяются квадратуры на квазиравномерных сетках.

По формулам (10)-(16) можно вычислить  $k$ -ые приближения Чепмена-Энскога для лоренцева газа, надо только в формуле (13) отбросить вторую сумму. Затем эти приближения можно сравнить с точными выражениями (24)-

(25). Это покажет нам скорость сходимости приближений. Разумеется, эта скорость зависит от вида сечений  $\sigma_j(v)$

Далее отдельно рассматривается рассеяние на ионах.

Пусть температура в плазме достаточно высока, так что нейтральных частиц не осталось. Тогда рассеивающая среда состоит только из ионов. В этом случае транспортное сечение легко вычисляется:

$$\sigma_{tr}(v) = \frac{2\pi z^2}{v^4} \left[ \ln(1+\beta) - \frac{\beta}{1+\beta} \right], \quad \beta = 4v^2 D^2. \quad (26)$$

Подставим сечение (26) в интегралы (24)-(25) для проводимости и теплопроводности. Тогда суммирование по всем ионам в знаменателе подынтегрального выражения легко выполняется. Это дает проводимость и коэффициент теплопроводности электрон-ионного лоренцева газа.

$$\eta = \frac{2}{3} \left( \frac{2T}{\pi} \right)^{3/2} \frac{1}{b^4 \zeta} \cdot \int_0^\infty \frac{\exp(-\beta/b) \beta^3 d\beta}{\ln(1+\beta) - \beta/(1+\beta)}, \quad (27)$$

$$\lambda = \frac{2T^{5/2}}{3\pi^{3/2} b^5 \zeta} \cdot \int_0^\infty \frac{\exp(-\beta/b) \beta^4 d\beta}{\ln(1+\beta) - \beta/(1+\beta)}. \quad (28)$$

Интегралы (27)-(28) хорошо сходятся при  $\beta \rightarrow \infty$  из-за быстро затухающей экспоненты в числителе. При  $\beta \rightarrow 0$  знаменатель близок к  $\beta^2/2$ , а в числителе стоят соответственно  $\beta^3$  или  $\beta^4$ ; поэтому никаких особенностей не возникает. В работе они вычисляются с помощью квадратур на квазиравномерных сетках.

Для приближений Чепмена-Энскога можно пользоваться формулами (10)-(12). Элементы определителя (12) принимают вид

$$q^{km} = q^{mk} = \xi \cdot \sum_{s \geq 1} b_s^{km} \Omega_{ei}^{1s} \left( \frac{1}{b} \right), \quad (29)$$

$\Omega_{ei}^{1s}$  вычисляется по формуле (22).

Расчеты проводились для двух значений среднего заряда ионов  $\zeta = 1$  и  $\zeta = 100$ . Значения температуры и плотности среды подбирались так, чтобы параметр  $b$  менялся в диапазоне от  $10^2$  до  $10^{12}$ . Эти же значения параметра брались в выражениях (27)-(28). Сравнение  $k$ -тых приближений ЧЭ для

проводимости  $\eta_k$  и  $\lambda_k$  с точными значениями  $\eta, \lambda$  позволяло оценить скорость их сходимости. Рассмотрим результаты расчетов.

Первое приближение для проводимости в 2-3 раза отличается от точного ответа. Однако второе приближение отличается всего лишь на 1-4%, третье – на ~0,1%, четвертое – на ~0,02% и пятое менее чем на 0,001%. Это очень быстрая сходимость. А достигнутая точность существенно превышает потребности физиков: характерная погрешность эксперимента здесь превосходит 10%.

Заметим, что: 1) отношения  $\eta_k/\eta$  почти не зависят от заряда  $\zeta$ ; 2) зависимость от параметра  $b$  невелика, но отчетливо видна; 3) приближения  $\eta_k$  сходятся к  $\eta$  монотонно снизу.

Если бы мы не располагали точным ответом, то сходимость приближений пришлось бы контролировать, сравнивая соседние приближения. С увеличением  $k$  приближения быстро сближаются, а разница между 4-м и 5-м приближением для проводимости не превышает 0.02%. Такой внутренний контроль сходимости позволяет уверенно пользоваться 5 приближением.

Далее отдельно рассматривается рассеяние на нейтральных частицах.

Температуры в несколько тысяч градусов можно считать невысокими. При них степень ионизации мала и концентрация  $x_e \ll 1$ . Соответственно, малы концентрации ионов, а суммарная концентрация нейтральных частиц близка к 1. При этом основную роль играют столкновения с тяжелыми нейтральными частицами, а вклад электрон-ионных и электрон-электронных столкновений мал. Таким образом, в этом случае приближение лоренцева газа является хорошим.

Для приближений Чепмена-Энскога можно пользоваться формулами (10)-(12). Элементы определителя (12) принимают вид

$$q^{km} = q^{mk} = \frac{4T^2}{\pi} \sum_{s \geq 1} b_s^{km} \sum_j x_j \omega_j^s, \quad (30)$$

в формулу (15) для интеграла  $\omega_j^s(T)$  подставляется транспортное сечение рассеяния электрона на  $j$ -м сорте нейтральных частиц. Для реальных атомов и молекул зависимости  $\sigma_{lr}(v)$  очень трудно рассчитать теоретически. Можно

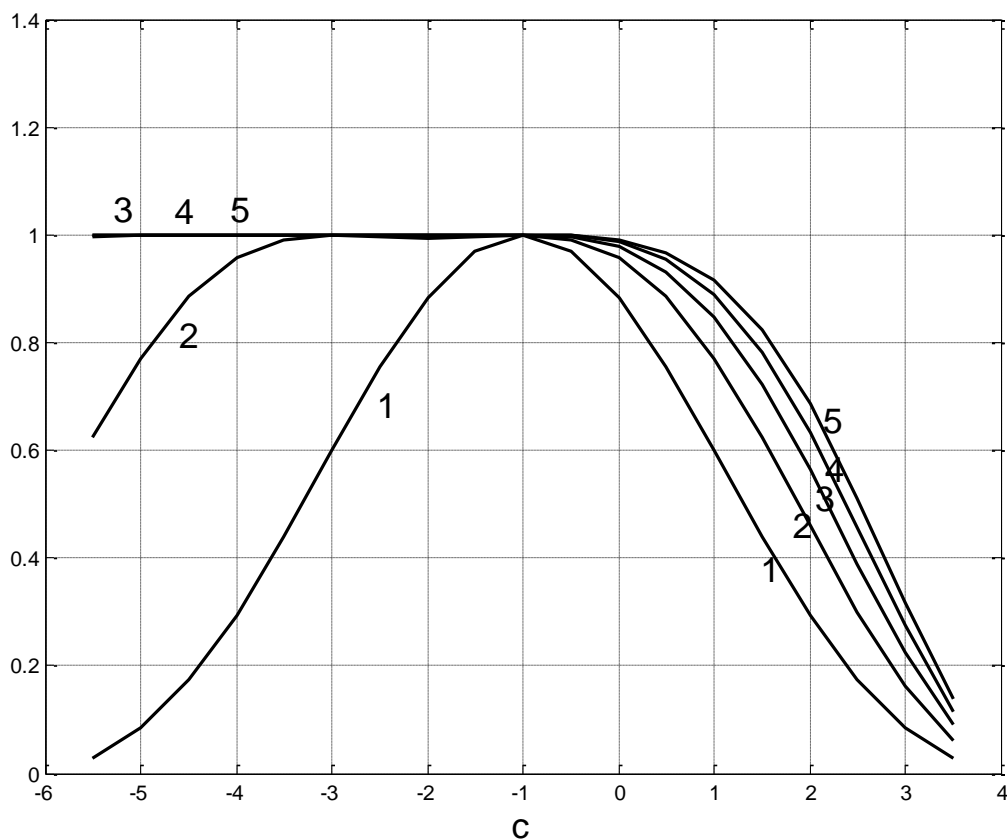
использовать аппроксимацию экспериментальных данных [3] для подстановки в интегралы (15), (24)-(25). Однако это неудобно для сравнения. Поэтому в диссертации рассматривается простое модельное сечение.

Пусть есть только один сорт тяжелых частиц, а транспортные сечения рассеяния электронов на них следующим образом зависят от скорости:

$$\sigma_{tr}(v) = const \cdot v^c, \quad -6 < c < 4; \quad (31)$$

далее без ограничения общности можно считать  $const = 1$ . В этом случае все три интеграла (15), (24)-(25) берутся точно.

Численные расчеты отношений  $\frac{\eta_k}{\eta}$  и  $\frac{\lambda_k}{\lambda}$  были проведены для всего допустимого диапазона значений показателя степени  $c$ . Отношения для проводимости показаны на рис.3. Видно, что первое приближение является плохим при любых показателях кроме  $c \approx -1$ . Однако второе приближение дает 5% точность уже в диапазоне  $-4 \leq c \leq 0$ . Следующие приближения сходятся еще лучше. Пятое приближение имеет точность не хуже 1% при  $-6 \leq c \leq 0$ . Таким образом, в диапазоне  $c \leq 0$  сходимость является хорошей.





**Рис. 3.** Зависимость сходимости от  $c$ ; цифры около линий – номера приближений.

При  $c > 0$  сходимость быстро ухудшается, и при  $c = 4$  отсутствует.

Для всех экспериментально исследованных веществ при больших скоростях сечения убывают при увеличении скорости. Это соответствует модельному примеру с  $c < 0$ . Таким образом, при высоких температурах для реальных слабоионизованных газов следует ожидать хорошей сходимости. Лишь при довольно низких температурах наблюдаются участки возрастания  $\sigma_{tr}(v)$ . В этих случаях следует ожидать удовлетворительной сходимости.

Как и для полностью ионизованных газов, приближения ЧЭ сходятся монотонно снизу. Для теплопроводности картина аналогичная (лишь число приближений на 1 меньше). Скорость сходимости можно хорошо контролировать, сравнивая последовательные приближения между собой.

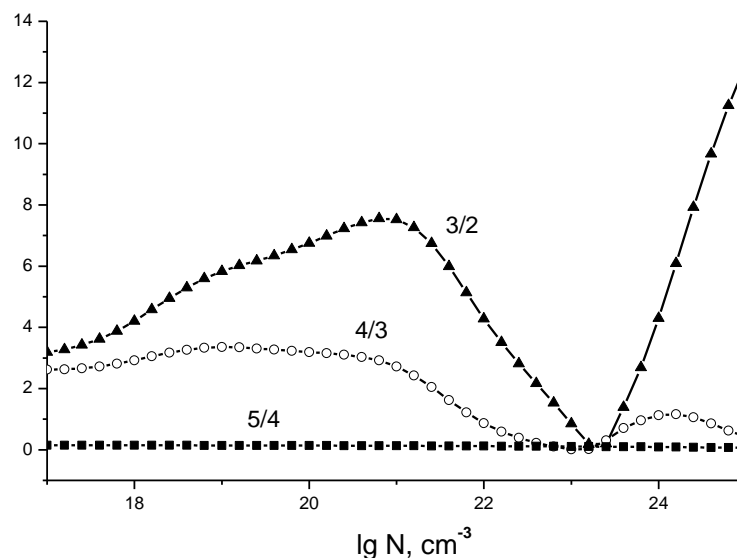
**В четвертой главе** описана программная реализация и результаты расчетов. На основе описанных выше методов был составлена программа. Она позволяет рассчитывать подробные таблицы проводимости и электронной теплопроводности, а также некоторые основные параметры, например классический параметр неидеальности  $\Gamma$  или полуквантовый параметр рассеяния  $b$ . В качестве исходных данных для нее задаются сетка по температуре и объему (плотности), а также данные по составу газо-плазменной смеси во всех узлах этой сетки (они берутся как результат расчета другой программы).

По составу смеси требуются следующие величины: концентрация электронов  $x_e$ , концентрации всех сортов нейтральных частиц  $x_j$ , средний квадрат заряда ионов  $\xi$ . Сведений о детальном ионном составе не требуется.

Далее приводятся некоторые примеры расчетов и обсуждаются их результаты.

На рис. 4 показана сходимость приближений Чепмена–Энскога на примере железа. На нем нанесены графики относительных отклонений

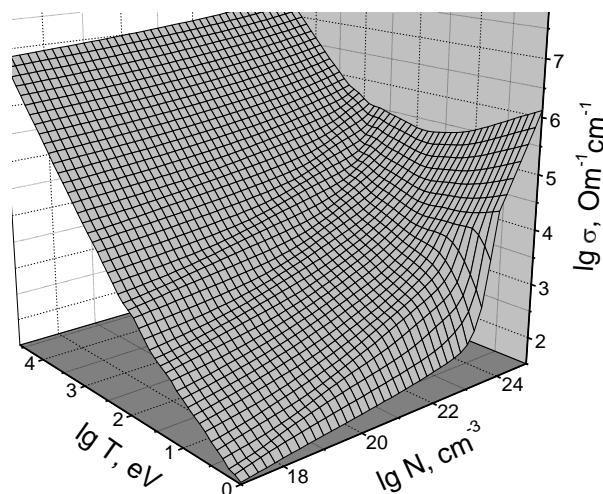
последовательных приближений (измеренные в 0.1%, то есть в тысячных долях). Видно, что даже отличие третьего приближения от второго в основном не превышает 1%, четвертого от третьего – 0.5%, а пятого от четвертого еще меньше. Это иллюстрирует быструю сходимость приближений. Видно, что от плотности скорость сходимости зависит довольно заметно. Более подробные исследования показывают, что зависимость от температуры гораздо слабее. Для других температур результаты сходные, для водорода сходимость приближений несколько медленнее, но также достаточно быстрая. Поэтому можно считать, что использование пятого приближения Чепмена–Энскога обеспечивает точность расчета проводимости не хуже 0.5%.



**Рис. 4.** Сходимость приближений Чепмена–Энскога для железа ( $T=12600$  К). Ордината – отличие последовательных приближений в 0.1%. Около кривых указаны номера приближений.

На рис.5. показана проводимость железа, рассчитанная в пятом приближении Чепмена–Энскога. При наименьшей плотности  $\lg N = 17$  поведение изолинии хорошо соответствует классическим представлениям. В интервале  $T = 1 - 10 \text{ KeV}$  вещество полностью ионизовано, и наклон изолинии соответствует классическому закону  $\eta \sim T^{3/2}$ . В диапазоне  $1 \text{ eV} - 1 \text{ KeV}$  средний наклон изолинии несколько меньше, так как происходит ионизация железа, и появление ионов большей кратности увеличивает рассеяние электронов и несколько уменьшает проводимость. На изотерме  $T = 10 \text{ KeV}$  вещество полностью ионизовано, и проводимость слегка возрастает с увеличением

плотности. Это объясняется уменьшением дебаевского радиуса, что приводит к уменьшению рассеяния частиц. Поведение линий при больших плотностях и невысоких температурах существенно более сложное.



**Рис. 5.** Проводимость железа.

**В заключении** сформулированы основные результаты работы.

**В приложении** приводится текст программы для расчета проводимости и теплопроводности водорода.

### **Основные результаты**

Построена «модель-алгоритм-программа» для расчета электронной проводимости и теплопроводности веществ в очень широком диапазоне температур (1 эВ – 10 КэВ) и концентраций ( $10^{16} - 10^{24} \text{ см}^{-3}$ ) обеспечивающая точностью не хуже 0.1% для проводимости и 0.5% для теплопроводности.

Такие диапазоны применимости и точность существенно превосходят мировой уровень. Модель надежно апробирована сравнением с экспериментами.

Эти результаты обеспечиваются:

- 1) использованием квантовой теории рассеяния электронов;
- 2) включением в расчеты пяти приближений Чепмена-Энскога и обоснованием их сходимости;

- 3) существенным уточнением значения дебаевского радиуса при больших плотностях;
- 4) введением в расчеты наиболее точных сечений рассеяния электронов на нейтральных частицах;
- 5) расчетом несобственных интегралов с помощью квадратур на квазиравномерных сетках с оценкой погрешности методом Эйткена.
- 6) использованием высокоточного алгоритма расчета интегральной экспоненты с оценкой погрешности;

### **Литература**

1. *С.Чепмен, Т.Каулинг.* Математическая теория неоднородных газов. // М.: Изд. иностранной литературы, 1960, 511с.
2. *Н.Н.Калиткин, Л.В. Кузьмина.* Модели неидеальной плазмы. // Препринт ИПМ им. Келдыша, 1989, №16, 38 с.
3. *Н.М.Шляхов.* Сплайн-аппроксимации транспортных сечений рассеяния электронов на некоторых атомах и молекулах. // Математическое моделирование, 2008, т. 20 (в печати).
4. *W.Gautschi, W.F.Cahill.* Exponential Integral and Related Functions. // Handbook of mathematical functions. National Bureau of Standards, December 1972.
5. *Н.Н.Калиткин, А.Б.Альшин, Е.А.Альшина, Б.В.Рогов.* Вычисления на квазиравномерных сетках. // Физматлит, 2005, 224с.

### **Основные результаты опубликованы в работах**

1. *Н.Н.Калиткин, И.А.Панин.* Вклад нейтральных частиц в электронные транспортные коэффициенты газов. // Математическое моделирование, 2009, т. 21, №7, с. 83-92.

2. *Н.Н.Калиткин, И.А.Панин.* О сходимости приближений Чепмена-Энскога при расчете электронных транспортных коэффициентов. // Математическое моделирование, 2008, т. 20, №6, с. 86-98.
3. *Н.Н.Калиткин, И.А.Панин.* Вычисление электронного переноса в плазме в высоких приближениях Чепмена-Энскога. // Математическое моделирование, 2008, т. 20, №4, с. 103-116.
4. *Н.Н.Калиткин, И.А.Панин.* О вычислении интегральной экспоненты. // Математическое моделирование, 2008, т. 20, №1, с. 87-91.
5. *Н.Н.Калиткин, И.А.Панин.* Электронный перенос в неидеальной плазме. // Сборник трудов международной конференции «IX Харитоновские тематические научные чтения», Саров, 2007
6. *Альшина Е.А., Калиткин Н.Н., Панин И.А., Пошивайло И.П.* Квадратуры от функций с особенностями // ДАН, 2006, т. 410, №1, стр. 32-35.
7. *Альшина Е.А., Калиткин Н.Н., Панин И.А.* Гауссово - сеточные квадратуры для несобственных интегралов. // Сборник трудов XI Всероссийской школы-семинара «Современные проблемы математического моделирования», Ростов-на-Дону, 2005, стр. 44-49.

Панин Илья Александрович

Прецизионный расчет электронного переноса в неидеальной плазме

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Отпечатано в Институте математического моделирования РАН  
Тираж 100 экз.