Moderní počítačová fyzika I (NEVF160)

Modelování systémů mnoha částic – hybridní modelování

ZS2022

Řešení Boltzmannovy rovnice
Hybridní modely plazmatu

Boltzmannova rovnice

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla f + \boldsymbol{a} \cdot \nabla_{\boldsymbol{v}} f = \frac{\delta f}{\delta t}$$

Normalizace

$$\int_{\boldsymbol{v}} f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, t) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} = n(\boldsymbol{x}, t)$$

Srážkový člen

$$\frac{\delta f_i}{\delta t} = \int_{\Omega} \int_{\boldsymbol{v}_j} (f_i(\boldsymbol{v}_i') f_j(\boldsymbol{v}_j') - f_i(\boldsymbol{v}_i) f_j(\boldsymbol{v}_j)) g_{ij} \sigma_{ij}(\Omega, g) \, \mathrm{d}\Omega \, \mathrm{d}\boldsymbol{v}_j + \\ + \text{neelastické} + \text{ionizace} + \text{rekombinace} + \ldots \quad (1)$$

$g_{ij} = |\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v}_j|$

Metody řešení Boltzmannovy rovnice

- Kinetické metody - přímé řešení 6D Boltzmannovy rovnice - nutné zjednodušení
- Částicové metody - "přibližné„ řešení metodou Monte Carlo
- Tekutinové modely - řešení ve 3D prostoru - přibližné rychlostní rozdělení

Hybridní modely - kombinace výše uvedených

- Kinetické a částicové modely jsou v principu přesné na rozdíl od tekutinových

Kinetické modely

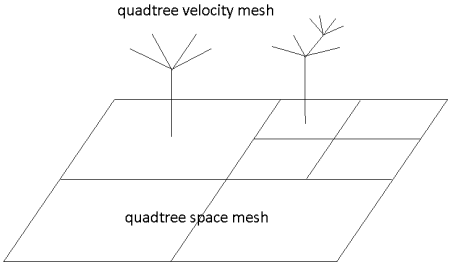
Řešení integro-diferenciální rovnice v 6D je obtížné

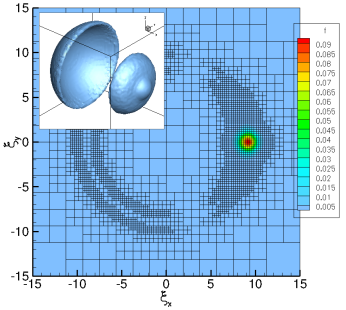
Příklad ELENDIF:

- 0D v prostoru, 1D v rychlostech (0D1V), (Morgan, Penetrante 1989)

Moderní kinetické modely i 3D3V

- Adaptivní mříže - stromové struktury, stromy stromů
- Spektrální metoda pro výpočet srážkového členu...
- MC integrace





Arslanbekov 2013

Tekutinové modely

- Integrály Boltzmannovy kinetické rovnice (BKR)
- Střední hodnota funkce $\langle A \rangle = \frac{1}{n} \int_{\boldsymbol{v}} A(\boldsymbol{v}) f(\boldsymbol{v}) \mathrm{d}\boldsymbol{v}$

Rovnice kontinuity $\int (\mathrm{BKR}) \mathrm{d}\boldsymbol{v}$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{J} = S\,; \quad \boldsymbol{J} = n\boldsymbol{V}\,; \quad \boldsymbol{V} = \langle v \rangle$$

Rovnice pro hybnost $\int m\boldsymbol{v} (\mathrm{BKR}) \mathrm{d}\boldsymbol{v}$

$$m\frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial t} + m\boldsymbol{V} \cdot \nabla \boldsymbol{V} = \langle \boldsymbol{F} \rangle - \frac{1}{n} \nabla \cdot \boldsymbol{P} - m_r \nu \boldsymbol{V} - m\frac{1}{n} S\boldsymbol{V}$$

Rovnice pro energii $\int \epsilon(\mathrm{BKR})\mathrm{d}\boldsymbol{v}$

$$\frac{\partial n\bar{\epsilon}}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{\Gamma}_\epsilon = S_\epsilon \; ; \quad \boldsymbol{\Gamma}_\epsilon = -\frac{5}{3}\mu \boldsymbol{E} n\bar{\epsilon} - \frac{5}{3} D \nabla \bar{\epsilon}$$

Transportní koeficienty, Einsteinův vztah

$$D = \frac{kT}{m_r \nu} \, , \quad \mu = \frac{q}{m_r \nu} \, , \quad D = kT\frac{\mu}{q}$$

Poissonova rovnice, MHD rovnice a tak dále...

Omezení tekutinových modelů

Vše odvozeno za předpokladu lokální termodynamické rovnováhy LTE / Maxwellova rozdělení

- Nemaxwellovské rozdělení lze snadno zohlednit, ale musí být známo předem
- V neutrálních plynech je jednoduchým kritériem validity lokální Knudsenovo číslo v závislosti na parametru Q, např ρ, p

$$Kn_L = \lambda \frac{|\nabla Q|}{Q} \ll 1$$

- Pokud $Kn_L \ll 1$, chování je lokální
- Spojitý model nelze aplikovat, pokud rychlostní rozdělení není předem známé / v LTE

Hybridní modely

Problematická složka se počítá kineticky / částicově

- Existuje mnoho různých přístupů
- Vhodná kombinace závisí na vlastnostech fyzikálního systému

Příklad: sluneční vítr

- Dominantní jsou ionty ($E \approx$ keV)
- Energie a hybnost elektronů jsou zanedbatelné
- Elektrony udržují kvazineutralitu

Hybridní model slunečního větru

- Protony

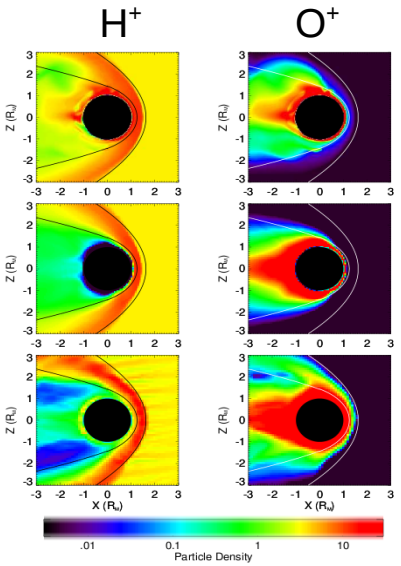
$$m_i \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i}{\mathrm{d}t} = q_i(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v}_i \times \boldsymbol{B})$$

- Elektrony: $m_e = 0$, $-q_e n_e = q_i n_i$

$$n_e m_e \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{V}_e}{\mathrm{d}t} = 0 = q_e(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{V}_e \times \boldsymbol{B}) - \nabla \cdot \boldsymbol{P}_e$$

- Mag. pole

$$\nabla \times B = \mu_0 \boldsymbol{J} = \mu_0 q_i n_i (\boldsymbol{V}_i - \boldsymbol{V}_e)\,, \qquad \frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} = -\nabla \times \boldsymbol{E}$$



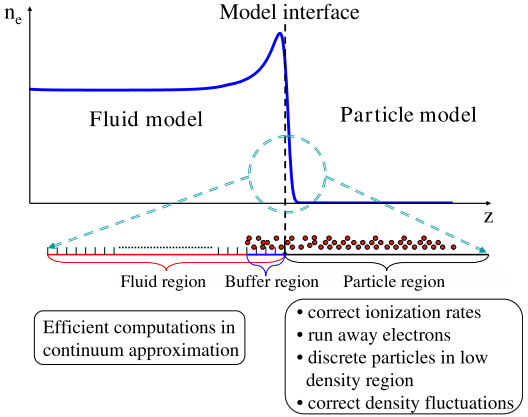
Brain et al. Icarus

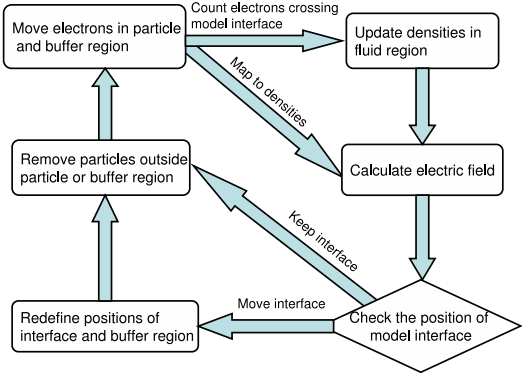
Hybridní model průrazu výboje

- Silně ionizované plazma ve výboji vs. téměř neionizovaný okolní plyn
- Jednotlivé elektrony způsobují laviny, runaway elektrony
- Prostorový hybridní model
  - Vnitřek výbojového vlákna (streameru) spojitý
  - Okraj a okolí částicové

Hybridní model průrazu výboje

- Interakce spojité a nespojité části
- Kritérium - $E > E_{\mathrm{min}}$, $n < n_{\mathrm{max}}$



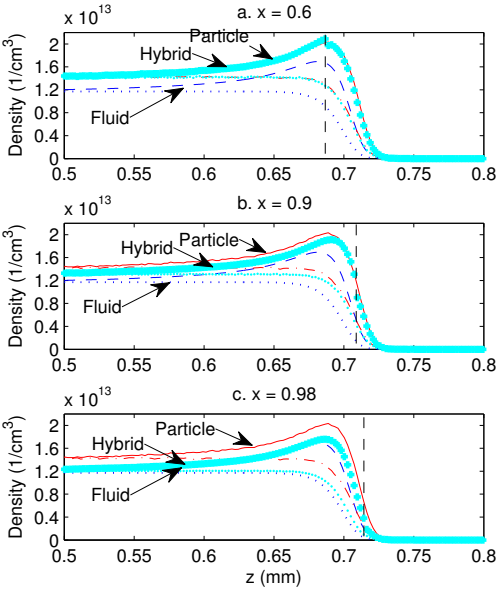


http://arxiv.org/abs/0712.2127

Hybridní model průrazu výboje

- Srovnání s částicovým a tekutinovým modelem

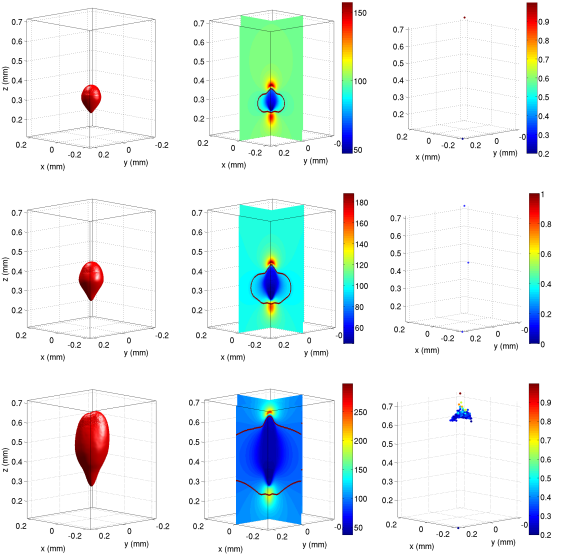
http://arxiv.org/abs/0712.2127



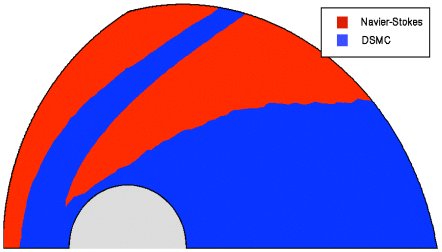
Hybridní model průrazu výboje

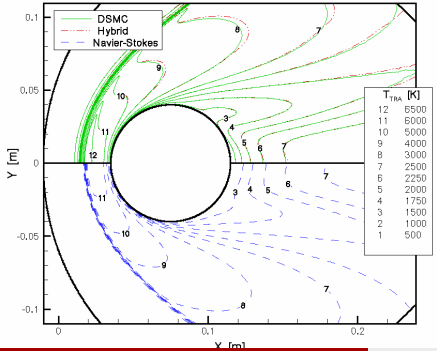
- Výsledky modelu

`http://arxiv.org/abs/1103.2148`



Hybridní model rázové vlny





- také prostorový hybrid
- Kritérium - Knudsenovo číslo

Boyd I. D. International Symposium on Rarefied Gas Dynamics 2010

Stacionární nízkoteplotní plazma

- Stacionární, ale značně nerovnovážné
- Rozdělení elektronů je nemaxwellovské
- Transportní koeficienty μ, D, $k \ldots$ nejsou správné
- Lze aplikovat spojitý model s transportními koeficienty, které odpovídají f

Příklad 1: Lokální model

- Transportní koeficienty lze počítat podle lokálního el. pole (ELENDIF, bolsig)

Příklad 2: Nelokální částicový model

- Transportní koeficienty lze počítat neselfkonzistentní částicovou simulací
- Elektrické pole tekutinového modelu

Hybridní model Langmuirovy sondy

Nelokální částicový model
Spojitá část modelu

- Drift-difúzní aproximace pro ionty i elektrony (srážkové plazma)

$$\frac{\partial n_{i,e}}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{J}_{i,e} = 0 \; ; \quad \boldsymbol{J}_{i,e} = \pm \mu_{i,e} n_{i,e} \boldsymbol{E} - D_{i,e} \nabla n_{i,e}$$

- Poissonova rovnice

$$\Delta \phi = -\frac{e}{\epsilon_0}(n_i - n_e)$$

- Okrajová podmínka na sondě

$$\boldsymbol{J}_e \cdot \boldsymbol{n} = -n_e \mu_e \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{n} + \frac{1}{4} \bar{v} n_e$$

Hybridní model Langmuirovy sondy

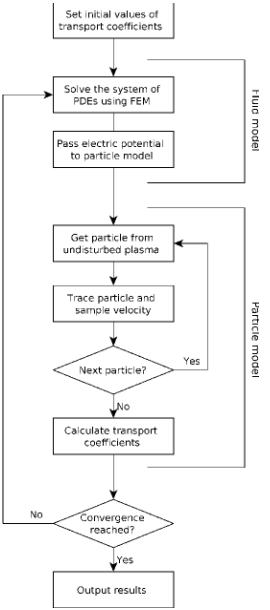
Iterační výpočet transportních koeficientů

- Neselfkonzistentní částicový model vypočte lokální rychlostní rozdělení
- Určení lokálních transportních koeficientů
- Srážková frekvence

$$\nu_{kl} = \langle n_l \sigma(g_{kl}) g_{kl} \rangle_{kl}$$

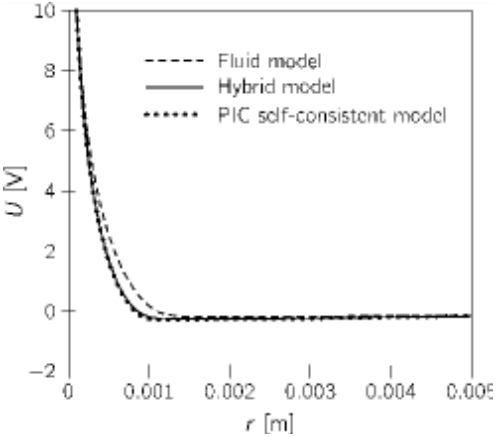
- Pohyblivost a difúze (chaotická rychlost c)

$$\mu_k = \frac{q_k}{m_k \nu_k}, \quad D_k = \frac{\langle c_k^2 \rangle}{3\nu_k}$$

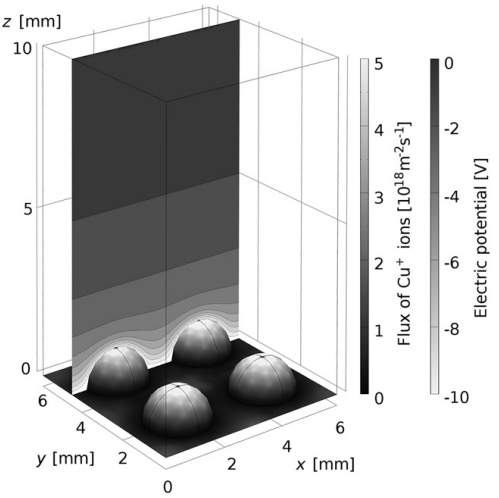


Hybridní model Langmuirovy sondy

Výsledky modelu



V. Hruby, R. Hrach / IEEE TPS 38 (2010) 2328



V. Hruby, R. Hrach / Vacuum 90 (2013) 109e113