

Глава 5. Программа для численного расчета константы скорости процесса.

5.1 Интерфейс программы

Для расчета скоростей реакций мною была разработана программа. Вид основного окна представлен на Рисунок 5.1 и Рисунок 5.2

У программы два режима работы: чтение сечений ионизации из файла и вычисление сечений по формуле из работы [13]. Режим выбирается переключателем в первой строке.

Во всех полях десятичным разделителем является запятая. При использовании точки или других недопустимых символов поле, в которое они вводятся, очистится и появится сообщение об ошибке.

В режиме «Сечения из файла» файл, из которого считываются сечения, вводятся в формате *.txt. Файл выбирается после нажатия кнопки «Ввести файл с данными». В первом столбце температура электронов в эВ, во втором – сечение ионизации в см², столбцы без заголовков. Десятичный разделитель точка. При вводе данных в других величинах это можно скорректировать с помощью полей «T scale» и «Sig scale». Тогда данные будут вводиться в *Tscale* * эВ и в *Sigscale* * см².

В поле «m» вводятся масса ионизирующих частиц в единица массы электрона. Так, например, при ионизации электронами $m = 1$, а при ионизации протонами $m = 1836$. Таким образом программа может быть использована для вычисления скоростей ионизации любыми частицами.

В режиме «Сечения из формулы» в правой части программы вводятся параметры формулы из работы [13]. a, b, c – параметры аппроксимации. $c = 1$ для нейтральных атомов, $c = 0.75$ для положительных и отрицательных ионов. Параметры a, b зависят от количества выбитых электронов n и приведены в Табл. 3.2.

В поле «N» вводится полное количество электронов мишени. В поле «I» вводится потенциал ионизации n электронов мишени, как в (3.9).

В группе полей справа вводятся параметры выходных данных.

1. T_1 – начальная температура [эВ] вычисления скоростей ионизации.
2. T_2 – конечная температура [эВ].
3. T_h – шаг по температуре [эВ].

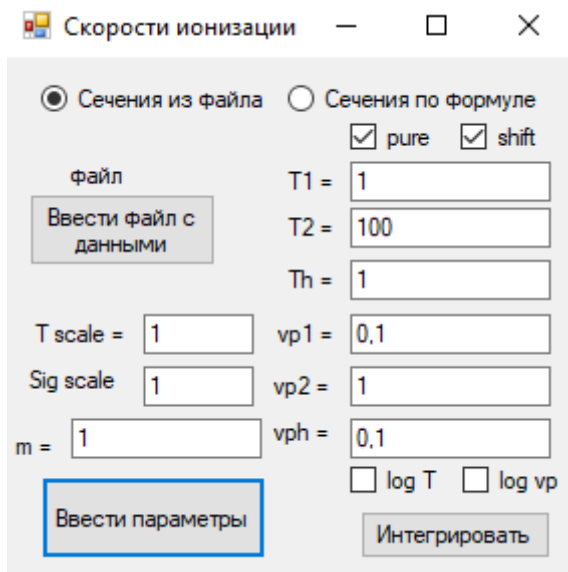


Рисунок 5.1: Основное окно программы в режиме чтения сечения из файла

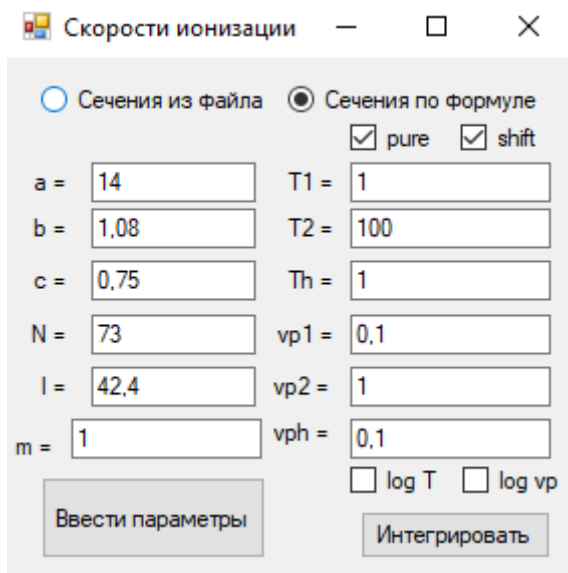


Рисунок 5.2: Основное окно программы в режиме вычисления сечения по формуле

4. v_{p1} – начальная скорость пучка [a.u.] при вычислении скоростей ионизации.
5. v_{p2} – конечная скорость пучка [a.u.].
6. v_{ph} – шаг по скорости пучка [a.u.].

Переключатель «pure» включает интегрирование по «чистому» распределению Максвелла. Переключатель «shift» включает интегрирование по сдвинутому Максвеллу. Если оба переключателя выключены, программа не будет делать ничего. Переключатели «log T» и «log v_p » – включают «логарифмический» масштаб шага. При неактивных переключателях за один шаг температура или скорость пучка увеличивается на величину шага. При активных переключателях температура или скорость пучка увеличивается в 10 раз за T_h или v_{ph} шагов.

Данные вводятся после нажатия кнопки «Ввести данные». Выводятся данные в файл формата *.txt, файл выбирается после нажатия кнопки «Интегрировать». В первом столбце выводится температура в эВ, во втором – скорость пучка в a.u., в третьем – константа скорости ионизации в см³/с. После выполнения интегрирования появится сообщение «Готово».

5.2 Методы интегрирования

Для интегрирования в программе использовалась библиотека GSL [16].

В режиме «Сечения из файла» интегрирование ведется в пределах от наименьшего значения энергии электронов в файле до наибольшего. Для интегрирования необходима непрерывная функция, поэтому средствами той же библиотеки GSL сечение ионизации интерполируется кубическим сплайном, как функция от энергии электронов. Результирующая кривая является кусочно-кубической на каждом интервале с соответствующими первой и второй производными в предоставленных точках данных. Вторая производная выбирается равной нулю в первой и последней точках.

Для численного интегрирования используется алгоритм QAG. Область интегрирования делится на подынтервалы, и на каждой итерации подынтервал с наибольшей расчетной ошибкой делится пополам. Это быстро уменьшает общую ошибку, поскольку подынтервалы концентрируются вокруг локальных трудностей в подынтегральном выражении. Ошибка уменьшается до того, как достигнет 0,1%.

В режиме вычисления «Сечения по формуле» интегрирование происходит по скорости, от скорости, на которой становится возможной ионизация, до бесконечности.

Для интегрирования в бесконечных пределах используется замена переменной $x = a + (1 - t)/t$

$$\int_a^\infty f(x)dx = \int_0^1 f\left(a + \frac{1-t}{t}\right) \frac{dt}{t^2} \quad (5.1)$$

Таким образом интеграл в бесконечных пределах сводится к интегралу на отрезке с особенностью. Наличие интегрируемой особенности в области интегрирования приводит к тому, что адаптивная процедура концентрирует новые подинтервалы вокруг особенности. По мере уменьшения размера подинтервалов последовательные приближения к интегралу сходятся предельным образом.