

Численные эксперименты

Одномерное уравнение

Рассмотрим следующую задачу для электронной концентрации n :

$$\begin{cases} \frac{\partial n}{\partial t} = P - kn + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial n}{\partial z} + un \right) \\ n|_{z=100 \text{ км}} = \frac{P(z=100 \text{ км})}{k(z=100 \text{ км})} \\ \left(D \frac{\partial n}{\partial z} + un \right) \Big|_{z=500 \text{ км}} = F = \text{const} \end{cases}$$

Здесь D — коэффициент амбиполярной диффузии, $u = D \left(\frac{1}{T_p} \frac{\partial T_p}{\partial z} + \frac{m_i g}{2kT_p} \right)$ — эффективная скорость, P и kn — слагаемые, отвечающие процессам ионизации при столкновении O и $O+$ и рекомбинации соответственно. В используемой модели температура, концентрация нейтралов, зависимости $D(z)$, $k(z)$ и $P_1(z)$ — внешние параметры.

Вблизи нижней границы влияние диффузионного слагаемого и переноса пренебрежимо малы по сравнению с процессами фотохимии. Напротив, на верхней части исследуемого высотного интервала преобладают диффузионные процессы, а P и k уже не играют роли. Важной особенностью рассматриваемой задачи является изменение входящих в уравнение коэффициентов D , P , k , u на рассматриваемом отрезке на несколько порядков. Характерные величины на нескольких высотах представлены в следующей таблице:

	$z_1 = 200 \text{ км}$	$z_2 = 300 \text{ км}$	$z_3 = 500 \text{ км}$
$D, \text{ см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$	$3,1 \cdot 10^9$	$3,4 \cdot 10^{10}$	$4,2 \cdot 10^{12}$
$k, \text{ с}^{-1}$	$5,2 \cdot 10^{-3}$	$5,5 \cdot 10^{-5}$	$1,3 \cdot 10^{-8}$
$P_1, \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$	$1,5 \cdot 10^3$	$1,2 \cdot 10^2$	1,3
$u_{\text{эфф}}/D, \text{ см}^{-1}$	$4,8 \cdot 10^{-8}$	$4,5 \cdot 10^{-8}$	$3,6 \cdot 10^{-8}$

Характерные времена различных физических процессов существенно различны, поэтому рассматриваемая задача жесткая. Следовательно, по времени рассматриваем неявные схемы: во всех случаях производную по времени аппроксимируем по формуле $\frac{\partial n}{\partial t} \approx \frac{n^{j+1} - n^j}{\tau}$, а в правой части все слагаемые

берём на следующем временном слое с номером $(j + 1)$. С учётом этого замечания далее в записи различных аппроксимаций правой части будем писать только нижние индексы у n , подразумевая всегда верхний индекс $(j + 1)$.

От разностной схемы требуется выполнение закона сохранения массы, а также сохранение неотрицательности значений n на следующем временном слое, если это свойство было выполнено на предыдущем. Эти требования связаны с отсутствием физического смысла у решений, не сохраняющих массу или содержащих отрицательные значения концентрации.

Перейдем к получению используемых разностных схем. Введём следующие обозначения для шагов по пространству:

$$h_i = z_{i+1} - z_i$$

$$h_{i+1/2} = z_{i+1/2} - z_{i-1/2}$$

В точке $z = z_i$ для слагаемого $\frac{\partial}{\partial z} D \frac{\partial n}{\partial z}$ в разностных схемах используется следующая аппроксимация, полученная двойным применением формулы центральной разности на отрезках $[z_{i-1}; z_i]$ и $[z_i; z_{i+1}]$:

$$\frac{\partial}{\partial z} D \frac{\partial n}{\partial z} \approx \frac{1}{h_{i+1/2}} \left(\frac{D_{i+1/2}(n_{i+1} - n_i)}{h_i} - \frac{D_{i-1/2}(n_i - n_{i-1})}{h_{i-1}} \right)$$

Для слагаемого $\frac{\partial}{\partial z}(nu)$ исследуем схемы направленных разностей $\frac{u_{i+1}n_{i+1} - u_i n_i}{h_i}$,

а также центральных разностей $\frac{u_{i+1}n_{i+1} - u_{i-1}n_{i-1}}{h_{i-1} + h_{i+1}}$.

Нижнее граничное условие (условие Дирихле) аппроксимируется точно, а на верхней границе условие постоянства потока может быть записано несколькими способами. Для данной одномерной задачи используем две различных аппроксимации этого условия:

- В первом случае поток $\frac{\partial n}{\partial z} + \frac{u_N}{D_N} \cdot n_N = F$ аппроксимируется с помощью центральных разностей по пространству, что соответствует схеме

$$n_N - n_{N-1} + u_N/D_N \cdot h_N \cdot n_N = F \cdot h_N$$

- Во втором случае для схемы центральных разностей запишем согласованную схему для верхнего граничного случая, получаемую с помощью интегрирования уравнения на N -ом шаге по пространству между двумя соседними полуцелыми узлами, а также учёта равенства потока на верхнем полуцелом узле заданной величине F :

$$h_{N+1/2} \frac{n^{j+1} - n^j}{\tau} = F - D_{N-1/2} \frac{n_N - n_{N-1}}{h_{N-1}} - \frac{1}{2}(u_{N-1}n_{N-1}^{j+1} + u_N n_N^{j+1})$$

Соответственно, в численных экспериментах протестированы три различные разностные схемы:

- В схеме 1 потоковый член и граничное условие аппроксимируются с помощью центральных разностей;
- В схеме 2 только потоковый член в уравнении записывается с помощью центральных разностей, а граничное условие всё еще использует центральные разности;
- Наконец, схема 3 имеет согласованные граничное условие и схему, записанные с помощью центральных разностей.

Исследуемая задача имеет не зависящее от времени решение, а численные эксперименты показали, что при итерациях по времени происходит установление решения во всех трёх схемах. Используемый шаг по пространству $h = 5$ км и по времени $\tau = 3$ мин обеспечивает сходимость к одной и той же кривой в схемах 1 и 3 с характерным временем установления порядка 4 – 5 часов (по прошествии этого времени первые несколько значащих цифр в решении уже не изменяются). Схема 2 также имеет сходимость к стационарному решению, но в отличие от оставшихся двух схем при шаг по пространству $h = 5$ км слишком велик, для получения того же самого решения, что и в других двух схемах, необходимо уменьшить шаг хотя бы до $h = 0,2$ км.

Результаты расчетов (стационарные решения в зависимости от разного количества узлов по пространству) представлены на следующих графиках (по горизонтальной оси масштаб выбран логарифмическим). Соответственно, 80, 400 и 2000 узлов отвечают шагам по времени 5 км, 1 км и 0,2 км.

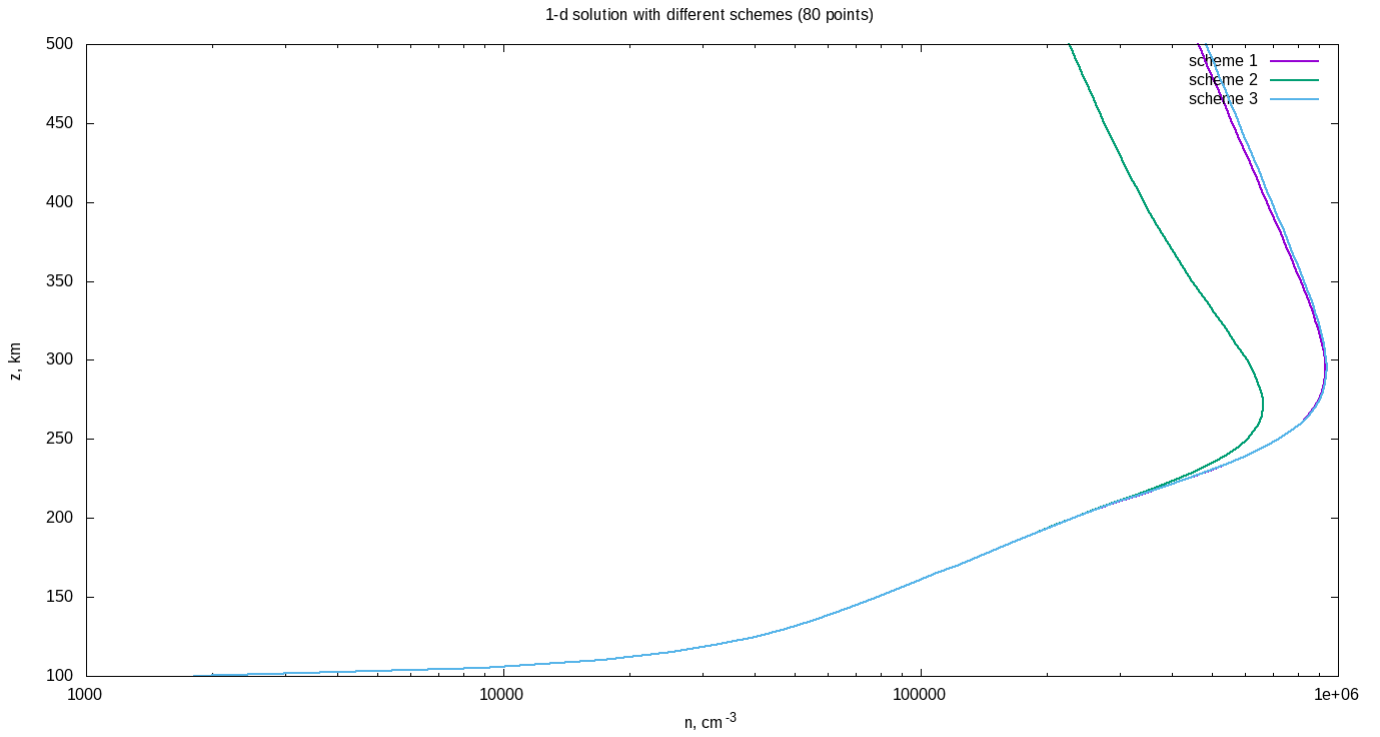


Рис. 1: Стационарные решения на 80 расчётных узлах.

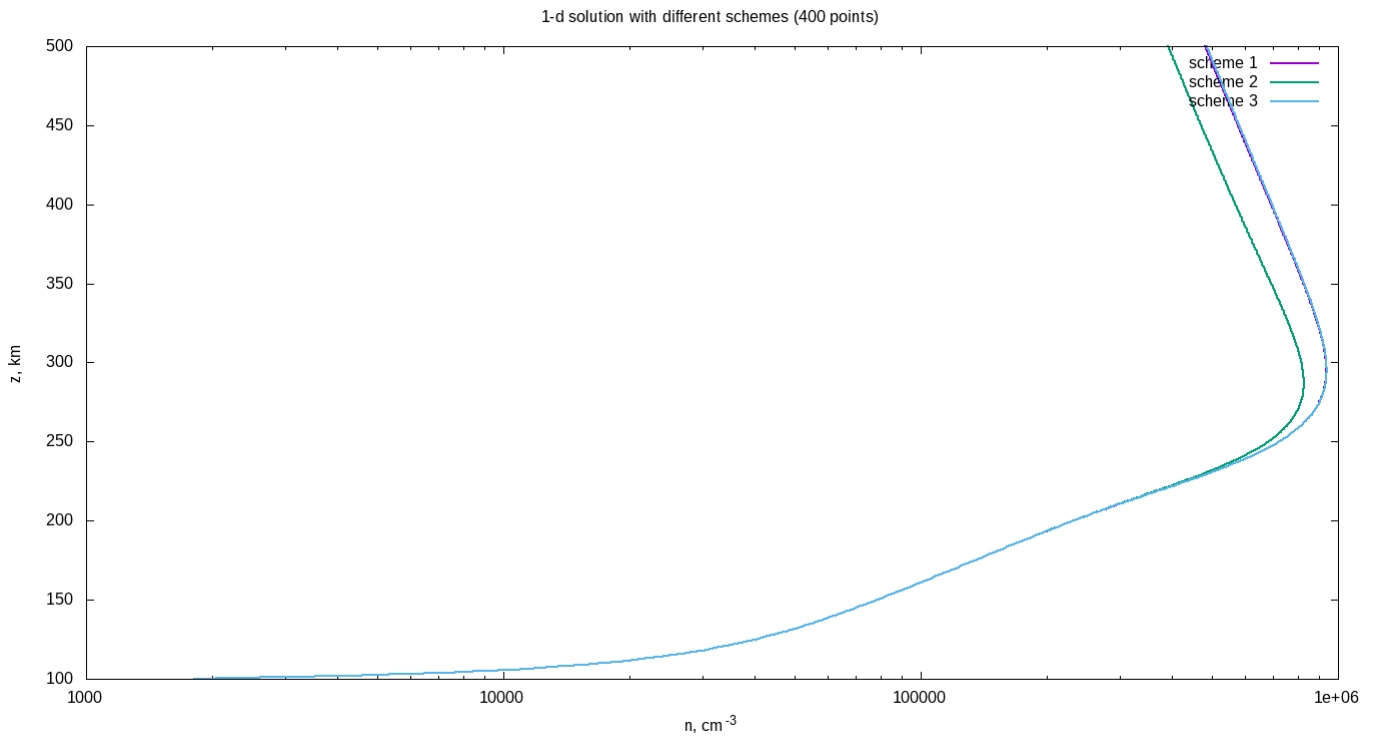


Рис. 2: Стационарные решения на 400 расчётных узлах.

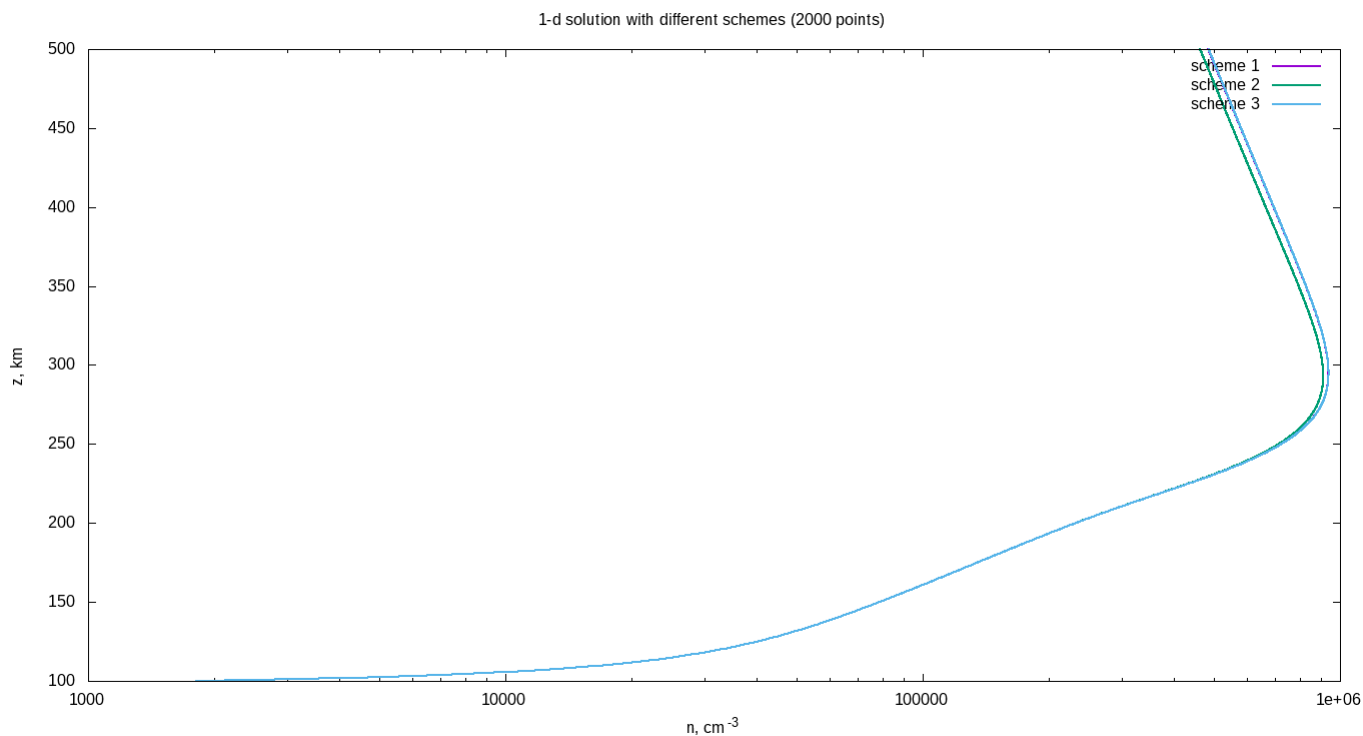


Рис. 3: Стационарные решения на 2000 расчётных узлах.

Полученное решение позволяет исследовать чувствительность к изменению различных входящих в уравнение внешних параметров: температурам, концентрациям нейтральных молекул, фотоионизации и рекомбинации. На следующих ниже графиках представлены результаты варьирования каждого из параметров в отдельности на 10% и 20% (в обе стороны).

Варьирование входящих в уравнение температур показывает, что наибольшую чувствительность решение имеет к температуре нейтральных молекул:

Теперь изменяем

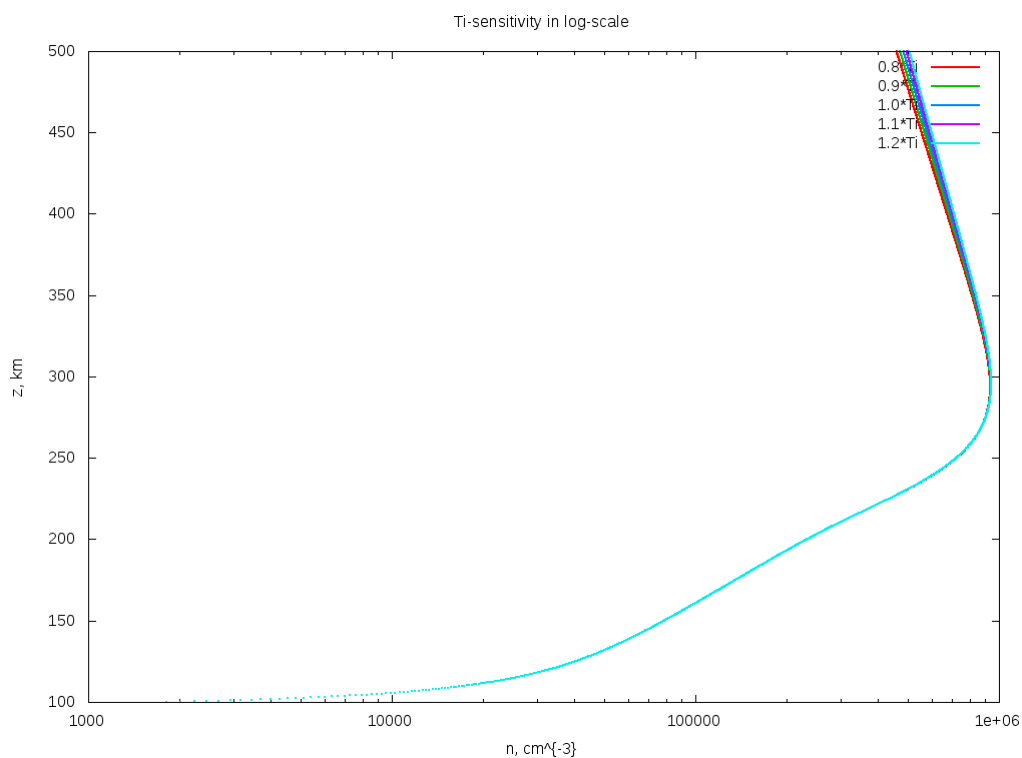


Рис. 4: Чувствительность к изменению температуры ионов.

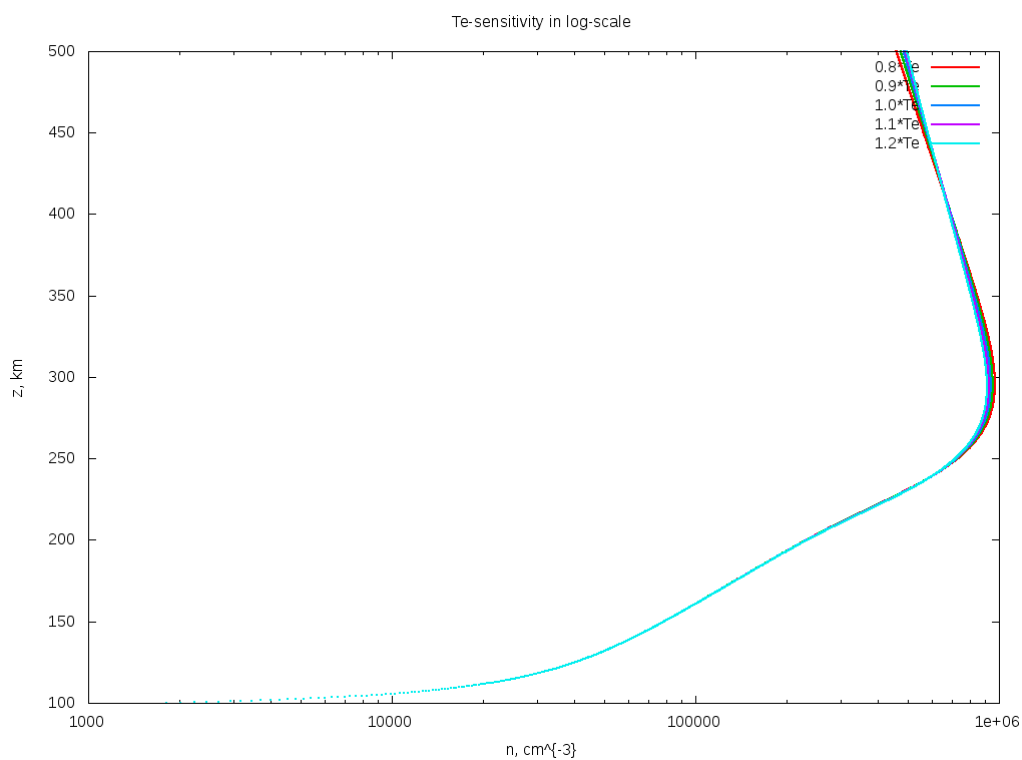


Рис. 5: Чувствительность к изменению температуры электронов.

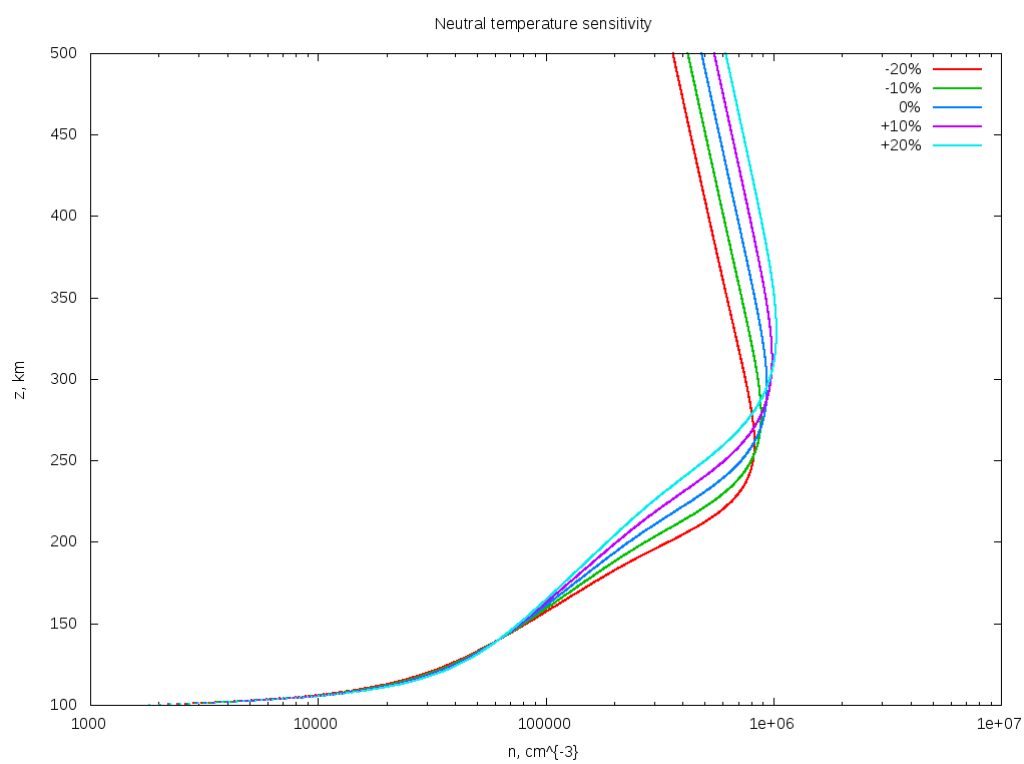


Рис. 6: Чувствительность к изменению температуры нейтральных молекул.