

**stichting
mathematisch
centrum**



AFDELING TOEGEPASTE WISKUNDE

TN 85/76

NOVEMBER

O. DIEKMANN, N.M. TEMME & J.G. VERWER

BEREKENING VAN EEN RUIMTELADINGSEFFECT

2e boerhaavestraat 49 amsterdam

BIBLIOTHEEK MATHEMATISCH CENTRUM
—AMSTERDAM—

5768.821

Printed at the Mathematical Centre, 49, 2e Boerhaavestraat, Amsterdam.

The Mathematical Centre, founded the 11-th of February 1946, is a non-profit institution aiming at the promotion of pure mathematics and its applications. It is sponsored by the Netherlands Government through the Netherlands Organization for the Advancement of Pure Research (Z.W.O).

Berekening van een ruimteladingseffect

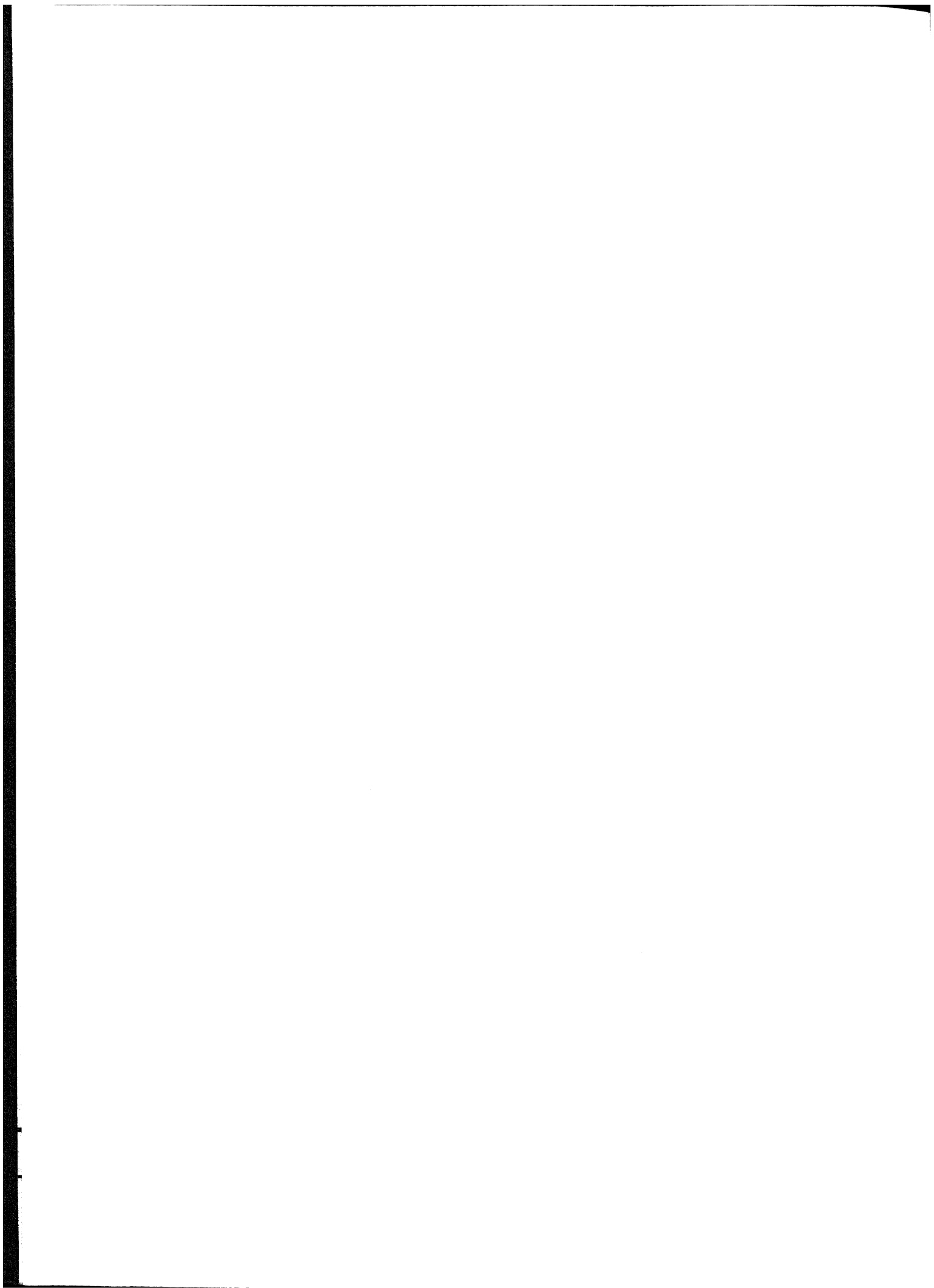
door

O. Diekmann, N.M. Temme & J.G. Verwer

UITTREKSEL

Dit rapport is een verslag van een opdracht van het FOM-instituut voor atoom- en molecuulfysica te Amsterdam. Er wordt een niet-lineaire integro-differentiaalvergelijking behandeld, deels analytisch ten aanzien van vragen betreffende existentie en eenduidigheid, deels numeriek ten aanzien van het verkrijgen van quantitative informatie.

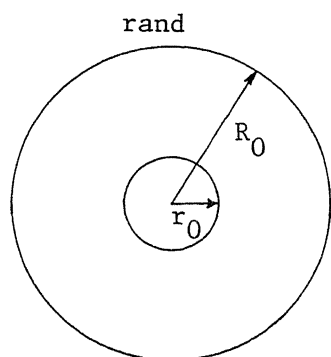
TREFWOORDEN: *Niet-lineaire integro-differentiaalvergelijking, ruimtelading.*



1. INLEIDING

In dit rapport wordt een verslag gegeven van een opdracht van het FOM-instituut voor atoom- en molecuulfysica te Amsterdam. Naast enige beschouwingen over vragen betreffende existentie en eenduidigheid van de te behandelen integro-differentiaalvergelijking en de numerieke berekening van de oplossing hiervan wordt de fysische achtergrond geschetst waarvan de gegevens ontleend worden aan de te verschijnen FOM-publicatie van Möhlman, de Heer en Hopman.

De essentie van dit natuurkundige probleem houdt in dat een bron twee typen deeltjes (of vloeistoffen) produceert. Beide typen hebben verschillende energie (of temperatuur), waardoor de ene sneller van de bron weg diffundeert dan de andere. De interactie - of wisselwerking- tussen beide typen, in dit geval de elektrische aantrekking tussen negatieve en positieve deeltjes, zorgt ervoor dat beide typen op de rand even snel wegstromen. Dit is alleen mogelijk bij een geschikte dichtheidsopbouw van de deeltjes over de radius. Dit dichtheidsverloop wordt gegeven door de functie $n(r)$.



Het fysische proces in het experiment is geïdealiseerd tot een één-dimensionaal probleem, waarbij de radius de dominante grootte is.

Neem aan dat we een bundel deeltjes schieten op een gasmassa. Deze bundel kan neutrale of geladen deeltjes bevatten. Verder veronderstellen we dat alle gecreëerde ionenparen radiaal naar buiten stromen. Door groot verschil in kinetische energie verkregen bij het botsingsproces tussen elektronen en ionen zijn de veel lichtere elektronen snel verdwenen en de zwaardere ionen achter gebleven. Deze achtergebleven ionen bouwen als het ware een ruimtelading op die in de natuurkunde wordt beschreven door de formule van Poisson:

$$\Delta V(r) = - \frac{e}{\epsilon_0} n_i(r),$$

- $n_i(r)$ is de ionendichtheidsfunctie, radieel afhankelijk, dus het aantal deeltjes per kubieke cm;
- e is de lading van een electron;
- ϵ_0 is de diëlectrische constante in het vacuum.

Uit de vergelijking van Poisson wordt het radiële potentiaal verloop $V(r)$ bepaald. Omdat de functie $n_i(r)$ hier niet bekend is, kan men deze dichtheidsfunctie uitdrukken in $V(r)$, namelijk (zie hiervoor de hierboven aangekondigde publicatie) met behulp van twee vergelijkingen (de z.g. eerste en tweede moment Boltzman-vergelijkingen), te weten:

- de continuïteitsvergelijking
- de bewegingsvergelijking.

Uitwerking van deze vergelijkingen leidt tot een relatie tussen $n_i(r)$, $V(r)$, en de radiële snelheidsfunctie $v(r)$, hetgeen het rechterlid opleverde van de bovengenoemde Poisson-vergelijking.

Het resultaat luidt

$$(1.1) \quad \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[r \frac{dV}{dr} \right] = - \frac{a}{r} \int_0^{\min(r, r_0)} \frac{s ds}{\sqrt{V(s) - V(r) + \delta}} + b \min(r^2, r_0^2),$$

$$\left(\frac{dV}{dr} \right)_{r=0} = 0, \quad V(R_0) = 0,$$

$$0 < r_0 < R_0, \quad a > 0, \quad b > 0, \quad \delta > 0.$$

Voor de betekenis van a , b en δ wordt verwezen naar §4 en de FOM-publicatie.

In §2 wordt deze vergelijking besproken voor zover het de kwalitatieve aspecten betreft. Deze bijdragen zijn afkomstig van O. Diekmann, terwijl J.G. Verwer de numerieke uitwerking zoals vermeld in §3 heeft verzorgd. Hij werd hierin ten aanzien van de programmering bijgestaan door F.J. Reckers.

2. KWALITATIEVE ANALYSE

In deze paragraaf zal met behulp van analytische technieken kwalitatieve informatie gewonnen worden over de oplossing van het gereduceerde niet-lineaire probleem

$$(2.1) \quad \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[r \frac{dV}{dr} \right] = - \frac{a}{r} \int_0^{\min(r, r_0)} \frac{s ds}{\sqrt{V(s) - V(r) + \delta}}$$

$$(2.2) \quad \frac{dV}{dr}(0) = 0, \quad V(R_0) = 0,$$

waarbij $0 \leq r \leq R_0$, $0 < r_0 < R_0$, $a > 0$, $\delta > 0$.

Bewezen zal worden

- (i) het probleem (2.1), (2.2) heeft één en slechts één oplossing;
- (ii) de oplossing is monotoon dalend;
- (iii) de oplossing is te "vinden" door de oplossing $V(r; V_0)$ van het beginwaarde probleem (2.1) en

$$(2.3) \quad V(0) = V_0, \quad \frac{dV}{dr}(0) = 0$$

uit te rekenen en hiervan $V(R_0; V_0)$ af te trekken;

- (iv) de oplossing is oneindig vaak continu differentieerbaar behalve in r_0 , waar de oplossing tweemaal continu differentieerbaar is, maar waar de derde afgeleide een sprong vertoont.

Tevens zal ingegaan worden op de afhankelijkheid van de parameters r_0 en R_0 . Enige opmerkingen over de complete vergelijking (1.1) volgen in §2.5.

2.1. Locale existentie en uniciteit

Voor gegeven r wordt de waarde van het rechterlid van (2.1) niet bepaald door de waarde van $V(r)$ alleen, maar ook door de waarden van V in andere punten. De vergelijking is dan ook geen gewone differentiaalvergelijking. Uit de structuur van het rechterlid, met name uit het feit dat het integratie-interval naar nul gaat als $r \downarrow 0$, volgt dat het toch mogelijk is om locale existentie en uniciteit te bewijzen voor het beginwaardeprobleem (2.1) en (2.3) met behulp van het principe van de contraherende afbeelding:

STELLING. Zij B een gesloten deelruimte van een Banachruimte X en zij $T : B \rightarrow B$ een contraherende afbeelding op B (dat wil zeggen dat een constante λ met $0 \leq \lambda < 1$ bestaat, zó dat $\|Tx - Ty\| \leq \lambda \|x - y\|$ voor alle $x, y \in B$), dan heeft T een uniek dekpunt in B .

Om deze stelling toe te kunnen passen schrijven we het probleem (2.1) en (2.3) eerst als een integraalvergelijking

$$(2.4) \quad V(r) = V_0 - a \int_0^r \frac{1}{\rho} \int_0^\rho \int_0^\tau \frac{s ds d\tau d\rho}{\sqrt{V(s) - V(\tau) + \delta}}.$$

De Banachruimte X zal zijn de ruimte van continue functies op $[0, \bar{r}]$, met $\bar{r}$ nog nader te bepalen, voorzien van de gebruikelijke maximum norm

$$\|\phi\| = \max_{0 \leq r \leq \bar{r}} |\phi(r)|.$$

De afbeelding T is gedefinieerd door de (integraal)operator in het rechterlid van (2.4). Om aan te tonen dat dit een contraherende afbeelding is gebruiken we de Lipschitz-continuïteit van de functie $1/\sqrt{x}$ voor $x > \varepsilon > 0$.

Met name:

$$\text{voor } x, y \geq \varepsilon \text{ geldt } \left| \frac{1}{\sqrt{x}} - \frac{1}{\sqrt{y}} \right| \leq \frac{1}{2} \varepsilon^{-3/2} |x - y|.$$

We kiezen nu ε met $0 < \varepsilon < \delta$ en vervolgens $B \subset X$ zodanig dat het argument van de wortel in het rechterlid van (2.4) groter dan of gelijk aan ε blijft.

$$B = B(\bar{r}, V_0, \varepsilon) = \{\psi \mid \psi \in X \text{ en } \|\psi - V_0\| \leq \frac{\delta - \varepsilon}{2}\}.$$

Als $\psi \in B$ dan geldt

$$\min_{0 \leq s \leq \tau \leq \bar{r}} \psi(s) - \psi(\tau) \geq -\delta + \varepsilon,$$

zodat $\|T\psi - V_0\| \leq \frac{a}{18\sqrt{\varepsilon}} \bar{r}^3$, en als $\psi_1, \psi_2 \in B$ dan

$$\|T\psi_1 - T\psi_2\| \leq \frac{1}{2} \varepsilon^{-3/2} \frac{a \bar{r}^3}{18} \|\psi_1 - \psi_2\|.$$

Door $\bar{r}$ voldoende klein te nemen bereiken we dat $TB \subset B$ en bovendien dat de afbeelding contraherend is. We kunnen dan de stelling toepassen en concluderen dat een op $[0, \bar{r}]$ gedefinieerde continue functie $V(r)$ bestaat die aan (2.4) voldoet. Voor $\bar{r}$ voldoende klein zal *iedere* continue oplossing van (2.4) tot B moeten behoren omdat noodzakelijk $V(0) = V_0$. We mogen dus tevens concluderen dat de locale oplossing uniek bepaald is. Uit de vergelijking (2.4) volgt dat de oplossing in feite oneindig vaak continu differentieerbaar is, zodat ook aan (2.1) en (2.3) voldaan is.

2.2. Monotonie en voortzetting van de oplossing

Een gebruikelijke techniek om globale uitspraken te verkrijgen is om de locale redenering te herhalen (voortzetting van de oplossing). In ons geval moeten we daarbij rekening houden met het feit dat het argument van de wortel van nul weg moet blijven om de Lipschitz continuïteit van $1/\sqrt{x}$ te mogen gebruiken. Daarom merken we eerst op:

de oplossing V is monotoon dalend op zijn definitiegebied.

Om dit in te zien redeneren we als volgt. Definieer

$$p(r) = \min_{0 \leq s \leq r} V(s) - V(r).$$

Dan is $p(r)$ een continue functie en $\lim_{r \rightarrow 0} p(r) = 0$. Er is dus een rechteromgeving van $r = 0$ waarop $p(r) > -\frac{1}{2}\delta$. Stel dat $\tilde{r}$ het eerste punt is waarvoor $p(r) = -\frac{1}{2}\delta$. Uit de éénmaal geïntegreerde versie van (2.1),

$$(2.5) \quad r \frac{dV}{dr} = -a \int_0^r \int_0^\tau \frac{s \, ds \, d\tau}{\sqrt{V(s) - V(\tau) + \delta}},$$

volgt dat $\frac{dV}{dr} < 0$ voor $0 \leq r \leq \tilde{r}$. Met andere woorden: V is monotoon dalend voor $0 \leq r \leq \tilde{r}$. Hieruit volgt evenwel dat $p(r) = 0$ voor $0 \leq r \leq \tilde{r}$ en dit levert een tegenspraak met $p(\tilde{r}) = -\frac{1}{2}\delta$. We mogen dus concluderen dat $p(r) > -\frac{1}{2}\delta$ op het definitiegebied van V en dus dat V monotoon dalend is (waaruit weer volgt dat in feite $p(r) \equiv 0$).

Gewapend met de wetenschap dat $V(s) - V(\tau) \geq 0$ voor $0 \leq s \leq \tau \leq \bar{r}$ kunnen

we nu de oplossing voortzetten. Voortzetting voorbij $r = r_0$ levert geen enkel probleem, alle redeneringen blijven geldig. De conclusie is dat het beginwaardeprobleem (2.1), (2.3) een éénduidig bepaalde oplossing op $[0, R_0]$ bezit die monotoon dalend is. Uit de vergelijking volgt weer dat de oplossing oneindig vaak differentieerbaar is voor $r < r_0$ en voor $r > r_0$. In $r = r_0$ zijn de linker- en de rechterafgeleide van de eerste en de tweede orde aan elkaar gelijk, maar de derde afgeleide vertoont een sprong (zie (2.1)).

2.3. Afhankelijkheid van V_0

In feite zijn we geïnteresseerd in oplossingen van het probleem (2.1), (2.2). We geven nu de oplossing van (2.1), (2.3) aan met $V(r; V_0)$. A priori is het voor niet-lineaire problemen allerm minst zeker dat er één en slechts één V_0 zal bestaan zó dat $V(R_0; V_0) = 0$. Dat dat in ons speciale geval wel zo is volgt uit:

als $V(r)$ voldoet aan (2.1) dan voldoet ook $V(r) + c$ aan (2.1), waarbij c een willekeurige constante is.

Er geldt dus ook dat

$$V(r; V_0^1) = V(r; V_0^2) - V_0^2 + V_0^1$$

zodat onmiddellijk volgt dat het probleem (2.1), (2.2) één en slechts één oplossing heeft en dat deze gevonden kan worden door $V(r; V_0)$ uit te rekenen voor een willekeurige V_0 en er vervolgens $V(R_0; V_0)$ af te trekken.

2.4. Afhankelijkheid van r_0 en R_0

Uit het feit dat oplossingen van (2.1) een constante van elkaar verschillen kunnen ook enkele eenvoudige conclusies over de afhankelijkheid van de parameters r_0 en R_0 getrokken worden. Zij $V(r; r_0; R_0)$ de oplossing van (2.1), (2.2). Dan geldt

$$V(r; r_0; R_0^1) = c + V(r; r_0; R_0^2)$$

waarbij $c = c(R_0^1; R_0^2) > 0$ als $R_0^1 > R_0^2$.

Stel $r_0^1 > r_0^2$ dan geldt

$$V(r; r_0^1; R_0) = c + V(r; r_0^2; R_0) \quad \text{voor } 0 \leq r \leq r_0^2,$$

waarbij $c = c(r_0^1; r_0^2) > 0$, terwijl

$$V(r; r_0^1; R_0) \geq V(r; r_0^2; R_0) \quad \text{voor } 0 \leq r \leq R_0.$$

Dit volgt uit (2.5): de oplossing daalt steiler als de bovengrens van het integratie-interval r is dan wanneer die bovengrens kleiner dan r is.

2.5. De invloed van een extra term in de vergelijking

Tot slot van deze paragraaf beschouwen we de vergelijking

$$(2.6) \quad \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[r \frac{dV}{dr} \right] = - \frac{a}{r} \int_0^{\min(r, r_0^2)} \frac{s ds}{\sqrt{V(s) - V(r) + \delta}} + b \min(r^2, r_0^2),$$

waarbij $b > 0$. Locale existentie en e  nduidigheid van een oplossing voor het beginwaardeprobleem volgt als in 2.1. Voor $r < r_0$ geldt

$$(2.7) \quad r \frac{dV}{dr} = - a \int_0^r \int_0^\tau \frac{s ds dt}{\sqrt{V(s) - V(\tau) + \delta}} + \frac{b}{4} r^4,$$

zodat voor $r \downarrow 0$,

$$\frac{dV}{dr} \sim - \frac{a}{6\sqrt{\delta}} r^2 + \frac{b}{4} r^3.$$

De oplossing start dus in ieder geval monotoon dalend. Of dit al dan niet op het hele gebied zo blijft zal afhangen van de onderlinge kwantitatieve verhoudingen van de parameters a , b , δ , r_0 en R_0 . Dientengevolge is de

voortzetbaarheid van de oplossing tot R_0 nu niet meer zo gemakkelijk te bewijzen. Uit de numerieke oplossing van het probleem blijkt dat voor de fysisch relevante waarden van de parameters de oplossing monotoon dalend is op $0 < r < R_0$. Omdat het argument uit 2.3 ook voor de vergelijking (2.6) geldig is, volgt dan tevens existentie en éénduidigheid van een oplossing van het randwaardeprobleem.

3. EEN NUMERIEKE METHODE

Bij het ontwerpen van de numerieke methode gaan we uit van de integraalvergelijking

$$(3.1) \quad V(r) = V_0 + b \int_0^r \frac{1}{\rho} \int_0^\rho \min(\tau^2, r_0^2) \, d\tau \, d\rho - \\ - a \int_0^r \frac{1}{\rho} \int_0^\rho \int_0^{\min(\tau, r_0)} F(s, \tau) \, ds \, d\tau \, d\rho, \quad 0 \leq r \leq R_0$$

waarbij

$$(3.2) \quad F(s, \tau) = \frac{s}{\sqrt{V(s) - V(\tau) + \delta}},$$

en waarbij V_0 een willekeurige beginwaarde in $r = 0$ is.

De oplossing van (3.1) gaan we numeriek benaderen met behulp van de herhaalde trapezium regel welke als volgt gedefinieerd is:

Zij gevraagd te berekenen

$$I(\phi) = \int_{\alpha}^{\beta} \phi(x) \, dx, \quad \phi \in C^2[\alpha, \beta].$$

Voor het interval $[\alpha, \beta]$ luidt de trapezium regel

$$I(\phi) = \frac{1}{2}(\beta - \alpha) \{\phi(\alpha) + \phi(\beta)\} + E(\phi),$$

waarbij

$$E(\phi) = -\frac{1}{12}(\beta - \alpha)^3 \phi''(\xi), \quad \xi \in [\alpha, \beta].$$

Indien we het interval $[\alpha, \beta]$ in gelijke deelintervallen verdelen van lengte h , zodat $Nh = \beta - \alpha$, en we definiëren $x_j = \alpha + jh$, $j = 0, \dots, N$, geeft herhaald toepassen van de trapezium regel

$$(3.3) \quad I(\phi) = h\left\{\frac{1}{2}\phi(\alpha) + \sum_{j=1}^{N-1} \phi(x_j) + \frac{1}{2}\phi(\beta)\right\} + R(\phi),$$

waarbij

$$R(\phi) = -\frac{1}{12}(\beta - \alpha) h^2 \phi''(\zeta), \quad \zeta \in [\alpha, \beta].$$

We gaan de kwadratuurregel (3.3) toepassen in (3.1). De keuze van de herhaalde trapeziumregel berust op:

- (a) $V \notin C^3[0, R_0]$, het heeft dan weinig zin om met hoge orde benaderingen te werken.
- (b) Door gebruik te maken van (3.3) is op een simpele manier de drie-dimensionale structuur uit het rekenschema te verwijderen.

Voordat we het numerieke model gaan opstellen is het wenselijk om (3.1) op $[0, r_0]$ en $[r_0, R_0]$ apart te representeren.

Op $[0, r_0]$: we vinden direct

$$(3.4) \quad V(r) = V_0 + \frac{br^3}{9} - a \int_0^r \frac{1}{\rho} \int_0^\rho \int_0^\tau F(s, \tau) \, ds d\tau d\rho, \quad 0 \leq r \leq r_0.$$

Op $[r_0, R_0]$: na enig rekenwerk volgt direct

$$(3.4) \quad \int_0^r \frac{1}{\rho} \int_0^\rho \min(\tau^2, r_0^2) \, d\tau d\rho = rr_0^2 - \frac{r}{3} r_0^3 \ln\left(\frac{r}{r_0}\right) - \frac{8}{9} r_0^3, \text{ en}$$

$$(3.5) \quad \int_0^r \frac{1}{\rho} \int_0^\rho \int_0^{\min(\tau, r_0)} F(s, \tau) \, ds d\tau d\rho = \ln\left(\frac{r}{r_0}\right) \int_0^{r_0} \int_0^\tau F(s, \tau) \, ds d\tau +$$

$$+ \int_0^{r_0} \frac{1}{\rho} \int_0^\rho \int_0^\tau F(s, \tau) \, ds d\tau d\rho + \int_{r_0}^r \frac{1}{\rho} \int_{r_0}^\rho \int_0^{r_0} F(s, \tau) \, ds d\tau d\rho.$$

Door de uitdrukkingen (3.4) en (3.5) in (3.1) te substitueren en door gebruik te maken van vergelijking (3.4) krijgen we

$$(3.6) \quad V(r) = V(r_0) + b\{rr_0^2 - r_0^3 - \frac{r}{3} r_0^3 \ln\left(\frac{r}{r_0}\right)\}$$

$$- a \ln\left(\frac{r}{r_0}\right) \int_0^{r_0} \int_0^\tau F(s, \tau) \, ds d\tau$$

$$- a \int_{r_0}^r \frac{1}{\rho} \int_{r_0}^\rho \int_0^{r_0} F(s, \tau) \, ds d\tau d\rho, \quad r_0 \leq r \leq R_0.$$

We merken op dat voor $r \geq r_0$ de dubbel integraal

$$(3.7) \quad \int_0^{r_0} \int_0^\tau F(s, \tau) \, ds d\tau$$

expliciet te berekenen valt.

Bij het opstellen van het numerieke model gebruiken we de volgende notatie:

$$\sum_{k=\ell}^u \phi(x_k) = \frac{1}{2} \phi(x_\ell) + \sum_{k=\ell+1}^{u-1} \phi(x_k) + \frac{1}{2} \phi(x_u),$$

$$(3.8) \quad \sum_{k=\ell}^u \phi(x_k) = \sum_{k=\ell}^{u-1} \phi(x_k) + \frac{1}{2} \phi(x_u),$$

$$\sum_{k=\ell}^u \phi(x_k) = \frac{1}{2} \phi(x_\ell) + \sum_{k=\ell+1}^u \phi(x_k).$$

3.1. Het numerieke model op $[0, r_0]$

We verdelen $[0, r_0]$ in N_0 deelintervallen van lengte h_0 , i.e. $r_0 = N_0 h_0$, en we definiëren de netpunten $r_j = j h_0$, $j = 1, \dots, N_0$. Toepassen van de herhaalde trapeziumregel (3.3) op vergelijking (3.4) geeft allereerst

$$V(r_j) \approx V_0 + \frac{b r_j^3}{9} - a h_0 \sum_{k=0}^j \frac{1}{k h_0} \int_0^{k h_0} \int_0^\tau F(s, \tau) ds d\tau, \quad j = 1, \dots, N_0.$$

Aangezien

$$\lim_{\rho} \frac{1}{\rho} \int_0^\rho \int_0^\tau F(s, \tau) ds d\tau = 0,$$

kunnen we boven direct sommeren over $1, 2, \dots, j$. Opnieuw toepassen van de kwadratuur geeft dan

$$V(r_j) \approx V_0 + \frac{b r_j^3}{9} - a \sum_{k=1}^j \frac{h_0}{k} \int_0^{k h_0} \frac{s}{\sqrt{V(s) - V_\ell + \delta}} ds, \quad j = 1, \dots, N_0.$$

waarbij V_ℓ de benadering voor $V(r_\ell)$ aangeeft. Nog eenmaal de kwadratuur toepassen geeft

$$V(r_j) \approx V_0 + \frac{br_j^3}{9} - ah_0^3 \sum_{k=1}^j \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^k \sum_{m=0}^{\ell} \frac{m}{\sqrt{V_m - V_\ell} + \delta}, \quad j = 1, \dots, N_0.$$

Definiëren we

$$F_{m,\ell} = \frac{m}{\sqrt{V_m - V_\ell} + \delta},$$

dan vinden we tenslotte het niet-lineaire stelsel

$$(3.9) \quad V_j = V_0 + \frac{br_j^3}{9} - ah_0^3 \sum_{k=1}^j \frac{1}{k} \sum_{\ell=1}^k \sum_{m=1}^{\ell} F_{m,\ell}, \quad j = 1, \dots, N_0.$$

Het is direct in te zien dat stelsel (3.9) componentsgewijs opgelost kan worden. We zullen dit doen door componentsgewijs 'n Newton-Raphson iteratie uit te voeren. Daartoe herschrijven we (3.9) als

$$(3.10) \quad V_j = C_j - \frac{ah_0^3}{4j} \sum_{m=1}^{j-1} F_{m,j}, \quad j = 1, \dots, N_0,$$

waarbij C_j niet van V_j afhangt en gegeven wordt door

$$(3.11) \quad C_j = V_0 + \frac{br_j^3}{9} - ah_0^3 \left\{ \sum_{k=1}^{j-1} \frac{1}{k} \sum_{\ell=1}^k \sum_{m=1}^{\ell} F_{m,\ell} + \sum_{\ell=1}^{j-1} \sum_{m=1}^{\ell} F_{m,\ell} / 2j + 1/8\sqrt{\delta} \right\}.$$

Merk op dat voor $j = 1$, V_1 direct gegeven wordt door C_1 , i.e.

$$(3.12) \quad V_1 = C_1 = V_0 - \frac{ah_0^3}{\sqrt{\delta}} + \frac{bh_0^3}{9}.$$

Definiëren we nu voor $j = 2, \dots, N_0$, de functie

$$(3.13) \quad Z_j(V) = V + \frac{ah_0^3}{4j} \sum_{m=1}^{j-1} \frac{m}{\sqrt{V_m - V + \delta}} - C_j,$$

dan is met een Newton-Raphson iteratie

$$(3.14) \quad V_{j,k+1} = V_{j,k} - Z_j(V_{j,k})/Z'_j(V_{j,k}), \quad k = 0, 1, \dots,$$

V_j , $j = 2, \dots, N_0$, zeer efficiënt te bepalen uit de vergelijking

$$Z_j(V) = 0.$$

Aangezien de analytische oplossing van de integraalvergelijking monotoon dalend is, is V_{j-1} een geschikte startwaarde voor het iteratieproces (3.14).

Om efficiënt te rekenen is het noodzakelijk dat C_j niet direct uit (3.11) bepaald wordt. We zullen nu een tweetal recursies definiëren waarmee wij C_j zonder te sommeren kunnen bepalen.

Definieer

$$(3.15) \quad S_{3,j} = \sum_{k=1}^{j-1} \frac{1}{k} \sum_{\ell=1}^k \sum_{m=1}^{\ell} F_{m,\ell},$$

en

$$(3.16) \quad S_{2,j} = \sum_{\ell=1}^{j-1} \sum_{m=1}^{\ell} F_{m,\ell}.$$

Na enig rekenwerk vinden we dan

$$(3.17) \quad S_{3,j+1} = S_{3,j} + \frac{1}{j} S_{2,j} + \frac{1}{2j} S_{1,j}, \quad j = 1, 2, \dots,$$

$$(3.18) \quad S_{2,j+1} = S_{2,j} + S_{1,j}, \quad j = 1, 2, \dots,$$

met

$$(3.19) \quad S_{1,j} = \sum_{m=1}^j F_{m,j}.$$

Voor $S_{1,j}$ kunnen we geen recursie opschrijven, maar met behulp van (3.10) vinden we direct

$$(3.20) \quad S_{1,j} = \frac{4j}{ah_0^3} \{C_j - V_j\} + \frac{j}{2\sqrt{\delta}}.$$

Om de recursies (3.19) en (3.18) te starten hebben wij nodig

$$(3.21) \quad S_{2,1} = S_{3,1} = 0.$$

Aldus zien we dat voor $j = 1, 2, \dots$,

$$(3.22) \quad C_{j+1} = V_0 + \frac{br_{j+1}^3}{9} - \frac{ah_0^3}{8\sqrt{\delta}} - ah_0^3 \{S_{3,j+1} + S_{2,j+1}/(2j+2)\},$$

zonder te sommeren te berekenen is.

Rest nog de afgeleide $V'(r)$ te bepalen voor $0 < r \leq r_0$. Uit (3.4) halen we

$$\frac{dV}{dr} = \frac{br^2}{3} - \frac{a}{r} \int_0^r \int_0^\tau F(s, \tau) \, ds d\tau, \quad 0 \leq r \leq r_0.$$

Zij V_j' de benadering voor $V'(r_j)$. Er geldt dan

$$V_j' = \frac{br_j^2}{3} - \frac{ah_0^2}{j} \sum_{k=1}^j \sum_{\ell=1}^k F_{\ell,k}, \quad j = 1, \dots, N_0.$$

Met behulp van (3.16) en (3.19) is direct in te zien dat we V_j' voor $j = 1, \dots, N_0$ efficiënt kunnen berekenen met

$$V_j' = \frac{br_j^2}{3} - \frac{ah_0^2}{j} S_{2,j} - \frac{ah_0^2}{2j} S_{1,j}.$$

3.2. Het numerieke model op $[r_0, R_0]$

Het afleiden van de benaderende vergelijkingen gaat vrijwel net zo als op het eerste interval. Daarom zullen we de afleiding hier iets beknopter weergeven. Het uitgangspunt is hier vergelijking (3.6).

We verdelen het interval $[r_0, R_0]$ in N_1 gelijke deelintervallen met lengte h_1 , i.e. $N_1 h_1 = R_0 - r_0$, en definiëren $r_{j+N_0} = r_0 + jh_1$, $j = 0, \dots, N_1$. Zij V_{j+N_0} de benadering voor $V(r_{j+N_0})$. Definieer

$$(3.23) \quad S = h_0^3 \sum_{k=0}^{N_0} \sum_{\ell=0}^k F_{\ell,k}$$

als de benadering voor (3.7) en definieer

$$(3.24) \quad T_{j+N_0} = V_{N_0} + b \left\{ r_{j+N_0}^2 - r_0^2 - \frac{r}{3} r_0^3 \ln \left(\frac{r_{j+N_0}}{r_0} \right) \right\} - a S \ln \left(\frac{r_{j+N_0}}{r_0} \right)$$

als de benadering voor de eerste drie termen in het rechterlid van (3.6). Herhaald toepassen van de kwadratuurregel (3.3) in (3.6) geeft dan het niet-lineaire stelsel

$$(3.25) \quad V_{j+N_0} = T_{j+N_0} - ah_0^2 h_1^2 \sum_{k=1}^j \frac{1}{r_{k+N_0}} \sum_{\ell=0}^k \sum_{m=1}^{N_0} F_{m,\ell+N_0}, \quad j = 1, \dots, N_1.$$

Dit niet-lineaire stelsel kunnen wij weer componentsgewijs oplossen. Daartoe schrijven we

$$(3.26) \quad V_{j+N_0} = C_{j+N_0} - \frac{ah_0^2 h_1^2}{4r_{j+N_0}} \sum_{m=1}^{N_0} F_{m,j+N_0}, \quad j = 1, \dots, N_1,$$

waarbij C_{j+N_0} niet van V_{j+N_0} afhangt en gegeven wordt door

$$(3.29) \quad C_{j+N_0} = T_{j+N_0} - ah_0^2 h_1^2 \left\{ \sum_{k=1}^{j-1} \frac{1}{r_{k+N_0}} \sum_{\ell=0}^k \sum_{n=1}^{N_0} F_{m,\ell+N_0} \right. \\ \left. + \frac{1}{2r_{j+N_0}} \sum_{\ell=0}^{j-1} \sum_{m=1}^{N_0} F_{m,\ell+N_0} \right\}.$$

Net zo als voorgaand beschreven kunnen wij nu efficiënt V_{j+N_0} bepalen door een Newton-Raphson iteratie toe te passen op (3.26). Ook hier zullen we weer een tweetal recursies definiëren waarmee we C_{j+N_0} efficiënt kunnen berekenen.

Definiëer

$$(3.28) \quad \bar{S}_{3,j} = \sum_{k=1}^{j-1} \frac{1}{r_{k+N_0}} \sum_{\ell=0}^k \sum_{m=1}^{N_0} F_{m,\ell+N_0},$$

en

$$(3.29) \quad \bar{S}_{2,j} = \sum_{\ell=0}^{j-1} \sum_{m=1}^{N_0} F_{m,\ell+N_0}.$$

Na enig rekenwerk vinden wij dan

$$(3.30) \quad \bar{S}_{3,j+1} = \bar{S}_{3,j} + \frac{1}{r_{j+N_0}} \bar{S}_{2,j} + \bar{S}_{1,j}, \quad j = 1, 2, \dots,$$

en

$$(3.31) \quad \bar{s}_{2,j+1} = \bar{s}_{2,j} + 2 r_{j+N_0} \bar{s}_{1,j}, \quad j = 1, 2, \dots,$$

met

$$(3.32) \quad \bar{s}_{1,j} = \frac{2}{ah_0^2 h_1^2} (C_{j+N_0} - V_{j+N_0}).$$

Om de recursies (3.30) en (3.31) te starten definiëren wij

$$(3.33) \quad \bar{s}_{3,1} = 0, \quad \bar{s}_{2,1} = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{N_0} F_{m,N_0}.$$

Aldus zien wij dat voor $j = 0, 1, \dots$,

$$(3.34) \quad C_{j+1+N_0} = T_{j+1+N_0} - ah_0^2 h_1^2 \bar{s}_{3,j+1} - \frac{ah_0^2 h_1^2}{2r_{j+N_0+1}} \bar{s}_{2,j+1}$$

zeer efficiënt te berekenen is.

Rest nog de afgeleide $V'(r)$ te bepalen voor $r_0 \leq r \leq R_0$. Uit (3.6) halen we

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dr} &= br_0^2 - \frac{2br_0^3}{3r} - \frac{a}{r} \int_0^{r_0} \int_0^\tau F(s,r) \, ds d\tau \\ &\quad - \frac{a}{r} \int_{r_0}^r \int_0^{r_0} F(s,\tau) \, ds d\tau, \quad r_0 \leq r \leq R_0. \end{aligned}$$

Zij V'_{j+N_0} de benadering van $V'(r_{j+N_0})$. Er geldt dan

$$V'_{j+N_0} = br_0^2 - \frac{2br_0^3}{3r_{j+N_0}} - \frac{aS}{r_{j+N_0}} - \frac{ah_0^2 h_1^2}{3r_{j+N_0}} \sum_{k=0}^j \sum_{\ell=0}^{N_0} F_{\ell,k+N_0}, \quad j = 1, \dots, N_1.$$

Met behulp van (3.29), (3.32) en (3.26) vinden wij na enig rekenwerk

$$v'_{j+N_0} = br_0^2 - \frac{2br_0^3}{3r_{j+N_0}} - \frac{aS}{r_{j+N_0}} - \frac{ah_0^2 h_1}{r_{j+N_0}} (\bar{S}_{2,j} + \frac{1}{2} \bar{S}_{1,j}), \quad j = 1, \dots, N_1.$$

4. SLOTOPMERKINGEN

Vergelijking (1.1) (of (3.1)) werd met fysische grootheden aangeboden in de vorm van een integro-differentiaalvergelijking

$$\frac{d}{dR} \left[R \frac{dV(R)}{dR} \right] = \frac{eN_i}{\epsilon_0} \left[\frac{\min(R^2, r_0^2)}{2\sqrt{kT_e/m_e}} - \int_0^{\min(R, r_0)} \frac{r \, dr}{\sqrt{\frac{2e}{m_i} [V(r) - V(R)] + \frac{kT_i}{m_i}}} \right],$$

welke eenvoudig tot (1.1) of (3.1) is terug te brengen. De fysische grootheden die als vaste constanten voor dit experiment beschouwd kunnen worden, zijn

e (lading electron)	$= 1.6 \times 10^{-19}$ Coulomb
m_e (massa electron)	$= 9.1 \times 10^{-31}$ kg
k (constante van Boltzmann)	$= 1.38 \times 10^{-23}$ Joule/ $^\circ$ K
ϵ_0 (diëlectrische constante)	$= 8.85 \times 10^{-12}$ Coulomb Volt $^{-1}$ m $^{-1}$
R_0 (straal van de ruimte)	$= 3.00 \times 10^{-2}$ m

De overige parameters zijn min of meer variabel. Experimenten zijn uitgevoerd met de volgende numerieke waarden

m_i (massa ion)	$= 3.0 \times 10^{-26}$ kg
T_i (ionentemperatuur)	$= 3.0 \times 10^2$ $^\circ$ K
T_e (electronentemperatuur)	$= 1.0 \times 10^5$ $^\circ$ K
N_i (ionenproductiesnelheid)	$= 5.8 \times 10^{21}$ m $^{-3}$ sec $^{-1}$
r_0 (straal electronenbundel)	$= 1.5 \times 10^{-3}$ m

Met deze gegevens zijn de waarden van a , b en δ uit (1.1) en (3.1) als volgt

$$a = 3.21 \times 10^{10},$$

$$b = 4.26 \times 10^7,$$

$$\delta = 1.29 \times 10^{-2}.$$

De algorithmen gebaseerd op de analyse in §3 bleek snel te convergeren binnen de nauwkeurigheid die het experiment voorschrijft. Enige numerieke resultaten, gebaseerd op de eerder genoemde numerieke waarden van de fysische grootheden, staan vermeld in onderstaande tabel. Hieruit is het verloop van de functie en de monotonie duidelijk af te lezen.

Tabel		
r (in mm)	$V(r)$	$\frac{dV}{dr} \times 10^{-4}$
0.00	196	0
0.75	194	-.621
1.50	186	-1.32
2.25	176	-1.31
3.00	167	-1.18
6.00	137	-.879
9.00	113	-.731
12.00	92	-.642
15.00	74	-.581
18.00	57	-.537
21.00	42	-.502
24.00	27	-.474
27.00	13	-.451
30.00	0	-.432

In de analyse van §2 wordt gebruik gemaakt van een contractiestelling in een Banachruimte. Voor literatuur op dit gebied kan verwezen worden naar J.K. Hale, Ordinary Differential Equations, Wiley, 1969. Hierin wordt ook het principe van de voortzetting van de oplossing behandeld.