Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт вычислительной математики и математической геофизики
Сибирского отделения Российской академии наук

На правах рукописи

БЕРЕНДЕЕВ Евгений Андреевич

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ПЛАЗМЫ В ОСЕСИММЕТРИЧНЫХ МАГНИТНЫХ ЛОВУШКАХ-МИШЕНЯХ

05.13.18 - математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
профессор, д.ф.-м.н.
В. А. Вшивков

Новосибирск - 2017

Оглавление

Введение

В настоящее время численное моделирование является не просто приложением к фундаментальным или прикладным исследованиям, а совершенно самостоятельным стремительно развивающимся научным направлением. Наиболее широкое применение численное моделирование нашло в области физики плазмы, выделившись в отдельное направление – вычислительную физику плазмы. Это связано, прежде всего, со сложностью и многообразием плазменных процессов, экспериментальное исследование которых не может быть полным без сопровождения вычислительными экспериментами. В настоящее время численное моделирование различного рода плазменных установок активно используется по всему миру [1, 2, 3]. Например, в результате численного моделирования были обнаружены принципиально новые механизмы развития сильной и умеренной плазменной турбулентности, найдены новые режимы ускорения заряженных частиц при взаимодействии лазерного импульса с плазмой [4, 5]. Кроме того, численное моделирование получило широкое применение в связи с проблемой нагрева и удержания плазмы в системах управляемого термоядерного синтеза (УТС).

Известно, что одним из методов накопления и нагрева высокотемпературной плазмы, удерживаемой магнитным полем, является инжекция мощных пучков нейтральных атомов. Для получения атомарных пучков высокой энергии необходимо пучки ускоренных отрицательных ионов пропускать через нейтрализующую мишень.. При этом увеличение отношения вырабатываемой реактором энергии к потребляемой требует высокой эффективности нейтрализации, что особенно важно для реакций с малым энергетическим выходом.

Нейтрализующие мишени различного типа (газовые, плазменные, фотонные) в настоящее время разрабатываются в ряде лабораторий как в России [6, 7, 8, 9], так и за рубежом [10]. В частности, в ИЯФ СО РАН была предложена и развита концепция нейтрализации пучка в низкотемпературной плазменной мишени [6], для которой выход атомов достиг уровня 85 % (в газовых мишенях ~ 55 %) и были получены высокие показатели по удержанию плазмы [11].

Мишенная плазма должна удерживаться в осесимметричной магнитной ловушке с инверсными магнитными пробками, имеющей отверстия с широкой апертурой для прохождения нейтрализуемого пучка. Необходимо удержание плазмы от истечения в эти отверстия, потери плазмы на стенки менее существенны. Для того чтобы избежать утечки плазмы, применяется достаточно сложная конфигурация магнитного поля, запирающая плазму внутри. Данное обстоятельство осложняет теоретические оценки поведения плазмы и для детального изучения динамики плазмы и эффективности её удержания необходимо, помимо лабораторных экспериментов, проведение численного моделирования.

Для эффективного использования магнитной ловушки в качестве нейтрализующей мишени пучков высокой энергии необходимо иметь методику расчёта как оптимальной конфигурации ловушки для получения требуемых параметров плазмы, так и повышения выхода нейтральных атомов. Однако на сегодняшний день универсального инструмента для решения данных проблем не существует. Таким инструментом может стать численная модель, которая позволит на основе вычислительных экспериментов исследовать основные закономерности плазменных процессов в ловушке.

Для того чтобы получить более глубокие знания о явлениях, которые сопровождают удержание плазмы в ловушке с мультипольными магнитными стенками и инверсными магнитными пробками, и описать их количественные характеристики, необходимо иметь адекватные исследуемым процессам численные модели. Все модели, используемые при описании плазменных явлений можно разделить на три типа: гидродинамические, кинетические и гибридные. Гидродинамические и гибридные модели используются при решении задач, в которых все или некоторые функции распределения частиц плазмы равновесны. Это существенно упрощает решение основных уравнений, но в некоторых случаях не может воспроизвести полной физической картины исследуемых процессов. Наиболее полное описание можно получить на основе кинетических моделей, в которых плазма представляется набором достаточно большого числа модельных частиц. Однако, практические расчёты на основе таких моделей требуют большой вычислительной мощности. Современное состояние вычислительной техники позволяет решить некоторые задачи, используя, например, многопроцессорные системы. В данной работе на основе кинетического подхода и метода Монте-Карло с применением методики распределенных вычислений на суперЭВМ проведено исследование динамики плазмы в ловушке-мишени, используемой для нейтрализации высокоэнергетичных пучков отрицательных ионов.

Диссертация посвящена построению численной модели динамики плазмы в ловушке-мишени на основе кинетического подхода и метода Монте-Карло, разработке численных методов решения полученных уравнений и созданию реализующих их программ, а также проведению численных экспериментов для исследования основных характеристик мишенной плазмы, используемой для нейтрализации высокоэнергетичных пучков отрицательных ионов.

Созданная модель учитывает, с одной стороны, существенно различную величину магнитного поля внутри и на границе ловушки, а с другой – влияние различных видов столкновений, в том числе эффектов ионизации. Это позволяет удовлетворить необходимые требования к численным методам и модели: адекватно воспроизводить траектории движения частиц плазмы во всей ловушке, учитывать столкновения частиц и процесс ионизации.

Для моделирования динамики плазмы в кинетическом приближении используется метод частиц в ячейках как наиболее универсальный и удовлетворяющий всем необходимым требованиям. Метод Монте-Карло используется для описания процессов ионизации и столкновения частиц. При этом плазма представляется набором достаточно большого числа модельных частиц, которые движутся под действием самосогласованного электромагнитного поля. Плотности тока и плотности заряда, необходимые для определения электромагнитных полей определяются исходя из функции распределения модельных частиц. Форма, размер частицы и распределение в ней заряда определяется специальной функцией – ядром частицы. Существует несколько видов ядер (*NGP*-ядро, *PIC*-ядро, параболическое и т.д.), однако на практике применяются в основном простейшие ядра. Это связано с тем, что приходится рассчитывать динамику достаточно большого числа модельных частиц и необходимо минимизировать количество арифметических операций на одну модельную частицу

Цилиндрическая геометрия рассматриваемой ловушки требует для описания динамики плазмы модификации имеющихся стандартных подходов в методе частиц. Наиболее широко используемые ядра частиц, такие как PIC-ядро и параболическое, симметричны, поэтому в недекартовых системах координат центр масс частиц не совпадает с центром ячейки, что приводит к существенным искажением плотности плазмы вблизи оси [12]. Использование других ядер затруднено тем, что для них вычисление плотности тока и плотности заряда частицы на сетке не согласованы, что в свою очередь требует коррекции значений электрического поля, полученных из решения уравнений Максвелла [13]. Несмотря на то, что решению проблемы вычисления тока в методе частиц в ячейках посвящено множество работ [14, 15, 16, 17, 18], на сегодняшний день универсального подхода, позволяющего корректно восстанавливать значения плотности тока на сетке для произвольного ядра, не существует.

В данной работе предложен численный метод нахождения плотности тока, использующий напрямую решение уравнения неразрывности, и позволяющий получить согласованные значения плотности заряда и плотности тока без необходимости дополнительных коррекций. Показано, что предложенный алгоритм применим, в том числе, и для несимметричных ядер частиц и может использоваться в произвольной криволинейной системе координат при решении широкого круга задач. Поскольку выбранные методы являются достаточно ресурсоёмкими, также создан параллельный алгоритм, позволяющий сократить время вычислений и увеличить точность получаемых оценок. Разработанный автором алгоритм параллельных вычислений основан на эйлерово-лагранжевой декомпозиции: расчётная область разделяется на подобласти, в которых вычисления производит своя группа процессоров. Внутри каждой такой подобласти модельные частицы распределяются между процессорами группы, что обеспечивает высокую степень параллелизма. Также разработанный алгоритм позволяет обеспечить балансировку вычислительной нагрузки на процессоры в случаях, когда частицы движутся с различным шагом по времени. Эффективность представленного в работе алгоритма подтверждена результатами тестовых расчётов на различных вычислительных системах, таких как суперкомпьютер «Ломоносов» (МГУ), НКС-30Т (ССКЦ СО РАН), кластер НГУ.

Актуальность работы

Программные комплексы, используемые для моделирования процессов в низкотемпературной плазме, представляют большую коммерческую ценность при разработке технологических плазменных систем. Поэтому работы по детальному моделированию низкотемпературной плазмы в значительной степени сконцентрированы в корпоративных исследовательских центрах и охраняются в режиме коммерческой тайны. В частности, из общедоступных коммерческих систем для численного моделирования можно отметить пакет COMSOL MULTIPHYSICS[19], в последнюю версию которого включен модуль для моделирования плазмы в гидродинамическом приближении, не позволяющий учесть кинетические эффекты. В настоящее время развитием кинетического подхода для моделирования низкотемпературной плазмы занимается группа В. Колобова [20]. Моделирование динамики и кинетики реакций нейтрального водорода в низкотемпературной плазме развивается в лабораториях термоядерного синтеза, исследующих взаимодействие горячей плазмы с поверхностью (Монте-Карло коды EREINE Юлих, Германия [21] и DEGAS2 Принстон, США [22]). Также существует ряд пакетов программ для моделирования физики плазмы методом частиц в ячейках: KARAT [23], CFHALL [24], VORPAL [25], DEMOCRITUS [26], MAGIC [27], код OSIRIS, UCLA, USA [28] (в том числе и в цилиндрической системе координат [29]), код QUICKPIC [30].

Однако, несмотря на обилие численных методов и программ для моделирования плазмы (в том числе и на основе метода частиц в ячейках), при решении каждой конкретной задачи возникает необходимость разрабатывать новый подход, учитывающий все особенности моделируемого явления.

В случае решаемой в диссертации задачи необходимость учёта сложной геометрии магнитного поля с большими градиентами, процессов ионизации и столкновений частиц, использование цилиндрической системы координат не позволяет использовать распространённые программные пакеты для моделирования плазмы. Кроме того, стандартные численные методы расчёта динамики заряженных частиц в цилиндрических координатах показывают низкую скорость и качество работы, в расчётах используются только простейшие симметричные ядра, поэтому построение метода, по своим характеристикам схожего с обычными методами в декартовой системе координат является своевременным и актуальным.

Ещё одним важным и актуальным аспектом при решении рассматриваемой задачи является разработка эффективного параллельного алгоритма вычислений для его реализации на вычислительных комплексах современной архитектуры. Существующие программы показывают высокую степень масштабируемости на тестовых задачах, однако, в прикладной области основной проблемой является балансировка вычислительной нагрузки, а именно равномерное распределение вычислений по процессорам.

Предложенный в работе алгоритм параллельных вычислений позволяет учесть неравномерность вычислительной нагрузки при расчёте движения частиц с различным временным шагом и может быть использован для решения различных сложных вычислительных задач в области физики плазмы.

Результаты вычислительных экспериментов можно использовать для оптимизации магнитной системы ловушки, оценки и улучшения эффективности удержания плазмы.

Цель диссертационной работы заключается в построении численной модели для описания динамики плазмы в ловушке-мишени, разработке экономичных вычислительных схем метода частиц в ячейках с применением методики распределенных вычислений на суперЭВМ и исследовании на основе вычислительных экспериментов основных закономерностей плазменных процессов в ловушке.

Для достижения этой цели были поставлены и решены следующие задачи:

1) создание на основе комбинации метода частиц и метода Монте-Карло численных методов решения основных уравнений динамики заряженных частиц в цилиндрической системе координат;

2) адаптация разработанных алгоритмов для проведения параллельных вычислений на вычислительных комплексах современной архитектуры;

3) создание комплекса программ для расчёта динамики плазмы в ловушке-мишени на суперЭВМ;

4) с помощью серии вычислительных экспериментов изучение динамики многокомпонентной плазмы в ловушке с инверсными магнитными пробками и мультипольными магнитными стенками применительно к условиям лабораторных экспериментов.

Научная новизна заключается в следующем:

1. Создана новая численная модель, построенная с применением комбинации метода частиц в ячейках и метода Монте-Карло, позволяющая наравне с кинетическими эффектами учесть процессы ионизации и рассеяния.

2. Создан новый универсальный численный метод расчёта плотности тока при движении частиц в цилиндрической системе координат, удовлетворяющий разностному аналогу уравнения неразрывности.

3. Разработан новый метод балансировки вычислительной нагрузки для алгоритма параллельных вычислений метода частиц в ячейках, обеспечивающий высокую масштабируемость распределённых вычислений.

4. С помощью созданного комплекса программ проведены численные расчёты динамики плазмы в ловушке мишенного типа, разработанной в

ИЯФ СО РАН. Показано, что магнитная система со слабым продольным полем и инверсными магнитными пробками в торцевых отверстиях позволяет минимизировать поток плазмы из ловушки. Установлено, что профили плотности всех компонент плазмы в области инверсной магнитной пробки имеют ступенчатую структуру.

Научная и практическая ценность работы состоит в создании новых численных методов для моделирования плазмы в магнитном поле сложной конфигурации в цилиндрической системе координат, а также комплекса программ для проведения расчётов основных характеристик плазмы в ловушке. Созданные алгоритмы и комплекс программ могут найти широкое применение при проектировании новых магнитных ловушек, а также при исследовании фундаментальных свойств плазмы в сильных магнитных полях и в работах, направленных на изучение эффективности удержания плазмы в магнитном поле.

Представленные в диссертации исследования проводились в рамках проектов, поддержанным Российским Фондом Фундаментальных исследований (№ 14-01-00392, № 16-31-00304, № 16-01-00209), в том числе под руководством Берендеева Е. А. (№ 14-01-31220), а также по грантам Российского Научного Фонда (№ 14-11-00485, № 16-11-10028).

Методы исследования. В работе используются методы вычислительной математики и математического моделирования, элементы теории разностных уравнений, элементы теории вероятности и математической статистики, метод частиц в ячейках. Разработка программного обеспечения проводилась на основе языка Fortran 2003 и Message Passing Interface (MPI).

Достоверность результатов

Достоверность представленных результатов основана на применении обоснованных численных моделей, верифицированных на специальном наборе тестовых задач, устойчивостью и сходимостью используемых численных схем, сравнением результатов моделирования с результатами лабораторных экспериментов.

Разработанный комплекс программ имеет модульную структуру, что позволило провести тестирование каждого модуля независимо.

Получена сходимость решения на сгущающихся сетках и при увеличении числа модельных частиц.

Проведены вычислительные эксперименты для сравнения с аналитическими решениями на тестовых задачах, выполнено сравнение с экспериментальными данными.

Результаты численных расчётов имеют качественное соответствие с данными, полученными в результате лабораторных экспериментов.

На защиту выносятся

- численная модель, построенная с применением комбинации метода частиц в ячейках и метода Монте-Карло, описывающая нелинейную динамику плазмы в ловушке-мишени с мультипольными магнитными стенками и инверсными магнитными пробками,
- численный метод нахождения плотности тока при движении частиц в цилиндрической системе координат, позволяющий согласовать плотность тока и плотность заряда без дополнительных коррекций,
- метод балансировки вычислительной нагрузки для алгоритма параллельных вычислений с эйлерово-лагранжевой декомпозицией, позволяющий существенно сократить время вычисления траекторий частиц в магнитных полях сложной геометрии,
- комплекс программ для моделирования динамики плазмы и результаты численного моделирования, позволившие оценить потери плазмы из ловушки-мишени применительно к условиям лабораторных экспериментов.

Апробация работы

Основные положения диссертационной работы докладывались и обсуждались на объединенном семинаре ИВМиМГ СО РАН, на семинаре ИВТ СО РАН «Законы сохранения и инварианты для уравнений гидродинамического типа», на семинаре «Математическое моделирование в механике» ИТПМ СО РАН, на II международной научно-технической конференции "Высокопроизводительные вычисления HPC-UA" (2012, Киев (Украина)), V международной молодёжной научной школе-конференции "Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач" (2013, Новосибирск), VII Международной научной конференции "Параллельные Вычислительные Технологии (ПаВТ)" (2013, Челябинск), VII Всероссийской конференции “Актуальные проблемы прикладной математики и механики”, посвящённой памяти академика А.Ф. Сидорова. (2014, Абрау-Дюрсо), The International Workshop Complex Plasma Phenomena in the Laboratory and in the Universe (2015, Rome (Italy)), Международной конференции "Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики – 2015", посвященной 90-летию со дня рождения академика Гурия Ивановича Марчука, Sixth Conference on Numerical Analysis and Applications (2016, Rousse (Bulgaria).

Основные результаты опубликованы в 18 работах[31-48], из которых 6 в журналах, рекомендованных ВАК.

Личный вклад соискателя заключается в обсуждении постановки задачи, разработке численной модели, численных алгоритмов и методов решения, создании и тестировании программ, проведении серии численных экспериментов и анализе полученных результатов. Все выносимые на защиту результаты принадлежат лично автору. Представление результатов совместных исследований и разработок согласовано с соавторами.

Структура диссертационной работы

Диссертационная работа состоит из введения, четырёх глав и Заключения. В первой главе содержится обзор основных численных моделей для описания динамики плазмы в магнитной ловушке-мишени, приведено подробное описание схемы ловушки. Вторая глава посвящена описанию численных методов решения системы уравнений Больцмана-Максвелла с помощью комбинации метода частиц в ячейках и метода Монте-Карло, а также проблеме вычисления плотности тока и плотности заряда модельных частиц. Во второй главе также приводится описание разработанного автором численного метода нахождения плотности тока, используя уравнение неразрывности. Третья глава посвящена алгоритмам параллельных вычислений для моделирования динамики плазмы методом частиц в ячейках. Здесь также приведены данные об эффективности используемых параллельных алгоритмов. В четвёртой главе содержатся результаты тестовых расчётов траекторий частиц в пробкотроне, а также результаты вычислительных экспериментов по моделированию динамики плазмы в ловушке-мишени с мультипольными магнитными стенками и инверсными магнитными пробками, разработанной в ИЯФ СО РАН. В Заключении приведены итоговые результаты, а также дальнейшие перспективы диссертационного исследования.

Глава 1. Численная модель

1.1. Плазменная ловушка-мишень

Одной из неотъемлемых частей проблемы управляемого термоядерного синтеза является создание источников мощных пучков нейтральных атомов; инжекция таких пучков используется как основной метод накопления и нагрева удерживаемой в магнитном поле высокотемпературной плазмы [3]. Для получения атомарных пучков с энергией более 0.5 МэВ необходимо ускорить пучки отрицательных ионов до указанной энергии и эти пучки пропускать через нейтрализующую мишень. Плазменные ловушки-мишени способны обеспечить более высокую степень нейтрализации, чем обычные газовые мишени, однако для наиболее эффективной нейтрализации, необходимо получить в мишени плазму достаточно высокой плотности и степени ионизации [49].

Разработка плазменных ловушек-мишеней в настоящее время является одной из самых актуальных задач.

В Курчатовском институте создана плазменная мишень с ионизацией газа мощным микроволновым полем. Достигнутая плотность аргоновой плазмы, удерживаемой в мультипольной магнитной ловушке, составила $0{,}9 \cdot 10^{12}$ см$^{-3}$ [8, 9]. В институте JAERI (Japan) изучалась магнитная ловушка-мишень, образованная стержневыми перманентными магнитами. Полученная ионизацией электронами водородная плазма была недостаточно ионизирована и имела плотность $1{,}1 \cdot 10^{12}$ см$^{-3}$ [10].

В настоящее время в ИЯФ СО РАН предложена осесимметричная магнитная ловушка со слабым продольным полем и инверсными пробками в торцевых отверстиях (с противоположным направлением продольного поля) [7], в которой предполагается достичь более высокой плотности водородной плазмы ($2 \cdot 10^{12}$ см$^{-3}$) и степени ионизованности 2/3.

Благодаря сохранению в аксиально-симметричной системе обобщённого момента импульса, продольное удержание частиц в такой ловушке окажется очень жёстким. Радиальные потери плазмы ограничиваются мультипольными магнитными стенками, сформированными последовательностью кольцевых магнитов с переменной намагниченностью.

В осесимметричной ловушке с кольцевыми магнитными поверхностями отсутствует азимутальный компонент поля, а также отсутствует стационарное азимутальное электрическое поле. Соответственно, в такой ловушке не может возникать нормальный к стенкам стационарный дрейф плазмы в скрещенных полях. Благодаря этому, а также благодаря естественной МГД устойчивости плазмы, окруженной мультипольными стенками, электроны плазмы хорошо удерживаются, во внутренней области потенциал плазмы понижается, что ведёт к улучшению удержания ионов.

Эффективность предложенной магнитной системы была подтверждена при испытании прототипа ловушки [11]. Экспериментально продемонстрировано жесткое ограничение истечения плазмы в торцевое отверстие инверсными пробками и показан механизм этого ограничения. Установлено, что электроны удерживаются в ловушке преимущественно магнитными полями. Наблюдалось ступенчатое падение плотности плазмы в области инверсной пробки, а также резкое падение плотности плазмы по радиусу, что позволяет с уверенностью говорить о высокой эффективности удержания плазмы в ловушке.

Схематичное изображение созданной ловушки-мишени представлено на рисунке 1.1. Ловушка представляет собой цилиндрическую систему длиной 1355 мм с вакуумной камерой внутренним диаметром 199 мм. Ловушка состоит из центрального катодного блока и симметричных относительно него цилиндрических секций и торцевых крышек. Дополнительное разделение каждой из цилиндрических секций на две половины обусловлено механической устойчивостью.

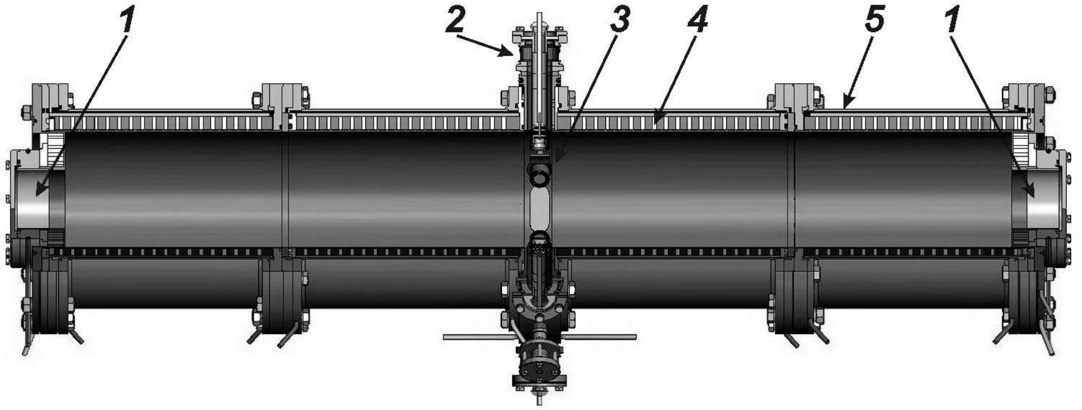


Рис. 1.1 Схема плазменной ловушки-мишени. (1) – широкоапертурные отверстия для прохождения нейтрализуемого пучка, (2) – катодный блок, (3) – один из шести катодов, (4) – постоянные магниты, (5) – магнитный экран.

На рисунке 1.2. представлена схема магнитной системы ловушки и силовые линии магнитного поля. Магнитная система состоит из двух зеркально симметричных половин. Чередующиеся радиально и азимутально намагниченные постоянные NdFeB магниты размещаются непосредственно на внешней поверхности вакуумной камеры с толщиной стенки 2.5 мм, что позволяет получить достаточно большое (до 7 кГс) поле вблизи поверхности камеры для обеспечения эффективного отражения частиц. Снаружи магнитов размещаются магнитные экраны. Торцевые магнитные сборки совместно с кольцевыми экранами формируют инверсные пробки в торцевых отверстиях диаметром 10 см.

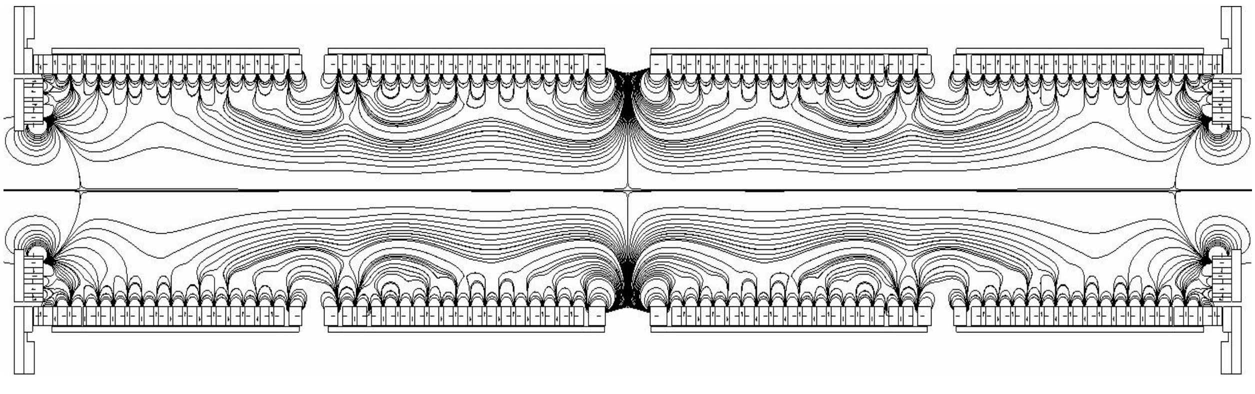


Рис. 1.2 Схема магнитной системы ловушки-мишени, силовые линии магнитного поля.

Изначально ловушка заполняется газом H_2 плотностью $n_g = 10^{13}$ см$^{-3}$. Ионизация газа осуществляется электронами. Центральный катодный блок состоит из 6 катодных узлов, установленных равномерно по окружности, с LaB_6 катодами диаметром 20 мм. Предполагается, что плотность мишенной плазмы составит $2 \cdot 10^{12}$ см$^{-3}$ частиц, степень ионизации достигнет 70 %. Состав водородных ионов будет следующим: H^+ – 40 %, H_2^+ – 30 %, H_3^+ – 30 %. Предполагается, что электронная температура достигнет 5 эВ.

В настоящее время ловушка-мишень полностью изготовлена. Также разработан и изготовлен комплекс устройств для диагностики плазмы, включая диагностический инжектор атомов водорода и анализатор прошедшего через плазму диагностического пучка. В ловушке реализовано зажигание плазмы. Для более детального анализа динамики плазмы в ловушке, проверки достоверности измерений и оптимизации параметров работы ловушки было проведено численное моделирование с использованием адекватной изучаемым процессам численной модели.

1.2. Основные уравнения

В ловушке с магнитным полем происходит запирание электронов, поэтому важно в расчетах учитывать фазовое распределение, область потерь и область удержания. Численное моделирование необходимо для оценки и минимизации потерь плазмы в проходные отверстия в торцах (через инверсные пробки), а также через мультипольные магнитные стенки ловушки на ее вакуумную камеру.

В данной работе рассматривается небольшой промежуток времени, когда происходит ионизация газа холодным пучком катодных электронов, поэтому наиболее важную роль играет процесс ионизации газа и рассеяния катодных электронов на молекулах водорода. Кулоновские столкновения в самой плазме в этот промежуток времени не играют существенной роли и в данной работе не учитываются.

При этом наиболее полно динамика плазмы может быть описана уравнением Больцмана для функций распределения ионов и электронов плазмы $f_\alpha(t,\vec{r},\vec{p})$ [50]:

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t}+\vec{v}\frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{r}}+q_\alpha(\vec{E}+\frac{1}{c}[\vec{v},\vec{\mathrm{B}}])\frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{p}}=St\{f_\alpha\}\,, \qquad (1.1)$$

и системой уравнений Максвелла с самосогласованными электромагнитными полями:

$$rot\vec{B}=\frac{4\pi}{c}\vec{j}+\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}=\frac{4\pi}{c}\sum_\alpha q_\alpha\int f_\alpha\vec{v}d\vec{v}+\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}\,, \qquad (1.2)$$

$$rot\vec{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}\,, \qquad (1.3)$$

$$div\vec{E}=4\pi\rho=4\pi\sum_\alpha q_\alpha\int f_\alpha d\vec{v}\,, \qquad (1.4)$$

$$div\vec{B}=0\,. \qquad (1.5)$$

Здесь α – сорт частиц (ионы и электроны),

$\vec{r}$, $\vec{v}$ – координата и скорость частицы,

q_α – заряд частицы сорта α,

$\vec{E}$ и $\vec{B}$ – напряжённость электрического и магнитного поля,

c – скорость света,

$\vec{p}=\dfrac{m\vec{v}}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}$ – импульс частицы массы m,

$\vec{j}$ – плотность тока,

ρ – плотность пространственного заряда,

$St\{f_\alpha\}$ – функция, описывающая следующие физические процессы:

1) упругое столкновение (рассеяние) на атомах водорода

$H_2 + e^- \rightarrow H_2 + e^-$,

2) диссоциативная ионизация молекул водорода катодными электронами

$H_2 + e^- \rightarrow H^+ + H + 2e^-$,

3) ионизация молекул водорода катодными электронами

$H_2 + e^- \rightarrow H_2^+ + 2e^-$,

4) ионизация ионами H_2^+ молекулы водорода

$H_2 + H_2^+ \rightarrow H_3^+ + H$

Рассматриваемые уравнения приведены в системе СГС для вакуума.

Для детального анализа динамики плазмы в ловушке необходимо построить максимально полную численную модель плазмы, позволяющую провести исследования процессов в плазменной ловушке, свойств удерживаемой плазмы, параметров удержания, баланса частиц, энергетического баланса и процесса ионизации газа электронами.

Проблема теоретического и численного описания процессов в плазме существует со времени появления физики плазмы как отдельного направления. До последнего времени для такого описания в основном использовались качественные или упрощенные гидродинамические модели, не позволяющие выявить некоторые важные кинетические эффекты в слабостолкновительной плазме. Возможность детального кинетического описания газоразрядной плазмы связана с бурным развитием вычислительных технологий и появлением высокопроизводительных вычислительных систем и соответствует общей тенденции перехода к моделированию сложных систем из первых принципов.

Специфика моделирования плазмы заключается в том, что необходимо решать самосогласованные задачи – рассчитывать электромагнитные поля от потоков заряженных частиц, а также движение частиц под действием электромагнитных полей. Кроме того, усложняет моделирование и существенное различие в массе ионов и электронов.

Решение уравнений Максвелла (1.2)- (1.5) обычно осуществляется конечно-разностными методами на вычислительной сетке [51, 52], а необходимые для решения уравнений значения плотности тока и плотности заряда определяются из изменения функции распределения частиц в уравнении (1.1).

Решение уравнения Больцмана в полной постановке представляет собой довольно сложную задачу, состоящую из нахождения функции распределения для частиц, движущихся в самосогласованных электромагнитных полях и испытывающих столкновения.

Для решения уравнения (1.1) существует большой класс различных методов. В [53, 54] и [55] приведена приблизительная их классификация, но и она является не полной.

Прямое решение уравнения Больцмана конечно-разностными методами [56, 57, 58] требует не только вычисления функции распределения в 6-тимерном пространстве координат-скоростей, но и вычисления интегралов всех типов столкновений.

Помимо конечно-разностного метода, метода конечных элементов [59, 60], которые обычно не применяются в силу своей сложности, широкое распространение получили магнитогидродинамическое описание плазмы (метод крупных частиц [61], метод Харлоу [62]), кинетический и гибридный подход, описывающий различные компоненты плазмы по отдельности.

Выбор способа описания плазмы зависит как от физических особенностей задачи, так и от объёма необходимых вычислительных затрат. МГД подход предполагает, что функции распределения частиц равновесны, что упрощает задачу. В этом случае, например, можно рассматривать изменение потоков вещества через границы ячеек за конкретный шаг по времени, и пренебречь эволюцией фиксированных в начальный момент времени отдельных модельных частиц среды.

При кинетическом описании [63], плазма разделяется на группы находящихся в одном единичном объеме фазового пространства частиц. Каждая из таких групп рассматривается как одна макрочастица. Функция распределения и макропараметры плазмы восстанавливаются из положения модельных макрочастиц в фазовом пространстве. Исходя из функции распределения частиц, определяются плотности тока, и плотности заряда, необходимые для решения уравнений Максвелла. Такой метод получил название метода частиц в ячейках [53, 64, 65]. Сам по себе такой метод описывает только бесстолкновительную плазму. Для учёта столкновений используют гибридный метод [66], совмещающий метод частиц с другими методами.

Одним из способов использования комбинации различных методов для решения уравнения Больцмана является естественное разделение столкновительной части и свободного движения под действием полей.

В этом случае можно будет решать два получившихся уравнения

$$\frac{\partial f_\alpha^{(1)}}{\partial t} + \vec{v}\,\frac{\partial f_\alpha^{(1)}}{\partial \vec{r}} + q_\alpha\,(\vec{E} + \frac{1}{c}[\vec{v},\vec{\mathrm{B}}])\frac{\partial f_\alpha^{(1)}}{\partial \vec{p}} = 0\,, \tag{1.6}$$

$$\frac{\partial f_\alpha^{(2)}}{\partial t} = St\{f_\alpha\}\,, \tag{1.7}$$

различными методами. Уравнение (1.6) называют кинетическим уравнением Власова для бесстолкновительной плазмы. Обычно уравнение Власова решается методом частиц в ячейках, а уравнение (1.7) с помощью метода Монте-Карло [67, 68], используя вероятности столкновений частиц. Также существуют методы, в которых функция столкновения частиц находится из решения уравнения Фоккера-Планка [69].

В некоторых случаях одну компоненту плазмы, например, электроны описывают как жидкость, а для расчёта движения ионов применяется кинетический подход. Такие схемы также называют гибридными [70, 71].

Существует также ряд методов, в которых рассчитывается действие каждой частицы друг на друга (Метод листов [72, 73], бессеточный метод частиц конечного размера - FSP (gridless Finite Size Particle) [74]. В FSP вместо точечных частиц используются облака частиц, имеющие форму функции Гаусса, а вычисление сил, действующих на частицу, происходит в Фурье-пространстве без перехода к пространственной сетке. Вычислительная сложность таких алгоритмов равна $O(N^2)$, где N - полное число частиц. Поэтому в практических расчётах можно использовать лишь небольшое число частиц.

Для описания замагниченной плазмы используется гирокинетическое приближение [75, 76, 77, 78] являющееся промежуточным между МГД и кинетическим подходом. Это приближение является модификацией метода частиц. Частицы здесь используются только для расчета отклонения функции распределения от локального максвелловского. Гирокинетический подход позволяет устранить высокочастотные составляющие движения частиц при помощи осреднения по фазе циклотронного вращения, что дает возможность сохранить учет физических эффектов, вносимых циклотронным движением.

В работе [79] проводится сравнение результатов моделирования газового разряда в МГД приближении и с помощью метода частиц. Показано, что МГД приближение действительно не учитывает ряд важных физических эффектов, происходящих в газовом разряде, в частности эффект нелокальности.

В ловушке с магнитным полем происходит запирание электронов, поэтому важно в расчетах учитывать фазовое распределение, область потерь и область удержания. Численное моделирование необходимо для оценки и минимизации потерь плазмы в проходные отверстия в торцах (через инверсные пробки), а также через мультипольные магнитные стенки ловушки на ее вакуумную камеру. Таким образом, наиболее подходящим способом моделирования плазмы в ловушке-мишени будет кинетическое описание плазмы с помощью метода частиц и учёт столкновений заряженных частиц с газом с помощью метода Монте-Карло [67].

Поскольку в рамках кинетической теории интегрирование вдоль траекторий частиц в невозмущенных полях требует большого времени счёта, а МГД-подход не отражает необходимых эффектов, предлагается использовать модификацию метода частиц с учётом адаптивного шага по времени.

1.3. Метод частиц в ячейках

Рассмотрим подробно метод частиц в ячейках. Представим плазму набором некоторого числа частиц (J). Функция распределения точечных частиц имеет вид:

$$f(\vec{r},\vec{v},t)=\sum_{j=1}^{J}\delta(\vec{r}-\vec{r}_j(t))\delta(\vec{v}-\vec{v}_j(t)), \qquad (1.8)$$

где δ - дельта-функция Дирака.

Однако такое представление приводит к большим флуктуациям плотности из-за ограниченного числа частиц. Для уменьшения флуктуаций, а также для устранения расходимости электрического поля на малых расстояниях вместо точечных частиц используют частицы, имеющие пространственный размер (определяющийся некоторой функцией *R*) и свободно проходящие сквозь друга. Функция распределения в таком случае будет иметь следующий вид

$$\tilde{f}(\vec{r},\vec{v},t) = \int f(\vec{r}',\vec{v},t)R(\vec{r},\vec{r}')d\vec{r}' = \sum_j R(\vec{r},\vec{r}_j(t))\delta(\vec{v}-\vec{v}_j(t)) \qquad (1.9)$$

Плотность заряда и плотность тока такой частицы будут равны

$$\tilde{\rho}(\vec{r},t) = \sum_j q_j R(\vec{r},\vec{r}_j(t))\,, \qquad (1.10)$$

$$\tilde{\vec{j}}(\vec{r},t) = \sum_j q_j \vec{v}_j(t) R(\vec{r},\vec{r}_j(t))\,. \qquad (1.11)$$

Как видно из этих формул, функция R (функция ядра частицы) характеризует форму, размер частицы и распределение в ней заряда. Для сохранения заряда каждой частицы, функция R должна удовлетворять естественному условию нормировки

$$\int_V R(\vec{r},\vec{r}'(t))\,d\vec{r} = 1 \qquad (1.12)$$

Помимо условия (1.12), функция R выбирается таким образом, чтобы выполнялось сглаживание силы и устранялись близкие взаимодействия, не играющие существенной роли

1.3.1. Сеточное ядро

Формулы (1.10)-(1.11) и (1.2)- (1.5**)** определяют функции $\tilde{\rho}(\vec{r},t)$, $\tilde{\vec{j}}(\vec{r},t)$, $\vec{E}$ и $\vec{B}$ по всей области, однако, в большинстве практических задач аналитическое решение уравнений Максвелла невозможно, поэтому необходимо использовать конечно-разностные методы и определить все величины на пространственной сетке.

Разобьём расчётную область на непересекающиеся ячейки s_k.

В качестве сеточных значений плотности заряда и плотности тока в узле с номером k выбирается усреднённое значение по ячейке s_k ($|s_k|$- лебегова мера объёма, занимаемого ячейкой s_k)

$$\rho_k = \frac{1}{|s_k|}\int_{s_k}\widetilde{\rho}(\vec{r})d\vec{r} = \sum_j \frac{q_j}{|s_k|}\int_{s_k} R(\vec{r},\vec{r}_j(t))d\vec{r}\,, \tag{1.13}$$

$$\vec{j}_k = \frac{1}{|s_k|}\int_{s_k}\widetilde{\vec{j}}(\vec{r})d\vec{r} = \sum_j \frac{q_j\vec{v}_j}{|s_k|}\int_{s_k} R(\vec{r},\vec{r}_j(t))d\vec{r}\,. \tag{1.14}$$

Определим сеточное ядро частицы следующим образом

$$\overline{R}(\vec{r},\vec{r}_j(t)) = \frac{1}{|s_k|}\int_{s_k} R(\vec{r},\vec{r}_j(t))d\vec{r} \tag{1.15}$$

Тогда формулы для плотности заряда и плотности тока будут аналогичны (1.10)-(1.11) с заменой исходного ядра частицы на сеточное ядро:

$$\rho_k = \sum_j q_j \overline{R}(\vec{r},\vec{r}_j(t))\,, \tag{1.16}$$

$$\vec{j}_k = \sum_j q_j \vec{v}_j(t)\overline{R}(\vec{r},\vec{r}_j(t))\,. \tag{1.17}$$

Очевидно, что $\overline{R}$ также удовлетворяет естественному условию нормировки

$$\int_V \overline{R}(\vec{r},\vec{r}\,'(t))d\vec{r} = 1$$

На практике, из-за необходимости простой реализации и аппроксимации используется небольшое число ядер.

Рассмотрим несколько одномерных ядер частиц и соответствующих им сеточных ядер.

Наиболее простым сеточным ядром является *NGP*-ядро (*nearest-grid-point*), в котором частица даёт свой вклад в плотность только в ближайший к ней узел сетки.

$$\overline{R}_{NGP}(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{h}, & |x| \le \dfrac{h}{2}, \\ 0, & |x| > \dfrac{h}{2}, \end{cases}$$

Исходное ядро в этом случае представляет собой дельта-функцию

$$R_{NGP}(x) = \delta(x)$$

Как уже отмечалось, использование такого ядра приводит к большим флуктуациям плотности, которыми часто уже невозможно пренебречь.

Наибольшее распространение получила модификация ядра, известного в литературе как *PIC* (*particle-in-cell*). Это ядро просто в реализации и по сравнению с *NGP* имеет меньший уровень численных шумов. Ядро *PIC* распределяет заряд каждой частицы между двумя ближайшими узлами с помощью обратной линейной интерполяции. Таким образом, восстановленная в узлах плотность будет непрерывной кусочно-линейной функцией

$$R_{PIC}(x) = \overline{R}_{NGP}(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{h}, & |x| \le \dfrac{h}{2}, \\ 0, & |x| > \dfrac{h}{2}, \end{cases}$$

$$\overline{R}_{PIC}(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{h}\left(1 - \dfrac{|x|}{h}\right), & |x| \le h, \\ 0, & |x| > h, \end{cases}$$

Заметим, что исходное ядро может иметь ширину отличную от h.

Например, можно взять

$$R(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{2\Delta}, & |x| \le \Delta, \\ 0, & |x| > \Delta, \end{cases}$$

Тогда, при $\Delta > \dfrac{h}{2}$ сеточное ядро будет иметь вид (рисунок 1.3.):

$$\overline{R}(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{h}\left(\dfrac{x}{2\Delta}+\dfrac{h}{4\Delta}+\dfrac{1}{2}\right), & -(\dfrac{h}{2}+\Delta)\le x\le -\dfrac{h}{2}+\Delta \quad , \\ \dfrac{1}{2\Delta}, & -\dfrac{h}{2}+\Delta< x\le \dfrac{h}{2}-\Delta, \\ \dfrac{1}{h}\left(-\dfrac{x}{2\Delta}+\dfrac{h}{4\Delta}+\dfrac{1}{2}\right), & \dfrac{h}{2}-\Delta< x\le \Delta+\dfrac{h}{2}, \\ 0, & |x|>\Delta+\dfrac{h}{2}, \end{cases} \qquad (1.18)$$

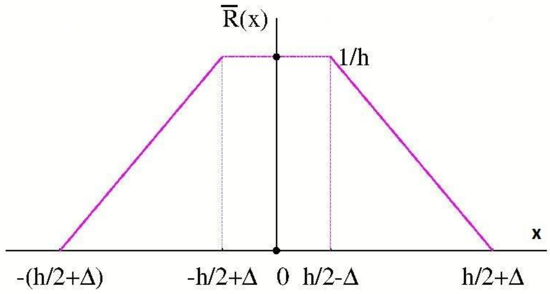


Рис. 1.3 Сеточное ядро (1.18) при ($\Delta>\dfrac{h}{2}$)

Если $\Delta\to 0$, то $\overline{R}(x)$ представляет собой сеточное NGP ядро, $\Delta=\dfrac{h}{2}$ соответствует сеточному *PIC* ядру. В общем случае, когда Δ выбрано произвольным, такое ядро называется *CIC* (*cloud-in-cell*).

Взяв за основу PIC можно получить более гладкое ядро, распределяющее заряд каждой части между тремя узлами.

$$R(x)=\overline{R}_{PIC}(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{h}\left(1-\dfrac{|x|}{h}\right), & |x|\le h, \\ 0, & |x|>h, \end{cases} \qquad (1.19)$$

$$\overline{R}(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{h}-\dfrac{1}{h^3}\left(x^2+\dfrac{h^2}{4}\right), & |x|\le \dfrac{h}{2}, \\ \dfrac{1}{2h^3}\left(\dfrac{3}{2}h-|x|\right)^2, & \dfrac{h}{2}<|x|\le \dfrac{3h}{2}, \\ 0, & |x|>\dfrac{3h}{2}, \end{cases} \qquad (1.20)$$

Ядро (1.19)-(1.20) называют параболическим (рисунок 1.4. d.). Оно обеспечивает меньший уровень численных шумов, чем PIC, но требует большего объёма вычислений и расчёта плотности в трёх узлах. Можно получить ядра частиц и из сплайнов более высоких порядков, однако, из-за большого количества требуемых вычислений на каждую частицу, в расчётах такие ядра практически не используются.

Кроме того, существует ряд ядер, не основанных на сплайнах (рисунок 1.4. c.), например:

$$R(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{2h}\left(1+\cos\dfrac{\pi\,|x|}{h}\right), & |x| \le h, \\ 0, & |x| > h, \end{cases} \qquad \mathbf{(1.21)}$$

$$\overline{R}(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{h^2}\left(-|x|+h+\dfrac{h}{2\pi}\sin(\pi-\dfrac{2\pi\,|x|}{h})\right), & |x| \le h, \\ 0, & |x| > h, \end{cases} \qquad (1.22)$$

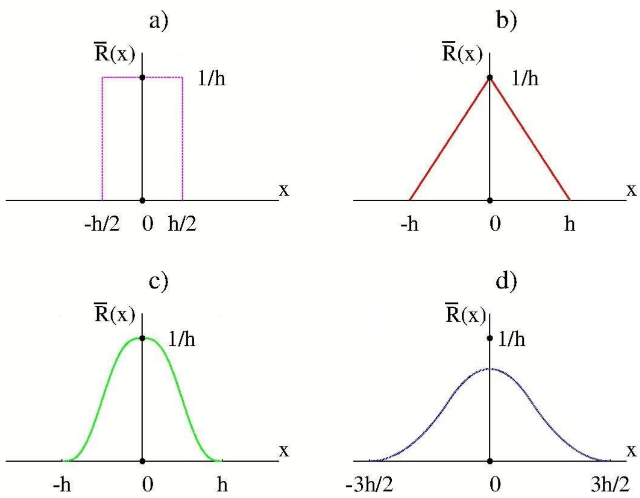


Рис. 1.4 Виды сеточных ядер: a) NGP-ядро, b) PIC-ядро, c) ядро ((1.22), d) параболическое ядро.

1.3.2. Решение уравнения Больцмана

Для решения кинетического уравнения Больцмана

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t}+\vec{v}\,\frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{r}}+q_\alpha\,(\vec{E}+\frac{1}{c}[\vec{v},\vec{\mathrm{B}}])\,\frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{p}}=St\{f_\alpha\}\,, \tag{1.23}$$

воспользуемся схемой расщепления, основанной на выделении двух физических процессов, один из которых описывает эволюцию функции распределения вдоль траекторий свободного движения частиц (правая часть уравнения), а другой, соответствующий оператору столкновений $St\{f_\alpha\}$ описывает столкновения частиц.

Схема расщепления, таким образом, на временном (итерационном) шаге m представляется в виде двух вспомогательных задач:

$$\frac{\partial f_\alpha^{(1)}}{\partial t}+\vec{v}\,\frac{\partial f_\alpha^{(1)}}{\partial \vec{r}}+q_\alpha\,(\vec{E}+\frac{1}{c}[\vec{v},\vec{\mathrm{B}}])\,\frac{\partial f_\alpha^{(1)}}{\partial \vec{p}}=0\,, \tag{1.24}$$

$$\frac{\partial f_\alpha^{(2)}}{\partial t}=St\{f_\alpha\}\,, \tag{1.25}$$

Рассмотрим решение этих уравнений.

Первое уравнение представляет собой кинетическое уравнение Власова для бесстолкновительной плазмы. Характеристики уравнения Власова дают следующую систему уравнений для движения модельных частиц:

$$\frac{d\vec{r}_j(t)}{dt}=\vec{v}_j(t), \tag{1.26}$$

$$\frac{d\vec{p}_j(t)}{dt}=q_j\left(\vec{E}_j+\frac{1}{c}\left[\vec{v}_j(t)\times\vec{B}_j\right]\right), \tag{1.27}$$

$$\vec{B}_j=\int R(\vec{r},\vec{r}_j)\vec{B}(\vec{r})d\vec{r}\;,\;\vec{E}_j=\int R(\vec{r},\vec{r}_j)\vec{E}(\vec{r})d\vec{r}\,. \tag{1.28}$$

Здесь $\vec{E}_j$ и $\vec{B}_j$ - электрическое и магнитное поле, действующее на частицу с номером *j* с функцией ядра *R*.

1.3.3. Аппроксимация силы

Поскольку электрическое и магнитное поле обычно определены на дискретном множестве точек (узлах сетки), а для вычисления силы, действующей на частицу в формулах (1.28) необходимо знать распределение полей во всей области, нужно выполнить интерполяцию.

Определим значение электромагнитных полей через их значения в узлах сетки с помощью следующей интерполяционной формулы:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \sum_k \vec{E}_k S(\vec{r} - \vec{r}_k)\,, \tag{1.29}$$

$$\vec{B}(\vec{r}) = \sum_k \vec{B}_k S(\vec{r} - \vec{r}_k)\,, \tag{1.30}$$

где $\vec{E}_k$ и $\vec{B}_k$ - известные значения полей в k-м узле сетки, а функция S – некоторая весовая функция, удовлетворяющая условию нормировки

$$\sum_k S(\vec{r} - \vec{r}_k) = 1\,. \tag{1.31}$$

Вид функции S определяет вид интерполяции.

Подставив (1.31) в (1.29)-(1.30) получим формулы для определения электромагнитных полей, действующих на частицу с номером j и функцией ядра R:

$$\vec{E}_j = \sum_k \int R(\vec{r}, \vec{r}_j) \vec{E}_k S(\vec{r} - \vec{r}_k) d\vec{r} \tag{1.32}$$

$$\vec{B}_j = \sum_k \int R(\vec{r}, \vec{r}_j) \vec{B}_k S(\vec{r} - \vec{r}_k) d\vec{r} \tag{1.33}$$

Обычно в одномерном случае функция S выбирается следующим образом

$$S^{1D}(x - x_k) = \begin{cases} 1, & |x - x_k| \le \dfrac{h}{2}, \\ 0, & |x - x_k| > \dfrac{h}{2}, \end{cases} \tag{1.34}$$

В трёхмерном случае $S^{3D}(\vec{r}) = S^{1D}(x) S^{1D}(y) S^{1D}(z)$.

Тогда формулы (1.32)-(1.33) примут вид, аналогичный (1.16)-(1.17):

$$\vec{E}_j = \sum_k |s_k| \vec{E}_k \overline{R}(\vec{r}, \vec{r}_j) \qquad (1.35)$$

$$\vec{B}_j = \sum_k |s_k| \vec{B}_k \overline{R}(\vec{r}, \vec{r}_j) \qquad (1.36)$$

1.4. Столкновения

Рассмотрим теперь уравнение (1.25), описывающее столкновительные процессы.

Вид функции $St\{f_\alpha\}$ определяется типом столкновений, в частности для нейтральных частиц это классический интеграл столкновений Больцмана. В случае столкновения заряженных частиц, взаимодействие между которыми осуществляется по закону Кулона, функция $St\{f_\alpha\}$ представляет собой функцию кулоновских столкновений, полученную Ландау. В данной модели кулоновские столкновения не учитываются, как маловероятные и рассматриваются только процессы столкновения заряженных частиц с газом.

Столкновение заряженных частиц с нейтральными атомами также можно представить интегралом столкновений, однако обычно его вывод достаточно громоздок. Для того, чтобы избежать трудоёмкого интегрирования и решения квантово-механических уравнений, обычно используют метод Монте-Карло.

Вероятность столкновения для частицы, имеющей скорость v, за время Δt может быть рассчитана по формуле:

$$P = 1 - \exp(-\Delta s \sigma_T(\varepsilon) n(\vec{r})), \qquad (1.37)$$

где $\Delta s = v\Delta t$, $\sigma_T(\varepsilon)$ – полное сечение столкновения, ε – кинетическая энергия частицы, $n(\vec{r})$ – локальная плотность частиц, с которыми происходит стокновение.

Полное сечение столкновения определяется суммой сечения для различных типов столкновений

$$\sigma_T(\varepsilon) = \sum_{\mathrm{k}} \sigma_k(\varepsilon),$$

где $\sigma_{\mathrm{k}}(\varepsilon)$ – сечение для *k*-го типа столкновений.

На первом этапе, на каждом шаге по времени по формуле (1.37) определяется, произошло ли столкновение для каждой частицы. В случае, если столкновение произошло, определяется тип столкновения, и затем рассчитываются новые параметры частицы. При необходимости также добавляются новые частицы, возникшие в результате столкновения.

Рассмотрим основные возможные типы столкновений для водородной плазмы в ловушке-мишени – упругие столкновения и ионизацию:

1) упругое столкновение (рассеяние) на атомах водорода

$H_2 + e^- \rightarrow H_2 + e^-$,

2) ионизация молекул водорода катодными электронами

$H_2 + e^- \rightarrow H^+ + H + 2e^-$,

3) ионизация молекул водорода катодными электронами

$H_2 + e^- \rightarrow H_2^+ + 2e^-$,

4) ионизация ионами H_2^+ молекулы водорода

$H_2 + H_2^+ \rightarrow H_3^+ + H$

Поскольку плотность газа H_2 существенно выше плотности плазмы в рассматриваемый период времени, частота столкновений заряженных частиц с газом также будет выше частоты столкновений заряженных частиц между собой. Таким образом, можно ограничиться лишь рассматриваемыми процессами.

В результате электрон-атомного упругого столкновения, электрон рассеивается на угол X, который может быть определён из следующего приближения для сечения столкновений [67]:

$$\frac{\sigma(\varepsilon,X)}{\sigma(\varepsilon)} = \frac{\varepsilon}{4\pi(1+\varepsilon\sin^2(\frac{X}{2})\ln(1+\varepsilon))} \qquad (1.38)$$

Используя (1.38) можно получить, что

$$\cos X = \frac{2+\varepsilon-2(1+\varepsilon)^{R}}{\varepsilon}, \tag{1.39}$$

где $R = \dfrac{\int_0^X \sigma(\varepsilon, X)\sin X dX}{\int_0^\pi \sigma(\varepsilon, X)\sin X dX}$ - случайное число в диапазоне [0,1].

Азимутальный угол рассеяния может быть получен с помощью другого случайного числа $R_1 \in [0,1]$:

$$\Phi = 2\pi R_1, \tag{1.40}$$

Используя полученные значения X и Φ, из геометрических соображений находится новая скорость частицы.

В случае ионизации и образовании пары ион-электрон необходимо учитывать закон сохранения энергии

$$\varepsilon_{\text{scatt}} + \varepsilon_{ej} + \varepsilon_i = \varepsilon_{inc} + \varepsilon_N - \varepsilon_{ion} \tag{1.41}$$

где $\varepsilon_{\text{scatt}}$, ε_{inc} - энергия падающего электрона до и после столкновения, $\varepsilon_{ej}, \varepsilon_i$ - энергия образовавшегося при столкновении электрона и иона $\varepsilon_N, \varepsilon_{ion}$ - энергия нейтрального атома и энергия необходимая для его ионизации.

Из-за большой величины отношения массы иона к массе электрона, можно предположить, что импульс падающего электрона гораздо меньше импульса нейтрального атома. Таким образом, после отрыва электрона нейтральный атом становится ионом и продолжает своё движение практически невозмущённым. Это позволяет переписать уравнение (1.41) следующим образом

$$\varepsilon_{\text{scatt}} + \varepsilon_{ej} = \varepsilon_{inc} - \varepsilon_{ion}$$

$$\varepsilon_i = \varepsilon_N$$

Теперь необходимо лишь определить энергию образовавшегося электрона.

В работе [80] получено следующее приближение для сечения:

$$\sigma_{ion}(\varepsilon_{inc}) = \int_0^{(\varepsilon_{inc}-\varepsilon_{ion})/2} S(\varepsilon_{inc}, \varepsilon_{ej}) d\varepsilon_{ej} \tag{1.42}$$

где

$$S(\varepsilon_{inc},\varepsilon_{ej}) = \frac{A(\varepsilon_{inc})}{\varepsilon_{ej}^2 + B^2(\varepsilon_{inc})},\ A(\varepsilon_{inc}) = \frac{\sigma_{ion}B(\varepsilon_{inc})}{\arctan\{[\varepsilon_{inc} - \varepsilon_{ion}]/[2B(\varepsilon_{inc})]\}},$$

$B(\varepsilon_{inc})$ - известная для данного типа нейтральных атомов функция.

Используя (1.42) можно получить

$$\varepsilon_{\mathrm{ej}} = B(\varepsilon_{inc})\tan\left[R\arctan\left(\frac{\varepsilon_{inc} - \varepsilon_{ion}}{B(\varepsilon_{inc})}\right)\right],$$

где

$$\mathrm{R} = \frac{\int_0^X \sigma(\varepsilon, X)\sin X dX}{\int_0^\pi \sigma(\varepsilon, X)\sin X dX}$$ - случайное число в диапазоне [0,1].

После нахождения всех членов уравнения (1.41) по формулам (1.39)-(1.40) определяется угол рассеяния падающего электрона и его новая скорость.

При моделировании процесса ионизации молекулы водорода ионами H_2^+

$$H_2 + H_2^+ \rightarrow H_3^+ + H$$

энергия образовавшегося иона H_3^+ рассчитывается непосредственно из закона сохранения энергии

$$\varepsilon_{\mathrm{H}_3^+} = \varepsilon_{H_2} + \varepsilon_{H_2^+} - \varepsilon_H - \varepsilon_{ion},$$

где ε_H - энергия атомов водорода, которая может быть получена из данных эксперимента [81].

1.5. Общая схема вычислений

Перед началом вычислений задаются начальное распределение частиц, электрические и магнитные поля. Затем проводится вычислительный цикл.

Общая схема шага комбинированного метода частиц с методом Монте-Карло состоит из 5-ти основных этапов;

1) по формулам (1.35)-(1.36) определяется сила, действующая на каждую частицу;

2) по формулам ((1.26)-(1.27)) осуществляется движение частиц под действием сил, определённых на первом этапе, определяются новые координаты и импульсы частиц. В случае, если частица покинула расчётную область, частица удаляется;

3) с помощью метода Монте-Карло по формуле (1.37) определяется, произошло ли столкновение частицы и, если столкновение произошло, определяется тип столкновений, импульс частицы после столкновения. Если произошло столкновение с образованием новых частиц, то в расчётную область добавляются частицы с необходимыми параметрами, определёнными согласно (1.41);

4) вычисляются плотность тока и плотность заряда на сетке по формулам (1.16)-(1.17);

5) используя определённые на четвёртом этапе вычислений значения плотности тока и плотности заряда, из уравнений Максвелла (1.2-1.5) находятся новые значения электромагнитных полей на пространственной сетке, которые в дальнейшем используются для вычисления силы на этапе 1 на следующем шаге.

Глава 2. Методы и алгоритмы решения основных уравнений

2.1. Исходная система уравнений в безразмерном виде

Перейдём во всех уравнениях (1.2-1.5 и 1.26-1.27) к безразмерным переменным, введя в качестве масштабов характерные физические величины.

За единицу времени примем $t_0 = \dfrac{1}{\omega_{pe}}$, где $\omega_{pe} = \sqrt{\dfrac{4\pi n_e e^2}{m_e}}$ - плазменная частота электронов.

Здесь n_e – характерная плотность плазменных электронов,

e – заряд электрона,

m_e – масса электрона.

За единицу скорости примем скорость света c.

Ниже приведён полный список используемых характерных величин:

Таблица 2.1. Характерные модельные величины

Плотность	$n_0 = n_e = 10^{10}$ см$^{-3}$
Заряд	$q_0 = e = 4.8 \times 10^{-10}$ статкулон
Масса	$m_0 = m_e = 9.1 \times 10^{-28}$ г
Время	$t_0 = \dfrac{1}{\omega_{pe}} = \left(\dfrac{4\pi n_e e^2}{m_e}\right)^{-1/2} = 1{,}77 \times 10^{-10}$ с
Скорость	$v_0 = c = 2{,}998 \times 10^{10}$ см / с
Длина	$r_0 = \dfrac{c}{\omega_{pe}} = 5{,}31$ см
Магнитная индукция	$B_0 = \dfrac{m_e c}{t_0 e} = 3{,}2 \times 10^2$ Гс
Напряжённость электрического поля	$E_0 = \dfrac{m_e c}{t_0 e} == 3{,}2 \times 10^2$ статвольт / см

Плотность заряда	$\rho_0 = en_0 = 4{,}8$ статкулон / см^3
Плотность тока	$j_0 = en_0c = 1{,}44 \times 10^{11}$ статампер / см^2

Перейдём во всех уравнениях к безразмерным переменным, введя в качестве масштабов указанные величины.

Уравнения движения (1.26-1.27) примут вид

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = q\left(\vec{E} + \left[\vec{v} \times \vec{B}\right]\right),$$

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}.$$

Здесь $\vec{p} = \dfrac{1}{\sqrt{1-v^2}} m\vec{v} = \gamma m\vec{v}$, m – масса частицы в массах электрона $m_e = 1$ (для ионов H+ – $m_{H^+} = 1836$, ионов H_2^+ – $m_{H_2^+} = 3673$, ионов H_3^+ – $m_{H_3^+} = 5510$), q – безразмерный заряд частицы (для электрона q=-1, для ионов H+, H_2^+, H_3^+ q=1)

Уравнения Максвелла примут следующий вид

$$div\vec{E} = \rho,$$

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -rot\vec{E},$$

$$div\vec{B} = 0,$$

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = rot\vec{B} - \vec{j}.$$

2.2. Движение частиц

Рассмотрим решение уравнения

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = q\left(\vec{E} + \left[\vec{v} \times \vec{B}\right]\right) \tag{2.1}$$

Будем исходить из того, что значение электрического и магнитного поля уже известны.

Центрированная разностная схема для (2.1):

$$\frac{\vec{p}^{\,m+1/2}-\vec{p}^{\,m-1/2}}{\Delta t}=q\left(\vec{E}+\left[\frac{\vec{v}^{\,m+1/2}+\vec{v}^{\,m-1/2}}{2},\vec{B}\right]\right) \tag{2.2}$$

Здесь Δt - дискретный шаг по времени, m – номер шага по времени.

Введём следующее обозначение: $\vec{u}=\frac{1}{\sqrt{1-v^2}}\vec{v}=\gamma\vec{v}=\frac{\vec{p}}{m}$

Тогда схему (2.2) можно переписать в виде

$$\frac{\vec{u}^{\,m+1/2}-\vec{u}^{\,m-1/2}}{\Delta t}=\frac{q}{m}\left(\vec{E}+\left[\frac{\vec{u}^{\,m+1/2}+\vec{u}^{\,m-1/2}}{2\gamma^m},\vec{B}\right]\right) \tag{2.3}$$

Рассмотрим метод, предложенный в [13] для реализации этой схемы (метод Бориса).

На первом этапе движение частицы разлагается на движение под действием электрического и магнитного поля. Для этого введём следующие величины

$$\vec{v}^{\,-}=\vec{u}^{\,m-1/2}+\frac{q\Delta t}{2m}\vec{E},$$

$$\vec{v}^{\,+}=\vec{u}^{\,m+1/2}-\frac{q\Delta t}{2m}\vec{E}.$$

Тогда схема (2.3) примет вид

$$\frac{\vec{v}^{\,+}-\vec{v}^{\,-}}{\Delta t}=\frac{q}{m}\left[\frac{\vec{v}^{\,+}+\vec{v}^{\,-}}{2\gamma^m},\vec{B}\right]. \tag{2.4}$$

Сначала вычисляется

$$\vec{v}\,'=\vec{v}^{\,-}+\vec{v}^{\,-}\times\vec{t},$$

где $\vec{t}=\frac{q\Delta t\vec{B}}{2m\gamma^m}$.

Затем находится $\vec{v}^{\,+}$

$$\vec{v}^{\,+}=\vec{v}^{\,-}+\vec{v}\,'\times\vec{s},$$

где $\vec{s} = \dfrac{2\vec{t}}{1+t^2}$.

После этого, вычисляется $\vec{u}^{m+1/2}$

$$\vec{u}^{m+1/2} = \vec{v}^{+} + \frac{q\Delta t}{2m}\vec{E}$$

Поскольку схема (2.4) выполняет только вращение в магнитном поле и происходит лишь поворот вектора $\vec{v}^{-}$, без изменения его величины, то $\left|\vec{v}^{-}\right|^2 = \left|\vec{v}^{+}\right|^2$

Таким образом, рассмотренная здесь схема Бориса является обратимой по времени и сохраняет полный импульс с точностью до второго порядка.

Этот метод можно использовать и в цилиндрической системе координат, но при движении частицы вблизи оси возникают сложности. Например, для круговой орбиты использование

$\Delta\varphi = \dfrac{v_{\varphi}\Delta t}{r}$ при $r \to 0$ может привести к большим $\Delta\varphi$.

Для решения этой проблемы можно использовать метод с преобразованием цилиндрических координат в декартовые и обратно, однако, такой подход несёт дополнительную вычислительную нагрузку.

В работе [13] также предложен метод, заключающийся в вычислении перемещения частицы в координатах *(x,y)* и последующем переходе к r и φ. Перемещение вдоль z такое же, как и в прямоугольных координатах. Частица в точке (r_1, α_1) (рисунок 2.1.) перемещается с использованием известных в момент времени $t_1 + \Delta t/2$ скоростей v_r и v_α при помощи показанной на рисунке 2.1. оси x^1, которая проходит через *r1* (и параллельна v_{r1}):

$x_2 = r1 + v_{r1}\Delta t$, $y_2 = v_{\alpha 1}\Delta t$, при этом $r2 = \sqrt{(x_2)^2 + (y_2)^2} \ge 0$, $\alpha 2 = \alpha 1 + \theta$.

Затем необходимо выполнить преобразование координат (x^1,y^1) к координатам (x^2,y^2):

$$\begin{pmatrix} v_r \\ v_\alpha \end{pmatrix}_2 = \begin{pmatrix} \sin\theta & \cos\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_r \\ v_\alpha \end{pmatrix}_1$$

где $\sin\theta = \dfrac{y_2}{r2}$, $\cos\theta = \dfrac{x_2}{r2}$.

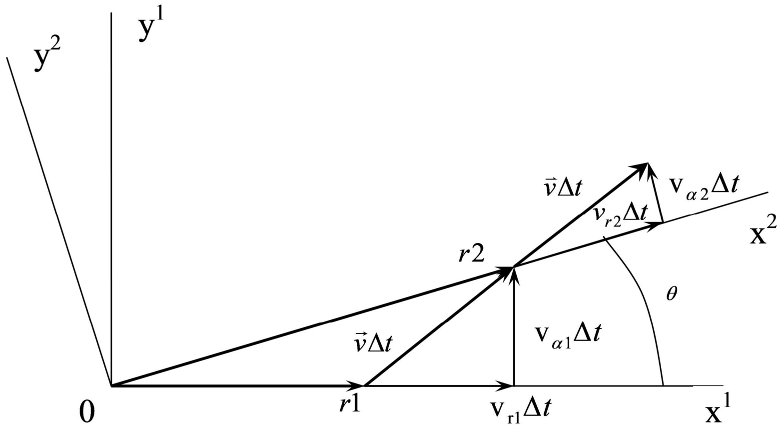


Рис. 2.1 Схема преобразования координат при движении частицы

Если частица попадает на *r2=0*, то положим $\sin\theta = 0$, $\cos\theta = 1$, при этом все импульсы становятся радиальными, как и должно быть для остановившейся на оси частицы.

Таким образом, поскольку координаты частиц в уравнения для определения скорости (2.2) явно не входят и цилиндрическая система координат ортогональна, для решения уравнения (2.1) можно использовать схему (2.3), выполняя преобразование координат на каждом временном шаге и решение уравнения движения

$$\frac{d\vec{r}_j(t)}{dt} = \vec{v}_j(t)$$

будет осуществляться по схеме

$$x = r^m + \Delta t\, v_r^{m+1/2},$$

$$y = \Delta t\, v_\alpha^{m+1/2},$$

$$z^{m+1} = z^m + \Delta t\, v_z^{m+1/2},$$

$$r^{m+1} = \sqrt{x^2 + y^2}$$

Определив углы θ и α

$$\sin\theta = \frac{y}{r^{m+1}}$$

$$\cos\theta = \frac{x}{r^{m+1}}$$

$$\alpha^{m+1} = \alpha^m + \theta$$

Можно получить значение скорости на следующем шаге

$$\left(v_r^{m+1/2}\right)' = v_r^{m+1/2}\cos\theta + v_\alpha^{m+1/2}\sin\theta$$

$$\left(v_\alpha^{m+1/2}\right)' = v_\alpha^{m+1/2}\cos\theta - v_r^{m+1/2}\sin\theta$$

Здесь переход от $\vec{v}^{\,m-1/2}$ к $\vec{v}^{\,m+1/2}$ осуществляется по схеме (2.3).

Адаптивный шаг по времени

Заметим, что величина временного шага Δt обусловлена точностью воспроизведения ларморовского вращения частицы и, следовательно, максимальной величиной магнитного поля в расчётной области. Поскольку разница в величине магнитного поля в разных областях ловушки может составлять до 10^2, то это ведёт к существенному замедлению работы программы, поскольку приходится вычислять плавные траектории частиц в областях малой величины магнитного поля с мелким шагом.

Решением этой проблемы может послужить вычисление движения частиц с различным временным шагом. За некоторый типичный временной шаг Δt_0 можно выбрать промежуток, между которым необходимо решить уравнения Максвелла. Поскольку величина магнитного поля внутри ячейки сетки меняется незначительно, то в каждой ячейке можно определить свой временной шаг для решения уравнений движения $\Delta t_i = C_i \Delta t_0$, где C_i - некоторый коэффициент, обратно пропорциональный максимальной величине магнитного поля в i-ой ячейке. C_i подбирается экспериментальным путём, чтобы воспроизвести траекторию движения частицы с необходимой точностью.

При этом предполагается, что в областях сильного магнитного поля значения электромагнитных полей за Δt_0 существенно не изменяется.

2.3. Решение уравнений Максвелла

Запишем ещё раз уравнения Максвелла в безразмерном виде

$$div\vec{E} = \rho \tag{2.5}$$

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -rot\vec{E} \tag{2.6}$$

$$div\vec{B} = 0 \tag{2.7}$$

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = rot\vec{B} - \vec{j} \tag{2.8}$$

Введём следующие обозначения для цилиндрической системы координат

$$\vec{B} = (B_r, B_\varphi, B_z) = (BR, BP, BZ)$$

$$\vec{E} = (E_r, E_\varphi, E_z) = (ER, EP, EZ)$$

$$\vec{J} = (J_r, J_\varphi, J_z) = (JR, JP, JZ)$$

Заменим $\frac{\partial \vec{a}}{\partial t}$, $div\vec{a} = \frac{1}{r}\frac{\partial (ra_r)}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial a_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial a_z}{\partial z}$,

$rot\,\vec{a} = \left(\left(\frac{1}{r}\frac{\partial a_z}{\partial \varphi} - \frac{\partial a_\varphi}{\partial z} \right), \left(\frac{\partial a_r}{\partial z} - \frac{\partial a_z}{\partial r} \right), \left(\frac{1}{r}\frac{\partial (ra_\varphi)}{\partial r} - \frac{1}{r}\frac{\partial a_r}{\partial \varphi} \right) \right)$ на разностные аналоги $\left(\frac{\partial}{\partial t} \right)_h$, div_h, rot_h и определим компоненты напряжённости электрического и магнитного поля, а также плотности заряда и тока на сдвинутых относительно друг друга сетках, как это предложено в схеме Лэнгдона-Лазински [51] для двумерного случая

$\vec{B}^{m+1/2} = (BR_{l,k+1/2}, BP_{l+1/2,k+1/2}, BZ_{l+1/2,k})^{m+1/2}$

$\vec{E}^{m} = (ER_{l+1/2,k}, EP_{l,k}, EZ_{l,k+1/2})^{m}$

$\vec{J}^{m+1/2} = (JR_{l+1/2,k}, JP_{l,k}, JZ_{l,k+1/2})^{m+1/2}$

$\rho^{m} = \rho^{\mathrm{m}}_{l,k}$

На рисунке представлена схема расположения узлов сетки

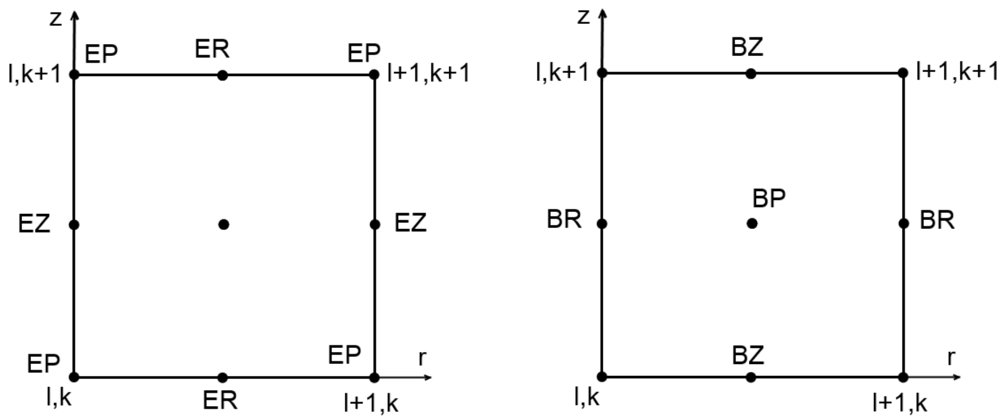


Рис. 2.2 Схема расположения узлов сетки

Получим следующие уравнения сеточных функций

$$div_h \vec{E}^{m} = \rho^{m} \tag{2.9}$$

$$\frac{\vec{B}^{m+1/2} - \vec{B}^{m-1/2}}{\Delta t} = -rot_h \vec{E}^{m} \tag{2.10}$$

$$div_h \vec{B}^{m+1/2} = 0 \tag{2.11}$$

$$\frac{\vec{E}^{m+1} - \vec{E}^{m}}{\Delta t} = rot_h \vec{B}^{m+1/2} - \vec{j}^{m+1/2} \tag{2.12}$$

Приведём эту схему в покомпонентной записи для двумерного случая в координатах *r, z*, на равномерной прямоугольной сетке с шагами h_r, h_z и шагом по времени Δt :

$$\frac{(BR)_{l,k+1/2}^{m+1/2}-(BR)_{l,k+1/2}^{m-1/2}}{\Delta t}=\frac{(EP)_{l,k+1}^{m}-(EP)_{l,k}^{m}}{h_z},$$

$$\frac{(BZ)_{l+1/2,k}^{m+1/2}-(BZ)_{l+1/2,k}^{m-1/2}}{\Delta t}=-\frac{r_{l+1}(EP)_{l+1,k}^{m}-r_l(EP)_{l,k}^{m}}{r_{l+1/2}h_r},$$

$$\frac{(BP)_{l+1/2,k+1/2}^{m+1/2}-(BP)_{l+1/2,k+1/2}^{m-1/2}}{\Delta t}=, \qquad (2.13)$$

$$=-\left[\frac{(ER)_{l+1/2,k+1}^{m}-(ER)_{l+1/2,k}^{m}}{h_z}-\frac{(EZ)_{l+1,k+1/2}^{m}-(EZ)_{l,k+1/2}^{m}}{h_r}\right],$$

$$\frac{(ER)_{l+1/2,k}^{m+1}-(ER)_{l+1/2,k}^{m}}{\Delta t}=$$

$$=-\frac{(BP)_{l+1/2,k+1/2}^{m+1/2}-(BP)_{l+1/2,k-1/2}^{m+1/2}}{h_z}-(JR)_{l+1/2,k}^{m+1/2},$$

$$\frac{(EP)_{l,k}^{m+1}-(EP)_{l,k}^{m}}{\Delta t}=$$

$$=\left[\frac{(BR)_{l,k+1/2}^{m+1/2}-(BR)_{l,k-1/2}^{m+1/2}}{h_z}-\frac{(BZ)_{l+1/2,k}^{m+1/2}-(BZ)_{l-1/2,k}^{m+1/2}}{h_r}\right]--(JP)_{l,k}^{m+1/2}. \qquad (2.14)$$

$$\frac{(EZ)_{l,k+1/2}^{m+1}-(EZ)_{l,k+1/2}^{m}}{\Delta t}=$$

$$=-\frac{r_{l+1/2}(BP)_{l+1/2,k+1/2}^{m+1/2}-r_{l-1/2}(BP)_{l-1/2,k+1/2}^{m+1/2}}{r_l h_r}-(JZ)_{l,k+1/2}^{m+1/2},$$

$$\frac{r_{l+1/2}ER_{l+1/2,k}^{m}-r_{l-1/2}ER_{l-1/2,k}^{m}}{r_l h_r}+\frac{EZ_{l,k+1/2}^{m}-EZ_{l,k-1/2}^{m}}{h_z}=\rho^{m} \qquad (2.15)$$

$$\frac{r_{l+1}BR_{l+1,k+1/2}^{m+1/2} - r_l BR_{l,k+1/2}^{m+1/2}}{r_{l+1/2}h_r} + \frac{BZ_{l+1/2,k+1}^{m+1/2} - BZ_{l+1/2,k}^{m+1/2}}{h_z} = 0 \qquad (2.16)$$

Эта явная схема имеет второй порядок аппроксимации и устойчива при выполнении условия

$$\Delta t < \frac{h_r h_z}{\sqrt{h_r^2 + h_z^2}}$$

Кроме того, схема такова, что если в начальный момент времени $div_h \vec{B} = 0$, то уравнение (2.16) выполнено в любой момент времени.

Поскольку плотность тока и плотность заряда вычисляются независимо от решения уравнений Максвелла, то уравнения (2.14) и (2.15), вообще говоря, не согласованы.

Для того, чтобы корректно находить сеточные значения напряжённости электрических и магнитных полей, необходимо потребовать выполнения разностного аналога уравнения неразрывности

$$\frac{\rho^{m+1} - \rho^m}{\Delta t} + div_h \vec{j}^{\,m+1/2} = 0 \qquad (2.17)$$

тогда уравнение выполнено в любой момент времени, если $div_h \vec{E}^0 = \rho^0$. Если разностный аналог уравнения неразрывности не выполнен, то необходимо скорректировать значение плотности тока для выполнения уравнения (2.15). Этот метод подробно описан в работе [13].

На первом этапе определяется электрическое поле $\vec{E}$ по схеме (2.14) с неуточнённым значением плотности тока и обозначим это промежуточное значение через $\vec{E}^*$. Пусть нужное нам электрическое поле $\vec{E}$ связано с промежуточным значением $\vec{E}^*$ формулой

$$\vec{E} = \vec{E}^* - \nabla_h \delta\Phi \qquad (2.18)$$

где $\delta\Phi$ - поправка к электрическому потенциалу. Используя уравнение (2.9) можно определить $\delta\Phi$, решив уравнение Пуассона

$$\Delta_h \delta\Phi = div_h \vec{E}^* - \rho \tag{2.19}$$

После этого можно получить окончательное значение $\vec{E}$ и приступить к нахождению магнитного поля по схеме (2.13).

Такой метод является более ресурсоёмким, поскольку требует решения эллиптического уравнения (2.19) на каждом шаге по времени, поэтому для вычислений плотности заряда и тока мы будем использовать методы, приводящие к выполнению уравнений (2.9)-(2.17) автоматически. Тогда решение уравнений Максвелла сведётся к решению всего 2-х уравнений (2.13)-(2.14).

2.4. Вычисление плотности тока и плотности заряда

Рассмотрим основные методы вычисления плотности тока и плотности заряда.

Как было рассмотрено в параграфе 1.3., сеточные величины плотности заряда и плотности тока в узле с координатами r_i можно определить по координатам и скоростям отдельных частиц с помощью сеточной функции ядра частицы

$$\rho(\vec{r}_i, t) = \sum_j q_j \overline{R}(\vec{r}_i, \vec{r}_j(t)), \tag{2.20}$$

$$\vec{j}(\vec{r}_i, t) = \sum_j q_j \vec{v}_j(t) \overline{R}(\vec{r}_i, \vec{r}_j(t)). \tag{2.21}$$

Здесь q_j – заряд частицы с номером j; функция $\overline{R}(\vec{r}_i, \vec{r}_j(t))$ (функция ядра) характеризует форму, размер частицы и распределение в ней заряда.

Однако, такой способ не гарантирует выполнения разностного аналога уравнения неразрывности, а, следовательно, нуждается в модификации.

Это, например, явно показано в работе [18].

В работе [15] предложен способ вычисления плотности тока из плотности заряда напрямую, используя уравнение (2.17).

Рассмотрим перемещение частицы в декартовой системе координат в общем трёхмерном случае и введём следующие обозначения:

координаты узлов ($X_l = l * h_x, Y_m = m * h_z, Z_k = k * h_z$), *l,m,k* – порядковые номера узлов.

(x, y, z), $(x_1 = x + \Delta x, y_1 = y + \Delta y, z_1 = z + \Delta z)$ - начальное и конечное положение частицы за время Δt

$S_{l,m,k}(x, y, z) = \overline{R}((X_l, Y_m, Z_k), (x, y, z))$ - сеточная функция ядра частиц, удовлетворяющая естественному условию нормировки

$$h_x * h_y * h_z * \sum_{l,m,k} S_{l,m,k}(x, y, z) = 1$$

Пусть частица при перемещении не покидает ячейку, т.е.

$X_l < x(t) < X_{l+1}, Y_m < y(t) < Y_{m+1}, Z_k < z(t) < Z_{k+1}$

Определим вектор W как конечно-разностный $W = (W^1, W^2, W^3)$

$$W^1_{l,m,k} = -\frac{\Delta t}{h_x}\left(J^1_{l+1/2,m,k} - J^1_{l-1/2,m,k}\right)$$

$$W^2_{l,m,k} = -\frac{\Delta t}{h_y}\left(J^2_{l,m+1/2,k} - J^2_{l,m-1/2,k}\right)$$

$$W^3_{l,m,k} = -\frac{\Delta t}{h_z}\left(J^3_{l+1/2,m,k+1/2} - J^3_{l,m,k-1/2}\right)$$

Тогда уравнение (2.17) можно записать в виде

$$W^1_{l,m,k} + W^1_{l,m,k} + W^1_{l,m,k} = S_{l,m,k}(x, y, z) - S_{l,m,k}(x_1, y_1, z_1) \tag{2.22}$$

В дальнейшем индексы *(l,m,k)* можно опустить, рассматривая один произвольный узел сетки.

Изменение положения частицы определяется восемью функциями:

$$S(x, y, z),$$

$$S(x + \Delta x, y, z),$$

$$S(x, y + \Delta y, z),$$

$$S(x, y, z+\Delta z),$$

$$S(x+\Delta x, y+\Delta y, z),$$

$$S(x+\Delta x, y, z+\Delta z),$$

$$S(x, y+\Delta y, z+\Delta z),$$

$$S(x+\Delta x, y+\Delta y, z+\Delta z)$$

Будем искать вектор W как линейную комбинацию этих функций.

Это предположение основано на том, что изменение плотности при перемещении в трёхмерном пространстве можно разложить на изменение плотности, связанное с тремя перемещениями, параллельными осям координат.

$$\begin{aligned}
&S(x+\Delta x, y+\Delta y, z+\Delta z)-S(x, y, z)= \\
&=S(x+\Delta x, y, z)-S(x, y, z)+ \\
&+S(x+\Delta x, y+\Delta y, z)-S(x+\Delta x, y, z)+ \\
&+S(x+\Delta x, y+\Delta y, z+\Delta z)-S(x+\Delta x, y+\Delta y, z)
\end{aligned}$$

В работе [15] показано, что вектор W может быть однозначно определён, если выполнены следующие условия:

1. Выполнено уравнение неразрывности. Вектор W удовлетворяет уравнению (2.22).

2. В отсутствии движения тока нет. Если перемещения вдоль выбранного направления нет, то соответствующая компонента вектора W равна нулю.

$\Delta x=0 \Rightarrow W^1=0$, $\Delta y=0 \Rightarrow W^2=0$, $\Delta z=0 \Rightarrow W^3=0$

3. Все направления равноправны. Если $S(x, y, z)$ симметрична относительно перестановки (x, y), т.е.

$S(x, y, z)=S(y, x, z)$ и $\Delta x=\Delta y$, тогда $W^1=W^2$. Аналогично для перестановок пар (x, z) и (y, z).

Выпишем вектор W, как это приведено в [15]:

$$W^1=\frac{1}{3}S(x+\Delta x,y+\Delta y,z+\Delta z)-\frac{1}{3}S(x,y+\Delta y,z+\Delta z)+$$
$$+\frac{1}{6}S(x+\Delta x,y,z+\Delta z)-\frac{1}{6}S(x,y,z+\Delta z)+$$
$$+\frac{1}{6}S(x+\Delta x,y+\Delta y,z)-\frac{1}{6}S(x,y+\Delta y,z)+$$
$$+\frac{1}{3}S(x+\Delta x,y,z)-\frac{1}{3}S(x,y,z)$$

$$W^2=\frac{1}{3}S(x+\Delta x,y+\Delta y,z+\Delta z)-\frac{1}{3}S(x+\Delta x,y,z+\Delta z)+$$
$$+\frac{1}{6}S(x,y+\Delta y,z+\Delta z)-\frac{1}{6}S(x,y,z+\Delta z)+$$
$$+\frac{1}{6}S(x+\Delta x,y+\Delta y,z)-\frac{1}{6}S(x+\Delta x,y,z)+$$
$$+\frac{1}{3}S(x,y+\Delta y,z)-\frac{1}{3}S(x,y,z)$$

$$W^3=\frac{1}{3}S(x+\Delta x,y+\Delta y,z+\Delta z)-\frac{1}{3}S(x+\Delta x,y+\Delta y,z)+$$
$$+\frac{1}{6}S(x,y+\Delta y,z+\Delta z)-\frac{1}{6}S(x,y+\Delta y,z)+$$
$$+\frac{1}{6}S(x+\Delta x,y,z+\Delta z)-\frac{1}{6}S(x+\Delta x,y,z)+$$
$$+\frac{1}{3}S(x,y,z+\Delta z)-\frac{1}{3}S(x,y,z)$$

Заметим, что, если последовательно применить уравнение (2.22) ко всем узлам сетки, то в отсутствии внешних токов, частица конечного размера будет давать вклад в плотность тока только в те узлы сетки, которые лежат внутри ячеек с ненулевым изменением плотности заряда.

Это позволяет по вектору W однозначно получить значения плотности тока в расчётной области.

Заметим, что если функция ядра частицы $S_{l,m,k}(x,y,z)=\overline{R}((X_l,Y_m,Z_k),(x,y,z))$ не удовлетворяет условию (3), то решение не может быть найдено однозначно.

Примером такого ядра может служить взвешивание по объёму для цилиндрической системы координат. В узле с номером *(i,l,k)* ядро частицы имеет вид:

$$\overline{\mathrm{R}}((\mathrm{r_i},\varphi_\mathrm{l},z_\mathrm{k}),(\mathrm{r_j},\varphi_\mathrm{j},z_\mathrm{j}))=\begin{cases}\dfrac{1}{V_i}*\dfrac{r_{i+1}^2-r_j^2}{r_{i+1}^2-r_i^2}*\dfrac{h_\varphi-|\varphi_l-\varphi_j|}{h_\varphi}*\dfrac{h_z-|z_k-z_j|}{h_z}, \\ \quad r_i<r_j<r_{i+1},|\varphi_l-\varphi_j|<h_\varphi,|z_k-z_j|<h_z. \\ \dfrac{1}{V_i}*\dfrac{r_{i-1}^2-r_j^2}{r_{i-1}^2-r_i^2}*\dfrac{h_\varphi-|\varphi_l-\varphi_j|}{h_\varphi}*\dfrac{h_z-|z_k-z_j|}{h_z}, \\ \quad r_{i-1}<r_j<r_i,|\varphi_l-\varphi_j|<h_\varphi,|z_k-z_j|<h_z. \\ 0, \quad \text{в остальных случаях}. \end{cases} \tag{2.23}$$

где $V_i = 2\pi r_i h_r h_\varphi h_z$ - объём ячейки. (Случай, когда плотность необходимо рассчитать непосредственно на оси *r=0,* должен рассматриваться отдельно).

В ряде работ предлагается решить эту проблему, вычисляя поток заряда через границы ячейки, например см. [14,17].

В [17] получены формулы вычисления плотности тока для PIC-ядра в трёхмерном случае для декартовой системы координат.

В [14] доказано, что для любого ядра $S^m(\vec{x})=(S_x^m(x))^{1D}(S_y^m(y))^{1D}(S_z^m(z))^{1D}$, $m\geq 1$ полученного с помощью операции свёртки из ядра

$$(S^0(x))^{1D}=\begin{cases}1, \ \text{если} -\dfrac{h}{2}\leq x\leq\dfrac{h}{2}, \\ 0, \text{иначе}\end{cases}$$

следующим образом $(S^m(x))^{1D}=\left((S^0(x))^{*(m+1)}(x)\right)^{1D}$, выражения для плотности тока имеют вид:

$$(J_x)_{l+1/2,m,k}^{n+1/2}=\frac{v_x^{n+1/2}}{\Delta t}\int_{t^n}^{t^{n+1}}S_x^{m-1}(X_{l+1/2}-x(t))S_y^m(Y_m-y(t))S_z^m(Z_k-z(t))dt$$

$$(J_y)_{l,m+1/2,k}^{n+1/2}=\frac{v_y^{n+1/2}}{\Delta t}\int_{t^n}^{t^{n+1}}S_x^{m}(X_{l}-x(t))S_y^{m-1}(Y_{m+1/2}-y(t))S_z^m(Z_k-z(t))dt$$

$$(J_z)^{n+1/2}_{l,m,k+1/2} = \frac{v_z^{n+1/2}}{\Delta t}\int\limits_{t^n}^{t^{n+1}} S_x^m(X_l - x(t))S_y^m(Y_m - y(t))S_z^{m-1}(Z_{k+1/2} - z(t))dt$$

Этот результат можно обобщить на произвольное ядро, пользуясь терминологией сеточных ядер.

Рассчитаем поток заряда через грань $(X_{l+1/2}, Y_{m-1/2}, Z_{k-1/2})$-$(X_{l+1/2}, Y_{m-1/2}, Z_{k+1/2})$-$(X_{l+1/2}, Y_{m+1/2}, Z_{k-1/2})$-$(X_{l+1/2}, Y_{m+1/2}, Z_{k-1/2})$. Он будет соответствовать току в узле *(l+1/2,m,k)*.

$$(J_x)^{n+1/2}_{l+1/2,m,k} =$$

$$= \frac{1}{\Delta t}\int\limits_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{1}{h_y h_z}\int\limits_{Z_{k-1/2}}^{Z_{k+1/2}}\int\limits_{Y_{m-1/2}}^{Y_{m+1/2}} v_x^{n+1/2} R_x(X_{l+1/2} - x(t))R_y(Y_m - y(t))R_z(Z_k - z(t))dydzdt$$

Поскольку

$$\overline{R}(X_l - x(t)) = \frac{1}{h_x}\int\limits_{X_{l-l/2}}^{X_{l+l/2}} R(X_l - x(t))dx$$

то

$$(J_x)^{n+1/2}_{l+1/2,m,k} = \frac{v_x^{n+1/2}}{\Delta t}\int\limits_{t^n}^{t^{n+1}} R_x(X_{l+1/2} - x(t))\overline{R}_y(Y_m - y(t))\overline{R}_z(Z_k - z(t))dt$$

Аналогично,

$$(J_y)^{n+1/2}_{l,m+1/2,k} = \frac{v_y^{n+1/2}}{\Delta t}\int\limits_{t^n}^{t^{n+1}} \overline{R}_x(X_l - x(t))R_y(Y_{m+1/2} - y(t))\overline{R}_z(Z_k - z(t))dt$$

$$(J_z)^{n+1/2}_{l,m,k+1/2} = \frac{v_z^{n+1/2}}{\Delta t}\int\limits_{t^n}^{t^{n+1}} \overline{R}_x(X_l - x(t))\overline{R}_y(Y_m - y(t))R_z(Z_{k+1/2} - z(t))dt$$

Здесь $R_x(X - x(t))R_y(Y - y(t))R_z(Z - z(t))$ - уже произвольное ядро.

Заметим, что в этом случае для вычисления плотности тока необходимо знать как исходную функцию ядра, так и его сеточный аналог. Таким образом, данный подход может вызвать определённые трудности в криволинейных системах координат, где для вычисления сеточного ядра требуется вычисление криволинейных интегралов. Кроме того, зачастую, для вычислений достаточно знать только вид сеточного ядра, без знания самой функции *R*.

В данной работе предлагается подход, лишённый этих недостатков и позволяющий рассчитывать плотность тока, удовлетворяющую уравнению неразрывности, и требующий вычисления только сеточной функции ядра.

Для большей наглядности, будем сразу использовать цилиндрическую систему координат, а в качестве ядра частицы возьмём (2.23)

Рассмотрим функцию ядра частицы как комбинацию трёх одномерных ядер

$$\overline{R}((r,\varphi,z),(r_j(t),\varphi_j(t),z_j(t)))=\frac{1}{V}SR(r,r_j(t))*SP(\varphi,\varphi_j(t))*SZ(z,z_j(t))$$

И запишем уравнение неразрывности в узле *(i,l,k)* для промежутка времени $\left[t^m,t^{m+1}\right]$, считая, что частица при перемещении не покидает окрестность $r_i<r_j<r_{i+1},\varphi_l<\varphi_j<\varphi_{l+1},z_k<z_j<z_{k+1}$ и движется с постоянной скоростью $\left(v_r^{m+1/2},rv_\varphi^{m+1/2},v_z^{m+1/2}\right)$

$$\begin{aligned}
&\frac{\rho_{i,l,k}^{m+1}-\rho_{i,l,k}^{m}}{\Delta t}=\frac{1}{\Delta t}\int_{t^m}^{t^{m+1}}\frac{d}{dt}\rho_{i,l,k}(t)dt=\\
&=\frac{1}{\Delta t}\int_{t^m}^{t^{m+1}}\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{V_i}SR(r_i,r_j(t))*SP(\varphi_l,\varphi_j(t))*SZ(z_k,z_j(t))\right)dt=\\
&=\frac{1}{\Delta tV_i}\int_{t^m}^{t^{m+1}}(-v_r^{m+1/2}\frac{d}{dr}\big(SR(r_i,r_j(t))\big)*SP(\varphi_l,\varphi_j(t))*SZ(z_k,z_j(t)))dt+\\
&+\frac{1}{\Delta tV_i}\int_{t^m}^{t^{m+1}}(-v_\varphi^{m+1/2}\frac{d}{d\varphi}\big(SP(\varphi_l,\varphi_j(t))\big)*SR(r_i,r_j(t))*SZ(z_k,z_j(t)))dt+\\
&+\frac{1}{\Delta tV_i}\int_{t^m}^{t^{m+1}}(-v_z^{m+1/2}\frac{d}{dz}\big(SZ(z_k,z_j(t))\big)*SR(r_i,r_j(t))*SP(\varphi_l,\varphi_j(t)))dt
\end{aligned}\qquad(2.24)$$

Пусть частица переместилась из точки $\left(r^m,\varphi^m,z^m\right)$ в точку $\left(r^{m+1},\varphi^{m+1},z^{m+1}\right)$.

Введём следующие операторы:

$$\Delta f=f^{m+1}-f^m,$$

$$\delta f = \frac{f^{m+1} + f^m}{2}$$

и выполним переход от $\left[t^m, t^{m+1}\right]$ к $\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$.

Траектория частицы тогда описывается следующим образом

$$r(t) = \delta r + \Delta r t,$$

$$\varphi(t) = \delta\varphi + \Delta\varphi t,$$

$$z(t) = \delta z + \Delta z t.$$

Подставив эти выражения в уравнение (2.24), получим

$$\frac{1}{V_i}\int_{-1/2}^{1/2}\left(v_r^{m+1/2}\frac{2r(t)}{r_{i+1}^2 - r_i^2}SP(\varphi_l, \varphi_j(t))SZ(z_k, z_j(t))\right)dt +$$
$$+\frac{1}{V_i}\int_{-1/2}^{1/2}\left(v_\varphi^{m+1/2}\frac{1}{h_\varphi}SR(r_i, r_j(t))SZ(z_k, z_j(t))\right)dt +$$
$$+\frac{1}{V_i}\int_{-1/2}^{1/2}\left(v_z^{m+1/2}\frac{1}{h_z}SP(r_i, r_j(t))SR(z_k, z_j(t))\right)dt =$$
$$= \frac{2 * v_r^{m+1/2}}{V_i * (r_{i+1}^2 - r_i^2)h_\varphi h_z} *$$
$$* \left(\delta r * (\varphi_{l+1} - \delta\varphi)(z_{k+1} - \delta z) + \frac{\Delta r\Delta\varphi(z_{k+1} - \delta z) + \Delta z\Delta\varphi\delta r + \Delta r\Delta z(\varphi_{l+1} - \delta\varphi)}{12}\right) + \quad (2.25)$$
$$\frac{v_\varphi^{m+1/2}}{V_i * (r_{i+1}^2 - r_i^2)h_\varphi h_z} *$$
$$* \left((r_{i+1}^2 - \delta r * \delta r)(z_{k+1} - \delta z) + \frac{\Delta r\Delta r(z_{k+1} - \delta z) + 2 * \Delta r\Delta z\delta r}{12}\right) +$$
$$\frac{v_z^{m+1/2}}{V_i * (r_{i+1}^2 - r_i^2)h_\varphi h_z} *$$
$$* \left((r_{i+1}^2 - \delta r * \delta r)(\varphi_{k+1} - \delta\varphi) + \frac{\Delta r\Delta r(\varphi_{k+1} - \delta\varphi) + 2 * \Delta r\Delta\varphi\delta r}{12}\right)$$

Эти три слагаемых соответствуют трём компонентам плотности тока *(JR,JP,JZ)*

$$\frac{r_{i+1/2}JR^{m+1/2}_{i+1/2,l,k} - r_{i-1/2}JR^{m+1/2}_{i-1/2,l,k}}{r_i h_r} + \frac{JP^{m+1/2}_{i,l+1/2,k} - JP^{m+1/2}_{i,l-1/2,k}}{r_i h_\varphi} + \frac{JZ^{m+1/2}_{i,l,k+1/2} - JZ^{m+1/2}_{i,l,k-1/2}}{h_z} = \\ = -\frac{\rho^{m+1}_{i,l,k} - \rho^{m}_{i,l,k}}{\tau} \qquad (2.26)$$

Пользуясь тем, что вне ячейки тока нет [8], получаем $JR^{m+1/2}_{i-1/2,l,k} = JP^{m+1/2}_{i,l-1/2,k} = JZ^{m+1/2}_{i,l,k-1/2} = 0$, откуда теперь однозначно можно восстановить все три компоненты плотности тока.

Исходя из (2.25) можно получить формулы и для двумерного случая (например, *r-z*):

$$JR^{m+1/2}_{i+1/2,k} = \frac{2 * v_r^{m+1/2} * r_i h_r}{V_i * (r_{i+1}^2 - r_i^2) h_z r_{i+1/2}} * \left(\delta r * (z_{k+1} - \delta z) + \frac{\Delta r \Delta z}{12} \right),$$

$$JP^{m+1/2}_{i,k} = \frac{r_i v_\varphi^{m+1/2}}{V_i * (r_{i+1}^2 - r_i^2) h_z} * \\ * \left((r_{i+1}^2 - \delta r * \delta r)(z_{k+1} - \delta z) + \frac{\Delta r \Delta r (z_{k+1} - \delta z) + 2 * \Delta r \Delta z \delta r}{12} \right), \qquad (2.27)$$

$$JZ^{m+1/2}_{i,k+1/2} = \frac{v_z^{m+1/2}}{V_i * (r_{i+1}^2 - r_i^2)} * \left((r_{i+1}^2 - \delta r * \delta r) + \frac{\Delta r \Delta r}{12} \right),$$

где $V_i = 2\pi r_i h_r h_z$ - объём ячейки.

В случае, если частица перемещается между ячейками, то можно использовать алгоритмы распределения плотности тока между ячейками, описанные в [16, 18].

Заметим, что уравнение (2.24) справедливо для любого ядра конечного размера, поэтому все выкладки, полученные выше, можно обобщить на все типы конечного размера ядер и любую систему координат.

Поскольку в данной работе мы рассматриваем двумерную задачу, то в дальнейшем будем пользоваться формулами (2.27).

2.5. Столкновения частиц

Для моделирования процесса столкновений используется метод Монте-Карло, описанный в главе 1. Для каждой частицы определяется вероятность её столкновения с нейтральными атомами. Кулоновские столкновения не учитываются как маловероятные. Если столкновение произошло, определяется тип столкновения и находятся новые параметры частицы (при необходимости в расчётную область также добавляются частицы, образовавшиеся в результате ионизации).

При определении вероятности столкновения для частицы по формуле (1.37) необходимо вычислить $\sigma_T(\varepsilon)$ – полное сечение столкновения, определить ε – кинетическую энергию частицы, и n_{H_2} –плотность нейтральных частиц.

Вычисление этих параметров для каждой модельной частицы достаточно трудоёмко, поэтому в данной работе используется метод «нулевых» столкновений, подробно описанный в [83].

Суть метода заключается в том, что вводится дополнительный тип столкновений («нулевое» столкновение), в ходе которого скорость и энергия частицы не меняется.

Частота «нулевых» столкновений μ_{null} выбирается таким образом, чтобы полная частота столкновений (включающая и «нулевые столкновения») не зависела от скорости v, (кинетической энергии ε) и положения частицы $\vec{r}$:

$$\mu'_{tot} = \mu_{null} + \mu_{tot} = \max_{\varepsilon}(\nu\sigma_T(\varepsilon)) = \max_{\varepsilon}(\nu\sigma_T(\varepsilon))$$

Здесь μ'_{tot} - полная частота столкновений, включающая «нулевые» столкновения, μ_{tot} - частота реальных столкновений, $\sigma_T(\varepsilon)$ - полное сечение столкновений.

Тогда вероятность столкновения для частицы будет равна

$$P_{null} = 1 - \exp(-\Delta t \mu'_{tot}), \qquad (2.28)$$

Используя формулу (2.28) с помощью первого случайного числа $R \in [0,1]$ определяется произошло столкновение или нет (столкновение происходит, если $P > R$)

Затем, с помощью другого случайного числа $R_2 \in [0,1]$ выбирается тип столкновения

$$\begin{array}{cc}
R_2 \le \mu_1 / \mu'_{tot} & (\textit{тип столкновений } 1) \\
\mu_1 / \mu'_{tot} < R_2 \le (\mu_1 + \mu_2) / \mu'_{tot} & (\textit{тип столкновений } 2) \\
\dots & \dots \\
\sum_{j=1}^{N} \mu_j / \mu'_{tot} < R_2 & (\textit{"нулевое" столкновение})
\end{array}$$

Таким образом при моделировании столкновений N частиц, вычисление $\sigma_T(\varepsilon)$ требуется уже не для каждой частицы, а для NP_{null} частиц. В остальном используемый метод полностью совпадает с описанным в параграфе 1.4.

2.6. Начальные и граничные условия

Начальное значение магнитного поля ловушки определяется положением и мощностью магнитов. В данной работе оно считается известным во всей области, в том числе на границе.

Значение электрического поля определяется с помощью заданной разницы потенциала на катодах ловушки и металлической сверхпроводящей стенкой. Потенциал на стенке ловушки считается нулевым. Таким образом, тангенциальная компонента электрического поля на границе равна 0. Поскольку ловушка имеет цилиндрическую форму, из осевой симметрии следует, что азимутальная компонента электрического и магнитного полей тоже равна нулю.

Нормальная компонента электрического поля согласно схеме определяется в точке, на полшага сдвинутой от границы, поэтому не требует специальных граничных условий.

Частица, вылетевшая за границу, считается покинувшей ловушку и в дальнейшем в расчётах не участвует. Для учёта баланса энергии, значения энергии и потока вылетевших частиц сохраняются.

2.7. Выводы

Описана общая схема расчётов динамки низкотемпературной плазмы в магнитной ловушке с помощью комбинации метода частиц в ячейках и метода Монте-Карло. Для описания движения частиц в цилиндрической геометрии использована схема Бориса с адаптивным под магнитное поле временным шагом. Решение уравнений Максвелла осуществляется на основе разностного подхода Ийе [52], с помощью схемы Лэнгдона-Лазински [51], адаптированной под цилиндрическую геометрию.

Рассмотрены основные методы вычисления плотности тока и плотности заряда. Для того, чтобы корректно вычислять значения электрического поля разработан алгоритм вычисления плотности тока и плотности заряда, удовлетворяющим разностным аналогам уравнений неразрывности и закону Гаусса. Это позволяют существенно сократить объём вычислений. Показано, что разработанный алгоритм применим для произвольной формы ядра частицы, в том числе и не симметричного ядра.

Для описания процессов ионизации газа использован метод Монте-Карло с "нулевыми" столкновениями.

Глава 3. Алгоритмы параллельных вычислений для метода частиц в ячейках

3.1. Обзор алгоритмов параллельных вычислений для метода частиц в ячейках

Необходимость параллельной реализации используемых алгоритмов диктуется потребностью проводить расчеты с большим количеством модельных частиц и на больших сетках.

Для того, чтобы учесть большие градиенты магнитного поля в ловушке требуется выбор достаточно маленького шага пространственной сетки *h*.

Таким образом, при моделировании ловушки-мишени требуется сетка порядка $10^4 \times 10^3$ узлов. Кроме того, для учёта столкновений частиц необходима достаточна большая выборка, поэтому в расчётах предполагается использование порядка 10^{10} модельных частиц.

Существует несколько вариантов параллельной реализации метода частиц в ячейках.

Так как метод частиц в ячейках является эйлерово-лагранжевым методом, то основными направлениями распараллеливания являются декомпозиция области и декомпозиция по частицам.

Поскольку траектории модельных частиц вычисляются независимо друг от друга, проще всего распределить все частицы поровну между процессорами, независимо от их координаты. В этом случае каждый процессор будет решать систему уравнений Максвелла во всей области. Поскольку время расчёта значений электромагнитных полей существенно меньше времени расчёта траекторий частиц (в каждой ячейке сетки находится до 1000 частиц каждого сорта), такой вариант распараллеливания кажется очень удачным: даже для сетки 1000x1000 необходимо обменяться на каждом шаге только 3×10^6 значениями плотности тока, что составляет около 30 Мб. Эффективность такого распараллеливания достаточна высока. Однако, при увеличении числа используемых процессоров и при увеличении размеров сетки, коллективные операции занимают существенно больше времени.

Второй вариант: провести декомпозицию расчётной области, например по одному направлению. При этом с каждой подобластью можно связать группу процессоров и разделить частицы в подобласти между всеми процессорами группы. Каждая группа решает уравнения Максвелла только в своей подобласти. В этом случае происходит обмен граничными значениями полей между группами, также группы должны обмениваться частицами, перелетевшими в соответствующую подобласть. Внутри группы происходит обмен значениями плотности тока (как и в первом варианте распараллеливания). Такой вариант распараллеливания применяется, например, при решении трёхмерных задач (в трёхмерном случае первый вариант оказывается неэффективным, поскольку пересылать приходится, например, для сетки 1000x1000x1000 уже 30 000 Мб). При этом существуют некоторые ограничения, связанные с числом групп: во-первых, оно не превосходит числа узлов по направлению, в котором ведётся декомпозиция, во-вторых, при большом числе групп число частиц в каждой подобласти может существенно различаться, делая нагрузку на процессоры неравномерной. Одним из способов решить эту проблему является динамическое разбиение области на различные части, размер которых определяется исходя из количества частиц, попадающих в подобласть, а также времени решения уравнения Максвелла в данной подобласти.

В работе [84,85] подробно рассматриваются преимущества и недостатки описанных выше подходов, а также предлагается вариант учитывающий время работы каждого процессора на предыдущем шаге. Однако, предложенный подход чувствителен к особенностям архитектуры компьютера и для эффективной работы требует достаточно сложного алгоритма распределения работы между процессорами.

В работе [86] для динамической балансировки вычислительной нагрузки предлагается ещё один подход – выполняется декомпозиция области на фиксированные по размеру участки, а число процессоров в каждой такой подобласти определяется динамически исходя из общего числа модельных частиц, приходящихся на один процессор. Такой подход позволяет добиться более равномерной загрузки процессоров и обеспечить высокую масштабируемость.

3.2. Параллельный алгоритм

В настоящей работе также предлагается использовать фиксированную декомпозицию области вдоль направления Z ловушки. Каждой подобласти выделяется группа процессоров и частицы подобласти равномерно распределяются между процессорами этой группы независимо от координаты. На каждом временном шаге внутри подобласти независимо вычисляются траектории частиц, определяется плотность тока на сетке. Внутри группы все сеточные значения суммируются. Граничные элементы сетки, а также частицы, покинувшие подобласть, пересылаются между группами.

Ниже приведена иллюстрация (Рис.3.1.) декомпозиции области на 4 части, с каждой частью связана группа из 4-х процессоров. Частицы каждой подобласти распределены между четырьмя процессорами независимо от координаты. Различные символы, обозначающие частицы: круг, квадрат, треугольник, ромб означают принадлежность частиц к разным группам процессоров, цвет фигуры выделяет принадлежность к разным процессорам в группе. Всего используется 16 процессоров.

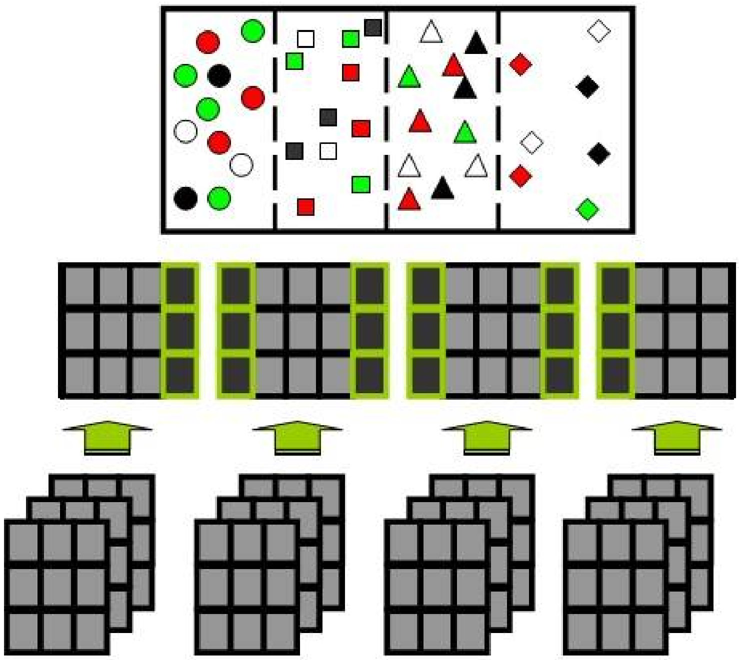


Рис. 3.1 Масштабируемость алгоритма параллельных вычислений

Заметим, что если при расчёте движения модельных частиц используются различные шаги по времени, зависящие от величины магнитного поля в ячейке, то для определения оптимального числа процессоров в группе данных только о числе частиц в области недостаточно. Действительно, при обычном способе декомпозиции области возможен вариант, когда в областях сильного магнитного поля необходимо будет выполнить расчёт траекторий частиц более подробно, чем в остальных подобластях. Для решения этой проблемы предлагается использовать информацию о геометрии магнитного поля. Для каждой ячейки вводится поправочный коэффициент, характеризующий величину шага по времени для частиц данной ячейки. Чем больше магнитное поле в ячейке - тем меньше поправочный коэффициент. Таким образом, шаг по времени для частицы определяется ячейкой, в которой частица находится в данный момент.

Исходя из этих рассуждений, для того, чтобы вычислительная нагрузка на процессоры была сбалансирована, число процессоров N_{pg} в группе оценивается следующим образом:

$$N_{pg} = \left(\sum_{j \in local\ area} \frac{N_j}{t_j} \Bigg/ \sum_{j \in all\ area} \frac{N_j}{t_j} \right) N_P$$

Здесь N_j - число частиц в ячейке j, t_j - поправочный коэффициент, N_P - общее число процессоров,

all area – вся расчётная область, local area– текущая подобласть, для которой определяется число используемых процессоров.

Поскольку магнитное поле в ловушке определяется в основном постоянными магнитами, то поправочные коэффициенты определяются только один раз до начала расчётов и дальнейшее распределение частиц по процессорам осуществляется только исходя из количества частиц в ячейках расчётной области.

Для того, чтобы оценить эффективность разработанного алгоритма, проводится исследование масштабируемости на различных вычислительных системах.

3.3. Масштабируемость

Поскольку расчёт достаточно большого числа частиц на одном процессоре не возможен из-за ограничений по оперативной памяти, а задачи с небольшим количеством частиц не представляют собой интереса из-за недостаточной точности вычислений, будем рассматривать ускорение относительно 128 и 1024 процессоров.

Параметры расчётов:

Число частиц $2{,}5*10^9$, размер сетки 512x1024.

Расчёты проводились с использованием суперкомпьютеров – «Ломоносов» (Московский государственный университет, процессоры Intel Xeon X5570 частотой 2932 Mhz), NKS-30T (Сибирский суперкомпьютерный центр СО РАН, процессоры Intel Xeon E5540 частотой 2530 Mhz), кластера Новосибирского государственного университета (процессоры Intel Xeon X5670 частотой 2932 Mhz).

Результаты вычислительных экспериментов приведены в таблице 3.1.

Таблица 3.1. Масштабируемость алгоритма на различных архитектурах

Количество используемых процессорных ядер	Время расчёта одного шага, с. / ускорение относительно 128 ядер		
	Ломоносов МГУ	Кластер НГУ	НКС-30Т
128	5,60 / 1,00	9,24 / 1,00	12,80 / 1,00
256	2,96 / 1,89	4,92 / 1,88	6,70 / 1,91
512	1,51 / 3,70	2,46 / 3,76	3,39 / 3,78
1024	0,76 / 7,37	-	-

Как видно из таблицы, несмотря на то, что масштабируемость алгоритма на суперкомпьютере «Ломоносов» чуть хуже, время расчёта одного шага существенно меньше из-за более быстрой работы с памятью. В целом, полученные результаты позволяют говорить о достижении высокой масштабируемости параллельного алгоритма на различных суперкомпьютерах в пределах одной тысячи процессорных ядер.

Также на суперкомпьютере «Ломоносов» была проверена масштабируемость параллельного алгоритма относительно 1024 процессорных ядер.

Параметры расчётов:

Число частиц $5*10^9$, размер сетки 1024x1024.

Результаты расчётов представлены на рисунке 3.2.

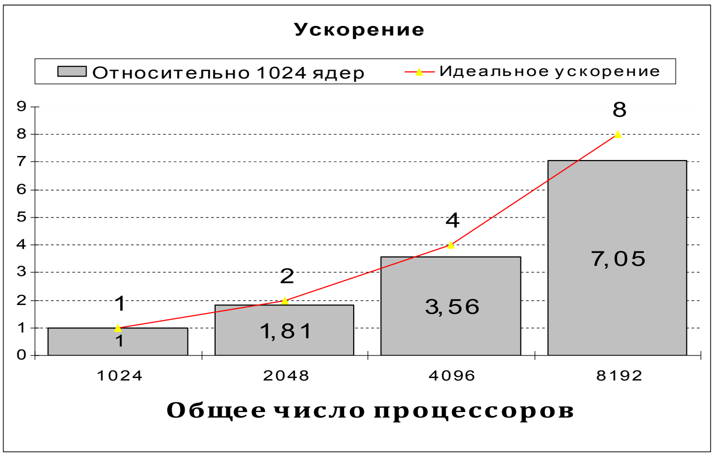


Рис. 3.2 Масштабируемость алгоритма параллельных вычислений

Как видно из рисунка, параллельный алгоритм также показывает высокую степень масштабируемости и до 8192 процессорных ядер.

Таким образом, предложенный параллельный алгоритм является достаточно хорошо масштабируемым до нескольких тысяч вычислительных ядер. Это позволяет проводить расчёты с миллиардами модельных частиц за разумное время на современных суперЭВМ.

3.4. Выводы

Выполнен обзор основных способов распараллеливания метода частиц в ячейках, рассмотрены их достоинства и недостатки с точки зрения балансировки вычислительной нагрузки. Для адаптивного шага по времени предложен авторский способ статической балансировки, учитывающий величину внешнего магнитного поля.

Выполнена программная реализация алгоритма параллельных вычислений. С помощью вычислительных экспериментов показана масштабируемость до нескольких тысяч процессорных ядер, а также высокая эффективность работы алгоритма на различных вычислительных системах.

Глава 4. Результаты вычислительных экспериментов

4.1. Тестирование численных методов

Прежде всего, необходимо провести верификацию программы.

Для этого рассмотрим динамику заряженных частиц в простейшей плазменной ловушке - пробкотроне.

Пробкотрон представляет собой осесимметричную линейную плазменную ловушку. В ловушке создаётся продольное магнитное поле, причём на концах ловушки магнитное поле больше, чем в центре. Заряженные частицы плазмы, двигаясь вдоль магнитных силовых линий, отражаются от областей более сильного поля — пробок. Схематичное устройство пробкотрона представлено на рисунке 4.1..

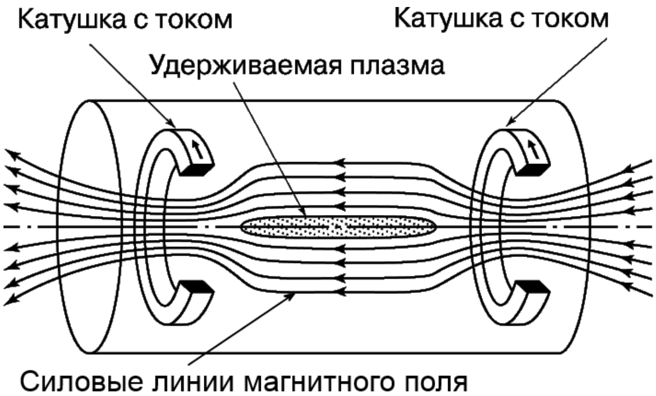


Рис. 4.1 Схема пробкотрона. Внутри показаны силовые линии магнитного поля.

Частица удерживается в пробкотроне, если выполнено следующее соотношение [87]:

$$\frac{v_{\perp}^2(\vec{r})}{v^2(\vec{r})} > \frac{B(\vec{r})}{B_{\max}}, \qquad (4.1)$$

где $v(\vec{r})$ — модуль вектора скорости частицы,

$v_{\perp}(\vec{r})$ – поперечная (по отношению к магнитному полю) составляющая скорости, B – напряженность магнитного поля,

$B_{\max}$ – максимум магнитного поля в пробке.

Обозначая через θ_0 угол между вектором скорости частицы и магнитным полем B_0 на некотором однородном участке в середине пробкотрона, можно придать условию (4.1) следующую форму:

$$\sin\theta_0 = \frac{v_\perp}{v} > \sqrt{\frac{B_0}{B_{\max}}} \qquad (4.2)$$

Неравенство (4.2) показывает, что в пространстве скоростей область, из которой теряются частицы, представляет собой конус с осью, параллельной магнитному полю (рисунок 4.2.). Этот конус называют «конусом потерь».

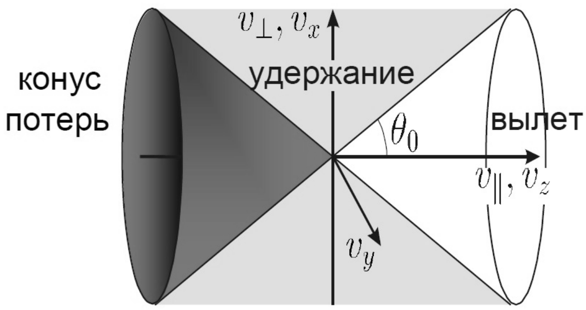


Рис. 4.2 Удержание частиц в пробкотроне

С помощью разработанной программы в магнитном поле пробкотрона (рисунок 4.3.) были рассчитаны траектории заряженных частиц и численно определён угол θ_0 вылета частицы из ловушки для частиц с различными начальными данными.

Задача рассматривается в следующей постановке.

Расчётная область представляет собой цилиндр длиной Lz=100 мм, и диаметром D=38 мм. В области задано магнитное поле B, конфигурация которого представлена на рисунке 4.3. Азимутальный компонент магнитного поля Bp =0, Электрическое поле E=0.

Движение частиц в пробкотроне описывается уравнением

$$\frac{d\vec{r}_j(t)}{dt} = \vec{v}_j(t), \tag{4.3}$$

$$\frac{d\vec{p}_j(t)}{dt} = q_j \frac{1}{c}\left[\vec{v}_j(t) \times \vec{B}_j\right], \tag{4.4}$$

$$\vec{B}_j = \int R(\vec{r}, \vec{r}_j)\vec{B}(\vec{r})d\vec{r} \tag{4.5}$$

Здесь $\vec{B}_j$ - магнитное поле, действующее на частицу с номером j с функцией ядра R.

Для проверки условия вылета частиц из пробкотрона проводятся расчёты траекторий частиц, стартующих из центральной части расчётной области с заданными скоростями.

Частица, имеющая скорость $\vec{v}_0$, соответствующую энергии U=200 эВ, направленную под углом θ_0 оси Z стартует из центра пробкотрона (точка с координатами (1,5;5)). На рисунках 4.4 и 4.5. представлены траектории частиц стартующих под различными углами θ_0 к оси Z.

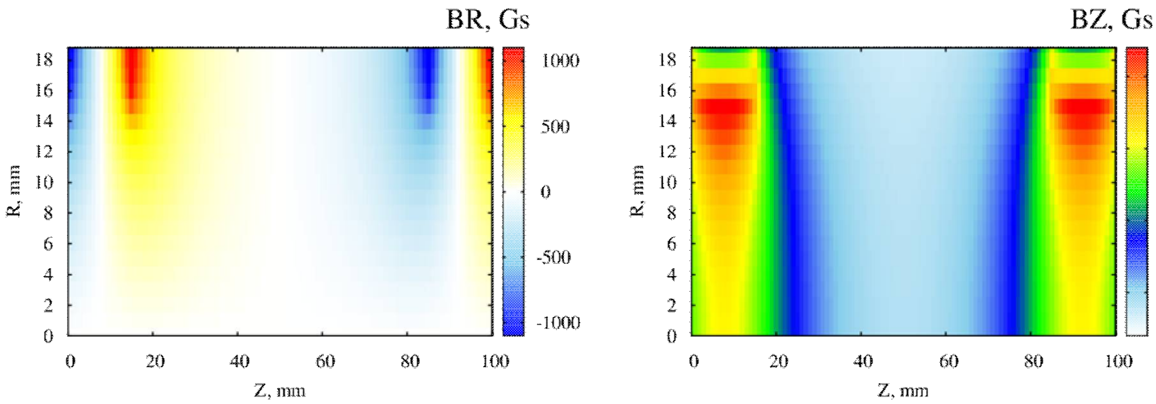


Рис. 4.3 Магнитное поле пробкотрона

Для частицы с энергией U=200 эВ в заданном магнитном поле расчётный угол конуса потерь $\theta_{\text{числ}}$ составил 482 мрад. Угол конуса потерь θ_0, определённый аналитически с помощью формулы (4.2) составил $\theta_{\text{аналит}}$ =481,4 мрад. Таким образом, ошибка составляет порядка 0,06 %.

Как видно из рисунков 4.4-4.5., частица, стартовавшая под углом менее $\theta_{числ}$, покидает ловушку. Если угол между начальной скоростью частицы и осью Z более $\theta_{числ}$, то частица быстро осциллирует между пробками и медленно дрейфует в азимутальном направлении.

θ_0=482 мрад.

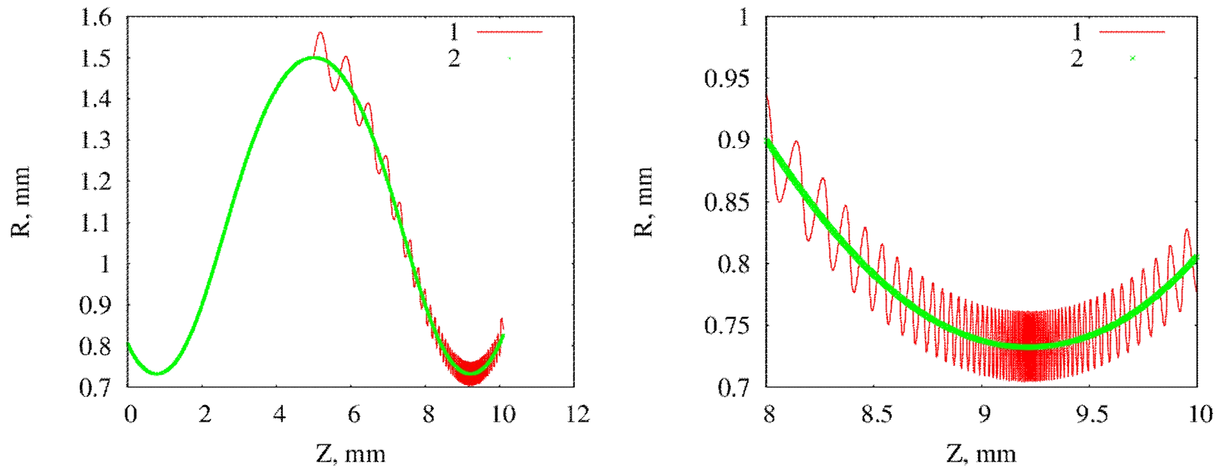
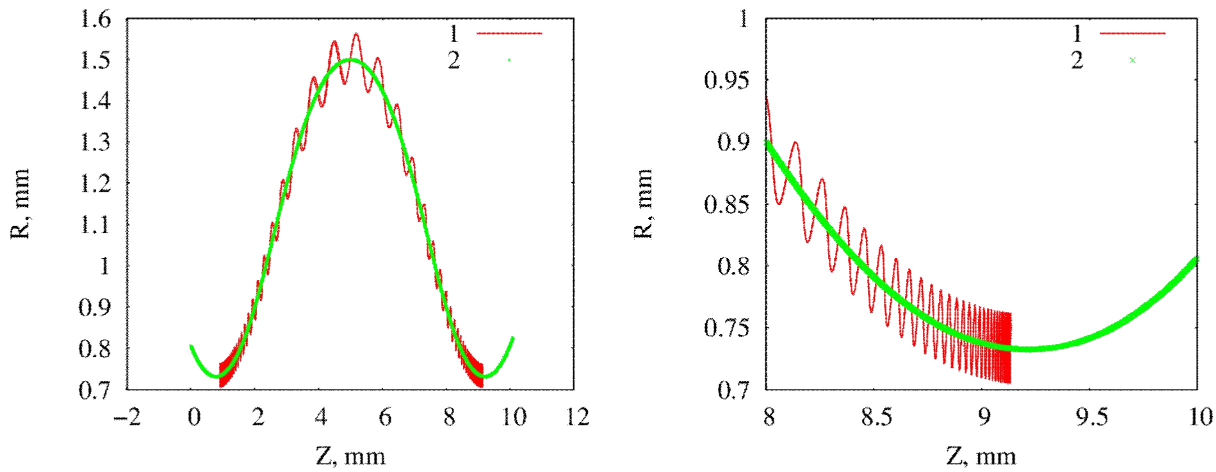
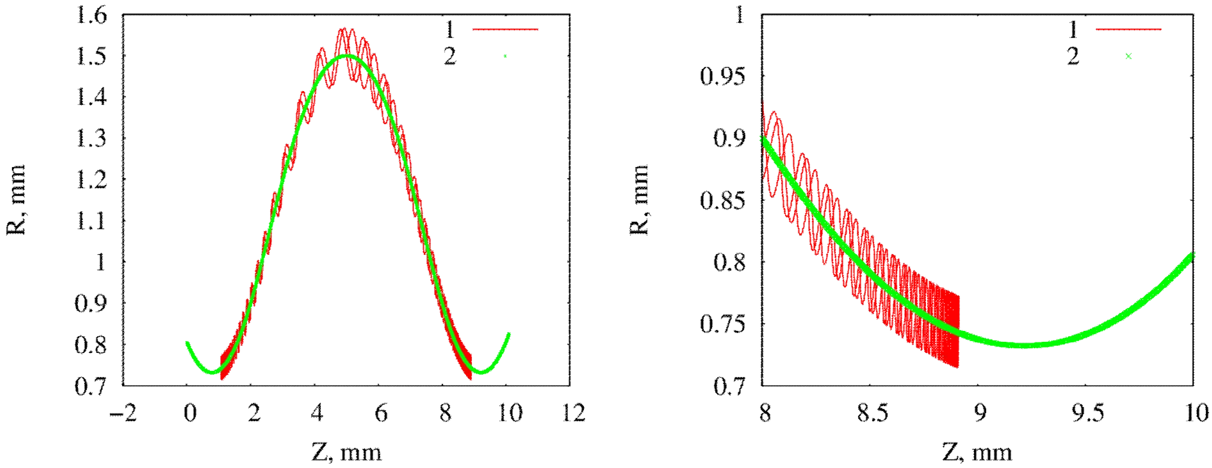


Рис. 4.4 Вылет частицы из пробкотрона для угла θ_0=482 мрад.. 1 – траектория частиц (красная линия), 2 – силовая линия магнитного поля (зелёная линия).

θ_0=483 мрад.



θ_0=490 мрад.



θ_0=550 мрад.

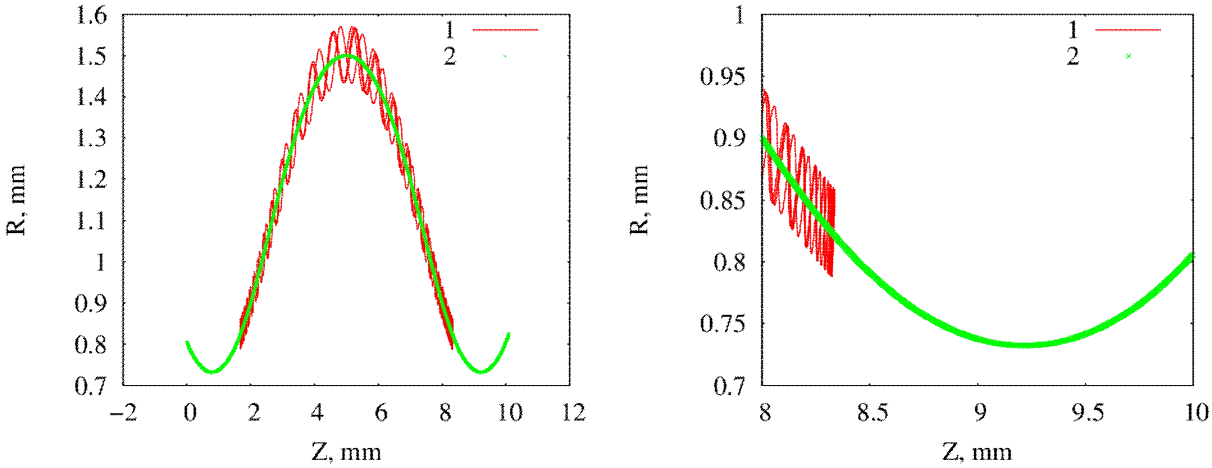


Рис. 4.5 Запирание частицы в пробкотроне для углов θ_0=483 мрад, θ_0=490 мрад, θ_0=550 мрад. 1 – траектория частиц (красная линия), 2 – силовая линия магнитного поля (зелёная линия).

При θ_0, близком к углу конуса потерь, происходит отражение от магнитной пробки ловушки, причём частица возвращается по той же траектории. При дальнейшем увеличении угла θ_0 частица не долетает до магнитной пробки и возвращается уже по другой траектории.

Таким образом, тестовые расчёты динамики частиц в магнитном поле пробкотрона показали корректность численного определения потерь плазмы в области магнитных пробок.

4.2. Моделирование плазменной ловушки-мишени

Перейдём к рассмотрению пламенной ловушки-мишени.

Ловушка состоит из центрального катодного блока и симметричных относительно него цилиндрических секций и торцевых крышек. В дальнейшем, при использовании условия симметрии, будем принимать за начало координат Z = 0 положение центрального катодного блока. Если условие симметрии не используется, начало координат будет совпадать с положением торцевой крышки.

Поскольку распределение плазмы в ловушке неизвестно, определение параметров плазменной ловушки-мишени предлагается проводить в два этапа.

На первом этапе проводится моделирование зажигания плазмы в ловушке - ионизация газа катодными электронами. Для этого рассчитана динамика катодных электронов и определено их распределение в ловушке. Рассчитанная область распространения катодных электронов позволяет говорить об эффективности ионизации газа и получении плазмы необходимой плотности. На основе этих данных определяются параметры получившихся в результате столкновения ионов и электронов плазмы.

Поскольку на этом этапе плотность плазмы в ловушке ещё мала, в расчётах используется небольшое число частиц, что позволяет моделировать процесс ионизации на продолжительном временном интервале.

На втором этапе вычислений проводится сравнения параметров плазмы в области инверсной магнитной пробки с экспериментальными данными, полученными на прототипе ловушке-мишени [6] и определяются потоки плазмы на мультипольные стенки ловушки, а также потери частиц через инверсные магнитные пробки в выходные отверстия.

Таким образом, задача рассматривается в следующей постановке:

Расчётная область имеет форму цилиндра длиной Lz=1355 мм и диаметром D=199,2 мм. Изначально ловушка заполнена газом H_2, плотность $n_{газа}=10^{13}$ см$^{-3}$. На границе ловушки установлена сверхпроводящая стенка.

В центральной части расчётной области на границе располагается катодный блок, из которого в ловушку радиально инжектируются электроны, обеспечивающие ионизацию газа

Движение заряженных частиц описывается уравнением Больцмана для функций распределения ионов и электронов $f_\alpha(t,\vec{r},\vec{p})$

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \vec{v}\frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{r}} + q_\alpha(\vec{E} + \frac{1}{c}[\vec{v},\vec{\mathrm{B}}])\frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{p}} = St\{f_\alpha\}\,, \tag{4.6}$$

и системой уравнений Максвелла с самосогласованными электромагнитными полями:

$$rot\vec{B} = \frac{4\pi}{c}\vec{j} + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c}\sum_\alpha q_\alpha \int f_\alpha \vec{v} d\vec{v} + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}\,, \tag{4.7}$$

$$rot\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}\,, \tag{4.8}$$

$$div\vec{E} = 4\pi\rho = 4\pi\sum_\alpha q_\alpha \int f_\alpha d\vec{v}\,, \tag{4.9}$$

$$div\vec{B} = 0\,. \tag{4.10}$$

Здесь α – сорт частиц (ионы и электроны),

$St\{f_\alpha\}$ – функция, описывающая следующие физические процессы:

1) упругое столкновение (рассеяние) на атомах водорода

$H_2 + e^- \rightarrow H_2 + e^-$,

2) диссоциативная ионизация молекул водорода катодными электронами

$H_2 + e^- \rightarrow H^+ + H + 2e^-$,

3) ионизация молекул водорода катодными электронами

$H_2 + e^- \rightarrow H_2^+ + 2e^-$,

4) ионизация ионами H_2^+ молекулы водорода

$H_2 + H_2^+ \rightarrow H_3^+ + H$

Расчёты проводятся до момента времени, пока столкновения с газом наиболее вероятны, а столкновения заряженных частиц между собой несущественны. Это соответствует низкой плотности плазмы (до $n_{плазмы}=10^{11}$ см$^{-3}$ при плотности газа $n_{газа}=10^{13}$ см$^{-3}$) и времени порядка 10^{-4} с.

В расчётах используются сечения столкновений, рассчитанные в работах [88-90].

Параметры частиц после ионизации или столкновения определяются согласно алгоритму, описанному в параграфе 1.4.

Начальные условия для полей

Конфигурация магнитного поля $\vec{B}$ в начальный момент считается заданной. Магнитное поле вдоль стенок ловушки, а также в области инверсной магнитной пробки представлено на рисунках 4.6.-4.7.

Поскольку ловушка имеет цилиндрическую форму, из осевой симметрии следует, что азимутальная компонента электрического и магнитного полей тоже равна нулю.

E= 0, Bp =0.

Значение электрического поля во всей области, за исключением области около катода считается нулевым. В области между катодом и сверхпроводящей металлической стенкой электрическое поля определяется как

$\frac{\partial r E_r}{r \partial r} = dU$, где dU=300 В - заданное значение потенциала на катоде. Потенциал на стенке ловушки считается нулевым.

Начальные условия для частиц

Изначально в ловушке находится только газ. Далее в ловушку с катода влетают электроны.

Ток электронов с катодов составляет I=150 А. Энергия частиц составляет K=150 эВ.

Граничные условия для полей

Магнитное поле на границе области считается заданным и не меняется со временем.

Тангенциальная и нормальная компонента электрического поля на границе равны нулю, поэтому везде на границе электрическое поле считается нулевым

$\vec{E}\Big|_{\Gamma} = 0$, где Г – граница ловушки.

Граничные условия для частиц

Частица, вылетевшая за границу, считается покинувшей ловушку и в дальнейшем в расчётах не участвует. Для учёта баланса энергии, значения энергии и потока вылетевших частиц сохраняются.

Новые частицы появляются только в результате ионизации и не прилетают извне. Взаимодействие частиц со стенкой ловушки не учитывается.

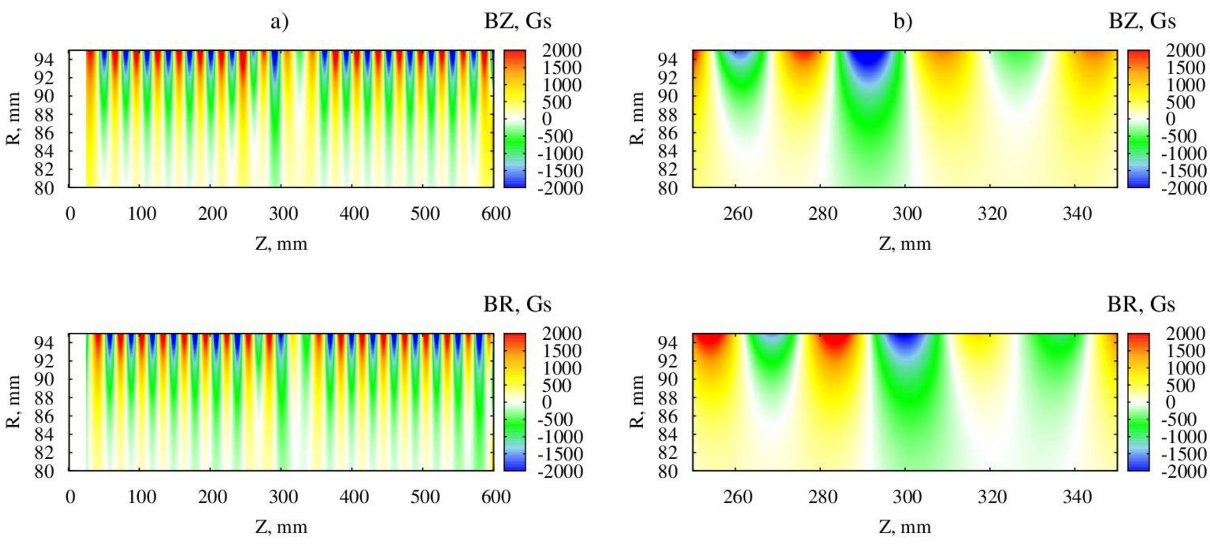


Рис. 4.6 Конфигурация магнитного поля ловушки a) вдоль всей стенки, b) в области центральной секции стенки. Z =0 соответствует положению катодного блока.

Для адекватного воспроизведения магнитного поля ловушки требуется шаг пространственной сетки *h* не менее 0,1 мм. Это связано с тем, что изменение магнитного поля в пространстве у магнитных пробок довольно существенно.

Таким образом, при размере области 1355 мм x 99,6 мм, была выбрана сетка 13550x996 узлов.

В расчётах использовалось до $5 \cdot 10^9$ модельных частиц для статистически корректного воспроизведения процесса ионизации.

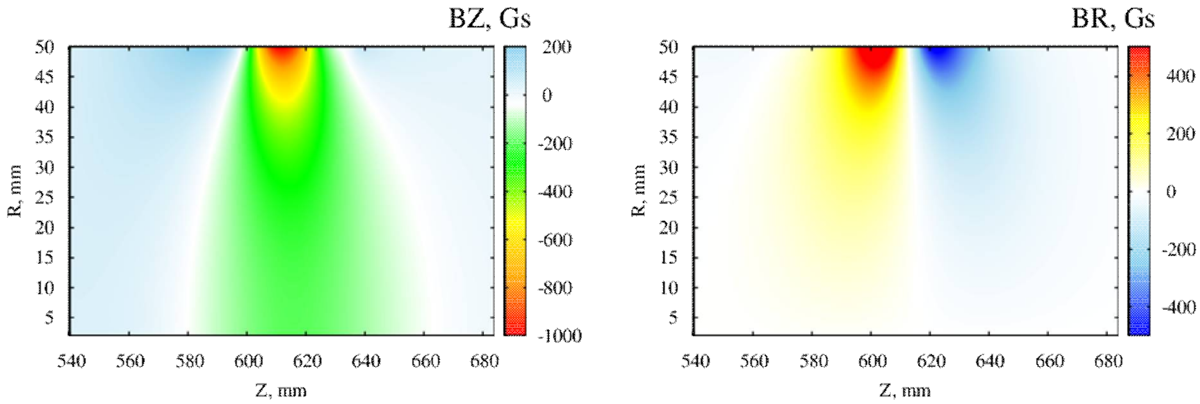


Рис. 4.7 Конфигурация магнитного поля ловушки в торцевой области ловушки, формирующая инверсную магнитную пробку. Z =0 соответствует положению катодного блока.

4.2.1. Динамика катодных электронов

Для поддержания удерживаемой в ловушке плазмы необходима её генерация внутри ловушки. Для создаваемой ловушки выбрана ионизация газа электронами с энергией K=150 эВ. В катодном блоке, размещенном в центре ловушки, устанавливается ряд катодов, которые располагаются равномерно по окружности вокруг пучка. Эмитируемые электроны инжектируются радиально в плазму, удерживаемую в ловушке.

Важным требованием к выбранному способу ионизации плазмы является распространение катодных электронов вдоль всей длины ловушки, что необходимо для создания плазмы с требуемой протяженностью и степенью однородности.

С помощью вычислительных экспериментов была рассчитана динамка плотности катодных электронов во всей ловушке (рисунок 4.8.). Частицы начинают радиальное движение от катода к центру ловушки. Ток электронов с катодов составляет I=150 А. Энергия частиц составляет K=150 эВ.

Из рисунка 4.8. видно, что электроны распространяются вплоть до инверсных пробок. Образующиеся при этом в центре ловушки волны плотности связаны с геометрией магнитного поля, поскольку при спиралевидном движении происходит наложение траекторий частиц друг на друга. При этом большая часть электронов захватывается и удерживается в мультипольном магнитном поле у стенок ловушки.

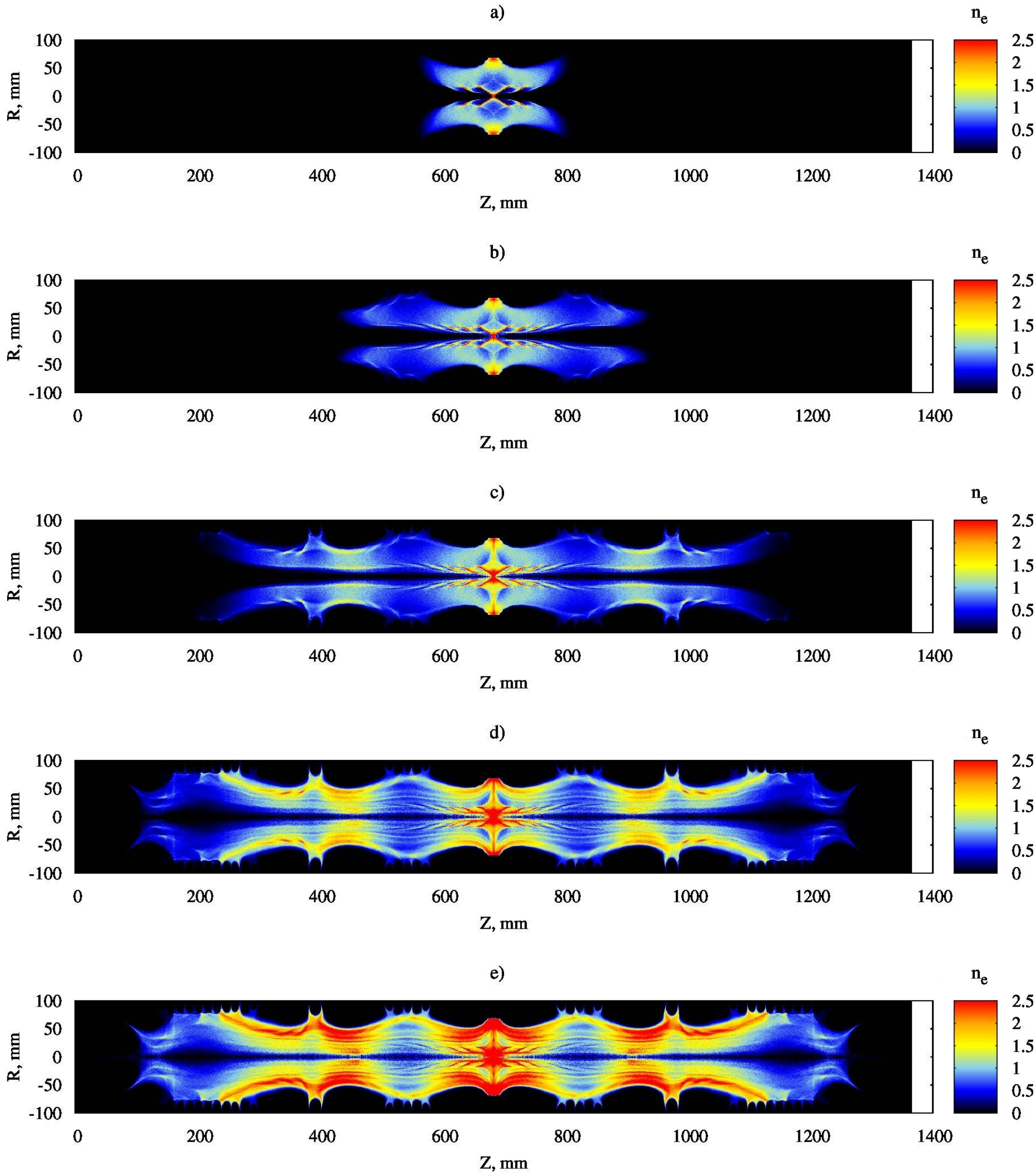


Рис. 4.8 Плотность катодных электронов (плотность нормирована на $n_e = 10^9$ см$^{-3}$) в различные моменты времени (a) 2×10^{-8} с. (b) 4×10^{-8} с. (c) 8×10^{-8} с. (d) 16×10^{-8} с. (e) 24×10^{-8}. Z = 0 соответствует положению левой торцевой крышки камеры.

Поскольку в областях повышенной плотности катодных электронов происходит наиболее активная ионизация газа, основная часть плазмы в первые моменты времени сосредоточена в центре ловушки и у её стенок. Таким образом, для изучения динамики плазмы во внутренней области ловушки необходимо рассматривать движение ионов.

На рисунке 4.9. приведена динамика плотности ионов H+.

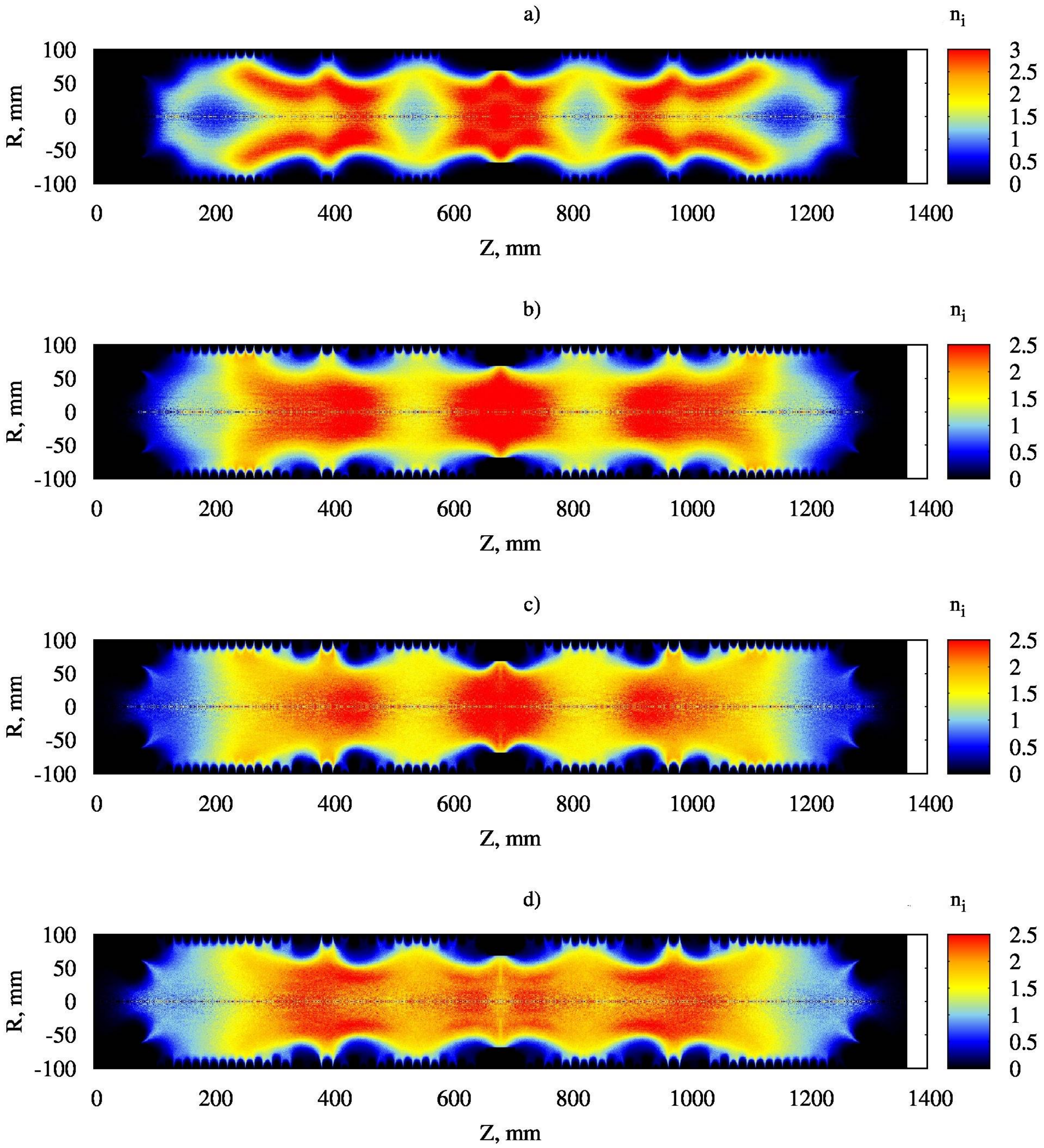


Рис. 4.9 Плотность ионов H+ (плотность нормирована на $n_i = 10^{10}$ см$^{-3}$) в различные моменты времени (a) 2×10^{-6} с. (b) 8×10^{-6}с. (c) 16×10^{-6}с. (d) 24×10^{-6} с. Z = 0 соответствует положению левой торцевой крышки камеры.

Из рисунка видно, что ионы распространяются до самой оси ловушки, обеспечивая высокую плотность плазмы практически во всей ловушки.

При этом достигнутая в расчётах плотность плазмы составила до 2×10^{11}см$^{-3}$. Именно такой плотности предполагается достичь на создаваемой ловушке.

4.2.2. Динамика плазмы в области магнитных пробок

Для оценки эффективности удержания плазмы в ловушке рассмотрим плотность всех ионных компонент у торцов ловушки.

На рисунке 4.10. показана плотность ионов H+, H_2+, H_3+ в области магнитной пробки. Как видно из рисунка, ионы с большей массой имеют больший разброс по радиусу у торцевого отверстия, однако величина потерь всех типов частиц невелика.

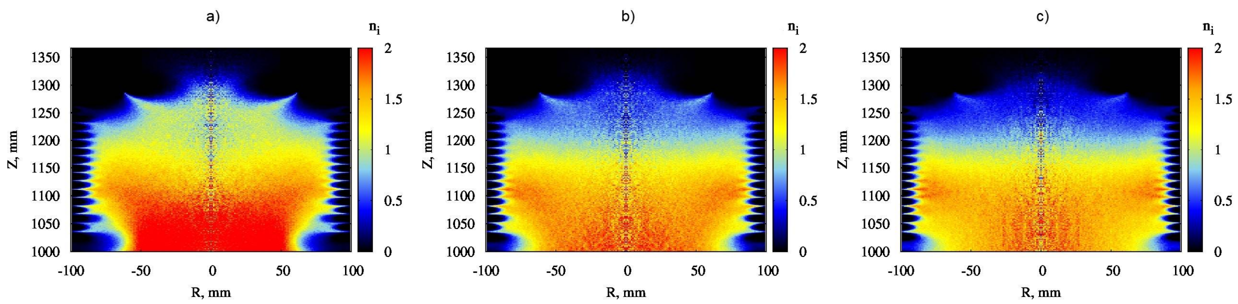


Рис. 4.10 Плотность ионов H+, H_2+, H_3+ (плотность нормирована на $n_i = 10^{10}$ см$^{-3}$) в момент времени 2×10^{-5} с. Z = 0 соответствует положению левой торцевой крышки камеры.

В плазме преобладают ионы H+, средняя ионная температура 0,5 эВ.

Радиальное распределение плотности ионов в области магнитной пробки (Z=1296 мм) приведено на рисунке 4.11. Как видно из рисунка, уже при радиусе R=25 мм концентрация ионов различных типов выравнивается и стремительно падает. Это означает, что наружу проникают только частицы с повышенной поперечной энергией. Аналогичный результат был получен экспериментально на торцевом сегменте ловушки в работе [11].

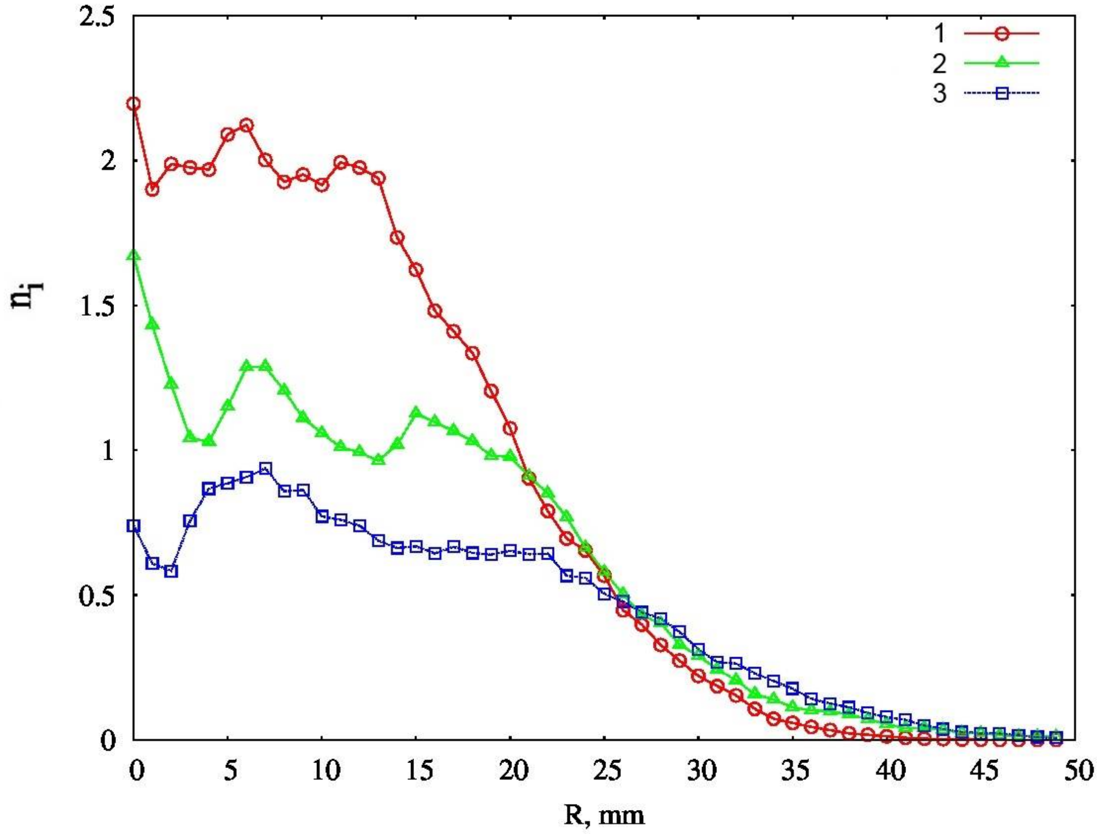


Рис. 4.11 Плотность ионов различных типов в точке Z = 1296 мм ((плотность нормирована на $n_i = 10^9$ см$^{-3}$). Время 2×10^{-5} с. 1 - H+, 2 - H_2+, 3 - H_3+ .

Z = 0 соответствует положению левой торцевой крышки камеры.

Также было рассмотрено прохождение плазмы через магнитную пробку. Результаты расчётов плотности плазмы на оси в области инверсии магнитного поля (*1200<Z<1360* мм) представлены на рисунке 4.12. Наблюдается двухступенчатое падение плотности всех ионных компонент плазмы вдоль оси - перед магнитной пробкой и непосредственно в области инверсии магнитного поля, что позволяет сделать вывод о высокой степени удержания плазмы в внутри ловушки. Этот результат также полностью соответствует наблюдениям в работе [11].

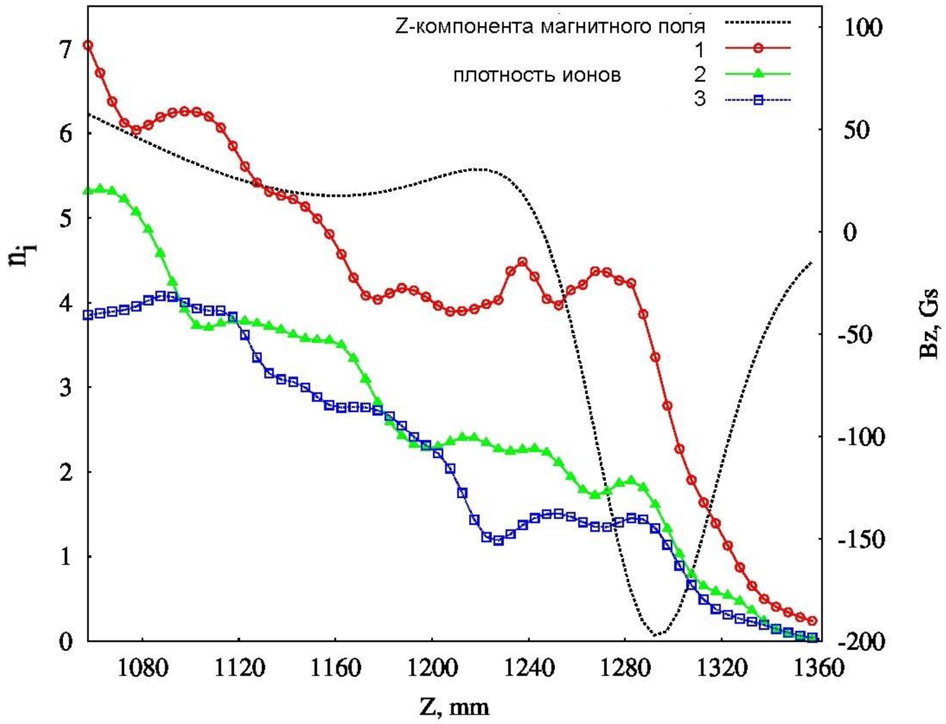


Рис. 4.12 Плотность ионов различных типов в области инверсии магнитного поля (плотность нормирована на $n_i = 10^9$ см$^{-3}$). Время 2×10^{-5} с. 1 - H+, 2 - H_2+, 3 - H_3+ . Z = 0 соответствует положению левой торцевой крышки.

На рисунке 4.13. приводится сравнение данных общей плотности ионов в области инверсной магнитной пробки, полученных в результате вычислительного эксперимента с данными лабораторных исследований[11].

Для сопоставления данных, данные плотности, полученные в [11] были нормированы на плотность в точке Z = 1296 мм, а также сопоставлены с величиной магнитного поля. Как видно из рисунка 4.13., полученные данные плотности практически совпадают с результатами лабораторного эксперимента.

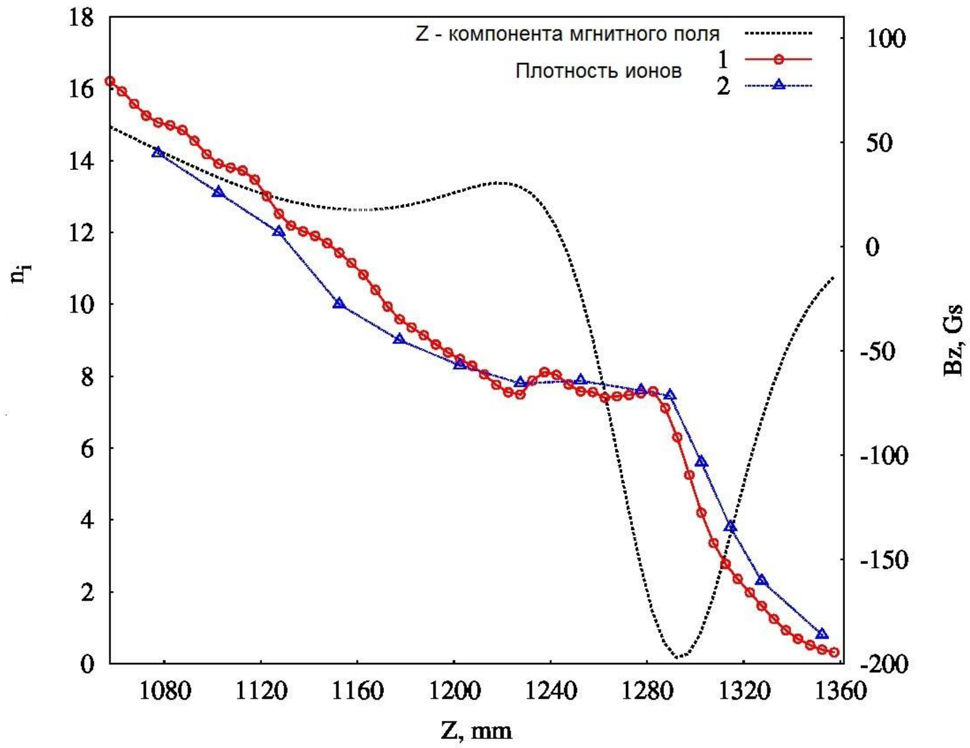


Рис. 4.13 Плотность ионов плазмы (плотность нормирована на $n_i = 10^9$ см$^{-3}$) в области инверсии магнитного поля. Время 2×10^{-5} с. 1 – данные вычислительного эксперимента, 2 – данные лабораторного эксперимента. Z = 0 соответствует положению левой торцевой крышки.

На рисунке 4.14. показан общий ток ионов через торцевую часть ловушки в зависимости от времени для различного числа модельных частиц.

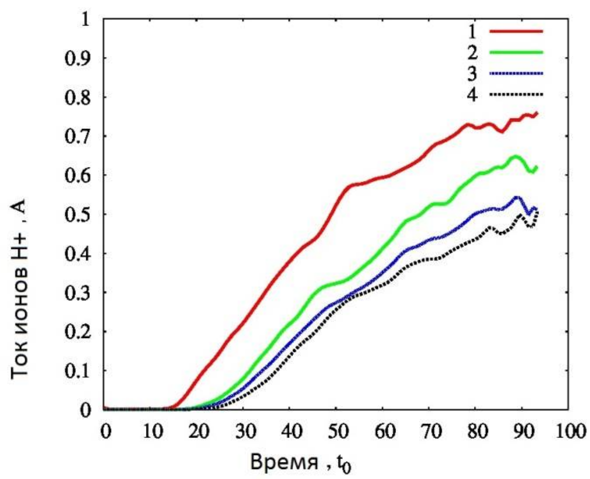


Рис. 4.14 Ток ионов через торцевую часть ловушки в зависимости от времени для различного числа модельных частиц.

$t_0 = 2*10^{-7}$ с,. 1 – 10^8 частиц, 2 - $2*10^8$ частиц, 3 - $4*10^8$ частиц. 4 - $8*10^8$ частиц

Рисунок 4.14. показывает, что при увеличении числа модельных частиц до $4*10^9$ имеет место сходимость тока плазмы к значению $I_t \approx 0.5$ А, что позволяет говорить о достаточно хорошем удержании плазмы.

На рисунке 4.15. показано изменение плотности плазмы на торце ловушки (Z=1300 мм) с течением времени. Из рисунка видно, что основной поток приходится на центральную часть вблизи оси. Аналогичные результаты были получены экспериментально в работе [11].

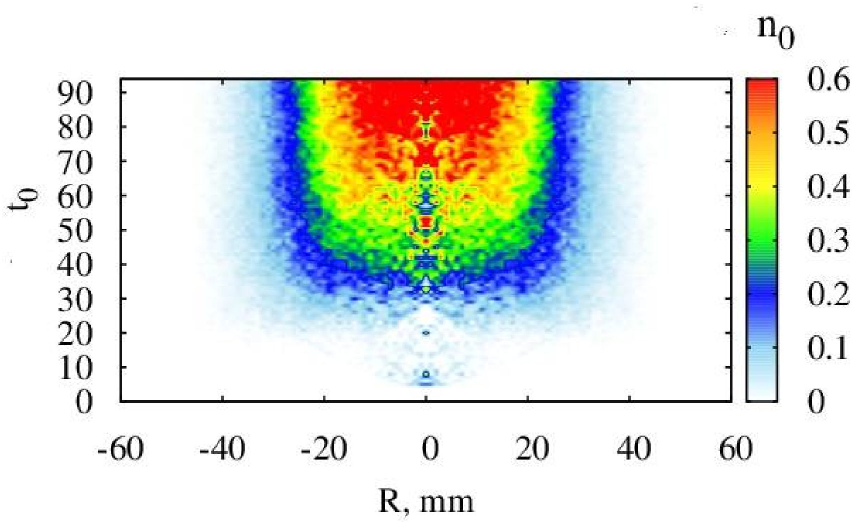


Рис. 4.15 Изменение плотности плазмы со временем в торцевой области ловушки. Здесь $t_0 = 2*10^{-7}$ с, плотность нормирована на $n_0 = 10^{11}$ см$^{-3}$.

4.2.3. Динамика плотности плазмы у стенок ловушки

Рассмотрим динамику плотности плазмы у границ ловушки и распределение тока вдоль стенок.

Для определения распределения тока на стенки ловушки, используется следующий подход. Ловушка, имеющая форму цилиндра, разбивается на множество колец шириной L=50 мм, покрывающих всю область ловушки, и рассматривается ток, проходящий через поверхность этих колец.

На рисунке 4.16. показано распределение тока вдоль стенки ловушки.

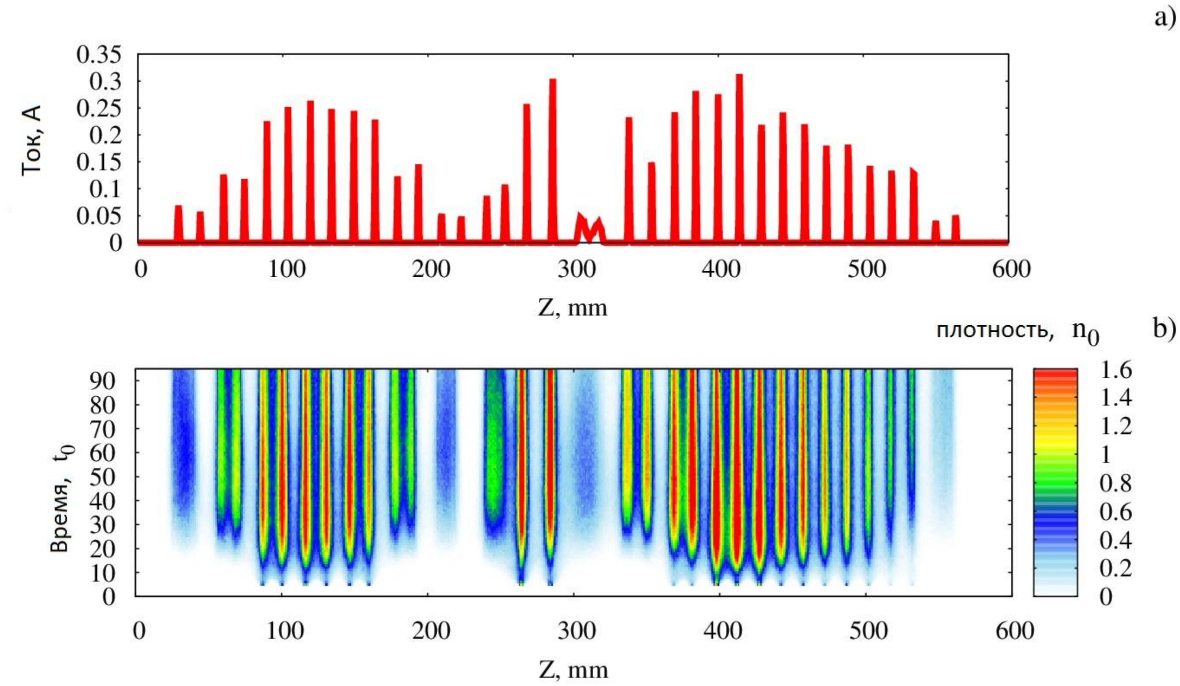


Рис. 4.16 a) Распределение тока на стенки ловушки, b) изменение плотности плазмы со временем в приграничной области. Здесь $t_0 = 2*10^{-7}$ с. , плотность нормирована на $n_0 = 10^{11}$ см$^{-3}$. Z = 0 соответствует положению катодного блока.

Как видно из рисунка, основной поток плазмы определяется магнитным полем ловушки, при этом распределение тока между участками с одинаковой величиной магнитного поля неравномерное. Максимальное значение тока I_m=0.3 А. Кроме того, можно видеть прямую корреляцию между плотностью плазмы у границы и током на стенки.

Заметим, что при расчётной температуре плазмы T≈ 5 эВ, охлаждаемые медные стенки камеры вполне способны справиться с такой мощностью (не будет ни локальных перегревов, ни сильного нагрева камеры в целом).

4.2.4. Определение параметров мишенной плазмы

Для эффективной нейтрализации ионного пучка в мишени необходимо иметь в ловушке достаточно однородную плазму необходимой плотности.

При этом, плотность плазмы в области пролёта пучка (до 5 см от оси ловушки) может отличаться в несколько раз, но интеграл плотности по осевой координате должен быть соответствовать требуемому значению.

Также важно, чтобы в области пролёта пучка радиальная плотность частиц была достаточно высокой. Ионы плазмы должны быть однородно распределены по радиусу для максимально эффективного использования пучка. Для проверки этого условия была рассчитана плотность ионов H+ вдоль всей длины ловушки на разном удалении от центра (рисунок 4.17.)

Из рисунка видно, что интегральные значения плотности по оси при удалении от оси существенно не изменяются. Таким образом, может быть эффективно нейтрализован весь пучок отрицательных ионов, проходящий через ловушку. Кроме того, важным моментом является резкое падение плотности частиц у торцов ловушки - это соответствует высокой степени удержания частиц.

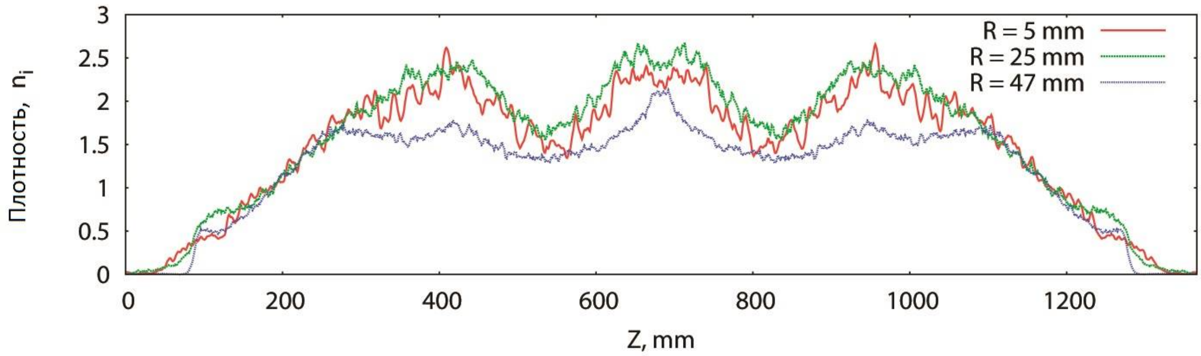


Рис. 4.17 Плотность ионов H+ в области пролёта пучка для различных значений радиуса (плотность нормирована на $n_i = 10^{10}$ см$^{-3}$). Время 2×10^{-5} с. Z = 0 соответствует положению левой торцевой крышки.

4.3. Выводы

Проведено тестирование разработанного программного комплекса на примере расчёта динамики плазмы в простейшей плазменной ловушке пробкотроне. Проведено сравнение условия потери частицы из ловушки с аналитическим значением, ошибка составила менее 0,06 %.

Проведено моделирование зажигания плазмы в ловушке-мишени ИЯФ СО РАН, определена динамика плотности катодных электронов и область их распространения в ловушке.

На основе полученных данных рассчитана динамика образующейся плазмы. Результаты вычислительных экспериментов показали, что образующаяся плазма имеет достаточную степень однородности и заполняет практически всю длину ловушки. При этом, поток плазмы в торцевые отверстия достаточно мал, потери плазмы на стенках ловушки несущественны.

Получены оценки плотности ионных компонент плазмы, определён состав получившейся плазмы и её температура. Также проведено сравнение плотности ионов в области магнитной пробки с данными, полученными экспериментально на торцевом сегменте ловушки. Качественно воспроизведено ступенчатое падение плотности плазмы в районе инверсии магнитного поля.

Таким образом, на основе построенной математической модели ещё до проведения лабораторных экспериментов удалось сделать важные оценки характеристик плазменной ловушки.

Заключение

Основные результаты диссертационной работы заключаются в следующем

Разработана численная модель плазменной ловушки-мишени с мультипольными магнитными стенками и инверсными магнитными пробками. Модель построена с применением комбинации метода частиц в ячейках и метода Монте-Карло и описывает динамику плазмы в магнитном поле сложной геометрии в цилиндрической вакуумной камере.

Разработан численный метод расчёта плотности тока, удовлетворяющего разностному аналогу уравнения неразрывности для произвольной формы ядра частицы. Это позволяет согласовать вычисление плотности тока и плотности заряда и отказаться от решения ресурсоёмкого уравнения Пуассона для корректировки значения электрического поля.

Разработан алгоритм параллельных вычислений, масштабируемый до нескольких тысяч процессорных ядер и позволяющий проводить расчёты траекторий 10^{10} частиц, что обеспечивает высокую точность результатов. Предложен вариант балансировки вычислительной нагрузки для адаптивного шага по времени.

На основе разработанных численных методов создан комплекс программ для моделирования динамики плазмы в магнитной ловушке-мишени.

Созданный комплекс программ позволил рассчитать процесс ионизации газа в ловушке, получить распределение катодных электронов и определить области наиболее активной ионизации. На основе этих данных была рассчитана динамика плазмы, определены потоки плазмы в торцевые отверстия ловушки. Результаты расчётов показали, что образующаяся плазма имеет достаточную степень однородности и заполняет практически всю длину ловушки.

С помощью вычислительных экспериментов показано, что магнитная система со слабым продольным полем и инверсными пробками в торцевых отверстиях в магнитном поле позволяет добиться достаточно малого потока плазмы из ловушки. Расчётные данные плотности всех компонент плазмы в области магнитной пробки согласуются с данными экспериментов.

Перспективы дальнейшей разработки темы заключаются в уточнении используемой модели, например, создание гибридной МГД-кинетической модели, а также применении созданного комплекса программ для численного моделирования других магнитных ловушек.

Созданные алгоритмы и комплекс программ могут найти широкое применение при проектировании новых магнитных ловушек, а также при исследовании фундаментальных свойств плазмы в сильных магнитных полях, в работах, направленных на изучение эффективности удержания плазмы в магнитном поле.

Литература

1. Dougar-Jabon, V. D. Plasma Confinement in an Electron Cyclotron Double Cusp Trap. / V. D. Dougar-Jabon, F. A. Vivas Mejia, A. M. Umnov // Physica Scripta. – 2000. – Vol. 62. – № 2-3. – P. 183-185.
2. Dougar-Jabon, V. D. Simulation of plasma confinement in an electron cyclotron resonance zero-B trap / V. D. Dougar-Jabon, A. Umnov, M. T. Murillo-Acevedo // Iteckne. – 2015. – Vol. 12. – P. 111-118.
3. Gomberoff, K. Simulations of plasma confinement in an antihydrogen trap / K. Gomberoff, J. Fajans, A. Friedman, D. Grote, J. L. Vay, J. S. Wurtele // Physics of Plasmas. – 2007. – Vol. 14. – P. 102-111.
4. Сигов, Ю. С. Вычислительный эксперимент: мост между прошлым и будущим физики плазмы. Избранные труды / Ю. С. Сигов; составители Г. И. Змиевская, В. Д. Левченко. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. – 288 с.
5. Faure, J. A laser–plasma accelerator producing monoenergetic electron beams / J. Faure, Y. Glinec, A. Pukhov (и др.) // Nature. – 2004. – Vol. 431. – Iss. 7008. – P. 541-544.
6. Dimov, G. I. Conversion of a beam of negative hydrogen ions to atomic hydrogen in a plasma target at energies between 0.5 and 1 MeV / G. I. Dimov, G. V. Roslyakov // Nuclear Fusion. – 1975. – Vol. 15. – P. 551-553.
7. Dimov, G. I. A plasma trap as a target for neutralization of the negative ion beam / G. I. Dimov, A. V. Ivanov // Transactions of the Fusion Science and Technology. – 2013. – Vol. 63. – P. 111-114.
8. Kulygin, V. M. Plasma Neutralizer for ITER Injector / V. M. Kulygin, A. A. Skovoroda, V. A. Zhil'tsov // Plasma Devices and Operations. – 1998. – Vol. 6. – P. 135-147.
9. Kulygin, V. Status of plasma neutralizer development [Электронный ресурс] / V. Kulygin, I. Moskalenko, A. Spitsyn, A. Skovoroda, S. Yanchenkov, V. Zhiltsov //

Proceedings 4th IAEA Technical Meeting. 2005. – Padova (Italy). – 2005. – P. 1-12. – Режим доступа:
http://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/P1256-cd/papers/kulygin1.pdf
10. Takeiri, Y. High-power and long-pulse injection with negative-ion-based neutral beam injectors in the Large Helical Device / Y. Takeiri, O. Kaneko, K. Tsumori, Y. Oka, K. Ikeda, M. Osakabe, K. Nagaoka, E. Asano, T. Kondo, M. Sato, M. Shibuya // Nuclear Fusion. – 2006. – Vol. 46. – Iss. 6. – P. 199-210.
11. Dimov, G. I. Experiments to study the confinement of a target plasma in a magnetic trap with inverse plugs and circular multipole walls / G. I. Dimov, I. S. Emelev // Technical Physics. – 2014. – Vol. 59. –Iss. 2. – P. 181-189.
12. Larson, D. J. Correction factors for PIC accumulation on radial grids / D. J. Larson, D. W. Hewett, A. B. Langdon // Computer Physics Communications. – 1995. – Vol. 90. – P. 260-266.
13. Boris, J. P. Relativistic plasma simulation – optimization of a hybrid code / J. P. Boris // Proceedings of the Conference on numerical Simulation of Plasmas (4th). November 2-3, 1970. – Washington (USA). – 1970. – P. 3-67.
14. Barthelmé, R. Conservation de la charge dans les codes PIC / R. Barthelmé // Comptes rendus. Mathematique. – 2005. – Vol. 11. – № 341. – P. 689-694.
15. Esirkepov, T. Z. Exact charge conservation scheme for Particle-in-Cell simulation with an arbitrary form-factor / T. Z. Esirkepov // Computer Physics Communications. – 2001. – Vol. 135. – Iss. 2. – P. 144-153.
16. Umeda, T. A new charge conservation method in electromagnetic particle-in-cell simulations / T. Umeda, Y. Omura, T. Tominaga, H. Matsumoto // Computer Physics Communications. – 2003. – Vol. 156. – Iss. 1. – P. 73-85.
17. Villasenor, J. Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solver / J. Villasenor , O. Buneman // Computer Physics Communications. – 1992. – Vol. 69. – Iss. 2-3. – P. 306-316.
18. Вшивков, В. А. Алгоритмы решения задачи взаимодействия лазерного импульса с плазмой / В. А. Вшивков, К. В. Вшивков, Г. И. Дудникова // Вычислительные технологии. – 2001. – Т. 6. – Вып. 2. – С. 47-63.

19. Dickinson, E. COMSOL Multiphysics (R) : Finite element software for electrochemical analysis. A mini-review / E. Dickinson, H. Ekström, E. Fontes // Electrochemistry Communications. – 2014. – Vol. 40. – P. 71-74.
20. Kolobov, V. Advances in electron kinetics and theory of gas discharges [Электронный ресурс] / V. Kolobov // Physics of Plasmas. – 2013. – Vol. 20. – № 101610. – P. 1-14. – режим доступа: https://www.researchgate.net/publication/260701248_Advances_in_electron_kinetics_and_theory_of_gas_discharges
21. Feng, Y. Recent Improvements in the EMC3-Eirene Code / Y. Feng, H. Frerichs, M. Kobayashi [и др.] // Contributions to Plasma Physics. – 2014. – Vol. 54. – Iss. 4-6. – P. 426-431.
22. Cao, B. Comparison of gas puff imaging data in NSTX with degas 2 simulations / B. Cao, D. Stotler, S. Zweben, [и др.] // Fusion Science and Technology. – 2013. – Vol. 64. – № 1. – P. 29-38.
23. Tarakanov, V. P. User's manual for code KARAT / V. P. Tarakanov // V.A. Springfield: Berkley Research. – 1992.
24. Perepelkina, A. Yu. CFHall Code Validation with 3D3V Weibel Instability Simulation [Электронный ресурс] / A. Yu. Perepelkina, I. A. Goryachev, V. D. Levchenko // Journal of Physics: Conference Series. – 2013. – Vol. 441. – Iss. 1. – P. 012014. – Режим доступа: http://iopscience.iop.org/1742-6596/441/1/012014/pdf/1742-6596_441_1_012014.pdf
25. Nieter, C. VORPAL: a versatile plasma simulation code / C. Nieter, J. R. Cary // Journal of Computational Physics. – 2004. – Vol. 196. – Iss. 2. – P. 448-473.
26. Lapenta, G. DEMOCRITUS: An adaptive particle in cell (PIC) code for object-plasma interactions / G. Lapenta // Journal of Computational Physics. – 2011. – Vol. 230. – Iss 12. – P. 4679–4695.
27. Goplen, B. User-configurable MAGIC code for electromagnetic PIC calculation / B. Goplen, L. Lideking, D. Smithe, G. Warren // Computer Physics Communications. – 1995. – Vol. 87. –Iss. 1-2. – P. 54-86.

28. Deng, S. Developing a Multi-Timescale PIC Code for Plasma Accelerators / S. Deng, X. Wang, T. Katsouleas, W. Mori // Proceedings of the 2005 Particle Accelerator Conference. May, 18-20, 2005. – Knoxville, Tennessee (USA). – 2005. – P. 2324-2326.

29. Davidson, A. Implementation of a hybrid particle code with a PIC description in r–z and a gridless description in ϕ into OSIRIS / A. Davidson, A. Tableman, W. An [и др.] // Journal of Computational Physics. – 2015. – Vol. 281. – P. 1063-1077/

30. Huang, C. QUICKPIC: A highly efficient particle-in-cell code for modeling wakefield acceleration in plasmas / C. Huang, V. K. Decyk, C. Ren [и др.] // Journal of Computational Physics. – 2006. – Vol. 217. – Iss. 2. – P. 658–679.

31. Берендеев, Е. А. Моделирование на суперЭВМ динамики плазменных электронов в ловушке с инверсными магнитными пробками и мультипольными магнитными стенками / Е. А. Берендеев, А. В. Иванов, Г. Г. Лазарева, А. В. Снытников // Вычислительные методы и программирование. – 2013. – Т. 14. – С. 149-154.

32. Берендеев, Е. А. Реализация эффективных параллельных вычислений при моделировании больших задач физики плазмы методом частиц в ячейках / Е. А. Берендеев, А. А. Ефимова // Вестник УГАТУ. – 2013. – Т. 17. – № 2 (55). – С. 112-116.

33. Берендеев, Е. А. Численное моделирование развития турбулентности при взаимодействии электронного пучка с плазмой / Е. А. Берендеев, В. А. Вшивков, А. А. Ефимова, Е. А. Месяц // Вычислительные методы и программирование. – 2015. – Т. 16. – Вып. 1. – С. 139-145.

34. Берендеев, Е. А. Моделирование низкотемпературной многокомпонентной плазмы в ловушке-мишени / Е. А. Берендеев, Димов Г. И., Иванов А. В., Лазарева Г. Г., Федорук М. П. // Доклады Академии Наук. – 2015. – Т. 460. – № 5. – С. 529-531.

35. Berendeev, E. A. Mathematical and experimental simulation of a cylindrical plasma target trap with inverse magnetic mirrors / E. A. Berendeev, G. I. Dimov,

G. I. Dudnikova, A. V. Ivanov, G. G. Lazareva, V. A. Vshivkov // Journal of Plasma Physics. – 2015. – Vol. 81. – Iss. 5. – P. 495810512(1-8).

36. Berendeev, E.A. Numerical simulation of nonlinear processes in a beam-plasma system / A. A. Efimova, E. A. Berendeev, G. I. Dudnikova, V. A. Vshivkov. // AIP Conference Proceedings. – 2015. – Vol. 1684. – Iss. 1. – P. 100001(1-8).

37. Берендеев, Е.А. Эффективное использование суперЭВМ для решения больших задач физики плазмы методом частиц в ячейках / Е.А. Берендеев, А.В. Иванов, Г.Г. Лазарева, А.В. Снытников // International conference High performance computing. HPC-UA 2012. Conference proceedings. Kyiv, 8-12 October 2012. – Kyiv: National Technical University of Ukraine "Kyiv Polytechnic Institute". – 2012. – P. 94-101.

38. Berendeev, E.A. Supercomputer simulation of plasma electron dynamics in a magnetic trap with inverse magnetic mirrors and multipole magnetic wall / E.A, Berendeev, G.G. Lazareva // Bulletin of the Novosibirsk Computing Center. Numerical Analysis. – 2013. – № 16. – P. 7-14.

39. Берендеев, Е.А., Моделирование на суперЭВМ динамики плазменных электронов в ловушке с инверсными магнитными пробками и мультипольными магнитными стенками / Е.А. Берендеев, А.В. Иванов, Г.Г. Лазарева, А.В. Снытников // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2013): труды международной научной конференции (1-5 апреля 2013 г., г. Челябинск). – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. – 2013. – С. 68-75.

40. Берендеев, Е.А., Численное моделирование резонансного возбуждения колебаний плазмы, нагреваемой электронным пучком / Е.А. Берендеев, А.А. Ефимова // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2013): труды международной научной конференции (1-5 апреля 2013 г., г. Челябинск). – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. – 2013. – С. 288-294.

41. Берендеев, Е.А. Математическое моделирование на суперЭВМ динамики плазмы в ловушке-мишени для получения атомарных пучков высокой энергии / Е.А. Берендеев, Г.Г. Лазарева // 5-я международная молодёжная научная школа-конференция "Теория и численные методы решения обратных и некорректных

задач". Тезисы докладов. Новосибирск: Сибирское научное издательство. – 2013. – С. 22.

42. Берендеев, Е.А. Параллельный алгоритм решения задач динамики заряженных частиц с учётом балансировки вычислительной нагрузки / Е.А. Берендеев, М.А. Боронина, В.Д. Корнеев // Вестник ЮУрГУ. Серия “Вычислительная математика и информатика”. – 2014. – Т. 3. – № 1. – С. 97-112.

43. Берендеев, Е.А. Численное моделирование потерь плазмы через инверсные пробки магнитной ловушки-мишени / Е.А. Берендеев, А.А. Ефимова //Тезисы докладов VII Всероссийской конференции “Актуальные проблемы прикладной математики и механики”, посвящённой памяти академика А.Ф. Сидорова (Абрау-Дюрсо, 15-20 сентября 2014 г.). Екатеринбург: УрО РАН, 2014, с 14-15.

44. Berendeev, E.A. Numerical simulation of various scenarios of nonlinear evolution in a beam-plasma system / E.A. Berendeev, A.A. Efimova, V.A. Vshivkov // Bulletin of the Novosibirsk Computing Center. Numerical Analysis. – 2015. – № 17. – P. 1-6.

45. Berendeev, E.A. Computer simulation of multicomponent plasma dynamics in the Target Trap / E.A. Berendeev, G.I. Dudnikova, V.A. Vshivkov // Book of abstracts of the International Workshop on Complex Plasma Phenomena in the Laboratory and in the Universe, January 19-20, 2015. – Rome: Accademia Nazionale dei Lincei. – 2015. – P.38-39

46. Берендеев, Е.А. Моделирование осесимметричных плазменных ловушек методом частиц в ячейках / Е.А. Берендеев // Труды Международной конференции "Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики – 2015", посвященной 90-летию со дня рождения академика Гурия Ивановича Марчука. 19-23 октября 2015 г. – Новосибирск: Академиздат. – 2015. – С. 108-114.

47. Берендеев, Е.А. Особенности использования цилиндрической геометрии при решении задач физики плазмы методом частиц в ячейках / Е.А. Берендеев, М.А. Боронина, В.А. Вшивков, А.А. Ефимова // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2016): труды международной научной конференции (28 марта

– 1 апреля 2016 г., г. Архангельск). – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. – 2016. – С. 442-453.

48. Berendeev, E.A., Computer simulation of cylindrical plasma target trap with inverse magnetic mirrors / E. A. Berendeev, G. I. Dudnikova, A. A. Efimova, A. V. Ivanov and V. A. Vshivkov // AIP Conference Proceedings – 2016. – Vol. 1771. – P. 030009(1-4).

49. Hemsworth, R.S. Negative ion based neutral beam injection / R.S. Hemsworth // Nuclear Fusion. – 2006. – Vol. 46. – Iss. 6. – P. 1-199.

50. Власов, А.А. Теория многих частиц. / А.А. Власов. М.–Л.: ГИТТЛ, 1950. – 348 с.

51. Langdon, A.B. Electromagnetic and relativistic plasma simulation models / A.B. Langdon, B.F. Lasinski // Methods in Computational Physics. – 1976. – Vol. 16. – P. 327-366.

52. Taflove, A. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method / A. Taflove. - Boston. London: Artech House Publishers, 1995. – 611 p.

53. Березин, Ю.А. Методы частиц в динамике разреженной плазмы / Ю.А. Березин, В.А. Вшивков. – Новосибирск: Наука, 1980. – 95 с.

54. Калиткин, Н.Н. Математические модели физики плазмы / Н.Н. Калиткин, Д.П. Костомаров // Математическое моделирование. – 2006. –Т. 18. – № 11. – С. 67–94.

55. Цветков, И.В. Применение численных методов для моделирования процессов в плазме: учебное пособие / И.В. Цветков. – М.: МИФИ, 2007. – 84 с.

56. Filbet, F. Comparison of eulerian Vlasov solvers / F. Filbet, E. Sonnendrucker // Computer Physics Communications. – 2003. – V. 150. – Iss. 3. – P. 247–266.

57. Байерс, Дж. Конечно-разностые методы в плазме без столкновений / Дж. Байерс, Дж. Киллин // Вычислительные методы в физике плазмы / под ред. Б. Ольдера, С. Фернбаха, М. Ротенберга. – М.: Мир, 1974. – С. 259–303.

58. Телегин, В.И. Об одной разностной схеме для уравнения Власова / В.И. Телегин // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1976. – Т. 16. – № 5. – С. 1191–1197.

59. Zaki, S.I. A finite element code for the simulation of one-dimensional vlasov plasmas. I. Theory / S.I Zaki, L.R.T Gardner, T.J.M Boyd // Journal of Computational Physics. –1988. – Vol. 79. – Iss. 1. – P. 184–199.

60. Zaki, S.I. A finite element code for the simulation of one-dimensional vlasov plasmas. II. Applications / S.I. Zaki, L.R.T. Gardner, T.J.M. Boyd // Journal of Computational Physics. –1988. – Vol. 79. – Iss. 1. – P. 200-208.

61. Белоцерковский, О.М. Метод крупных частиц в газовой динамике / О.М. Белоцерковский, Ю.М. Давыдов. – М.: Наука, 1982. – 392 с.

62. Харлоу, Ф.Х. Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики / Ф.Х. Харлоу // Вычислительные методы в гидродинамике / под ред. Б. Ольдера, С. Фернбаха, М. Ротенберга. – М.: Мир, 1967. – С. 316–342.

63. Сигов, Ю.С. Численные методы кинетической теории плазмы / Ю.С. Сигов. – М.: МФТИ, 1984. – 94 с.

64. Бэдсел, Ч. Физика плазмы и численное моделирование / Ч. Бэдсел, А. Ленгдон. – М.: Энергоатомиздат, – 1989. – 456 с.

65. Хокни, Р. Численное моделирование методом частиц / Р. Хокни, Дж. Иствуд. – М.: Мир, 1987. – 638 с.

66. Григорьев, Ю.Н. Численное моделирование методами частиц-в-ячейках / Ю.Н. Григорьев, В.А. Вшивков, М.П. Федорук. – Новосибирск: Издательство СО РАН, – 2004. – 360 с.

67. Birdsall, C.K. Particle-in-Cell charged-particle simulation plus Monte Carlo collisions with neutral atoms, PIC-MCC / C.K. Birdsall // IEEE Transactions on Plasma Science. – 1991. – Vol. 19. – № 2. – P. 65-83.

68. Larson, D.J. A Coulomb collision model for PIC plasma simulation / D.J. Larson // Journal of Computational Physics. – 2003. – Vol. 188. – Iss. 1. – P. 123–138.

69. Potapenko, I.F. Numerical simulation of heating problems for a weakly collisional plasma / I.F. Potapenko, C.A. de Azevedo // Computer Physics Communications. – 1999. – Vol. 121–122. – P. 274–277.

70. Parashar, T.N. Transition from KINETIC to MHD behavior in a collisionless plasma / T.N. Parashar, W.H. Matthaeus, M.A. Shay, M. Wan // The Astrophysical Journal. – 2015. – Vol. 811. – Iss. 2. – P. 112(1-8).

71. Sugiyama, T. MHD–PIC connection model in a magnetosphere–ionosphere coupling system / T. Sugiyama, K. Kusano, S. Hirose, A. Kageyama // Journal of Plasma Physics. – 2006. – Vol. 72. – Iss. 6. – P. 945-948.

72. Buneman, O. Dissipation of currents in ionized media / O. Buneman // Physical Review. – 1959. – Vol. 115. – № 3. – P. 503-519.

73. Dawson, J. One-dimensional plasma model / J. Dawson // Physics of Fluids. – 1962. – Vol. 5. – № 4. – P. 445-459.

74. Vlad, G. Gridless finite-size-particle plasma simulation / G. Vlad, S. Briguglioa, G. Fogaccia, B. Di Martino // Computer Physics Communications. – 2001. – Vol. 134. – Iss. 1. – P. 58–77.

75. Dimits, A.M. Partially linearized algorithms in gyrokinetic particle simulation / A.M. Dimits, W.W. Lee // Journal of Computational Physics. – 1993. – Vol. 107. – Iss. 2. – P. 309–323.

76. Hess, S. How to improve the diagnosis of kinetic energy in delta-f PIC codes / S. Hess, F. Mottez // Journal of Computational Physics. – 2009. – Vol. 228. Iss. 18. – P. 6670–6681.

77. Lee, W.W. A generalized weight-based particle-in-cell simulation scheme / W.W. Lee, T.G. Jenkins, S. Ethier // Computer Physics Communications. – 2011. – Vol. 182. – Iss. 3. – P. 564–569.

78. Parker, S.E. A fully nonlinear characteristic method for gyrokinetic simulation / S.E. Parker, W.W. Lee // Physics of Fluids. – 1993. – Vol. B 5. – P. 77–86.

79. Дацюк, О.В. Сравнение метода частиц и гидродинамического приближения для моделирования газового разряда / О.В. Дацюк, А.А. Бакаев, Г.Н. Толмачев // Математическое моделирование. – 2004. – Т. 16. – № 10. – С. 29-34.

80. Opal, C.B. Measurements of secondary electron spectra produced by electron impact ionization of a number of simple gases / C.B. Opal, W.K. Peterson, E.C. Beaty // The Journal of Chemical Physics. – 1971. – Vol. 55. – Iss. 8. – P. 4100-4106.

81. Барнет К., Прикладная физика атомных столкновений: Плазма. / К. Барнет, М. Харрисон; Под ред. В. И. Пистуновича. – М. : Энергоатомиздат. – 1987. – 430 с.

82. Takayanagi, K. Introduction to electron-molecule collisions / K. Takayanagi // Physics of Atoms and Molecules / I. Shimamura. K. Takayanagi. – New York: Plenum Press, 1984. – P. 1-87.

83. Vahedi, V. A Monte Carlo collision model for the particle-in-cell method: Applications to argon and oxygen discharges / V. Vahedi, M. Surendra // Computer Physics Communications. – 1995. – Vol. 87. – Iss. 1-2. – P. 179-198.

84. Андрианов, А.Н. Подход к параллельной реализации метода частиц в ячейках [Электронный ресурс] / А.Н. Андрианов, К.Н. Ефимкин // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. – 2009. – № 9. – 20 с. – Режим доступа: http://mi.mathnet.ru/ipmp280/

85. Андрианов, А.Н. Метод частиц в ячейках: учёт в параллельной реализации взаимодействия частиц [Электронный ресурс] / А.Н. Андрианов, К.Н. Ефимкин // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. – 2016. – № 71. – 16 с. – Режим доступа: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-71

86. Снытников, Н.В. Масштабируемый параллельный алгоритм для моделирования трехмерной динамики гравитирующих систем методом частиц / Н.В. Снытников // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2016): труды международной научной конференции (28 марта – 1 апреля 2016 г., г. Архангельск). – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. – 2016. – С. 298-307.

87. Рютов, Д.Д. Открытые ловушки / Д.Д. Рютов // Успехи физических наук. – 1988. – Т. 154. – № 4. – С. 565–614.

88. Смирнов, Б.М. Кинетика электронов в газах и конденсированных системах / Б.М. Смирнов // Успехи физических наук. – 2002. – Т. 172. – № 12. – С. 1411-1447.

89. Phelps A.V., Cross Sections and Swarm Coefficients for H + , H2 + , H3 + , H, H2, and H - in H2 for Energies from 0.1 eV to 10 keV / A. V. Phelps // Journal of Physical and Chemical – 1990. – Vol. 19(3). – P. 653-675.

90. Донец Е. Д., Исследование ионизации положительных ионов электронным ударом / Е.Д. Донец, В.П. Овсянников // ЖЭТФ – 1981. – Т. 80. – С. 916-925.

91. Кролл, Н. Основы физики плазмы / Н. Кролл, А. Трайвелпис. – М.: Мир, – 1975. – 525 с.

92. Вшивков, В.А. Проблема саморазогрева модельной плазмы в методе частиц / В.А. Вшивков, Д.В. Романов, В.Н. Снытников // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1999. – Т. 4. – № 3. – С. 62–72.

93. Вшивков, В.А. О самодействии в методе частиц в ячейках / В.А. Вшивков, А.В. Терехов // Вычислительные методы и программирование. – 2008. – Т. 9. – С. 48–57.

94. P.J. Mardahl, Charge conservation in electromagnetic PIC codes; spectral comparison of Boris/DADI and Langdon-Marder methods / P.J. Mardahl, J.P. Verboncoeur // Computer Physics Communications. – 1997. – Vol. 106. – Iss. 3. – P. 219–229.

95. Скачков, М.В. О проблеме шумов и сохранения заряда в методе крупных частиц / М.В. Скачков // Математическое моделирование. – 2000. – Т. 12. – № 9.

96. Langdon, A.B. On enforcing Gauss' law in electromagnetic particle-in-cell codes / A.B. Langdon // Computer Physics Communication. – 1992. – Vol. 70. – Iss. 3. – P. 447–450.

97. Munz, C.D. Divergence correction techniques for Maxwell solvers based on a hyperbolic model / C.D. Munz, P. Omnes, R. Schneider, E. Sonnendrucker, U. Voss // Journal of Computational Physics. – 2000. – Vol. 161. – Iss. 2. – P. 484–511.

98. Lapenta, G. Dynamic and selective control of the number of particles in kinetic plasma / G. Lapenta, J.U. Brackbill // Journal of Computational Physics. – 1994. – Vol. 115. – Iss. 1. – P. 213–227.

99. Lapenta, G. Control of the number of particles in fluid and MHD particle in cell methods / G. Lapenta, J.U. Brackbill // Computer Physics Communications. – 1995. – Vol. 87. – Iss. 1–2. – P. 139–154.

100. Welch, D.R. Adaptive particle management in a particle-in-cell code / D.R. Welch, T.C. Genoni, R.E. Clark, D.V. Rose // Journal of Computational Physics. – 2007. – Vol. 227. – Iss. 1. – P. 143–155.

101. Lapenta, G. Particle Rezoning for multidimensional kinetic particle-in-cell simulations / G. Lapenta // Journal of Computational Physics. – 2002. – Vol. 181. – Iss. 1. – P. 317–337.

102. Innocenti, M.E. A multi level multi domain method for particle in cell plasma simulations // Journal of Computational Physics. – 2013. Vol. 238. – P. 115–140.

103. Снытникова, Т.В. Модификация метода частиц в ячейках с использованием адаптивных масс: взаимодействие лазерного импульса с плазмой / Т.В. Снытникова, Г.И. Дудникова, В.А. Вшивков // Вычислительные методы и программирование. – 2013. – Т. 14. – С. 348–356.

104. Coppa, G.G.M. Blob Method for kinetic plasma simulation with variable-size particles / G.G.M. Coppa, G. Lapenta, G. Dellapiana, F. Donato, V. Riccardo // Journal of Computational Physics. – 1996. – Vol. 127. – Iss. 2. – P. 268–284.

105. Бэрдсол, Ч. Физика системы частиц конечных размеров и ее применение к моделированию плазмы / Ч. Бэрдсол, А. Ленгдон, Х. Окуда // Вычислительные методы в физике плазмы / под ред. Б. Ольдера, С. Фернбаха, М. Ротенберга. – М.: Мир, 1974. – С. 242–258.

106. Birdsall, C.K. Clouds-in-clouds, clouds-in-cell physics for many-body plasma simulation / C.K. Birdsall, D. Fuss // Journal of Computational Physics. – 1997. – Vol. 135. – Iss. 2. – P. 141–148.

107. Idomura, Y. Chaotic behaviour in PIC simulation and its relation to computational errors / Y. Idomura, S. Tokuda, M. Wakatani // Computer Physics Communications. – 1997. – Vol. 102. – Iss. 1. – P. 68–80.

108. Вшивков, В.А. Аппроксимационные свойства метода частиц в ячейках / В.А. Вшивков // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1996. – Т. 36. – № 4. – С. 106–113.
109. Williamson, J.H. Initial particle distributions for simulated plasma / J.H. Williamson // Journal of Computational Physics. – 1971. – Vol. 8. – Iss. 2. – P. 258-267.
110. Sydora, R.D. Low-noise electromagnetic and relativistic particle-in-cell plasma simulation models / R.D. Sydora // Journal of computational and applied mathematics. – 1999. Vol. 109. – Iss. 1–2. – P. 243–259.
111. Markidis, S. The energy conserving particle-in-cell method / S. Markidis, G. Lapenta // Journal of Computational Physics. – 2011. – Vol. 230. – Iss. 18. – P. 7037-7052.
112. Brackbill, J.U. An implicit method for electromagnetic plasma simulation in two dimensions / J.U. Brackbill, D.W. Forslund // Journal of Computational Physics. – 1982. – Vol. 46. – Iss. 2. – P. 271–308.
113. Lapenta, G. Kinetic approach to microscopic-macroscopic coupling in space and laboratory plasmas / G. Lapenta, J.U. Brackbill, P. Ricci // Physics of Plasmas. – 2006. – Vol. 13. – № 5. – P. 055904.
114. Cohen, B.I. Implicit time integration for plasma simulation / B.I. Cohen, A.B. Langdon, A. Friedman // Journal of Computational Physics. – 1982. – Vol. 46. – Iss. 1. – P. 15–38.
115. Hockney, R.W. Measurements of collision and heating times in a two-dimensional thermal computer plasma / R.W. Hockney // Journal of Computational Physics. – 1971. – Vol. 8. – Iss. 1.– P. 19–44.
116. Вшивков, В.А. О методе частиц для решения кинетического уравнения Власова / В.А. Вшивков, В.Н. Снытников // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1998. – Т. 38. – № 11. – С. 1877–1883.
117. Vay, J.L. Mesh refinement for particle-in-cell plasmas simulation: application and benefits for heavy ion fusion / J.L. Vay, P. Colella, P. McCorquodale, B. Van Straalen,

A. Friedman, D.P. Grote // Laser and Particle Beams. – 2002. – Vol. 20. – Iss. 4. – P. 569–575.

118. Vay, J.L. Implementations of mesh refinement schemes for particle-in-cell plasma simulations / J.L. Vay, P. Colella, A. Friedman, D.P.Grote, P. McCorquodale, D.B. Serafini // Computer Physics Communications. – 2004. – Vol. 164. – Iss. 1–3. – P. 297–305.

119. Colella, P. Controlling self-force errors at refinement boundaries for AMR-PIC / P. Colella, P.C. Norgard // Journal of Computational Physics. – 2010. – Vol. 229. – Iss. 4. – P. 947–957.

120. Дудникова, Г.И. О моделях частиц на неструктурированных сетках / Г.И. Дудникова, Д.В. Романов, М.П. Федорук // Вычислительные технологии. – 1998. – Т. 3. – № 6. – С. 30–46.

121. Okuda, H. Nonphysical noises and instabilities in plasma simulation due to a spatial grid / H. Okuda // Journal of Computational Physics. – 1972. – Vol. 10. – Iss. 3. – P. 475–486.

122. Abe, H. Grid effects on the plasma simulation by the finite-size particle / H. Abe, J. Miyamoto, R. Itaniti // Journal of Computational Physics. – 1975. – Vol. 19. – Iss. 2. – P. 134–149.

123. Вшивков В.А., Снытников А.В. Оптимизация вычислений при моделировании на суперЭВМ аномальной теплопроводности в плазме методом частиц в ячейках. // Междунар. суперкомпьютерная конф. и конф. молодых ученых «Научный сервис в сети Интернет: суперкомпьютерные центры и задачи» – Изд-во МГУ, Москва 2010., с. 208-211.

124. Verboncoeur, J. P. Symmetric Spline Weighting for Charge and Current Density in Particle Simulation / J. P. Verboncoeur // Journal of Computational Physics. – 2001. – Vol. 174. – P. 421–427.

125. Delzanno, G.L. On particle movers in cylindrical geometry for Particle-In-Cell simulations / G.L. Delzanno, E. Camporeale // Journal of Computational Physics. – 2013. – Vol. 253. – P. 259–277.

126. Pointon, T.D. Second-order, exact charge conservation for electromagnetic particle-in-cell simulation in complex geometry / T.D. Pointon // Computer Physics Communications. – 2008. – Vol. 179. – P. 535–544.
127. Verboncoeur, J. P. Particle simulation of plasmas: review and advances / J. P. Verboncoeur // Plasma Physics and Controlled Fusion. – 2005. – Vol. 47. – P. 231–260.