

Численное моделирование непрерывной инжекции электронного пучка в плазму

Берендеев Е.А., ИВМиМГ СО РАН, ИЯФ СО РАН, н.с., к.ф.-м.н.
Ефимова А.А., ИВМиМГ СО РАН, м.н.с.

Аннотация

Работа посвящена сравнению способов реализации открытых граничных условий, допускающих непрерывную инжекцию пучка заряженных частиц в плазму в PIC-модели, в случае различных ядер частиц, а также с двумя вариантами граничных условий на торцах плазмы. Для задачи об инжекции электронного пучка в плазму в 1D геометрии показано совпадение результатов моделирования с PIC и параболическим ядрами макро частиц при всех рассматриваемых граничных условиях. В 2D геометрии обнаружено расхождение данных моделей, а также неприменимость граничных условий Мура для электромагнитных полей одновременно с условием равенства токов в пограничных ячейках. Определено необходимое для сходимости вычислений число частиц в ячейке для каждого метода.

Введение

В настоящий момент актуальной является проблема создания мощного и компактного источника электромагнитного (ЭМ) излучения в ТГц диапазоне частот (0.3-10 ТГц). За последние десятилетия был предложен ряд идей на базе ускорительных и лазерных технологий. Перспективной средой для генерации такого излучения является плазма, поскольку она может поддерживать электромагнитные колебания очень большой амплитуды. Однако, выход излучения, частота которого близка к плазменной, ограничен эффектом плазменной экранировкой, что приводит к необходимости использования дополнительных мер по выводу излучения из плазмы. В работе [Timofeev, I. V., Annenkov, V. V. Volchok, E. P. Generation of high-field narrowband terahertz radiation by counterpropagating plasma wakefields. *Physics of Plasmas* 24, 103106 (2017).] показана возможность эффективной конверсии встречных плазменных волн с различной поперечной структурой в вакуумное ЭМ излучение на удвоенной плазменной частоте. Подобную схему можно реализовать и при столкновении в плазме двух встречных электронных пучков. Основополагающим инструментом для проверки рассматриваемой теории является численное моделирование методом частиц-в-ячейках, которое позволяет описать быструю динамику плазмы и изучить генерируемое в ней излучение. Основной сложностью в построении численной модели для схемы со встречными пучками частиц является необходимость реализации открытых граничных условий, обеспечивающих непрерывную инжекцию пучков в систему. Такие граничные условия применялись для исследования пучково-плазменного взаимодействия [Timofeev, I. V., Terekhov, A. V. Simulations of turbulent plasma heating by powerful electron beams. *Physics of Plasmas*, 17, 83111 (2010)] и генерации излучения из плазмы в случае одного пучка [Annenkov, V. V., Timofeev, I. V., Volchok, E. P. Simulations of electromagnetic emissions produced in a thin plasma by a continuously injected electron beam. *Physics of Plasmas*, 23(5), 053101 (2016)] В этих работах использовалась параболическая форма частиц, и специальный поглощающий слой для электромагнитных полей. Дальнейшие исследования потребуют

существенное увеличение пространственных масштабов и количества частиц особенно для 3-мерного случая, поэтому актуально использование более быстрых алгоритмов, например, с использованием PIC ядра макро частиц. Данная работа посвящена проверке возможности использования данной формы макро частиц а также реализация двух типов открытых граничных условий при решении подобных задач, посвящена данная работа. Проверка осуществлялась для двух задач. Первая представляет собой одномерную инжекцию электронного пучка в плазму. Во второй рассматривается генерация излучения в плазме при помощи встречных электронных пучков различной ширины.

Постановка задачи.

Численная модель непрерывной инжекции электронного пучка в плазму

В общем случае динамика системы плазма-электронные пучки может быть описана уравнением Власова для функций распределения частиц

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

и системой уравнений Максвелла с самосогласованными электромагнитными полями:

$$\text{rot} \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \sum_\alpha q_\alpha \int f_\alpha \vec{v} d\vec{v} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (2)$$

$$\text{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (3)$$

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

$$\text{div} \vec{B} = 0. \quad (5)$$

Здесь индексом α обозначается сорт частиц (ионы и электроны плазмы, электроны пучков), $\vec{p} = m\gamma \vec{v}$ - релятивистский импульс частицы.

Для решения уравнения (1) используется метод частиц в ячейках [Hockney R W, Eastwood J W 1988 Computer Simulation Using Particles (CRC Press: Boca Raton, Florida USA)].

Движение частиц происходит согласно характеристикам уравнения Власова

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = q_\alpha (\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v}, \vec{B}]), \quad \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}. \quad (6)$$

для решения которых используется схема с перешагиванием, обеспечивающей второй порядок точности [Boris J.P. Relativistic plasma simulation – optimization of a hybrid code // Fourth Conference on numerical Simulation of Plasmas. Washington, 1970. P. 3-67.]:

$$\frac{\vec{p}_i^{m+1/2} - \vec{p}_i^{m-1/2}}{\tau} = q_\alpha \left(\vec{E}_i^m + \frac{1}{c} \left[\frac{\vec{v}_i^{m+1/2} + \vec{v}_i^{m-1/2}}{2}, \vec{B}_i^m \right] \right), \quad \frac{r_i^{m+1} - r_i^m}{\tau} = v_i^{m+1/2}. \quad (7)$$

Здесь τ - шаг по времени; верхний индекс указывает на момент времени, в который вычисляется искомая функция, нижний индекс i указывает на номер частицы, для которой производятся вычисления.

Решение уравнений Максвелла осуществляется по схеме FDTD [Taflove, A. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method / A. Taflove. - Boston. London: Artech House Publishers, 1995. – 611 p.]:

$$\frac{\vec{B}^{m+1/2} - \vec{B}^{m-1/2}}{\tau} = -c \text{rot}_h \vec{E}^m, \quad (9)$$

$$\frac{\bar{E}^{m+1} - \bar{E}^m}{\tau} = -4\pi \bar{j}^{m+1/2} + c \operatorname{rot}_h \bar{B}^{m+1/2}, \quad (10)$$

$$\operatorname{div}_h \bar{E}^m = 4\pi \rho^m, \quad (11)$$

$$\operatorname{div}_h \bar{B}^{m+1/2} = 0. \quad (12)$$

Плотности заряда и плотности тока вычисляются по скоростям и координатам отдельных частиц:

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_j q_j R(\vec{r}, \vec{r}_j(t)), \quad (13)$$

$$\bar{j}(\vec{r}, t) = \sum_j q_j \vec{v}_j(t) R(\vec{r}, \vec{r}_j(t)). \quad (14)$$

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

Граничные условия.

Пусть плазменный столб имеет длину Lx и начинается в нулевой ячейке вычислительной сетки. Основной сложностью в постановке задачи является адекватная реализация около точек инжекции и вывода пучка.

Рассмотрим отдельно условия на частицы, плотности тока и электромагнитные поля. Очевидно, что частицы, вылетевшие через границы $x=0$ и $x=Lx$, должны быть удалены из области моделирования. Однако, это приведёт к тому, что плазма постоянно будет утекать из области и условие квазинейтральности соблюдаться не будет. Таким образом, необходимо моделировать естественный противоток плазмы через открытые границы $x=0$ и $x=Lx$.

Для решения этой проблемы рассмотрим следующее условие на функцию распределения частиц

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t)|_{x=-1} = f(\vec{r}, \vec{p}, t)|_{x=0}, \text{ для } p > 0$$

Реализуется это следующим образом – для частицы, перелетевшей за шаг по времени точку $x=h$ слева направо (то есть из нулевой ячейки в первую) создаётся её копия, смещённая в продольном направлении на шаг сетки h , при этом остальные координаты новой частицы остаются прежними. Продольный (px) импульс частицы также сохраняется, а поперечный импульс берётся из начального распределения. Аналогично реализуется условие на правой границе $x=Lx$.

Инжекция пучков выполняется следующим образом: в каждый момент времени в область за границей плазменного столба (то есть в минус первую ячейку для левого пучка) добавляется необходимое число частиц пучка с заданным распределением скоростей.

Вычислять ток и электромагнитные поля на границе можно двумя способами

Граничное условие 1)

Можно расширить область вычисления электромагнитных полей вдоль направления X с обеих сторон и установить в расширении условие поглощения SAL [Berendeev E.A. and Efimova A.A. A method of damped absorption of electromagnetic waves in the numerical simulation of electron beam-plasma interaction // Vychislitel'nye Metody i Programmirovaniye. Iss 19, 2018, P 253-260] - искусственное затухание электромагнитных волн путём умножения значений электромагнитного поля на каждом шаге по времени на некоторый коэффициент $k < 1$, зависящий от расстояния до границы.

$$k = \begin{cases} \frac{(a-1)}{l^2} x^2 - 2 \frac{(a-1)}{l} x + a, & x < l \\ 1, & x \geq l \end{cases},$$

где l - ширина поглощающего слоя составляющая длину порядка c/w_p , x - расстояние до границы области, $0 < a < 1$ - величина характеризующая степень затухания волны внутри поглощающего слоя.

Ток на границе $X=0$ (аналогично на другой границе) вычисляется следующим образом

На каждом шаге по времени для каждой частицы из нулевой и первой ячеек создаются виртуальные копии с теми же значениями импульса и поперечными координатами, но смещённые на две ячейки (в -1 и -2 ячейки). Далее для этих частиц происходит расчёт их движения под действием реальных полей с сохранением вклада в реальные токи системы. Таким образом, в нулевой ячейке (крайней ячейке реальной плазмы) реализуются такие значения токов, какие были бы в ней при условии наличия за левой границей реальной плазмы. После вычисления тока, копии частиц удаляются. На правой границе условия аналогичны. Данная реализация граничных условий была выполнена для PIC ядра и параболического ядра. (PIC-1, Parabolic-1)

Граничное условие 2) Поставить условие $\vec{J}(\vec{r}, t)|_{x=-1} = \vec{J}(\vec{r}, t)|_{x=0}$ - то есть предположить, что ток в первой ячейке полностью совпадает с током во второй (аналогично для последней и предпоследней). Для параболического ядра необходимо условие $\vec{J}(\vec{r}, t)|_{x=-2} = \vec{J}(\vec{r}, t)|_{x=-1} = \vec{J}(\vec{r}, t)|_{x=0}$

Электромагнитные поля при этом можно вычислять, используя условия Мура [G.Mur, Absorbing Boundary Conditions for the Finite-Difference Approximation of the Time-Domain Electromagnetic-Field Equations // IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility. Is. 4, 1981.]

Рассмотрим сначала одномерный 1D3V случай.

В плазму через границу $x=0$ инжектируется пучок со скоростью $v=0,9c$, температурой $T_b=15$ эВ и плотностью $n_b=6,25 \times 10^{10} \text{ см}^{-3}$.

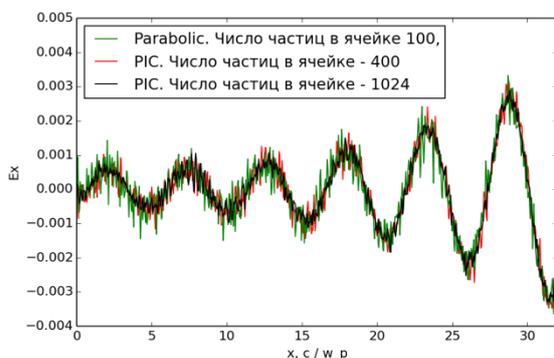
Температура электронов плазмы $T_e=50$ эВ, плотность плазмы $n_p=10^{15} \text{ см}^{-3}$.

Ионы считаются неподвижными.

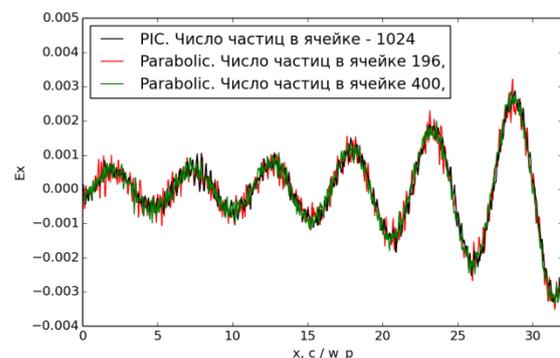
Размеры области $L_x=160 c/w_p$.

Шаги сетки $h_x=0,04 c/w_p$, $\tau=0,02 1/w_p$, где w_p -плазменная частота

На рисунке 1 представлены результаты расчёта электрического поля, возбуждаемого пучком для различных ядер и различным числом частиц в момент времени $T=400/w_p$



Граничное условие 1



2

Рисунок 1. Результаты расчёта электрического поля, возбуждаемого пучком для различных ядер и различным числом частиц в момент времени $T=400/w_p$.

Из рисунка 1 видно, что результат моделирования зависит только от числа частиц, причём для параболического ядра требуется примерно в 4 раза меньше частиц для сопоставимого уровня шумов. В данном расчёте граничное условие не оказывает существенного влияния на результат.

В таблице 1 показано среднеквадратичное отклонение значения X-компоненты электрического поля для каждого типа граничных условий, ядра и числа частиц в ячейках. Поскольку аналитическое решение в данном случае не известно, сравнение проводилось со сглаженным полем E_x , полученным путём усреднения численного решения на 25 точках (размер $1 c / w_p$).

Таблица 1

Ошибка по сравнению с аппроксимационным значением X-компоненты электрического поля.

Тип ядра / Число частиц в ячейках	Граничное условие 1	Граничное условие 2
PIC / 100	0.00239	0.00246
PIC / 400	0.00141	0.00146
PIC/ 1024	0.00117	0.0012
PIC / 1600	0.00101	0.00106
Parabolic / 100	0.00173	0.0016
Parabolic / 196	0.00138	0.0012
Parabolic / 400	0.00101	0.00098

Из таблицы 1 видно, что во всех случаях наблюдается сходимость по числу частиц, а тип граничного условия практически не влияет на результат. При этом ошибка для PIC ядра с 1600 частиц в ячейке совпадает с ошибкой для параболического ядра и 400 частиц в ячейке.

Таким образом, несмотря на то, что PIC-ядро позволяют обеспечить более быстрые вычисления, необходимо брать гораздо больше частиц в ячейке чем в случае параболического, что нивелирует данное преимущество PIC-ядра.

Для изучения генерации излучения в плазме необходимо проведение 2Д и 3Д расчётов.

Рассмотрим задачу о генерации ЭМ излучения в плазме под действием встречных электронных пучков различной ширины с плазмой [Annenkov, V. V., Berendeev, E. A., Timofeev, I. V., & Volchok, E. P. (2018). High-power terahertz emission from a plasma penetrated by counterstreaming different-size electron beams. Manuscript submitted for publication.].

Ошибки в граничных условиях могут приводить к формированию нефизических полей на границах плазмы, которые в итоге приведут к неправильным результатам всего моделирования.

Мы будем рассматривать взаимодействие двух встречных пучков с плазмой в 2D3V постановке, т.е., считая, что плотность и скорость частиц в направлении Z однородна.

Два электронных пучка движутся вдоль направления X и влетают в плазму, удерживаемую однородным продольным магнитным полем $(V_x, 0, 0)$. Вдоль направления Y плазма ограничена вакуумом.

Схема расчётной области представлена на рисунке 1.

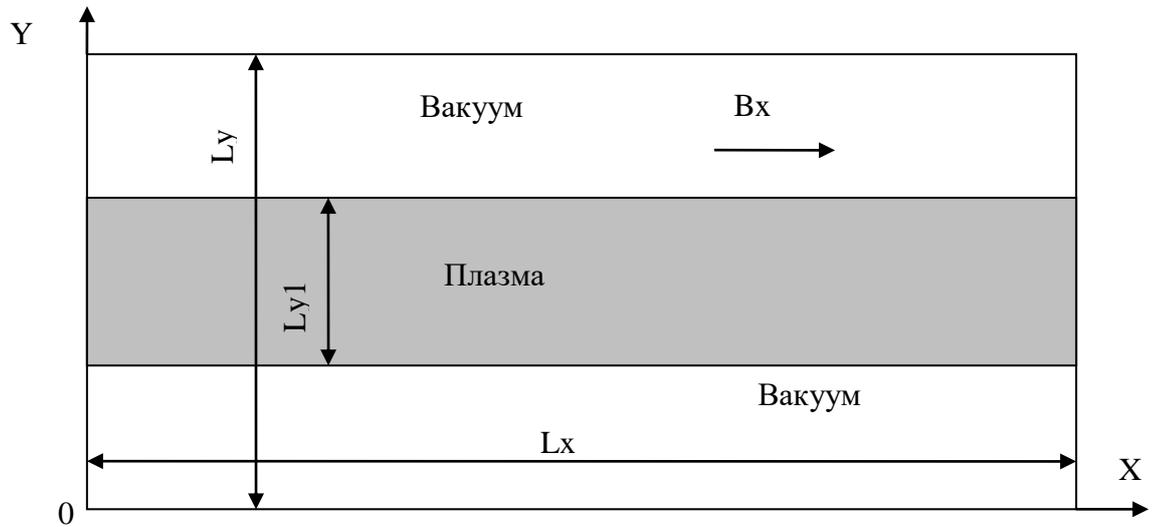


Рисунок 2. Схема расчётной области.

В начальный момент времени пучков в области нет

$$n_0 = 3.1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}.$$

Здесь n_0 – плотность электронов плазмы. Ионы считаем неподвижными.

Электроны плазмы имеют следующее распределение по импульсам:

$$f(p_x, p_y, p_z) = \left(\frac{1}{\sigma_e \sqrt{2\pi}} \right)^3 e^{-\frac{(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)}{2\sigma_e^2}}$$

$$\text{где } \sigma_e^2 = m_e k T_e$$

Температура электронов T_e задаётся через среднюю кинетическую энергию электронов

$$K_e = \frac{3}{2} k T_e = 40 \text{ эВ.}$$

Пучки, входящие в область, имеют плотность $n_{b1} = n_{b2} = 0.002 n_0$ и распределение по импульсам:

$$f(p_x, p_y, p_z) = \left(\frac{1}{\sigma_b \sqrt{2\pi}} \right)^3 e^{-\frac{((p_x \pm p_0)^2 + p_y^2 + p_z^2)}{2\sigma_b^2}}.$$

$$\text{где } \sigma_b^2 = m_e k T_b.$$

Температура каждого пучка T_b задаётся через среднюю кинетическую энергию

$$\text{электронов } K_b = \frac{3}{2} k T_b = 4 \text{ КэВ.}$$

p_0 соответствует скорости 0,9с.

Внешнее магнитное поле $(B_x, 0, 0)$ определяется соотношением ларморовской и плазменной частот $\Omega/\omega_p = 0.2$

Размеры области $L_x = 64c / w_p, L_y = 60c / w_p$.

Ширина плазмы и правого пучка $L_{y1} = 10c / w_p$, ширина левого пучка, $L_{y2} = 5c / w_p$

Частицы, достигшие границы области ($y=0, y=L_y$) удаляются. Поскольку в области присутствует продольное магнитное поле – таких частиц будет очень мало. Для электромагнитных полей у границ $y=0, y=L_y$ применяется поглощающий слой SAL, рассчитывается мощность поглощённого в этих слоях излучения.

Величина

$$P_{rad} = \frac{h_x h_y}{2\tau} \sum_{i,l} (Ex_{i,l}^2(1-k_{i,l}) + Ey_{i,l}^2(1-k_{i,l}) + Ez_{i,l}^2(1-k_{i,l}) + Bx_{i,l}^2(1-k_{i,l}) + By_{i,l}^2(1-k_{i,l}) + Bz_{i,l}^2(1-k_{i,l}))$$

характеризует мощность излучения, т.е. энергию, ушедшую из системы за время τ , причём здесь достаточно легко выделить вклад отдельных компонент электрических и магнитных полей в суммарную мощность излучения.

Эффективность мощности излучения вычисляется как

$\Psi = P_{rad} / P_{beam}$, где P_{rad} – мощность излучения, поглощённая на границах области, P_{beam} – мощность входящих пучков за шаг по времени.

Рассмотрим эффективность электромагнитного излучения для PICи параболического ядра в зависимости от типа граничных условий и числа частиц.

На рисунке 3 представлены графики эффективности излучения для четырёх случаев вычисления плотности тока на границах

- 1) Граничные условия 1 с PIC-ядром.
- 2) Граничные условия 2 с PIC-ядром.
- 3) Граничные условия 1 с параболическим ядром.
- 4) Граничные условия 2 с параболическим ядром.

Во всех случаях использована сетка, пространственный шаг которой $h_x=h_y=0.1c / w_p$, позволяющая разрешить плазменные колебания, возникающие при пучково-плазменном взаимодействии.

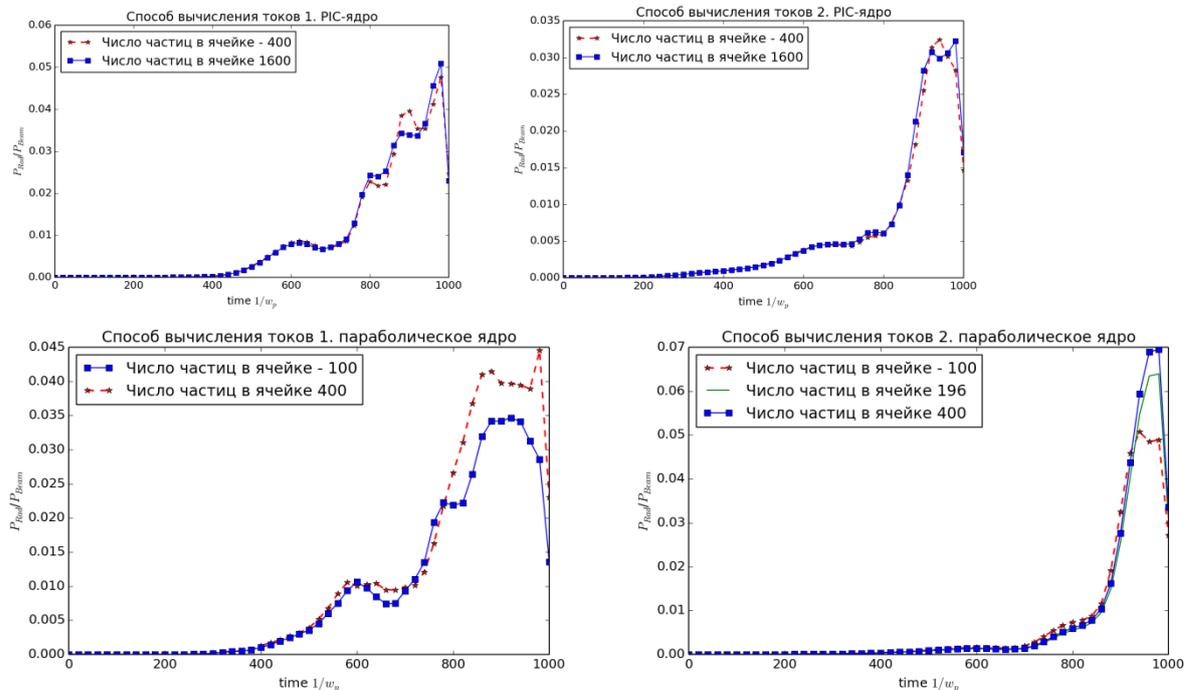
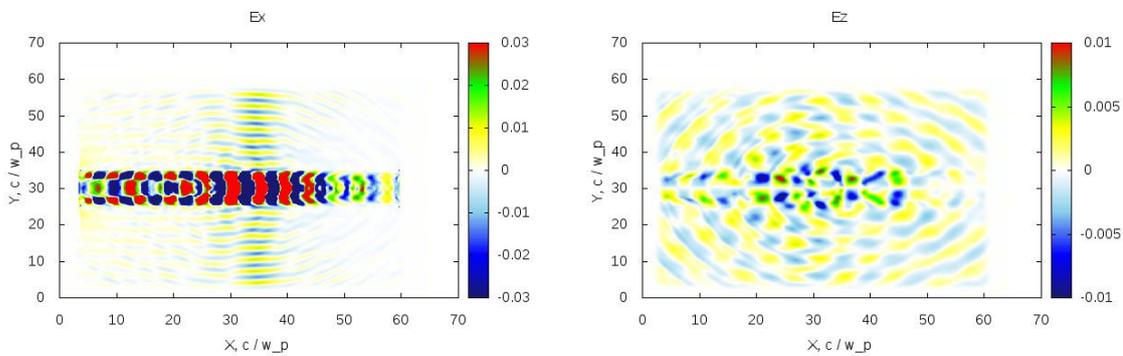
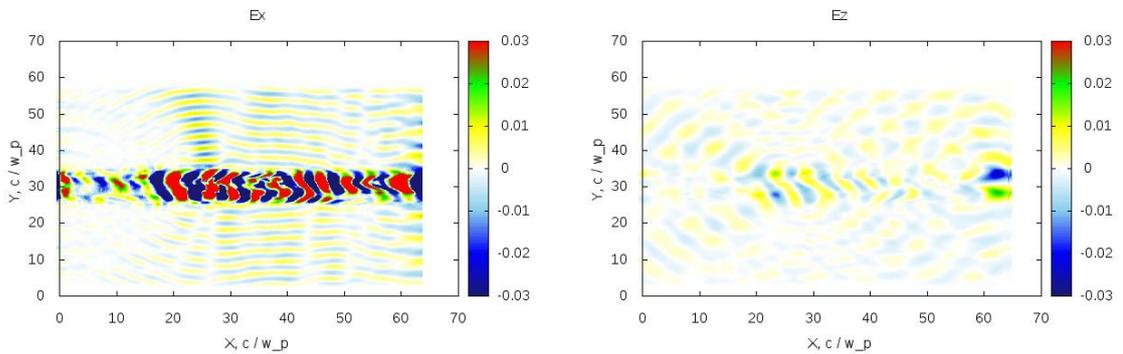


Рисунок 3. Эффективность излучения для различных случаев вычисления плотности тока на границах.

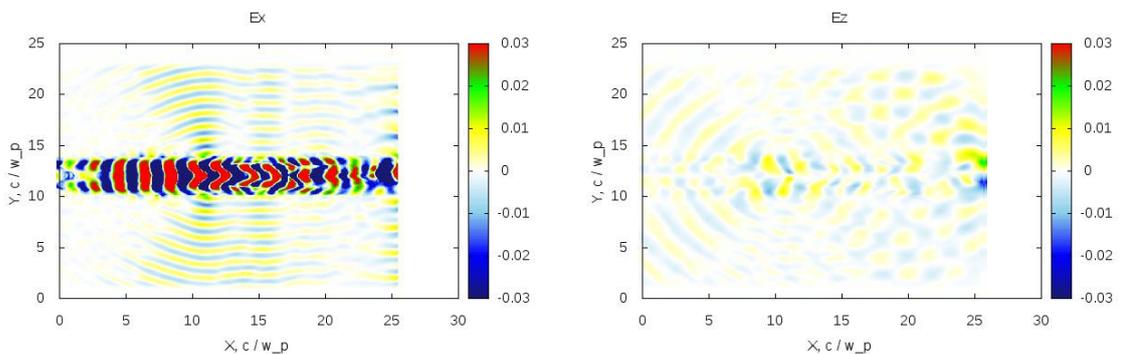
Из рисунка 3 видно, что для Ріс-ядра использование метода вычисления тока на границе с помощью виртуальных токов (метод 1) даёт меньший уровень эффективности излучения (почти в 1,5 раза), чем метод, предполагающий равенство токов в граничных (метод 2). Использование параболического ядра в методе 1 приводит к тому, что в результате моделирования уровень эффективности излучения составляет 7%, при этом сама кривая эффективности имеет более гладкий вид. Метод 2 для параболического ядра даёт похожий результат, что и метод 1 для РІС ядра.

Во всех случаях наблюдается сходимость решения по увеличению числа частиц в ячейке). В расчётах использовалось 1600 частиц в ячейке для Ріс ядра и 400 для параболического. Рассмотрим изолинии Хи Z-компонент электрического поля (которые представляют E_x, E_y, B_z -O-моду и E_z, B_x, B_y -X-моду

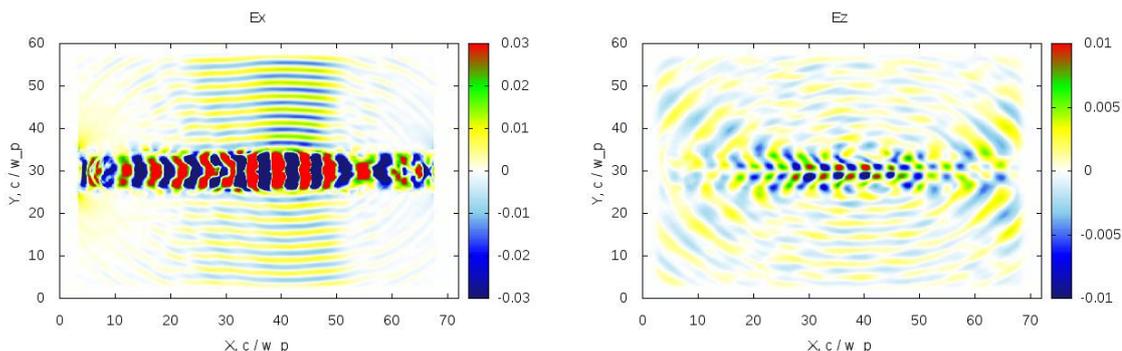
1.



2.



3.



4.

Рисунок 4. изолинии X и Z-компонент электрического поля для различных способов вычисления тока на границе в момент времени $T=880/w_p$

Из рисунка 4 видно, что в случае модели с равенством токов в пограничных ячейках и граничного условия Мура наблюдается формирование значительных нефизических полей вблизи областей инжекции пучков. На левой границе таких шумов практически нет, поскольку левый пучок уже чем плазма. При этом, для PIC-ядра излучение получается достаточно рваным. Использование параболического ядра в обоих случаях позволяет получить более гладкое излучение.

Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Было проведено сравнение реализаций PIC-модели плазмы с открытыми граничными условиями для случая PIC ядра и параболического ядра частиц с различными граничными условиями. В 1D геометрии показано совпадение результатов моделирования инжекции одного пучка в плазму для всех рассмотренных моделей. Обнаружено, что для достижения в модели с PIC форм фактором макрочастиц уровня шумов близкого к уровню шумов для параболической формой необходимо в несколько раз большее число частиц, что приводит, в итоге, к увеличению времени вычислений. Таким образом, использование параболического ядра является предпочтительным. Для 2D задачи о генерации излучения встречными электронными пучками в плазме показано существенное отличие результатов вычислений эффективности генерации излучения в случае PIC-ядра от случая параболического ядра. Обнаружено формирование нефизических полей в плазме при использовании граничных условий Мура и условия равенства токов в приграничных областях.

Работа выполнялась в рамках бюджетного проекта 0315-2016-0009 ИВМиМГ СО РАН, а также в рамках грантов РФФИ 19-07-00446 и 16-01-00209.

Список публикаций.

Berendeev E.A., Annenkov V.V., Timofeev I. V., Dudnikova G.I., Efimova A.A. Comparison of open boundary conditions realizations for continuous injection of an electron beam into a plasma in the case of the PIC and parabolic form-factors. October 2018. Journal of Physics Conference Series 1103(1):012022 DOI: 10.1088/1742-6596/1103/1/012022