

Отчёт ИВЦ НГУ

Берендеев Е.А.

Тема работы

Разработка алгоритмов и программного обеспечения для кинетического моделирования эксперимента по обращению магнитного поля в процессе атомарной инжекции

Состав коллектива (с указанием места учёбы/работы, учёных степеней и званий).

Берендеев Е.А., с.н.с. ИЯФ СО РАН, н.с. ЛБНЗТ НГУ

Работа выполнена при поддержке госзадания - Тема 1.3.4.1. Разработка физических основ и технологических решений для создания термоядерного реактора на основе линейной магнитной ловушки, РНФ № 21-72-10071

Аннотация

В рамках работы над проектом создана новая модель частиц в ячейках для полностью кинетического моделирования режимов удержания плазмы с высоким относительным давлением. Эти режимы рассматриваются как наиболее перспективные для термоядерных реакторов на основе конфигураций с обращенным полем, зеркальных и мультикасповых магнитных ловушек. Формирование равновесной плазмы высокого давления с полностью исключенным или обращенным магнитным полем не может быть исследовано с использованием упрощенных магнитогидродинамических и гирокинетических подходов. Правильное описание динамики электронов в непосредственной близости от областей нулевого и сильного магнитного поля может быть достигнуто только в рамках кинетической теории, которая может быть наиболее эффективно реализована методом частиц в ячейках. Полномасштабное моделирование частиц в ячейках современных экспериментов по термоядерному синтезу требует использования конечно-разностных схем, в которых временные шаги превышают период самых быстрых электронных колебаний на плазменных или даже циклотронных частотах, а пространственные шаги не должны разрешать радиус Дебая. Этому требованию удовлетворяют неявные схемы, способные сохранять полную энергию системы. Модель частиц в ячейках, представленная в рамках работы над проектом, основана на энергосберегающем полунеявном подходе в качестве предсказательного шага и новом методе подавления электростатического шума, присущего ему, в качестве корректирующего шага. Этот двухшаговый алгоритм обеспечивает не только точное сохранение энергии, но и точное локальное выполнение закона Гаусса.

Научное содержание работы:

Постановка задачи.

Основной проблемой при численном моделировании установок для управляемого термоядерного синтеза является огромный динамический диапазон между микро- и макромасштабами исследуемых процессов. Наиболее подробное кинетическое описание плазмы можно получить, используя модели частиц в ячейках (PIC), требующие разрешения ларморовского вращения электронов или их быстрых колебаний на плазменной частоте на протяжении всего времени эксперимента.

Использование стандартных явных схем здесь ограничивается не только малым шагом по времени, который посредством условия Куранта–Фридрихса–Леви привязан к пространственному шагу, обычно разрешающему дебаевский радиус в плазме, но и накоплением со временем численных ошибок, связанных с неточным сохранением энергии. В последние годы появилось множество неявных схем интегрирования системы уравнений Власова–Максвелла, обладающих хорошей устойчивостью даже при больших шагах по времени. Их можно разделить на две группы: полностью неявные и полунеявные схемы. В первом случае уравнения движения частиц и уравнения Максвелла для полей решаются совместно с помощью нелинейных итераций Ньютона–Крылова, а энергия системы может сохраняться с любой наперёд заданной точностью. В полунеявном подходе вычислительный цикл строится так же, как и в явных PIC-схемах, а отклик частиц на поле в будущем учитывается в уравнениях Максвелла через линейный ток. В то время как в прямом неявном методе (Direct Implicit Method или DIM) и неявном методе моментов (Implicit Moment Method или IMM) отклик частиц является линейным только приближённо, что приводит к несохранению энергии, в полунеявном методе Лапенты (Energy Conserving Semi-Implicit Method или ECSIM) линейность тока не является результатом каких-либо приближений, что позволяет точно сохранить энергию на дискретных шагах по времени. Однако стоит заметить, что выбранный в оригинальном методе ECSIM способ вычисления тока несовместим с выполнением уравнения непрерывности, а значит, и закона Гаусса, что приводит к повышенному уровню электростатических шумов. В нашей работе была предложена новая модель, в которой одновременное сохранение энергии и заряда было предложено достигать за счёт использования дополнительного этапа кор рекции, на котором удовлетворяющий закону Гаусса ток вычислялся по предсказанным положениям частиц. Таким образом мы получили инструмент для моделирования тех режимов плазмы, которые нас интересовали.

На суперкомпьютере НГУ планировалось проводить вычислительные эксперименты по моделированию плазмы в магнитных ловушках с высоким бета, а также тестировать параллельные алгоритмы.

Современное состояние проблемы.

Одним из наиболее востребованных инструментов теоретического исследования удержания термоядерной плазмы в магнитных ловушках стало численное моделирование, которое позволяет в деталях изучить различные стадии формирования и поддержания чисто полоидального магнитного поля (field-reversed configuration, FRC) в ловушках, имея при этом полную информацию сразу о всех параметрах и частях моделируемой плазмы. Главная трудность данного подхода состоит в том, что достаточно длительный процесс установления равновесия необходимо моделировать, разрешая быстрое циклотронное вращение частиц. Из-за этого исследователями используются различные упрощённые подходы к моделированию плазмы. Наименее ресурсоёмкий подход состоит в рассмотрении плазмы в магнитогидродинамическом (МГД) приближении. Данный метод позволяет моделировать длительные времена эксперимента, но в нём полностью исключены кинетические эффекты, учёт которых является критически важным при исследовании формирования FRC, в особенности в рамках интересующего нас метода с использованием пучков атомарных частиц. В некоторой степени учесть кинетические эффекты, отчасти сохранив возможность моделирования больших

временных масштабов, возможно, используя гирокинетические модели. Однако общим недостатком указанных моделей является их неспособность правильно описывать области с околонулевым магнитным полем, появление которых и является целью экспериментов по FRC. В данном случае наиболее корректное моделирование возможно с помощью полностью кинетической модели на базе метода частиц в ячейках (particle-in-cell, PIC). Этот подход позволяет моделировать одновременно и области с высоким магнитным полем (магнитные пробки открытой ловушки и пространство вокруг зоны FRC), и области с нулевым магнитным полем в центре сформировавшегося FRC. Основным его недостатком является высокая ресурсоёмкость, приводящая к тому, что использование столь точной модели обычно ограничивается небольшими временами моделируемых процессов в упрощённой 2D геометрии и практически неприменимо для моделирования полных масштабов установки. Распространённым способом частично преодолеть проблему высокой ресурсоёмкости PIC кодов, сохранив возможность исследования кинетических эффектов, является использование гибридных кодов, в которых часть компонент (например, ионы плазмы и инжектируемого пучка) рассматриваются в рамках PIC подхода, а часть (электроны плазмы) – в рамках МГД. Одним из перспективных направлений моделирования плазмы в рассматриваемых системах является использование сохраняющего энергию алгоритма решения уравнения движения частиц, который позволяет избежать возникновения численных неустойчивостей из-за малой по сравнению с шагом сетки длины Дебая. Данная отличительная особенность делает возможным использовать в PIC коде крупную расчётную сетку, допускающую моделирование с помощью существующих вычислительных ресурсов больших объёмов плазмы на длительных временах. Этот алгоритм реализован в коде Large Scale Plasma (LSP) и успешно применялся, в частности, для моделирования обращения магнитного поля в системе с вращающимся магнитным полем (rotating magnetic field, RMF).

Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

Для устранения недостатков ECSIM модели мы сформулировали схему предиктор-корректор для стандартной пространственной сетки Δx , существенно модифицируя корректирующий шаг. В нашем варианте предсказание неизвестных величин на новом временном шаге основано на сохраняющем энергию методе ECSIM, а сохранение заряда обеспечивается переходом к току, вычисляемому напрямую из уравнения непрерывности с помощью метода декомпозиции плотности Есиркепова. В отличие от остальных работ, коррекция подвергается не только электрическое, но и магнитное поле, а сам метод легко обобщается на случай генерации тока несколькими сортами частиц.

Эта схема была реализована в коде Beren3D для моделирования динамики плазмы в открытых ловушках с высоким β ; с помощью этого кода на примере задачи вейбелевской неустойчивости было показано сохранение полной энергии системы до 10^{-13} . Однако в процессе реализации данной модели мы столкнулись с тем, что заполнение разреженной матрицы для решения системы уравнений Максвелла затрудняет использование параллельных алгоритмов, обычно применяющихся при реализации метода частиц. Действительно, представление разреженной матрицы, как правило, включает в себя несколько массивов, один из которых хранит значения ненулевых элементов, а другие — их положение в матрице. Поскольку элементы матрицы определяются координатами и скоростями модельных частиц, то при

параллельной обработке частиц возникает необходимость одновременного обновления всех массивов, представляющих матрицу. Это приводит к необходимости синхронизации большого объёма данных, так как каждая частица вносит вклад сразу в несколько элементов. Таким образом, построение матрицы занимает основную часть вычислений. Например, в некоторых работах отмечено, что построение подобной матрицы занимает 90 % всего времени расчёта (в 10 раз больше, чем перемещение частиц, и в 30 раз больше, чем решение СЛАУ). В данной работе мы разработали параллельный алгоритм, связывающий частицы с матрицей на вычислительной сетке таким образом, чтобы избежать конкуренции данных и лишних синхронизаций в матрице. Также нами был предложен специальный алгоритм хранения, поиска и вставки элементов, основанный на неупорядоченном словаре, который позволяет существенно ускорить заполнение матрицы. А поскольку в разработанной нами схеме с сохранением энергии и заряда необходимо решение 2-х СЛАУ, мы предложили переписать большую часть вычислений в матрично-векторном виде, что позволило свести основные параллельные вычисления к умножению матрицы на вектор и сложению векторов, а также использовать стандартные библиотеки для работы с линейной алгеброй.

Полученные результаты.

Создана новая 3D PIC модель для моделирования режимов удержания плазмы с высоким относительным давлением в открытых ловушках. В основе модели лежит полунеявный метод (Energy Conserving Semi-Implicit Method, ECSIM), в котором явный двигатель частиц комбинируется с неявным линейным решателем уравнений Максвелла. Данный метод сохраняет энергию, а также устойчив по отношению к большим пространственным и временным шагам, превышающим длину Дебая и период плазменных колебаний электронов, однако не совместим с локальным выполнением закона Гаусса, из-за чего подвержен повышенной генерации электростатического шума. Показано, что на сетке Y_{ee} этот шум оказывается настолько велик, что существенно влияет на развитие неустойчивости Вейбеля в анизотропной плазме. Для одновременного выполнения и закона сохранения энергии, и закона Гаусса предложено использовать двухстадийную схему предиктор-корректор, в которой для предсказания величин на новом временном шаге используется метод ECSIM, а на стадии коррекции ток, который не удовлетворяет уравнению непрерывности, заменяется на ток, вычисляемый с помощью метода декомпозиции плотности Езиркепова. Для восстановления закона сохранения энергии по новому току происходит пересчёт электрического и магнитного поля, а также перенормировка скоростей частиц, так что работа, совершаемая новым полем над новым током в каждой ячейке пространственной сетки, оказывается равна новой кинетической энергии частиц из этой ячейки. Показано, что такой метод позволяет не только делать коррекцию скоростей частиц локальной (то есть учитывать работу только того локального поля, которое реально действует на частицу), но и вводить свои коэффициенты коррекции для каждого сорта частиц. Установлено, что важной особенностью реализации данного метода на сетке Y_{ee} является необходимость использования различных форм-факторов частиц: если на этапе ECSIM частица описывается линейным (PIC) ядром, то при вычислении тока Езиркепова нужно использовать более плавное параболическое ядро. В противном случае предсказанный и скорректированный токи дают ненулевой вклад в различное количество узлов сетки, что приводит к необходимости сильной локальной

коррекции полей и развитию численной неустойчивости при отклике частиц на эту коррекцию. Показано, что с этапом коррекции (при одновременном сохранении заряда и энергии) модель сильно давит электростатический шум и правильно воспроизводит как линейный инкремент, так и уровень нелинейного насыщения неустойчивости Вейбеля. С вычислительной точки зрения этап коррекции является весьма экономичным, приводя к замедлению вычислительного цикла ECSIM менее чем на 10%.

Иллюстрации, визуализация

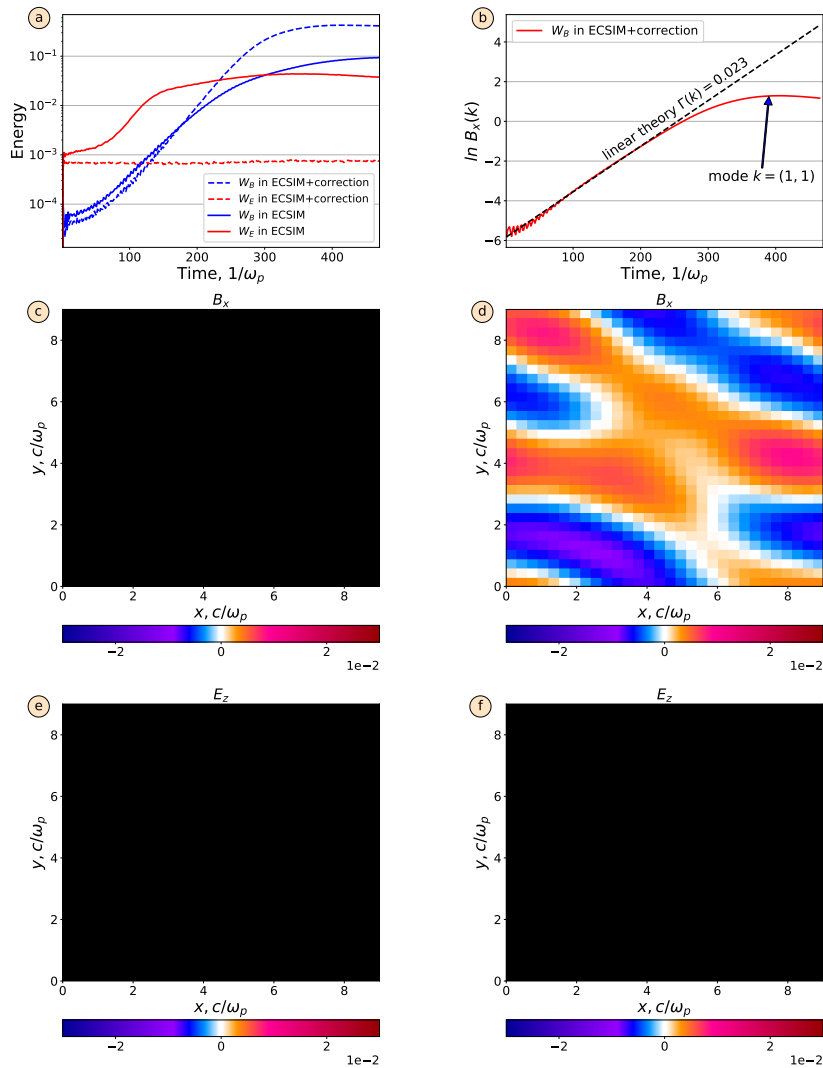


Рисунок 1. Результаты PIC моделирования Вейбелевской неустойчивости: (a) энергия электрического и магнитного поля для ECSIM модели с корректирующим шагом и без, (b) сравнение теоретически предсказанного роста неустойчивости с полученным в результате моделирования, (c) карта магнитного поля $B_x(x,y)$ для ECSIM модели в один из моментов времени, (d) подобная карта $B_x(x,y)$ для ECSIM с коррекцией, (e) карта поля $E_z(x,y)$ в тот же момент времени для ECSIM, (f) подобная карта поля $E_z(x,y)$ для ECSIM модели с коррекцией.

Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Для решение поставленной задачи необходима большая вычислительная мощность, поскольку требуется рассчитывать траектории миллиардов модельных частиц. В

рамках выполнения проекта активно использовался кластер НГУ.

Перечень публикаций, содержащих результаты работы (если есть). Указать импакт-фактор журнала (Thomson Reuters, РИНЦ,...).

Berendeev E.A., Timofeev I.V., Kurshakov V.A. Energy and charge conserving semi-implicit particle-in-cell model for simulations of high-pressure plasmas in magnetic traps // Comput. Phys. Commun. -- 2024. -- Vol. 295. -- Article N° -- 109020.

Ваши впечатления от работы вычислительной системы и деятельности ИВЦ НГУ, а также Ваши предложения по их совершенствованию.