

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

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН

Для решения ряда задач физики плазмы (например, моделирование осесимметричных магнитных ловушек) целесообразно использовать цилиндрическую систему координат. Однако, при построении алгоритмов на основе метода частиц в ячейках, в цилиндрической геометрии возникает ряд особенностей, существенно снижающих эффективность параллельных вычислений. В данной работе на примере задачи моделирования динамики плазмы в осесимметричной ловушке-мишени рассматривается несколько алгоритмов, позволяющих устранить особенности, возникающие при использовании цилиндрической системы координат. С помощью предложенного подхода удалось достичь масштабируемости задачи до нескольких тысяч вычислительных ядер и рассчитать параметры мишенной плазмы во всей области ловушки.

Ключевые слова: физика плазмы, метод частиц в ячейках, высокопроизводительные вычисления.

1. Введение

В настоящей работе предлагается рассмотреть осесимметричную плазменную ловушку-мишень с инверсными магнитными пробками и мультипольными магнитными стенками, разработанную в ИЯФ СО РАН для нейтрализации пучков отрицательных ионов [1]. Инжекция мощных пучков нейтральных атомов является основным методом накопления и нагрева удерживаемой в магнитном поле высокотемпературной плазмы. Атомы в плазме теряют слабосвязанные электроны и становятся высокотемпературными ионами, поэтому создание источников атомарных пучков является важной частью проблемы управляемого термоядерного синтеза.

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 с низкотемпературной плазмой способны обеспечить высокую степень нейтрализации (более 85% [1]), однако для этого необходим эффективный способ удержания плазмы необходимой плотности в цилиндрической установке. Для детального изучения динамики плазмы и эффективности ее удержания необходимо как проведение лабораторных экспериментов, так и численное моделирование.

В качестве исходной математической модели рассматривается система, состоящая из уравнения Больцмана для функций распределения частиц и уравнений Максвелла для электромагнитных полей. Для решения этих уравнений используется комбинация метода частиц в ячейках с методом Монте-Карло. Поскольку мишень имеет форму цилиндра, целесообразно рассматривать задачу в двумерной постановке в цилиндрических координатах R и Z , при этом учитываются все три компоненты полей и скоростей частиц (2D3V постановка). Такая постановка позволяет существенно снизить вычислительные затраты (в декартовых координатах потребовалось бы решать полностью трехмерную задачу) и избежать нефизических эффектов, связанных с вычислительной сеткой в аксиальной плоскости. В то же время, в цилиндрической системе координат ячейки сетки имеют разный объем, а центр масс ячейки не совпадает с ее центром. Это приводит к тому, что стандартные подходы к определению плотности заряда и решению уравнений Максвелла либо не применимы, либо не поддаются распараллеливанию.

* Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов № 14-01-00392, 15-31-20150, 16-31-00304, 16-01-00209, 16-07-00916). Разработка вычислительных алгоритмов проведена при поддержке гранта РНФ № 14-11-00485.

2. Математическая модель

2.1. Плазменная ловушка-мишень

Рассмотрим построение математической модели для описания динамики плазмы в ловушке-мишени. Мишенная плазма представляет собой цилиндрический столб плазмы, удерживаемый в магнитной ловушке магнитными полями достаточной длины и апертуры для прохождения нейтрализуемого пучка отрицательных ионов. Удержание плазмы магнитным полем представляет собой непростую задачу. Требуется создать магнитное поле, способное удерживать мишенную плазму, и геометрия которого способна подавлять неустойчивости плазмы. Особо необходимо хорошее удержание плазмы от истечения в торцевые отверстия-пробки, иначе вытекающая через них плазма вынесет большое количество газа, и потребуются чрезвычайно производительная система откачки. В осесимметричной магнитной ловушке в качестве торцевых пробок используются инверсные пробки, в которых создается продольное магнитное поле с противоположным направлением относительно поля во всей ловушке между пробками. С помощью мультипольных магнитных стенок, сформированных последовательностью кольцевых магнитов с переменной намагниченностью, формируется поле, препятствующее радиальным потерям плазмы.

Модель ловушки 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. Схема ловушки приведена на рисунке 1.

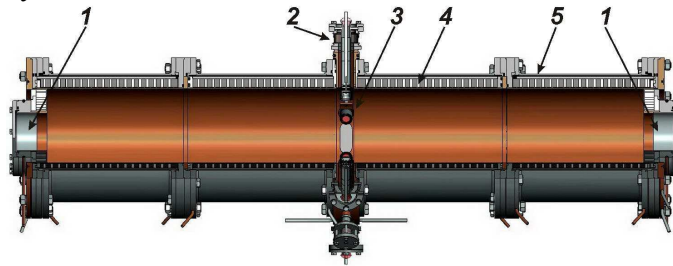


Рис. 1. Схема плазменной ловушки-мишени. (1) – широкоапертурные отверстия для прохождения нейтрализуемого пучка, (2) – катодный блок, (3) – один из шести катодов, (4) – постоянные магниты, (5) – магнитный экран.

В ловушке с магнитным полем происходит запираение электронов, поэтому важно в расчетах учитывать фазовое распределение, область потерь и область удержания. Математическое 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. При этом наиболее полно динамика плазменных электронов может быть описана уравнением Больцмана для функций распределения

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

и системой уравнений Максвелла с самосогласованными электромагнитными полями [2]:

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

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

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

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

Здесь индексом α обозначается сорт частиц (ионы и электроны), $\vec{p} = m\gamma\vec{v}$ - релятивистский импульс частицы, $St\{f_\alpha\}$ - функция, описывающая следующие физические процессы:

- ионизация атомов водорода катодными электронами $H + e^- \rightarrow H^+ + 2e^-$,
- ионизация молекул водорода катодными электронами $H_2 + e^- \rightarrow H_2^+ + 2e^-$,
- ионизация ионами H^+ атомов водорода $H_2 + H^+ \rightarrow H_3^+ + H$

2.2. Решение основных уравнений

Для решения системы (1-5) используется комбинация метода частиц в ячейках [3] и метода Монте-Карло. Чтобы описать физические эффекты, происходящие во всей ловушке с высокой точностью, необходимо использовать не менее 10^9 модельных частиц и не менее 10^6 узлов сетки, что требует применения высокопроизводительной техники. Такие требования к модели вызваны сложной конфигурацией магнитного поля, многокомпонентностью плазмы, а также необходимостью учитывать ионизацию газа и истечение плазмы из ловушки.

Решение уравнения Больцмана методом расщепления сводится к решению уравнения Власова и корректировке траекторий частиц с учетом физических процессов с использованием метода Монте-Карло [4].

Движение частиц происходит согласно характеристикам уравнения Власова по leap-frog схеме, обеспечивающей второй порядок точности:

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

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

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.

Для того чтобы избежать особенностей у оси, используется локальное преобразования из декартовых координат в цилиндрические – схема Бориса [5].

Для моделирования процесса ионизации используется вероятность столкновения заряженной частицы с нейтральными атомами. Если столкновение произошло, в расчетную область добавляются частицы с необходимыми параметрами.

Вероятность столкновения для j -ой частицы, имеющей скорость v_j , за время Δt может быть рассчитана по формуле [6]

$$P_j = 1 - \exp(-\Delta s_j \sigma(\varepsilon_j) n_j(\vec{r}_j)), \quad (8)$$

где $\Delta s_j = v_j \Delta t$, $\sigma(\varepsilon_j)$ – сечение столкновения, ε_j – кинетическая энергия j -ой частицы, n_j – локальная плотность частиц соответствующего сорта.

Решение уравнений Максвелла (2-3) осуществляется по схеме Лангдона-Лазински [7]:

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

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

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

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

Сеточные операторы div_h и rot_h строятся таким образом, чтобы уравнения (11-12) выполнялись в отсутствие зарядов. Этого можно достичь, определив электрические и магнитные поля на сдвинутых друг относительно друга сетках.

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

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

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

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.

Как показано в [8], при таком способе вычисления плотности тока и плотности заряда уравнения (10) и (11) несогласованны, и не выполняется уравнение неразрывности

$$\frac{\rho^{m+1} - \rho^m}{\tau} + \text{div}_h \vec{j}^{m+1/2} = 0. \quad (15)$$

Поэтому в общем случае необходимо скорректировать значение плотности тока для выполнения уравнения (15). Этот метод описан в [5].

На первом этапе определим электрическое поле \vec{E} по схеме (10) с неуточненным 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

$\vec{E} = \vec{E}^* - \nabla_h \delta\Phi$, где $\delta\Phi$ - поправка к электрическому потенциалу. Используя уравнение (11) можно определить $\delta\Phi$, решив уравнение Пуассона

$$\Delta_h \delta\Phi = \text{div}_h \vec{E}^* - \rho.$$

После этого можно получить окончательное значение \vec{E} и приступить к нахождению магнитного поля по схеме (9).

Такой метод является более ресурсоемким, поскольку требует решение уравнения Пуассона, кроме того, существенно усложняет построение параллельного алгоритма на основе декомпозиции области.

Для того чтобы избежать решения уравнения Пуассона и корректно находить сеточные значения напряженности электрических и магнитных полей, необходимо изначально потребовать выполнения уравнения неразрывности (15), тогда уравнение (11) выполнено в любой момент времени, если $\text{div}_h \vec{E}^0 = \rho^0$. В работах [9-11] для некоторых функций R вычисления плотности тока и плотности заряда были согласованы в соответствии с (15). Однако, основным условием такого согласования является симметрия ядра

$$R((x, y, z), (x_j(t), y_j(t), z_j(t))) = S(x, x_j(t)) * S(y, y_j(t)) * S(z, z_j(t)).$$

В цилиндрической системе координат такой симметрии нет и функция R в узле с номером (i, l, k) имеет вид:

$$R((r_i, \varphi_l, z_k), (r_j, \varphi_j, z_j)) = \begin{cases} \frac{1}{V_i} * \frac{r_{i+1}^2 - r_j^2}{r_{i+1}^2 - r_i^2} * \frac{h_\varphi - |\varphi_l - \varphi_j|}{h_\varphi} * \frac{h_z - |z_k - z_j|}{h_z}, \\ \quad r_i < r_j < r_{i+1}, |\varphi_l - \varphi_j| < h_\varphi, |z_k - z_j| < h_z. \\ \frac{1}{V_i} * \frac{r_{i-1}^2 - r_j^2}{r_{i-1}^2 - r_i^2} * \frac{h_\varphi - |\varphi_l - \varphi_j|}{h_\varphi} * \frac{h_z - |z_k - z_j|}{h_z}, \\ \quad r_{i-1} < r_j < r_i, |\varphi_l - \varphi_j| < h_\varphi, |z_k - z_j| < h_z. \\ 0, \quad \text{иначе} \end{cases} \quad (16)$$

где $V_i = 2\pi r_i h_\varphi h_z$ - объем ячейки. Мы не рассматриваем здесь случай $r=0$, поскольку он не влияет на дальнейшее построение параллельного алгоритма и может быть рассмотрен независимо.

В данной работе мы рассмотрим вычисление функции плотности тока через прямое решение уравнение неразрывности. Поскольку в исходной постановке задачи необходимо учитывать все три компоненты скорости, то и уравнение неразрывности необходимо рассматривать в трехмерном пространстве, с последующим устранением зависимости от φ .

Рассмотрим функцию ядра частицы (16) как комбинацию трех одномерных ядер

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

И запишем уравнение неразрывности в узле (i, l, k) для промежутка времени $[t^m, t^{m+1}]$, 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 $(v_r^{m+1/2}, v_\varphi^{m+1/2}, v_z^{m+1/2})$

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{i,l,k}^{m+1} - \rho_{i,l,k}^m}{\tau} &= \frac{1}{\tau} \int_{t^m}^{t^{m+1}} \frac{d}{dt} \rho_{i,l,k}(t) dt = \frac{1}{\tau} \int_{t^m}^{t^{m+1}} \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{V_i} SR(r_i, r_j(t)) * SP(\varphi_l, \varphi_j(t)) * SZ(z_k, z_j(t)) \right) dt = \\ &= \frac{1}{\tau V_i} \int_{t^m}^{t^{m+1}} \left(-v_r^{m+1/2} \frac{d}{dr} (SR(r_i, r_j(t))) * SP(\varphi_l, \varphi_j(t)) * SZ(z_k, z_j(t)) \right) dt + \\ &+ \frac{1}{\tau V_i} \int_{t^m}^{t^{m+1}} \left(-v_\varphi^{m+1/2} \frac{d}{d\varphi} (SP(\varphi_l, \varphi_j(t))) * SR(r_i, r_j(t)) * SZ(z_k, z_j(t)) \right) dt + \\ &+ \frac{1}{\tau V_i} \int_{t^m}^{t^{m+1}} \left(-v_z^{m+1/2} \frac{d}{dz} (SZ(z_k, z_j(t))) * SR(r_i, r_j(t)) * SP(\varphi_l, \varphi_j(t)) \right) dt \end{aligned} \quad (17)$$

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

Введем следующие операторы:

$$\Delta f = f^{m+1} - f^m, \quad \delta f = \frac{f^{m+1} + f^m}{2}$$

и выполним переход от $[t^m, t^{m+1}]$ 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 (17), получим

$$\begin{aligned} &\frac{1}{V_i} \int_{-1/2}^{1/2} \left(v_r^{m+1/2} \frac{2r(t)}{r_{i+1}^2 - r_i^2} SP(\varphi_l, \varphi_j(t)) SZ(z_k, z_j(t)) \right) dt + \\ &+ \frac{1}{V_i} \int_{-1/2}^{1/2} \left(v_\varphi^{m+1/2} \frac{1}{h_\varphi} SR(r_i, r_j(t)) SZ(z_k, z_j(t)) \right) dt + \frac{1}{V_i} \int_{-1/2}^{1/2} \left(v_z^{m+1/2} \frac{1}{h_z} SR(r_i, r_j(t)) SR(z_k, z_j(t)) \right) dt = \quad (18) \\ &= \frac{2 * v_r^{m+1/2}}{V_i * (r_{i+1}^2 - r_i^2) h_\varphi h_z} * \left(\delta r * (\varphi_{l+1} - \delta \varphi) (z_{k+1} - \delta z) + \frac{\Delta r \Delta \varphi (z_{k+1} - \delta z) + \Delta z \Delta \varphi \delta r + \Delta r \Delta z (\varphi_{l+1} - \delta \varphi)}{12} \right) + \end{aligned}$$

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

$$+ \frac{v_z^{m+1/2}}{V_i * (r_{i+1}^2 - r_i^2) h_{\varphi} h_z} * \left((r_{i+1}^2 - \delta r * \delta r)(\varphi_{k+1} - \delta \varphi) + \frac{\Delta r \Delta r (\varphi_{k+1} - \delta \varphi) + 2 * \Delta r \Delta \varphi \delta r}{12} \right)$$

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

$$\frac{r_{i+1/2} JR_{i+1/2,l,k}^{m+1/2} - r_{i-1/2} JR_{i-1/2,l,k}^{m+1/2}}{r_i h_r} + \frac{JP_{i,l+1/2,k}^{m+1/2} - JP_{i,l-1/2,k}^{m+1/2}}{r_i h_{\varphi}} + \frac{JZ_{i,l,k+1/2}^{m+1/2} - JZ_{i,l,k-1/2}^{m+1/2}}{h_z} = - \frac{\rho_{i,l,k}^{m+1} - \rho_{i,l,k}^m}{\tau} \quad (19)$$

Пользуясь тем, что вне ячейки тока нет [8], получаем

$$JR_{i-1/2,l,k}^{m+1/2} = JP_{i,l-1/2,k}^{m+1/2} = JZ_{i,l,k-1/2}^{m+1/2} = 0.$$

Пользуясь (18) и (19) и переходя к двумерному случаю, получим все три компоненты плотности тока:

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

$$JP_{i,k}^{m+1/2} = \frac{r_i v_{\varphi}^{m+1/2}}{V_i * (r_{i+1}^2 - r_i^2) h_z} * \left((r_{i+1}^2 - \delta r * \delta r)(z_{k+1} - \delta z) + \frac{\Delta r \Delta r (z_{k+1} - \delta z) + 2 * \Delta r \Delta z \delta r}{12} \right) \quad (20)$$

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

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

В случае, если частица перемещается между ячейками, то можно использовать алгоритмы распределения плотности тока между ячейками, описанные в [8,12]

Заметим, что уравнение (17) справедливо для любого ядра конечного размера, поэтому все выкладки, полученные выше, можно обобщить на все типы конечного размера ядер и любую систему координат.

Таким образом, решение уравнений (1-5) разбивается на два этапа – на первом, лагранжевом этапе происходит движение частиц по схеме (7), с учетом столкновений (8). Затем, на эйлеровом этапе определяются значения электромагнитных полей из уравнений Максвелла, на основе плотности тока, полученной по формуле (20).

2.3 Алгоритм параллельных вычислений.

Прямое вычисление плотности тока по формуле (20) требует решения уравнения Пуассона только в начальный момент времени и в дальнейшем все сеточные величины зависят только от значений в соседних узлах сетки на предыдущем временном шаге. Это дает возможность выполнить декомпозицию области, сводя все коммуникации только между границами подобластей, и достичь высокой масштабируемости параллельных алгоритмов.

Таким образом, можно построить следующий алгоритм параллельных вычислений, основанный на эйлерово-лагранжевой декомпозиции. Область решения разбивается вдоль координаты Z на несколько подобластей. 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. На основе этого подхода, авторами статьи разработан параллельный алгоритм с учетом статической балансировки вычислительной нагрузки, позволяющий добиться высокой масштабируемости до нескольких тысяч вычислительных ядер [13]

Как показано в работе [13], при расчете динамики $5 * 10^9$ частиц на сетке $512 * 1024$ ускорение при использовании 128 ядер по сравнению с 1024 составляет 7,71.

На данной задаче также была проверена масштабируемость полученного алгоритма относительно 128 процессорных ядер. Результаты вычислительных экспериментов приведены в таблице 1.

Параметры расчетов:

Число частиц $2,5 \cdot 10^9$, размер сетки 512×1024 .

Расчеты проводились с использованием суперкомпьютеров – «Ломоносов» (Московский государственный университет), NKS-30T (Сибирский суперкомпьютерный центр СО РАН), кластера Новосибирского государственного университета.

Таблица 1. Масштабируемость алгоритма на различных архитектурах

Количество используемых процессорных ядер	Время расчета одного шага, с. / ускорение относительно 128 ядер		
	Ломоносов МГУ, Intel Xeon X5570 2932 Mhz	Кластер НГУ, Intel Xeon X5670 2932 Mhz	НКС-30Т, Intel Xeon E5540 2530 Mhz
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 расчета 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. В дальнейшем планируется увеличить число используемых процессоров до десятка тысяч по аналогии с [13] и использовать ускорители Intel Xeon Phi.

3. Результаты моделирования

Для адекватного воспроизведения магнитного поля ловушки требуется шаг пространственной сетки h не более 0,1 мм. Таким образом, при размере области 1355 мм x 99.6 мм, выбрана сетка 13550×996 узлов. В расчетах использовалось до $5 \cdot 10^9$ модельных частиц. Была рассчитана плотность ионов H^+ во всей ловушке (Рис. 2)

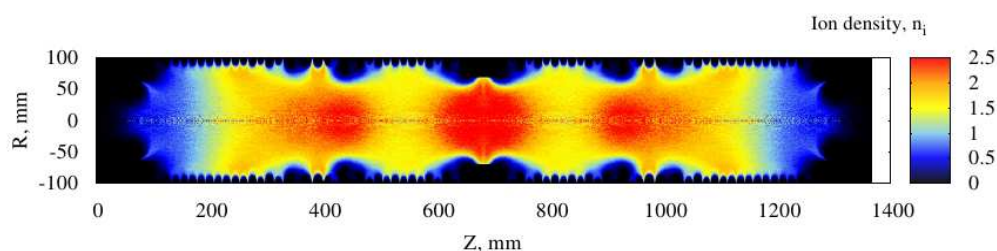


Рис. 2. Плотность ионов H^+ в ловушке, $n_i = 5,72 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$. Момент времени 10^{-5} с .

Из рисунка 2 видно, что ионы распространяются до самой оси ловушки, обеспечивая высокую плотностью плазмы. При этом значение плотности ионов по оси может отличаться в несколько раз, но интеграл плотности по осевой координате должен соответствовать требуемому значению. Также важно, чтобы в области пролета пучка (до 5 см от оси ловушки) 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 ловушки (Рис. 3.)

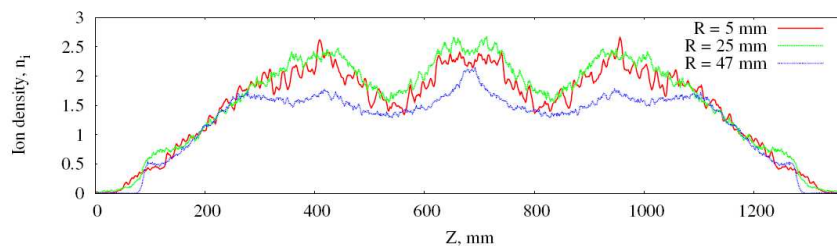


Рис. 3. Плотность ионов H^+ в области пролета пучка для различных значений радиуса, $n_i = 5,72 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$. Момент времени 10^{-5} с .

Из рисунка 3 видно, что интегральные значения плотности по оси при удалении от оси существенно не изменяются. Таким образом, эффективно нейтрализуется 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.

Также для оценки эффективности удержания плазмы было рассчитано распределение частиц в области магнитных пробок ловушки.

Радиальное распределение плотности ионов в области магнитных пробок ($Z=1296 \text{ мм}$) приведено на рис 4.

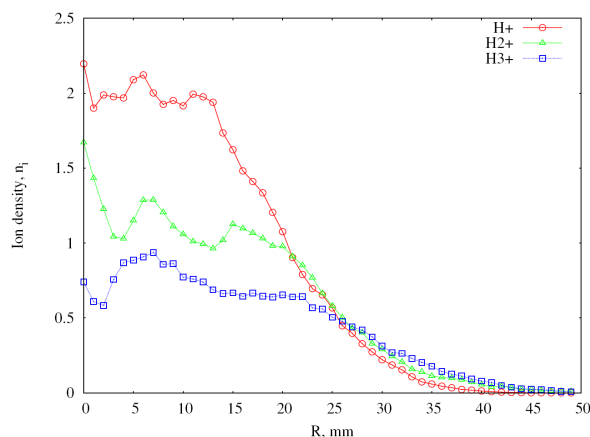


Рис. 4. Радиальная плотность ионов H^+ , H_2^+ , H_3^+ , $n_i = 5,72 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$.

Как видно из рисунка, плотность ионов быстро падает по радиусу, при этом ионы H_2^+ и H_3^+ более размазаны по радиусу. Тем не менее, при радиусе 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 в работе [14].

Результаты расчетов плотности плазмы на оси в области магнитной пробки представлены на рис. 5. Наблюдается ступенчатое падение плотности всех ионных компонент плазмы вдоль оси в области инверсной магнитной пробки. Этот результат также полностью соответствует наблюдениям работы [14].

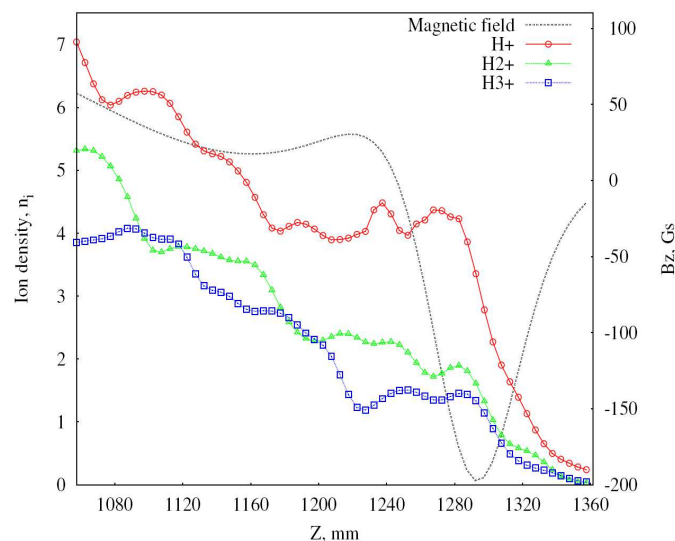


Рис. 5. Плотность ионов H^+ , H^{2+} , H^{3+} на оси, $n_i = 5,72 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ и распределение Z -компоненты магнитного поля.

Достигнутая в расчетах средняя плотность плазмы составила до $2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$. Именно такой плотности предполагается достичь на создаваемой ловушке.

4. Заключение

Разработана математическая модель ловушки-мишени для высокоэффективной нейтрализации мощных пучков отрицательных ионов. Модель построена на основе комбинации метода частиц в ячейках и метода Монте-Карло и описывает удержание столба плазмы в вакуумной камере магнитным полем сложной геометрии. Для расчета плотности тока в цилиндрической системе координат на основе уравнения неразрывности были получены прямые формулы, не требующие корректировки электрического поля с помощью уравнения Пуассона. Это позволяет избавиться от глобальной зависимости по данным и построить масштабируемый до нескольких тысяч вычислительных ядер параллельный алгоритм.

Использование современных суперкомпьютеров позволило рассчитать динамику плазмы, определить потоки плазмы в торцевые отверстия ловушки. Результаты расчетов показали, что образующаяся плазма имеет достаточную степень однородности и заполняет практически всю длину ловушки.

С помощью численных 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.

Также показано формирование на оси ловушки достаточно широкого (около 50 мм в диаметре) столба плазмы, имеющего плотность порядка 10^{13} см^{-3} .

Таким образом, на основе построенной математической модели и эффективных вычислительных алгоритмов еще до проведения лабораторных экспериментов удалось сделать важные оценки характеристик плазменной ловушки. В дальнейшем планируется взаимное уточнение результатов моделирования и эксперимента, оптимизация магнитной системы ловушки для достижения ее высоких параметров.

Литература

1. G.I. Dimov, A.V. Ivanov. A plasma trap as a target for neutralization of the negative ion beam. // Transactions of the Fusion Science and Technology 2013, 63, (1T May) P. 111-114.
2. A.A. Vlasov. Many-Particle Theory and Its Application to Plasma. Gordon and Breach, 1961.

3. C. K. Birdsall, A. B. Langdon. *Plasma Physics via Computer Simulation*. McGraw-Hill, 1985.
4. Birdsall C.K. Particle-in-Cell Charged-Particle Simulation Plus Monte Carlo Collisions With Neutral Atoms, PIC-MCC// *IEEE Trans. Plasma Sci.*1991. Vol. 19, No. 2. P. 65-83.
5. Boris J.P. Relativistic plasma simulation - optimization of a hybrid code // *Fourth Conference on numerical Simulation of Plasmas*. Washington, 1970. P. 3-67.
6. V. Vahedi, M. Surendra. A Monte Carlo collision model for the particle-in-cell method: applications to argon and oxygen discharges // *Comput. Phys. Comm.*, 87 (1995), P. 179-198.
7. Langdon A.B, Lasinski B.F. Electromagnetic and relativistic plasma simulation models // *Meth. Comput. Phys.* 1976, Vol. 16. P. 327-366.
8. Вшивков В.А., Вшивков К.В., Дудникова Г.И. Алгоритмы решения задачи взаимодействия лазерного импульса с плазмой // *Вычислительные технологии*, Т. 6. № 2, 2001, с. 47-63.
9. T. Zh. Esirkepov, Exact charge conservation scheme for Particle-in-Cell simulation with an arbitrary form-factor, *Computer Physics Communications* 2001. Vol. 135. P. 144-153.
10. Villasenor J., Buneman O. Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solver // *Computer Phys. Comm*, 1992, Vol. 69. P. 306-316.
11. Regine Barthelme. Conservation de la charge dans les codes PIC. // *Comptes rendus – Mathématique*. 2005, Vol. 341, Issue 11. P 689-694
12. T. Umeda, Y. Omura, T. Tominaga, H. Matsumoto, A new charge conservation method in electromagnetic particle-in-cell simulations, *Computer Physics Communication* 2003, 156, Issue 1, P. 73-85.
13. Берендеев Е.А., Боронина М.А., Корнеев В.Д. Параллельный алгоритм решения задач динамики заряженных частиц с учетом балансировки вычислительной нагрузки. // *Вестник ЮУрГУ. Серия “Вычислительная математика и информатика”* 2014, т. 3, № 1, с 97-112.
14. Dimov, G. I., Emelev, I. S. Experiments to study the confinement of a target plasma in a magnetic trap with inverse plugs and circular multipole walls. // *Technical Physics*, 2014, Vol. 59, Issue 2, P. 181-189.

The features of using the cylindrical geometry for solution of the plasma physics problems with the particle-in-cell method

E.A. Berendeev, M.A. Boronina, V.A. Vshivkov, A.A. Efimova

Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS

A big number of problems in plasma physics (for example, for axially symmetric magnet traps) reasonably requires the usage of the cylindrical coordinate system. However, in the algorithms based on the particle-in-cell method, there are many peculiarities of the cylindrical geometry, which significantly reduce the effectiveness of the parallel computations. In the present work, few algorithms are considered with the aim to reduce the problems of the usage of the cylindrical coordinate system. As an example, the modeling of the plasma dynamics in the axially symmetric trap is considered. The new approach allowed to reach the scalability for few thousands of processor cores. The plasma parameters in the whole domain were found.

Keywords: plasma physics, particle-in-cell-method, high performance computing.

References

1. G.I. Dimov, A.V. Ivanov. A plasma trap as a target for neutralization of the negative ion beam. // Transactions of the Fusion Science and Technology 2013, 63, (1T May) P. 111-114/
2. A.A. Vlasov. Many-Particle Theory and Its Application to Plasma. Gordon and Breach, 1961.
3. C. K. Birdsall, A. B. Langdon. Plasma Physics via Computer Simulation. McGraw-Hill, 1985.
4. Birdsall C.K. Particle-in-Cell Charged-Particle Simulation Plus Monte Carlo Collisions With Neutral Atoms, PIC-MCC// IEEE Trans. Plasma Sci.1991. Vol. 19, No. 2. P. 65-83.
5. Boris J.P. Relativistic plasma simulation - optimization of a hybrid code // Fourth Conference on numerical Simulation of Plasmas. Washington, 1970. P. 3-67.
6. V. Vahedi, M. Surendra. A Monte Carlo collision model for the particle-in-cell method: applications to argon and oxygen discharges // Comput. Phys. Comm., 87 (1995), P. 179-198.
7. Langdon A.B, Lasinski B.F. Electromagnetic and relativistic plasma simulation models // Meth. Comput. Phys. 1976, Vol. 16. P. 327-366.
8. Vshivkov V.A., Vshivkov K.V., Dudnikova G.I. Algoritmy resheniya zadachi vzaimodeystviya lazernogo impul'sa s plazmoy (Numerical algorithms for laser pulse - plasma interaction) // Vychislitel'nye tekhnologii (Computational technologies), Vol. 6. № 2, 2001, P. 47-63.
9. T. Zh. Esirkeпов, Exact charge conservation scheme for Particle-in-Cell simulation with an arbitrary form-factor, Computer Physics Communications 2001. Vol. 135. P. 144-153.
10. Villasenor J., Buneman O. Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solver // Computer Phys. Comm, 1992, Vol. 69. P. 306-316.
11. Regine Barthelme. Conservation de la charge dans les codes PIC. // Comptes rendus – Mathématique. 2005, Vol. 341, Issue 11. P 689-694
12. T. Umeda, Y. Omura, T. Tominaga, H. Matsumoto, A new charge conservation method in electromagnetic particle-in-cell simulations, Computer Physics Communication 2003, 156, Issue 1, P. 73-85.
13. Berendeev E.A., Boronina M.A., Korneev V.D. Parallel'nyy algoritm resheniya zadach di-namiki zaryazhennykh chastits s uchetom balansirovki vychislitel'noy nagruzki. (Parallel algorithm for charge particles dynamics with load-balance calculations)// Vestnik YuUrGU. Seriya "Vychislit-

el'naya matematika i informatika" (Journal of South Ural State University. Computational mathematics and informatics) 2014, Vol. 3, № 1, P. 97-112.

14. Dimov, G. I., Emelev, I. S. Experiments to study the confinement of a target plasma in a magnetic trap with inverse plugs and circular multipole walls. // *Technical Physics*, 2014, Vol. 59, Issue 2, P. 181-189.