

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«НОВОСИБИРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ» (НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ, НГУ)

Факультет **ФИЗИЧЕСКИЙ**

Кафедра физики плазмы

---

Направление подготовки **03.04.02 ФИЗИКА**

Образовательная программа: **МАГИСТРАТУРА**

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА**

Федоренков Эдуард Александрович

---

(Фамилия, Имя, Отчество автора)

Тема работы Моделирование кинетики нейтрального газа в расширителе открытой ловушки

---

**«К защите допущена»**

Заведующий кафедрой

канд. физ.-мат. наук,

в.н.с., ИЯФ СО РАН

Беклемишев А. Д./.....  
(фамилия И., О.) / (подпись, МП)

«.....».....20...г.

**Научный руководитель**

канд. физ.-мат. наук,

в.н.с., ИЯФ СО РАН

Беклемишев А. Д./.....  
(фамилия И., О.) / (подпись, МП)

«.....».....20...г.

Дата защиты: «.....».....20...г.

Новосибирск, 2020

# Оглавление

1	Введение . . . . .	3
1.1	Физика расширителя газодинамической ловушки . . . . .	3
1.2	Моделирование газа в расширителе . . . . .	4
1.3	Моделирование парных столкновений в газе . . . . .	6
2	Общее описание метода . . . . .	10
2.1	Пространственно неоднородная задача . . . . .	10
2.2	Локальные упругие столкновения . . . . .	11
2.3	Трансляционная симметрия тензоров $\Gamma_{ij}^{kl}$ и $G_i^{kl}$ . . . . .	13
2.4	Корректировка законов сохранения . . . . .	14
2.5	Алгоритм решения столкновительного шага . . . . .	15
3	Алгоритмы вычисления матрицы $G_0^{kl}$ . . . . .	15
3.1	Алгоритм первого порядка точности вычисления интеграла столкновений . . . . .	15
4	Численные тесты . . . . .	18
4.1	Тест 1: Сравнение численного решения с точным решением уравнения Больцмана . . . . .	18
4.2	Тест 2: Релаксация к равновесию газа упругих шаров . . . . .	20
5	Выводы . . . . .	22
	Список литературы . . . . .	23

## Введение

### Физика расширителя газодинамической ловушки

Газодинамическая ловушка (ГДЛ) — установка для исследования магнитного удержания горячей плазмы. В ГДЛ плазма состоит из двух компонент: мишенная и быстрые ионы. ГДЛ - ловушка открытого типа. Это означает что неизбежны потери плазмы вдоль установки. Мишенная плазма имеет максвелловское распределение и удерживается в газодинамическом режиме, то есть она вытекает с такой же скоростью, как и газ из небольшого отверстия. Быстрые ионы рождаются в результате мощной атомарной инжекции и передают энергию электронам мишенной плазмы. Удержание быстрых ионов определяется временем торможения на электронах. Это время сильнее всего зависит от температуры электронов, пропорционально  $T_e^{3/2}$ . Таким образом для улучшения продольного удержания быстрых ионов необходимо поддерживать высокую электронную температуру и обеспечить термоизоляцию электронной компоненты плазмы. Одним из возможных способов уменьшения потерь по электронному каналу является расширитель. Схема расширителя на установке ГДЛ приведена на рис. 1. В расширяющейся плазме

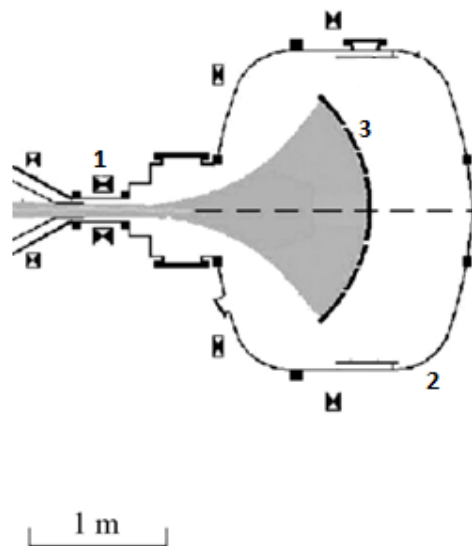


Рис. 1. Схема расширителя на установке ГДЛ. Здесь 1 - магнитная пробка, 2 - бак расширителя, 3 - плазмоприёмник.

устанавливается амбиполярный потенциал, который препятствует вытеканию электронов. Однако наличие прямого контакта вытекающей плаз-

мы с плазмоприемником, который представляет собой металлическую конструкцию, запускает множество элементарных процессов. Процессы в которых появляются новые свободные электроны потенциально могут вызывать большую опасность. Поскольку образовавшиеся холодные электроны могут свободно скатываться по амбиполярному потенциалу в центральную камеру, что приводит к снижению электронной температуры. Наиболее опасными процессами могут быть: эмиссия электронов с поверхности металла и ионизация нейтрального газа. В этой работе мы сосредоточим внимание на нейтральном газе в расширителе.

Нейтральный газ в расширителе ГДЛ образуется в процессе нейтрализации вытекающей плазмы. Предел по допустимой концентрации нейтрального газа в плазме расширителя был оценен для типичных параметров плазмы в ГДЛ. Этот предел весьма низок, порядка  $10^{12}$  см<sup>-3</sup>. Если действительно требуется откачка расширителя до такой низкой плотности, стоимость и габариты вакуумных систем для стационарных установок оказываются очень высокими. С целью исследовать, как нейтральный газ влияет на удержание плазмы, на ГДЛ был проведен следующий эксперимент. В расширитель, до начала зажигания плазмы, напускали нейтральный газ и изучали как это скажется на удержании плазмы. Результаты показали, что вплоть до начальной концентрации газа равной  $10^{14}$  см<sup>-3</sup>, качество продольного удержания не ухудшается [1]. Чтобы согласовать результаты эксперимента с оценкой была выдвинута гипотеза, что плазма вытесняет газ к стенкам так, что концентрация газа у стенок расширителя оказывается на несколько порядков больше концентрации газа в плазме. О справедливости этой гипотезы свидетельствуют также показания датчика плотности у стенки бака расширителя рис. 2. Для исследования того, как газ перераспределяется в расширителе, и проверки гипотезы мы начали построение теоретической модели.

## Моделирование газа в расширителе

Ранее мы разработали простую модель нагрева газа за счет упругих столкновений с плазмой [2, 3]. Геометрия была максимально упрощена. Мы рассматривали бесконечный стационарный плазменный цилиндр окруженный газом. Газ влетающий в плазму имеет максвеллов-

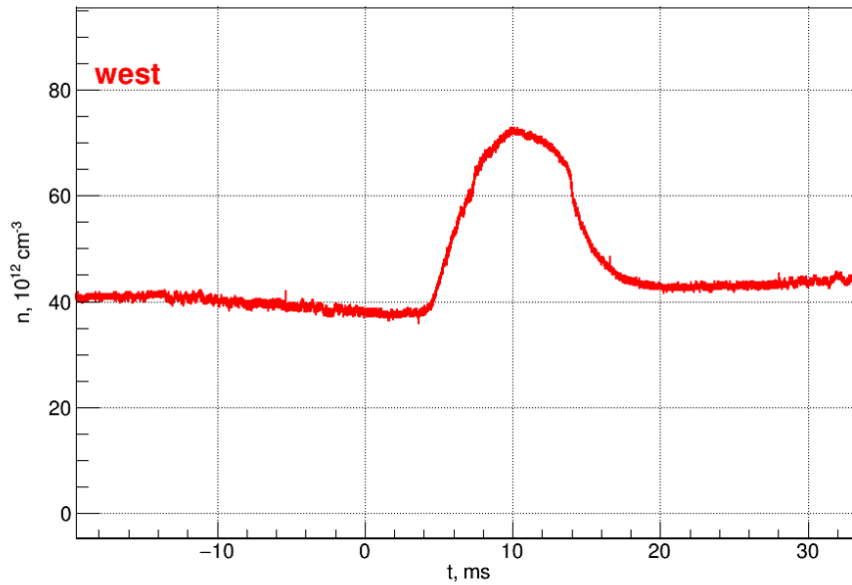


Рис. 2. Плотность газа у стенки расширителя. Время отсчитывается от зажигания плазмы. Обратимое возрастание концентрации у стенки во время разряда согласуется с гипотезой о вытеснении газа из объема плазмы.

ское распределение, он испытывает однократное столкновение с плазмой и вылетает из плазменного столба. Вне плазмы решаются уравнения газовой динамики. На границе плазмы сшиваются потоки частиц, импульса и энергии. Стационарное распределение плотности газа в этой модели показано на рис. 3. Плотность имеет скачок на границе плазмы.

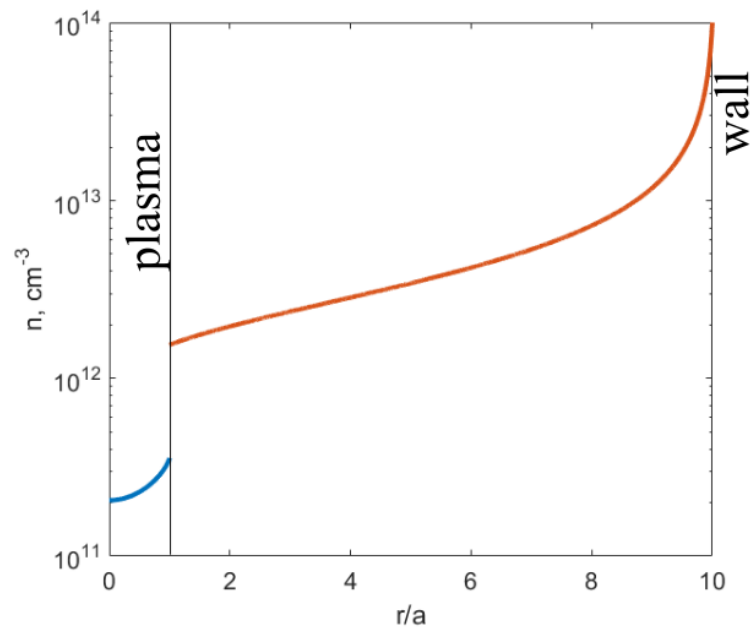


Рис. 3. Радиальный профиль плотности газа.  $a$  - радиус плазмы

Это связано с резким переходом от кинетики к гидродинамике. В модели предполагается, что газ максвеллизировался на границе плазмы за счет собственных столкновений. Это допущение является существенным

недостатком модели, поскольку на границе плазмы плотность газа низкая и длина свободного пробега весьма велика. Функция распределения газа в результате столкновений с плазмой становится сильно неравновесной, и для более реалистичной модели нужно включить в нее процесс релаксации к равновесному распределению за счет упругих столкновений газа с газом. Кроме того, сечения возбуждения внутренних степеней свободы газа, а также процессы ионизации и диссоциации для типичных параметров плазмы и газа в расширителе меньше сечения упругих столкновений всего в несколько раз. Следовательно, для построения хорошей кинетической модели нужно учесть процессы возбуждения, диссоциации и ионизации. Первый шаг в построении кинетической модели — это описание упругих столкновений газа. Этому и будет посвящена текущая работа.

## Моделирование парных столкновений в газе

Упругие столкновения газа учитываются кинетическим уравнением с интегралом столкновений Больцмана.

$$\frac{df}{dt} = \int \int B(u, \vec{n})(f(\vec{v}')f(\vec{w}') - f(\vec{v})f(\vec{w}))d^2nd^3w, \quad (1)$$

где  $f$  - функция распределения газа,  $\vec{n}$  - направление рассеяния,  $\vec{u}$  - относительная скорость сталкивающихся частиц,

$$\vec{v}', \vec{w}' = \frac{1}{2}(\vec{v} + \vec{w}) \pm \frac{1}{2}u\vec{n}, \quad (2)$$

$\vec{v}, \vec{w}$  - скорости частиц до столкновения,  $\vec{v}', \vec{w}'$  - скорости частиц после столкновения.  $B(u, \vec{n})$  - ядро интеграла:

$$B(u, \vec{n}) = u \frac{d\sigma}{d\Omega}(u, \vec{n}), \quad (3)$$

$\frac{d\sigma}{d\Omega}(u, \vec{n})$  - дифференциальное сечение рассеяния, зависящее от относительной скорости и направления рассеяния.

Уравнение Больцмана в общем случае не имеет известных аналитических решений. Более того, в данном конкретном случае нет каких-

либо малых параметров, позволяющих упростить интеграл столкновений. Остается искать численное решение уравнения (1), наибольшую трудность в котором представляет вычисление правой части.

Наиболее распространенный способ, применяемый к подобным задачам, — метод Монте-Карло. Этот метод заключается в моделировании движения пробных частиц со случайными столкновениями с фоновым газом. В нашем случае распределение фонового газа неизвестно, что означает необходимость итераций. Кроме того, параметры физической модели явления соответствуют полустолкновительному режиму, когда длина свободного пробега в холодном газе вблизи стенки мала, а в том же газе вблизи плазмы сравнима с линейными размерами системы. При этом плотность газа меняется на два-три порядка. В таких условиях алгоритмы на основе методов Монте-Карло малоэффективны. Альтернативой является прямое вычисление интеграла столкновений. Есть два основных подхода: разложение функции распределения по конечному набору гладких ортогональных функций и модель дискретных скоростей.

Первый подход, по сути, является методом Галеркина, примененным к уравнению Больцмана. В качестве базисных функций в основном используют специальные наборы ортогональных полиномов или раскладывают в ряд Фурье. Разложение по полиномам широко используется в кинетике газа. В нелинейном случае этот метод получил развитие в работах Бернетта [4, 5] и Града [6]. В качестве набора функций обычно используют сферические полиномы Эрмита или полиномы Сонина. Разложение в ряд Фурье рассматривается в статье Парески и Руссо [7]. Приведенный ими спектральный алгоритм сохраняет число частиц, и в пределе сохраняет импульс и энергию. Достоинство всех этих алгоритмов в меньшей трудоемкости по сравнению с вычислением интеграла столкновений на сетке, поскольку коэффициентов в разложении функции распределения намного меньше чем узлов в трехмерной сетке. Основной недостаток алгоритмов в том, что не обеспечена неотрицательность функции распределения. Во всех подобных статьях в результатах вычислений наблюдаются отрицательные значения в хвостах функции распределения.

Во втором подходе предполагается, что пространство скоростей дис-

кретно  $\vec{v} = \Delta v \vec{n}$ , где  $\vec{n} \in \mathbb{Z}^3$ . С таким допущением интеграл столкновений Больцмана представим в виде бесконечной суммы

$$St(f, f)(v_i) \simeq \sum_j \sum_{k, l} \Gamma_{ij}^{kl} (f_k f_l - f_i f_j), \quad (4)$$

где  $f_i = f(v_i)$ , индексы  $i, j, k, l \in \mathbb{Z}^3$  - целочисленные векторы, нумерующие значения скоростей  $v_i, w_j, v'_k, w'_l$  из уравнения (1) на дискретной сетке. Суммирование по  $j$  заменяет интегрирование по  $\vec{w}$ , а сумма по  $k, l$  заменяет интегрирование по углам рассеяния  $\vec{n}$ . Тензор  $\Gamma_{ij}^{kl}$  обладает симметриями, отражающими физические свойства интеграла столкновений Больцмана, такие, как обратимость процесса и неизменность от перестановок частиц до и после столкновения

$$\Gamma_{ij}^{kl} = \Gamma_{kl}^{ij} = \Gamma_{ji}^{kl} = \Gamma_{ij}^{lk}. \quad (5)$$

Тензор  $\Gamma_{ij}^{kl}$  должен сохранять импульс и энергию в каждом элементарном акте столкновений:

$$\Gamma_{ij}^{kl} = 0, \text{ при } i + j \neq k + l \text{ или } i^2 + j^2 \neq k^2 + l^2 \quad (6)$$

Однако далеко не все схемы могут обеспечить свойство (6).

Метод впервые предложил Аристов в 1985 году, и более детально его можно изучить здесь [8]. Позднее Тан и другие предложили похожий метод [9]. В отличие от Аристова, они вычисляли стандартными методами численного интегрирования коэффициенты перед стоком и источником интеграла столкновений.

$$St(f, f)(v_i) \simeq \sum_{k, l} J_{kl}(v_i) f_k f_l - \sum_k \nu_k(v_i) f_k f_i, \quad (7)$$

В дальнейшем теоретически были показаны сходимость (4) к интегралу Больцмана [10], и сходимость решения в модели дискретных скоростей к решению уравнения Больцмана [11]. Бобылевым, Пальчевским и Шнейдером был предложен другой способ вычисления коэффициентов  $\Gamma_{ij}^{kl}$  [12], позволяющий точно выполнить законы сохранения числа частиц, импульса и энергии на бесконечной сетке, в отличие от способа предло-



женного Аристовым. Однако, на ограниченной сетке есть потери частиц, а если даже запретить такие процессы, то это приведет к не физическому взаимодействию функции распределения с границами сетки. Кроме того, в этом методе сечение эффективно заменяется на набор  $\delta$ -функций по энергиям и углам рассеяния, что не всегда хорошо, особенно на грубой сетке. Позднее Буэт разработал процедуру ускорения вычисления интеграла столкновений [13]. Однако, эта процедура вносит стохастичность, нарушая детерминированность метода. Позднее были предложены и другие процессы ускорения вычислений (например [14]). Сейчас метод развивается и усложняется путем решения уравнения Больцмана на неоднородных и динамических сетках, а также на основе этого метода решают системы кинетических уравнений, описывающие столкновения в смеси газов или неупругие процессы в газе [15].

Резюмируя подход дискретной модели скоростей следует отметить, что без использования различных ускорительных процедур сложность алгоритма ведет себя как  $O(N^2)$ , где  $N$  полное число узлов сетки скоростей. Это сильно увеличивает время вычислений на трехмерной сетке. А также требуется большой объем памяти для хранения вычисленных заранее коэффициентов  $\Gamma_{ij}^{kl}$ , даже с учетом их симметрии. Есть несколько отличающихся друг от друга конкретных реализаций этого метода, однако отличие по сути заключается в способе вычисления коэффициентов  $\Gamma_{ij}^{kl}$ . На практике все способы не могут обеспечить точную консервативность, поэтому в алгоритм добавляют корректирующий шаг, исправляющий ошибку в законах сохранения.

В этой работе будет продемонстрирован новый метод аппроксимации интеграла столкновений. Метод быстрый и консервативный, а также не требующий большого количества памяти для хранения коэффициентов в отличие от стандартных схем в модели дискретных скоростей. Будет показано как метод проходит тестовые задачи с релаксацией к максвелловскому распределению.

## Общее описание метода

Для построения кинетической модели газа в расширителе требуется решать пространственно неоднородное уравнение Больцмана.

### Пространственно неоднородная задача

Классический подход при решении подобных уравнений заключается в разделении столкновений (9) и бесстолкновительного транспорта (8) на два последовательных процесса.

Транспортный шаг

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = 0. \quad (8)$$

Столкновительный шаг

$$\frac{\partial f}{\partial t} = St(f, f). \quad (9)$$

Это позволяет, во-первых, решать задачу о столкновениях локально и независимо в каждой точке пространства, а во вторых, учитывать транспорт простым уравнением бесстолкновительного переноса, которое можно решать в произвольной геометрии методом конечных элементов. Решение пространственно неоднородного уравнения (1) будет аппроксимироваться с первым порядком точности по времени следующим образом

$$f(x, t) = S_c(\Delta t) S_t(\Delta t) S_c(\Delta t) \dots S_t(\Delta t) f(x, t = 0), \quad (10)$$

где  $S_c(\Delta t)$  и  $S_t(\Delta t)$  - операторы эволюции функции распределения на столкновительном и транспортном шаге за время  $\Delta t$ , соответственно. Второй порядок точности можно получить симметризацией каждой пары операторов  $S_c(\Delta t)$  и  $S_t(\Delta t)$

$$S_c(\Delta t) S_t(\Delta t) \rightarrow S_t(\Delta t/2) S_c(\Delta t) S_t(\Delta t/2) \quad (11)$$

В трехмерной геометрии оба шага представляют сложную задачу с точки зрения реализации. В этой работе мы сосредоточимся на более интересном с физической стороны столкновительном шаге.

## Локальные упругие столкновения

Пусть в области  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  пространства скоростей задана однородная сетка  $\mathbb{V}$  с шагом  $\Delta v$ .

$$\mathbb{V} = \left\{ v_{\vec{i}} \in \mathbb{R}^3 \mid v_{\vec{i}} = \Delta v \vec{i}, \text{ где } \vec{i} \in \mathbb{Z}^3 \right\}, \quad (12)$$

Обозначим  $f_{\vec{i}}$ , как значения функции распределения на сетке  $\mathbb{V}$ . Будем считать, что функция распределения между узлами сетки представима в виде линейной комбинации значений  $f_{\vec{i}}$ :

$$f(\vec{v}) = \alpha_{\vec{k}}(\vec{v}) f_{\vec{k}}, \quad (13)$$

коэффициенты  $\alpha_{\vec{k}}(\vec{v})$  зависят от скорости. Запись (13) охватывает случаи кусочно постоянной функции распределения и трилинейной интерполяции набора  $f_{\vec{i}}$ . В первом случае реальное значение скорости  $\vec{v}$  заменяется на ближайший узел сетки скоростей

$$\alpha_{\vec{k}}(\vec{v}) = \delta(\vec{v} - v_{\vec{k}}), \text{ где } \vec{k} : |\vec{v} - v_{\vec{k}}| \rightarrow \min. \quad (14)$$

Во втором случае значение скорости  $\vec{v}$  заменяется на восемь ближайших узлов кубической сетки с весами, определяемыми трилинейной интерполяцией набора  $f_{\vec{i}}$

$$\alpha_{\vec{k}}(\vec{v}) = \sum_{i=1}^8 \frac{V_i}{\Delta v} \delta(\vec{v} - v_{\vec{k}_i}), \text{ где } k_{j_i} : |v_j - v_{k_{j_i}}| < \Delta v. \quad (15)$$

Здесь  $V_i$  - объем прямоугольного параллелепипеда, диаметрально противоположного узлу  $v_{\vec{k}_i}$  (рис. 4). Подставим функцию распределения (13) в интеграл столкновений из уравнения (1)

$$St(f, f)(v_{\vec{i}}) \simeq \int \int B(u, \vec{n}) (\alpha_{\vec{k}}(\vec{v}') \alpha_{\vec{l}}(\vec{w}') - \alpha_{\vec{k}}(\vec{v}) \alpha_{\vec{l}}(\vec{w})) d^2 n d^3 w f_{\vec{k}} f_{\vec{l}}. \quad (16)$$

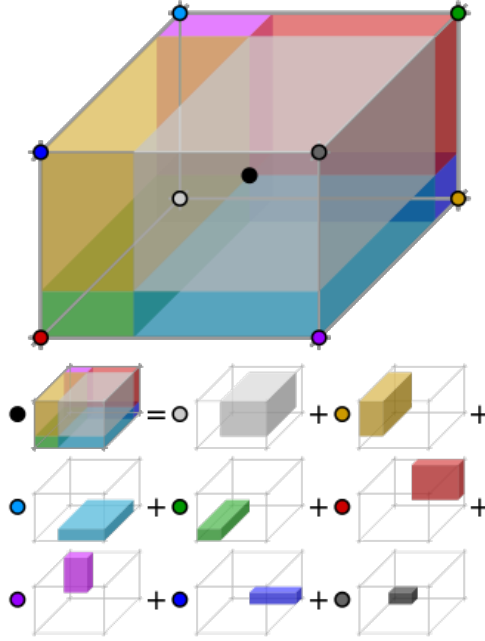


Рис. 4. Схема трилинейной интерполяции

Вычислив пятимерный интеграл (16), мы получим значение интеграла столкновений в  $i$ -ом узле в виде свертки

$$St(f, f)(v_i) \simeq G_i^{\vec{k}\vec{l}}(v_i) f_{\vec{k}} f_{\vec{l}} \equiv G_i^{\vec{k}\vec{l}} f_{\vec{k}} f_{\vec{l}} \quad (17)$$

Тензор  $G_i^{\vec{k}\vec{l}}$ , очевидно, обладает симметрией по двум верхним индексам. Однако даже с учетом этого на грубой сетке размера  $10 \times 10 \times 10$  нужно хранить порядка  $5 \cdot 10^8$  элементов. Занимаемый объем памяти коэффициентами  $G_i^{\vec{k}\vec{l}}$  меньше, чем коэффициентами  $\Gamma_{ij}^{\vec{k}\vec{l}}$ , однако по-прежнему очень большой для хранения их в оперативной памяти. По сути, аппроксимация интеграла столкновений (17) пока отличается от (4) только избавлением от суммирования по индексу  $\vec{j}$ . Коэффициенты  $G_i^{\vec{k}\vec{l}}$  можно получить из  $\Gamma_{ij}^{\vec{k}\vec{l}}$  следующим образом

$$G_i^{\vec{k}\vec{l}} = \sum_{\vec{j}} \Gamma_{ij}^{\vec{k}\vec{l}} - \sum_{\vec{n}, \vec{m}} \Gamma_{ik}^{\vec{n}\vec{m}} \delta_{i\vec{l}}, \quad (18)$$

где под суммированием по целочисленному вектору подразумевается суммирование по всем его компонентам

$$\sum_{\vec{j}} = \sum_{j_1, j_2, j_3} \quad (19)$$

Чтобы упростить метод, мы воспользуемся еще одной симметрией тензора  $G_{\vec{i}}^{\vec{k}\vec{l}}$ .

Трансляционная симметрия тензоров  $\Gamma_{ij}^{kl}$  и  $G_i^{kl}$

Если область  $\Omega$  в которой задана однородная сетка скоростей совпадает с  $\mathbb{R}^3$ , то тензор  $\Gamma_{ij}^{\vec{k}\vec{l}}$  со свойством (6) обладает трансляционной симметрией.

$$\Gamma_{\vec{i}+\vec{a},\vec{j}+\vec{a}}^{\vec{k}+\vec{a},\vec{l}+\vec{a}} = \Gamma_{\vec{i}\vec{j}}^{\vec{k}\vec{l}}, \text{ для любого } \vec{a} \in \mathbb{Z}^3. \quad (20)$$

Это свойство можно понять, рассмотрев сферу рассеяния с диаметрально противоположными точками  $\vec{i}$  и  $\vec{j}$ , которые в результате упругого столкновения перейдут в диаметрально противоположные точки  $\vec{k}$  и  $\vec{l}$  (рис. 5). Законы сохранения энергии и импульса не позволяют находиться точкам  $\vec{k}$  и  $\vec{l}$  вне сферы рассеяния. Сферу рассеяния можно сдвинуть на любой вектор  $\Delta v \cdot \vec{a}$ , где  $\vec{a} \in \mathbb{Z}^3$ . Поскольку сетка однородна и бесконечна, то узлы с координатами  $\vec{i}$ ,  $\vec{j}$ ,  $\vec{k}$ ,  $\vec{l}$  перейдут в узлы с координатами  $\vec{i} + \vec{a}$ ,  $\vec{j} + \vec{a}$ ,  $\vec{k} + \vec{a}$ ,  $\vec{l} + \vec{a}$ , лежащими на смещенной сфере рассеяния. Рассеяние  $(\vec{i}, \vec{j}) \rightarrow (\vec{k}, \vec{l})$  происходит на тот же угол и с той же относительной скоростью, что и рассеяние  $(\vec{i} + \vec{a}, \vec{j} + \vec{a}) \rightarrow (\vec{k} + \vec{a}, \vec{l} + \vec{a})$ . Следовательно, имеет место равенство (20). Учитывая связи коэффициентов  $G_{\vec{i}}^{\vec{k}\vec{l}}$  и  $\Gamma_{\vec{i}\vec{j}}^{\vec{k}\vec{l}}$  (18), тензор  $G_{\vec{i}}^{\vec{k}\vec{l}}$  тоже обладает трансляционной симметрией на бесконечной однородной сетке.

$$G_{\vec{i}+\vec{a}}^{\vec{k}+\vec{a},\vec{l}+\vec{a}} = G_{\vec{i}}^{\vec{k}\vec{l}}, \text{ для любого } \vec{a} \in \mathbb{Z}^3. \quad (21)$$

Это свойство позволяет вычислять интеграл столкновений с меньшим количеством коэффициентов. Достаточно вычислить только матрицу  $G_0^{kl}$ .

$$St(f, f)(v_{\vec{i}}) \simeq G_0^{\vec{k}-\vec{i}, \vec{l}-\vec{i}} f_{\vec{k}} f_{\vec{l}} \equiv G_0^{\vec{k}\vec{l}} f_{\vec{k}+\vec{i}} f_{\vec{l}+\vec{i}} \quad (22)$$

Это свойство не выполняется в ограниченной области. Однако при построении алгоритма мы потребуем сохранения этого свойства от коэффициентов  $G_{\vec{i}}^{\vec{k}\vec{l}}$ . Это допущение упростит вычисления, но нарушит законы сохранения. Чтобы выполнить законы сохранения точно, мы будем вносить в интеграл столкновений корректирующие добавки.

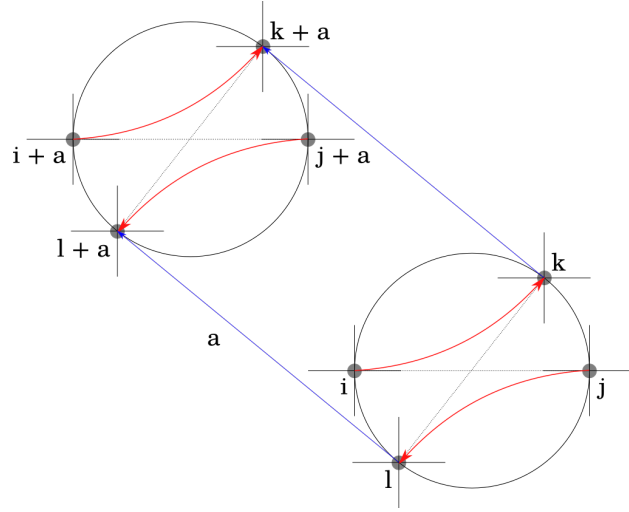


Рис. 5. Иллюстрация трансляционной симметрии коэффициентов  $\Gamma_{ij}^{kl}$  на бесконечной однородной сетке.  $i, j, k, l$  - узлы сетки на сфере столкновений,  $a$  - вектор смещений по однородной сетке.

## Корректировка законов сохранения

Сконструируем добавку к интегралу столкновений, зависящую от пяти параметров, которые определяются из законов сохранения числа частиц, импульса и энергии. Помимо этого, добавка должна сохранять неотрицательность функции распределения. Этого можно добиться, сделав добавку к интегралу столкновений, пропорциональную функции распределения. Это гарантирует неотрицательность и малое изменение функции распределения в той части фазового пространства, где она сама мала. Резюмируя все вышесказанное, будем изменять интеграл столкновений следующим образом:

$$\hat{S}t(\vec{v}) = St(\vec{v}) + (a + \vec{b} \cdot \vec{v} + cv^2)f(\vec{v}). \quad (23)$$

Коэффициенты  $a, \vec{b}, c$  определяются из следующих уравнений:

$$\begin{aligned} \int \hat{S}t(\vec{v})d^3v &= 0; \\ \int \vec{v}\hat{S}t(\vec{v})d^3v &= 0; \\ \int v^2\hat{S}t(\vec{v})d^3v &= 0. \end{aligned} \quad (24)$$

Эти уравнения являются линейной системой на искомые коэффициенты  $a, \vec{b}, c$ , что позволяет легко и быстро их находить.

## Алгоритм решения столкновительного шага

Учитывая все выше перечисленное, наш алгоритм решения уравнения (9) состоит из следующих шагов:

1. Выделяем границы области счета и задаем в ней однородную сетку скоростей. Используя данные о сечении и заданную сетку, вычисляем матрицу  $G_0^{\vec{k}\vec{l}}$ . Как именно это сделать будет показано в следующей главе.
2. В цикле по времени вычисляем по функции распределения  $f(t_n) \equiv f^n$  в момент времени  $t_n$  интеграл столкновений  $St(f^n, f^n)(v_i)$  согласно формуле (22).
3. Корректируем интеграл столкновений  $St(f^n, f^n)(v_i)$  согласно (23).
4. Получаем функцию распределения  $f(t_n + \Delta t)$  в момент времени  $t_{n+1}$ , как численное решение уравнения (9) по схеме Рунге-Кутты второго порядка точности.

## Алгоритмы вычисления матрицы $G_0^{kl}$

Пусть имеется трехмерная однородная сетка скоростей размера  $N \times N \times N$  в кубе  $[-V, V]^3$ . Далее мы продемонстрируем наш алгоритм вычисления матрицы  $G_0^{kl}$  в такой области. От способа вычисления матрицы  $G_0^{kl}$  зависит порядок точности вычисления интеграла столкновений. Здесь мы приведем метод первого порядка точности.

### Алгоритм первого порядка точности вычисления интеграла столкновений

Воспользуемся представлением функции распределения (13) с коэффициентами разложения (14). Одна из частиц до столкновения будет всегда находится в центре сетки со скоростью  $v_i = (0, 0, 0)$ . Вторая частица до столкновения пробегает все возможные  $N^3$  значений скорости

$v_j$ . Фиксированные значения  $v_i$  и  $v_j$  задают сферу столкновений. Согласно законам сохранения энергии и импульса скорости частиц после столкновения  $v_k$  и  $v_l$  должны лежать на этой сфере.

Для численного интегрирование по сфере рассеяния необходимо создать равномерной набор точек на сфере. Для этого мы использовали Spiral Sample Sphere алгоритм, который создает квазиравномерный набор точек на сфере. В этом алгоритме по заданному количеству точек  $M$ , подбираются параметры спирали, которая лежит на сфере, соединяя два ее полюса. После чего набор из  $M$  точек укладывается на спираль (рис. 6). С ростом  $M$  заполнение сферы становится более равномерным. В качестве полюсов мы выбираем узлы  $v_i$  и  $v_j$ . Набор точек на сфе-

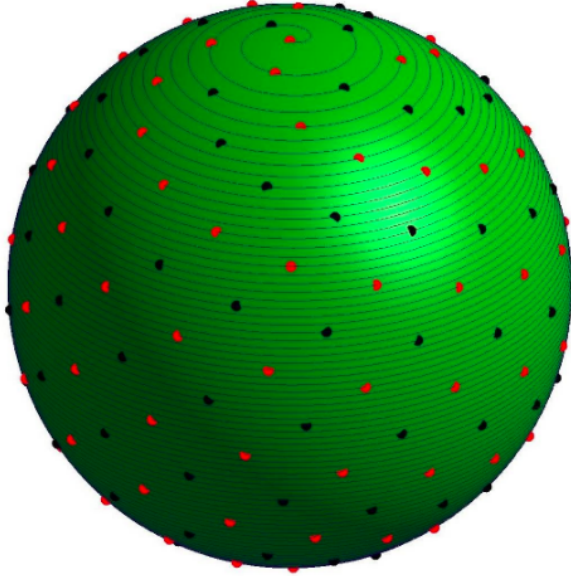


Рис. 6. Иллюстрация создания равномерного заполнения сферы алгоритмом Spiral Sample Sphere для числа точек  $M = 200$

ре задает набор направлений рассеяния  $\vec{n}_{ij}$ . Фиксируя направление, мы определяем пару скоростей частиц после столкновения  $(\vec{v}_k, \vec{v}_l)$  на сфере рассеяния. Если ни одна из скоростей не вышла за пределы сетки, то мы, согласно модели (14), находим ближайшие к этим скоростям узлы сетки (рис. 7). Обозначим индексы этих узлов  $\vec{k}$  и  $\vec{l}$ , и добавим в соответствующий элемент матрицы  $G_0^{\vec{k}\vec{l}}$  значение

$$G_0^{\vec{k}\vec{l}} = G_0^{\vec{k}\vec{l}} + B(|v_j|, \vec{n}_{ij})(\Delta v)^3 \frac{4\pi}{M}, \quad (25)$$

где  $B$  - ядро интеграла Больцмана,  $\Delta v$  - шаг сетки,  $(\Delta v)^3$  - элемент объема сетки скоростей,  $M$  - число точек на сфере рассеяния,  $4\pi/M$  -



элемент телесного угла, под знаком "=" подразумевается прямое присвоение (стандартное обозначения в языках программирования). Если хоть одна из скоростей  $\vec{v}_k, \vec{v}_l$  вышла за пределы сетки, то такой процесс учтен не будет.

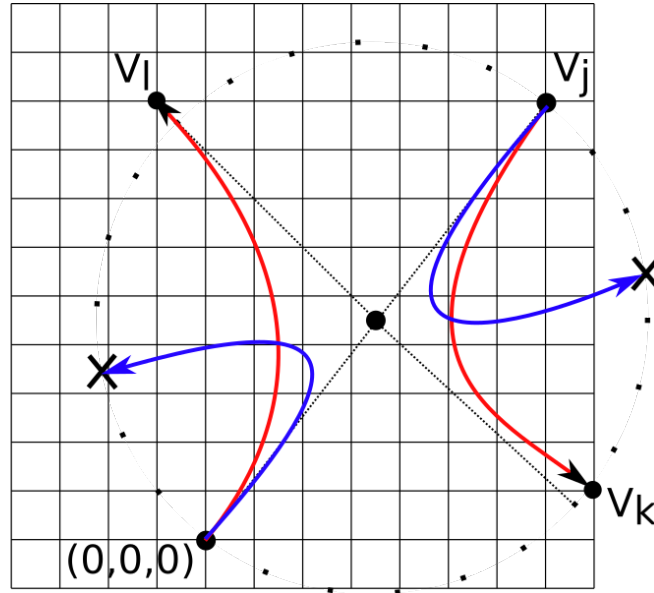


Рис. 7. Иллюстрация столкновений, учитывающихся при вычислении матрицы  $G_0^{kl}$  (красным цветом) и процессов, приводящих к вылету частиц за область вычислений, которые не учитываются (синим цветом).

В итоге, алгоритм первого порядка точности состоит из следующих шагов:

1. Для каждого узла сетки скоростей  $v_j$  создается набор возможных направлений рассеяния  $\vec{n}_{ij}$  с помощью алгоритма Spiral Sample Sphere.
2. Для каждого направления из множества  $\vec{n}_{ij}$  определяется пара скоростей после рассеяния  $(\vec{v}_k, \vec{v}_l)$ .
3. Проверка попадания скоростей  $(\vec{v}_k, \vec{v}_l)$  в область расчетов. Если хоть одна из скоростей вышла за пределы сетки, такой процесс не учитывается.
4. Если скорости  $(\vec{v}_k, \vec{v}_l)$  лежат в области счета, то находим ближайшие к ним узлы сетки. Обозначим их за  $\vec{k}$  и  $\vec{l}$ .
5. В элемент матрицы  $G_0^{\vec{k}\vec{l}}$  добавляем значение  $B(|v_j|, \vec{n}_{ij})(\Delta v)^3 4\pi/M$

Таким образом, сложность алгоритма вычисления матрицы  $G_0^{kl}$  можно оценить как  $O(MN^3)$ . Поиск узлов  $\vec{k}$  и  $\vec{l}$  выполняется за константное

время, поскольку сетка скоростей однородна. Следовательно, поиск узлов не вносит существенный вклад в сложность алгоритма.

Используя представление функции распределения (13) с коэффициентами разложения (15), теоретически можно добиться повышения порядка точности вычисления интеграла столкновений, однако нам пока не удалось реализовать это на практике.

## Численные тесты

Здесь мы приведем два теста кинетического кода основанного на описанном выше алгоритме и продемонстрируем результаты решения уравнения Больцмана.

### Тест 1: Сравнение численного решения с точным решением уравнения Больцмана

Уравнение Больцмана имеет единственное известное аналитическое решение найденное Бобылевым [16] и затем независимо Круком и Ву [17]. Решение получено для дифференциального сечения, имеющего специальный вид:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha}{u}, \quad (26)$$

где  $\alpha$  - постоянная величина,  $u$  - относительная скорость сталкивающихся частиц. Решение уравнения Больцмана с дифференциальным сечением (26) в безразмерных переменных имеет следующий вид:

$$f_{BKW}(t,v) = \frac{1}{2K(2\pi K)^{3/2}} \left[ 5K - 3 + \frac{1-K}{K}v^2 \right] \exp\left(-\frac{v^2}{2K}\right), \quad (27)$$

где

$$K = 1 - \exp\left(-\frac{t}{6}\right), \quad (28)$$

а время и скорость обезразмерены следующим образом:

$$\begin{aligned} t &\rightarrow 4\pi\alpha nt \\ v &\rightarrow v\sqrt{\frac{m}{T}} \end{aligned} \quad (29)$$

В вычислениях мы приняли  $n = 1$ ,  $\sqrt{m/T} = 1$ ,  $\alpha = 1/4\pi$ , а в качестве начального условия:

$$f(0,v) = f_{BKW}(t = 6 \ln(2.5), v) = \frac{25\sqrt{5}}{9(6\pi)^{3/2}} v^2 \exp\left(-v^2 \frac{5}{6}\right). \quad (30)$$

Результаты теста в виде сравнения численного и точного решения (27) показаны на рис. 8. При этом средняя относительная ошибка достигает

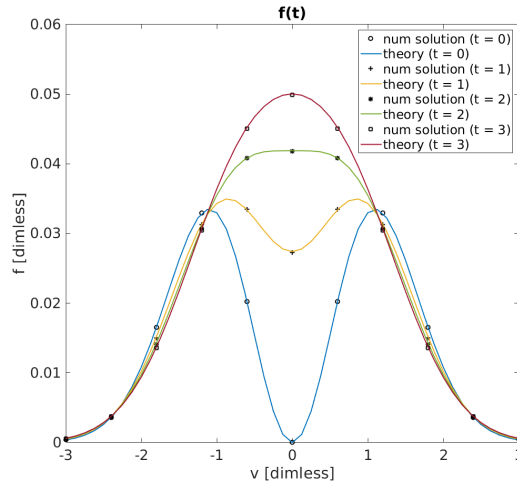


Рис. 8. Точное и численное решение уравнения Больцмана в зависимости от времени. Время отсчитывается от  $t = 6 \ln(2.5)$ .

порядка 10% (рис. 9). Рис. 8 построен при  $v_y = v_z = 0$ . Ошибка на рис. 8 явно меньше 10%. Это связано с тем, что ошибка распределена по области счета не равномерно. Во втором тесте мы продемонстрируем, что наибольшая ошибка сосредоточена в углах области счета.

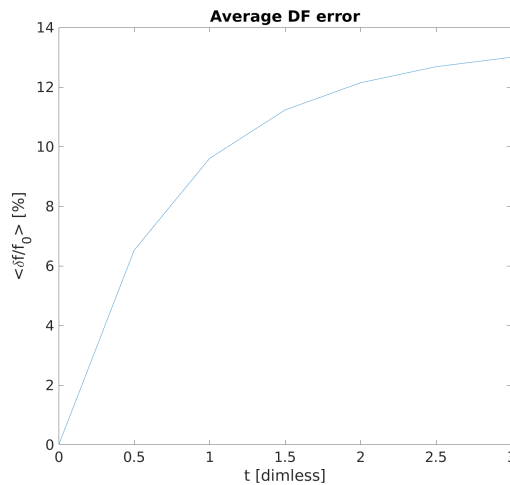


Рис. 9. Среднее по сетке отклонение численного решения от точного в процентах. Время отсчитывается от  $t = 6 \ln(2.5)$ .

## Тест 2: Релаксация к равновесию газа упругих шаров

В этом тесте наблюдаем релаксацию к максвелловскому распределению газа упругих шаров.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \text{const.} \quad (31)$$

В качестве начального условия было выбрано распределение

$$f_0 = \frac{n_0}{\pi^{3/2} v_{T_0}^3} \left( \frac{v_y}{v_{T_0}} \right)^2 \exp \left( -\frac{v^2}{v_{T_0}^2} \right) \quad (32)$$

С учетом законов сохранения это распределение релаксирует к максвелловскому с плотностью и температурой:

$$\begin{aligned} n &= \frac{n_0}{2}, \\ T &= \frac{5}{3} T_0, \end{aligned} \quad (33)$$

за характерное время:

$$\tau \sim \frac{1}{\sigma n v_T} \quad (34)$$

В моделировании были приняты следующие параметры:

$$\begin{aligned} n_0 &= 4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}, \\ T_0 &= 0.026 \text{ эВ} \\ \sigma &\simeq 1.3 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2 \\ \tau &\sim 1.4 \text{ мкс} \end{aligned} \quad (35)$$

Результаты численного решения представлены на рис. 10. Из них видно, что для данного начального распределения равновесие устанавливается за время порядка  $4\tau$ , а также видно что распределение остается стационарным. Относительное отклонение от максвелловской функции распределения представлено на рис. 11. Из графика видно, что самая большая ошибка в углах области счета и она составляет порядка 30%. Далеко от границ области расчетов ошибка порядка 5 – 10%

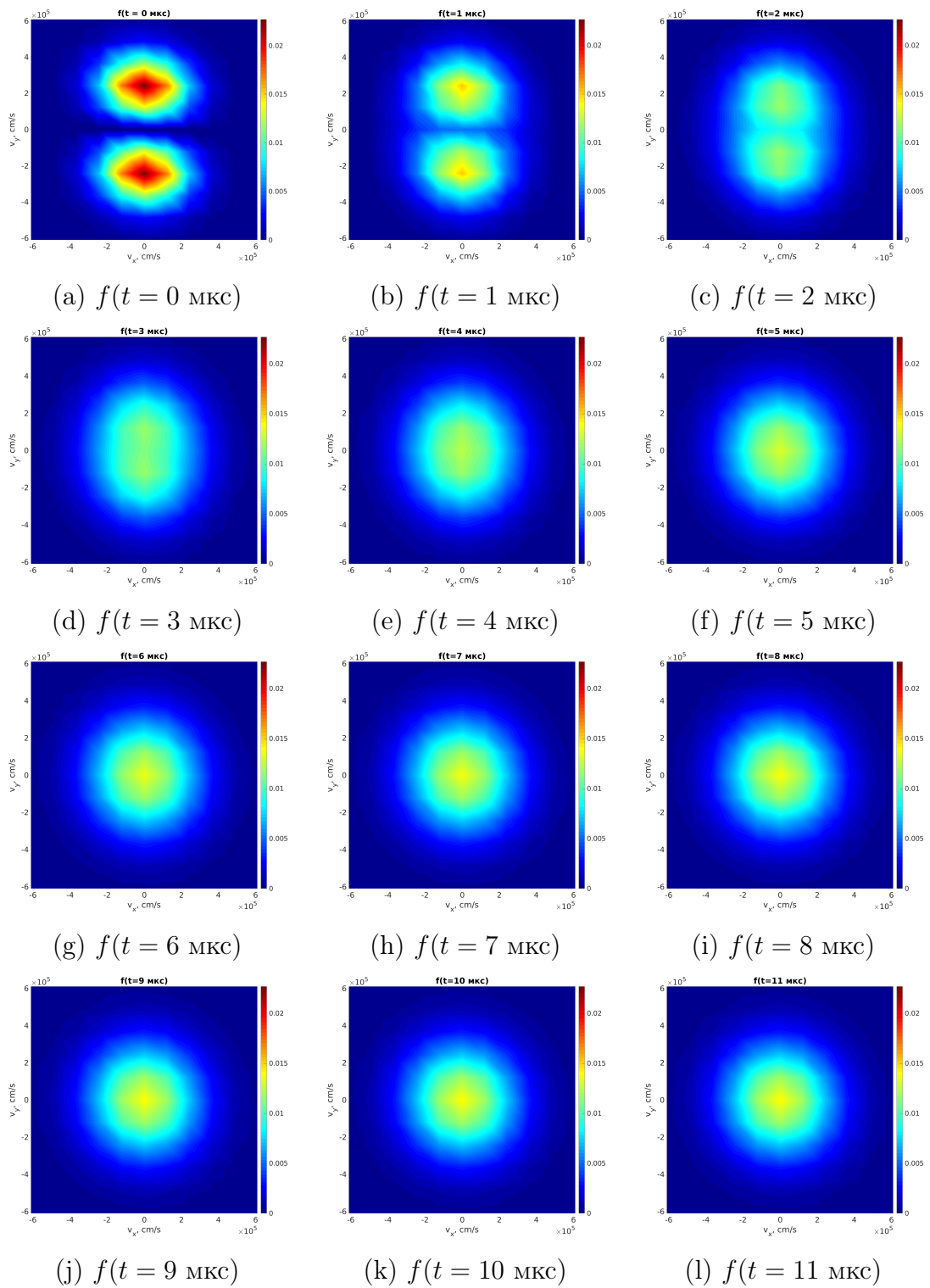


Рис. 10. Релаксация к равновесному распределению

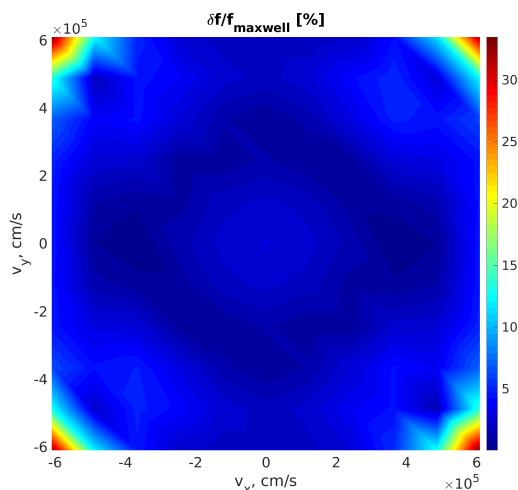


Рис. 11. Относительное отклонение численного решения от равновесной функции распределения в конце расчетов.

## Выводы

- Придуман, реализован на языке Матлаб и протестирован новый довольно быстрый и точный метод интегрирования уравнения Больцмана на грубой равномерной сетке, работающий даже на персональном компьютере.
- Эффективность метода достаточна для решения одномерной задачи для газа в расширителе. Эту задачу планируется решить на следующем этапе.
- Алгоритм допускает обобщение на неупругие процессы с разными сортами частиц и легко распараллеливается. Это позволяет надеяться на успешную адаптацию алгоритма к задаче с более реалистичным взаимодействием газа с плазмой в расширителе открытой ловушки.

## Список литературы

1. Плазменный семинар. П.А. Багрянский "Продольный транспорт энергии и физика расширителя в магнитной ловушке открытого типа"
2. Федоренков Э. А., Беклемишев А. Д. Кинетика взаимодействия газа с плазмой в расширителе открытой ловушки //XLVI Международная Звенигородская конференция по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу (ICPAF-2019). – 2019. – С. 196-196.
3. Федоренков Э. А., Беклемишев А. Д. Кинетика упругого взаимодействия нейтрального газа и плазмы в расширителе открытой ловушки //МНСК-2018: Физика сплошных сред. – 2018. – С. 91-91.
4. Burnett D. // Proc. London Math. Soc. 1935. Vol. 39. P. 385– 430.
5. Burnett D. // Proc. London Math. Soc. 1935. Vol. 40. P. 382– 435.
6. Grad H. // Comm. Pure Appl. Math. 1949. Vol. 2. P. 311.
7. Pareschi L., Russo G. Numerical solution of the Boltzmann equation I: Spectrally accurate approximation of the collision operator //SIAM journal on numerical analysis. – 2000. – Т. 37. – №. 4. – С. 1217-1245.
8. Aristov V. V. Solving the Boltzmann equation for discrete velocities //Akademiiia Nauk SSSR Doklady. – 1985. – Т. 283. – С. 831-834.
9. Tan Z. et al. New numerical strategy to evaluate the collision integral of the Boltzmann equation //Progress in Astronautics and Aeronautics. – 1989. – Т. 117. – С. 359-373.
10. Schneider J. Une méthode déterministe pour la résolution de l'équation de Boltzmann : дис. – Paris 6, 1993.
11. Palczewski A., Schneider J. Existence, stability, and convergence of solutions of discrete velocity models to the Boltzmann equation //Journal of statistical physics. – 1998. – Т. 91. – №. 1-2. – С. 307-326.

12. Bobylev A., Palczewski A., Schneider J. On approximation of the Boltzmann equation by discrete velocity models //Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série 1, Mathématique. – 1995. – T. 320. – №. 5. – C. 639-644.
13. Buet C. A discrete-velocity scheme for the Boltzmann operator of rarefied gas dynamics //Transport Theory and Statistical Physics. – 1996. – T. 25. – №. 1. – C. 33-60.
14. Płatkowski T., Waluś W. An acceleration procedure for discrete velocity approximation of the Boltzmann collision operator //Computers and Mathematics with Applications. – 2000. – T. 39. – №. 5-6. – C. 151-163.
15. Bobylev A., Vinerean-Bernhoff M. Discrete kinetic models and conservation laws. – 2006.
16. Bobylev A. V. Exact solutions of the Boltzmann equation //Akademiiia Nauk SSSR Doklady. – 1975. – T. 225. – C. 1296-1299.
17. Krook M., Wu T. T. Exact solutions of the Boltzmann equation //The Physics of Fluids. – 1977. – T. 20. – №. 10. – C. 1589-1595.