

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**  
**СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

Кафедра прикладної математики та моделювання складних систем

Допущено до захисту

Завідувач кафедри ПМ та МСС

\_\_\_\_\_ Коплик І.В.  
(підпис)

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2022 р.

**КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА**

на здобуття освітнього ступеня «бакалавр»

спеціальність 113 «Прикладна математика»

освітньо-професійна програма «Прикладна математика»

тема роботи: **«ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ ЧАСТИНОК В  
КОМІРКАХ (PIC) ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ ДВОПОТОКОВОЇ  
НЕСТІЙКОСТІ В ПЛАЗМОВОПОДІБНИХ СИСТЕМАХ»**

**Виконавець**

студент факультету ЕЛІТ

Піддубна Дарина Іванівна \_\_\_\_\_  
(підпис)

**Науковий керівник**

док. фіз.-мат. наук, професор

Лисенко Олександр Володимирович \_\_\_\_\_  
(підпис)

Суми – 2022

## РЕФЕРАТ

**Кваліфікаційна робота:** 39 с., 13 рисунків, 22 джерела.

**Мета роботи:** побудувати математичну та комп'ютерну моделі двопотокової нестійкості в зустрічних електронних пучках, використовуючи метод частинок в комірці; провести аналіз процесу двопотокової нестійкості.

**Об'єкт дослідження:** процес двопотокової нестійкості.

**Предмет дослідження:** фазові портрети системи, залежності імпульсу та енергії частинок від часу, генерація електростатичних хвиль

**Методи дослідження:** метод частинка в комірці (particle in the cell, PIC), методи математичної фізики для чисельного розв'язання рівнянь у частикових похідних, стандартні чисельні методи.

В роботі побудовано математичну та комп'ютерну моделі двопотокової нестійкості в електронних пучках, які рухаються назустріч один одному. Використано метод частинки в комірці. Побудовані фазові портрети системи в різні моменти часу. Визначено час, коли ламінарна течія електронних потоків перетворюється в турбулентну. Отримані залежності імпульсу, кінетичної та потенціальної енергій від часу. Знайдено час, коли перетворення кінетичної енергії в потенціальну енергію електростатичних хвиль є максимальним.

**Ключові слова:** МЕТОД ВЕЛИКИХ ЧАСТИНОК, МЕТОД ЧАСТИНКИ В КОМІРЦІ, ДВОПОТОКОВА НЕСТІЙКІСТЬ, ЕЛЕКТРОННИЙ ПУЧОК

## ЗМІСТ

<b>ВСТУП</b> .....	4
<b>1. МЕТОДИ ВЕЛИКИХ ЧАСТИНОК ТА ДВОПОТОКОВА НЕСТІЙКІСТЬ (ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ)</b> .....	5
<b>1.1 Загальна характеристика методів великих частинок</b> .....	5
<b>1.2 Метод частинка-частинка</b> .....	7
<b>1.3 Метод частинка в комірці (PIC)</b> .....	9
<b>1.4 Метод частинка-частинка-сітка</b> .....	10
<b>1.5 Двопотокowa нестійкість</b> .....	12
<b>2. МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ ДВОПОТОКОВОЇ НЕСТІЙКОСТІ МЕТОДОМ ЧАСТИНОК В КОМІРЦІ</b> .....	13
<b>2.1 Загальний метод частинки в сітці</b> .....	13
<b>2.2 Алгоритм розрахунку</b> .....	17
<b>3. РЕАЛІЗАЦІЯ КОМП'ЮТЕРНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ</b> .....	20
<b>3.1 Методика комп'ютерного експерименту. Комп'ютерний код</b> .....	20
<b>3.2 Результат комп'ютерного експерименту</b> .....	21
<b>ВИСНОВОК</b> .....	30
<b>ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕЛІЛ</b> .....	31
<b>ДОДАТКИ</b> .....	33
<b>ДОДАТОК А</b> .....	33
<b>ДОДАТОК В</b> .....	35
<b>ДОДАТОК С</b> .....	38
<b>ДОДАТОК D</b> .....	39

## ВСТУП

Для задач чисельного моделювання взаємодії випромінювання з плазмою останнім часом метод частинки в комірці (particle in the cell, PIC) знаходить велике застосування. Він дозволяє моделювати достатньо широкий клас прикладних задач.

Методи PIC (частинка в комірці) використовувалися ще 1955 року, навіть до появи перших компіляторів Fortran. Даний метод став популярним для моделювання плазми в період 1950-1960х років. Роботи Бунемана, Доусона, Хокні, Бердсолл, Морс та активно проводили дослідження в своїх роботах [1-4]. Метод великих частинок при використанні у фізиці плазми зводиться до відстеження траєкторій заряджених частинок у самоузгоджених електромагнітних полях, які розраховані на фіксованій сітці.

Останнім часом PIC моделювання також використовується в різних областях, таких як взаємодія лазер-плазма [5] і нелінійна променева плазмова взаємодія [6].

Перші моделі частинок електростатичної плазми були введені Бунеманом [10]. Ці моделі були одновимірними і не використовували сітку для розрахунків полів. Доусон в Принстоні та Елдріджа і Feix в 1962 році працювали над подібними моделями. Перший алгоритм particlemesh (PM) в одному вимірі був введений Бургером і у двох вимірах Хокні [1]. Вони використовували модель заряду найближчої точки сітки (NGP) та інтерполяцію поля в алгоритмі PM. Насправді, алгоритм PM — це модель плазми, яка використовує частинки кінцевого розміру або хмари. Однак алгоритми, що використовують такі частинки кінцевого розміру були розроблені Бірдсоллом і Ленгдоном [4].

Подана робота присвячена дослідженню двопотокової нестійкості методом частинка в комірці (PIC) Створена та досліджена система, що складається з двох електронних пучків, що рухаються назустріч один одному.

# 1. МЕТОДИ ВЕЛИКИХ ЧАСТИНОК ТА ДВОПОТОКОВА НЕСТІЙКІСТЬ (ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ)

## 1.1 Загальна характеристика методів великих частинок

Ідея методу частика в комірці (PIC) наступна. Частинки системи описуються рівняннями у повних похідних типу диференціальних рівнянь над лагранжевими змінними. Разом з цим моменти розподілу типу густина заряду або густина струму обчислюються в ейлеревих координатах, в певних точках сітки. Кінцевим результатом є коливання електричного поля та траєкторії частинок у досліджуваній системі.

Існує клас чисельних методів, які використовують характеристики гіперболічних диференціальних рівнянь в частинних похідних. Ці методи зводять дане рівняння в частинних похідних до звичайних диференціальних рівнянь, які можна інтегрувати з початкових значень, для того, щоб потім отримати розв'язок вихідного диференціального рівняння в частинних похідних. Ці методи також відносять до методів великих частинок, оскільки характеристики є траєкторіями окремих частинок у фазовому просторі.

Класичний метод PIC (particle-in-cell) при вирішенні багатьох задач є достатньо зрозумілим, а в реалізації – дуже простим. Саме через це він став достатньо популярним, а в моделюванні плазми він займає особливе місце [7-8]. Саме для даного моделювання у методі великих частинок існує порядок процедур:

- Інтегрування даних рівнянь руху.
- Інтерполяція заряду та струму в польову сітку.
- Обчислення полів у вузлах сітки.
- Інтерполяція полів із сітки в розташування частинок.

Моделі, що враховують взаємодію частинок лише через усереднені поля, називаються PM (particle-mesh). Моделі, що включають прямі бінарні

взаємодії – це PP (particle-particle). Моделі з обома типами взаємодій називаються PP-PM або P<sup>3</sup>M.

Метод PIS дуже вразливий до помилок, це пов'язано з шумом дискретних частинок. Через її статистичний характер, помилка залишається не повністю зрозумілою в порівнянні з традиційними ейлеровими або напівлагранжевими схемами, які є прикладом методів з фіксованою сіткою [9].

В наш час, геометричні PIS-алгоритми мають зовсім іншу теоретичну базу. Основою являються інструменти дискретного різноманіття, інтерполяційні диференціальні форми канонічних або неканонічних симплектичних інтеграторів. Вони актуальні в цьому методі для того, щоб гарантувати калібрувальний інваріант, збереження заряду, енергії імпульсу. А найбільш важливим є збереження нескінченно симплектичної структури системи частинка-поле. Дані властивості пов'язані з варіаційним принципом фізики, тобто ці геометричні алгоритми побудовані на фундаментальній теоретико-польовій основі і дуже тісно пов'язані з ідеальною формою.

Суть методу PIS для плазми полягає в тому, що деяка множина елементарних частинок, вибір якого залежить від конкретного різновиду методу, замінюється однією квазічастинкою, для якої надалі вирішуються рівняння руху. Рівняння електромагнітного поля вирішується чисельно на сітці. На тій же сітці проводиться інтерполяція зарядів і струмів, що створюються квазічастинками, що потрапили у відповідні комірки просторової сітки.

Основним недоліком методу PIS є те, що з його допомогою досить важко описати процеси зіткнень частинок. Тому область його застосування обмежується, як правило, задачами взаємодії лазерних імпульсів високої інтенсивності з ідеальною плазмою, коли зіткнення часток не відіграють суттєвої ролі.

Є три основних типи обчислювальної моделі частинок:

- Частинка-частинка або PP (використовується формулювання закону сили далекодії).
- Частинка -сітка або PM (сила розглядається як польова величина та апроксимується на сітці).
- Частинка -частинка-сітка або P<sup>3</sup>M M (гібрид моделей PP і PM).

В наступних підрозділах розглянемо всі три типи за роботою [1].

## 1.2 Метод частинка-частинка

Моделювання методами частинок стає дедалі популярнішим з розвитком обчислювальних можливостей та паралельних технологій. Важливим моментом як і теоретичних, і експериментальних дослідженнях є вміння простежувати рух великої кількості часток у полях, створюваних ними самими і під впливом зовнішніх сил.

Метод частинка-частинка (PP) є найлегшим з подібних . Він є простим з обчислювальної та теоретичної точки зору [1]. Стан фізичної системи у різних моментах точки  $t$  описується набором положень та швидкостей представлених частинок  $\{x_i(t), v_i(t); i = 1, N_p\}$ . Цикл тимчасового кроку перераховує дані величини, при цьому використовуючи сили взаємодії та рівняння руху для того, щоб отримати стан системи у пізніший момент часу  $t + DT$  наступним чином:

Цикл кроку часу методу PP

1. Обчислити сили. Обнулити накопичувачі сил

$$\text{for } i = 1 \text{ to } N_p \text{ do}$$

$$F_i := 0$$

Накопичити сили

```

for i = 1 to Np - 1 do
  for j = i + 1 to Np do
    Знайти силу Fij, з якою частинка j діє на частинку i
    Fi := Fi + Fij
    Fj := Fj + Fij

```

## 2. Проінтегрувати рівняння руху

```

for i = 1 to Np do
  vinew := viold +  $\frac{F_i}{m_i} DT$ 
  xinew := xiold + viDT

```

## 3. Змінити значення лічильника часу

```
t := t + DT
```

Для стеження розвитку системи у часі використовуємо багаторазове повторення даного циклу.

Для отримання потрібних результатів з обчислювального експерименту треба здійснити кілька тисяч кроків за часом. Тобто програмування циклу тимчасового кроку в методі РР є звичайною справою.

Якщо розглядати обчислювальні витрати, то стає зрозуміло, чому дана схема використовується тільки у випадку систем, в яких є до тисячі частинок, при далекодіючих силах або короткодіючих, але при цьому кількість операцій пропорційна кількості частинок, помножених на число, досить близьких до виділеної частинки, сусідніх, для того, щоб значно вплинути на діючу силу.



### 1.3 Метод частинка в комірці (PIC)

Для метода частинки в сітці актуальним у використанні є метод формалізму близькодії та рівняння поля для потенціалу. Швидкість обчислення при цьому збільшується, але недоліком методу є точність. Вона гірша, ніж при використанні минулого методу.

Для того, щоб наближено подати значення в регулярно розташованих вузлах сітки, використовуються польові величини, які в свою чергу заповнюють весь простір фізичної системи. Для заміни диференціальних операторів, таких як лапласіан  $\nabla^2$ , наприклад, використовують звичайно-розносні апроксимації на цій сітці. За допомогою інтерполяції за масивом сіткових значень можна обчислити потенціали та сили в місці розташування частинок. А при використанні зворотної процедури роздачі характеристик частки у найближчі вузли сітки для отримання сіткових значень [10] можна розрахувати сіткову щільність.

Якщо говорити про розрахунок сили у методі particle-mesh, то він складається з трьох етапів, а цикл кроку часу відрізняється від циклу попереднього методу лише способом обчислення сил.

1. Роздавання заряду на сітку.
2. Вирішення на цій сітці рівняння Пуассона.
3. Обчислення сил за сіточним потенціалом та інтерполяція сил у точці розташування частинок.

На першому та третьому етапах кількість операцій пропорційною числу частинок  $N_p$ . На другому ж етапі кількість операцій залежна від кількості вузлів сітки  $N$ , саме через це повна кількість визначається наступним виразом:

$$a = \alpha N_p + \beta(N)$$

тут  $\alpha$  – постійна, а  $\beta$  – функція, які залежать від конкретного виду схеми particle-mesh, яку ми збираємося використовувати.

Скорочення часу обчислення в методі РМ є величезним плюсом, але він досягається втратою потенціалу та сили в полі. Тільки поля, у варіаціях яких є довжина хвилі, що більша за крок просторової сітки, можна точно представити за допомогою сіткових значень. Неточними в даному методі є поля, потенціали та сили одиночного точкового заряду (або маси) на відстанях, які менші за крок сітки. Але, дані похибки можна представити як точне уявлення полів від зарядженої хмари кінцевого розміру, ширина порядку кроку сітки, а не як неточне уявлення полів точкового заряду.

Розмір сітки є обмеженим, саме тому він є неприйнятним для вивчення кореляційних систем. Сама сітка є дуже дрібною для аналізу близьких зіткнень частинок, тому, вона мала б величезну кількість сіткових вузлів. Через це, час роботи збільшився б, і, навіть, перевищував би виконання циклу для методу РР. Ситуація зворотна для некорельованих систем та систем із зіткненнями, оскільки є необхідні, для придушення нефізичних кореляцій між кінцевим числом рахункових макрочасток, властивості, залучені обмеженою сітковою роздільною здатністю. Модель РМ буде подавати математичні моделі даних систем, але тільки за умови, що сітковий крок менший за характерну довжину хвилі фізичної системи, а також число рахункових макрочасток у кожному осередку сітки буде досить великим, щоб підтримувати низький рівень флуктуації.

#### 1.4 Метод частинка-частинка-сітка

З попередніх методів ми можемо зробити висновки, що вони обидва не є дуже зручними при використанні різного виду моделювання. Оскільки метод particle-particle використовується у системах, які містять до тисячі частинок при далекодіючих силах, або ж коли кількість операцій буде пропорційна кількості частинок, помножених на число сусідніх, досить

близьких до виділеної частинки, щоб суттєво вплинути на чинну силу при короткодійчих[1]. Другий же метод – particle-mesh є дуже швидким в обчислюванні, але використовувати його актуально лише для сил, які гладко змінюються. Саме тому з'явився третій метод, який поєднує в собі найкращі властивості двох попередніх – метод Р<sup>3</sup>М. Завдяки цьому методу можна моделювати великі кореляційні системи з далекодіючими силами.

$$F_{ij} = F_{ij}^{sr} + F_{ij}^m,$$

тут  $F_{ij}^{sr}$  – швидкозмінна короткодійча сила, яка різниться від нуля лише на декількох міжчасткових відстанях, а  $F_{ij}^m$  представляє собою повільну змінну частину, досить гладку для точного уявлення на сітці. Метод РР використовується для знаходження сумарної короткодійчої та сумарно повільно змінної складової сили дає результуючу силу, що діє на кожен частинку; ця результуюча використовується для перерахунку швидкостей. Отримана в результаті схема Р<sup>3</sup>М займає проміжне положення в тому сенсі, що можна уявити близькі зіткнення з тією ж точністю, як у методі РР, і обчислити далекосяжні з тим самим швидкодією, як у методі РМ.

Сили, що підкорюються закону оберених квадратів найкраще підходять для розщеплення сил  $F_{ij} = F_{ij}^{sr} + F_{ij}^m$ .

Правильним вибором  $N, N_p, a$  приходять до лінійної залежності кількості операцій від кількості макрочастинок. Час, витрачений на виконання циклу кроку за часом, приблизно дорівнює 1с на тисячу частинок для типових високопродуктивних комп'ютерів. Для десяти тисяч частинок це дає час циклу, що дорівнює 10 с, що можна порівняти з часом, приблизно рівним 20 хв, для тієї ж ситуації при використанні методу РР.

## 1.5 Двопотокова нестійкість

Добре відомо, що двопотокова нестійкість (TSI) виникає в консервативній системі, і з цієї точки зору ця нестійкість є загальним класом реактивних нестійкостей [11], які виникають внаслідок взаємодії між пучками електронів.

Двопотокова нестійкість є дуже поширеною нестійкістю у фізиці плазми [7-8]. Вплив цієї нестійкості було досліджено за допомогою графічного рішення дисперсійного відношення [12], а поведінку протилежних потоків - за допомогою чисельного моделювання [2]. Ця нестійкість може бути створена двома зустрічними потоками пучки енергійним потоком частинок, інжектюваних у плазму, або встановлення струму вздовж плазми, де різні види (іони та електрони) можуть мати різні швидкості дрейфу. У всьому із вищезгаданих прикладів, енергія частинок може переноситься в збудження плазмової хвилі. Однак TSI вперше був досліджений за допомогою рівняння макроскопічного моменту [3,13], повний аналітичний та чисельні дослідження вже детально описані в минулого десятиліття [14-15]. Відповідно до цього ця нестабільність стосується різних сфер наук, предмет постійно вивчався в різноманітних ситуацій [16-20].

Ми знаємо, що в стандартному припущенні статистичних механік зі статистикою Больцмана-Гіббса, термодинамічні величини, такі як енергія, є «обширними», тобто ці величини пропорційні їх розміру  $V$  або кількість частинок  $N$ . Власне, в ближній природі взаємодій, які утримують матерію разом, це виправдано. Але якщо хтось має справу з системами з далекими взаємодіями, особливо з гравітацією та кулонівським електричним сил, зрозуміло, що енергія не є екстенсивною.

## 2. МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ ДВОПОТОКОВОЇ НЕСТІЙКОСТІ МЕТОДОМ ЧАСТИНОК В КОМІРЦІ

### 2.1 Загальний метод частинки в сітці

Дисперсія співвідношення для електронних пучків, які розподіляються монохроматично зі швидкостями  $\pm v_0$ , визначається як

$$D(w, k) = 1 - w_p^2 \left[ \frac{1}{(w - kv_0)^2} + \frac{1}{(w + kv_0)^2} \right], \quad (2.1.1)$$

де  $w_p = \left( \frac{e^2 n}{m \epsilon_0} \right)^{1/2}$  – електронна плазмова частота і  $e, n$  — заряд і густина електрона. Умова нестійкості вимагає існування комплексних коренів для дисперсійного співвідношення (2.1) [21]

$$kv_0 < \frac{e^2 n}{m \epsilon_0}, \quad (2.1.2)$$

Рівняння, які керують рухом електрона :

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v_x, \\ \frac{dv_x}{dt} &= -eE, \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

$$\begin{aligned} E &= -\nabla_x \varphi \\ \epsilon_0 \nabla_x^2 \varphi &= -e(n_0 - n), \end{aligned}$$

де  $x$  і  $v_x$  представляють положення та швидкість електрона,  $e, n$  - заряд і щільність електрона,  $E, \varphi$  і  $n_0$  визначають електричне поле і потенціал збудженої хвилі і щільність фонових нейтралізуючих важких іонів,

відповідно. Зараз потрібно нормалізувати рівняння. Зручно нормалізувати час до  $\omega_p^{-1}$ , відстані до  $\lambda_D$  (де  $\lambda_D = \frac{v_{th}}{w_p}$  довжина Дебая), швидкість до  $v_{th}$  і електричне поле до  $\omega_p^{-1} v_{th}^{-1}$ . У цій одиниці треба розглянути дві швидкості променів з довільними значеннями  $v_0 = \pm 3$ . Під час моделювання, початкова конфігурація збурюється хвилею з хвильовим числом  $k = \frac{2\pi}{L}$  з достатньо великою довжиною  $L = 100\lambda_D$ , щоб задовільнити умову нестійкості (2.2). Поле моделювання поділено на 512 точок сітки з періодичною граничною умовою, а крок за часом вибирається як

$\Delta t = 0,1 \omega_p^{-1}$ . Тут можна дискретизувати перше і друге відношення в рівнянні (2.3) явно в часі, використовуючи плутану схему [4]. У реальній плазмі надзвичайно велика кількість частинок, з яких можна обробити максимальну кількість частинок лише найкращими суперкомп'ютерами. Тому в моделюванні РС зазвичай дозволяється, щоб вона складалася з однієї частинки моделювання з багатьох фізичних частинок. Відповідно до факту, що відношення заряд/маса є незмінним під час перетворення, ця суперчастинка і відповідна частинка плазми слідує тією ж траєкторією. Однак вибирається довільна кількість цих суперчастинок, кількість змодельованих частинок дорівнює визначається набором фізичних і числових обмежень, і зазвичай обирається надзвичайно великим ( $>10^5$ ) [22]. У цьому моделюванні один мільйон суперчастинок однаково навантажені в двох променях, що поширюються в протилежному напрямку. У цьому моделюванні відстежуються суперчастинки в безперервному фазовому просторі, в якому ці окремі частинки імітувати поведінку функції розподілу. Чотири основні кроки повинні виконуватися на кожному кроці часу:

- (1) Заряд щільності інтерполюється на сітку від положення частинок ( $x_p \rightarrow \rho_g$ ).

- (2) Розв'язується рівняння Пуассона для обчислення електростатичного потенціалу на сітці і з цього електричне поле, легко доступне в точках сітки ( $\rho_g \rightarrow E_g$ ).
- (3) Електричне поле інтерполюється від сітки до положення частинок ( $E_g \rightarrow E_p$ ).
- (4) Положення та швидкості частинок просуваються в часі з рівняннями руху знаючи електричне поле в положеннях частинок.

Для початку моделювання частинки розподіляються в одному вимірі за допомогою випадкової програми. Якщо припустити, що положення  $p$ -го електрона  $\tilde{x}_p$  лежить між  $g$ -ою і  $(g + 1)$  точки сітки, тобто  $\tilde{x}_g < \tilde{x}_p < \tilde{x}_{g+1}$ ,

$$n_g = \frac{\tilde{x}_{g+1} - \tilde{x}_p}{\Delta\tilde{x}}, n_{g+1} = \frac{\tilde{x}_p - \tilde{x}_g}{\Delta\tilde{x}}, \quad (2.1.4)$$

де тильди використовуються для відображення нормованих величин, а  $\tilde{x}_g = g\Delta\tilde{x}$  — координата точок сітки. На цьому етапі можна розв'язати рівняння Пуассона, щоб отримати потенціал і електричне поле на сітці точки  $\tilde{E}_g$ . Вже потім електричні поля на позиціях частинок отримують шляхом інтерполяції, як показано нижче

$$\tilde{E}_p = \left( \frac{\tilde{x}_{g+1} - \tilde{x}_p}{\Delta\tilde{x}} \right) \tilde{E}_g + \left( \frac{\tilde{x}_p - \tilde{x}_g}{\Delta\tilde{x}} \right) \tilde{E}_{g+1}. \quad (2.1.5)$$

Тепер можна оновлювати положення та швидкість частинок для кожного кроку часу. У РІС моделюванні час ділиться на дискретний момент часу, фактично він фіксується.

Еволюція дискретизована на багато тимчасових кроків  $\Delta t$ , кожне вибрано так, щоб частинки рухалися лише на невелику відстань, після кожного переміщення сила перераховується, а новий хід створений для всіх

частинок. Якщо ми ідентифікуємо положення і швидкість частинки як, відповідно,  $x_p$  і  $v_p$ , то рівняння руху можна записати так:

$$\begin{aligned}\tilde{x}_p^{new} &= \tilde{x}_p^{old} + \Delta t \tilde{v}_p^{old}, \\ \tilde{v}_p^{new} &= \tilde{v}_p^{old} - \frac{e}{m} \Delta t \widetilde{E}_p(\tilde{x}_p^n).\end{aligned}\tag{2. 1.6}$$

При  $\omega_p t = 10$  буде відображений спочатку розподілений фазовий простір для пучків. Структура електронних дірок, в свою чергу, різна між фігурами. Електронні дірки є областю фазового простору, що нагадує отвори, де вказують на місцевість виснаження електрона та посилення локалізованого електричного поля в цій області. Структура всіх вихрових отворів подібна, як і структура круглого ока. Нормовано збуджене електричне поле  $\vec{E}$  в реальному просторі буде відображено прямо на верхній частині діаграм фазового простору, з чого і можна зробити висновок, що електричне поле зникає прямо в центрі дірок.

Розглянемо тепер еволюцію частинок у фазовому просторі при  $\omega_p t = 20$ . Утворення трьох електронних дірок є чітким для всіх випадків, незважаючи на розмір і кавітацію ступені для них різні. Для аналізу процесів утворення дірок, можна порівняти з фазовим простором частинок при  $\omega_p t = 60$ . В цьому випадку електронні дірки рухаються при обертанні, а також зберігаються їх цілісності та форми. Невеликі початкові отвори часу взаємодіють разом і утворюють нові дірки, але пізніше, менші отвори згортаються до великої електронної дірки.

Зрозуміло, що утворення порожнини може розвиватися внаслідок взаємодії холодних електронів одного променя на електростатичні хвилі, що переносяться іншим, однак розповсюдження теплових електронів (тепловий шум) може впливати на це утворення.



Розберемо відношення електростатичної енергії до кінетичної енергії початкових електронів, як функція  $\omega_p t$ . Зауважу, що електростатична енергія спочатку дорівнює нулю, але через короткий час навколо  $t \approx 10\omega_p^{-1}$  система досягає динамічної рівноваги. Після цього енергія розділяється між кінетичною та електростатичною енергіями нерівномірно з безперервним обміном між двома. Коли починається нестабільність, коливання енергії великі, але коливання зменшуються і залишаються постійними протягом достатньо тривалого часу. Максимальне перетворення становить близько 15% для часового масштабу, а це близько  $t \approx 10\omega_p^{-1}$ , тобто порівнюючи з розподілом Максвелла максимальна конверсія зросла більш ніж вдвічі.

Дослідимо більш детальний аналіз процесу перетворення енергії та генерацію нестабільності, час розвитку електронів середньоквадратичної швидкості (VRMS). Електони VRMS визначають як

$$v_{rms} = \sqrt{\frac{1}{N_p} \sum_{p=1}^{N_p} (\tilde{v}_p^n - \tilde{v}_p^0)^2}, \quad (2.1.7)$$

де  $\tilde{v}_p^n$  і  $\tilde{v}_p^0$  вказує нормовану швидкість  $p$  електрона при  $n$ -й часовий крок і  $t = 0$  відповідно. Швидкість електронів в цьому випадку швидко зростає в масштабі часу, на якому зростає TSI ( $t \approx 10\omega_p^{-1}$ ). Тепловий шум можна зменшити VRMS електронів, а результатом є ефективність перетворення енергії та швидкість зростання TSI.

З відношення загальної енергії електронів до початкової повної енергії через  $\omega_p t$  можемо зауважити, що PIC моделювання є енергозберіжним.

## 2.2 Алгоритм розрахунку

Дослідимо одновимірну систему електронів у однорідному середовищі іонів. Опишемо електрони  $N$  частинками, кожна з яких має положення  $r_i$  та

швидкість  $v_i$ . Електрони залежать від прискорення  $a_i$ , спричиненим електричним полем  $E$  в місці розташування частинки. Задаємо рівняння руху електронів:

$$\frac{dr_i}{dt} = v_i \quad (2.2.1)$$

$$\frac{dv_i}{dt} = a_i = E(r_i) \quad (2.2.2)$$

Далі розраховуємо електричне поле  $E$ . Воно залежить від щільності електронів  $n$ , а також визначається як градієнт електричного потенціалу  $\phi$ .

$$E(x) = -\frac{d\phi}{dx} \quad (2.2.3)$$

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = n - n_0 \quad (2.2.4)$$

де  $n_0$  – середня густина.

Наступним кроком є розрахунок щільності, взагалі її можна обчислити, коли частинки на точках сітки поєднуються. Частка лежить між координатами  $x_j$  та  $x_{j+1}$ . В даному випадку густина :

$$n_j = \frac{x_{j+1} - r_i}{\Delta x} \quad (2.2.5)$$

$$n_{j+1} = \frac{r_i - x_j}{\Delta x} \quad (2.2.6)$$

де  $\Delta x$  – відстань між точками сітки. Даним кроком ми нормували щільність.

Тепер, коли нам відома щільність в точках  $n_j$  ми можемо знайти потенціал  $\phi_j$  в цих точках.

$$\frac{d^2\phi(x_j)}{dx^2} \simeq \frac{\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1}}{(\Delta x)^2} \quad (2.2.7)$$

На даному етапі значення  $n_j$  та  $\phi_j$  можна розташувати як систему лінійних рівнянь матричного виду:

$$\frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \dots & 1 \\ 1 & -2 & 1 & & & \\ & & -1 & -2 & 1 & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & & & 1 & -2 & 1 \\ 1 & & & & & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_{m-1} \\ \phi_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ \vdots \\ n_{m-1} \\ n_m \end{bmatrix} - n_0 \quad (2.2.8)$$

Цю матрицю реалізуємо в кодї мовою Python (Додаток С).

Наступним етапом є розрахунок електричного поля, тут використовуємо дискретизацію оператора похідної:

$$\frac{d\phi(x_j)}{dx} \simeq \frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} \quad (2.2.9)$$

Як і на минулому кроці записуємо дану формулу у матричному вигляді:

$$\begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \\ \vdots \\ E_{m-1} \\ E_m \end{bmatrix} = -\frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \dots & -1 \\ -1 & 0 & 1 & & & \\ & -1 & 0 & 1 & & \\ & \vdots & & \ddots & & \\ & & & & -1 & 0 & 1 \\ 1 & & & & & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_{m-1} \\ \phi_m \end{bmatrix} \quad (2.2.10)$$

Дана матриця показана в Додатку D.

За допомогою інтерполяції двох найближчих точок сітки  $x_j$  та  $x_{j+1}$  знаходимо електричне поле на місці розташування частинок. Виконаємо це таким чином:

$$E_i = \frac{x_{j+1} - r_i}{\Delta x} E_j + \frac{r_i - x_j}{\Delta x} E_{j+1} \quad (2.2.11)$$

Тепер об'єднуємо те, що ми робили до цього і отримуємо функцію РС (Додаток А).

Далі ми починаємо розвивати електрони, використовуючи крок часу  $\Delta t$ :

$$v_i = v_i + \frac{\Delta t}{2} \times a_i \quad (2.2.12)$$

$$r_i = r_i + \Delta t \times v_i \quad (2.2.13)$$

Для кожної частинки використовується півкроку часу.

Реалізація показана в Додатку В. Ми отримали симуляцію методу РІС.

### **3. РЕАЛІЗАЦІЯ КОМП'ЮТЕРНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ**

#### **3.1 Методика комп'ютерного експерименту. Комп'ютерний код**

Реалізація комп'ютерного експерименту була проведена за допомогою комп'ютерної програми, що була написана на мові програмування Python. Дана програма була створена згідно парадигмі модульного програмування, що передбачає організацію програмного коду як множини незалежних модулів. В даному випадку ми маємо зручний механізм об'єднання модулів у програму, перенесення окремих модулів до іншої програми. Перевагами є що ми можемо повторно використовувати код та розширювати функціонал. Кожен модуль містить в собі код набору інструкцій та функцій, що направлені на вирішення нашої задачі.

Початок виконання обчислень відбувається через запуск першого модуля. Даний модуль має назву *acceleration* (додаток А). Саме з цієї програми ми починаємо обчислювати. Тут проведено обчислення прискорення кожної частинки через електричне поле, а також щільність. Основною задачею цього модуля було вирішення рівняння Пуассона за допомогою застосування похідних для отримання електричного поля та інтерполяції значення сутки в місце розташування частинок.

Тут ми використовуємо наші попередні дослідження. Рівняння руху електронів та щільності є основними для розрахування матриці градієнта, яка в майбутньому допоможе нам у вирішенні нашої задачі. Далі в коді ми аналогічним способом описуємо матричний вигляд розрахунку електричного поля.

Далі ми можемо розглянути головний модуль з функцією *main* (додаток В). В ході роботи цього модуля ми викликаємо останні модулі – *gmtx*

(додаток С) та `lmtx` (додаток D). Основним завданням програми `gmtx` є побудова матриці для градієнта першої похідної, а `lmtx` – побудова матриці за другою похідною, або ж як ще можна це назвати – лапласіаном. Через ці модулі проходять данні для полегшення подальшого рішення нашої задачі.

Таким чином ми можемо бачити, що в головному модулі проводиться зчитування основних значень, необхідних для вирішення нашої задачі. Також, були створені умови, побудовані матриці для обчислення градієнта та лапласіана, були обчислені дані щодо часу. Після об'єднання модулів ми бачимо, що всі основні функції математичної моделі показані саме тут.

Результати програми в цілому були відображені у вигляді графіка зміни електронних потоків у фазовому просторі.

### 3.2 Результат комп'ютерного експерименту

Запускаючи код ми спостерігаємо симуляцію руху частинок в реальному часі.

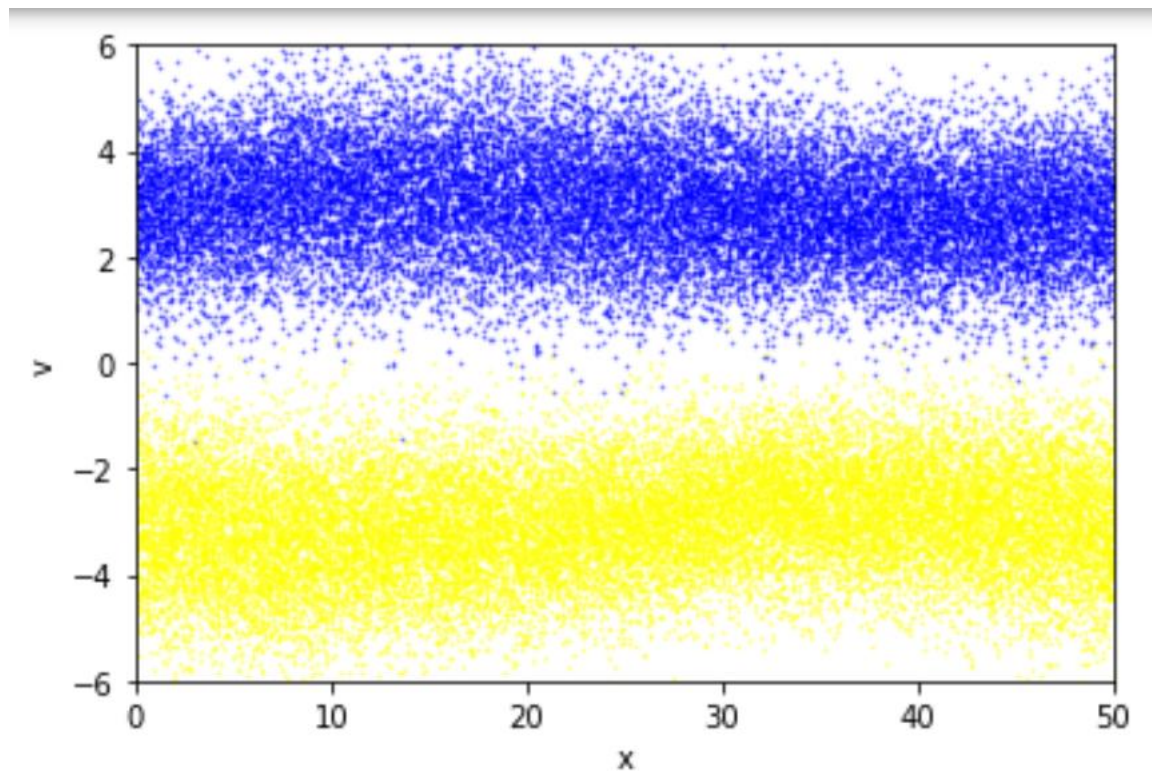


Рисунок 1 - Знімок еволюції частинок у фазовому просторі в момент часу  $t = 0$

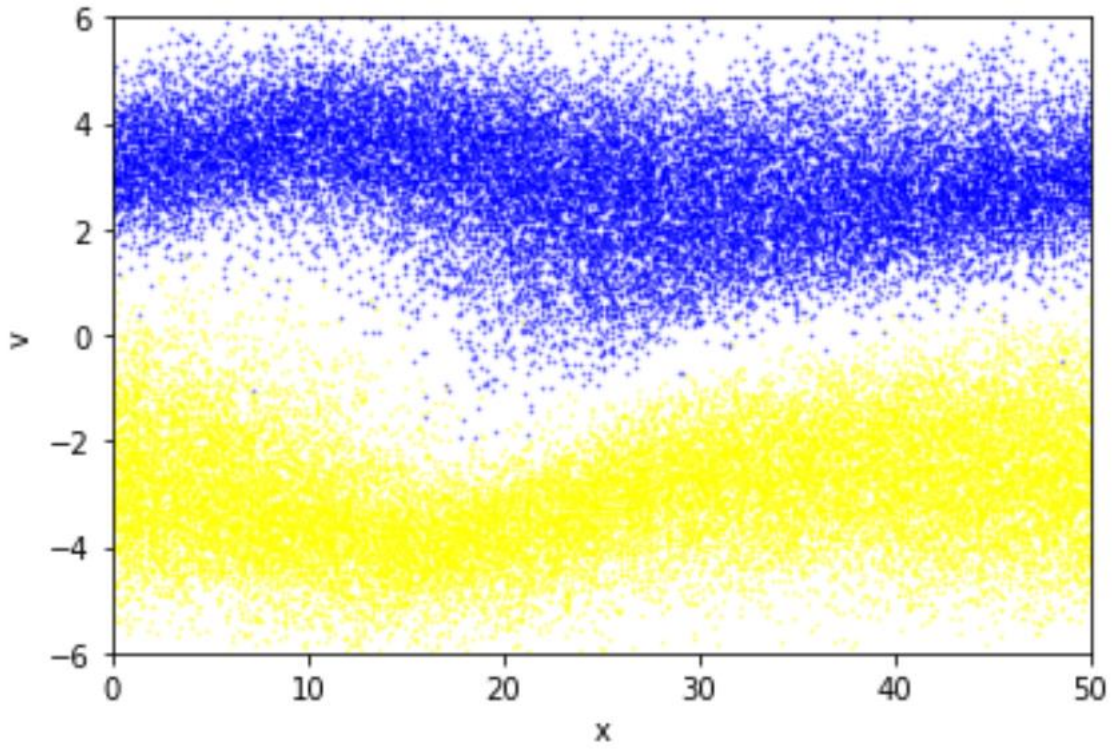


Рисунок 2 - Знімок еволюції частинок у фазовому просторі в момент часу  $t = 5$

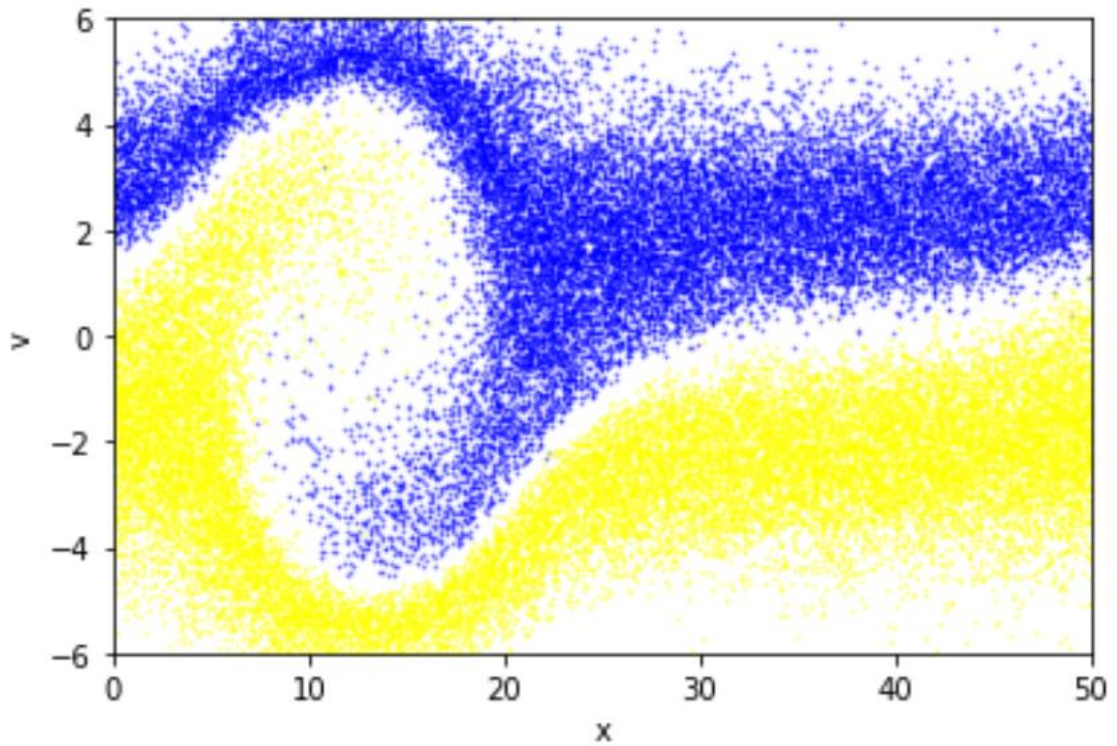


Рисунок 3 - Знімок еволюції частинок у фазовому просторі в момент часу  $t = 10$

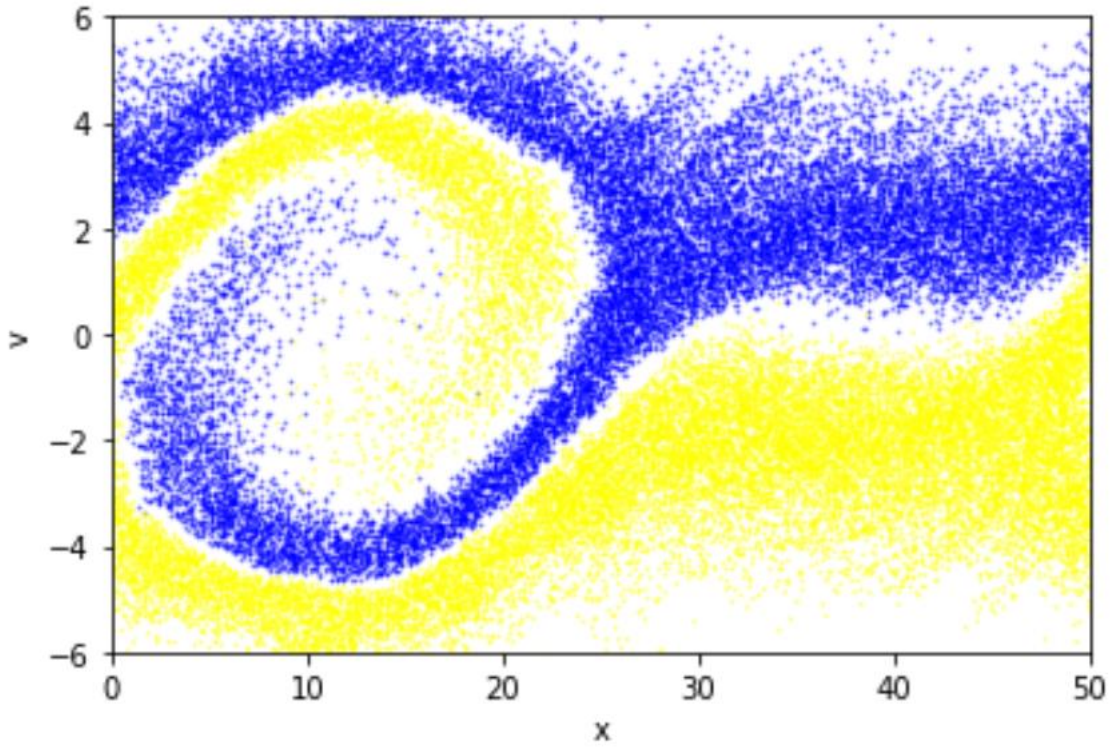


Рисунок 4 - Знімок еволюції частинок у фазовому просторі в момент часу  $t = 15$

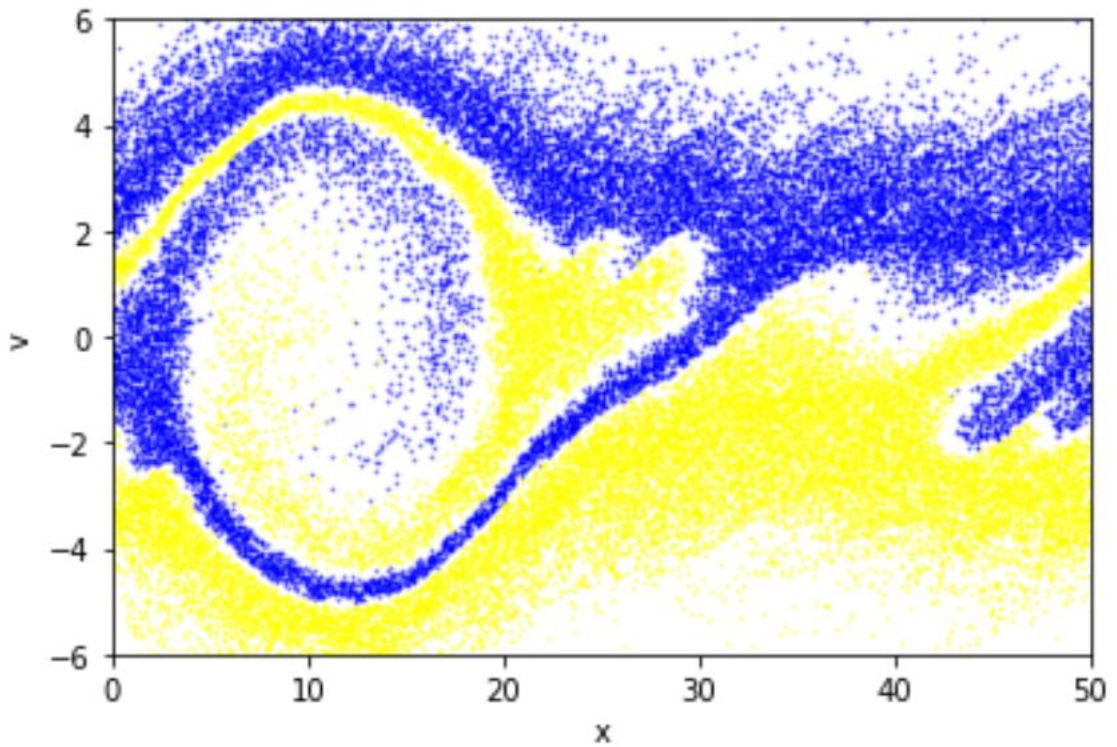


Рисунок 5 - Знімок еволюції частинок у фазовому просторі в момент часу  $t = 20$

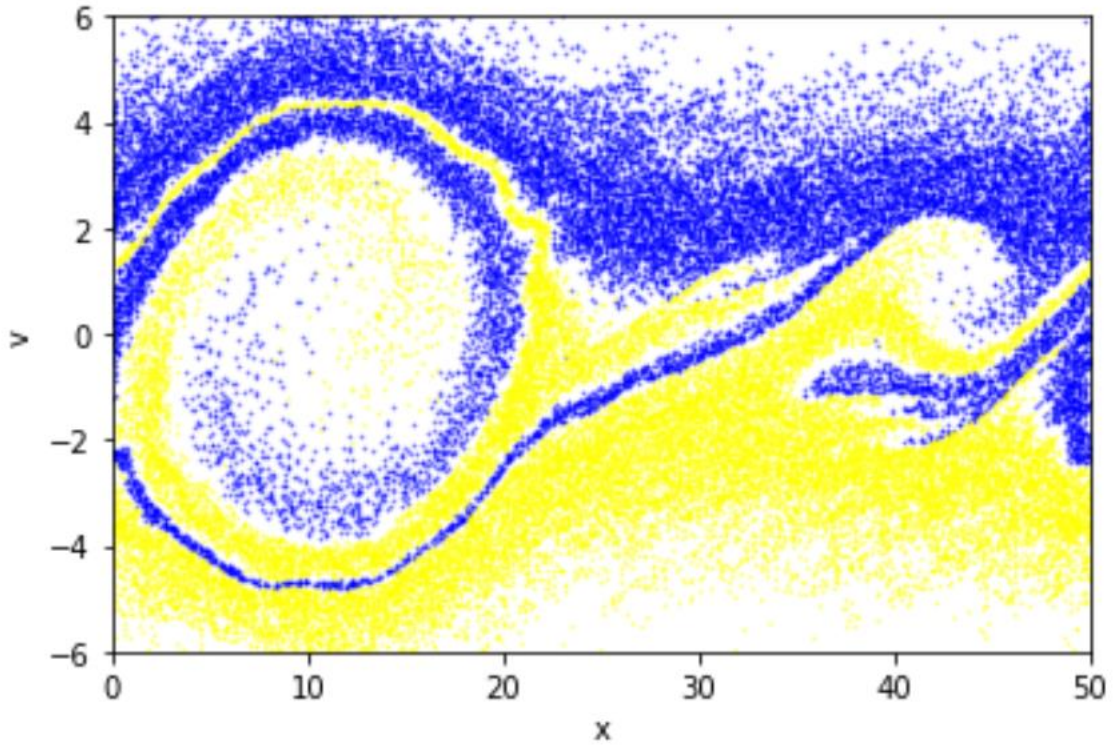


Рисунок 6 - Знімок еволюції частинок у фазовому просторі в момент часу  $t = 25$

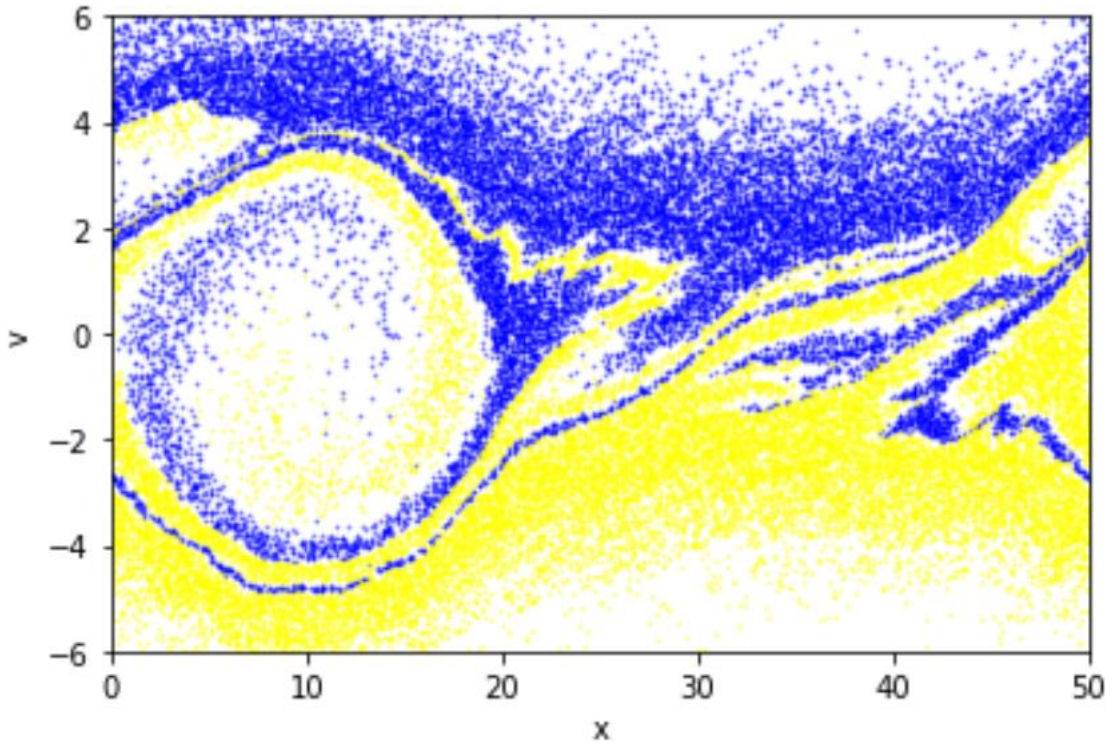


Рисунок 7 - Знімок еволюції частинок у фазовому просторі в момент часу  $t = 30$



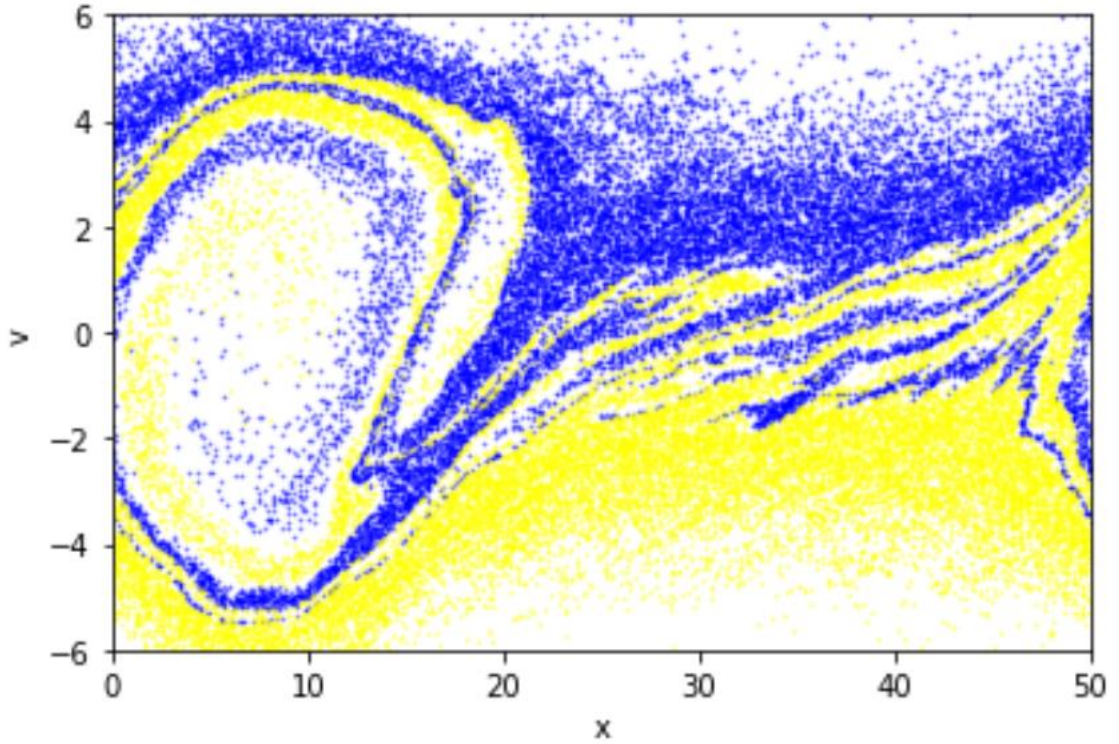


Рисунок 8 - Знімок еволюції частинок у фазовому просторі в момент часу  $t = 35$

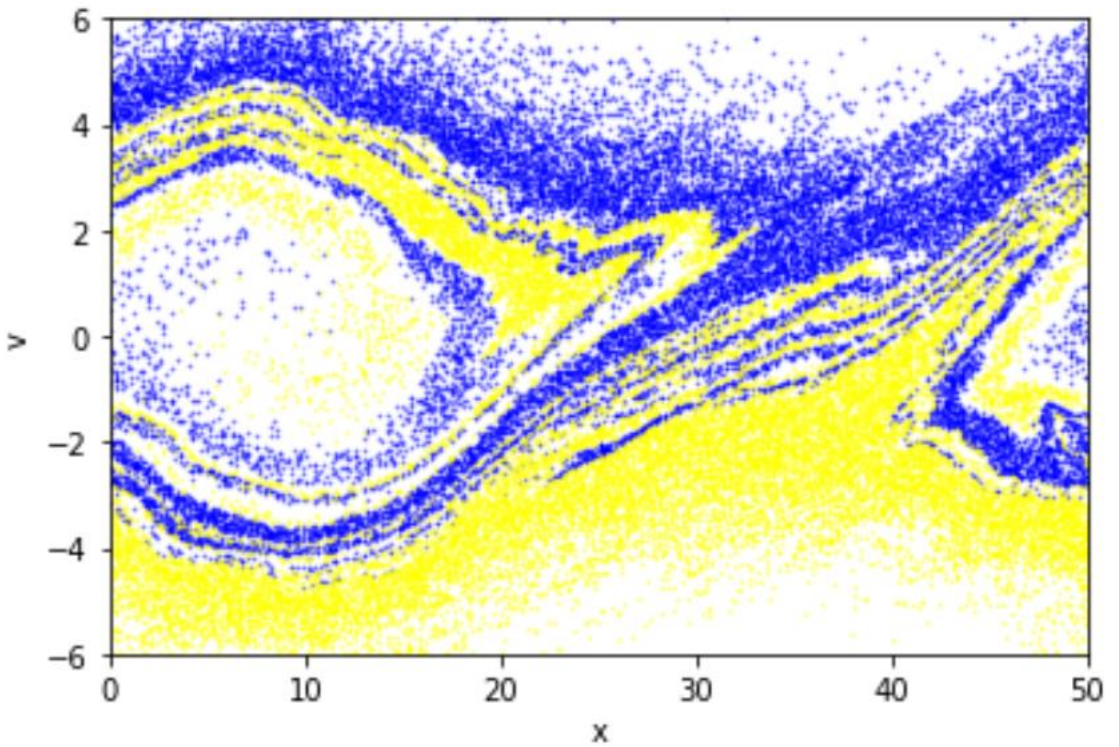


Рисунок 9 - Знімок еволюції частинок у фазовому просторі в момент часу  $t = 40$

На рисунках 1-9 ми можемо побачити еволюцію частинок у фазовому просторі. Горизонтальна вісь характеризує собою положення частинки, а вертикальна – швидкість. Через те, що промені мають різні кольори ми можемо спостерігати їхню взаємодію.

Ми спостерігаємо еволюція частинок у порівнянні з часом. В нашому випадку початковий показник часу був 0, а кінцевий – 40. Тут ми бачимо електронні дірки, які є областю фазового простору, вони нагадують отвори, що вказують місце виснаження електрона та посилення локалізованого електричного поля в цій області. Структура всіх вихрових отворів подібна, і нагадує структуру круглого ока. З рисунків ми можемо бачити, що електричне поле зникає з самого центру дірок.

На рисунках також можна побачити, що електронні дірки рухаються при обертанні, але при цьому зберігають свою форму та цілісність. Отвори, які спочатку були невеликого розміру починають взаємодіяти один з одним, при цьому утворюючи нові.

На рисунку 10 ми можемо спостерігати графік залежності імпульсу від часу. Бачимо, що сумарний імпульс системи коливається у межах  $10^{-16}$ , тобто нуля. Це свідчить, що в системі зберігається сумарний імпульс. Чисельні розрахунки практично похибку не вносять.

На рисунку 11 зображений графік залежності кінетичної енергії від часу. На зображенні ми можемо бачити зниження кінетичною енергії в момент часу  $t=30$ . В цей час потік переходить із ламінарного руху в турбулентний. Цей час спостерігається максимум потенціальної енергії (див. рис. 12). Далі починається турбулентний рух і ми спостерігаємо осциляторну зміну кінетичної енергії.

Залежність потенціальної енергії від часу подана на рис 12. Тут також можемо бачити, що в момент часу  $t=30$  потенціальна енергія має максимум, потім відбувається перехід в турбулентний режим, яких характеризується осциляціями.

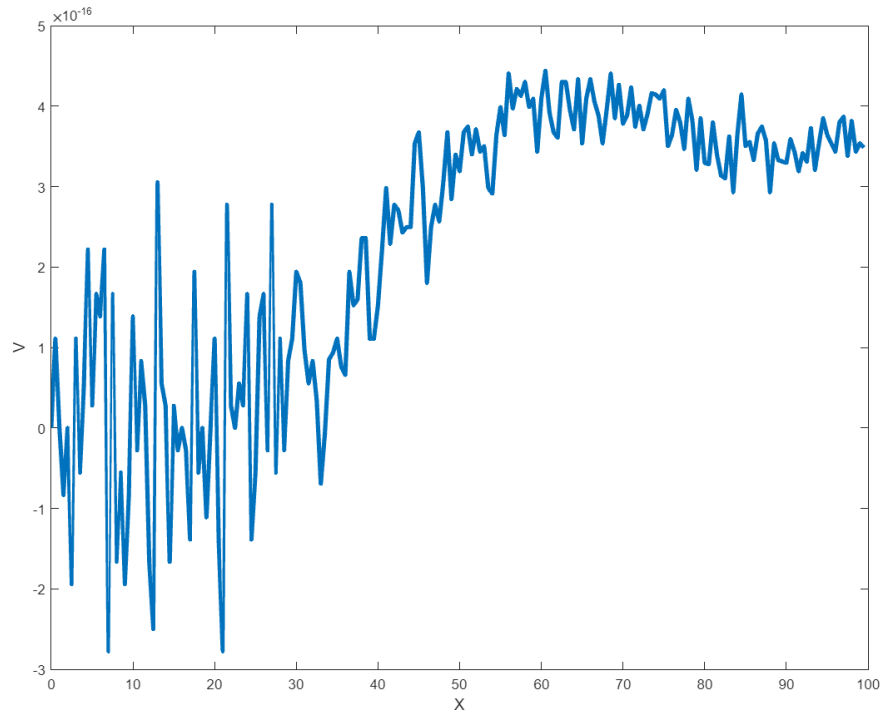


Рисунок 10 – Залежність імпульсу системи від часу

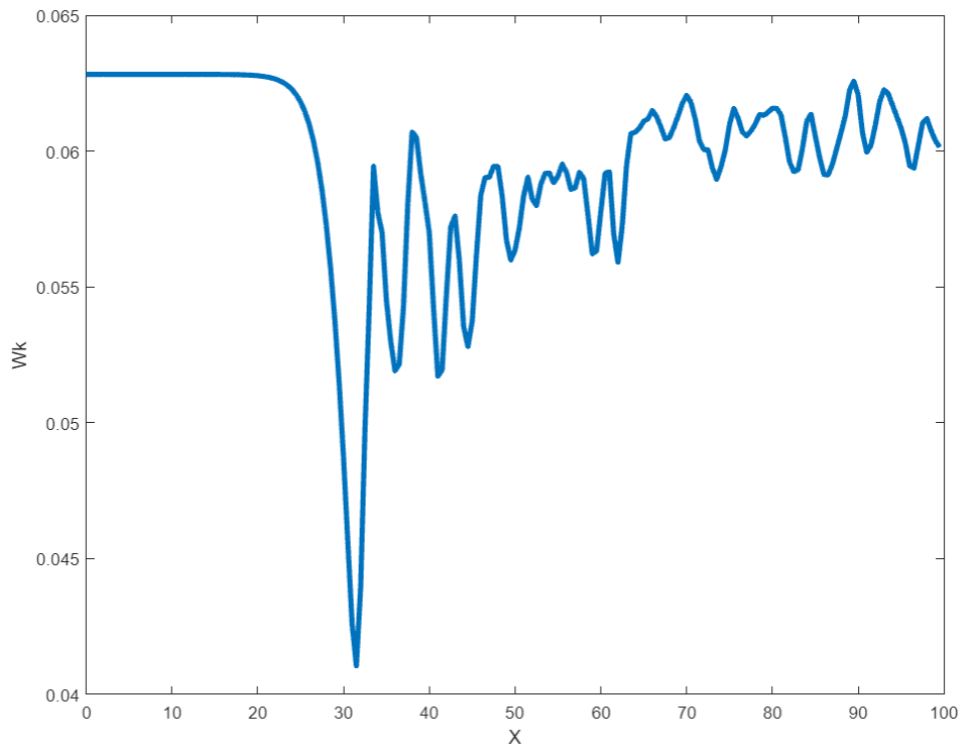


Рисунок 11 – Залежність кінетичної енергії від часу

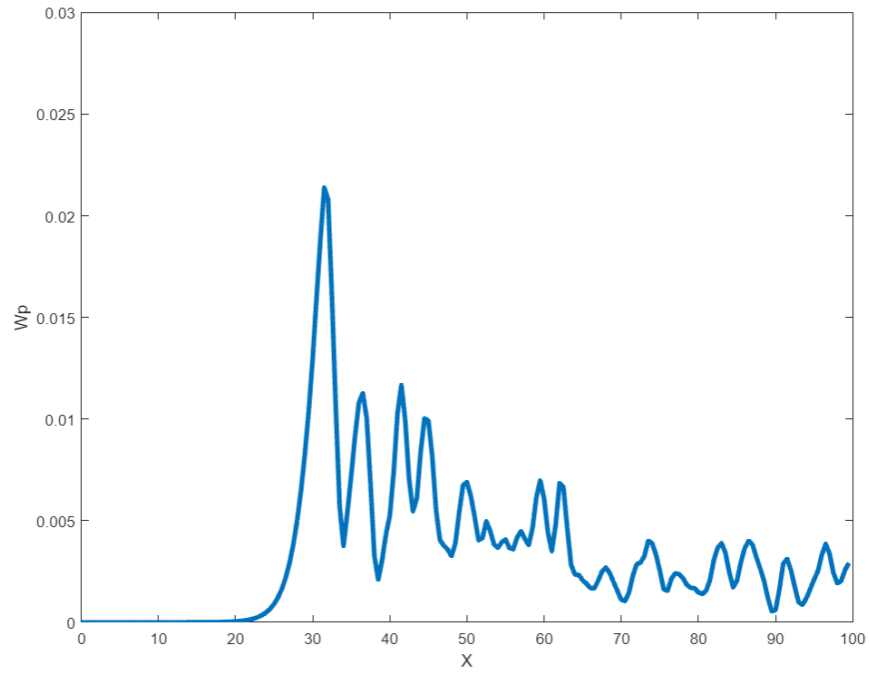


Рисунок 12 – Графік потенціальної енергії

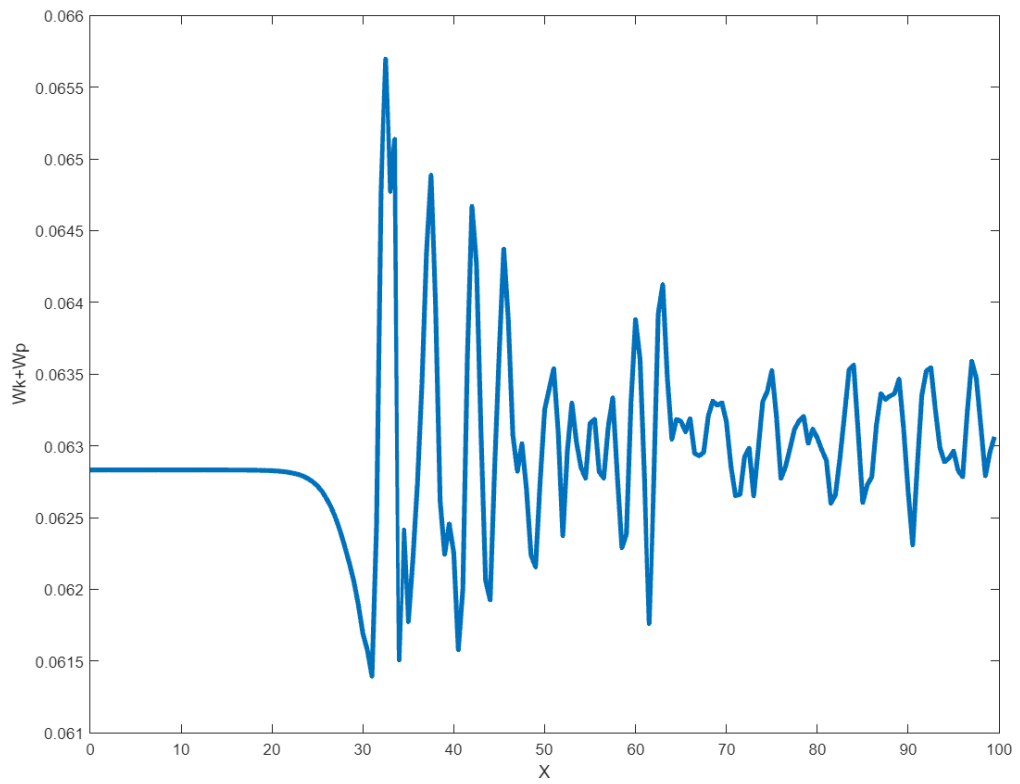


Рисунок 13 – Графік суми кінетичної та потенціальної енергій

На рисунку 13 показано залежність суми кінетичної та потенціальної енергій від часу. З фізичних міркувань відомо, що ця сума повинна не змінюватись з часом. Разом з цим ми бачимо, що ця сума не є константою, відбуваються осциляції в межах від 0,065 до 0,062, тобто відносна похибка таких осциляцій складає 4,5%. Ця похибка обумовлена чисельними особливостями методу РІС. Як зазначалось вище, величезний виграш у часі роботи методу РІС досягається за рахунок точності обчислення потенціалу та сили. Саме цим обумовлена похибка обчислення повної енергії системи в 4,5%.

## ВИСНОВОК

В роботі побудовано математичну та комп'ютерну моделі двопотокової нестійкості в електронних пучках, які рухаються назустріч один одному. Використано метод частинки в комірці (PIC).

Побудовані фазові портрети системи в різні моменти часу. Визначено час, коли ламінарна течія електронних потоків перетворюється в турбулентну.

Отримані залежності імпульсу, кінетичної та потенціальної енергій від часу. Знайдено час, коли перетворення кінетичної енергії в потенціальну енергію електростатичних хвиль є максимальним.

Залежності імпульсу та суми кінетичної і потенціальної енергій повинні бути постійними з часом, що і підтверджується результатами роботи комп'ютерної моделі.

## ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕЛІЛ

- 1 Hockney R. W. Computer simulation using particles / R. W. Hockney, J. W. Eastwood. — CRC Press, 2021. — 566 p.
- 2 Dawson, J.M. One-dimensional plasma model/ Dawson, J.M.//Physics of Fluids – 1962. – Vol. 5, No. 4 – P. 445-459.
- 3 Haeff A. V. The electron-wave tube — A novel method of generation and amplification of microwave energy / A. V. Haeff // Proceedings of the IRE. — 1949. — Vol. 37, No. 1. — P. 4–10.
- 4 Birdsall, C.K. Plasma Physics via Computer Simulation / Birdsall, C.K. & Langdon, A.B. - CRC Press, 1985. – 504 p.
- 5 Benedetti, C. PIC simulations of the production of high-quality electron beams via laser-plasma interaction. - Nuclear Instruments and Methods in Physical Research/ Benedetti, C., Londrillo, P., Petrillo, V., Serafini, L., Sgattoni, A., Tomassini, P. & Turchetti, G. – 2009 – No. 608. P. 94
- 6 Yoo, J. 1D PIC simulation study of non linear beam plasma interaction./ Yoo, J., Rhee, T. & Ryu, C.// Computer Physics Communication. – 2007- Vol. 77, No.1 – P. 93-94.
- 7 Krall, N.A. Principles of Plasma Physics./ Krall, N.A., Trivelpiece, A.W.//Physics Today - 1974 – Vol. 27, No. 3 – P.57.
- 8 Pierce, J.R. Possible fluctuations in electron streams due to ions./ J.R. Pierce // Journal of Applied Physics – 1948 – Vol.19, No.3. – P. 231-236.
- 9 Renyi, A. On a new axiomatic theory of probability/ A. Renyi // Acta Mathematica Hungarica. – 1955 – Vol.6, No. 3. – P. 285-335.
- 10 Buneman, O. Dissipation of curreicts in ionized media./ O. Buneman.// Physical Review. - Vol. 115, No 3 – P. 503-517.
- 11 Hasegawa, A. Theory of longitudinal plasma instability./ A. Hasegawa // Physical Review. - Vol. 169, No 1 – P. 204-214.
- 12 Jackson, E.A. Drift instabilities in a Maxwellian plasma./E.A. Jackson.// Physics of Fluids. – 1960. – Vol.3, No. 5. – P.786-792.

- 13 Pierce, J.R. Possible fluctuations in electron streams due to ions / J.R. Pierce // *Journal of Applied Physics*. – 1948. – Vol.19, No.3. – P. 231-236
- 14 Lapenta, G. Relaxation of relativistic plasmas under the effect of wave-particle interaction./ Lapenta, G., Markidis, S., Maroccino, A. & Kanidakis, G. // *The Astrophysical Journal*. – 2007. – Vol.666, No.2. – P. 949-954.
- 15 Dieckmann, M.E. On the ultrarelativistic two-stream instability, electrostatic turbulence and Brownian motion. / Dieckmann, M.E., Drury, L. & Shukla, P.K.// *New journal of Physics*. – 2006. – Vol.8. – P.40.
- 16 Startsev, E.A. Davidson, R.C. Two-stream instability for a longitudinally compressing charged particle beam./ Startsev, E.A. Davidson, R.C. // *Physics Plasmas*. – 2006. – Vol. 13, No. 6. – P. 786.
- 17 Silin, I. Electron beam-plasma inter-action: Linear theory and Vlasov-Poisson simulation. / Silin, I., Sydora, R. & Sauer, K. // *Physics of Plasmas*. – 2007. – Vol. 14, No. 1. – 012106.
- 18 Haas, F. Physical interpretation of the quantum two-stream instability./ Haas, F., Bret, A. & Shukla, P.K. // *Physical Review*. – 2009. – Vol.80. - 066407.
- 19 Zeba, I. Electron-hole two-stream instability in a quantum semiconductor plasma with exchange-correlation effects. / Zeba, I., Yahia, M.E., Shukla, P.K. & Moslem, W.M. // *Physics Letters A*. – 2012. – Vol. 376. – P. 2309.
- 20 Startsev, E.A. Effects of beam-plasma instabilities on neutralized propagation of intense ion beams in background plasma./ Startsev, E.A., Kaganivich, I.D. & Davidson, R.C. // [Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment](#). – 2014. – Vol.733. – P. 80-85.
- 21 Krall, N.A. Principles of Plasma Physics./ Krall, N.A. Trivelpiece, A.W. // [American Journal of Physics](#). – 1973. – Vol. 41. – P. 1380.
- 22 Feshke, H. Computational Many-Particle Physics. / Feshke, H. Schneider, R., Wei Be, A. – Springer, 2008. – 795 p.



## ДОДАТКИ

### ДОДАТОК А

#### Лістинг програми acceleration

```
def acceleration(pmtx, nx, box_size, n0, gmtx, lmtx):
    #Прискорення кожної частинки через електричне поле
    #pmtx      це матриця положення частинок Nx1
    #nx        кількість клітинок сітки
    #n0        щільність
    #gmtx      матриця розрахунку градієнта
    #lmtx      матриця розрахунку оператора другої похідної
    в рівнянні Пуассона
    #a         матриця прискорення
    # Обчислюємо щільність частинок на сітці
    dx = box_size / nx
    j = np.floor(pmtx / dx).astype(int)
    jp1 = j + 1
    weight_j = (jp1 * dx - pmtx) / dx
    weight_jp1 = (pmtx - j * dx) / dx
    jp1 = np.mod(jp1, nx)
    n = np.bincount(j[:, 0], weights=weight_j[:, 0],
minlength=nx)
    n += np.bincount(jp1[:, 0], weights=weight_jp1[:, 0],
minlength=nx)
    n *= n0 * box_size / pmtx.shape[0] / dx

    # Розв'язуємо рівняння Пуассона
```

```
phi_grid = spsolve(lmtx, n - n0,
permc_spec="MMD_AT_PLUS_A")
e_grid = - gmtx @ phi_grid
e = weight_j * e_grid[j] + weight_jp1 * e_grid[jp1]

return -e
```

## ДОДАТОК В

## Лістинг програми main

```
def main():
    n: int = 40000 # Кількість частинок
    nx: int = 400 # Кількість клітинок в сітці
    t: int = 0 # поточний час
    t_end: int = 50 # кінцевий час
    dt: int = 1 # крок часу
    box_size: int = 50
    n_0: int = 1 # щільність
    vb: int = 3 # швидкість потоку
    vth: int = 1 # ширина потоку
    a: float = 0.1 # збурення
    plot_real_time: bool = True

    # Створюємо початкові умови
    np.random.seed(42)
    pmtx = np.random.rand(n, 1) * box_size
    vel = vth * np.random.randn(n, 1) + vb
    nh = int(n / 2)
    vel[nh:] *= -1
    vel *= (1 + a * np.sin(2 * np.pi * pmtx / box_size))

    # Будова матриці градієнта
    dx = box_size / nx
    e = np.ones(nx)
    diagram = np.array([-1, 1])
    vals = np.vstack((-e, e))
```

```

gmtx = sp.spdiags(vals, diagram, nx, nx)
gmtx = sp.lil_matrix(gmtx)
gmtx[0, nx - 1] = -1
gmtx[nx - 1, 0] = 1
gmtx /= (2 * dx)
gmtx = sp.csr_matrix(gmtx)

# Будова матриці розрахунку оператора другої похідної в
рівнянні Пуассона(лапласіан)
diagram = np.array([-1, 0, 1])
vals = np.vstack((e, -2 * e, e))
lmtx = sp.spdiags(vals, diagram, nx, nx)
lmtx = sp.lil_matrix(lmtx)
lmtx[0, nx - 1] = 1
lmtx[nx - 1, 0] = 1
lmtx /= dx ** 2
lmtx = sp.csr_matrix(lmtx)

acc = acceleration(pmtx, nx, box_size, n_0, gmtx, lmtx)

# кількість кроків часу
nt = int(np.ceil(t_end / dt))

for i in range(nt):
    vel += acc * dt / 2.0
    pmtx += vel * dt
    pmtx = np.mod(pmtx, box_size)
    acc = acceleration(pmtx, nx, box_size, n_0, gmtx,
lmtx)

```

```
vel += acc * dt / 2.0
t += dt
if plot_real_time or i == nt - 1:
    plt.cla()
    plt.scatter(pmtx[0:nh],      vel[0:nh],      s=.4,
color='blue', alpha=0.5)
    plt.scatter(pmtx[nh:],      vel[nh:],      s=.4,
color='yellow', alpha=0.5)
    plt.axis([0, box_size, -6, 6])

plt.pause(0.001)
```

**ДОДАТОК С****Лістинг програми gmtx**

```
e = np.ones(nx)
diagram = np.array([-1, 1])
vals = np.vstack((-e, e))
gmtx = sp.spdiags(vals, diagram, nx, nx)
gmtx = sp.lil_matrix(gmtx)
gmtx[0, nx - 1] = -1
gmtx[nx - 1, 0] = 1
gmtx /= (2 * dx)
gmtx = sp.csr_matrix(gmtx)
```

**ДОДАТОК D****Лістинг програми lmtx**

```
diagram = np.array([-1, 0, 1])
vals = np.vstack((e, -2 * e, e))
lmtx = sp.spdiags(vals, diagram, nx, nx)
lmtx = sp.lil_matrix(lmtx)
lmtx[0, nx - 1] = 1
lmtx[nx - 1, 0] = 1
lmtx /= dx ** 2
lmtx = sp.csr_matrix(lmtx)
```