

基于负氢离子源的全三维 PIC/MCC 模拟算法研究*

杨超[†] 刘大刚 王小敏 刘腊群 王学琼 刘盛纲

(电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

(2011 年 4 月 28 日收到; 2011 年 5 月 5 日收到修改稿)

在分析负氢离子源中等离子体物理机理基础上, 研究并优化粒子模拟算法, 设计高效的粒子存储方法. 研究并运用粒子碰撞蒙特卡罗方法, 考虑等离子体势以及带电粒子间库仑碰撞, 研制了全三维粒子模拟/蒙特卡罗算法 (PIC/MCC). 采用磁荷模型, 运用时域有限差分方法计算多峰磁场, 并结合国外负氢离子源 JT-60U, 考虑负氢离子源中主要反应, 对全三维 PIC/MCC 模拟算法模拟验证.

关键词: 负氢离子源, 粒子模拟, 蒙特卡罗

PACS: 52.65.Pp, 52.50.Dg

1 引言

目前, 基于全球 ITER 计划, 大量关于中性束注入 (NBI) 等离子体热核研究正在各国进行中. 由于负氢离子的中性化效率高, 因而备受国内外热核研究者的青睐 (如 Camembert III、JAERI 10 A 等大型装置)^[1-4]. 在热核实验中, 要求较大能量离子束对等离子体加热, 研究表明提高负离子源中负离子的产生率, 能有效地提高离子束功率. 近来, 日本学者在实验中发现, 离子源中电子能量分布的非均匀性会导致所产生的负氢离子空间分布不均匀, 这将影响离子束光学效应, 从而改变等离子体加热路径^[5]. 因此, 分析和研究电子能量空间分布的非均匀现象, 对于优化负氢离子源和负氢离子束光学特性等研究工作而言, 是十分重要的. 然而, 对等离子体输运及引出特性的研究光靠理论和实验手段, 不仅耗费巨大而且难度极大, 因而国内外大批研究者致力于开发模拟软件并对其进行数值模拟研究. 从早期的模拟研究成果知, 绝大多数负氢离子源的模拟报道, 都是采用较低维模型研究^[6-10]. 这些模拟对于理解和分析负氢离子源放电基本特性是可行的, 但考虑实际离子源的特殊形状和磁场形态时, 此类低维数值模拟方法不能真实反应离子源的物理机理. 鉴于物理情景的离子源模型都极其复杂, 采用全三

维的模拟算法对其数值模拟研究意义重大. 基于以上描述, 本文在 CHIPIC 粒子模拟软件平台下, 开发了一款全三维 (即三维空间三维速度) PIC/MCC 模拟软件, 并结合国外实验对其模拟验证.

2 全三维 PIC/MCC 算法研究

2.1 全三维 PIC/MCC 理论分析

带电粒子运动方程

$$m_i \frac{dv}{dt} = q_i (E + v \times B) + \text{collision}, \quad (1)$$

其中 m_i 为带电粒子质量, v 为带电粒子速度, q_i 为电量, E 为电场强度, B 为磁感应强度, collision 为带电粒子碰撞项.

在负氢离子源的模拟过程中, 影响粒子运动状态的因素包括: 粒子之间的碰撞和电磁场对其的洛伦兹力推动作用. 反过来带电粒子的运动也会影响电磁场. 在模拟时间步长较小的情况下能将两者分别处理. 鉴于此, 本文采用时间步进的方法, 在一个时间步长 Δt 内 (如图 1), 运用 Boris-Buneman^[11] 蛙跳网格方法, 利用时域有限差分 (FDTD) 方法求解带电粒子与电磁场之间相互作用, 利用蒙特卡罗方法处理粒子的碰撞. 此外, 对于模拟空间区域的

* 国家重点基础研究发展计划 (973) 项目 (批准号: 2007CB310401) 资助的课题.

[†] E-mail: ychao@uestc.edu.cn

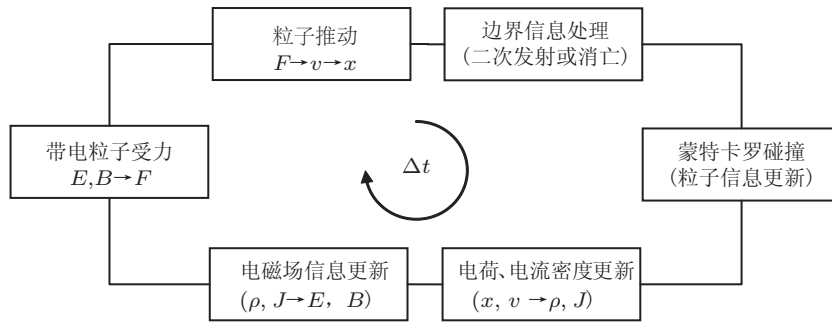


图1 带电粒子时间流程图

划分, 可将整个三维空间沿着 Z 方向划分为一个个平面处理 (如图 2). 具体处理过程如下: 在 A, B 面求解粒子所受电磁力, 并用体积权重法将场值插值到网格点上; 在 C 面处理粒子受电磁场推动并更新粒子信息, 以及计算粒子之间的碰撞并对带电粒子速度进行修正; 在 D 面处理粒子的发射和边界信息, 并考虑等离子体势对边界粒子的影响, 以确保粒子数目收支平衡. 由于在 PIC/MCC 算法处理过程中, 对粒子信息处理次数较多, 为了确保运算高效, 在一个时间步长开始时, 将所有粒子信息从硬盘中读出, 并用于 PIC 中 C 面粒子受力处理和 D 面粒子存活处理, 待处理完毕后将粒子信息存到缓存中, 并直接用于带电粒子与背景粒子间碰撞以及库仑碰撞处理, 最后将粒子信息存入硬盘中, 这样就可避免频繁地调用硬盘, 以提高计算效率. 目前, 由于全三维泊松方程的求解效率偏低, 因而本文采用准中性近似, 忽略电场作用, 对离子源数值模拟研究.

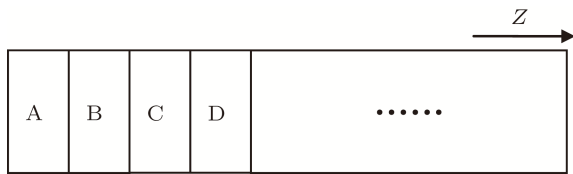


图2 模拟空间划分示意图

2.2 全三维带电粒子的碰撞处理

2.2.1 电子与中性粒子的碰撞

由 PIC 中计算得到了电子三个方向动量分量为 p_1, p_2, p_3 , 可计算相对论因子

$$\gamma = \sqrt{\frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{c^2} + 1}, \quad (2)$$

电子的速度

$$v_i = \sqrt{\frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{\gamma^2}}, \quad (3)$$

电子的动能 (单位: eV)

$$\varepsilon_i = \frac{m_e c^2}{e} \left(\sqrt{\frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{c^2} + 1} - 1 \right), \quad (4)$$

第 i 个电子的碰撞概率

$$P_i = 1 - \exp \left(-\Delta t \sum_j v_i \sigma_j(\varepsilon_i) n_j(x_i) \right), \quad (5)$$

其中 c 为真空光速, v_i 为电子速度, $\sigma_j(\varepsilon_i)$ 为第 j 类反应类型的碰撞截面, $n_j(x_i)$ 为第 j 类反应的靶粒子数密度.

第 j 类反应发生的分概率

$$P_j = \frac{n_j(x_i) \sigma_j(\varepsilon_i)}{\sum_j n_j(x_i) \sigma_j(\varepsilon_i)}. \quad (6)$$

蒙特卡罗方法处理粒子碰撞具体方法为: 首先计算 P_i , 比较 P_i 与均匀随机数的大小来决定是否发生碰撞, 碰撞发生后, 根据各反应类型的分概率大小 P_j 与另一个均匀随机数的大小关系, 以决定发生何种类型的反应, 根据各反应类型的碰撞动力学理论^[12] 处理碰撞后粒子的速度变化, 以及旧粒子的消亡与新粒子的产生.

2.2.2 库仑碰撞

在等离子体中, 带电粒子之间的库仑碰撞也是影响粒子沉积的重要因素. 本文采用 Takizuka 模型^[13] 计算带电粒子之间的碰撞, 目前仅考虑电子之间的库仑效应. 如图 3 所示, 具体处理流程如下: 首先将所有电子信息从缓存中读出并记录各粒子的原始地址, 然后按照不重复规则将电子排序, 再随机地选取两个电子进行碰撞, 当粒子总数为偶数时, 每组粒子对仅参与一次库仑碰撞, 当粒子总数为奇数时, 让最后三个粒子两两碰撞. 当粒子对选取完毕后, 让每组粒子对进入库仑碰撞动力学处理模块, 得到粒子库仑碰撞后的速度. 最后,

将所有粒子按照原始地址读入硬盘 (即不改变粒子的坐标信息).

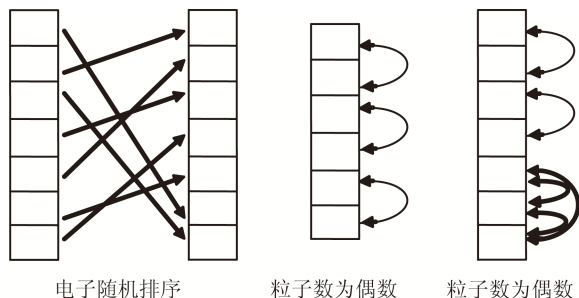


图3 电子间库仑碰撞处理流程示意图

2.3 多峰磁场和等离子体势计算

特定形态磁场不仅能有效约束粒子, 还能改善负氢离子的引出效率. 另外, 在离子源的设计中, 必须考虑负氢离子的引出, 由于负氢离子和电子的回旋半径不同, 电子更容易被磁化而滞留在离子源的源区, 因而引入合理的过滤磁场形态对于设计负氢离子源也十分重要. 本工作在 CHIPIC 软件平台上, 采用磁荷模型, 对矩形磁体进行差分, 并数值求解磁场分布, 在多峰磁场中, 单个磁体结构如图 4 所示.

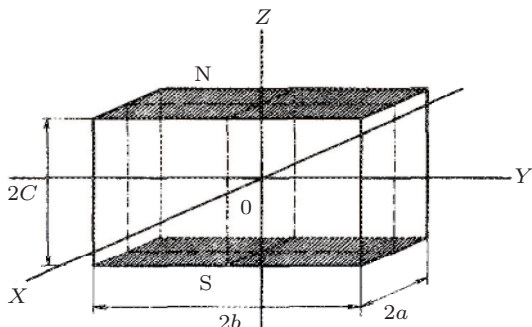


图4 单个磁体结构

为了保证等离子体放电过程中粒子数收支平衡, 必须引入合理的粒子消亡模型. 当粒子运动到模拟边界时, 由于每个粒子的速度大小不同, 它们受到其他场粒子的影响也不同. 本文采用一种简化模型处理粒子是否被器壁俘获, 其理论公式^[14]为

$$V_{sh} = (kT_e/2e) \ln [(1/2\pi) \cdot (m_{ion}/m_e)], \quad (7)$$

其中 V_{sh} 为等离子体势, m_{ion} 为离子质量, m_e 为电子质量, kT_e 为电子能量.

当电子能量大于 V_{sh} 时, 电子将被壁吸收, 当

电子能量小于 V_{sh} 时, 电子将被反射. 具体实现如下: 首先判定电子从哪个边界越界, 然后根据光路反射原理结合电子能量和动量守恒, 计算电子与壁碰撞后的速度大小.

表1 磁场设置

	a/mm	b/mm	c/mm	磁荷面方向	磁体个数
第一类磁场	4	120	10	垂直 X 轴	5×2
第二类磁场	4	240	5	垂直 Y 轴	4×2
第三类磁场	4	240	5	垂直 Z 轴	6
过滤磁场	8	120	10	垂直 X 轴	1×2

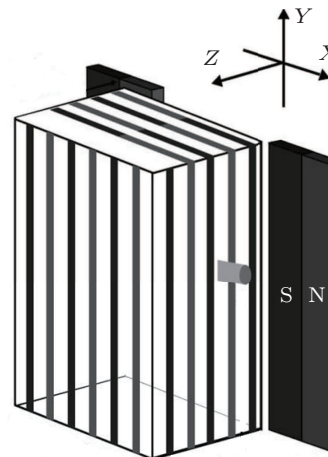


图5 模拟模型结构图

3 模拟参数设置及描述

图 5 是离子源模拟模型的结构图, $-120 \text{ mm} < X < 120 \text{ mm}$, $-240 \text{ mm} < Y < 240 \text{ mm}$, $0 \text{ mm} < Z < 203 \text{ mm}$, 各边界都设置为良导体, 磁场按照表 1 设置. 每隔 10^{-8} s 从 $X = 0, Y = 0, Z = 100 \text{ mm}$ 处发射 100 个宏粒子. 考虑粒子模拟的约束条件, 以及碰撞概率的约束条件, X, Y, Z 三个方向网格分别设为 $2 \text{ mm}, 4 \text{ mm}, 2 \text{ mm}$. PIC 中时间步长设为 10^{-10} s , 电子与中性粒子间碰撞以及电子之间的库仑碰撞时间步长都设为 10^{-8} s . 为了简化计算, 假定模拟过程中氢分子、氢原子、各类氢离子密度分布均匀且不随时间变化, 氢分子的温度设为 300 K , H_2^+ 数密度为 $1.0 \times 10^8 \text{ mm}^{-3}$, H_3^+ 数密度为 $5.0 \times 10^8 \text{ mm}^{-3}$, 氢原子与氢气分子粒子数密度之比为 $10 : 1$ ^[15], 电子与上述各类靶粒子之间的反应类型如表 2 所示.

表 2 模拟所考虑的反应类型

指数	碰撞形式	反应前	反应后
1	激发	$e+H(1s)$	$e+H^*(2p)$
2	电离	$e_1+H(1s)$	$e_1+e_2+H^+$
3	振动激发	$e+H_2(v=0)$	$e+H_2(v=1)$
4	电子激发	$e+H_2(X^1\Sigma_g^+)$	$e+H_2^*(B^1\Sigma_u^+2p\sigma)$
5	电子激发	$e+H_2(X^1\Sigma_g^+)$	$e+H_2^*(b^3\Sigma_u^+)$ $e+H_2^*(a^3\Sigma_g^+)$ $e+H_2^*(c^3\Pi_u^+)$
6	离解	$e+H_2(X^1\Sigma_g^+)$	$e+H(1s)+H^*(2s)$
7	电离	$e+H_2(X^1\Sigma_g^+)$	$e+H_2(v)^++e$
8	离解复合	$e+H_2^+(0 \leq v \leq 9)$	$H(1s)+H^*(n \geq 2)$
9	离解复合	$e+H_3^+$	$H+H+H$
10	弹性的	$e+H_2$	$e+H_2$

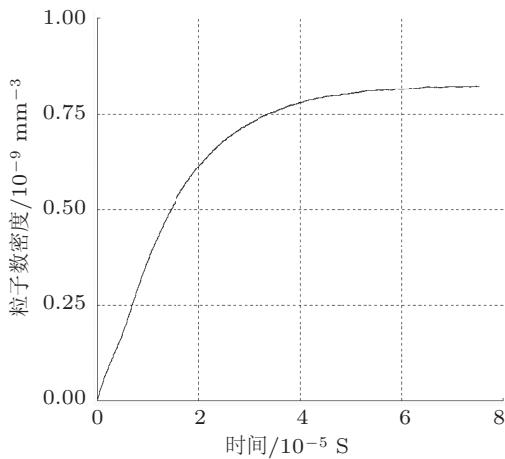


图 6 电子数密度随时间演化

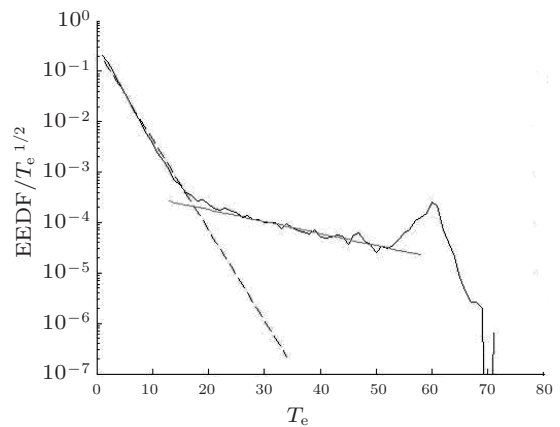


图 7 电子能量分布与电子温度随能量变化

4 模拟结果与验证

随着时间推移,当电子数密度达到稳定状态后,得到一些模拟结果.

由图 6 知当模拟时间到达 4.0×10^{-5} s 时电子收支达到平衡,电子数密度稳定在 $0.8 \times 10^9 \text{ mm}^{-3}$,表明所模拟等离子体达到稳态.图 7 中 EEDF 为电子能量分布函数, T_e 为电子能量(下同).由图 7 知电子能量主要分布在两个电子能级,通过计算知两个能级分别是 2.3 eV(图 7 中虚线)和 19 eV(图 7 中实线),且在 70 eV 附近存在电子盲区.

由图 8 知多峰磁场对电子起到约束作用,且 Z 轴下游过滤磁场对电子起到阻滞作用,由图 9 知电子在 Y 方向产生了漂移.

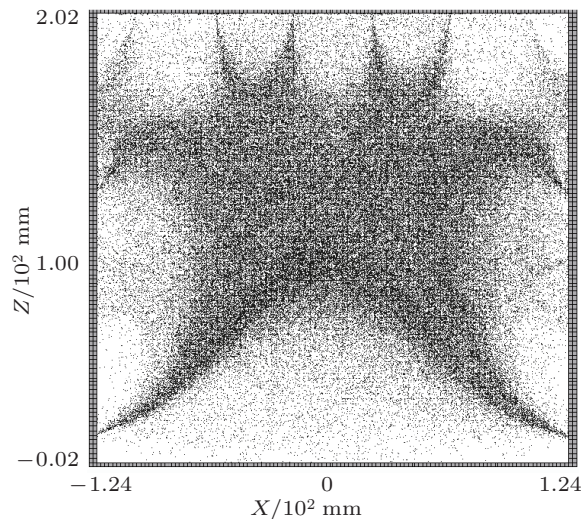


图 8 电子在 XZ 平面相空间图

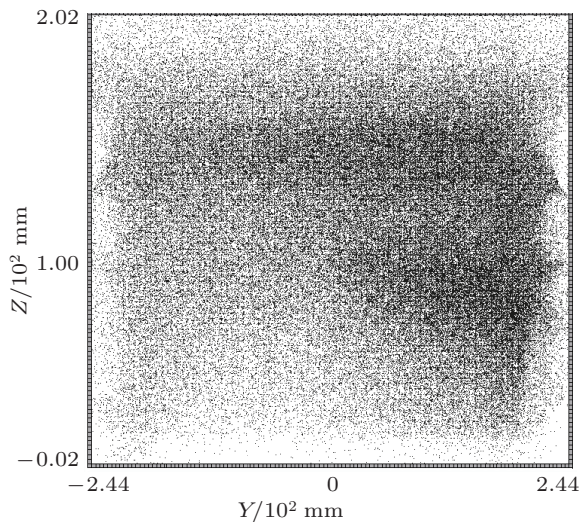


图9 电子在YZ平面相空间图

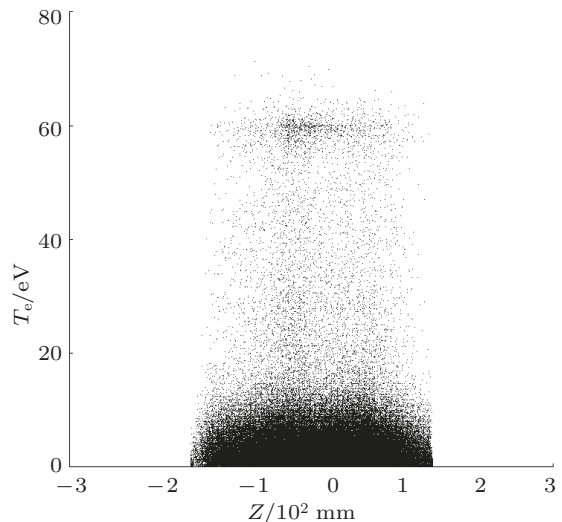


图11 电子能量在Z方向分布

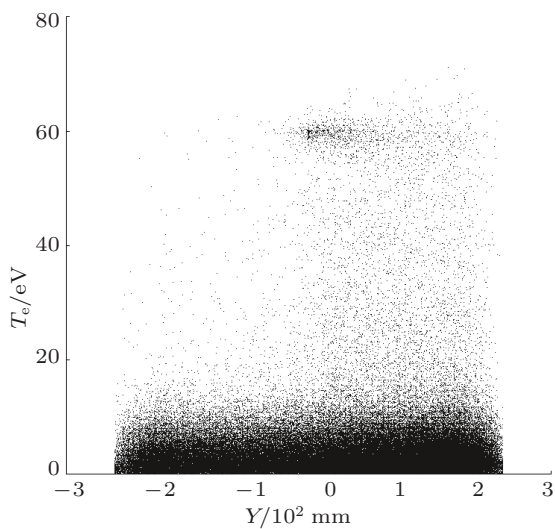


图10 电子能量在Y方向分布

由图 10 和图 11 知电子之间的库仑碰撞和电子与氢分子、离子及原子间碰撞共同决定了电子能量沉积. 另外, 图 10 也显示了电子在 Y 方向产生了 $B \times \nabla B$ 漂移.

综合以上模拟截图知, 模拟结果与近几年国内外负氢离子源模拟和实验工作基本符合, 证明了此全三维 PIC/MCC 算法的正确性.

5 结论

本文主要从 PIC/MCC 模拟算法研究入手, 采用 FDTD 方法计算永磁体, 添加库仑碰撞和等离子体势垒计算模块, 在全三维 CHIPIC 粒子模拟上, 实现了负氢离子源的数值模拟, 并结合国外研究热门离子源模拟验证, 模拟得到的等离子体特性和参数与实际相符.

- [1] Terasaki R, Fujino I, Hatayama A 2010 *Review of Scientific Instruments* **81** 02A703
- [2] Fujino I, Hatayama A, Takado N 2008 *Review of Scientific Instruments* **79** 02A510
- [3] Tobari H, Hanada M, Kashiwagi M 2008 *Review of Scientific Instruments* **79** 02C111
- [4] Katoh K, Takado N, Hatayama A 2006 *Review of Scientific Instruments* **77** 03A535
- [5] Takado N, Tobari H, Inoue T 2008 *Journal of Applied Physics* **103** 053302
- [6] Zhao H Y, Mu Z X 2008 *Chinese Physics B* **17** 1475
- [7] Gorse C, Capitelli M, Bacal M 2008 *Chemical Physics* **117** 117
- [8] Jin X L, Huang T, Liao P, Yang Z H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5526 (in Chinese) [金晓林, 黄桃, 廖平, 杨中海 2009 物理学报 **58** 5526]
- [9] Jin X L, Yang Z H 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5774 (in Chinese) [金晓林, 杨中海 2006 物理学报 **55** 5930]
- [10] Jin X L, Yang Z H 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5774 (in Chinese) [金晓林, 杨中海 2006 物理学报 **55** 5935]
- [11] Birdsall C K, Langdon A B 1985 *Plasma Physics Via Computer Simulation* (New York: McGraw-Hill) pp13
- [12] Vahedi V, Surendra M 1995 *Computer Physics Communication* **87** 179
- [13] Chiaming W, Tungyou L, Russel C 2008 *Journal of Computational Physics* **227** 4308
- [14] Emmert G A, Wieland R M, Mense A T 1980 *Physics of Fluids* **23** 803
- [15] Bruneteau A M, Hollos G, Bacal M 1990 *Journal of Applied Physics* **67** 7254

A three-dimensional particle-in-cell/Monte Carlo computer simulation based on negative hydrogen ion source*

Yang Chao[†] Liu Da-Gang Wang Xiao-Ming Liu La-Qun
Wang Xue-Qiong Liu Sheng-Gang

(*University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China*)

(Received 28 April 2011; revised manuscript received 5 May 2011)

Abstract

Based on the analysis of the plasma physics mechanism in negative hydrogen ion source, the particle-in-cell algorithm is studied and optimized and a high efficient storage method of particles is designed. Using the Monte Carlo collision model, considering the plasma potential and coulomb collisions between charged particles, the full three-dimensional particle-in-cell/ Monte Carlo algorithm (PIC/MCC) is developed. With the magnetic charge model, using the FDTD method, the line cusp magnetic field is calculated. With the negative hydrogen ion source JT-60U and considering the main reactions in the negative hydrogen ion source, the full three-dimensional PIC/MCC simulation algorithm is verified by simulation.

Keywords: negative hydrogen ion source, particle-in-cell, Monte Carlo method

PACS: 52.65.Pp, 52.50.Dg

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No.2007CB310401).

[†] E-mail: ychao@uestc.edu.cn