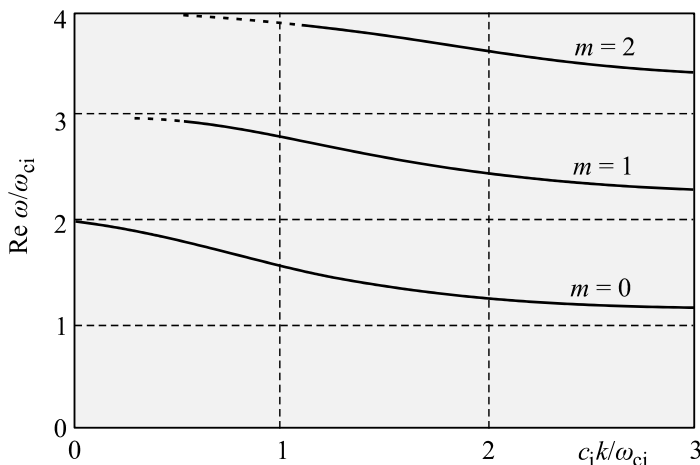


$$m\omega_{ci} < |\operatorname{Re}(\omega)| < (m+1)\omega_{ci}; \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (5.180)$$

Imaginární část frekvence, která je zodpovědná za útlum, razantně roste, pokud se vlny nešíří kolmo na magnetické pole. Útlum také roste s číslem módu m , jen několik nejnižších Bernsteinových módů se šíří téměř bez útlumu. Elektrické pole Bernsteinových módů míří přibližně ve směru vlnového vektoru.



Obr. 141: První tři Bernsteinovy iontové módy. Na vodorovné ose je bezrozměrný vlnový vektor a na svislé ose reálná část bezrozměrné frekvence.

Obdobná sada Bernsteinových módů existuje i pro elektrony. Tyto módy plazmových vln se opět šíří kolmo na magnetické pole (v tomto směru je jejich útlum minimální) a mají frekvenci mezi jednotlivými harmonickými elektronové cyklotronní frekvence.

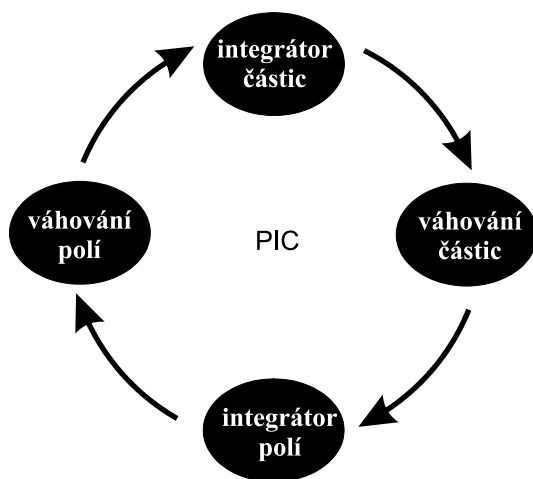
5.5 PIC simulace

PIC (Particle in Cell, částice v buňce) patří mezi nejoblíbenější algoritmy ve fyzice plazmatu. Jde o hybridní simulace – částice se pohybují v prostoru volně v souladu s pohybovou rovnicí, pole jsou ale známa jen ve vrcholech předem dané mříže. Částice tak interaguje nikoli se všemi ostatními částicemi, ale se středním polem generovaným celým souborem částic. Označíme-li N počet částic v simulaci, sníží tento přístup výpočetní náročnost z N^2 (v molekulární dynamice, kde interaguje každá částice s každou) na $N \log N$. Každá částice v PIC kódu představuje v mnoha simulacích celý shluk skutečných částic.

PIC algoritmus je vhodný k popisu vln a nestabilit v plazmatu, přepojení magnetických indukčních čar, ohřevu plazmatu, interakce laserového paprsku s plazmatem, ke sledování vývoje turbulencí atd. Úspěšnost simulace je podmíněna vhodnou volbou časového a prostorového kroku. Obecně by časový krok integrátoru pohybové rovnice

měl být výrazně kratší než perioda odpovídající plazmové frekvenci elektronů a prostorový krok mříže by měl být menší (nebo alespoň srovnatelný), než je Debyeova vzdálenost v simulovaném plazmatu. Základní cyklus PIC metody probíhá ve čtyřech stěžejních krocích:

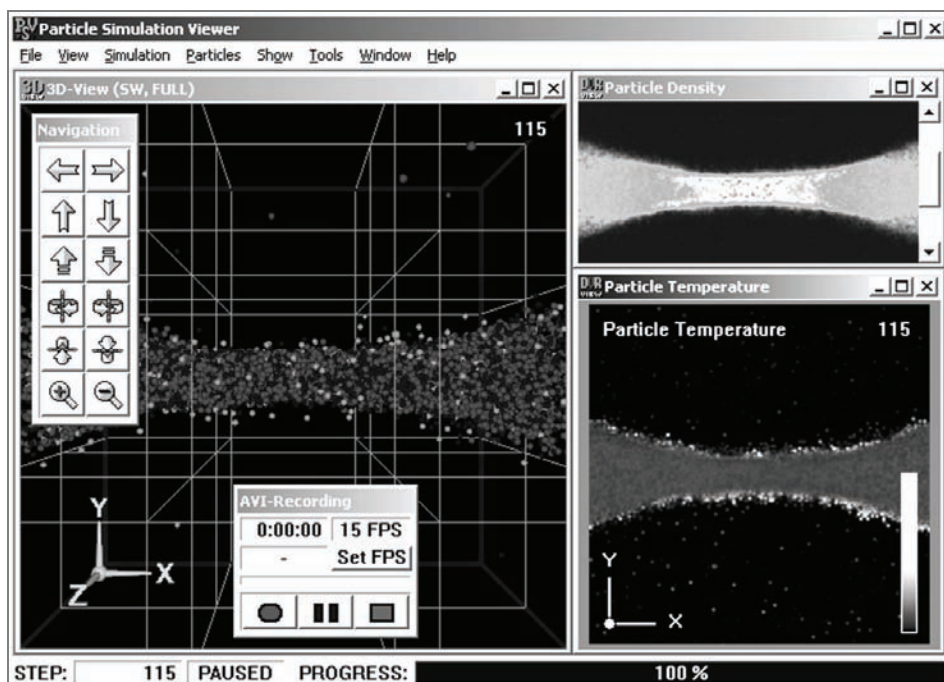
1. *Váhování částic.* Ze známých poloh a rychlostí částic určíme hustotu náboje a proudovou hustotu ve vrcholech mříže. Částici zpravidla rozdělíme mezi nejbližší vrcholy podle nějakého pravidla, které zajistí aby největší část částice „patřila“ do nejbližšího vrcholu. Ve vrcholech mříže po tomto kroku známe zdrojové členy Maxwellových rovnic.
2. *Integrátor polí.* Z Maxwellových rovnic určíme hodnotu elektrického a magnetického pole ve vrcholech mříže. Maxwellovy rovnice se zpravidla řeší pro potenciály a teprve poté se určují elektromagnetická pole. Lze využít veškeré dostupné metody pro řešení parciálních diferenciálních rovnic (sítě, konečné prvky, rychlou Fourierovu transformaci atd.). Po tomto kroku známe hodnoty polí ve vrcholech mříže.
3. *Váhování polí.* Po předchozím kroku jsou pole známa ve vrcholech mříže a je nutné zjistit hodnoty polí v místech, kde jsou lokalizovány částice. Pole je třeba „rozháňovat“ do pozice konkrétní částice, jde o obrácený postup než u váhování částic. Po tomto kroku známe hodnotu pole v místě libovolně zvolené částice.
4. *Integrátor částic.* Procházíme jednotlivé částice (pole u nich již známe) a pohneme s nimi ve shodě s pohybovými rovnicemi. Integraci pohybových rovnic provádíme standardními metodami (například Runge-Kutta. Leap-Frog atd., viz kapitola 1.5)



Obr. 142: Základní cyklus PIC algoritmu.

Základní cyklus je srdcem PIC metody, nicméně k její implementaci je potřeba celá řada pomocných procedur. Důležité jsou počáteční podmínky (jakým způsobem je generováno počáteční rozdělení částic v plazmatu) a okrajové podmínky (jak se plazma má chovat na hranicích sledované oblasti). PIC výpočet není myslitelný bez zobrazování částic a polí, zde se nabízí nepřeberné množství metod – barvy částic mohou znázorňovat náboj, odstín barvy teplotu, částice za sebou mohou nechávat postupně mizející stopu nebo jsou zobrazeny jen jako pohybující se body, kuličky či mnohostěny. Pole

zpravidla zobrazujeme pomocí indukčních čar, buď prostorových nebo v různých řezech. Důležitá je tzv. diagnostika plazmatu, při které v probíhající simulaci počítáme makroskopicky ověřitelné parametry plazmatu (teplotu, koncentraci, měrná tepla, susceptibilitu, permeabilitu, permitivitu atd.). Pomocí Monte Carlo metod můžeme realizovat srážky nabitých částic s neutrály. Vzhledem k tomu, že interakce nabitých částic v rámci jedné buňky sítě je PIC metodou podceňena, je možné doplnit výpočet i Monte Carlo metodou, která zahrne náhodné binární srážky nabitých částic v rámci dané buňky sítě.

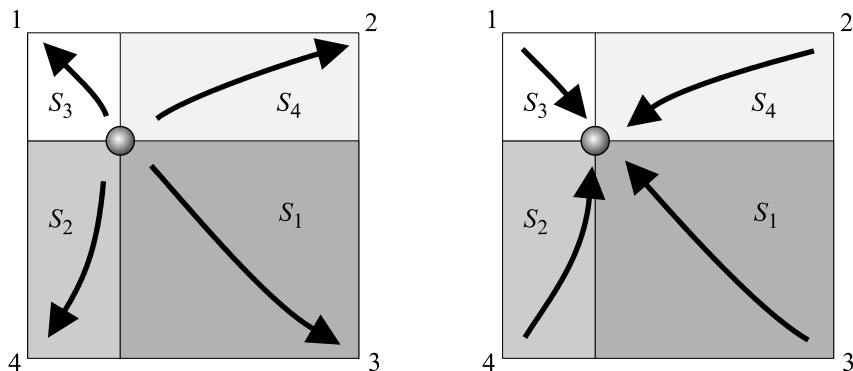


Obr. 143: Grafické uživatelské rozhraní programového balíku PIC vyvíjeného na pracovišti autora.

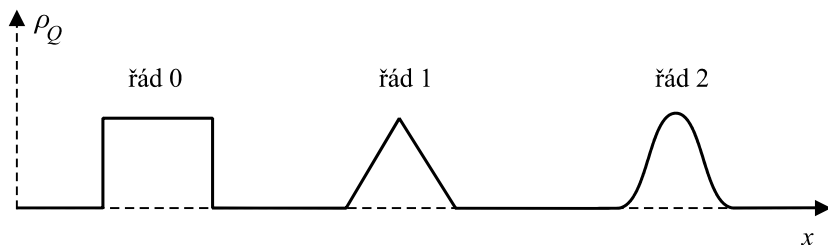
5.5.1 Váhování

Váhování je v PIC metodě prováděno dvakrát. Jednou jsou váhovány částice do vrcholů mříže a podruhé je váhováno pole z vrcholů mříže k částicím. Oba typy váhování by měly být stejného řádu. Popišme si nyní, jak probíhá váhování částic, zpětné váhování polí je obdobné. Nejjednodušší je tzv. váhování *nultého řádu*, při kterém předpokládáme, že částice patří celá do nejbližšího vrcholu mříže. Takové váhování je sice velmi rychlé, ale má své nevýhody. Představme si částici letící napříč mříží a sledujme například hustotu náboje v konkrétním vrcholu mříže. Hustota náboje bude nejprve nulová, jakmile se částice dostatečně ke sledovanému vrcholu přiblíží, skokem vzroste na maximální hodnotu a po odletu částice opět skokem poklesne na nulu. Takovéto skokové změny mohou zapříčinit numerické nestability metody. Většinou se proto využívá tzv. váhování prvního řádu, které si objasníme pro rovinný případ. Částice je rozváhována k nejbližším vrcholům (v rovině jde o 4 vrcholy) v poměru protilehlých ploch, čímž

dosáhneme toho, že nejbližšímu vrcholu patří největší část částice a nejbližšímu nejmenší. V prostorovém případě se váhování děje k nejbližším osmi sousedům v poměru protilehlých objemů. Existují i váhování vyšších řádů, která jsou kvalitnější, ale výpočetně náročnější.



Obr. 144: Váhování prvního řádu (nalevo částice, napravo pole)



Obr. 145. Průběh hustoty náboje ve vrcholu mříže způsobený prolétávající částicí při různých váhováních.

5.5.2 Řešení polí

Pro řešení polí ve vrcholech mříže existuje velké množství nejrůznějších metod. Pokud se pole změní za zvolený časový krok málo, postačí řešit Poissonovy rovnice pro potenciály (ρ_Q je hustota náboje, \mathbf{j}_Q je proudová hustota)

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho_Q}{\epsilon_0}; \quad (5.181)$$

$$\nabla^2 \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{j}_Q.$$

Po nalezení potenciálů (jakoukoli numerickou metodou) určíme pole ze vztahů

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\nabla \phi; \\ \mathbf{B} &= \text{rot } \mathbf{A}. \end{aligned} \quad (5.182)$$

Popišme stručně metodu řešení založenou na Fourierově transformaci, která je vhodná pro oblast ve tvaru kvádrů ($L_x \times L_y \times L_z$) s periodickými okrajovými podmínkami. Celý algoritmus má pět kroků:

1. Diskretizace Poissonovy rovnice.
2. Diskrétní Fourierova transformace (DFT) rovnic.
3. Algebraické řešení v \mathbf{k} prostoru.
4. Provedení inverzní diskrétní Fourierovy transformace (IDFT), získání potenciálu.
5. Výpočet polí ve vrcholech mříže.

Popišme tyto kroky na Poissonově rovnici pro potenciál elektrického pole. Diskretizaci můžeme provést například přes centrální diference (hustotu náboje budeme značit ρ):

$$\begin{aligned} \frac{\Delta_x^2 \varphi}{(\Delta x)^2} + \frac{\Delta_y^2 \varphi}{(\Delta y)^2} + \frac{\Delta_z^2 \varphi}{(\Delta z)^2} &= -\frac{\rho_{n_1, n_2, n_3}}{\varepsilon_0}; \\ \frac{\Delta_x^2 \varphi}{(\Delta x)^2} &\equiv \frac{\varphi_{n_1+1, n_2, n_3} - 2\varphi_{n_1, n_2, n_3} + \varphi_{n_1-1, n_2, n_3}}{(\Delta x)^2}, \\ \frac{\Delta_y^2 \varphi}{(\Delta y)^2} &\equiv \frac{\varphi_{n_1, n_2+1, n_3} - 2\varphi_{n_1, n_2, n_3} + \varphi_{n_1, n_2-1, n_3}}{(\Delta y)^2}, \\ \frac{\Delta_z^2 \varphi}{(\Delta z)^2} &\equiv \frac{\varphi_{n_1, n_2, n_3+1} - 2\varphi_{n_1, n_2, n_3} + \varphi_{n_1, n_2, n_3-1}}{(\Delta z)^2}. \end{aligned} \quad (5.183)$$

Diskrétní Fourierova transformace (DFT) funkce F a inverzní diskrétní Fourierova transformace (IDFT) jsou dány vztahy:

$$\begin{aligned} \tilde{F}(k_1, k_2, k_3) &= \frac{1}{N_1 N_2 N_3} \sum_{n_1=0}^{N_1-1} \sum_{n_2=0}^{N_2-1} \sum_{n_3=0}^{N_3-1} F(n_1, n_2, n_3) \exp \left[2\pi i \left(\frac{k_1 n_1}{N_1} + \frac{k_2 n_2}{N_2} + \frac{k_3 n_3}{N_3} \right) \right]; \\ F(n_1, n_2, n_3) &= \sum_{k_1=0}^{N_1-1} \sum_{k_2=0}^{N_2-1} \sum_{k_3=0}^{N_3-1} \tilde{F}(k_1, k_2, k_3) \exp \left[-2\pi i \left(\frac{k_1 n_1}{N_1} + \frac{k_2 n_2}{N_2} + \frac{k_3 n_3}{N_3} \right) \right]. \end{aligned}$$

Aplikace DFT převede rovnici (5.183) do \mathbf{k} prostoru:

$$\left[\frac{4N_1^2}{L_x^2} \sin^2 \frac{\pi k_1}{N_1} + \frac{4N_2^2}{L_y^2} \sin^2 \frac{\pi k_2}{N_2} + \frac{4N_3^2}{L_z^2} \sin^2 \frac{\pi k_3}{N_3} \right] \tilde{\varphi}(k_1, k_2, k_3) = \frac{\tilde{\rho}(k_1, k_2, k_3)}{\varepsilon_0}. \quad (5.184)$$

Poznamenejme, že spojitá Fourierova transformace pro spojitou proměnnou by dala $k^2 \tilde{\varphi} = \tilde{\rho} / \varepsilon_0$. Kvadráty funkce sinus, které se objevily ve výsledku, jsou způsobeny vlivem mříže. Algebraické řešení rovnice je velmi jednoduché:

$$\tilde{\varphi}(k_1, k_2, k_3) = \frac{\tilde{\rho}(k_1, k_2, k_3)}{\varepsilon_0 \left[\frac{4N_1^2}{L_x^2} \sin^2 \frac{\pi k_1}{N_1} + \frac{4N_2^2}{L_y^2} \sin^2 \frac{\pi k_2}{N_2} + \frac{4N_3^2}{L_z^2} \sin^2 \frac{\pi k_3}{N_3} \right]}. \quad (5.185)$$