



北京航空航天大学  
BEI HANG UNIVERSITY

学士学位毕业论文答辩

# 电推进等离子体的 PIC程序设计

答辩人：崔 忱

导 师：汤海滨

北京航空航天大学

宇航学院

2017年6月8日



# 答辩内容概览

- 第一部分 绪论及研究背景
- 第二部分 电推进等离子体的基础物理理论
- 第三部分 PIC程序的数值实现方法
- 第四部分 计算结果及并行实现
- 第五部分 结论
- 第六部分 致谢

# 第一部分 绪 论

## 1.1 课题的背景及意义

(对应内容：论文1.1节)

## 1.2 国内外研究现状及数值方法介绍

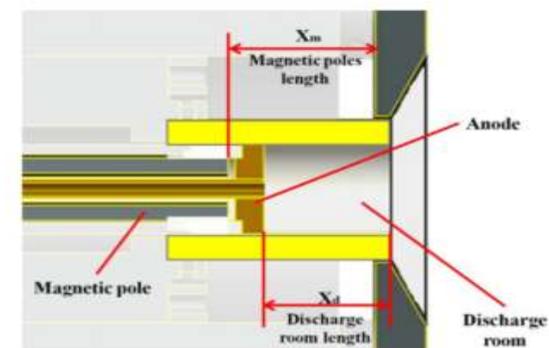
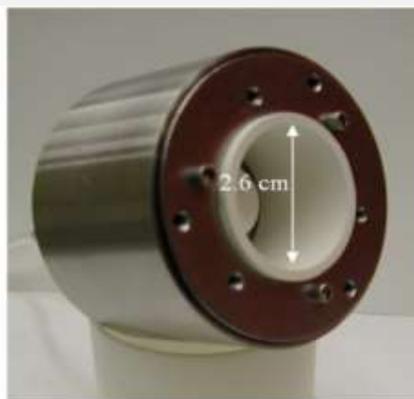
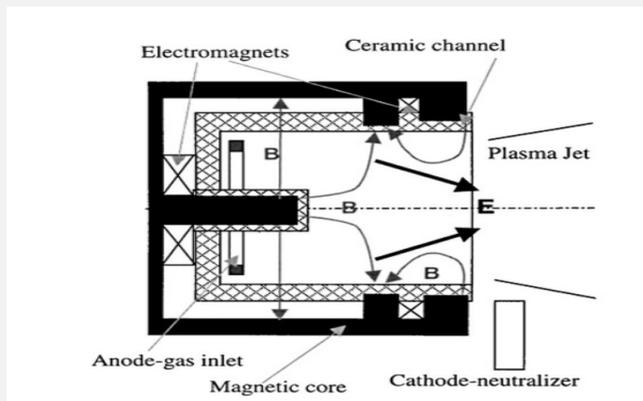
(对应内容：论文1.2-1.3节)

## 1.3 本次毕设主要完成的任务

(对应内容：论文1.4节)

## 1.1 课题的背景及意义

- **课题背景**：电推进目前方兴未艾，是研究者关注的热点。由于探针探测可能破坏放电室内等离子体状态，采用数值仿真的方式进行研究。PIC程序可以用于放电室进行仿真，故而提出设计PIC程序作为本次课题内容。同时利用新设计的PIC程序对于圆柱形霍尔推进器进行验证计算。
- **研究目标**：设计PIC程序，并利用该程序研究圆柱形霍尔推进器放电室内部在不同磁场环境下的物理性质。
- **研究目的意义**：设计通用的等离子体PIC程序，并且利用该程序更好的设计霍尔推进器，提高霍尔推进器效率，必须要理解霍尔推进器内部放电现象。



## 1.2 国内外研究现状及主流数值方法

### • 主流数值方法：

- MHD：做出连续性假设，认为等离子体中的离子、电子、原子均为流体。计算量小，但是对于稀薄的等离子体（电推进放电室内）计算精度低。
- DK：直接对于波尔兹曼方程视作双曲型偏微分方程进行离散，方兴未艾，还有许多问题需要解决。
- PIC：将所有粒子视作粒子，利用类似于CFD的方法计算电场，利用电场推动粒子，更新信息。优点是计算精度高，能够解决物理问题，但是计算量大。

### • 国内外对于圆柱形霍尔推进器研究现状：

- 来自美国 Princeton 大学的 A. Smirnov等在 2003 年对圆柱形霍尔推进器的放电通道进行了仿真，其研究目的在于利用数值仿真探索了解何种数量级的电子交叉场效应。
- 2007 年，来自法国的 L. Garrigues[3] 等对于微型圆柱形霍尔推进器采用了二维的混合模型对于通道电势降落位置以及电离主要发生的位置和工质利用率进行了研究。
- 2015 年，哈工大的高园园等利用了 PIC 方法对于微型圆柱形霍尔推进器进行了研究。其主要研究目的在于考察变流量工况下推进器通道内的等离子体运动变化。

### • 本文创新点：

- 利用电推进PIC代码，验证计算不同磁场位形下的圆柱型霍尔推进器放电室内物理情况。

## 1.3 本次毕设主要完成的工作

- **在实验室原有工作基础上根据现有计算域编写并修改完善了电离模块：**
  - 一、二价离子运动模块的边界条件编写
  - 电子与中性原子碰撞激发模块的完善
  - 电子与一价离子碰撞激发模块的完善
  - 电子与二价离子碰撞激发模块的完善
- **在实验室原有基础上修改了保存读写模块，并使之适应于目前的计算域。**
- **参与修正DADI场求解器。**
  - 探讨边界条件的设置，并且协助师兄师姐进行验证。
- **搭建实验室并行环境并及进行管理**
- **独立开发了并行的DADI电场求解器，并且进行了验证。**
  - 利用SRB信息交互方式开发了非阻塞式的并行计算的DADI场求解器
- **利用代码对于不同磁场条件下的放电室内部物理情况进行计算，并且进行了对比。**
  - 计算了不同情况下的电势分布、电子密度分布、一价、二价离子密度分布、电子温度分布

## 第二部分 电推进等离子体的基础物理理论

### 2.1 电子传导及电子运动

(对应内容：论文2.1节)

### 2.2 碰撞理论

(对应内容：论文2.2-2.3节)

## 2.1 电子传导及电子运动

- **电子传导是推进器中的重要物理性质：**

- 利用下述公式定义电子传导率：

$$\vec{v} = \mu \vec{E}$$

- 其中 $\mu$  是张量

- **理论推导上得到结果与实验值不符合：**

- 理论推导结果：

$$\mu_{\perp} = \frac{\mu_{\parallel}}{1 + \omega_c^2 \tau^2}$$

- 引入波姆传导解释这一现象，在本仿真中利用等效波姆碰撞来体现波姆传导：

$$\mu_{Bohm} = \frac{\alpha_B}{16m} qB$$

- 拟合实验数据可以得到合适的  $\alpha_B$

## 2.2 碰撞理论

### • 电子-原子碰撞：

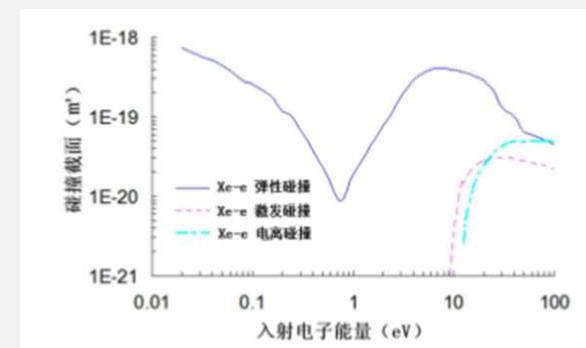
- 弹性碰撞（原子、电子之间没有能量损失）
- 激发碰撞（原子电子的动能一部分转化为电子、原子得不得能量）
- 电离碰撞（激发出新的电子和离子）

### • 离子-原子碰撞：

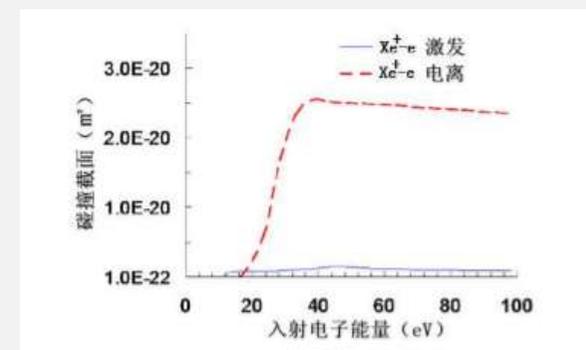
- 弹性碰撞（原子、电子之间没有能量损失）
- CEX 碰撞（电荷交换碰撞）

### • 电子-离子碰撞：

- 库伦碰撞（电荷作用力，非接触等效碰撞）
- 三体结合碰撞（电子、离子结合为新的原子）
- 激发碰撞（原子电子的动能一部分转化为电子、原子的能量）
- 电离碰撞（激发出新的电子和离子）



氙原子与电子的碰撞截面与电子能量的关系曲线



氙离子与电子的碰撞截面与电子能量的关系曲线

## 第三部分 PIC程序的数值实现方法

### 3.1 计算区域网格及时间步长

(对应内容：论文3.1-3.3节)

### 3.2 电磁场计算

(对应内容：论文3.4节)

### 3.3 粒子运动与粒子入射

(对应内容：论文3.5-3.6节)

### 3.4 碰撞的数值实现

(对应内容：论文3.7-3.9节)

### 3.5 并行计算数值方法

(对应内容：论文3.10节)

## 3.1 计算区域网格及时间步长

### • 几何参数：

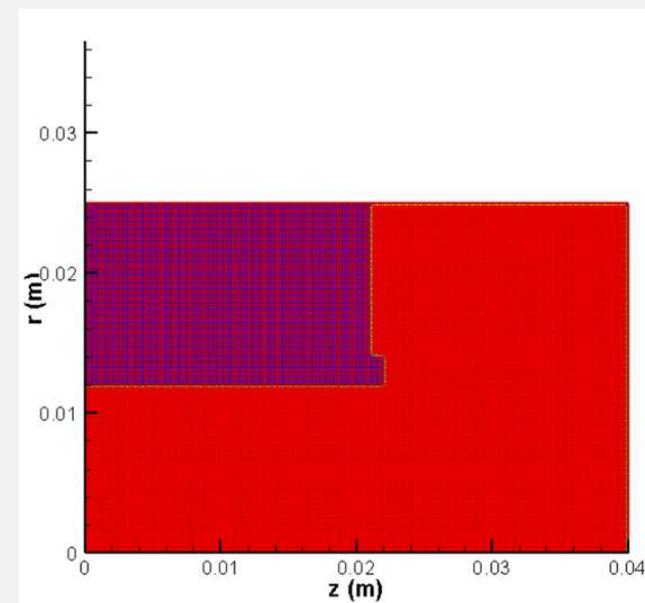
- 放电通道长0.022m，半径0.012m，计算域之中还包含有外磁极。外陶瓷厚度为0.0024m，磁极长度0.021m，高度0.0106m，阳极的内径是0.006m。
- 本文产生的网格数是200\*125。网格长度 $2 * 10^{-4}$

### • 时间步长：

- 时间步长必须满足下述公式：

$$\Delta t \leq \frac{1}{\omega_{ne}} \quad \text{且} \quad \Delta t \leq \frac{1}{\omega_{ce}}$$

- 本文选取的计算时间步长为  $2.0 * 10^{-12}$ ，其中离子由于运动比较慢采用了每50个时间步长推动一次的方法



计算域示意图

## 3.2 电磁场计算

### • 磁场：

- Comsol计算磁场，作为数据文件导入代码。

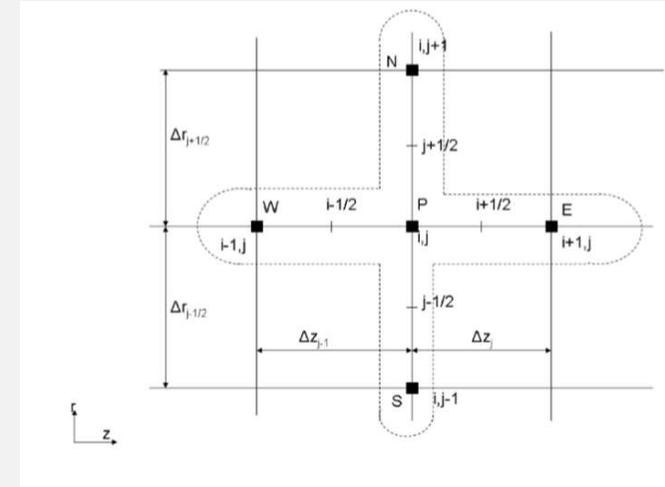
### • 电场：

- DADI计算电场，离散方式如下：

$$\begin{aligned} \nabla^2(\varepsilon_a \phi) = & \frac{2\varepsilon_{a,i+1/2,j}}{\Delta z_{i,j}(\Delta z_{i,j} + \Delta z_{i-1,j})}(\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}) - \frac{2\varepsilon_{a,i-1/2,j}}{\Delta z_{i-1,j}(\Delta z_{i,j} + \Delta z_{i-1,j})}(\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}) \\ & + \frac{2r_{i,j+1/2}\varepsilon_{a,i,j+1/2}}{(\Delta r^2)_j\Delta r_{j+1/2}}(\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j}) - \frac{2r_{i,j-1/2}\varepsilon_{a,i,j-1/2}}{(\Delta r^2)_j\Delta r_{j-1/2}}(\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}) \end{aligned}$$

### • 边界条件：

- 上自由边界上、右侧的自由边界采用了第一类边界条件。
- 左侧边界定值边界条件。
- 左侧边界条件和陶瓷边界条件交接的角点。这里的点的边界系数中 $a_{wi}$ 设置为0，非角点的 $a_{nj}$ ， $a_{sj}$ 全部设置为紧邻的内部点一样的值。右边界处的 $a_{ei}$ 设置为0，其他的条件设置方式类同于左边界。阳极采用了定值边界系数，陶瓷部分采用了类推办法。
- 电势和源项的边界条件，在机身部分设置为了浮动电势。



计算格式示意图

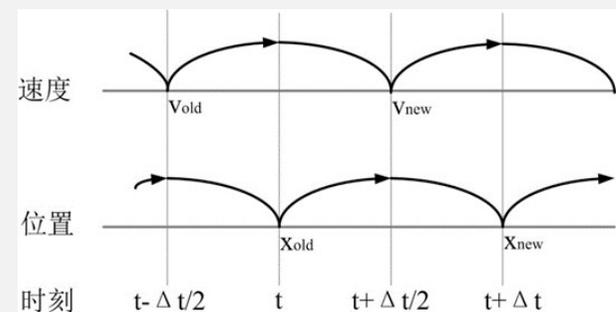
## 3.3 粒子运动与粒子入射

### • 粒子运动：

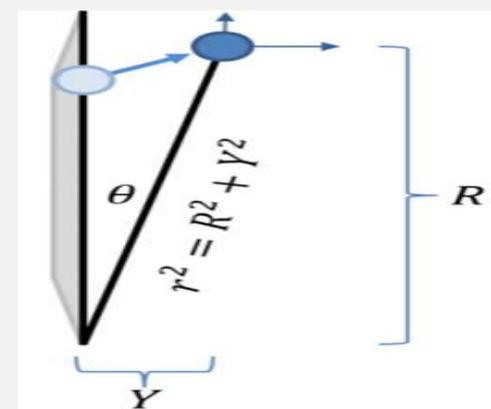
- 蛙跳格式， Boris算法。
- 周向速度投影。

### • 粒子入射：

- 原子做背景分布，利用数据文件读入程序。
- 电子入射：两段式入射，离开边界离子数 $<50$ 之前利用第一种入射函数入射（满足半麦克斯韦分布）， $>50$ 以后采用Szabo入射法进行入射：
  - 电子发射位置的电子电势小于阴极温度时候，电子速度分布是半麦克斯韦分布，其中采用的参照温度是阴极温度。电子整体速度此时不包含在内。
  - 发射电子电势超过阴极温度下限大于阴极温度上限的三分之二的的时候，电子温度以电势的三分之二为参考温度，速度进行半麦克斯韦分布。整体速度是0。
  - 当电势大于阴极温度时候，电子按照麦克斯韦分布模式分布，其基础热能是基于基础热能 $2.5eV$ 进行计算，整体速度按照公式计算给出，沿着磁场方向。



蛙跳格式示意图



投影方式示意图

## 3.4 碰撞的数值实现

### • 碰撞数值方法：

- 在本文的模拟之中，考虑了电子与一价离子和电子与原子碰撞产生离子的情况。大多数文献对于这两种电离过程的计算采用的方法是MCC法，也就是蒙特卡洛碰撞法。
- 在给定的时间间隔内，粒子之间的碰撞几率可被表示为如下的形式：

$$P = 1 - \exp(-\Delta t n_i v_i \sigma_t)$$

- 其中 $n_i$ 表示背景粒子的数密度， $v_i$ 表示目标粒子的速度， $\sigma_t$ 表示粒子间的碰撞截面积，其值与目标粒子能量有关。

### • 不同种类碰撞实现：

- 弹性碰撞：重粒子的速度变化忽略不计，同时电子能量产生损失。也就是说只计算电子的速度变化。
- 电离碰撞：计算时候离子速度分配服从按照原子初始能量为基底的麦克斯韦分布，二次电子发射速度分配如下式：

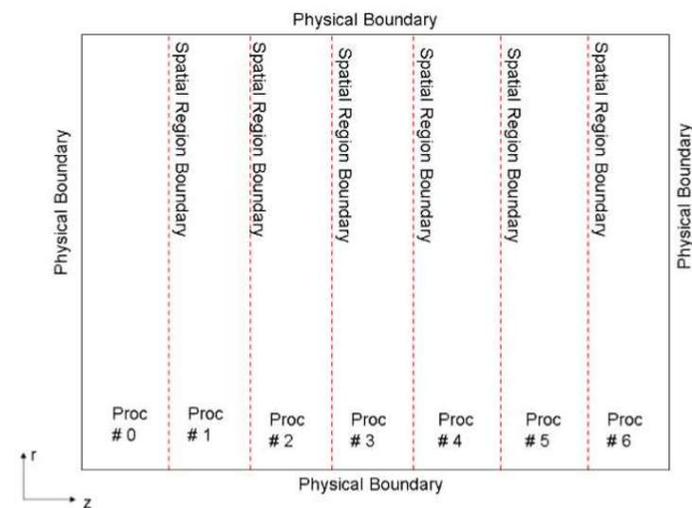
$$\varepsilon_{se} = B(\varepsilon_{inc,e}) \tan \left[ R_3 \tan^{-1} \left( \frac{\varepsilon_{inc,e} - \varepsilon_{ionz}}{2B(\varepsilon_{inc,e})} \right) \right]$$

- 激发碰撞：对于原子的能量不做处理，对于电子的能量是减去定值 8.35eV 的能量：

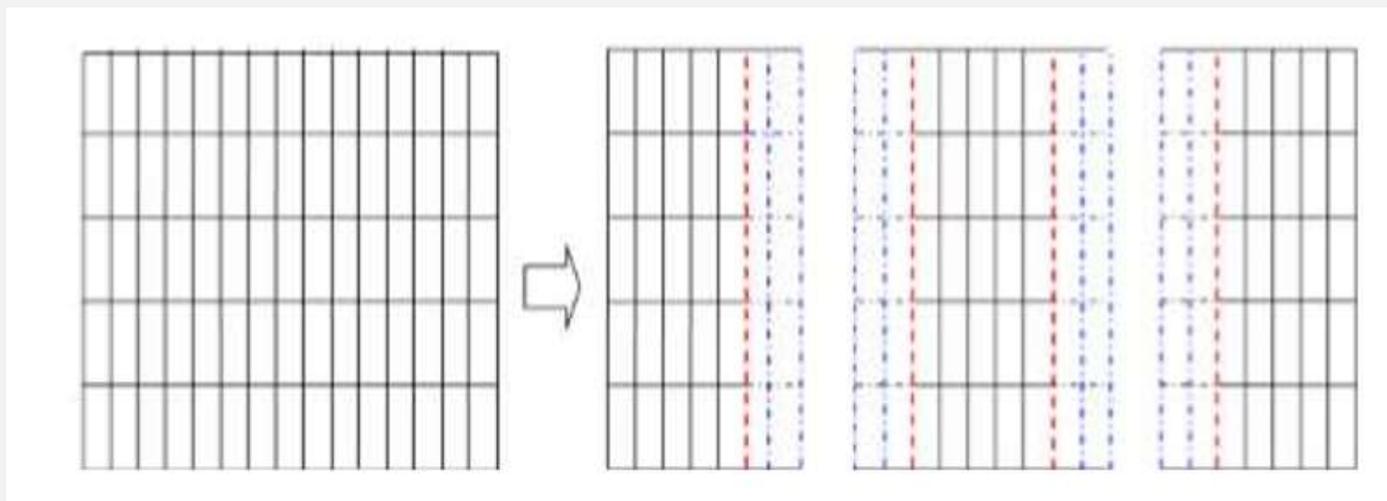
## 3.5 并行计算数值方法-1

### • 计算区域划分：

- 采用了Spatial Region Boundary 条件，作为划分准则。
- 根据之前的研究者的研究成果，比较合适的是对于100列的数组，将其分割为10~15个计算区域。  
本文由于是验证性的计算，因此采用了4个处理器划分为四个计算区域。
- 根据SRB条件，为了交换信息，设置了重叠列，并且对于交换的信息进行平均值计算。



### SRB 说明



### 重叠区域说明

## 3.5 并行计算数值方法-2

### • 数值算法流程：

1. 首先分配属于每个计算区域的局部数组。要考虑到这些数组都应该具有重叠区域。
2. 首先对于重叠区和边界处的数据列进行数据交换。
3. 进入迭代环节，执行第一步ADI。
4. 重叠区域交换数据到缓存区，然后旧值和缓冲区值叠加做平均作为新的值赋值给重叠区数组。
5. 执行第二步ADI。
6. 再次交换数据到缓冲区，然后同步骤4进行同样的操作。
7. 执行一次ADI，计算预估电势。
8. 重复步骤6，但是这次交换的有关于预估步的电势信息在两个计算区域之间进行交换。
9. 每个计算区域内部计算局部的残差，使用的是二阶范数来计算局部残差，之后归约，求和得到总计算域的残差。然后作为总的误差限广播给每个进程。

$$Res_{local} = \|\nabla^2(\epsilon_a \phi_{i,j}^{k+1}) + \rho_{i,j}\| \quad Res_{global} = \sum_{m=0}^{m=N_{proc}-1} Res_{local,m} \quad r_{global} = \frac{\sqrt{Res_{global}}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N_z} \sum_{j=1}^{N_r} [\rho_{i,j}]^2}}$$

10. 每个子区域分别求解本地的误差和预估误差，然后分别归约求和得到总的残差，利用这个来预估时间步长。
11. 进行下一步迭代直到收敛

## 第四部分 计算结果讨论及并行说明

### 4.1 代码验证

(对应内容：论文4.1节)

### 4.2 电场电势分布结果

(对应内容：论文4.2节)

### 4.3 电子、离子分布

(对应内容：论文4.3节)

### 4.4 电子温度分布

(对应内容：论文4.4节)

### 4.5 并行计算结果说明

(对应内容：论文4.5节)

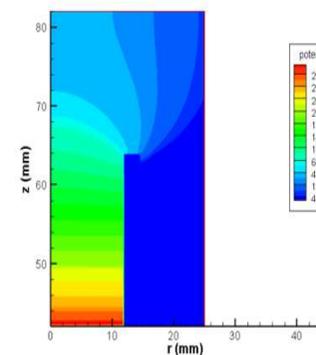
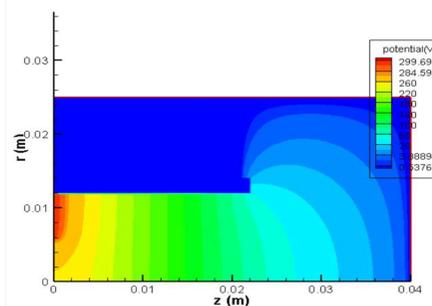
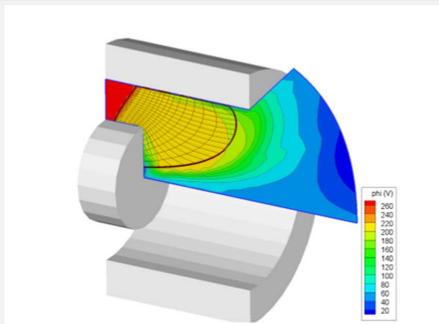
## 4.1 代码验证

### • 静电势验证：

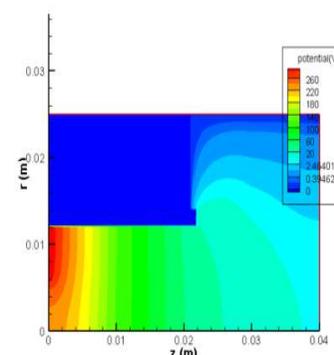
- 利用Comsol

### • 算例验证：

- 对比Dr. Brieda论文
- 修改几何参数后参照法国论文（姜逸伟实现）



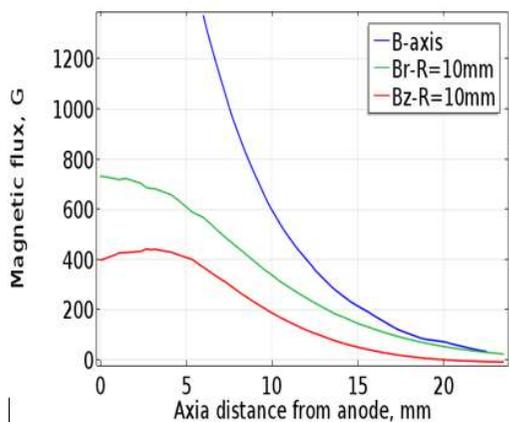
(a) Comsol 仿真静电势分布



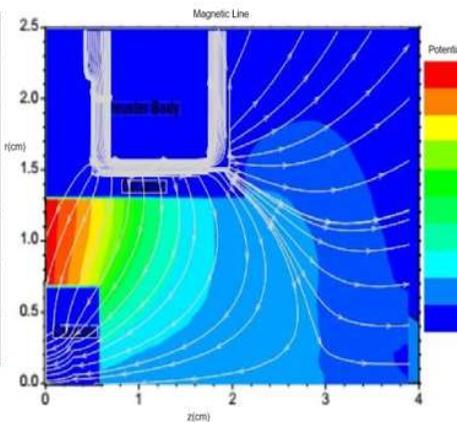
(b) 本程序仿真静电势分布

与Dr. Brieda论文对比

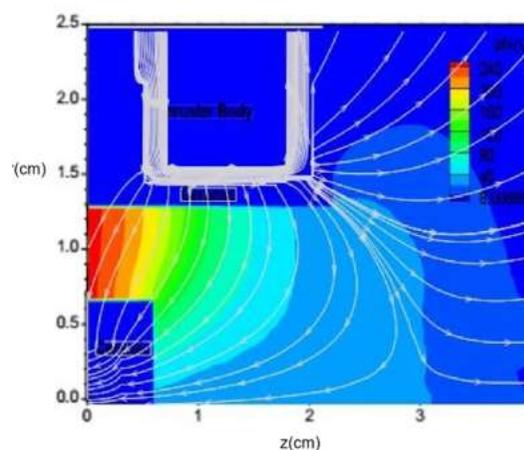
静电势分布对比



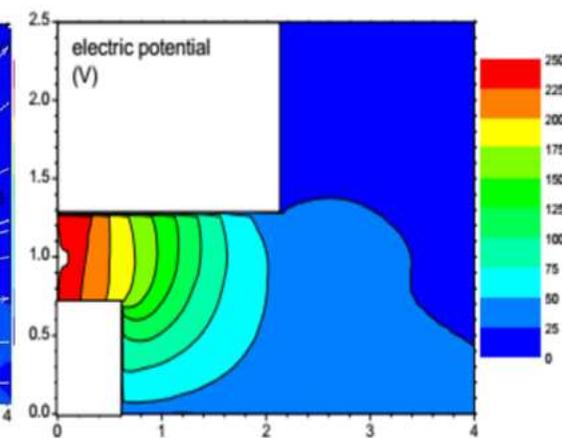
(a) 磁场强度分布曲线



(b) 磁力线分布及电势分布云图示意



(a) 姜逸伟计算电势分布及磁力线分布



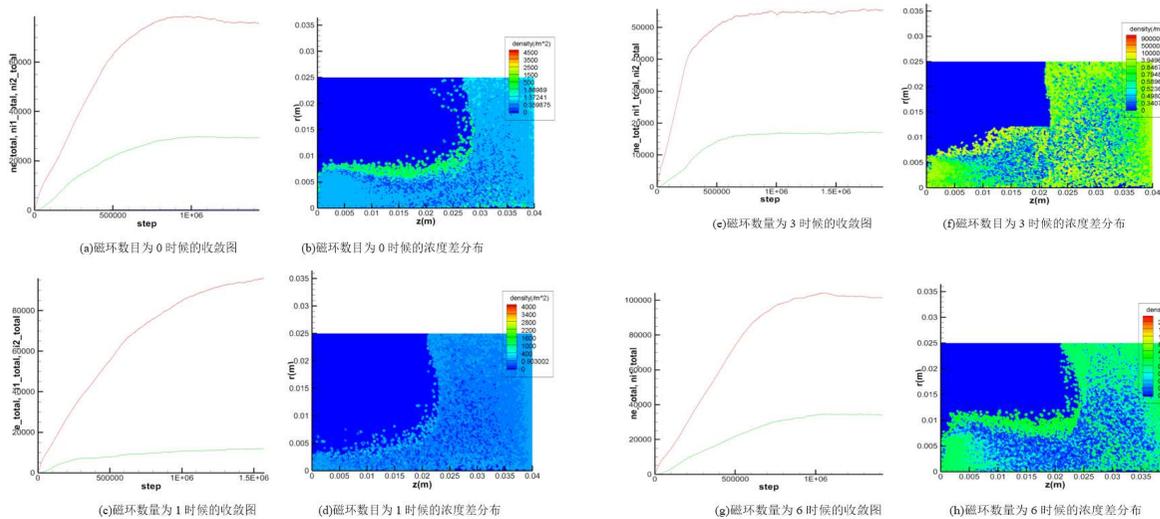
(b) Laurent 计算电势分布

磁场分布对比

对于Princeton CHT电势计算结果对比

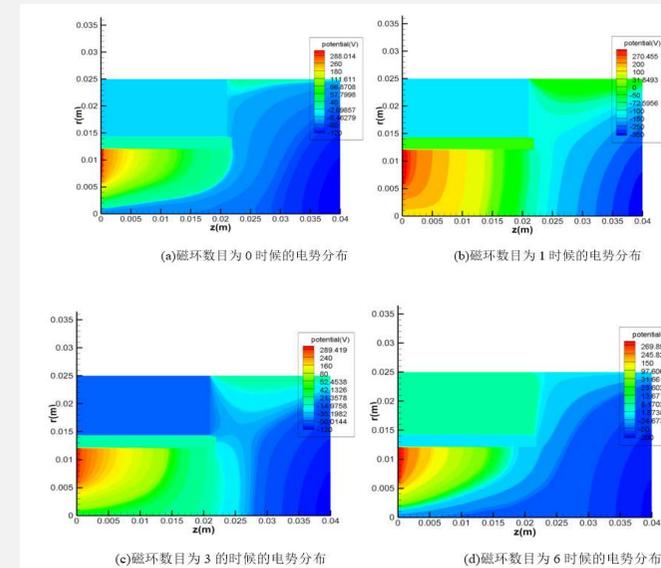
## 4.2 电场电势分布结果

### 不同磁环数目下电势分布：



收敛图及浓度差分布

电势分布云图



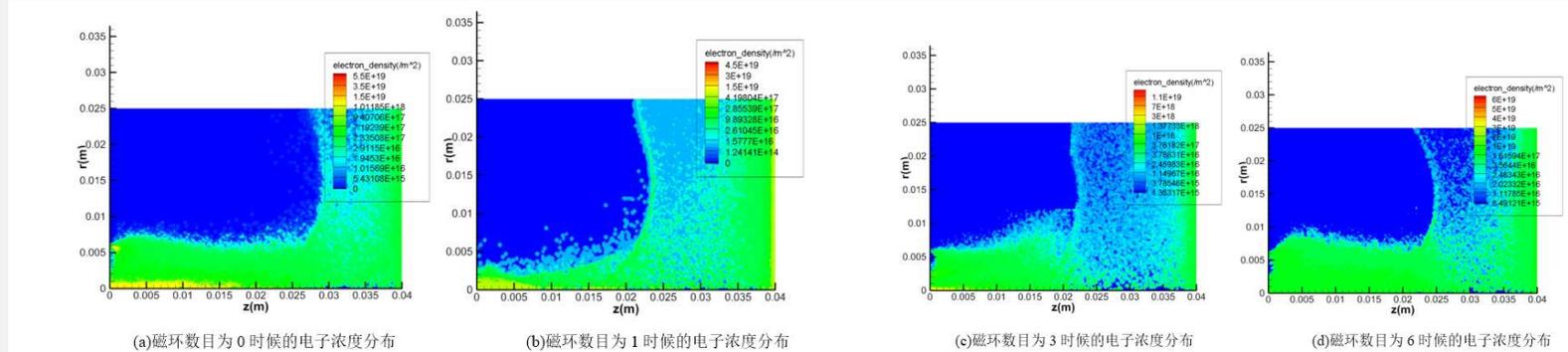
### 讨论：

- 电势分布受到磁场的的影响极大，磁场对于电子运动的影响，电子被磁力线束缚，难以进入阳极附近区域。放电通道出口处的磁镜比较小，电子受到磁力线的束缚也要相对小很多，因此也可以对这里的电势分布的结果进行一种可能的比较准确的解释。
- 磁场的增大导致了阳极区域的不断扩大，这可能是由于磁场强度的增强导致了电子进入阳极区的难度增大，这对设计磁场位形有指导性作用。

## 4.3 电子、离子分布-1

### • 不同磁环数目下电子浓度分布：

#### 电子浓度分布



### • 讨论：

- 电子密度分布比较密集的区域主要集中于放电通道内
- 轴线附近的电子密度分布对于放电室内部其他区域的密度更加大
- 右侧自由边界处的电子密度比较大
- 存在着一个中间区域，在这个区域之中，电子浓度分布非常低
- 磁场强度越强的工况下，羽流区域的电子密度分布的更加均匀。磁场强度比较大的时候，分布的磁力线密度比较大，电子运动受到磁力线约束，漂移运动进入放电通道更加深入的区域。
- 磁场强度的增大，沿着外磁极的电子密度分布也逐渐增大，这可以解释为磁场强度增大的影响。

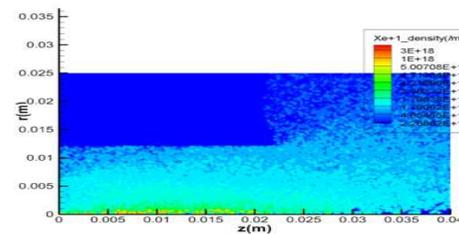
## 4.3 电子、离子分布-2

- 不同磁环数目下一价离子浓度分布：
- 不同磁环数目下二价离子浓度分布：
- 讨论：

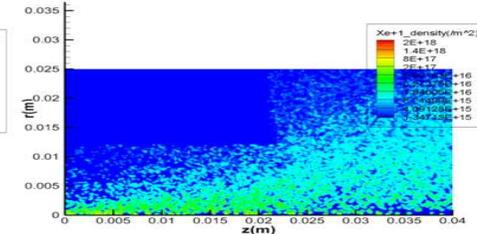
- 一价离子密度分布密集的区域主要集中于对称轴附近，沿着放电通道外壁面附近离子分布比较少，羽流区域的一价离子分布规则不明显。在放电通道阳极区域离子密度分布比较少，区域电子密度分布比较少。
- 二价离子数目在仿真中并不是主要影响因素轴线附近二价离子的密度分布接近一价离子在放电通道其他区域以及羽流区都很少。这是由于本身一价离子分布的少，所以电离出来的也相对少

一价离子浓度分布

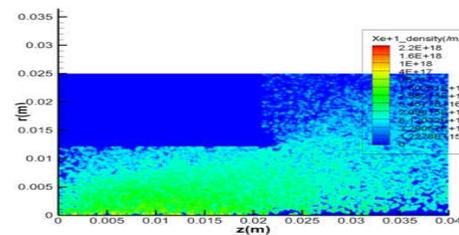
二价离子浓度分布



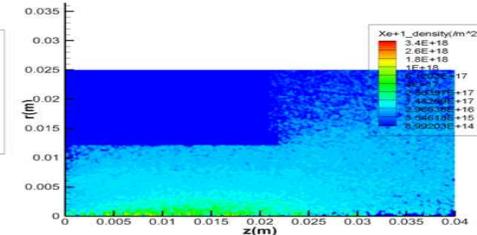
(a)磁环数目为 0 的一价离子浓度分布



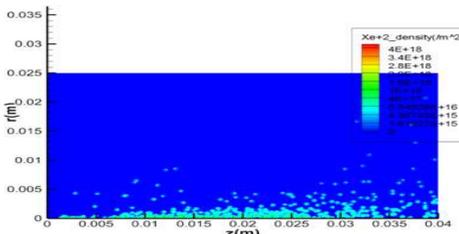
(b)磁环数目为 1 时候的一价离子浓度分布



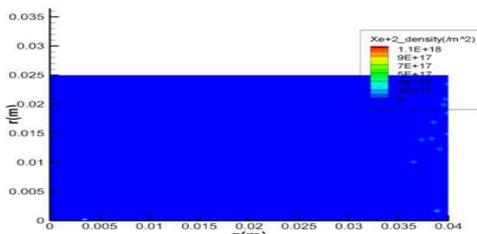
(c)磁环数目为 3 时候的一价离子浓度分布



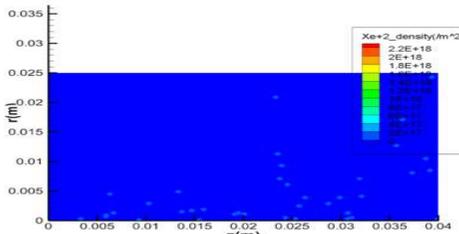
(d)磁环数目为 6 时候的一价离子浓度分布



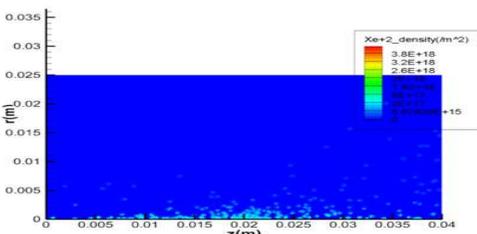
(a)磁环数目为 0 时候的二价离子浓度分布



(b)磁环数目为 1 时候的二价离子浓度分布



(c)磁环数目为 3 时候的二价离子浓度分布



(d)磁环数目为 6 时候的二价离子浓度分布

## 4.4 电子温度分布

### • 电子温度计算公式：

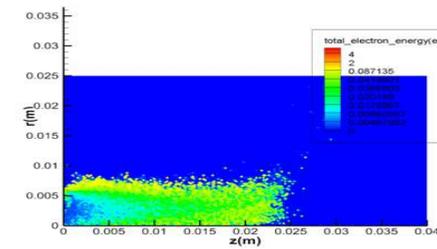
- 定义如下公式计算：

$$T_e = \frac{E_e - V_r^2 - V_z^2 - V_\theta^2}{11594K_b}$$

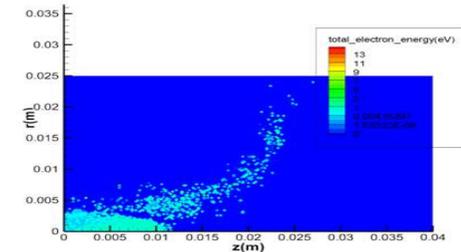
### • 电子温度分布：

### • 讨论：

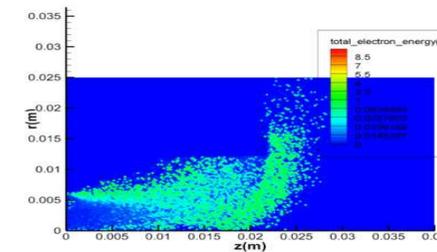
- 电子温度在有无磁环时候的分别比较明显，电子温度在没有磁环的时候均匀分布在放电通道内部，几乎没有分布在羽流区之中，有磁环以后，电子温度分布变成了类似于条形分布的形状，同时进入了羽流区域。
- 不同磁场下，电子温度的数值并不均匀，最大值较大波动，电子温度受到了磁场变化影响
- 同时需要指出的一点就是，电子温度属于人为定义的物理量，其计算方式可能在不同的论文中并不一致。所以其具体的数值并不相同。以上计算的主要作为定性分析来使用。



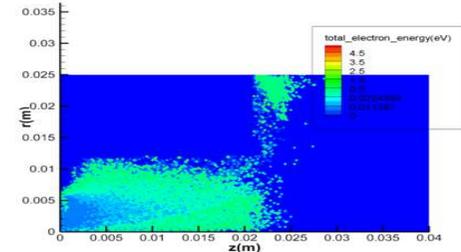
(a)磁环数目为 0 时候的电子温度



(c)磁环数目为 1 时候的电子温度



(e)磁环数目为 3 时候的电子温度



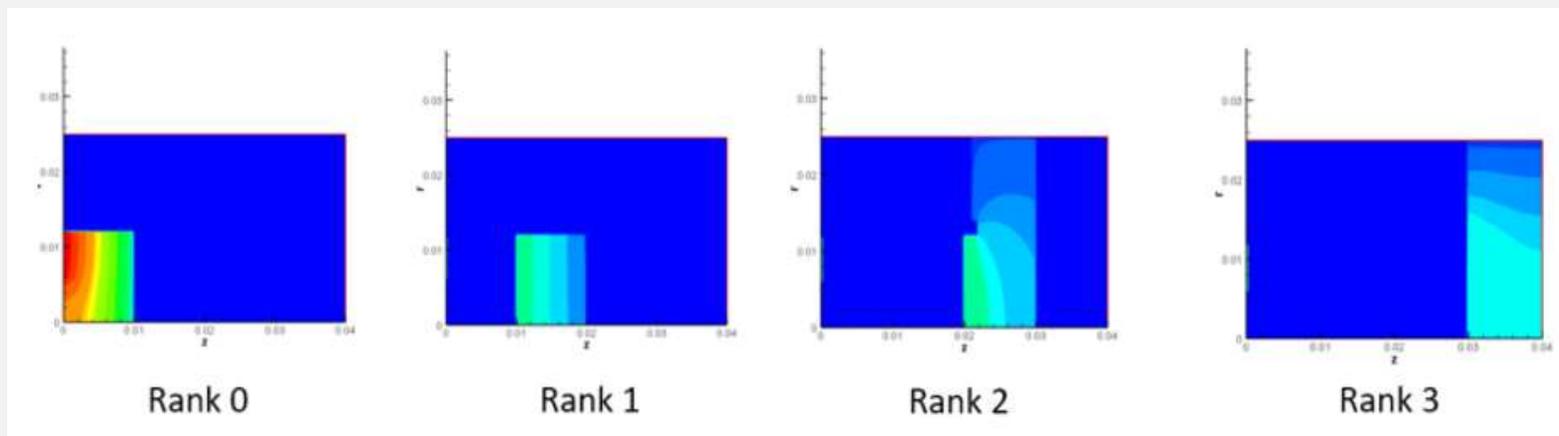
(d)磁环数目为 6 时候的电子温度

### 电子温度分布

## 4.5 并行计算结果说明-1

### • 并行验证：

- 首先进行验证的是是否完成了并行任务。本论文设计了一种简单有效的办法输出验证这一问题。本论文在右边界第二类边界条件的情况下验证了一个简单的算例（与上文的Comsol算例一样的右侧自由边界第二类边界条件），本论文之中，利用并行求解器的每个进程单独输出一个数据文件然后绘制成云图，观察是否符合设置的空间区域边界条件（只进行第一步计算时候，所有多余的重叠区域全部被赋值为0），就可以验证是否每个进程进行了单独的计算。

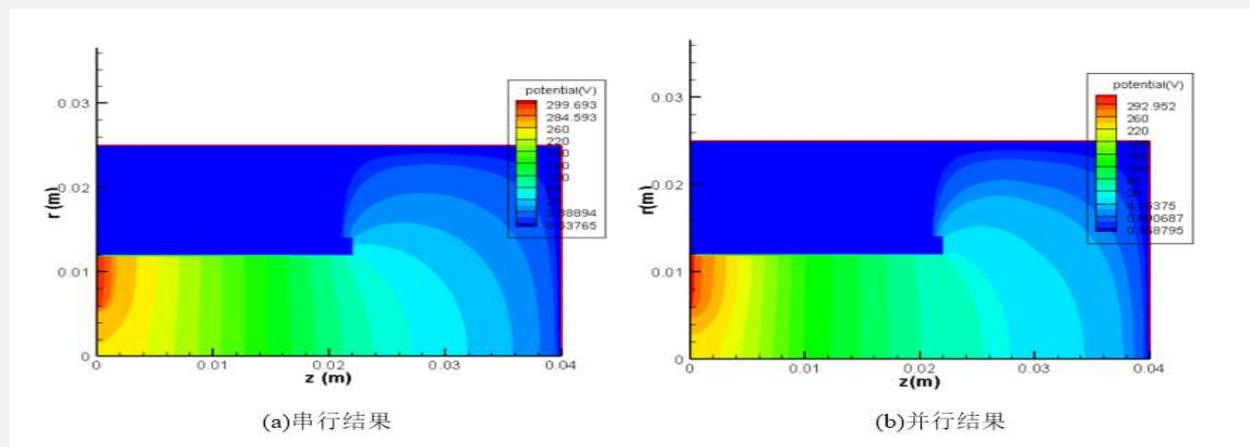


并行验证

## 4.5 并行计算结果说明-2

### • 并行计算结果精度验证：

- 串行计算结果和并行计算结果之间的对比。计算结果的吻合程度比较好。略微的不同主要是云图生成过程中的等势线显示问题，实际数值基本完全一致。
- 实际需要的迭代次数要比串行略长。
- 可能的原因：信息传递、边界条件动态变化



串行并行电势分布对比

## 4.5 并行计算结果说明-3

### • 并行效率计算公式：

- 引入下述公式，用来衡量并行计算效率
- 首先定义加速比：

$$\eta_{accelerate} = \frac{T_{sequential}}{T_{parallel}} \times 100\%$$

- 加速比为串行时间相对于并行时间的倍数。
- 定义加速比以后可引入并行效率：

$$\eta_{efficiency} = \frac{\eta_{accelerate}}{P_{number}}$$

- 即加速比与处理器个数的比值。

### • 本程序并行效率：

- 对于本程序，经过计算， $\eta_{accelerate} = 2.37$ ， $\eta_{efficiency} = 59.25\%$ ，通信所消耗时间可能成为使得计算效率达不到理想计算比的原因。

### • DADI动态加速因子的影响：

- 如果不加入动态时间调整，整个计算可能需要数以千计步骤才能够收敛，但是加入了动态时间预估调整步骤以后，计算所需要的收敛步骤只需要不超过100步。但是步长的选择非常关键。由于实际计算区域相对于串行的计算区域已经发生了改变，因此计算过程中的误差估计，二阶范数估计都会发生变化。

## 第五部分 结论

### 5.1 本文所取得的主要工作成果及结论

(对应内容：论文结论)

### 5.2 尚存在的不足之处及可继续深入的下一步工作

(对应内容：论文结论)

## 5.1 本文所取得的主要工作成果及结论

### • 主要工作成果及结论：

- 通过对于相关文献的阅读学习，掌握了新型霍尔推进器的主要工作原理及结构，建立了仿真二维物理模型，对于圆柱型霍尔推进器进行仿真，求解了放电通道及羽流区的多种物理量分布。
- 利用MPI编写了本实验室第一套并程序，对于PIC程序所使用的DADI算法进行了并行化，并且进行了验证，得到了满意的结果。
- 讨论验证了本论文所使用的程序，验证了代码的可行性，与之前研究者使用不同方法得到的结果进行了对比，得到了满意的结果，说明了代码的可行性和准确性。
- 计算并讨论了不同磁场位形下面推进器内部的物理量分布情况，重点研究了电势分布、电子浓度分布、一价离子浓度分布、二价离子浓度分布、电子温度分布。发现了磁场位形对于物理量分布影响非常大，增强的磁场可以影响到电子浓度的分布，从而影响到电势的分布，从而影响了离子浓度分布，对于推进器的电离会造成比较大的影响。因此设计推进器时候需要慎重选择磁场位形。

## 5.2 尚存在的不足之处及可继续深入的下一步工作

### • 尚存在的不足：

- 计算代码中为了减少计算量，把原子密度作为了固定的背景密度，可能会影响计算的精度。
- 并行验证之中只考虑了四个进程，没有采用前人研究中优化的得到的最佳进程数目。对于动态时间调整上还略有不足。同时只做了并行化的电场求解器，没有做并行化的粒子运动求解器。
- 对于物理结果的讨论还不够深入，需要进一步深化讨论。

### • 可继续深入的下一步工作：

- 对于程序可以设计非阻塞式的并行程序，提高并行效率，同时可以尝试GPU并行
- 可以加入MCC模块，把原子也纳入考虑之中，观察是否和目前结果一致。
- 可以深入进一步探讨物理机制，可以位磁场位形设计提供有力的一手资料，同时可以研究新的等离子物理机制。

# 第六部分 致谢

## 6.1 致谢

(对应内容：论文致谢)

## 6.1 致谢

- 感谢各位老师及答辩委员会对我论文的评阅及指导。
- 感谢我的导师汤海滨老师在科研过程中的指导及鼓励，感谢任老师在每次组会上的认真指导。
- 感谢实验室的全体师兄师姐对我毕设的指导帮助。
- 感谢今天到场的全体领导、老师、同学。
- 谢谢各位！

欢迎各位领导、老师、同学提问！