



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • [Электронная библиотека](#)

[Препринты ИПМ](#) • [Препринт № 64 за 2017 г.](#)



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

[Волков Ю.А.](#), [Воронин Ф.Н.](#),
[Иноземцева К.К.](#), [Марков М.Б.](#),
[Сысенко А.В.](#)

Алгоритм моделирования
электрических и
термомеханических
эффектов в
рассеивающемся
электронном пучке

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Алгоритм моделирования электрических и термомеханических эффектов в рассеивающемся электронном пучке / Ю.А.Волков [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 64. 19 с. doi:[10.20948/prepr-2017-64](https://doi.org/10.20948/prepr-2017-64)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2017-64>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

**Ю.А. Волков, Ф.Н. Воронин, К.К. Иноземцева,
М.Б. Марков, А.В. Сысенко**

**Алгоритм моделирования электрических
и термомеханических эффектов
в рассеивающемся электронном пучке**

Москва — 2017

Волков Ю.А., Воронин Ф.Н., Иноземцева К.К., Марков М.Б., Сысенко А.В.

Алгоритм моделирования электрических и термомеханических эффектов в рассеивающемся электронном пучке

Рассмотрена модель электромагнитного и термомеханических полей, образующихся в веществе при рассеянии ионизирующего излучения. Модель основана на уравнениях Максвелла с конвективным током и Эйлера с объемной силой Лоренца и джоулевым нагревом. Построены консервативные разностные аналоги величин, ответственных за взаимодействие электромагнитного поля с ионизованным веществом. Представлены результаты расчета, демонстрирующего влияние электромагнитного поля на термомеханические процессы.

Ключевые слова: сила, работа, разностная схема, консервативность

Volkov Y.A., Voronin F.N., Inozemtseva K.K., Markov M.B., Sysenko A.V.

The Algorithm for Simulation of Electrical and Thermomechanical Effects in the Scattering Electron Beam

The model of electromagnetic and thermomechanical fields generating in substance by scattering electron beam is considered. Model is founded on Maxwell equations with convective current and Euler equations with Lorentz force and Joule heating. Conservative difference analog of values, which provides the interaction of electromagnetic field with ionized substance are constructed. The simulation results, which demonstrate the electromagnetic field influence on the thermomechanical processes are represented.

Key words: force, work, difference scheme, conservatism

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты 17-01-00301-а, 15-01-03027-а.

Оглавление

Введение	3
1 Постановка задачи	4
2 Разностные уравнения термомеханических и электромагнитного полей	6
3 Тестовый расчет	13
Заключение	18
Библиографический список	18

Введение

Математическое моделирование комплекса термомеханических и электродинамических эффектов, сопровождающих рассеяние ионизирующего излучения в твердотельной преграде, требует совместного решения разнородных уравнений. Модель включает уравнения Максвелла для электромагнитного поля, переноса излучения и динамики рассеивающей среды. Решения одних уравнений определяют правые части и коэффициенты для других. Численный алгоритм вынужден сочетать в себе статистический метод частиц для моделирования переноса с разностными схемами для уравнений Максвелла и сплошной среды. Подобное сочетание порождает ряд вычислительных проблем, одна из которых состоит в обеспечении правильного энергетического баланса между электромагнитным полем и ионизованной средой.

Взаимодействие электронного пучка – наиболее распространенного источника мощного ионизирующего излучения [1], с твердотельной преградой сопровождается радиационными, электромагнитными и термомеханическими эффектами [2]. Распространение электронов эквивалентно наличию плотности электрического тока, генерирующего электромагнитное поле [3,4]. Рассеяние электронов приводит к выделению энергии и ионизации среды [3-5]. Энерговыделение является причиной термомеханических эффектов [5], ионизация порождает радиационную проводимость [6]. Радиационные, электромагнитных и термомеханических поля влияют друг на друга. Перераспределение плотности при разрядке механических напряжений меняет рассеивающие свойства вещества. Ионизация под действием радиационного нагрева увеличивает электропроводность материалов, которая снижает электрическое поле, усиливая токи проводимости. Некомпенсированный объемный заряд и электрическое поле создают пондеромоторную силу, вызывающую, наряду с градиентом давления, движение вещества. Джоулев нагрев проводящего вещества в электрическом поле приводит к дополнительному энерговыделению.

Авторами данной работы разработана математическая модель рассматриваемого комплекса явлений. Перенос излучения в веществе описан классическими кинетическими уравнениями [7]. Интегралы столкновений моделируют комптоновское рассеяние и фотопоглощение фотонов, образование электрон-позитронных пар, а также тормозное излучение электронов и позитронов, ударную ионизацию, возбуждение молекул и упругое рассеяние [8-12]. Электромагнитное поле, генерируемое заряженными частицами, описано уравнениями Максвелла [3]. Решения кинетических уравнений построены в пространстве финитных обобщенных функций. Плотность мощности энерговыделения представлена как линейный функционал функций распределения позитронов и электронов [13-14]. В качестве модели сплошной среды выбраны уравнения идеальной двухтемпературной магнитной гидродинамики [15].

Данная работа посвящена построению численного алгоритма, обеспечивающего совместное решение уравнений Максвелла и гидродинамики для сово-

купности вещества и электромагнитного поля. Методы решения уравнений переноса излучения подробно рассмотрены в работах [7, 16-21]. Вычислительные модули, реализующие численное решение уравнений в общем и в нескольких частных случаях [7], включены в состав комплекса программ РЭМП (Радиационное и ЭлектроМагнитное Поле), разработанного в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

1 Постановка задачи

Воздействие потока электронов на преграду сопровождается выделением энергии, образованием плотности электрического тока $\mathbf{j}_{ext}(t, \mathbf{r})$ и некомпенсированного электрического заряда $q_{ext}(t, \mathbf{r})$.

Рассмотрим уравнения Максвелла для компонент электромагнитного поля:

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} (\mathbf{j}_{ext} + \mathbf{j}^* + q\mathbf{v}), \quad (1)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (2)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi (q + q_{ext}), \quad (3)$$

где q – плотность заряда ионизованного вещества, \mathbf{v} – удельная скорость вещества, \mathbf{j}^* – плотность тока электронов проводимости:

$$\mathbf{j}^* = \sigma \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right), \quad (4)$$

где σ – сумма термической и радиационной проводимости.

Последнее уравнение Максвелла (3) выражает закон Кулона. В составе задачи Коши для уравнений (1-3) оно эквивалентно уравнению непрерывности заряда:

$$\frac{\partial (q + q_{ext})}{\partial t} + \operatorname{div} (\mathbf{j}_{ext} + \mathbf{j}^* + q\mathbf{v}) = 0.$$

Рассмотрим уравнения гидродинамики:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} = 0, \quad (5)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} \right) = -\text{grad} p + \mathbf{F}_l, \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho w) = -\text{div} \left(\mathbf{v} \rho \left(\frac{v^2}{2} + u_0 \right) - \lambda \text{grad} T + \mathbf{v} p \right) + A + Q, \quad (7)$$

где $w = v^2/2 + u_0$ – удельная энергия вещества, ρ – плотность вещества преграды, p – давление, T – температура, u – внутренняя энергия.

Объемная сила Лоренца \mathbf{F}_l , действующая на ионизованное вещество преграды, и суммарная работа A электромагнитного поля над единицей объема веществом в единицу времени выражаются следующим образом:

$$\mathbf{F}_l = q \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) + \frac{1}{c} [\mathbf{j}^* \times \mathbf{B}], \quad (8)$$

$$A = q \mathbf{E} \mathbf{v} + \mathbf{j}^* \mathbf{E} = (\mathbf{j} - \mathbf{j}_{ext}) \mathbf{E}. \quad (9)$$

Энергию поля A_H , расходуемая на нагрев вещества имеет вид:

$$A_H = A - \mathbf{F}_l \mathbf{v} = \mathbf{j}^* \mathbf{E} - \frac{1}{c} (\mathbf{v} [\mathbf{j}^* \times \mathbf{B}]). \quad (10)$$

Выражения (8), (9), (10) определяют влияние электромагнитного поля на ионизованное вещество. Подставляя (4) в (8) и (10), после эквивалентных преобразований получим выражения для силы Лоренца и плотности мощности нагрева

$$\mathbf{F}_l = q \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) + \frac{\sigma}{c} [\mathbf{E} \times \mathbf{B}] + \frac{\sigma}{c^2} (\mathbf{v} B^2 - \mathbf{B}(\mathbf{v} \mathbf{B})), \quad (11)$$

$$A_H = \sigma E^2 - 2 \frac{\sigma}{c} (\mathbf{v} [\mathbf{E} \times \mathbf{B}]) - \frac{\sigma}{c^2} (v^2 B^2 - (\mathbf{v} \mathbf{B})^2).$$

Учитывая (3), получим выражение силы Лоренца только через компоненты электромагнитного поля

$$\mathbf{F}_l = \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right) \left(\frac{\text{div} \mathbf{D}}{4\pi} - q_{ext} \right) + \frac{\sigma}{c} [\mathbf{E} \times \mathbf{B}] + \frac{\sigma}{c^2} (\mathbf{v} B^2 - \mathbf{B}(\mathbf{v} \mathbf{B})).$$

Уравнения (1-3), (5-7) вместе с табличными уравнениями состояния, граничными и начальными условиями составляют математическую модель взаимодействия излучения и потоков частиц с веществом.

2 Разностные уравнения термомеханических и электромагнитного полей

Основу алгоритма численного решения () составили ранее разработанные разностные уравнения.

Базовая разностная схема для уравнений Максвелла в неподвижной среде с кусочно-непрерывными электрофизическими характеристиками и нестационарной проводимостью рассмотрена в [19]. Схема полностью консервативна, имеет второй порядок точности на разностной сетке с постоянным шагом. Используется явный вариант схемы, устойчивый при выполнении условия Куранта.

Базовый численный алгоритм решения уравнений гидродинамики основан на консервативной разностной схеме повышенного порядка точности [22]. Она представляет собой модифицированную и обобщенную для трехмерных неструктурированных сеток схему Колгана. Интегрирование по времени осуществляется в рамках схемы предиктор-корректор, обеспечивающей второй порядок аппроксимации. Применяется явная схема с ограничением на шаг по времени, определяемым условием Куранта.

Рассмотрим построение общей разностной схемы для системы уравнений электро- и гидродинамики.

В схеме для уравнений Максвелла [19] с заданной плотностью тока в правой части разностная сетка вводится следующим образом. По переменной x :

$$x_{i+1} = x_i + \Delta_i, \quad i = 0, \dots, N_x - 1, \quad x_0 = x_{\min}, \quad x_{N_x} = x_{\max},$$

$$x_{i+1/2} = (x_i + x_{i+1}) / 2, \quad i = 0, \dots, N_x - 1, \quad x_{-1/2} = x_0, \quad x_{N_x+1/2} = x_{N_x},$$

$$\delta_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}, \quad i = 0, \dots, N_x, \quad \delta_0 = \Delta_0 / 2, \quad \delta_0 = \Delta_0 / 2, \quad \delta_{N_x} = \Delta_{N_x-1} / 2.$$

Разностная сетка по переменным y, z вводится аналогично. Параметры сетки выбираются так, чтобы разрывы коэффициентов уравнений Максвелла разместились на поверхностях $x = x_i, y = y_j$ и $z = z_k$. Считается, что значения коэффициентов заданы в точках сетки с дробными пространственными индексами. Эти точки совпадают с центрами прямоугольных параллелепипедов, образованных пересечением плоскостей $x = x_i, x_{i+1}, y = y_j, y_{j+1}$ и $z = z_k, z_{k+1}$. Компоненты плотности тока и напряженности электрического поля, параллельные ребрам параллелепипедов, определены в центрах этих ребер. Компоненты напряженности магнитного поля, перпендикулярные граням параллелепипедов, определены в

центрах этих граней. Напомним, что конвективный ток $q\mathbf{v}$ и движение среды в [22] не рассматриваются.

Сетка по времени состоит из точек: $\tau_n = t_{n+1/2} - t_{n-1/2}$; $n = 2, \dots, N_t - 1$. Сеточные функции (E^x, E^y, E^z) задаются в целые моменты времени t_n , а (H^x, H^y, H^z) в полуцелые моменты $t_{n+1/2}$.

Рассмотрим разностную схему для уравнений Максвелла (1), (2) [19]:

$$\begin{aligned} & \left(H_{i+1/2, j+1/2, k}^{zn+1/2} - H_{i+1/2, j-1/2, k}^{zn+1/2} \right) / \delta y_j - \left(H_{i+1/2, j, k+1/2}^{yn+1/2} - H_{i+1/2, j, k-1/2}^{yn+1/2} \right) / \delta z_k = \\ & = \left(D_{i+1/2, j, k}^{xn+1} - D_{i+1/2, j, k}^{xn} \right) / c\tau_{n+1/2} + \frac{4\pi}{c} I_{i+1/2, j, k}^{\circ x}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left(H_{i, j+1/2, k+1/2}^{xn+1/2} - H_{i, j+1/2, k-1/2}^{xn+1/2} \right) / \delta z_k - \left(H_{i+1/2, j+1/2, k}^{zn+1/2} - H_{i-1/2, j+1/2, k}^{zn+1/2} \right) / \delta x_i = \\ & = \left(D_{i, j+1/2, k}^{yn+1} - D_{i, j+1/2, k}^{yn} \right) / c\tau_{n+1/2} + \frac{4\pi}{c} I_{i, j+1/2, k}^{\circ y}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left(H_{i+1/2, j, k+1/2}^{yn+1/2} - H_{i-1/2, j, k+1/2}^{yn+1/2} \right) / \delta x_i - \left(H_{i, j+1/2, k+1/2}^{zn+1/2} - H_{i, j-1/2, k+1/2}^{zn+1/2} \right) / \delta y_j = \\ & = \left(D_{i, j, k+1/2}^{zn+1} - D_{i, j, k+1/2}^{zn} \right) / c\tau_{n+1/2} + \frac{4\pi}{c} I_{i, j, k+1/2}^{\circ z}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left(E_{i, j+1/2, k+1}^{yn+1} - E_{i, j+1/2, k}^{yn+1} \right) / \Delta z_k - \left(E_{i, j+1, k+1/2}^{zn+1} - E_{i, j, k+1/2}^{zn+1} \right) / \Delta y_j = \\ & = \left(H_{i, j+1/2, k+1/2}^{xn+3/2} - H_{i, j+1/2, k+1/2}^{xn+1/2} \right) / c\tau_{n+1}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left(E_{i+1, j, k+1/2}^{zn+1} - E_{i, j, k+1/2}^{zn+1} \right) / \Delta x_i - \left(E_{i+1/2, j, k+1}^{xn+1} - E_{i+1/2, j, k}^{xn+1} \right) / \Delta z_k = \\ & = \left(H_{i+1/2, j, k+1/2}^{yn+3/2} - H_{i+1/2, j, k+1/2}^{yn+1/2} \right) / c\tau_{n+1}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left(E_{i+1/2, j+1, k}^{xn+1} - E_{i+1/2, j, k}^{xn+1} \right) / \Delta y_j - \left(E_{i+1, j+1/2, k}^{yn+1} - E_{i, j+1/2, k}^{yn+1} \right) / \Delta x_i = \\ & = \left(H_{i+1/2, j+1/2, k}^{zn+3/2} - H_{i+1/2, j+1/2, k}^{zn+1/2} \right) / c\tau_{n+1}. \end{aligned}$$

Далее используются следующие обозначения. Символ s^n обозначает значение функции s на n -ом временном слое. Символ $s_{i+1/2, j, k}^{\circ}$ обозначает следующее средневзвешенное значение сеточной функции u , заданной в узлах сетки с дробными индексами в точке сетки с индексами $i+1/2, j, k$.

$$s_{i+1/2,j,k}^{\circ} = u_{i+1/2,j-1/2,k-1/2} \frac{\Delta_{j-1}}{2\delta_j} \frac{\Delta_{k-1}}{2\delta_k} +$$

$$+ s_{i+1/2,j-1/2,k+1/2} \frac{\Delta_{j-1}}{2\delta_j} \frac{\Delta_k}{2\delta_k} + s_{i+1/2,j+1/2,k+1/2} \frac{\Delta_j}{2\delta_j} \frac{\Delta_k}{2\delta_k} + s_{i+1/2,j+1/2,k-1/2} \frac{\Delta_j}{2\delta_j} \frac{\Delta_{k-1}}{2\delta_k}.$$

Вектор индукции имеет вид $D_{i+1/2,j,k}^x = \varepsilon_{i+1/2,j,k}^{\circ} E_{i+1/2,j,k}^x$, плотность стороннего тока – $I_{i+1/2,j,k}^x = \sigma_{i+1/2,j,k}^{\circ} E_{i+1/2,j,k}^x + J_{i+1/2,j,k}^x$, где $J_{i+1/2,j,k}^x$ – плотность стороннего тока.

Для данной дискретной модели имеет место разностный закон сохранения энергии электромагнитного поля для расчетной области [19]

$$\left(W^{fd}(\mathbf{E}^{n+1}, \mathbf{H}^{n+1}) - W^{fd}(\mathbf{E}^n, \mathbf{H}^n) \right) / \tau_n + Q^{fd} + A^{fd} + K^{fd} + S^{fd} = 0,$$

где $W^{fd}(\mathbf{E}^n, \mathbf{H}^n)$ – квадратичная форма значений компонент напряженности электрического и магнитного полей на n -ом временном слое, являющаяся разностным аналогом энергии электромагнитного поля, τ_n – текущий шаг по времени. Конечно-разностные аналоги работы сторонних токов, токов проводимости, конвективных токов и потока энергии через границу расчетной области выражают величины A^{fd} , Q^{fd} , K^{fd} и S^{fd} , соответственно.

Работа стороннего тока в расчетной области выражается следующим образом:

$$A^{fd} = 4\pi \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} J_{i+1/2,j,k}^x E_{i+1/2,j,k}^x \Delta_i \delta_j \delta_k + 4\pi \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z} J_{i,j+1/2,k}^y E_{i,j+1/2,k}^y \delta_i \Delta_j \delta_k +$$

$$+ 4\pi \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z-1} J_{i,j,k+1/2}^z E_{i,j,k+1/2}^z \delta_i \delta_j \Delta_k, \quad (12)$$

где $E_{i+1/2,j,k}^x$, $J_{i+1/2,j,k}^x$ – компоненты вектора напряженности электрического поля и плотности тока в точке $x = x_{i+1/2}$, $y = y_j$, $z = z_k$, c – скорость света. Работа полного тока во всей расчетной области также имеет вид (12).

Работа стороннего тока в ячейке (с центром в точке $x = x_{i+1/2}$, $y = y_{j+1/2}$, $z = z_{k+1/2}$), соответственно, равна

$$A_{cell}^{fd} = \pi \Delta_i \Delta_j \Delta_k \left(J_{i+1/2,j,k}^x E_{i+1/2,j,k}^x + J_{i+1/2,j+1,k}^x E_{i+1/2,j+1,k}^x + J_{i+1/2,j,k+1}^x E_{i+1/2,j,k+1}^x + J_{i+1/2,j+1,k+1}^x E_{i+1/2,j+1,k+1}^x + \right.$$

$$+ J_{i,j+1/2,k}^y E_{i,j+1/2,k}^y + J_{i+1,j+1/2,k}^y E_{i+1,j+1/2,k}^y + J_{i,j+1/2,k+1}^y E_{i,j+1/2,k+1}^y + J_{i+1,j+1/2,k+1}^y E_{i+1,j+1/2,k+1}^y +$$

$$\left. + J_{i,j,k+1/2}^z E_{i,j,k+1/2}^z + J_{i+1,j,k+1/2}^z E_{i+1,j,k+1/2}^z + J_{i,j+1,k+1/2}^z E_{i,j+1,k+1/2}^z + J_{i+1,j+1,k+1/2}^z E_{i+1,j+1,k+1/2}^z \right). \quad (13)$$

Разностный аналог работы тока проводимости во всей расчетной области аналогичен выражению для стороннего тока и представляет собой сумму токов проводимости по всем ребрам всех ячеек. Разностная работа тока проводимости в ячейке выражается следующим образом:

$$Q_{cell}^{fd} = \pi \Delta_i \Delta_j \Delta_k \left(J_{c\ i+1/2,j,k}^x E_{i+1/2,j,k}^x + J_{c\ i+1/2,j+1,k}^x E_{i+1/2,j+1,k}^x + J_{c\ i+1/2,j,k+1}^x E_{i+1/2,j,k+1}^x + \right. \\ \left. + J_{c\ i+1/2,j+1,k+1}^x E_{i+1/2,j+1,k+1}^x + J_{c\ i,j+1/2,k}^y E_{i,j+1/2,k}^y + J_{c\ i+1,j+1/2,k}^y E_{i+1,j+1/2,k}^y + J_{c\ i,j+1/2,k+1}^y E_{i,j+1/2,k+1}^y + \right. \\ \left. + J_{c\ i+1,j+1/2,k+1}^y E_{i+1,j+1/2,k+1}^y + J_{c\ i,j,k+1/2}^z E_{i,j,k+1/2}^z + J_{c\ i+1,j,k+1/2}^z E_{i+1,j,k+1/2}^z + J_{c\ i,j+1,k+1/2}^z E_{i,j+1,k+1/2}^z + \right. \\ \left. + J_{c\ i+1,j+1,k+1/2}^z E_{i+1,j+1,k+1/2}^z \right),$$

где

$$J_{c\ i+1/2,j,k}^x = \sigma_{i+1/2,j,k}^{\circ} \left(E_{i+1/2,j,k}^x + \frac{1}{c} \left[\mathbf{v}_{i+1/2,j,k} \times \mathbf{B}_{i+1/2,j+1/2,k+1/2} \right]^{\circ x} \right).$$

Рассмотрим работу конвективного тока, исходя из того, что скорость вещества в разностной схеме для уравнений газовой динамики задана в центре ячейки. Плотность заряда также отнесем к центру прямоугольной ячейки. Плотность конвективного тока определим в центре ребра ячейки:

$$J_{i+1/2,j,k}^x = \frac{1}{4\delta_j \delta_k} \left(q_{i+1/2,j+1/2,k+1/2} v_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^x \Delta_j \Delta_k + q_{i+1/2,j-1/2,k+1/2} v_{i+1/2,j-1/2,k+1/2}^x \Delta_{j-1} \Delta_k + \right. \\ \left. + q_{i+1/2,j+1/2,k-1/2} v_{i+1/2,j+1/2,k-1/2}^x \Delta_j \Delta_{k-1} + q_{i+1/2,j-1/2,k-1/2} v_{i+1/2,j-1/2,k-1/2}^x \Delta_{j-1} \Delta_{k-1} \right) = J_{i+1/2,j,k}^{\circ x}, \quad (14)$$

здесь $J_{i+1/2,j,k}^x, q_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}, v_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^x$ — компонента плотности конвективного тока по оси x , плотность заряда и скорость вещества в центре ячейки.

Работу конвективного тока K^{fd} и K_{cell}^{fd} , выраженного формулой (14), определим по аналогии с формулами для стороннего тока (12), (13).

Если диэлектрическая проницаемость среды постоянна, то обмен энергией между веществом и полем осуществляется только через конвективный ток и ток проводимости в соответствии с формулами:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{E^2}{8\pi} + \frac{B^2}{8\pi} \right) + \mathbf{E} \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = -\text{div} \mathbf{S} - (\mathbf{j}^* + q\mathbf{v} + \mathbf{j}_{ext}) \mathbf{E},$$

$$A = q\mathbf{E}\mathbf{v} + \mathbf{j}^* \mathbf{E} = (\mathbf{j} - \mathbf{j}_{ext}) \mathbf{E}.$$

Компоненту удельной силы Лоренца для ячейки сетки с центром в точке $x = x_{i+1/2}, y = y_{j+1/2}, z = z_{k+1/2}$ определим в соответствии с выражением (11). Для этого необходимо вычислить значения компонент напряженности электромагнитного поля в центре ячейки путем интерполяции. Вектор магнитной индукции будем вычислять как среднее по всем граням в ячейке с весом δ_i , а вектор напряженности электрического поля – как среднее по всем ребрам в ячейке с весом $\delta_i \delta_j$:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^l = & q_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \left(\mathbf{E}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} + \frac{1}{c} \left[\mathbf{v}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \times \mathbf{B}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \right] \right) + \\ & + \frac{\sigma_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}}{c} \left[\mathbf{E}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \times \mathbf{B}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \right] + \\ & + \frac{\sigma_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}}{c^2} \mathbf{v}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} B_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^2 - \\ & - \frac{\sigma_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}}{c^2} \mathbf{B}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \left(\mathbf{v}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \mathbf{B}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \right), \end{aligned} \quad (15)$$

где $\mathbf{F}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^l$ – разностный аналог удельной силы Лоренца.

Работа конвективного тока и тока проводимости не фигурирует явно в разработанном алгоритме. Поэтому необходимо построить разностный аналог работы, которая идет только на нагрев, то есть на изменение внутренней энергии вещества в ячейке. Для этого умножим скалярно силу Лоренца на гидродинамическую скорость и вычтем ее из полной работы конвективного тока и тока проводимости:

$$\begin{aligned} A_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^H = & Q_{cell}^{fd} - K_{cell}^{fd} - \mathbf{E}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \mathbf{v}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} q_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} - \\ & - \frac{\sigma}{c} \left(\mathbf{v}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \left[\mathbf{E}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \times \mathbf{B}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \right] \right) - \\ & - \frac{\sigma}{c^2} \left(v_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^2 B_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^2 - \left(\mathbf{v}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \mathbf{B}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} \right)^2 \right). \end{aligned} \quad (16)$$

Наконец, необходимо выразить плотность электрического заряда через компоненты электромагнитного поля. В реализованной разностной схеме для уравнений Максвелла плотность полного заряда определяется в узле сетки следующим образом:

$$q_{i, j, k}^{tot} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{D_{i+1/2, j, k} - D_{i-1/2, j, k}}{\delta_i} + \frac{D_{i, j+1/2, k} - D_{i, j-1/2, k}}{\delta_j} + \frac{D_{i, j, k+1/2} - D_{i, j, k-1/2}}{\delta_k} \right),$$

где $D_{i+1/2,j,k}$ – компонента вектора электрического смещения, определенная в центре параллельного ему ребра ячейки. Плотность заряда в центре ячейки определяется как разность средней плотности полного заряда по всем узлам ячейки с весом $\delta_i \delta_j \delta_k$ и плотности заряда быстрых частиц q^{ext}

$$q_{i+1/2,j+1/2,k+1/2} = \frac{1}{8V_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}} \left(q^{tot}_{i,j,k} \delta_i \delta_j \delta_k + q^{tot}_{i+1,j,k} \delta_{i+1} \delta_j \delta_k + q^{tot}_{i,j+1,k} \delta_i \delta_{j+1} \delta_k + \right. \\ \left. + q^{tot}_{i,j,k+1} \delta_i \delta_j \delta_{k+1} + q^{tot}_{i+1,j+1,k} \delta_{i+1} \delta_{j+1} \delta_k + q^{tot}_{i+1,j,k+1} \delta_{i+1} \delta_j \delta_{k+1} + q^{tot}_{i,j+1,k+1} \delta_i \delta_{j+1} \delta_{k+1} + \right. \\ \left. + q^{tot}_{i+1,j+1,k+1} \delta_{i+1} \delta_{j+1} \delta_{k+1} + q^{tot}_{i+1,j+1,k+1} \delta_{i+1} \delta_{j+1} \delta_{k+1} \right) - q^{ext}_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}, \quad (17)$$

где $V_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}$ – объем ячейки:

$$V_{i+1/2,j+1/2,k+1/2} = \frac{1}{8} \left(\delta_i \delta_j \delta_k + \delta_{i+1} \delta_j \delta_k + \delta_i \delta_{j+1} \delta_k + \delta_i \delta_j \delta_{k+1} + \right. \\ \left. + \delta_{i+1} \delta_{j+1} \delta_k + \delta_{i+1} \delta_j \delta_{k+1} + \delta_i \delta_{j+1} \delta_{k+1} + \delta_{i+1} \delta_{j+1} \delta_{k+1} \right).$$

Подставляя (17) в (15), (16), получим выражения для силы Лоренца и нагрева вещества в дискретной модели только через компоненты электромагнитного поля и гидродинамической скорости, которые определяются путем решения разностных уравнений Максвелла и гидродинамики, соответственно.

Формулы (15) и (16) выражают разностные значения импульса и внутренней энергии, передаваемые в качестве источников в разностную схему для уравнений газодинамики. Это обеспечивают консервативность разностной схемы в целом. Далее рассмотрим разностную схему газодинамики.

Сеточные функции в уравнениях газодинамики отнесены к центрам ячеек, их аппроксимации на центры граней описаны в [22]. Переход на следующий временной слой в разностных уравнениях осуществляется в два этапа. На первом этапе учитываются силы давления и вычисляются промежуточные величины скорости и удельной полной энергии $\tilde{\mathbf{v}}$ и \tilde{w} :

$$\frac{\rho_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^n \tilde{\mathbf{v}}_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^n - \rho_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^{n-1} \mathbf{v}_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^{n-1}}{\tau_n} = - \frac{1}{V_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}} \cdot \\ \cdot \left(F_{i+1,j+1/2,k+1/2} - F_{i,j+1/2,k+1/2} + F_{i+1/2,j+1,k+1/2} - F_{i+1/2,j,k+1/2} + F_{i+1/2,j+1/2,k+1} - F_{i+1/2,j+1/2,k} \right),$$

$$\frac{\rho_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^n \tilde{W}_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^n - \rho_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^n W_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^n}{\tau_n} = -\frac{1}{V_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}} \cdot \left(A_{i+1,j+1/2,k+1/2} - A_{i,j+1/2,k+1/2} + A_{i+1/2,j+1,k+1/2} - A_{i+1/2,j,k+1/2} + A_{i+1/2,j+1/2,k+1} - A_{i+1/2,j+1/2,k} \right),$$

где $V_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}$ – объем ячейки с центром с индексами $i+1/2, j+1/2, k+1/2$, F – сила, действующая на грань, A – работа силы F .

$$w_{i+1/2,j+1/2,k+1/2} = u_{i+1/2,j+1/2,k+1/2} + v_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^2 / 2,$$

где $u_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}$ – внутренняя энергия вещества.

Сила и работа выражаются через скорость и давление следующим образом:

$$\mathbf{F} = P \cdot \mathbf{S},$$

$$A = (\mathbf{S} \cdot \mathbf{v}) P,$$

где \mathbf{S} – ориентированная площадь грани, направленная из ячейки с меньшим индексом в ячейку с большим, P – давление, определенное в центре грани, скорость \mathbf{v} также берется в центре грани.

На втором этапе учитывается конвективный перенос и вычисляются окончательные значения ρ^{n+1} , \mathbf{v}^{n+1} , w^{n+1} на верхнем слое по времени:

$$\frac{\rho_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^{n+1} - \rho_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^n}{\tau_n} = -\frac{1}{V_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}} \left(F_{i+1,j+1/2,k+1/2}^\rho - F_{i,j+1/2,k+1/2}^\rho + F_{i+1/2,j+1,k+1/2}^\rho - F_{i+1/2,j,k+1/2}^\rho + F_{i+1/2,j+1/2,k+1}^\rho - F_{i+1/2,j+1/2,k}^\rho \right),$$

$$\frac{\rho_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^{n+1} \mathbf{v}_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^{n+1} - \rho_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^n \tilde{\mathbf{v}}_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^n}{\tau_n} = -\frac{1}{V_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}} \cdot \left(\mathbf{F}_{i+1,j+1/2,k+1/2}^{\rho v} - \mathbf{F}_{i,j+1/2,k+1/2}^{\rho v} + \mathbf{F}_{i+1/2,j+1,k+1/2}^{\rho v} - \mathbf{F}_{i+1/2,j,k+1/2}^{\rho v} + \mathbf{F}_{i+1/2,j+1/2,k+1}^{\rho v} - \mathbf{F}_{i+1/2,j+1/2,k}^{\rho v} \right),$$

$$\frac{\rho_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^{n+1} W_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^{n+1} - \rho_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^n \tilde{W}_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}^n}{\tau_n} = -\frac{1}{V_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}} \cdot \left(A_{i+1,j+1/2,k+1/2}^{\rho w} - A_{i,j+1/2,k+1/2}^{\rho w} + A_{i+1/2,j+1,k+1/2}^{\rho w} - A_{i+1/2,j,k+1/2}^{\rho w} + A_{i+1/2,j+1/2,k+1}^{\rho w} - A_{i+1/2,j+1/2,k}^{\rho w} \right),$$

здесь F^ρ , $\mathbf{F}^{\rho\mathbf{v}}$, $F^{\rho w}$ – конвективные потоки величин ρ , $\rho\mathbf{v}$, ρw через соответствующую грань:

$$F^\rho = (\mathbf{S} \cdot \mathbf{v})(\rho_{upv} + \Delta\rho_{upv}), F^{\rho\mathbf{v}} = (\mathbf{S} \cdot \mathbf{v})(\rho\mathbf{v}_{upv} + \Delta\rho\mathbf{v}_{upv}),$$

$$F^{\rho w} = (\mathbf{S} \cdot \mathbf{v})(\rho w_{upv} + \Delta\rho w_{upv}).$$

Индекс upv означает, что значение величины определяется в той из двух примыкающих к грани ячеек, из которой направлена скорость $\check{\mathbf{v}}$. Δ обозначает поправку к значению соответствующей величины, обеспечивающую одновременно монотонность и повышенный порядок схемы. Если для грани с индексами $i+1/2, j+1/2, k$ наветренной ячейкой окажется ячейка с центром с индексами $i+1/2, j+1/2, k+1/2$, то поправка будет равна минимуму по модулю из двух значений:

$$|\Delta\rho_{upv}| = \min[|\rho_{i+1/2, j+1/2, k} - \rho_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}|, |\rho_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} - \rho_{i+1/2, j+1/2, k+1}|].$$

Для величин $\rho\mathbf{v}$ и ρw поправка вычисляется аналогично. Если обе разности в (78) имеют разные знаки, то поправка равна нулю.

После второго этапа к скорости и внутренней энергии добавляются приращения, обусловленные силой Лоренца и энергией нагрева вещества электромагнитным полем, соответственно

$$\Delta\mathbf{v}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} = \mathbf{F}_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^l \tau_n / \rho_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^{n+1},$$

$$\Delta u_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} = A_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^H \tau_n / \rho_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^{n+1}.$$

Так как электродинамическая, газодинамическая схема и все полученные выражения имеют второй порядок аппроксимации по пространству, общая разностная схема также имеет второй порядок аппроксимации по пространству.

3 Тестовый расчет

Проверка численного алгоритма и оценка влияния электрического поля на движение среды выполнены путем проведения тестового расчета. Рассмотрено падение монохроматического пучка электронов с энергией 200 кэВ нормально на поверхность преграды, выполненной из эпоксидной смолы. Длительность импульса составила 150 нс, поток электронов $N_e = 3 \cdot 10^{16}$ 1/см², площадь пучка составляла 1 см². Электронные пучки с такими параметрами генерирует ускоритель электронов КАЛЬМАР, который эксплуатируется в НИЦ «Курчатовский институт» [23,24].

Моделирование взаимодействия частиц с твердотельной преградой, динамики вещества и электродинамики проводилось в полной трехмерной постановке на гибридном вычислительном кластере К-100 с помощью вычислительных модулей комплексов РЭМП и MARPLE3D, объединенных в программный скрипт. Статистическим методом частиц [7, 25] вычислены распределения энерговыделения и плотности стороннего тока.

Зависимость энерговыделения от продольной координаты представлена на рис. 1. Для полученной плотности стороннего тока вычислено распределение электромагнитного поля. Основной его компонентой, определяющей величину силы Лоренца, является продольная компонента напряженности электрического поля. Ее зависимость от продольной координаты представлена на рис. 2.

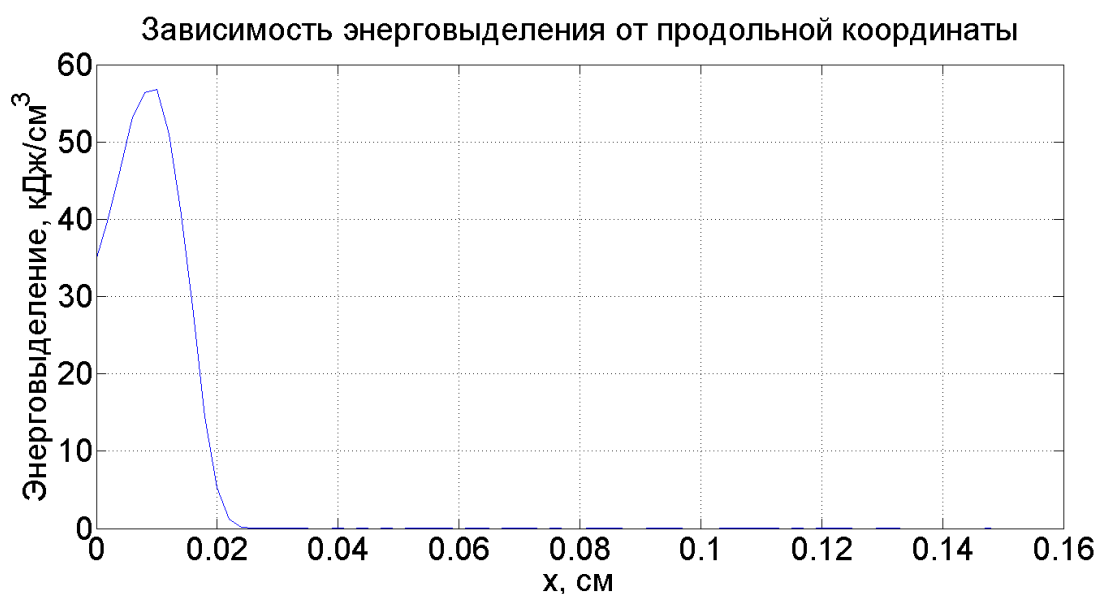


Рис. 1 График зависимости энерговыделения от продольной координаты

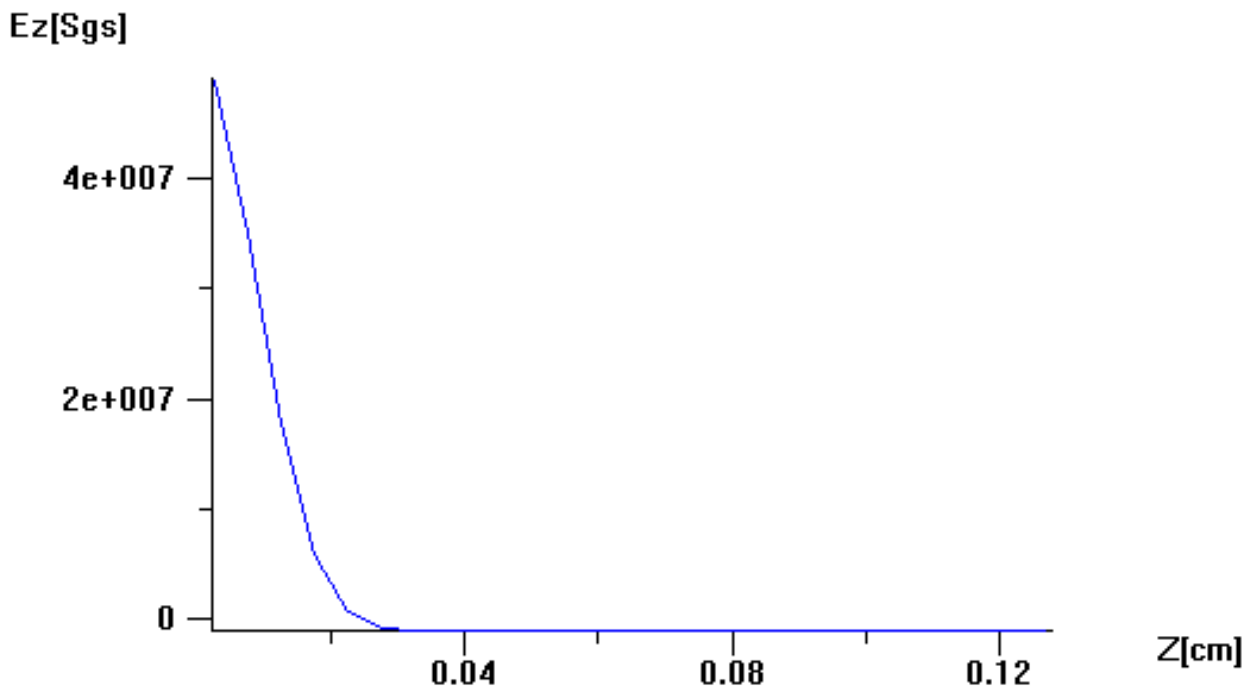


Рис. 2 Зависимость продольной компоненты напряженности электрического поля от продольной координаты

На рис. 3, 4 изображены двумерные распределения напряженности электрического поля в диэлектрической преграде.

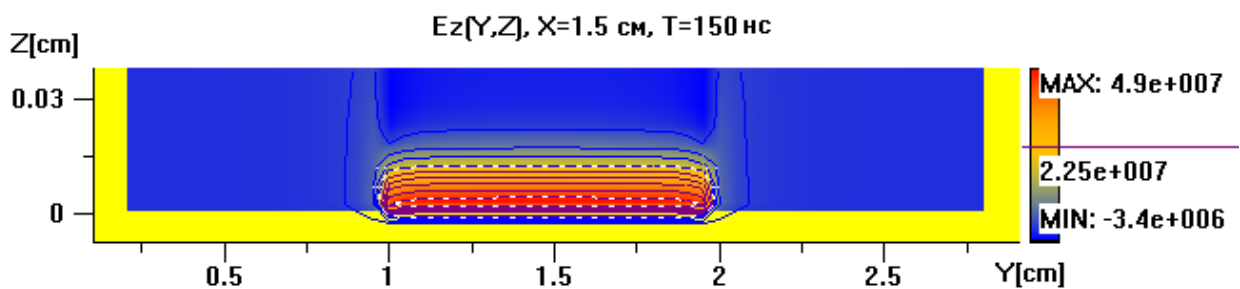


Рис. 3 Распределение продольной компоненты напряженности электрического поля в преграде в плоскости распространения потока электронов

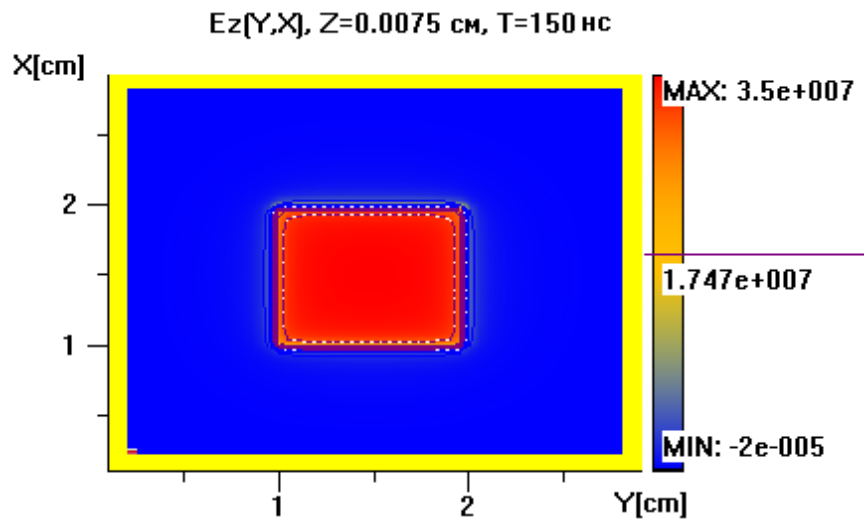


Рис. 4 Распределение продольной компоненты напряженности электрического поля в преграде в плоскости, перпендикулярной потоку квантов

Также проведены расчеты электромагнитного поля с учетом радиационной и температурной проводимостей твердотельной преграды. При этом, как и следовало ожидать, полученные значения компонент электромагнитного поля уменьшились на несколько порядков. На рис. 5 приведена характерная зависимость напряженности электрического поля от времени на расстоянии 0.01 см от облученной поверхности преграды.

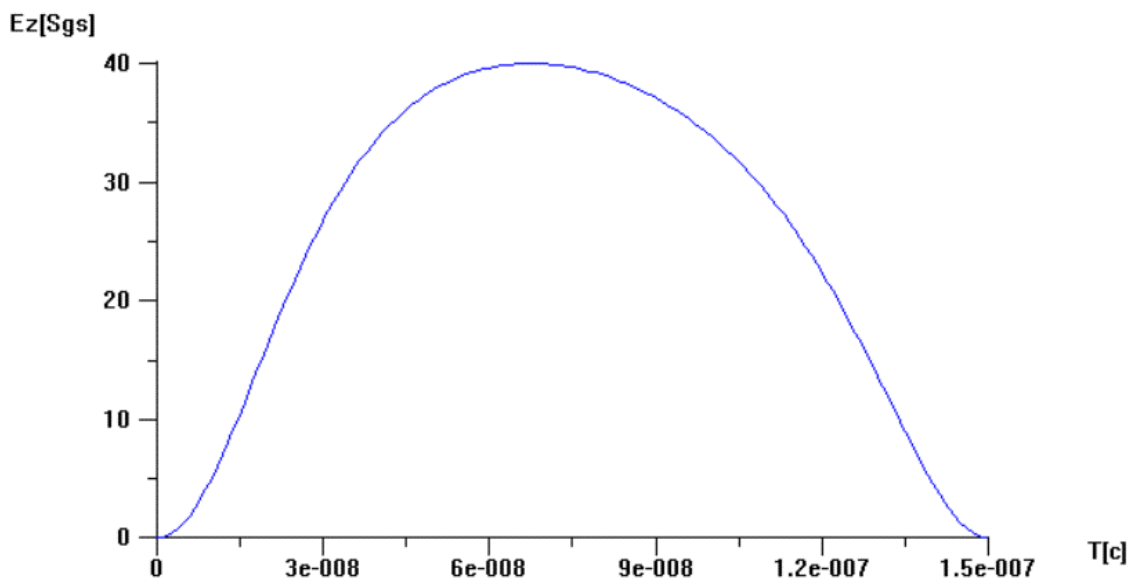


Рис. 5 Зависимость напряженности электрического поля от времени с учетом радиационной и температурной проводимостей

Вычисленные распределения энерговыведения, плотности стороннего тока и электромагнитного поля использованы для моделирования газодинамических эффектов. С помощью программного комплекса MARPLE3D проведены расчеты динамики преграды с учетом и без учета силы Лоренца. На рис. 6, 7 показаны распределения термодинамических параметров в преграде после окончания действия импульса. Из приведенных графиков видно, что влияние силы Лоренца на формирование ударной волны существенно при взаимодействии электронного пучка с твердотельной преградой.

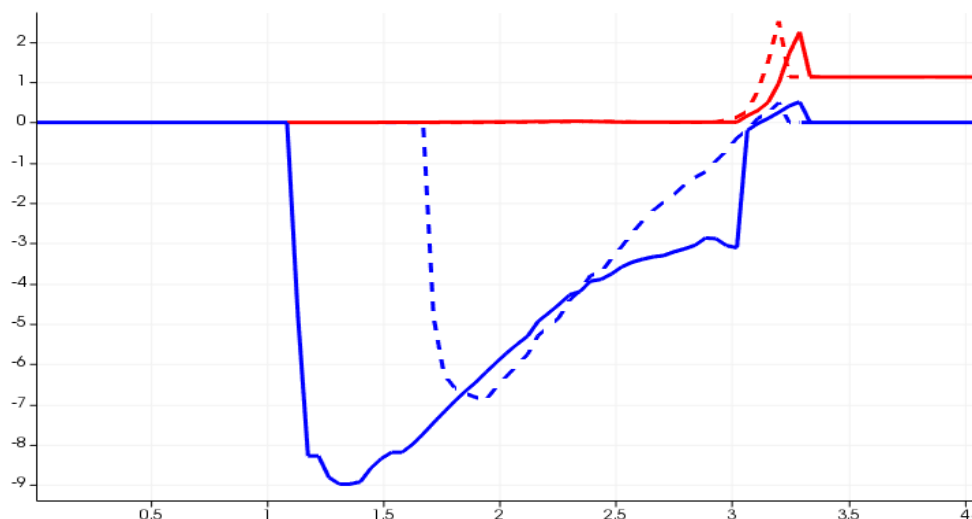


Рис. 6 Графики зависимости продольной компоненты скорости (синие линии, см/мкс) и плотности (красные линии, г/см³) вещества преграды от продольной координаты без учета (пунктирные линии) и с учетом (сплошные линии) силы Лоренца

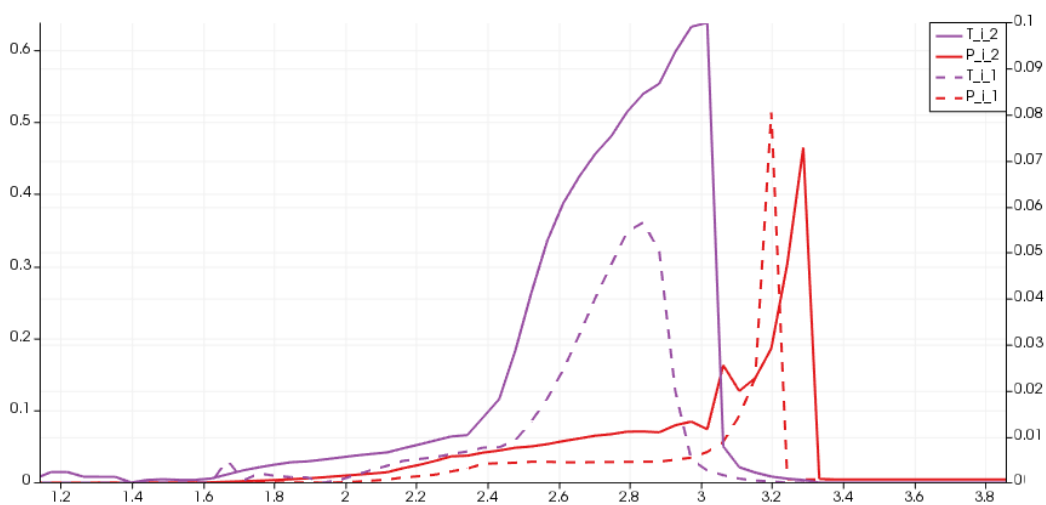


Рис. 7 Графики зависимости давления (красные линии, г/см³) и температуры (фиолетовые линии, кэВ) в веществе преграды от продольной координаты без учета (пунктирные линии) и с учетом (сплошные линии) силы Лоренца

Заключение

Рассмотрена математическая модель термомеханических и электромагнитных эффектов, обусловленных рассеянием ионизирующего излучения в среде. Перенос описан классическими кинетическими. Электромагнитное поле, генерируемое заряженными частицами, моделируется уравнениями Максвелла. Динамика сплошной среды под действием излучения описана в модели идеальной двухтемпературной магнитной гидродинамики. В основу численного алгоритма решения уравнений Максвелла и газовой динамики положены разработанные ранее полностью консервативные явные разностные схемы. Построены разностные аналоги работы электрического поля и объемной силы Лоренца, обеспечивающие выполнение разностного аналога закона сохранения энергии в системе, объединяющей электромагнитное поле и вещество.

Проведены расчеты, призванные оценить влияние электромагнитного поля на динамику преграды, облучаемой проникающим излучением. Рассмотрено нормальное падение монохроматического пучка электронов с энергиями 200 кэВ на поверхность преграды, выполненной из эпоксидной смолы. Длительность импульса составила 150 нс, плотность энергии в потоке порядка 1 кДж/см². Показано, что при таких параметрах потока в непроводящей среде сила Лоренца сравнима с градиентом давления, обусловленного нагревом при энерговыделении. Электромагнитное поле, генерируемое потоком электронов, в этом случае оказывает существенное влияние на возбуждаемую этим потоком динамику преграды.

Библиографический список

1. Генерация и фокусировка сильнооточных релятивистских электронных пучков./ под ред. Рудакова Л.И. М.: Энергоатомиздат, 1990, 280 с.
2. Бойко В.И., Скворцов В.А., Фортон В.Е., Шаманин И.В. Взаимодействие импульсных пучков заряженных частиц с веществом. М.: Физматлит, 2003, 288 с.
3. Тамм, И.Е. Основы теории электричества: Учеб. пособие для ун-тов / И.Е. Тамм. – 3-е изд., совершенно перераб. М.; Л.: ОГИЗ. Гос. изд-во технико-теорет. лит., 1946, 661 с.
4. Ландау, Л. Д., Лифшиц, Е. М. Теория поля. М.: Физматлит, 2006, 534 с.
5. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966, 688 с.
6. Марков М.Б., Паротькин С.В. Кинетическая модель радиационной проводимости газа // Матем. моделирование. 2011. Т. 23. №4. С. 41-56.
7. Березин А.В., Воронцов А.С., Жуковский М.Е., Марков М.Б., Паротькин С.В. Метод частиц для электронов в рассеивающей среде // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2015. Т. 55. №9. С. 1566-1578.
8. Гайтлер Л. Квантовая теория излучения. М.: Иностранная литература, 1956, 492 с.

9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1980, 273 с.
10. Ахиезер А.И., Берестецкий В.Б. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1969, 623 с.
11. Мотт Н., Мэсси Г. Теория атомных столкновений. М.: МИР, 1969, 446 с.
12. Мэсси Г., Бархоп Е. Электронные и ионные столкновения. М.: МИР, 1958, 605 с.
13. Braun W., Nepp K. The Vlasov Dynamics and Its Fluctuations in the $1/N$ Limit of Interacting Classical Particles // Commun. math. Phys. 1977. v. 56. №2. p. 101-113.
14. Шилов Г.Е. Математический анализ. Второй специальный курс. М.: Изд-во МГУ, 1984, 328 с.
15. Ландау, Л. Д., Лифшиц, Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986, 736 с.
16. Марков М.Б. Приближение однородного рассеяния электронов на траекториях // Математическое моделирование. 2009. Т. 21. №10. С. 132-142.
17. Березин А.В., Воронцов А.С., Марков М.Б., Паротькин С.В., Захаров С.В. Моделирование предпробойной стадии газового разряда // Математическое моделирование. 2013. Т. 25, № 3, С. 105-118.
18. Андрианов А.Н., Березин А.В., Воронцов А.С., Ефимкин К.Н., Зинченко В.Ф., Марков М.Б., Членов А.М. Моделирование пучка ускорителя ЛИУ-10 на параллельном компьютере // Математическое моделирование. 2010. Т. 22. № 2. С. 29-44.
19. А.В. Березин, А.А. Крюков, Б.Д. Плющенко Метод вычисления электромагнитного поля с заданным волновым фронтом // Математическое моделирование. 2011. Т. 23. №3. С. 109-126.
20. Андрианов А.Н., Березин А.В., Воронцов А.С., Ефимкин К.Н., Марков М.Б. Моделирование электромагнитных полей радиационного происхождения на многопроцессорных вычислительных системах // Матем. моделирование. 2008. Т. 20. № 3. С. 98-114.
21. Марков М.Б., Паротькин С.В., Сысенко А.В. Метод частиц для модели электромагнитного поля потока электронов в газе // Матем. моделирование. 2008. Т. 20. №5. С. 35-54.
22. Болдарев А.С. О конечноразностном решении гиперболических систем дифференциальных уравнений с повышенным порядком аппроксимации на двумерных неструктурированных сетках // ИММ РАН. Препринт № 35. М., 1993. 20 с.
23. Демидов Б.А., Ивкин М.В., Ивонин И.А., Петров В.А., Ефремов В.П., Фортон В.Е., Килер Н. Определение профиля энерговыделения мощного электронного пучка в аэрогеле // Журнал технической физики, 1997, Т. 67, № 11, С. 26-32.
24. Демидов Б.А., Ефремов В.П., Ивкин М.В., Мещеряков А.Н., Петров В.А. Воздействие мощных потоков энергии на вакуумную резину // Журнал технической физики, 2003, Т. 73, вып. 6, С. 130-135.
25. Жуковский М.Е., Усков Р.В. Моделирование взаимодействия гамма-излучения с веществом на гибридных вычислительных системах. // Математическое моделирование. 2011. Т. 23. Вып. 7. С. 20-32.