

Entwicklung und Untersuchung eines Partikelverfahrens zur Simulation elektromagnetischer Wechselwirkungen in verdünnten Plasmaströmungen

Von der Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik und Geodäsie der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

Torsten Kai Manuel Stindl

aus Stuttgart - Bad Cannstatt

Hauptberichterin: Prof. Dr.-Ing. habil. Monika Auweter-Kurtz

Mitberichter: Prof. Dr. rer. nat. habil. Claus-Dieter Munz

Tag der mündlichen Prüfung: 12. Februar 2015

Institut für Raumfahrtssysteme der Universität Stuttgart

2015

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Raumfahrtsysteme der Universität Stuttgart.

Mein besonderer Dank gilt Frau Prof. Dr.-Ing. habil. Monika Auweter-Kurtz für die Übernahme des Hauptberichts und die Unterstützung meiner Forschungstätigkeiten. Ohne ihre Ratschläge und Anmerkungen, sowie ihr Engagement über die gesamte Entstehungszeit, wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen. Ebenfalls möchte ich Herrn Prof. Dr. rer. nat. habil. Claus-Dieter Munz für die Übernahme des Mitberichts danken sowie für seine freundliche Unterstützung und die gute Zusammenarbeit.

Herrn Dr.-Ing. Markus Fertig danke ich für die fachlichen Diskussionen, die entscheidend zu meinem Verständnis der Materie und zu meinen ersten Schritten in die Welt der numerischen Modellierung und Simulation beigetragen haben.

Den Kollegen am Institut für Raumfahrtsysteme und am Institut für Aerodynamik und Gasdynamik der Universität Stuttgart danke ich für die produktive und angenehme Zusammenarbeit. Meinen Mitstreitern in der Codeentwicklung, vor allem Herrn Dipl.-Phys. Marcel Pfeiffer, Herrn Dr.-Ing. Jonathan Neudorfer und Herrn Dr.-Ing. Andreas Stock, bin ich dabei zu besonderem Dank für die gemeinsamen Jahre verpflichtet. Auch den anderen Kollegen der Numerikabteilung, allen voran Herrn Dipl.-Ing. Uwe Bauder und Herrn Dipl.-Ing. Asim Mirza möchte ich herzlich für die gute Zusammenarbeit danken. Herrn Prof. Dr. rer. nat. Hans-Peter Röser und Herrn Prof. Dr.-Ing. Stefanos Fasoulas danke ich für die Möglichkeit, diese Arbeit am Institut für Raumfahrtsysteme durchzuführen.

Die Arbeit wurde zusätzlich gefördert durch Promotionsstipendien der Erich-Becker-Stiftung der Fraport AG und der Landesgraduierföderung Baden-Württemberg, für deren großzügige finanzielle Unterstützung ich mich an dieser Stelle besonders bedanke.

Schließlich gilt mein Dank auch allen anderen Personen, die mich im Laufe meiner Arbeit mit ihrer fachlichen Kompetenz und einem angenehmen Arbeitsklima begleitet haben. Meiner Familie und meinen Freunden danke ich von Herzen für ihre mentale Unterstützung, ihre Geduld und ihr Verständnis.

Torsten Stindl

Stuttgart, Februar 2015

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	3
Kurzfassung	7
Abstract	9
Nomenklatur	11
1. Einleitung	15
2. Theoretische Grundlagen	19
2.1. Plasma	19
2.2. Boltzmann-Gleichung	21
2.3. Lorentzkraft	22
2.4. Maxwell-Gleichungen	23
3. Modellierung und numerische Methoden	25
3.1. Particle-In-Cell Verfahren	25
3.2. Berechnung der elektromagnetischen Felder	28
3.2.1. Divergenzkorrektur	28
3.2.2. Das Discontinuous Galerkin Verfahren	31
3.2.3. Randbedingungen	36
3.2.4. Externe Felder	36
3.3. Parallelisierungskonzept	37
3.4. Rechengitter	38
3.4.1. Parallelisierung: Gebietszerlegung und Lastverteilung	40
3.5. Zeitdiskretisierung und Zeitintegration	42
3.5.1. Zeitdiskretisierung	42
3.5.2. Zeitintegration des Feldlösers	43
3.5.3. Zeitintegration der Partikelbewegung	45
3.5.4. Subcycling	48
3.5.5. Parallelisierung: Zeitdiskretisierung	50
3.6. Lorentzlöser	50
3.7. Partikelemission	51

3.8.	Lokalisierung und Randbehandlung der Partikel	53
3.8.1.	Lokalisierung	54
3.8.2.	Verfolgung	57
3.8.3.	Randbehandlung	60
3.8.4.	Parallelisierung: Lokalisierung und Verfolgung	63
3.9.	Deposition	65
3.9.1.	Elementmittelwertmethode	66
3.9.2.	Direkte Deposition auf den nächsten Gaußpunkt	67
3.9.3.	Formfunktionsmethode	68
3.9.4.	Volumengewichtungsmethode	69
3.9.5.	Basis-Splines-Methode	71
3.9.6.	Parallelisierung: Deposition	72
3.10.	Interpolation	74
4.	Verifizierung und Untersuchung	75
4.1.	Maxwelllöser	75
4.2.	Lorentzlöser	83
4.3.	Partikellokalisierung und -verfolgung	85
4.4.	Deposition	88
4.4.1.	Ladungserhaltung und -verteilung	88
4.4.2.	Rechenzeitaufwand	93
4.4.3.	Plasmawelle	97
4.4.4.	Energieerhaltung	99
4.4.5.	Weitere Untersuchungen und Fazit	102
4.5.	Profiling und parallele Skalierbarkeit	104
4.5.1.	Profiling	104
4.5.2.	Parallele Skalierbarkeit	106
4.6.	Anwendungsfall Ionenoptik	109
5.	Zusammenfassung und Ausblick	117
	Literaturverzeichnis	123
A.	Anhang zum Rechenaufwand der Deposition	I
B.	Anhang zur Ladungsverteilung der Deposition	III

Kurzfassung

In einer Vielzahl von technischen Prozessen und Geräten, insbesondere in der Raumfahrt, spielen verdünnte Plasmaströmungen eine signifikante Rolle. Zur Erforschung, Auslegung und Optimierung dieser Prozesse und Geräte können numerische Plasmasimulationen einen wertvollen Beitrag liefern. Aufgrund der dünnen Plasmen und der damit verbundenen Ungültigkeit der Kontinuumsannahme werden Partikelverfahren verwendet. Gekoppelte PIC-DSMC-Verfahren zur Approximation der Boltzmann-Gleichung können sowohl elektromagnetische Interaktionen als auch Kollisionen der Partikel behandeln. Ein solches Verfahren wird derzeit in einer Kooperation zwischen dem Institut für Raumfahrtsysteme (IRS) und dem Institut für Aerodynamik und Gasdynamik (IAG) der Universität Stuttgart entwickelt, mit früheren Beteiligungen des Karlsruher Institut für Technologie (KIT), des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS) und der German Research School der RWTH Aachen.

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Entwicklung und Untersuchung von Teilen der PIC-Komponente dieses gekoppelten PIC-DSMC-Verfahrens und stellt die implementierten Verfahren und Techniken sowie die durch die Verifizierung und Untersuchung gewonnenen Erkenntnisse vor. Die theoretischen Grundlagen und physikalischen Zusammenhänge sowie die grundlegenden Gleichungen werden vorgestellt. Die Modellierung und Implementierung des PIC-Verfahrens wird erläutert und die räumlichen und zeitlichen Diskretisierungsmethoden sowie Randbedingungen des Verfahrens werden präsentiert. Der Fokus der Arbeit liegt auf der Partikelbehandlung. Dazu gehören unter anderem die Partikellokalisierung und -verfolgung bezüglich des Rechengitters sowie die Randbehandlung der Partikel. Die entwickelten und vorgestellten Methoden ermöglichen eine zuverlässige und schnelle Verfolgung der Partikel auf unstrukturierten Gittern mit nicht planaren Flächen zwischen Gitterelementen. Dadurch wird allgemein die sichere Anwendung von Randbedingungen, für das PIC-Verfahren die korrekte Zuordnung der Partikel zu den Rechengitterelementen und für das DSMC-Verfahren die schnelle Erfassung der in einem Element befindlichen Partikel gewährleistet. Ein weiterer Aspekt der Partikelbehandlung ist die Deposition der Ladungen von den Partikeln auf das Rechengitter selbst, für die verschiedene Methoden präsentiert werden. Durch eine grundlegende Untersuchung dieser Methoden hinsichtlich Rechenaufwand, Ladungserhaltung und -verteilung wird deren Eignung für verschiedene Anwendungsbereiche und deren spezifischen Anforderungen identifiziert. Für die bisher verwendete Formfunktionsmethode wurde eine Alternative hoher Ordnung auf der Basis von B-Splines eingeführt, die durch die Verwendung eines kartesischen Hintergrundgitters zur Deposition zu einer signifikanten Reduzierung des Rechenaufwands führt.

Da die Simulation der meisten Anwendungsfälle aufgrund der Notwendigkeit von hohen Partikelzahlen und hochaufgelösten Rechengittern sehr rechenintensiv ist und somit die Verwendung von parallelen Hochleistungsrechnern erfordert, ist das Verfahren voll parallelisiert. Die Methoden zur

Parallelisierung der einzelnen Teile des Verfahrens werden vorgestellt. Darüber hinaus wird die Skalierbarkeit und die Verteilung der Rechenlast gezeigt. Das PIC-Verfahren wird verifiziert und die Anwendbarkeit des Verfahrens am Beispiel der Simulation einer Strömung durch das Gitter eines Ionentriebwerks demonstriert.

Die in dieser Arbeit vorgestellten Verfahren und Techniken ermöglichen die parallele Simulation von dreidimensionalen verdünnten Plasmaströmungen auf komplexen Geometrien unter Verwendung des Discontinuous Galerkin Verfahrens hoher Ordnung, wofür die hierfür entwickelten und untersuchten Partikelbehandlungsmethoden einen wesentlichen Beitrag leisten.

Abstract

For many technical processes and devices, especially for space applications, rarefied plasma flows play a significant role for their working principle. Plasma simulations can be a valuable contribution to the research, design and optimization of these processes and devices. Due to the rarefied character of the plasma flows, they cannot be treated as continuum flows, instead particle methods are applied. Coupled PIC-DSMC methods for the approximate solution of the Boltzmann equation allow the simulation of electromagnetic interactions as well as particle collisions. Such a method is currently developed in cooperation between the Institute of Space Systems (IRS) and the Institute of Aerodynamics and Gasdynamics (IAG) of the University of Stuttgart, with previous participation by the Karlsruhe Institute of Technology (KIT), the High Performance Computing Center Stuttgart (HLRS) and the German Research School of the RWTH Aachen.

The topic of this work is the development and investigation of the PIC part of the coupled method and it presents the implemented methods and techniques as well as the results and insights gained by the verification and investigation. The theoretical and physical foundations and the basic equations are outlined. The modeling and implementation of the PIC method are discussed and the spatial and temporal discretization methods as well as the boundary conditions are presented. This work focuses on the particle treatment. This includes particle localization, particle tracking and the boundary treatment of particles with respect to the computational grid. The developed and presented methods allow reliable and fast tracking of the particles on unstructured grids with non-planar volume element boundaries. Thereby, the accurate application of particle boundary conditions and the correct mapping of particles to the computational grid as well as the fast compilation of particles within a grid element is ensured, the latter being of high importance for the DSMC method. An additional aspect of the particle treatment is the deposition of the particle charges onto the computational grid, for which several methods are presented. An extensive investigation of these deposition methods with regard to computational cost, charge conservation and charge distribution is conducted and their suitability for different areas of application is identified. A B-splines based alternative to the commonly used method of employing high order shape functions is introduced and applied to the deposition via a Cartesian background mesh, which significantly reduces computational costs.

For most applications, large numbers of particles and high resolution grids must be employed, requiring high computational effort. Therefore, to facilitate high performance computing, the method has been fully parallelized and the parallelization methods in use for the different parts of the PIC code are presented within this work. Additionally, scalability tests and profiling of the code are performed and the results are shown. A verification of the PIC code is conducted and the application of the code is demonstrated using the example of a simulation of the plasma flow through the grid of an ion thruster.

The methods and techniques presented in this work enable the parallel simulation of three dimensional rarefied plasma flows with complex geometries via the high order discontinuous Galerkin method, for which the particle treatment methods developed and investigated in this work provide a substantial contribution.

Nomenklatur

\vec{a}	Beschleunigung $\left(\frac{\text{m}}{\text{s}^2}\right)$
a_{ij}, b_i, c_i	Koeffizienten des Runge-Kutta-Verfahrens
A_i, B_i, C_i	Koeffizienten des LSERK4-Verfahrens
\vec{B}	Magnetische Flussdichte (T)
B	B-Spline
C	CFL-Zahl (–)
\vec{D}	Elektrische Flussdichte $\left(\frac{\text{As}}{\text{m}^2}\right)$
\vec{E}	Elektrische Feldstärke $\left(\frac{\text{V}}{\text{m}}\right)$
E_{kin}	kinetische Energie (J)
E_{pot}	potentielle Energie (J)
\mathbf{F}	numerischer Fluss über Elementgrenzen
\vec{F}	Kraft (N)
f	Geschwindigkeitsverteilungsfunktion $\left(\frac{\text{s}^3}{\text{m}^6}\right)$
\vec{g}	Quelltermvektor
G	Grundfläche (m^2)
\vec{H}	Magnetische Feldstärke $\left(\frac{\text{A}}{\text{m}}\right)$
h	Schrittweite des Runge-Kutta-Verfahrens
I	Strom (A)
\vec{j}	Stromdichte $\left(\frac{\text{A}}{\text{m}^2}\right)$
\mathbf{K}_d	Zustandsortsableitungen/physikalischer Fluss in Dimension d
\vec{k}	ganzzahlige Hintergrundgitterzuordnung in x-,y- und z-Richtung (–)
K	Faktor (–)
ΔL	Länge einer kartesischen Hintergrundgitterzelle (m)
L	Rechenlast (–)
l_i	Lagrangepolynome
l_L	Landaulänge (m)
m	Masse (kg)

\vec{n}	Normalen(einheits)vektor (m)
N	Anzahl, Polynomgrad für DG (–)
n	Teilchendichte $\left(\frac{1}{\text{m}^3}\right)$
\mathcal{O}	Ordnung
\mathbf{P}	Matrix aus drei Vektoren (m)
\vec{p}	Impuls $\left(\frac{\text{N}}{\text{s}}\right)$
p	Polynomgrad
PE	parallele Effizienz (–)
Q	Ladung (C)
\vec{R}	Residuum
$\vec{r}_{i,j}, \vec{r}_{ij}$	Ortsvektor von i nach j (m)
R	Radius der Formfunktion (m)
S	Funktion der Ladungsverteilung in Punktwolke
s	Abstand (m)
δT	Simulations-, Gyrationdauer (s)
Δt	Zeitschrittweite (s)
T	Temperatur (K)
t	Zeit (s)
$\vec{u}, \vec{u}_L, \vec{u}_R$	Zustandsvektor allgemein, rechts, links
\vec{v}	Geschwindigkeitsvektor $\left(\frac{\text{m}}{\text{s}}\right)$
V	Volumen (m^3)
\vec{x}	Ortsvektor (m)

Griechische Formelzeichen

α	Polynomexponent (–)
B	Betafunktion
χ	Divergenzkorrekturparameter (–)
δ	geringe Abweichung vom Nullwert
ϵ_r	Permittivitätszahl $\left(\frac{\text{N}}{\text{A}^2}\right)$
γ	Lorentzfaktor (–)
ϕ	Elektrisches Potential (V)
Λ_c	Coulomb-Algorithmus (–)
λ	Mittlere freie Weglänge (m)
λ_D	Debyelänge (m)
μ_r	Permeabilitätszahl $\left(\frac{\text{N}}{\text{A}^2}\right)$

ν	Divergenzkorrekturparameter (–)
ω	Kreisfrequenz ($\frac{1}{s}$)
ω_p	Plasmafrequenz ($\frac{1}{s}$)
Φ	Divergenzkorrekturvariable ($\frac{Vs}{m^2}$)
Ψ	Divergenzkorrekturvariable ($\frac{V}{m}$)
ψ	Basisfunktion
φ	Testfunktion
ρ	(Ladungs-) Dichte ($\frac{C}{m^3}$)
σ	Wirkungsquerschnitt (m^2)
σ_L	Gewichtungsfaktor für die Gebietszerlegung (–)
Konstanten	
c, c_0	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ($299792458 \frac{m}{s}$)
ϵ_0	Elektrische Feldkonstante ($8,85418781762 \cdot 10^{-12} \frac{As}{Vm}$)
k_B	Boltzmannkonstante ($1,3806488(13) \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$)
μ_0	Magnetische Feldkonstante ($12,566370614 \cdot 10^{-7} \frac{N}{A^2}$)
q, e	Elementarladung ($1,602176565(35) \cdot 10^{-19} C$)
Indizes	
<i>alt, neu</i>	vor bzw. nach einer Operation, z.B. einem Stoß
<i>ch</i>	charakteristisch
<i>D</i>	Dreieck
<i>d</i>	Dimension
<i>e</i>	Elektron
<i>E, Elem</i>	Element
<i>el</i>	elektrisch
<i>h</i>	diskretisiert
<i>I</i>	Ion
<i>i, j, k, n, m</i>	kontextabhängige Zählvariablen
<i>mag</i>	magnetisch
<i>min, max</i>	Minimum, Maximum
<i>P</i>	Punkt, Prozess
<i>p, part</i>	Partikel
<i>proc</i>	Prozess
<i>r, ϕ, θ</i>	Polarkoordinatenrichtungen

<i>s</i>	Formfunktion
<i>tetra</i>	Tetraeder
<i>vv</i>	Verschiebung
<i>x,y,z</i>	x-, y-, z-Richtung

Abkürzungen

BS	B -Splines-Methode
CAD	Computer Aided D esign
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
DG	Discontinuous G alerkin
DG-FEM	Discontinuous G alerkin F inite E lemente M ethode
DG-SEM	Discontinuous G alerkin S pektrale E lemente M ethode
DSMC	D irect S imulation M onte C arlo
EMW	E lement m ittelwertmethode
FDM	F inite D ifferenzen M ethode
FEM	F inite E lemente M ethode
FF	Formfunktionsmethode
FVM	F inite V olumen M ethode
HGG	H intergrundgitter
LSERK4	L ow S torage E xplicit R unge K utta 4 th Order
MPF	M akropartikelfaktor
NASA	N ational A eronautics and S pace A dmistration
NGP	N ächster- G außpunkt-Methode
PHM	P urely H yperbolic M axwell System
PIC	P article I n C ell
VG	V olumengewichtungsmethode

1. Einleitung

Verdünnte Plasmaströmungen spielen bei einer Vielzahl von technischen Prozessen und Geräten eine wichtige Rolle. Insbesondere in der Raumfahrt finden sich häufig verdünnte Plasmen, unter anderem von der Ionosphäre der Erde über den Sonnenwind bis hin zum Eintritt in Planetenatmosphären als Umgebungsbedingung für Raumfahrzeuge, sowie als zentraler Bestandteil verschiedener elektrischer Raumfahrtantriebe, beispielsweise bei Iontriebwerken und gepulsten Plasmatriebwerken [3, 36], die ihren Schub durch eine elektromagnetische Beschleunigung eines Plasmas erzeugen. Zur Erforschung, Auslegung und Optimierung der Plasmaströmungen und der betroffenen Geräte ist eine möglichst genaue Kenntnis der auftretenden Strömungseffekte erforderlich. Numerische Simulationen unterstützen dabei experimentelle Untersuchungen, insbesondere auch in Fällen, in denen experimentelle Untersuchungen nur eingeschränkt möglich sind, sei es durch Grenzen der Messtechnik, beispielsweise aufgrund sehr kleiner oder sehr großer Zeit- oder Größenskalen, oder durch den hohen finanziellen und zeitlichen Aufwand von Experimenten, beispielsweise im Weltraum oder beim Wiedereintritt in die Erdatmosphäre. Zusätzlich bieten Simulationen die Möglichkeit, Vorauslegungen und erste Abschätzungen zu erstellen. Auch wenn das Interesse dieser Arbeit der Raumfahrt gilt, sind die Anwendungsmöglichkeiten von Plasmasimulationen keineswegs auf die Raumfahrt beschränkt. Einige bekannte industrielle Anwendungen von Plasmen sind zum Beispiel Leuchtstofflampen, Zündfunken für Verbrennungsmotoren, Bauteilbeschichtungen, die Erzeugung von Hochleistungsmikrowellen durch Gyrotrons oder Kernfusionsreaktoren.

Eine charakterisierende Größe für Plasmen und Gase ist die Knudsenzahl $Kn = \frac{\lambda}{L}$, das Verhältnis aus mittlerer freier Weglänge λ der im Plasma befindlichen Teilchen und einer charakteristischen Länge der Strömung L . Bei einer Knudsenzahl $Kn \ll 1$ finden entsprechend sehr viele Stöße zwischen den Teilchen statt und es ergibt sich eine sogenannte Kontinuumsströmung, die klassisch mittels numerischer Strömungsmechanik (*Computational Fluid Dynamics*, CFD) durch Lösung der Navier-Stokes- oder der magnetohydrodynamischen Gleichungen, welche eine Strömung als newtonsches Fluid betrachten, simuliert wird [8]. Für die hier betrachteten Anwendungen weisen die Strömungen hohe Knudsenzahlen auf, so dass zu deren Simulation die Kontinuumsannahme nicht gerechtfertigt ist und daher Partikelverfahren zur Anwendung kommen müssen, bei denen die Eigenschaften und Interaktionen von Teilchen modelliert werden. Die Teilchenzahlen sind dabei in der Regel jedoch zu hoch, um auf aktuellen Rechensystemen jedes einzelne Teilchen zu berücksichtigen. Daher werden

sie zu Simulationspartikeln, sogenannten Makropartikeln, zusammengefasst.

Zwei übliche Partikelverfahren für hohe Teilchenzahlen sind das Particle-In-Cell (PIC)- und das Direct Simulation Monte Carlo (DSMC)-Verfahren. Bei beiden Verfahren werden im Gegensatz zu Kontinuumsverfahren keine makroskopischen Größen wie Dichten oder Temperaturen im Strömungsgebiet betrachtet, sondern die Interaktion und Bewegung der einzelnen Simulationspartikel simuliert. Das PIC-Verfahren [6, 31] behandelt die kollisionsfreien elektromagnetischen Interaktionen zwischen geladenen Partikeln unter Berücksichtigung eventueller externer elektromagnetischer Felder, wohingegen das DSMC-Verfahren [5] binäre Kollisionen und chemische Reaktionen simuliert. Die vorliegende Arbeit ist Teil der kooperativen Entwicklung eines gekoppelten PIC-DSMC-Verfahrens zur Behandlung von Kollisionen und elektromagnetischen Feldern [50], wobei der Fokus dieser Arbeit auf dem PIC-Teil des gekoppelten Verfahrens liegt. Grundlage des gekoppelten Verfahrens bildeten zu Beginn der Arbeit zum einen das von Munz et al. [51] vorgestellte PIC-Verfahren auf Basis der Finite Volumen (FV) Methode, das unter Verwendung des FV-Lösers und der Gitterverwaltung eines am Institut für Aerodynamik und Gasdynamik (IAG) der Universität Stuttgart entwickelten 3D-FV-Kontinuumsverfahrens zunächst implementiert werden sollte, und zum anderen ein zweidimensionales, am Institut für Raumfahrtssysteme (IRS) der Universität Stuttgart entwickeltes, DSMC-Verfahren [44]. Ziel der kooperativen Entwicklung ist der Aufbau eines voll gekoppelten, dreidimensionalen PIC-DSMC-Verfahrens auf unstrukturierten Gittern zur Simulation verdünnter Plasmaströmungen mit komplexen Geometrien.

PIC-Verfahren existieren seit den Anfängen der Computer in den 1950er Jahren; ein detaillierter Überblick über Entwicklung bis hin zu den 1990er Jahren findet sich in [6], daher soll hier nur eine kurze Zusammenfassung gegeben werden: Die ersten PIC-Verfahren waren eindimensionale, elektrostatische Verfahren ohne Rechengitter. Durch Einführung eines Rechengitters und der Finite Differenzen Methode auf strukturierten Gittern in den 1960er Jahren [81] konnten größere, mehrdimensionale Simulationen durchgeführt werden, was zur weitläufigen Verbreitung des PIC-Verfahrens als Werkzeug für die Plasmaforschung führte [43, 48]. Die folgenden Schritte waren zum einen die Einführung von Partikeln als Ladungswolken zunächst durch gewichtete Interpolation und später durch Einführung einer Partikelformfunktion zur Ladungsverteilung eines Partikels auf das Rechengitter [31] und zum anderen das von Boris [10] vorgestellte, zweiter Ordnung genaue, „Bocksprung“-Zeitintegrationsverfahren mit zeitversetzten Orts- und Geschwindigkeitsinformationen der Partikel. Zeitgleich wurden statt der Poissongleichung zum ersten Mal die vollständigen Maxwellgleichungen für zwei- und dreidimensionale Rechnungen verwendet [10]. In den 1990ern wurden verstärkt PIC-Verfahren für unstrukturierte Gitter zur Simulation komplexer Geometrien entwickelt, wie das bereits erwähnte Verfahren basierend auf der FV-Methode [51], das allerdings nur zweiter Ordnung genau ist. Einen neuen Ansatz stellen nun die auch im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Discontinuous („unsteten“) Galerkin Methoden [13, 34, 42, 75] dar, die Rechnungen mit theoretisch

beliebig hoher räumlicher Ordnung auf unstrukturierten Gittern erlauben.

Die Zielsetzung dieser Arbeit ist die Entwicklung, Erweiterung und Untersuchung von Teilen eines PIC-Verfahrens zur Simulation kollisionsfreier Plasmaströmungen als Teil eines gekoppelten PIC-DSMC-Verfahrens. Zusammengefasst sind die Hauptziele dabei

- die Entwicklung und Verifizierung der Partikellokalisierung auf einem unstrukturierten dreidimensionalen Gitter unter Verwendung von Hexaederelementen mit nicht planaren Seitenflächen,
- die Entwicklung und Verifizierung der Partikelverfolgung und der Randbedingungen für Partikel,
- die Entwicklung, Verifizierung und Untersuchung von Depositionsmethoden zur Quelltermberechnung und die Identifizierung der Anwendungsmöglichkeiten,
- die Parallelisierung aller entwickelten Teile des Verfahrens für die effiziente Simulation auf Cluster-Höchstleistungsrechnern,
- die Verifizierung des gesamten PIC-Verfahrens und
- die Demonstration der Anwendbarkeit des Verfahrens.

In Kapitel 2 werden daher zuerst die theoretischen Grundlagen zur Plasmasimulation, insbesondere die wichtigsten Plasmaparameter und die grundlegenden physikalischen Zusammenhänge, vorgestellt. Darauf folgt in Kapitel 3 die Erläuterung der Modellierung und Implementierung des PIC-Verfahrens, wobei im ersten Teil der Fokus auf der Erweiterung und numerischen Behandlung der Maxwellgleichungen, dem Parallelisierungskonzept und der Zeitintegration liegt. Im zweiten Teil wird die Partikelbehandlung, bestehend aus Lokalisierung, Partikelverfolgung, Randbehandlung und Ladungsdeposition, beschrieben. In jedem Abschnitt wird zusätzlich auf die Parallelisierung und die dafür eingesetzten Methoden eingegangen. Kapitel 4 zeigt die Verifizierung und Untersuchung der einzelnen Teile des PIC-Verfahrens mit besonderem Fokus auf der Ladungsdeposition. Die Anwendung des Verfahrens auf die Simulation der Durchströmung des Lochgitters eines Ionentriebwerks folgt in Kapitel 4.6. Abschließend bietet Kapitel 5 eine Zusammenfassung der Arbeit und einen Ausblick auf zukünftig relevante Themen, die sich aus den Ergebnissen dieser Arbeit ergeben.

2. Theoretische Grundlagen

Um die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten und untersuchten Methoden zur numerischen Simulation von Plasmen beschreiben zu können, werden im Folgenden die theoretischen Grundlagen zur physikalisch-mathematischen Modellierung der Bewegung von geladenen Teilchen in elektromagnetischen Feldern und der Entstehung und Ausbreitung der Felder erläutert.

2.1. Plasma

Als Plasma wird in der Physik allgemein ein Gasgemisch bezeichnet, in dem freie elektrische Ladungsträger, also Elektronen und Ionen, enthalten sind, die durch elektrische und magnetische Felder beeinflusst werden können. Im Folgenden soll ein kurzer Überblick über relevante Kenngrößen von Plasmen gegeben werden, wobei zur Vereinfachung von einem aus Elektronen und einfach positiv geladenen Ionen bestehenden Plasmas ausgegangen wird.

Quasineutralität Ein quasineutrales Plasma liegt vor, wenn innerhalb des betrachteten Volumens etwa die gleiche Anzahl positiver und negativer Ladungen vorliegt, also wenn gilt

$$q_e N_e + q_I N_I = 0, \tag{2.1}$$

mit den entgegengesetzten Ladungen q_e und q_I eines Elektrons und eines Ions sowie der jeweiligen Anzahl N_e und N_I . Ein quasineutrales Plasma weist lokal dennoch Ladungstrennungen durch die Bewegung der Teilchen auf, die Frequenz der dadurch entstehenden Schwingung ist die weiter unten definierte Plasmafrequenz. In der Literatur wird Plasma mitunter dadurch definiert, dass Quasineutralität vorhanden sein muss [14]. Da das im Rahmen dieser Arbeit implementierte und untersuchte Verfahren Plasmen vom quasineutralen Zustand bis hin zu z.B. reinen Ionenstrahlen simulieren kann, wird im Folgenden der Einfachheit halber die oben beschriebene, allgemeinere Definition eines Plasmas angewandt, und alle Strömungen mit geladenen, wechselwirkenden Teilchen werden als „Plasmaströmung“ bezeichnet.

Plasmafrequenz Die Plasmafrequenz ω_p definiert sich aus einer Störung der Quasineutralität, also der Schwingungs-(Kreis-)frequenz der aus der Neutralität ausgelenkten, geladenen Teilchen und

2. Theoretische Grundlagen

berechnet sich gemäß [14] aus der Elektronendichte n_e bei gleicher Ionendichte n_I zu

$$\omega_p = \sqrt{\frac{q_e^2 n_e}{\epsilon_0} \left(\frac{q_I/q_e}{m_I} + \frac{1}{m_e} \right)}, \quad (2.2)$$

wobei die Frequenz der Ionen aufgrund der höheren Masse meist bedeutend geringer ist, so dass die Frequenz der Elektronen die entscheidende ist. Durch Vernachlässigung der Ionenfrequenz und unter Annahme von einfach geladenen Ionen vereinfacht sich Gleichung (2.2) zu

$$\omega_p = \sqrt{\frac{q_e^2 n_e}{\epsilon_0 m_e}} \approx 56,4146 \sqrt{n_e}. \quad (2.3)$$

Debyelänge Die Debye- oder Abschirmlänge λ_D gibt an, in welcher Entfernung das Potential einer Ladung auf das $1/e$ -fache abfällt und stellt damit eine Art Reichweite einer Ladung im Plasma dar. Für die Debyelänge in einem quasineutralen Plasma gilt nach [14]

$$\lambda_D^{-2} = \frac{n_e q_e^2}{\epsilon_0} \left(\frac{1}{k_B T_e} + \frac{1}{k_B T_I} \right). \quad (2.4)$$

Freie Weglänge Die freie Weglänge λ gibt die Strecke an, die ein Teilchen in einem Plasma im Mittel zurücklegt, bevor es auf ein anderes Teilchen trifft, d.h. bevor ein Stoß zu berücksichtigen ist. Die freie Weglänge berechnet sich aus dem Wirkungsquerschnitt σ der betrachteten Stöße aus [14]

$$\lambda = \frac{1}{\sigma n}. \quad (2.5)$$

Der Wirkungsquerschnitt ist dabei je nach betrachteter Stoßart, beteiligten Teilchensorten und anderen Parametern wie der Relativgeschwindigkeit zwischen den stoßenden Teilchen unterschiedlich. Generell kann bei einem Plasma zwischen Stößen mit Neutralteilchen und Stößen zwischen geladenen Teilchen unterschieden werden. Bei geladenen Teilchen ergibt sich die freie Weglänge unter Annahme von Quasineutralität und Verwendung des rutherfordischen Streuungsquerschnitts gemäß [14] zu

$$\lambda = \frac{\epsilon_0 k_B^2 T^2}{q_e^4 (q_I^2/q_e^2) \Lambda_c n}, \quad (2.6)$$

mit dem sogenannten Coulomb-Logarithmus $\Lambda_c = \ln(\lambda_D/l_L)$, der aus der Debyelänge und der Landaulänge

$$l_L = q_I/q_e \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 k_B T} \quad (2.7)$$

gebildet wird. Bei Stößen von Neutralteilchen sind die Wirkungsquerschnitte σ spezies- und modellabhängig. Sie werden in der Regel experimentell bestimmt und können der Literatur, z.B. [5], entnommen werden. Je komplexer die Modelle sind, desto mehr Abhängigkeiten werden berücksichtigt, desto weniger entsprechende Daten sind generell verfügbar. Ein einfaches und übliches Modell ist das Starrkugelmodell, bei dem lediglich eine Speziesabhängigkeit existiert [5].

2.2. Boltzmann-Gleichung

Bei einer Plasmaströmung können aufgrund der großen Anzahl von Teilchen nicht die Bewegungsgleichungen aller Teilchen aufgestellt und gelöst werden, die zur Beschreibung des Teilchenverhaltens notwendig wären. Daher wird eine Dichte- oder Geschwindigkeitsverteilungsfunktion $f(x, y, z, v_x, v_y, v_z)$ betrachtet, welche die Dichte einer Teilchenmenge, also z.B. eines Gases oder eines Plasmas, in einem sechsdimensionalen Phasenraum darstellt, dessen Koordinaten aus dem dreidimensionalen Orts- und Geschwindigkeitsraum gebildet werden. Sie gibt die Zahl der Teilchen $f \cdot dV$ an, die am Ort $\vec{x} = (x, y, z)^T$ in einem Volumenelement $dV = dx dy dz$ die Geschwindigkeit $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)^T$ besitzen. Die zeitliche Veränderung dieser Funktion wird für jede Teilchenspezies k im nichtrelativistischen Fall durch die Boltzmann-Gleichung

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \vec{v}_k \cdot \frac{\partial f_k}{\partial \vec{x}_k} + \frac{\vec{F}_k}{m_k} \cdot \frac{\partial f_k}{\partial \vec{v}_k} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stöße}} \quad (2.8)$$

beschrieben [20, 45]. Die Terme der Gleichung spiegeln dabei die drei auftretenden Effekte wider, die die zeitliche Änderung der Verteilungsfunktion beeinflussen. Auf der linken Seite der Gleichung sind dies die Bewegung der Teilchen in Folge ihrer Geschwindigkeit \vec{v}_k und ihre Beschleunigung aufgrund äußerer Kräfte \vec{F}_k . Für die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Plasmen sind als äußere Kräfte insbesondere die elektromagnetischen Lorentzkräfte von Interesse. Andere Kräfte, wie z.B. die Gravitationskraft, die bei astrophysikalischen Anwendungen der Boltzmann-Gleichung relevant ist, werden hier aufgrund ihres geringen Einflusses vernachlässigt. Auf der rechten Seite der Boltzmann-Gleichung steht der Stoßterm, der die direkten Wechselwirkungen der Teilchen berücksichtigt. Diese führen zu einer Änderung der Flugrichtung und -geschwindigkeit, die zu einer Zu- oder Abnahme der Teilchenzahlen im betrachteten Volumenelement führen. Die Form des Stoßterms ist je nach Annahme über die Art der Stöße unterschiedlich und kann verschiedene sogenannte Stoßintegrale beinhalten [14]. Das Boltzmannsche Stoßintegral behandelt beispielsweise Binärstöße kurzer Reichweite während die Fokker-Planck-Gleichung Coulombstöße zwischen mehreren geladenen Teilchen berücksichtigt. Auch chemische Reaktionen, d.h. die Umwandlung eines Teilchens oder die Entstehung bzw. der Abbau von Teilchen, erzeugen eine Änderung der Verteilungsfunktion und sind Bestandteil des Stoßterms der Boltzmann-Gleichung.

Die Boltzmann-Gleichung ist eine nichtlineare, partielle Integrodifferentialgleichung, d.h. die gesuchte Verteilungsfunktion f tritt sowohl abgeleitet als auch als Integrand auf. Eine Lösung der Gleichung ist daher nicht direkt möglich. Numerisch wird die Boltzmann-Gleichung mittels Partikelverfahren durch eine getrennte, aber gekoppelte, Betrachtung der Teilchenbewegung zum einen durch äußere Kräfte und zum anderen durch Stöße behandelt.

Bei sehr geringen Dichten kann der Stoßterm der Boltzmann-Gleichung aufgrund der niedrigen Anzahl an auftretenden Stößen vernachlässigt werden. Dies führt zur Vlasov-Gleichung für stoßfreie Plasmen,

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \vec{v}_k \cdot \frac{\partial f_k}{\partial \vec{x}_k} + \frac{\vec{F}_k}{m_k} \cdot \frac{\partial f_k}{\partial \vec{v}_k} = 0, \quad (2.9)$$

die nur die langreichweitigen Wechselwirkungen geladener Teilchen aufgrund der elektromagnetischen Felder berücksichtigt, welche die Kraft \vec{F}_k erzeugt [14].

2.3. Lorentzkraft

Für die numerische Simulation von Plasmen ist in der Boltzmann-Gleichung (2.8) oder der Vlasov-Gleichung (2.9) in den meisten Anwendungsfällen nur die durch elektromagnetische Felder entstehende Lorentzkraft von Bedeutung. Die allgemeine Lorentzkraft

$$\vec{F} = Q (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (2.10)$$

beschreibt die Kraft, die eine Punktladung Q erfährt, die sich mit der Geschwindigkeit \vec{v} durch ein elektrisches Feld der Stärke \vec{E} und ein magnetisches Feld der Flussdichte \vec{B} bewegt [23]. Es ist sofort ersichtlich, dass die Wirkung des elektrischen Feldes dabei unabhängig von der Geschwindigkeit der Ladung ist, so dass die Ladung immer eine Beschleunigung in Richtung des elektrischen Feldes erfährt. Die Wirkung des magnetischen Feldes hingegen liegt aufgrund des Kreuzprodukts $\vec{v} \times \vec{B}$ immer senkrecht zur Geschwindigkeit der Ladung. Dadurch kann ein Magnetfeld keine Änderung des Geschwindigkeitsbetrags der Ladung, sondern lediglich der Flugrichtung bewirken.

Der Zusammenhang zwischen elektrischer Flussdichte \vec{D} und elektrischer Feldstärke ist dabei

$$\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}, \quad (2.11)$$

mit der elektrischen Feldkonstante ϵ_0 und der Permittivitätszahl ϵ_r , die vom Material abhängt, in dem sich das elektrische Feld ausbreitet. Im Vakuum und damit bei den hier betrachteten Anwendungen gilt $\epsilon_r = 1$. Analog zur elektrischen Flussdichte gilt für den Zusammenhang zwischen magnetischer

Flussdichte \vec{B} und magnetischer Feldstärke \vec{H}

$$\vec{B} = \mu_0 \mu_r \vec{H}, \quad (2.12)$$

mit der magnetischen Feldkonstante μ_0 und der materialabhängigen Permeabilitätszahl μ_r , die ebenfalls im Vakuum 1 wird. Der Zusammenhang zwischen μ_0 und ϵ_0 ist dabei durch die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum c_0 mit $\epsilon_0 \mu_0 = c_0^{-2}$ gegeben. Die traditionelle Bezeichnung für die magnetische Flussdichte und Feldstärke ergibt sich also aus der Analogie der Gleichungen (2.11) und (2.12). Für die Lorentzkraft und die im nächsten Abschnitt diskutierten Maxwellgleichungen ist jedoch die Größe \vec{B} das passendere Analogon zu \vec{E} , weswegen in der modernen Literatur (z.B. [17, 76]) \vec{B} allgemein als Magnetfeld oder magnetische Feldstärke und \vec{H} als magnetische Erregung bezeichnet wird.

2.4. Maxwellgleichungen

Die Maxwellgleichungen beschreiben die Entwicklung elektrischer und magnetischer Felder in Zeit und Raum in Abhängigkeit der vorhandenen Ladungs- und Stromdichten ρ und \vec{j} sowie der Felder selbst. Eine Vielzahl möglicher Schreibweisen der Gleichungen existiert, üblicherweise werden vier Differentialgleichungen verwendet, die zusammen das Maxwellgleichungssystem bilden. Im Vakuum sind dies [33]

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - c_0^2 \nabla \times \vec{B} = - \frac{\vec{j}}{\epsilon_0} \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \nabla \times \vec{E} = 0 \quad (2.14)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.15)$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}. \quad (2.16)$$

Die ersten beiden Gleichungen sind hyperbolische Differentialgleichungen und beschreiben, wie das elektrische und magnetische Feld gekoppelt sind und dass zeitliche Änderungen eines der Felder immer die Entstehung des anderen Feldes bewirken. Gleichung (2.13) ist die Erweiterung des ampèreschen Durchflutungsgesetzes mit dem Verschiebungsstrom. Das ampèresche Durchflutungsgesetz besagt, dass magnetische Felder durch Ströme verursacht werden. Maxwell korrigierte dieses Gesetz durch Hinzufügen des Verschiebungsstroms, der durch eine zeitliche Änderung des elektrischen Feldes entsteht. Zusammengefasst erzeugen also elektrische Ströme und zeitliche Änderungen der elektrischen Felder magnetische Wirbelfelder. Gleichung (2.14) ist das faradaysche Induktionsgesetz,

nach dem zeitliche Änderungen des Magnetfeldes ein elektrisches Wirbelfeld induzieren. Nach Gleichung (2.15), dem gaußschen Gesetz für Magnetfelder, müssen Magnetfelder quellenfrei sein, und das gaußsche Gesetz der Elektrostatik (2.16) sagt aus, dass Ladungen Quellen bzw. Senken für das elektrische Feld darstellen.

Die Ladungs- und Stromdichte ergeben sich dabei an einem Punkt \vec{x} zum Zeitpunkt t aus der Teilchendichte, also der Integration der Geschwindigkeitsverteilungsfunktion f über den gesamten Phasenraum, sowie der Ladung und Geschwindigkeit der Teilchen Q_k und \vec{v} gemäß

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_k Q_k \int_{\vec{v}} f_k(\vec{x}, \vec{v}, t) d\vec{v} \quad (2.17)$$

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \sum_k Q_k \int_{\vec{v}} \vec{v} f_k(\vec{x}, \vec{v}, t) d\vec{v}. \quad (2.18)$$

Das gekoppelte Gleichungssystem aus den Maxwellgleichungen mit Quellen, (2.13)-(2.16) und (2.17)-(2.18), der Lorentzkraft (2.10) und der Boltzmann-Gleichung (2.8) für stoßbehaftete bzw. der Vlasov-Gleichung (2.9) für stoßfreie Plasmen beschreibt das selbstkonsistente Verhalten von Plasmateilchen aufgrund ihrer Wechselwirkungen untereinander sowie aufgrund externer elektrischer und magnetischer Felder.

3. Modellierung und numerische Methoden

Im Folgenden werden die eingesetzten Modelle und numerischen Methoden für die Simulation einer kollisionsfreien, verdünnten Plasmaströmung erläutert. Nach einer kurzen Einführung in das Particle-In-Cell-Verfahren in Kapitel 3.1 werden in den anschließenden Unterkapiteln die einzelnen Komponenten des Verfahrens und die jeweils angewandten und entwickelten Methoden vorgestellt, wobei der Fokus im ersten Teil auf der Berechnung der elektromagnetischen Felder und im zweiten Teil auf der Partikelbehandlung liegt.

3.1. Particle-In-Cell Verfahren

Für das in Kapitel 2.4 beschriebene Vlasov-Maxwell-System existiert keine explizite Lösungsdarstellung. Zur numerischen Lösung des Systems wird das sogenannte Particle-In-Cell („Partikel im Element“, PIC)-Verfahren verwendet. Der Name des Verfahrens rührt daher, dass es eine Kopplung lagrangescher (Partikel) und eulerscher (Rechengitter mit Elementen) Betrachtungsweisen darstellt [6, 31]. Die Verteilungsfunktion f_k der Vlasovgleichung (2.9) wird durch Simulationspartikel in lagrannger Betrachtungsweise diskretisiert, d.h. die Bewegung einzelner Partikel wird hinsichtlich ihrer Flugbahn, Geschwindigkeit und Beschleunigung betrachtet. Die Partikel bewegen sich dabei frei im Raum, die Verteilungsfunktion wird also implizit im sechsdimensionalen Phasenraum durch die einzelnen Partikel und ihre Position und Geschwindigkeit dargestellt. Die Bewegungsgleichung eines einzelnen Partikels ergibt sich dabei aus den klassischen Bahn- und Bewegungsgleichungen

$$\frac{d\vec{x}(t)}{dt} = \vec{v}(t) \quad \text{und} \tag{3.1}$$

$$\frac{d\vec{p}(t)}{dt} = \vec{F}(t), \tag{3.2}$$

welche die zeitliche Änderung des Impulses \vec{p} und damit der Geschwindigkeit \vec{v} durch die Kraft \vec{F} und die daraus resultierende Änderung der Position \vec{x} beschreiben. Für schnelle Partikel muss hierbei der relativistische Impuls $\vec{p} = m_0\gamma\vec{v}$ mit der sogenannten Ruhemasse m_0 und dem Lorentzfaktor

3. Modellierung und numerische Methoden

$\gamma = (1 - v^2/c_0^2)^{-1/2}$ eingesetzt werden [19]. Zusammen mit der Lorentzkraft (2.10) ergeben sich die Bewegungsgleichungen

$$\frac{dp(\vec{t})}{dt} = Q \left(\vec{E}(t) + \vec{v}(t) \times \vec{B}(t) \right) \quad \text{und} \quad \frac{dx(\vec{t})}{dt} = \vec{v}(t). \quad (3.3)$$

Die Anzahl der physikalischen Teilchen überschreitet dabei die Zahl der simulierbaren Partikel in den meisten betrachteten Fällen weit, daher stellen die Simulationspartikel immer eine gewisse Anzahl physikalischer Teilchen dar. Da die Anzahl der Teilchen pro Simulationspartikel, der sogenannte Makropartikelfaktor (MPF), sowohl in die Ladung Q als auch in die Masse m der Bewegungsgleichung eingehen, spielt diese für die Bewegung des Partikels in einem gegebenen elektromagnetischen Feld keine Rolle, sehr wohl aber für die Erzeugung der Felder, in welche die Masse nicht einght.

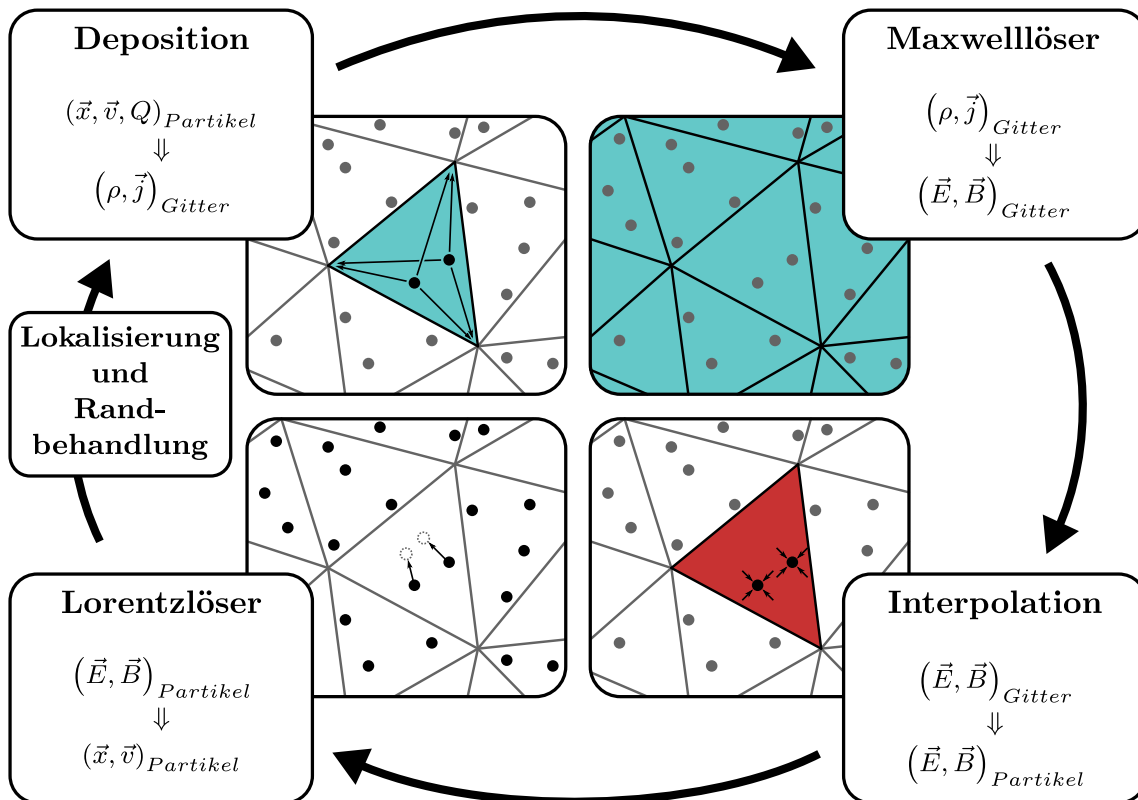


Abbildung 3.1.: Schematischer Ablauf des PIC-Verfahrens. **Deposition:** Bestimmung der Quellterme ρ und \vec{j} für den Feldlöser aus den Partikelpositionen \vec{x} , -geschwindigkeiten \vec{v} und -ladungen Q . **Maxwelllöser:** Berechnung der elektrischen und magnetischen Felder \vec{E} und \vec{B} durch Lösung der Maxwellgleichungen auf dem Rechengitter. **Interpolation:** Bestimmung der elektrischen und magnetischen Felder an den Partikelpositionen. **Lorentzlöser:** Berechnung der auf die Partikel wirkenden Lorentzkräfte und der resultierenden Bewegung der Partikel für einen Zeitschritt Δt . **Lokalisierung und Randbehandlung:** Lokalisierung der Partikel relativ zum Gitter und Beachtung eventueller Partikelrandbedingungen.

Die zur Bestimmung der auf die Partikel wirkenden Lorentzkraft benötigten elektrischen und magnetischen Felder werden aus den Maxwellgleichungen (2.13 - 2.16) mit den Partikeln als Quellen berechnet. Die Maxwellgleichungen werden dabei in eulerscher Betrachtungsweise räumlich diskretisiert, d.h. die Felder werden auf einem Gitter gelöst. Die Verteilungsfunktion f_k wird nicht direkt aus den Partikelpositionen im Phasenraum bestimmt, sondern ist nur indirekt durch die Ladungen der Partikel und die daraus resultierenden lokalen Ladungs- und Stromdichten gegeben, die direkt in die Maxwellgleichungen eingesetzt werden. Mit einer zeitlichen Diskretisierung lassen sich so die Zustände der Partikel und der Felder sowie deren Änderung über die Zeit berechnen.

Abbildung 3.1 zeigt schematisch den Ablauf des PIC-Verfahrens: Aus den Positionen und Geschwindigkeiten der Partikel werden die Quellterme für die Maxwellgleichung bestimmt. Dies geschieht durch eine Interpolation der Ladungs- und Stromdichten aus den frei verteilten Partikeln auf die diskreten Elemente des Rechengitters. Die Lösung der Maxwellgleichungen auf dem Gitter ergibt die elektrischen und magnetischen Felder. Nach Berechnung der Felder werden diese durch eine Interpolation von den diskreten Gitterelementen auf die Partikelpositionen abgebildet. Zur sprachlichen Unterscheidung zwischen der Interpolation der Ladungen von den Partikeln auf die Elemente und der Interpolation der Felder von den Elementen auf die Partikel wird erstere auch als *Deposition* bezeichnet. Die Partikel werden anschließend aufgrund der Felder und der resultierenden Lorentzkraft bewegt. Dabei werden eventuell vorhandene Randbedingungen oder physikalische Hindernisse für die Partikel berücksichtigt. Nach der Bewegung müssen die Partikel bezüglich des Rechengitters lokalisiert werden, damit im nächsten Zyklus wieder mittels *Deposition* die Quellen für die Feldlösung bestimmt werden können.

Soll anstelle der Vlasovgleichung die Boltzmann-Gleichung für die Behandlung stoßbehafteter Plasmen verwendet werden, müssen die in der Vlasovgleichung vernachlässigten Stoßterme hinzugefügt werden. Dies wird durch die Kopplung des PIC-Verfahrens mit dem sogenannten Direct Simulation Monte Carlo (DSMC)-Verfahren [5] erreicht, welches Stöße und chemische Reaktionen inklusive Ionisation und Rekombination durch statistische Methoden behandelt. Durch die Kopplung wird das PIC-Verfahren entsprechend Abbildung 3.2 durch ein DSMC-Modul erweitert, in dem die Stöße ausgeführt und die Geschwindigkeitsänderungen der Partikel durch die Stöße berechnet werden. Da die Entwicklung des DSMC-Moduls nicht Bestandteil dieser Arbeit war, können Details zum implementierten DSMC-Modul den Arbeiten von D. Petkow [64], M. Pfeiffer und A. Mirza [66], sowie [50] entnommen werden.

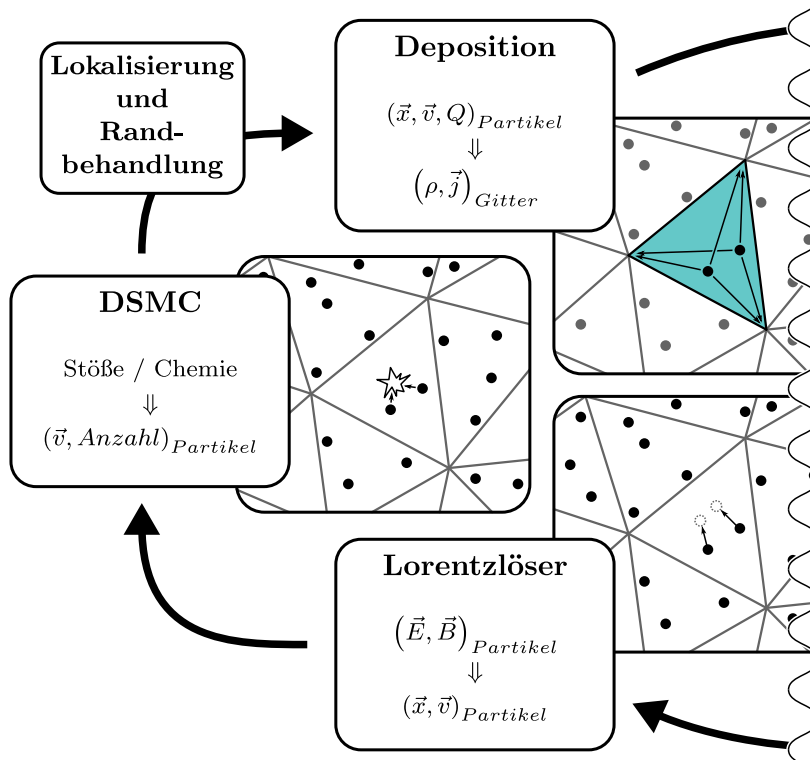


Abbildung 3.2.: Schematische Darstellung der Erweiterung des PIC-Verfahrens mit Stoßtermen durch Kopplung mit einem DSMC-Verfahren.

3.2. Berechnung der elektromagnetischen Felder

Da die Berechnung der elektromagnetischen Felder auf einem Rechengitter erfolgt, bestimmt die Wahl des dafür verwendeten Verfahrens auch die Wahl des Rechengitters, des Parallelisierungskonzepts und damit die zugrundeliegende Struktur des implementierten Gesamtverfahrens, im Folgenden auch „Programm“ oder „Code“ genannt. Aus diesem Grund soll zunächst auf die Berechnung der Felder und erst in den folgenden Unterkapiteln auf die übergeordnete Struktur des Programms eingegangen werden.

3.2.1. Divergenzkorrektur

Der allgemeingültige Ladungserhaltungssatz sagt aus, dass keine Ladung entstehen oder verschwinden kann, ohne dass gleichzeitig eine entgegengesetzte Ladung entsteht oder verschwindet. Eine Veränderung der Ladung an einem Ort kann demzufolge nur durch Zu- oder Abfluß von Ladungen,

also durch einen Strom entstehen. Es gilt daher zu jedem Zeitpunkt t die Kontinuitätsgleichung [23]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0. \quad (3.4)$$

Die Bildung der Divergenz des erweiterten Durchflutungsgesetzes (2.13) ergibt

$$\nabla \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - c_0^2 \nabla \cdot (\nabla \times \vec{B}) = -\nabla \cdot \frac{\vec{j}}{\epsilon_0}. \quad (3.5)$$

Da Wirbelfelder quellenfrei sind, also die Divergenz einer Rotation $\nabla \cdot (\nabla \times \vec{B})$ immer Null wird [46], verschwindet der zweite Term:

$$\nabla \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = -\nabla \cdot \frac{\vec{j}}{\epsilon_0}. \quad (3.6)$$

Das Einsetzen der Ladungserhaltung (3.4) führt zu

$$\nabla \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{\partial \rho}{\partial t}. \quad (3.7)$$

Aufgrund der Kommutativität von Differential- und Integraloperatoren kann der Operator $\partial/\partial t$ aus der Divergenz herausgezogen werden und eine anschließende Integration über t führt direkt zum gaußschen Gesetz der Elektrostatik (2.16). Genauso lässt sich die Divergenz des faradayschen Induktionsgesetzes (2.14)

$$\nabla \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \nabla \cdot (\nabla \times \vec{E}) = \nabla \cdot (0) \quad (3.8)$$

bilden und mit $\nabla \cdot (\nabla \times \vec{E}) = 0$ und Integration über die Zeit in das gaußsche Gesetz für Magnetfelder (2.15) überführen.

Die Lösung der Gleichungen (2.13) und (2.14) ergibt also bereits eine eindeutige Lösung der Maxwellgleichungen und erfüllt automatisch die beiden gaußschen Gesetze (2.15) und (2.16), unter der Voraussetzung, dass die Ladungserhaltung zu jedem Zeitpunkt gilt und die gaußschen Gesetze initial erfüllt sind.

Praktisch sind durch die numerische Diskretisierung und durch Rechenungenauigkeiten sowohl die Ladungserhaltung als auch die Quellenfreiheit der Wirbelfelder nicht immer exakt erfüllt. Wird beispielsweise ein Fehler δ in der Ladungserhaltung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = \delta \quad (3.9)$$

3. Modellierung und numerische Methoden

auf die Gleichungen (3.5) und (3.6) angewendet, führt er zu einem mit der Zeit immer weiter anwachsenden Fehler der Divergenz des elektrischen Feldes

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} - \frac{\delta}{\epsilon_0} t. \quad (3.10)$$

Aus diesem Grund wird eine sogenannte Divergenzkorrektur eingeführt, die die Erfüllung der beiden gaußschen Gesetze sicherstellt. Eine Methode ist dabei nach [6, 10] die Korrektur durch Einführung eines Korrekturterms $\nabla \delta \phi$, so dass gilt

$$\vec{E} = \vec{E}' - \nabla \delta \phi, \quad (3.11)$$

mit dem unkorrigierten Feld \vec{E}' und dem tatsächlichen Feld \vec{E} . Einsetzen dieser Gleichung in (2.16) und auflösen nach dem gesuchten Korrekturterm ergibt die Poissongleichung

$$\nabla^2 \delta \phi = \nabla \cdot \vec{E}' - \rho, \quad (3.12)$$

die jeden Zeitschritt gelöst werden muss. Eine neuere und die hier verwendete Methode ist die Kopplung der elliptischen gaußschen Gesetze an (2.13) und (2.14) durch Verwendung eines sogenannten verallgemeinerten Lagrange-Multiplikator Ansatzes [51, 52]. Die Kopplung erfolgt hier durch Einführung zusätzlicher Variablen Φ und Ψ sowie Parameter χ und ν . Durch geeignete Wahl dieser Variablen und Parameter können die Fehlerterme der Divergenz ebenfalls als hyperbolische Wellengleichungen dargestellt werden, so dass ein resultierendes rein hyperbolisches („purely hyperbolic maxwell“, PHM) Maxwellgleichungssystem

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - c_0^2 \nabla \times \vec{B} + \chi c_0^2 \nabla \Phi = - \frac{\vec{j}}{\epsilon_0} \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \nabla \times \vec{E} + \nu \nabla \Psi = 0 \quad (3.14)$$

$$\frac{1}{\nu c_0^2} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (3.15)$$

$$\frac{1}{\chi} \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (3.16)$$

entsteht, das sich explizit lösen und damit gut parallelisieren lässt. Die Parameter χ und ν legen dabei die Geschwindigkeiten χc_0 und νc_0 fest, mit denen der jeweilige Divergenzfehler aus dem Rechengebiet transportiert wird. Der Fehler muss dabei mindestens mit der Geschwindigkeit der Feldausbreitung transportiert werden. Es ist zwar möglich, aber nicht sinnvoll, den Divergenzfehler des Magnetfeldes mit einer anderen Geschwindigkeit abzutransportieren als den Fehler des elektrischen

Feldes, so dass für die Wahl der Parameter gilt

$$\chi = \nu \geq 1. \tag{3.17}$$

Die genaue Wahl von χ ist dabei ein Erfahrungswert und variiert je nach Anwendungsfall. Während bei hochfrequenten Feldfluktuationen $\chi > 10$ vonnöten sein kann, um die entsprechenden Effekte auflösen zu können, kann bei langsamen Feldänderungen, zum Beispiel durch eher langsame Partikel bei einer Triebwerksausströmung, oder stationären Fällen auch ein Wert von $\chi = 1$ für stabile und korrekte Lösungen ausreichend sein.

Die Vorteile der Divergenzkorrektur mittels Verwendung des PHM Systems liegen zum einen in der Reduktion der Komplexität, da nicht zusätzlich zu den Maxwellgleichungen noch die Poissongleichung gelöst werden muss, und zum anderen in der besseren Parallelisierbarkeit, da das PHM System im Gegensatz zu den Poissongleichungen explizit gelöst werden kann. Außerdem kann das PHM System komplett mittels der expliziten unstetigen Galerkin („Discontinuous Galerkin“, DG) - Methode behandelt werden, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet und im nächsten Abschnitt näher erläutert wird. Nachteilig ist der direkte Einfluss von χ auf die Zeitschrittweite, so dass bei hohen χ mehr Zeitschritte zur Simulation einer gegebenen Zeitspanne berechnet werden müssen. Eine detailliertere Diskussion über die Vor- und Nachteile der beiden Methoden findet sich in [34], und für eine detaillierte Untersuchung der hier verwendeten Divergenzkorrektur mittels PHM sei auf [73] verwiesen.

3.2.2. Das Discontinuous Galerkin Verfahren

Zur Lösung partieller Differentialgleichungen im Allgemeinen und der Feldgleichungen für PIC im Besonderen stehen eine Vielzahl verschiedener Methoden zur räumlichen Diskretisierung zur Verfügung, die alle jeweils verschiedene Vor- und Nachteile bieten. Eine gute Übersicht hierzu findet sich z.B. in [27], im Folgenden sollen die gebräuchlichsten Methoden daher nur in aller Kürze erläutert werden, bevor näher auf das verwendete Discontinuous Galerkin Verfahren eingegangen wird.

Die Finite Differenzen Methode (FDM) basiert auf der Approximation der Ableitungen der zu berechnenden Größen durch Differenzenquotienten. Die Verwendung der FDM zur Lösung der Maxwellgleichungen wurde 1966 von K. Yee [81] für zwei Dimensionen vorgestellt und ist bis heute aufgrund der hohen Geschwindigkeit und des relativ einfachen Aufbaus ein für PIC oft eingesetztes Verfahren. Ein Nachteil der FDM ist die Beschränkung auf strukturierte Gitter, was die Verwendung komplexer Geometrien oder Strömungsbilder erschwert und damit die Anwendung stark limitiert. Ein weiterer Nachteil tritt bei der Parallelisierung bei Erweiterung auf hohe Ordnungen auf: Alle Elemente,

die nach der Diskretisierung im zu lösenden Gleichungssystem direkt miteinander verknüpft sind, bilden einen sogenannten „Stencil“ bzw. eine „Schablone“. Diese Schablone erstreckt sich bei niedriger Ordnung nur auf die direkt angrenzenden Nachbarelemente. Je höher die Ordnung wird, desto größer wird die Schablone, es werden also auch weiter entfernte Elemente direkt verknüpft, was die Parallelisierung erschwert, da sich die Schablone bei einer Gebietszerlegung über mehrere Teilgebiete erstrecken kann, was einen erhöhten Kommunikationsaufwand zur Folge hat.

Die Finite Elemente Methode (FEM) verwendet zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen sogenannte Ansatzfunktionen, die lokal innerhalb der einzelnen Elemente definiert werden und beliebiger Ordnung sein können. Die Kombination der Ansatzfunktionen aller Elemente führt zu einem Gleichungssystem über das gesamte Rechengebiet. Ein Vorteil der FEM ist die Möglichkeit, unstrukturierte Gitter zu verwenden. Der Einsatz der FEM im Bereich der PIC-Verfahren findet sich beispielsweise in [13].

Die Finite Volumen Methode (FVM) dient der Lösung von Erhaltungsgleichungen und eignet sich damit sehr gut für die Lösung des hyperbolischen PHM Systems. Da die FVM keine strukturierten Gitter benötigt, sind auch komplexe Geometrien simulierbar. Die FVM erlaubt außerdem Unstetigkeiten an Elementgrenzen, welche sogenannte Riemannprobleme darstellen, die beispielsweise mit einem Flussvektorteilungsverfahren nach [51] gelöst werden können. Wie bei der FDM gilt aber auch hier, dass die Schablone mit steigender Ordnung größer wird und damit die Parallelisierung erschwert wird. Zusätzlich wird das Verfahren bei einer Vergrößerung der Schablone aufgrund der unstrukturierten Gitter generell erheblich komplexer. Die erste Version des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Programmcodes [4, 69, 70] verwendete einen nach [51] von M. Quandt [68] implementierten FV-Löser zweiter Ordnung.

Das Discontinuous („unstete“) Galerkin Verfahren (DG) vereint die Vorteile der schwachen Kopplung zwischen Nachbarelementen durch Flüsse der FVM und die beliebig hohe Ordnung der FEM. Im Verlauf dieser Arbeit wurden drei verschiedene Maxwelllöser eingesetzt. Ausgangsbasis war, wie oben erwähnt, ein Löser basierend auf der FVM. Zur Erhöhung der Ordnung wurde ein DG-FEM Verfahren [21] und zuletzt zur Ausnutzung des Geschwindigkeitszuwachses und Speicherbedarfsverringerung ein DG-SEM Verfahren („DG-Spektrale Element Methode“) verwendet [30]. Die drei Verfahren stellen dabei unterschiedliche Programmpakete dar, in die jeweils das PIC-Verfahren implementiert wurde. Da sämtliche im Rahmen dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse und Untersuchungen das DG-(SEM) Verfahren verwenden, soll dieses hier detaillierter vorgestellt werden.

Die rein hyperbolischen Maxwellgleichungen mit Divergenzkorrektur (3.13 bis 3.16) bilden ein lineares Differentialgleichungssystem mit den Unbekannten \vec{E} , \vec{B} , Φ und Ψ sowie deren zeitlichen und räumlichen Ableitungen. Durch Definition eines Zustandsvektors $\vec{u} = (E_x, E_y, E_z, B_x, B_y, B_z, \Phi, \Psi)^T$

lassen sich die Gleichungen in zusammengefasster Form durch

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \sum_{d=1}^3 \mathbf{K}_d \frac{\partial \vec{u}}{\partial x_d} = \vec{g} \quad (3.18)$$

mit dem Quelltermvektor $\vec{g} = \epsilon_0^{-1}(-j_x, -j_y, -j_z, 0, 0, 0, \rho, 0)^T$ ausdrücken. \mathbf{K}_d sind Matrizen der Größe 8×8 , die die Vorfaktoren der durch die Divergenzen und Rotationen entstehenden Ortsableitungen der Zustände in den drei Dimensionen $d = 1, 2, 3$, also den physikalischen Fluss, darstellen [53].

Die Grundidee des DG-Verfahrens ist nun, die gesuchte Lösung $\vec{u}(\vec{x}, t)$ des Gleichungssystems für jedes Element k im Rechengebiet durch eine stetige Funktion $\vec{u}_k(\vec{x}, t)$, hier ein Polynom, anzunähern. Das Polynom wird dabei aus einer Linearkombination von Basisfunktionen zusammengesetzt, wobei hier zwischen dem nodalen und dem modalen Ansatz unterschieden wird. Beim modalen Ansatz wird die Näherungslösung durch eine Linearkombination von modalen Basisfunktionen $\psi_n(\vec{x})$ gemäß

$$\vec{u}_k(\vec{x}, t) = \sum_{n=1}^{N_m} \hat{u}_{k,n}(t) \psi_n(\vec{x}), \quad (3.19)$$

mit den Faktoren der Linearkombination $\hat{u}_{k,n}$, beschrieben. N_m ist hierbei die Anzahl der Freiheitsgrade pro Zustand und Element k und berechnet sich aus dem Polynomgrad p unabhängig von der Art der verwendeten Gitterelemente durch [21]

$$N_m = 1/6(p+1)(p+2)(p+3). \quad (3.20)$$

Beim nodalen Ansatz hingegen werden in jedes Element eine Anzahl Stützstellen \vec{x}_n^k , sogenannte Interpolationspunkte, gelegt und das Polynom durch eine Kombination von Basisfunktionen, hier Lagrangepolynome $l_n^k(\vec{x})$, gebildet. Für die Stützstellen von Lagrangepolynomen gilt

$$l_i(\vec{x}_j) = \begin{cases} 0 & \text{für } i \neq j \\ 1 & \text{für } i = j \end{cases}, \quad (3.21)$$

d.h. die Koeffizienten der Linearkombination entsprechen an den Stützstellen direkt den Lösungswerten. Mit den Koeffizienten $\check{u}_k(\vec{x}_n, t)$ gilt

$$\vec{u}_k(\vec{x}, t) = \sum_{n=1}^{N_n} \check{u}_k(\vec{x}_n, t) l_{k,n}(\vec{x}), \quad (3.22)$$

wobei N_n die Freiheitsgrade im nodalen Fall sind, die der Anzahl der Interpolationspunkte entsprechen. Die Anzahl der Interpolationspunkte hängt dabei im Gegensatz zum modalen Ansatz nicht nur

3. Modellierung und numerische Methoden

von der Ordnung, sondern auch von der Art der verwendeten Gitterelemente (Tetraeder, Pyramiden, Hexaeder, ...) ab. Eine Auflistung der Anzahl der verwendeten Interpolationspunkte und damit der Freiheitsgrade für verschiedene Gitterelemente findet sich in [72].

Die Anwendung des Polynomansatzes auf Gleichung (3.18) ergibt für jedes Element ein Residuum

$$\vec{R}_k = \frac{\partial \vec{u}_k}{\partial t} + \sum_{d=1}^3 \mathbf{K}_d \frac{\partial \vec{u}_k}{\partial x_d} - \vec{g}_k. \quad (3.23)$$

Die Grundidee des DG-Verfahrens zur Lösung der Gleichung (3.18) ist die Variationsformulierung. Es kann gezeigt werden, dass die Variationsformulierung identisch zu einem mathematischen Projektionsansatz ist, im Speziellen der \mathbb{L}_2 -Projektion des Residuums auf eine Testfunktion. Dazu werden beliebig oft differenzierbare Testfunktionen $\varphi_n(\vec{x})$ mit $n = 1, N_p$ eingeführt, wobei N_p die Anzahl der Freiheitsgrade ist. Beim Galerkinansatz sind dabei die Testfunktionen gleich den Basisfunktionen. Der Projektionsansatz erfordert nun, dass das Residuum orthogonal zu den Testfunktionen ist, es soll also gelten

$$\int_k \vec{R}_k(\vec{x}, t) \varphi_n(\vec{x}) d\vec{x} = 0, \quad 1 \leq n \leq N_p. \quad (3.24)$$

Einsetzen von Gleichung (3.23) führt auf ein Gleichungssystem mit N_p Gleichungen und Unbekannten

$$\int_k \frac{\partial \vec{u}_k}{\partial t} \varphi_n d\vec{x} + \int_k \sum_{d=1}^3 \mathbf{K}_d \frac{\partial \vec{u}_k}{\partial x_d} \varphi_n d\vec{x} = \int_k \vec{g}_k \varphi_n d\vec{x} \quad (3.25)$$

für $n = 1, N_p$ für jedes Element. Da jedes Element einzeln behandelt wird und keine Einschränkungen hinsichtlich Randbedingungen an den Elementgrenzen gemacht wurden, weisen die Lösungspolynome an den Elementgrenzen im Allgemeinen Sprünge von einem Element zum nächsten auf. Durch partielle Integration kann die räumliche Ableitung des Lösungsvektors auf die Testfunktionen übertragen werden und es ergibt sich unter Anwendung des Gaußschen Integralsatzes $\int_V \nabla \partial f / \partial \vec{x} d\vec{x} = \int_{\partial V} f dS$ die sogenannte schwache Formulierung

$$\int_k \frac{\partial \vec{u}_k}{\partial t} \varphi_n d\vec{x} + \int_{\partial k} \mathbf{F}(\vec{u}_L, \vec{u}_R, \vec{n}) \varphi_n dS - \int_k \sum_{d=1}^3 \mathbf{K}_d \vec{u}_k \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_d} d\vec{x} = \int_k \vec{g}_k \varphi_n d\vec{x}. \quad (3.26)$$

Durch die schwache Formulierung verschwindet die Ableitung über den Raum $\partial \vec{u}_k / \partial x_d$, wodurch nicht mehr gefordert wird, dass \vec{u}_k differenzierbar ist. Aufgrund der Sprünge an den Elementgrenzen und den daraus folgenden dortigen doppelten Zustandswerten kann der physikalische Fluss nicht mehr ausgewertet werden, weshalb der numerische Fluss $\mathbf{F}(\vec{u}_L, \vec{u}_R, \vec{n})$ über die Elementgrenzen eingeführt wird. Der Fluss hängt dabei von den beiden Zuständen „links“ (\vec{u}_L) und „rechts“ (\vec{u}_R) an

der Seitenfläche zwischen jeweils zwei aneinander angrenzenden Elementen ab. Die Berechnung des Flusses erfolgt durch die Lösung des Riemannproblems [77], hier unter Verwendung des Flussvektorteilungsverfahrens, das in [51] für das FV-Verfahren vorgestellt und in [72] an das DG-Verfahren, d.h. an die Berechnung an den Interpolationspunkten, angepasst wurde. Für lineare Gleichungen, wie die hier verwendeten Maxwellgleichungen, ist das Flussvektorteilungsverfahren exakt. Die Integrale in (3.26) werden durch Gaußquadratur ausgewertet, wofür Integrationspunkte als Stützstellen verwendet werden.

Das DG-FEM Verfahren [27] ist eine Mischung aus modalem DG-Ansatz und nodaler Integration. Vorteile des modalen Ansatzes sind hier insbesondere die Verwendung beliebiger Elementformen, was die Gittererstellung erheblich vereinfacht, sowie die geringere Anzahl an Freiheitsgraden. Das neuere DG-SEM Verfahren [42] basiert auf einem rein nodalen Ansatz unter Verwendung von reinen Hexaedergittern und einer identischen Wahl der Integrations- und Interpolationspunkte, für die hier die sogenannten Gaußpunkte gewählt, die eine hohe Integrationsgenauigkeit bei geringem Interpolationsfehler aufweisen [38]. Somit sind die Basisfunktionen nicht nur nodal, sondern zusätzlich orthogonal und können unabhängig jeweils eindimensional in den drei Richtungen der Hexaeder ausgewertet werden, was trotz der höheren Anzahl an Freiheitsgraden einen Geschwindigkeitsvorteil sowie eine Reduktion des Speicheraufwands gegenüber dem modalen Ansatz erbringt. Der große Nachteil ist die Beschränkung auf Hexaedergitter, was sowohl die Gittererstellung als auch die Partikelbehandlung (s. Kapitel 3.8) erschwert. Die Hexaederelemente werden für die Feldberechnungen in einen $[-1,1]$ -Raum transformiert, so dass alle Elemente in diesem Raum identisch sind und damit die Festlegung der geometrischen Informationen, wie die Position der Interpolationspunkte oder die Basisfunktionen, nur einmal im $[-1,1]$ -Raum durchgeführt werden muss.

Die Implementierung der beiden DG-Verfahren wurde am Institut für Aerodynamik und Gasdynamik durchgeführt und war nicht Bestandteil dieser Arbeit, daher sei für weitere Details zum Verfahren auf die Veröffentlichungen von G. Gassner [21] (DG-FEM) und F. Hindenlang [30] (DG-SEM) verwiesen. Die Implementierung der Maxwellgleichungen mit Divergenzkorrektur in die DG Verfahren inklusive der für das Partikelverfahren allgemein erforderlichen Programminfrastruktur erfolgte in Zusammenarbeit mit J. Neudorfer [55] und A. Stock [72].

Zusätzlich zu den Maxwellgleichungen wurde die Poissongleichung zur Verwendung von Potentialrandbedingungen von M. Pfeiffer [65] implementiert. Hierbei wird die elliptische Poissongleichung ebenfalls durch Einführung einer zusätzlichen Variable auf eine hyperbolische Form gebracht. Die elektrischen Felder aus der Lösung der Maxwellgleichungen dienen dabei als Quellen für die Poissongleichung. Zusammen mit den Potentialen am Rechengebietsrand wird das Potential im gesamten Gebiet berechnet und abschließend werden die elektrischen Felder für die Partikel aus den Gradienten des Potentials bestimmt.

3.2.3. Randbedingungen

Es stehen folgende Randbedingungen für den Feldlöser zur Verfügung:

Offener Rand Der offene Rand simuliert die unbeschränkte Fortführung des Raums über die Rechengrenzen hinaus. Die ankommenden Wellen werden im Idealfall nicht reflektiert sondern verlassen das Rechengebiet. Im verwendeten Verfahren wird eine absorbierende Silver-Müller [54] Randbedingung eingesetzt [72], die für Wellenphänomene gut geeignet ist, allerdings insbesondere bei statischen Anwendungsfällen einen Teil der Felder am Rand reflektiert bzw. als (unerwünschter) Quellterm am Rand fungiert, was unter Umständen bei der Auswertung der Simulationsergebnisse und der Wahl des Rechengebiets beachtet werden muss, wie z.B. in Kapitel 4.1 zu sehen ist.

Perfekter Leiter Der perfekte Leiter simuliert einen leitfähigen Rand, der im allgemeinen für Metalloberflächen verwendet wird. Die Feldlinien des elektrischen Feldes laufen senkrecht in den Rand während die Feldlinien des magnetischen Feldes den Rand nicht durchdringen, also parallel dazu verlaufen. Der perfekte Leiter stellt den Idealfall eines Supraleiters dar, ist jedoch auch für normale Metalloberflächen eine gute Näherung. Zusätzlich zu den Bedingungen an die Feldlinien der elektromagnetischen Felder kann unter Verwendung des zusätzlichen Poissonlösers am Rand ein Potential angelegt werden.

Periodischer Rand Periodische Ränder verbinden zwei Seiten des Rechengebiets und erlauben damit, ein Gebiet unendlicher Ausdehnung mit sich wiederholenden Mustern zu simulieren. Verwendet werden periodische Ränder in der Regel für Testfälle, Vergleiche mit zweidimensionalen Rechnungen anderer Verfahren oder Ausschnittsrechnungen wie z.B. die Plasmaströmung durch ein einzelnes Loch eines Ionentriebwerksgitters in Kapitel 4.6.

Aufgeprägter Rand Auf den Rand wird eine in der Regel zeitabhängige Zustandsfunktion aufgeprägt, die dann in das Rechengebiet expandiert. Übliche Anwendungen sind Testfälle zur Untersuchung des Maxwelllösers ohne Verwendung von Quelltermen, also Partikeln.

3.2.4. Externe Felder

Zusätzlich zu den von den Partikeln erzeugten elektromagnetischen Feldern können externe Felder überlagert werden, welche als Funktion vorgegeben oder von externen Programmen wie zum Beispiel OpenFOAM [62] auf der Grundlage von an Teilen der Geometrie anliegenden Spannungen berechnet und dann aus einer Datendatei eingelesen werden können. Die externen Felder werden dabei nicht vom Feldlöser behandelt, breiten sich also nicht im Rechengebiet aus und werden auch nicht von Partikeln beeinflusst. Aktuell können nur zeitlich unveränderliche Felder angegeben werden. Die Erweiterung auf zeitabhängige Felder, die beispielsweise durch eine zeit- und ortsabhängige Funktion definiert werden, ist jedoch vergleichsweise trivial und kann bei Bedarf schnell implementiert werden.

Die externen Felder werden direkt entsprechend der Position der Partikel auf diese interpoliert und dort auf die vom Feldlöser berechneten Felder addiert.

3.3. Parallelisierungskonzept

Die Parallelisierung ist durch den immer höheren Rechenaufwand aufgrund der detaillierteren Modelle ein wichtiger Bestandteil der Entwicklung von Forschungscode und ist für nahezu alle Teile des PIC-Verfahrens von Bedeutung. Zum besseren Verständnis soll hier zunächst eine Übersicht über das Parallelisierungskonzept in seiner Gänze gegeben werden, auf die Parallelisierungskonzepte und -implementierungen der einzelnen Teile wird jeweils am Ende der entsprechenden Kapitel eingegangen, sofern sie Bestandteil dieser Arbeit sind.

Während von den Anfängen der Computerzeit bis zum Beginn dieses Jahrhunderts immer schnellere Einzelprozessoren entwickelt und verwendet wurden, geht der Trend inzwischen dahin, immer mehr Prozessoren bzw. Kerne in Prozessoren einzusetzen, um höhere Rechengeschwindigkeiten zu erreichen. Dies bedeutet, dass Forschungscode wie das hier entwickelte PIC-Verfahren entsprechend für viele Prozessoren ausgelegt werden müssen, um die aktuellen Höchstleistungsrechner sinnvoll zu nutzen. Aktuell (Stand Mitte 2014) ist dies am Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) die CRAY XE6 mit über 10^5 Prozessoren, wobei die Anzahl an Prozessoren in entsprechenden Rechnern in absehbarer Zukunft stetig weiter steigen wird. Die Höchstleistungsrechner sind dabei in sogenannte Knoten oder „Cluster“ aufgeteilt, die jeweils aus einer Anzahl von Prozessoren (CRAY XE6: 32 bzw. 16) bestehen, die auf einen gemeinsamen Speicher (CRAY XE6: 32 GB bzw. 64 GB) zugreifen. Da die Anzahl der Prozessoren und die Größe des Speichers pro Knoten relativ niedrig sind, ist der sinnvollste Ansatz für das PIC-Verfahren die Parallelisierung mit verteiltem Speicher, d.h. jeder Prozess des Programms besitzt einen eigenen Speicherbereich, auf den nur dieser Prozess zugreifen kann.

Die Parallelisierung des PIC-Verfahrens erfolgt daher durch eine Gebietszerlegung. Dabei wird das gesamte Rechengebiet auf alle beteiligten Prozesse aufgeteilt, die dann jeweils nur ihr eigenes Gebiet sowie die darin befindlichen Partikel behandeln (und kennen). Betrachtet man den Ablauf des PIC-Verfahrens (Abb. 3.1), ist ersichtlich, dass an zwei Stellen Kommunikation zwischen den Prozessen stattfinden muss. Zum einen müssen Partikel, die das Gebiet eines Prozesses verlassen, dem Prozess übermitteln werden, in dessen Gebiet sie eintreten. Zum anderen muss beim Lösen der Maxwellgleichungen auf dem Gitter der numerische Fluss an den Gebietsgrenzen kommuniziert werden. Die Kommunikation erfolgt für verteilte Speicher mittels des „Message Passing Interface“ (MPI), einem entsprechenden Standard zur Kommunikation bei verteilten Computersystemen.

Die Implementierungen der Parallelisierung für die einzelnen Teile des Verfahrens werden in den

entsprechenden Kapiteln genauer beschrieben, soweit sie Bestandteil dieser Arbeit sind. Einen ausführlichen Einblick in das Parallelisierungskonzept allgemein sowie die Untersuchung der Leistungsfähigkeit und Skalierbarkeit der Parallelisierung für das DG-FEM Verfahren finden sich in [55, 59]. Eine Untersuchung im Hinblick auf die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Parallelisierungskonzepte insbesondere für die Partikelbehandlung befindet sich in Kapitel 4.5.

3.4. Rechengitter

Die Wahl des Rechengitters wird zum einen von den Anforderungen der zu berechnenden Problemstellungen und zum anderen von der Art des verwendeten numerischen Verfahrens zur Feldberechnung bestimmt. Da das Gitter ein bestimmender Faktor für den Aufbau des Programmcodes, die Parallelisierung und die Interaktion zwischen Feldern und Partikeln ist, soll in diesem Abschnitt eine kurze Übersicht über die möglichen und die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Gitterarten gegeben werden. Generell wird ein Rechengebiet in eine Anzahl von Elementen unterteilt, welche durch ihre Eckpunkte, die sogenannten Knoten, und ihre Seitenflächen definiert sind. Die Elemente überlappen sich nicht und es existieren keine Lücken zwischen den Elementen. Bei den hier verwendeten Gittern grenzen an eine Seitenfläche immer genau zwei Elemente, während die an einen Knoten angrenzende Zahl von Elementen von der Art und Anordnung der Elemente abhängt.

Grundlegend wird zwischen strukturierten und unstrukturierten Gittern unterschieden. Die Elemente eines strukturierten Gitters liegen in einem regelmäßigen Raster vor, so dass sie durch fortlaufend nummerierte, ganzzahlige Indizes definiert und während der Rechnung identifiziert werden können. Dadurch müssen keine Nachbarschaftsbeziehungen gespeichert oder berechnet werden, was den Aufbau der Algorithmen einfach und die Ausführung schnell macht. Komplexe Geometrien sind mit strukturierten Gittern aufgrund des regelmäßigen Rasters allerdings nur schwer zu realisieren. Es gibt zwar die Möglichkeit, mit sogenannten Multiblockgittern das Gebiet in mehrere strukturierte Gebiete zu unterteilen und damit theoretisch jede Geometrie darzustellen, allerdings ist die Kopplung dieser Blöcke aufwändig. Zusätzlich ist eine lokale Verfeinerung des Gitters generell nicht möglich, da aufgrund der Rasterstruktur immer über einen gesamten Index verfeinert werden muss. Durch die Beschränkung auf ein regelmäßiges Raster ist zudem die Erstellung der Gitter sehr aufwändig. Im Gegensatz dazu bestehen unstrukturierte Gitter aus beliebig angeordneten Elementen, wodurch sie sich vergleichsweise leicht erstellen lassen. Die Verwendung komplexer Geometrien und lokaler Verfeinerungen ist problemlos möglich. Die großen Nachteile der unstrukturierten Gitter sind der höhere Speicherbedarf aufgrund der zu speichernden Nachbarschaftsbeziehungen und der höhere Rechenaufwand bei der Berechnung sowie die generell höhere Komplexität der Algorithmen bei Verwendung potentiell beliebig angeordneter Elemente. Zusätzlich kann durch ungünstig geformte Elemente eine erhöhte Ungenauigkeit entstehen.

Da für die Anwendung im Bereich der elektrischen Raumfahrtantriebe und bei anderen Plasmaströmungen komplexe Geometrien zwingend notwendig sind, werden im Rahmen dieser Arbeit ausschließlich unstrukturierte Gitter verwendet, und die vorgestellten, entwickelten und implementierten Verfahren sind nur für unstrukturierte Gitter ausgelegt. Strukturiert aufgebaute Gitter können zwar prinzipiell ebenfalls eingesetzt werden, sie werden jedoch unstrukturiert verwaltet, d.h. die Vorteile der klaren Nachbarschaftsbeziehungen fallen hier weg.

Eine weitere grundlegende Wahl muss hinsichtlich der Anzahl der Dimensionen getroffen werden. Eindimensionale Verfahren sind grundsätzlich nur für sehr wenige Anwendungsfälle verwendbar und dienen eher der Verifikation und Entwicklung eines Verfahrens denn der Anwendung. Zweidimensionale Verfahren sind sehr gebräuchlich, da mit ihnen bereits etliche Anwendungen berechnet werden, insbesondere die Erweiterung auf rotationssymmetrisches 2D erlaubt die Simulation von Anströmungen von bzw. Strömungen in rotationssymmetrischen Körpern, was z.B. für einige der elektrische Raumfahrtantriebe ausreichend ist. Sobald jedoch wesentliche Geometrien oder Strömungseffekte, und im Falle von PIC Feldeffekte, nur noch durch voll dreidimensionale Berechnungen berücksichtigt werden können, muss ein 3D Verfahren verwendet werden. 3D Verfahren sind wesentlich aufwändiger hinsichtlich Rechenzeit- und Speicherbedarf, letzteres schon alleine durch die erhöhte Anzahl der Elemente. Bei einer räumlichen Diskretisierung in zwei bzw. drei Dimensionen, die äquivalent zu einer Diskretisierung mit N Elementen in einer Dimension sein soll, werden N^2 bzw. N^3 Elemente benötigt, wobei zusätzlich noch die Anzahl der Knoten und Seitenflächen pro Element sowie die Anzahl der Partikel aufgrund der höheren Dimension ansteigen. Da dreidimensionale Effekte sowohl bei den in dieser Arbeit betrachteten Problemstellungen als auch bei weiteren potentiellen und aktuellen Anwendungen des Verfahrens eine Rolle spielen, werden voll dreidimensionale Gitter verwendet.

Für die Unterteilung des Rechengebiets in Elemente ist die Form der Elemente des unstrukturierten Gitters im Normalfall irrelevant, es können beliebige Polyeder verwendet werden, solange die erforderlichen Geometrien abgebildet werden können. Runde Geometrien werden dabei durch polygone Flächen, bestehend aus den an die Rundung angrenzenden Elementseitenflächen, approximiert. Die Form der Elemente ergibt sich also nur aus dem verwendeten numerischen Verfahren und der nötigen Diskretisierung. Für die im Verlauf dieser Arbeit zuerst verwendeten FV- und DG-FEM-Verfahren konnten beliebige Polyedergitter verwendet werden während das neuere DG-SEM-Verfahren reine Hexaedergitter (6 Seiten, 8 Knoten) erfordert.

Die Gitter werden mit kommerziellen Gittergeneratoren wie z.B. GridPro [67] erstellt, die in der Lage sind, vorgegebene Geometrien, welche z.B. mit CAD-Programmen erzeugt werden, zu vernetzen. Die Erstellung und Verwendung von Hexaedergittern ist im Vergleich zu Tetraedergittern allerdings aufwändiger. Reine Hexaedergitter können zum einen durch Zerlegung eines Tetraedergitters erzeugt werden. Jeder Tetraeder kann in z.B. 4 Hexaeder zerlegt werden. Dies führt jedoch zu einer generellen Gitterverfeinerung, ohne dass z.B. Rundungen der Geometrie besser approximiert werden. Zum ande-

ren kann das Rechengebiet direkt in Hexaeder zerlegt werden, was die verwendeten Gittergeneratoren allerdings im Normalfall nicht ohne manuelle Eingriffe leisten können. Für sehr einfache Geometrien kann sowohl bei DG-FEM als auch bei DG-SEM auf einen internen Gittergenerator zurückgegriffen werden, der einfache pseudo-strukturierte Hexaedergitter in quaderförmigen Rechengebieten erzeugen kann.

3.4.1. Parallelisierung: Gebietszerlegung und Lastverteilung

Das Rechengebiet wird bei jedem Start und Neustart, d.h. Fortführung der Simulation von einem gespeicherten Zustand aus, zerlegt und auf die zugewiesene Anzahl von Prozessen aufgeteilt. Dabei soll zum einen die während der Rechnung nötige Kommunikation zwischen den Prozessen möglichst gering gehalten werden. Kommunikation findet in erster Linie zwischen angrenzenden Elementen statt, entweder durch übertretende Partikel oder durch den für die Feldlösung auf dem Gitter nötigen Informationsaustausch. Zur Minimierung der Kommunikation sollten also die Grenzflächen zwischen den Prozessgebieten möglichst klein sein. Zum anderen soll die Rechenlast gleichmäßig auf die Prozesse verteilt werden, um Leerlaufzeiten zu minimieren. Eine häufig verwendete Bibliothek zur Gebietszerlegung ist ParMETIS [39], diese verwendet allerdings Zerlegungsalgorithmen, die jeweils die Information des gesamten Gitters benötigen, weswegen der Speicherbedarf bei hohen Prozessanzahlen stark ansteigt und damit unpraktikabel wird. Dies lässt sich vermeiden, indem das Gitter mittels raumfüllenden Kurven wie der Hilbert- [28] oder der z-Kurve [49] zerlegt wird. Die Hilbertkurve ist dabei generell besser geeignet, da sie keine Sprünge aufweist und damit eine bessere räumliche Zusammengehörigkeit der Elemente entlang der Kurve bietet. Durch die Form der Kurve sind benachbarte Punkte auf der Kurve auch immer benachbarte Punkte im Raum, so dass die unstrukturierten Elemente entlang der Kurve sortiert und auf die Prozesse verteilt werden können [1]. Dies erfordert bedeutend weniger Speicher als die Zerlegung mittels ParMETIS, da nicht die Information des gesamten Gebiets bekannt sein muss, führt allerdings häufig und insbesondere im Fall niedriger Prozesszahlen zu ungünstigen Gebietszerlegungen (Abb. 3.3 und 3.4). Die Zerlegung mittels raumfüllender Kurven wurde von F. Hindenlang [29] für den im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Code implementiert. In Veröffentlichungen von Harlacher et al. [24,25] finden sich Details hinsichtlich Speicherbedarf und Rechen- sowie Kommunikationsaufwand der Gebietszerlegung.

Da die Partikel im Simulationsgebiet in der Regel nicht gleichmäßig verteilt sind, muss für eine optimale Auslastung der Prozesse die Anzahl der Partikel in den jeweiligen Elementen mitberücksichtigt werden. Dies geschieht mit einer Gewichtung, die den Rechenaufwand für ein Partikel mit dem Aufwand für ein Element bei der Feldberechnung in Beziehung setzt. Prozessen mit geringen Partikelzahlen wird also eine höhere Anzahl an Elementen zugewiesen und umgekehrt. Untersuchungen von J. Neudorfer [55] ergaben einen groben Richtwert für den Gewichtungsfaktor in der

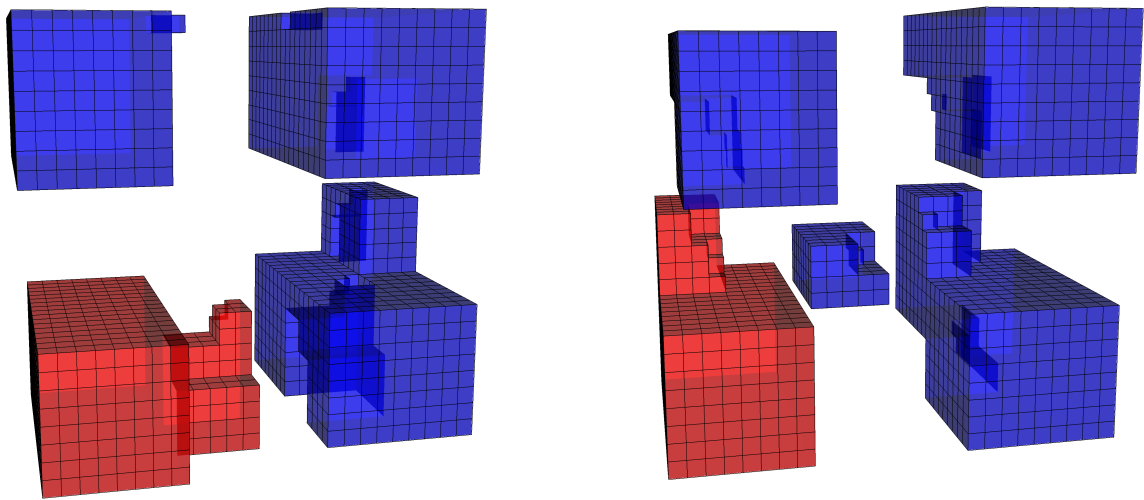


Abbildung 3.3.: Explosionsansicht der Gebietszerlegung eines regelmäßigen $17 \times 17 \times 17$ -Gitters mittels Hilbertkurve (links) und z-Kurve (rechts) bei 4 Prozessen. Anzahl der Elemente pro Teilgebiet: 1229 (rot) und 1228 (blau). Gut sichtbar sind die allgemein ungünstigen Nachbarschaftsbeziehungen (herausstehende Teile) sowie im Fall der z-Kurve sogar ein aus zwei separaten Teilen bestehendes Teilgebiet.

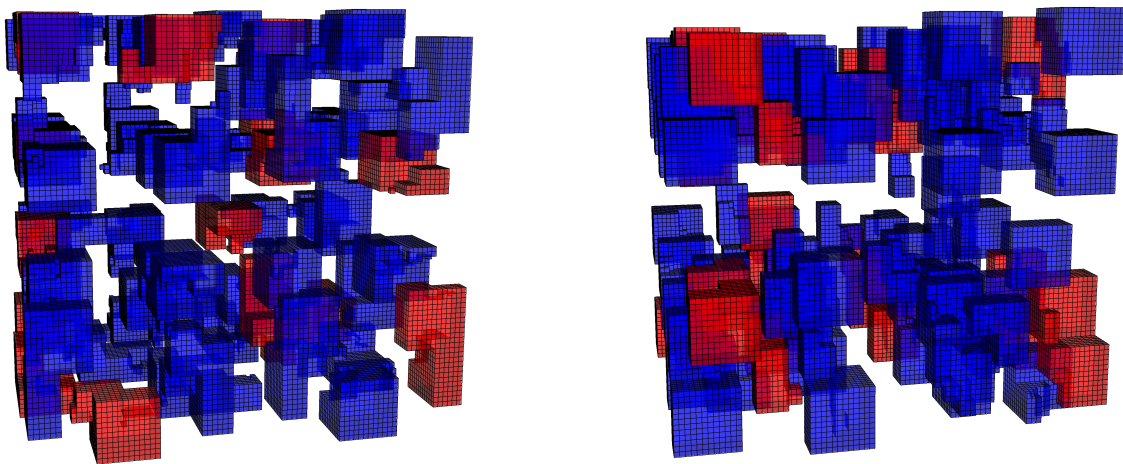


Abbildung 3.4.: Explosionsansicht der Gebietszerlegung eines regelmäßigen $47 \times 47 \times 47$ -Gitters mittels Hilbertkurve (links) und z-Kurve (rechts) bei 64 Prozessen. Anzahl der Elemente pro Teilgebiet: 1623 (rot) und 1622 (blau).

Größenordnung von $\sigma_L = 0,02$ für das DG-FEM Verfahren vierter Ordnung, d.h. der Aufwand für ein Element entspricht dem für 50 Partikel. Der Aufwand ist allerdings je nach Ordnung der verwendeten Verfahren zur Feldberechnung und zur Ladungsdeposition und -interpolation unterschiedlich, so dass ein allgemeingültiger Gewichtungsfaktor nicht angegeben werden kann und

für jeden Anwendungsfall neu bestimmt werden muss, wobei die in den Kapiteln 4.4.2 und 4.5 vorgestellten Rechenzeituntersuchungen eine grobe Einordnung erlauben. Für die Gebietszerlegung unter Berücksichtigung der Lastverteilung ergibt sich die Last für ein Element k mit der im Element befindlichen Partikelzahl N_p aus

$$L_k = 1 + \sigma_L N_p, \quad (3.27)$$

mit der gesamten Last im Rechengebiet $L = \sum_k L_k$. Jedem Prozess werden N Elemente entlang der Hilbertkurve zugeordnet, so dass die Last jedes Prozesses $L_{proc} = \sum_{k=1}^N L_k$ den Wert L/N_{procs} erreicht oder überschreitet.

Entscheidend für den sinnvollen Einsatz der Lastverteilung ist die Verwendung von nicht-blockierender Kommunikation beim Transfer der Partikel zwischen den Prozessen, da nur so die Prozesse, die zum Beispiel die Feldberechnung abgeschlossen haben, bereits mit der Berechnung der Partikelbehandlung beginnen können, um die Leerlaufzeiten zu minimieren. Eine detaillierte Beschreibung und Untersuchung der Lastverteilung findet sich in [55].

3.5. Zeitdiskretisierung und Zeitintegration

Da die Partikelbewegung sowie die Maxwellgleichungen, im Gegensatz zu z.B. der Poissongleichung, nicht nur orts- sondern auch zeitabhängig sind, muss zusätzlich zur räumlichen Diskretisierung eine Zeitdiskretisierung eingeführt werden. In diesem Abschnitt werden die Zeitdiskretisierung und verschiedene Methoden zur Zeitintegration des Verfahrens unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Anforderungen der elektromagnetischen Feldausbreitung und der Partikelbewegung vorgestellt.

3.5.1. Zeitdiskretisierung

Die Zeitdiskretisierung erfolgt über einen Zeitschritt Δt , der vom Zeitpunkt t^n zum Zeitpunkt $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ führt. Die Zeitschrittweite muss dabei so klein gewählt werden, dass das Verfahren insgesamt stabil bleibt. Der maximale Zeitschritt des Verfahrens wird im allgemeinen durch die CFL-Zahl C (Courant-Friedrichs-Lewy) ausgedrückt [16], die angibt, wie viele Zellen die betrachteten Größen, in diesem Fall also die elektromagnetischen Felder, jeden Zeitschritt maximal durchschreiten. Die maximale Ausbreitungsgeschwindigkeit der elektromagnetischen Felder ist im Vakuum die Lichtgeschwindigkeit c_0 . Im durch die Divergenzkorrektur erweiterten PHM Gleichungssystem (3.13 bis 3.16) bewegen sich die Divergenzkorrekturanteile allerdings mit einer um den Faktor $\chi \geq 1$ erhöhten Geschwindigkeit, so dass die maximal auftretende Geschwindigkeit χc_0 ist. Der maximale

Zeitschritt, der noch ein stabiles Verfahren erlaubt, ist dann

$$\Delta t = C \frac{|\Delta x|}{|c_0|}, \quad (3.28)$$

wobei $|\Delta x|$ die Abmessung des kleinsten Elements im Rechengebiet darstellt. Je größer C , desto weniger Rechenschritte n müssen für eine simulierte Gesamtzeit $t = n\Delta t$ durchgeführt werden. Die mögliche CFL-Zahl hängt dabei vom verwendeten Lösungsverfahren ab. Für die Lösung des PHM Systems durch ein explizites Verfahren gilt allgemein $C < 1$, da sich sonst die elektromagnetischen Felder ohne gegenseitige Interaktion über mehrere Zellen ausbreiten [51]. Bei der Verwendung von Polynomen hoher Ordnung, wie dies beim DG-Verfahren der Fall ist, verringert sich der maximal mögliche Zeitschritt zusätzlich, da die Länge $|\Delta x|$ und damit die Ausbreitung je Zeitschritt nicht auf ein Element sondern auf die Gaußpunkte bezogen wird. Die Wahl der Zeitintegrationsmethode wirkt sich ebenfalls auf die Stabilität des Verfahrens aus, da z.B. Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung genauer sind und das Verfahren damit für größere Zeitschrittweiten stabil bleibt. Eine detaillierte Untersuchung der CFL-Zahlen für das hier verwendete Verfahren findet sich in [22].

Für die Partikelbewegung ergibt sich dabei automatisch der gleiche Zeitschritt, da die Partikel die Quellen des Maxwelllösers sind und damit mit dem gleichen Zeitschritt bewegt werden müssen. Für Fälle, in denen die Ausbreitung der elektromagnetischen Felder keine Rolle spielt, beispielsweise bei Vernachlässigung der Eigenfelder der Partikel und Bewegung nur aufgrund extern angelegter Felder, ergibt sich für die Partikel die maximale Zeitschrittweite aus der maximalen Geschwindigkeit der Partikel, worauf in Kapitel 3.5.4 näher eingegangen wird.

3.5.2. Zeitintegration des Feldlösers

Die Berechnung der elektromagnetischen Felder und der Divergenzkorrekturvariablen, kurz des Zustands \vec{u} , zu einem Zeitpunkt $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ erfordert die Lösung der bereits vorgestellten Differentialgleichungen des PHM Systems (3.18). Da der Zustand zum Zeitpunkt t^n bekannt ist, ergibt sich für jeden Zeitschritt ein Anfangswertproblem der Form

$$u'(t) = f(t, u(t)), \quad u(0) = u^n, \quad u \in \mathbb{R}^8. \quad (3.29)$$

Eine übliche Methode zur numerischen Lösung dieses Anfangswertproblems sind die Runge-Kutta-Verfahren (RK) [12], eine Familie von s -stufigen Einschrittverfahren. Allgemein berechnet sich der Zustand zum Zeitpunkt t^{n+1} aus

$$u^{n+1} = u^n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \quad (3.30)$$

3. Modellierung und numerische Methoden

mit der Schrittweite h , welche der Zeitschrittweite Δt entspricht, und

$$k_i = f(t^n + c_i h, u^n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j). \quad (3.31)$$

Die Koeffizienten a_{ij} , b_i und c_i sind für die verschiedenen Varianten des RK-Verfahrens charakteristische Koeffizienten. Gilt $a_{ij} = 0$ für alle $i \leq j$, ist das RK Verfahren explizit, d.h. die k_i können sequentiell berechnet werden. Die Koeffizienten werden aus der gewünschten Konvergenzordnung erstellt und im allgemeinen mittels eines Butcher-Tableaus [12] dargestellt. Tabelle 3.1 zeigt das Butcher-Tableau und Tabelle 3.2 die Koeffizienten für RK1 (auch als Eulerverfahren bekannt), RK3 und das klassische RK4, also Runge-Kutta-Verfahren dritter und vierter Konvergenzordnung.

c_1				
c_2	$a_{2,1}$			
c_3	$a_{3,1}$	a_{32}		
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	
c_s	a_{s1}	a_{s2}	\dots	a_{ss-1}
	b_1	b_2	\dots	$b_{s-1} \quad b_s$

Tabelle 3.1.: Darstellung der Koeffizienten der expliziten RK-Verfahren in einem Butcher-Tableau.

0	0	0	0	0
$1/2$	$1/2$	$1/2$	$11/2$	$1/2$
1	1	-1	2	$1/2$
	$1/6$	$4/6$	$1/6$	1
	$1/6$	$1/3$	$1/3$	$1/6$

Tabelle 3.2.: Koeffizienten für RK1 (Euler), RK3 und RK4 (von links nach rechts).

Aufgrund der Stabilitätseigenschaften des DG-Verfahrens müssen Runge-Kutta-Verfahren höherer Ordnung, üblicherweise RK3 oder RK4, für die Feldlösung verwendet werden [27]. Die Schrittweite h ist dabei entscheidend für die Genauigkeit der Lösung und damit für die Stabilität des DG-Verfahrens. Dies hat zur Folge, dass z.B. eine Simulation mit RK3-Verfahren trotz der geringeren Anzahl an Stufen unter Umständen effektiv langsamer ist als ein RK4-Verfahren, da die Schrittweite h und damit die Zeitschrittweite Δt stark reduziert werden muss, um die Stabilität des Verfahrens zu gewährleisten. Wie aus Gleichungen (3.30) und (3.31) ersichtlich ist, werden bei den üblichen RK-Verfahren alle Zwischenlösungen k_i gespeichert, was bei den hier verwendeten großen Rechengittern einen sehr hohen Speicheraufwand bedeuten würde. Aus diesem Grund wird im Rahmen dieser Arbeit statt des klassischen RK4 ein von Carpenter und Kennedy [15] entwickeltes fünfstufiges RK-Verfahren vierter Ordnung verwendet („Low Storage Explicit RK4“, LSERK4), bei dem nur zwei Zustände

gespeichert werden müssen. Der RK Algorithmus unter Verwendung von nur zwei Zuständen lautet

$$w_i = A_i w_{i-1} + h f(t_{i-1}, u_{i-1}) \quad (3.32)$$

$$u_i = u_{i-1} + B_i w_i \quad (3.33)$$

mit $1 \leq i \leq s$, u und $w \in \mathbb{R}^8$, der (Zeit-)Schrittweite $h = \Delta t$ und $A_1 = 0$, d.h. w_0 wird nicht benötigt und kann ebenfalls zu Null gesetzt werden. Die Zustände u und w werden dabei jeweils in der Folgestufe überschrieben. Der Zusammenhang zwischen A , B und den oben vorgestellten RK Koeffizienten a , b und c ist dabei [80]

$$B_i = a_{i+1,i} \quad (i \neq s) \quad (3.34)$$

$$B_s = b_s \quad (3.35)$$

$$A_i = (b_{i-1} - B_{i-1})/b_i \quad (i \neq 1, b_i \neq 0) \quad (3.36)$$

$$A_i = (a_{i+1,i-1} - c_i)/B_i \quad (i \neq 1, b_i = 0). \quad (3.37)$$

Für die Zeitpunkte der Zwischenschritte gilt $t_i = t^n + C_i \Delta t$. Die Koeffizienten für ein effizientes fünfstufiges Verfahren vierter Ordnung für hyperbolische Gleichungssysteme, das im Rahmen dieser Arbeit für die Zeitintegration des Feldlösers verwendet wird, werden in [15] hergeleitet und sind in Tabelle 3.3 aufgeführt.

$A_1 = 0$	$B_1 = 0, 1496590219993$	$C_1 = 0$
$A_2 = -0, 4178904745$	$B_2 = 0, 3792103129999$	$C_2 = 0, 1496590219993$
$A_3 = -1, 192151694643$	$B_3 = 0, 8229550293869$	$C_3 = 0, 3704009573644$
$A_4 = -1, 697784692471$	$B_4 = 0, 6994504559488$	$C_4 = 0, 6222557631345$
$A_5 = -1, 514183444257$	$B_5 = 0, 1530572479681$	$C_5 = 0, 9582821306748$

Tabelle 3.3.: Koeffizienten für LSERK4 [15].

3.5.3. Zeitintegration der Partikelbewegung

Ebenso wie für die Feldlösung ist auch für die Partikelbewegung eine Zeitintegration zu wählen. Die Bewegungsgleichungen lassen sich ebenso wie die Maxwellgleichungen als Anfangswertproblem analog zu Gleichung (3.30) in der Form $u' = f(u, t)$, $u(0) = u^n$ darstellen, hier mit dem Zustandsvektor $\vec{u}_p = (x, y, z, v_x, v_y, v_z)^T$. Das Euler- bzw. Runge-Kutta-Verfahren erster Ordnung ist dann

$$\vec{u}_p^{n+1} = \vec{u}_p^n + \Delta t \cdot f(\vec{u}_p^n, t), \quad (3.38)$$

$$\text{mit } f(\vec{u}_p, t) = \vec{u}'_p = (v_x, v_y, v_z, a_x, a_y, a_z)^T. \quad (3.39)$$

3. Modellierung und numerische Methoden

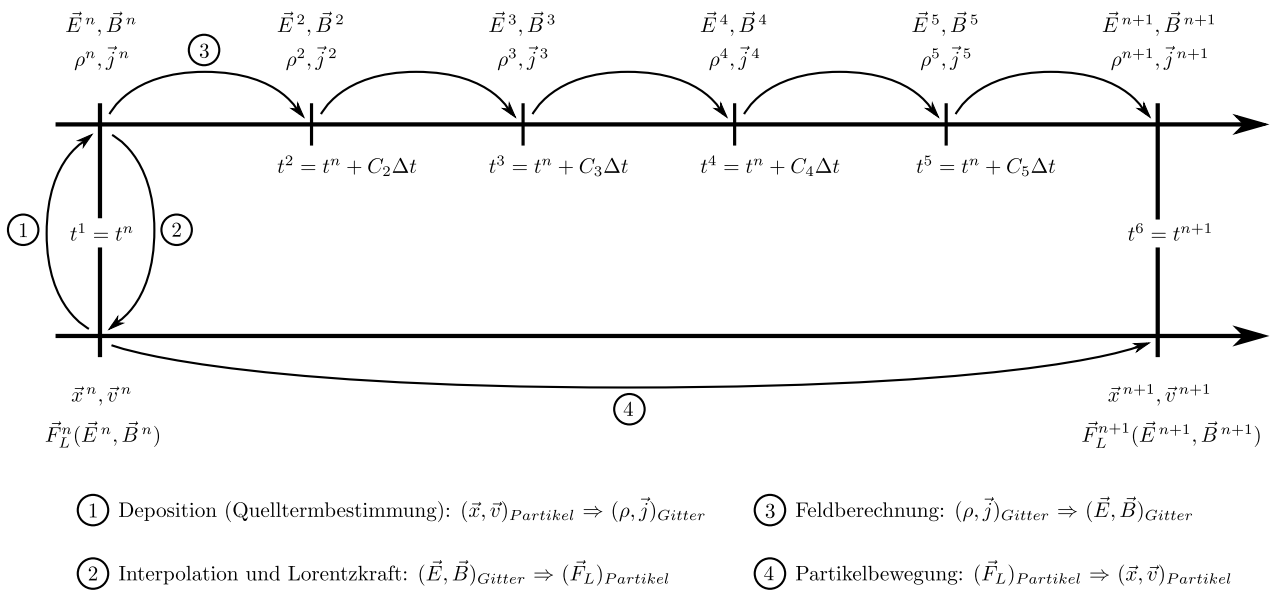


Abbildung 3.5.: Schematische Darstellung des Eulerverfahrens zur Zeitintegration der Partikelbewegung

Der Beschleunigungsvektor ergibt sich aus der Lorentzkraft (s. Kapitel 3.6). Das Ablaufschema des Eulerverfahrens für die Partikelbewegung in Kombination mit dem LSERK4-Verfahren für die Feldberechnung ist in Abbildung 3.5 dargestellt.

Eine genauere und bei PIC-Verfahren übliche Integrationsvariante ist das Bocksprung- („leapfrog“) Verfahren [7], bei dem die Positionen und Geschwindigkeiten der Partikel zeitversetzt vorliegen

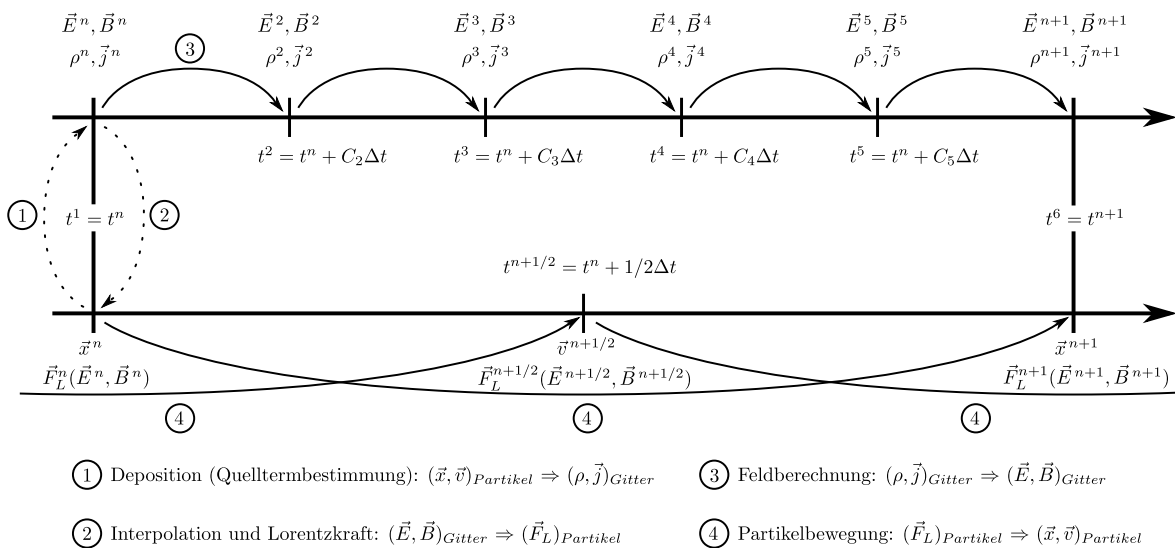


Abbildung 3.6.: Schematische Darstellung des Bocksprung- („leapfrog“) Verfahrens zur Zeitintegration der Partikelbewegung. Werte, die an Halbzeitschritten benötigt werden, müssen aus den vorhandenen Werten an den Vollzeitschritten interpoliert werden.

und (daher der Name) sich jeweils überspringen. Abbildung 3.6 zeigt den schematischen Ablauf des Verfahrens. Die Attraktivität dieses Verfahrens ergibt sich daraus, dass es bei ähnlich geringem Rechenaufwand wie beim erster Ordnung genauen Eulerverfahren zweiter Ordnung genau ist. Die Positionen und Geschwindigkeiten der Partikel sind allerdings nie zum gleichen Zeitpunkt bekannt, was verschiedene Schwierigkeiten hervorruft: Die Quellen für die Feldberechnung liegen durch den Versatz zu unterschiedlichen Zeitpunkten vor, da die Ladungsdichte ρ vom Ort und die Stromdichte \vec{j} vom Ort und der Geschwindigkeit abhängen (s. Gleichungen (2.17) und (2.18)). Umgekehrt werden die Felder nur zu den vollen Zeitschritten berechnet, während die Lorentzkraft auch zu den halben Zeitschritten benötigt wird. Ein weiteres Problem ergibt sich bei der Festlegung der Anfangsbedingungen. Beim Einsetzen von Partikeln in das Rechengebiet müsste die Geschwindigkeit einen halben Zeitschritt vor dem Einsetzen berechnet werden. Genauso ist die Auswertung der Simulationsergebnisse aufgrund der unterschiedlichen Zeitpunkte von Position und Geschwindigkeit problematisch.

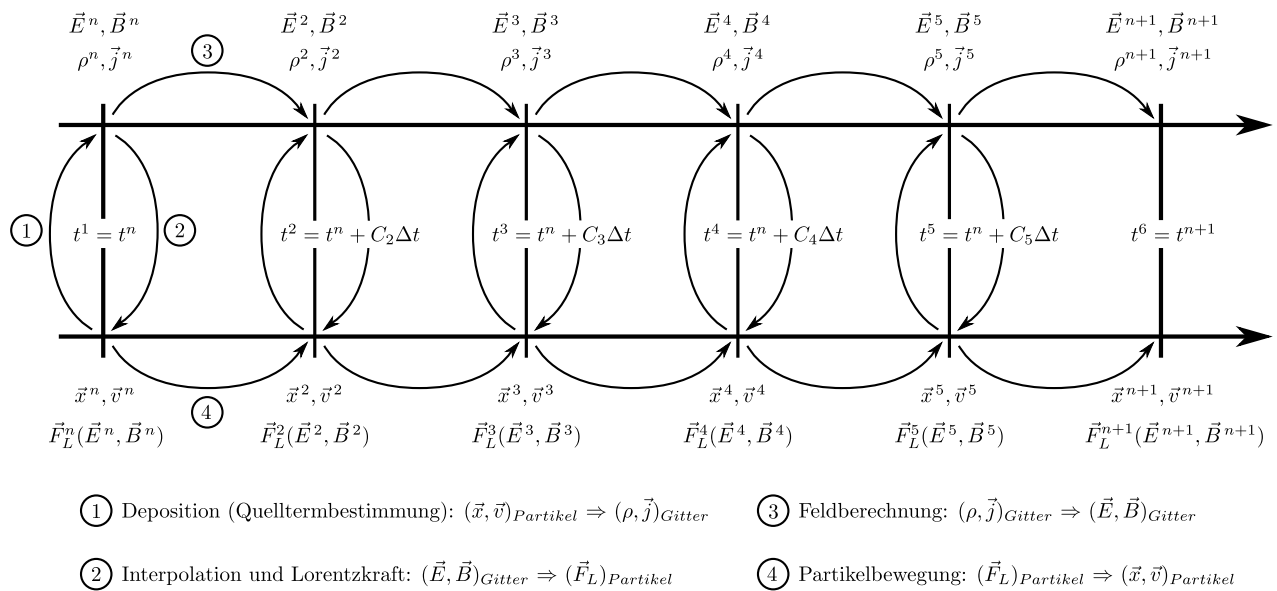


Abbildung 3.7.: Schematische Darstellung des LSERK4 Verfahrens zur Zeitintegration der Partikelbewegung

Sowohl beim Euler- als auch beim Bocksprungverfahren werden die Bewegungsgleichungen der Partikel jeden Zeitschritt nur einmal gelöst, d.h. die Quellterme für die Feldberechnung sind in jeder Stufe des LSERK4-Verfahrens identisch, was zu einem Fehler in der Feldberechnung führt. Für Simulationen mit langsamen Partikeln ist dieser Fehler aufgrund der großen Zeitskalenunterschiede zwischen Partikelbewegung und Feldausbreitung gering. Bei Simulationen mit schnellen Partikeln oder starken Beschleunigungen müssen die Bewegungsgleichungen der Partikel für eine konsistente Berechnung mit dem gleichen Verfahren gelöst werden wie die Feldausbreitung, also hier mit dem im vorigen Abschnitt beschriebenen LSERK4-Verfahren (Abb. 3.7). Dies hat den offensichtlichen

Nachteil, dass die komplette Partikelbehandlung, also Bewegung, Lokalisierung, Ladungsdeposition und Interpolation in jedem Zeitschritt fünf- statt einmal durchgeführt werden muss. Im Rahmen dieser Arbeit wird je nach Anwendungsfall und Partikelgeschwindigkeiten das Euler- oder das LSERK4-Verfahren verwendet. Das Bocksprungverfahren wird nicht eingesetzt, da es ungenauer als das LSERK4-Verfahren und durch die beschriebenen Effekte bei nur geringem Genauigkeitsgewinn bedeutend komplexer in der Implementierung ist als das Eulerverfahren.

3.5.4. Subcycling

Eine zusätzliche Möglichkeit zur Kopplung von Partikel- und Feldzeitintegration ist die Verwendung von Unterschritten, dem sogenannten „Subcycling“. Der Ansatz dieser Methode beruht darauf, dass die Partikel sich im Vergleich zu den elektromagnetischen Feldern sehr viel langsamer bewegen und damit die Änderung der Quellen während eines Feldzeitschritts vernachlässigbar klein ist. Als Beispiel sei eine reine Ionenströmung mit Ionengeschwindigkeiten von maximal 100 km/s gegeben. Da die Felder sich mit Lichtgeschwindigkeit ausbreiten, ergibt sich ein Faktor von ca. $3,3 \cdot 10^{-4}$, also ca. 0,033 %, zwischen der Bewegung der Partikel und der der Felder. Aufgrund dieser Diskrepanz ist es bei im Vergleich zur Feldausbreitung langsamen Strömungen sinnvoll, die Zeitschritte für die Partikelbewegung zu vergrößern, also eine große Anzahl von Felditerationsschritten während eines einzelnen Partikeliterationsschritts auszuführen (Abbildung 3.8). Ein kritischer Punkt ist hierbei die Wahl dieser Anzahl an Felditerationen bzw. der Partikelzeitschrittweite. Der einfachste Ansatz ist

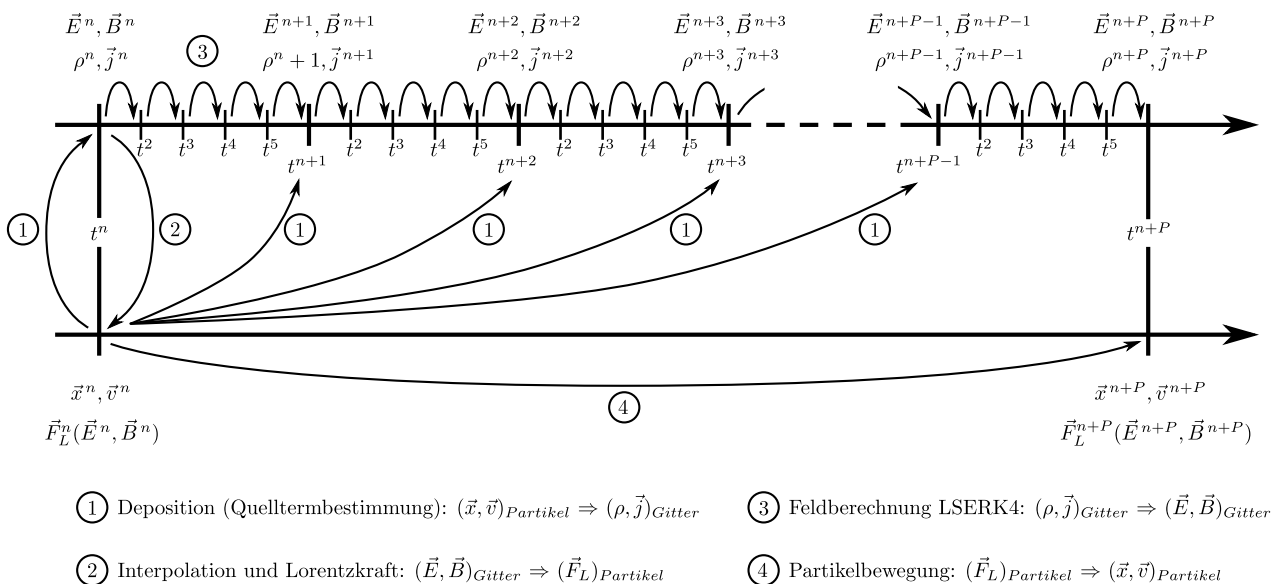


Abbildung 3.8.: Schematische Darstellung des Subcyclings. Die Zeitintegration der Partikelbewegung erfolgt per Eulerverfahren, die der Feldlösung per LSERK4 mit P Feldlösungsschritten pro Partikelschritt

die manuelle Festlegung des Partikelzeitschritts mit dem Kriterium, dass ein Partikel innerhalb eines Zeitschritts nicht weiter als zum Beispiel die Abmessung des kleinsten Elements im Rechengitter fliegen darf. Diese Methode hat jedoch zwei signifikante Nachteile: Zum einen ist zu Beginn der Rechnung noch nicht bekannt, wie schnell die Partikel maximal werden können, so dass eine sehr konservative Abschätzung angenommen werden muss. Zum anderen gilt dieser Zeitschritt für die gesamte Simulation, also auch in Phasen mit niedriger Partikelgeschwindigkeit, in denen ein höhere Schrittweite verwendet werden könnte, wodurch Rechenzeit verschwendet wird. Um diese Probleme zu vermeiden, wurde von Pfeiffer [65] eine automatische Zeitschrittweitenberechnung für die Partikel entwickelt, bei der aus der maximal auftretenden Geschwindigkeit die Partikelzeitschrittweite mit

$$\Delta t_p = K \frac{\Delta t_c \cdot c_0}{v_{max}}, \quad (3.40)$$

berechnet wird, wobei Δt_c die durch die Lichtgeschwindigkeit c_0 festgelegte Feldzeitschrittweite darstellt. K ist dabei ein Faktor, der angibt, wie weit ein Gitterelement innerhalb eines Zeitschritts maximal von einem Partikel durchflogen werden soll. Die maximale Geschwindigkeit v_{max} ist dabei die betragsmäßig größte Geschwindigkeit aller Partikel im letzten Zeitschritt. Die Verwendung dieser größten Partikelgeschwindigkeit führt allerdings bei starken Beschleunigungen zu einer Fehlabschätzung, da die tatsächliche Geschwindigkeit der Partikel in einem Zeitschritt die Beschleunigung beinhalten muss, deren Einfluss wiederum vom (gesuchten) Zeitschritt abhängt. Die im Folgenden beschriebene Erweiterung zu Gleichung (3.40) berücksichtigt diese Abhängigkeiten. Für die maximale Partikelgeschwindigkeit aus einer Menge von N_p Partikeln gilt in jedem Partikelzeitschritt Δt_p

$$v_{max} = \max_{N_p} |\vec{v}_p + \Delta t_p \cdot \vec{a}_p|, \quad (3.41)$$

mit den individuellen Geschwindigkeiten \vec{v}_p und Beschleunigungen \vec{a}_p der einzelnen Partikel. Der gesuchte Zeitschritt Δt_p wird iterativ bestimmt, indem initial mit der Feldschrittweite als Anfangsschrittweite die maximale Geschwindigkeit gemäß Gleichung (3.41) und daraus gemäß Gleichung (3.40) eine Partikelzeitschrittweite berechnet wird. Der Mittelwert zwischen Anfangsschrittweite und Partikelschrittweite bildet die neue Anfangsschrittweite. Dieser Zyklus wird wiederholt, bis die Änderung der Schrittweite unter 5 % liegt. Die Berechnung wäre auch ohne Iteration möglich, indem aus den beiden Gleichungen für jedes einzelne Partikel eine Zeitschrittweite berechnet und dann das Minimum aller Zeitschrittweiten verwendet würde, dies hätte jedoch bei einer hohen Partikelanzahl einen erheblich höheren Rechenaufwand zur Folge.

Wird die Partikelzeitschrittweite so groß gewählt oder berechnet, dass die Felder in dieser Zeitspanne mehrmals das komplette Rechenggebiet durchqueren können, werden die Felder nur bis zu einem pseudo-stationären Zustand berechnet, woraufhin sofort zur Simulationszeit des nächsten Partikelschritts gesprungen wird.

Es ist zu beachten, dass die maximale Geschwindigkeit als Kriterium für die Partikelzeitschrittweite nur angewandt werden kann, wenn die elektromagnetischen Felder und damit die auf die Partikel wirkenden Kräfte sich innerhalb eines Partikelzeitschritts nur geringfügig ändern. Ist dies nicht der Fall, werden die Beschleunigungen nicht zeitgenau aufgelöst und führen je nach Stärke der zeitlichen Schwankung zu Ungenauigkeiten oder vollkommen falschen Lösungen. Für hochfrequente Felder oder hohe Plasmafrequenzen, aber auch für die initiale Phase einer Berechnung, in der sich die Felder aufbauen und damit schnell ändern, ist die Subcycling Methode damit ungeeignet.

3.5.5. Parallelisierung: Zeitdiskretisierung

Die Zeitschrittweite für das Verfahren wird global zu Beginn der Rechnung basierend auf der CFL-Zahl und der gewählten Zeitintegrationsmethode berechnet oder vom Anwender festgelegt. Da außerdem im gesamten Rechengebiet die selbe Zeitschrittweite verwendet wird, müssen für die parallele Simulation außer der initialen Zeitschrittweitenberechnung und -kommunikation keine Anpassungen im Vergleich zur seriellen Simulation durchgeführt werden. Im Fall der Partikelzeitschrittweite beim Subcycling muss zur Berechnung des Zeitschritts jeweils das schnellste Partikel im gesamten Rechengebiet gesucht werden, was eine einmalige Kommunikation aller Prozesse erfordert.

3.6. Lorentzlöser

Die Partikel werden mit der durch die elektrischen und magnetischen Felder an der Partikelposition erzeugten Lorentzkraft \vec{F} beschleunigt. Die Bewegung findet im freien Raum statt, die einzige Diskretisierung ist hier also die Zeitdiskretisierung. Es gilt, wie in Kapitel 2.3 beschrieben, für jedes Partikel

$$\vec{F} = Q \left(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \right), \quad (3.42)$$

wobei die elektromagnetischen Felder über den gesamten Zeitschritt bzw. bei LSERK4 den jeweiligen Teilzeitschritt konstant sind. Die gesuchte Beschleunigung $\vec{a} = d\vec{v}/dt$ ergibt sich für kleine Geschwindigkeiten, also $|\vec{v}| \ll c_0$, aus

$$\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m_0}, \quad (3.43)$$

mit der Lorentzkraft \vec{F} und der Masse des Partikels m_0 . Eine Näherung, die für den Fall $\vec{F} \perp \vec{v}$ in die exakte Lösung übergeht, ist die Verringerung der Beschleunigung um den Lorentzfaktor γ , also

$$\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m_0\gamma}. \quad (3.44)$$

Diese einfache Näherung führt jedoch durch die Vernachlässigung der zeitlichen Abhängigkeit des Lorentzfaktors und der Geschwindigkeit bzw. Lorentzkraft zu einem Fehler in der Beschleunigung, der um so größer wird, je größer die beschleunigenden Kräfte und damit die Änderung des Lorentzfaktors während eines Zeitschritts sind. Bei Geschwindigkeiten nahe der Lichtgeschwindigkeit kann im ungünstigsten Fall die Lichtgeschwindigkeit überschritten werden, was zu einem imaginären Lorentzfaktor γ führt und den Abbruch der Simulation zur Folge hat. Um den Fehler zu vermeiden, muss diese Zeitabhängigkeit des Lorentzfaktors während des Zeitschritts berücksichtigt werden. Die Kraft ist allgemein durch die relativistische Impulsänderung

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = m_0 \frac{d(\gamma\vec{v})}{dt} \quad (3.45)$$

definiert. Die Ableitung des Impulses nach der Zeit ergibt

$$m_0 \frac{d(\gamma\vec{v})}{dt} = m_0\gamma \frac{d\vec{v}}{dt} + m_0\vec{v} \frac{d\gamma}{dt} \quad (3.46)$$

$$= m_0\gamma \frac{d\vec{v}}{dt} + m_0\vec{v} \frac{\gamma^3}{c_0^2} \left(\vec{v} \cdot \frac{d\vec{v}}{dt} \right) \quad (3.47)$$

$$= m_0\gamma \frac{d\vec{v}}{dt} + m_0\vec{v} \frac{\gamma^3}{c_0^2} \left(v_x \frac{dv_x}{dt} + v_y \frac{dv_y}{dt} + v_z \frac{dv_z}{dt} \right), \quad (3.48)$$

mit der gesuchten Beschleunigung $d\vec{v}/dt$. Komponentenweise Betrachtung von Gleichung (3.48) führt auf ein Gleichungssystem mit drei Gleichungen und den drei unbekanntenen Komponenten der Beschleunigung, das direkt gelöst werden kann [63]. Die zweite Berechnungsmethode ist genauer, erfordert durch die Lösung der Gleichungen aber etwa 50 % mehr Rechenaufwand. Bei langsameren Partikeln sowie bei kleinen Geschwindigkeitsänderungen pro Zeitschritt ist der Fehler in der Regel so gering, dass zur Rechenzeiteinsparung die Näherungsmethode (3.44) eingesetzt werden kann.

3.7. Partikelemission

Alle simulierten Partikel müssen zu einem bestimmten Zeitpunkt in das Rechengebiet eingebracht, also emittiert werden. Dazu zählen sowohl Partikel, die bereits zu Beginn der Simulation vorhanden sind, wie zum Beispiel ein Hintergrundgas, als auch Partikel, die erst im Laufe der Rechnung

in das Rechengebiet eintreten, sei es durch Einströmung am Rand des Rechengebiets oder durch Ausströmung aus einem im Rechengebiet befindlichen Objekt, beispielsweise einem Triebwerk. Bei der Emission eines Partikels müssen alle für die weitere Simulation der Partikel relevanten Parameter festgelegt und dem Partikel zugeordnet werden. Vom Anwender werden dabei die Emissionsparameter für einzelne Partikelspezies festgelegt, wie zum Beispiel die Spezies der Elektronen. Die Startparameter der einzelnen Partikel werden dann je nach Spezieszugehörigkeit gebildet. Im Folgenden wird ein Überblick über die Parameter und die implementierten Einstellmöglichkeiten gegeben.

Anzahl Die Anzahl der zu emittierenden Partikel wird vom Anwender für jede auftretende Spezies separat angegeben. Dabei wird unterschieden zwischen initial emittierten Partikeln, die noch vor dem ersten Zeitschritt in das Rechengebiet gesetzt werden, und laufend emittierten Partikeln. Bei letzteren wird angegeben, wie viele Partikel pro Sekunde oder optional pro Iterationsschritt emittiert werden sollen. In jedem Iterationsschritt wird dann die entsprechende Anzahl an Partikeln ins Rechengebiet gesetzt. Generell können für jede Spezies auch mehrere Emissionen definiert werden, um zum Beispiel sowohl initiale als auch einströmende Partikel derselben Spezies berücksichtigen zu können. Anstelle der Vorgabe einer Anzahl an Partikeln kann auch ein Zustand, definiert durch Druck und Temperatur, in einem festgelegten Gebiet vorgegeben werden [40]. Der Zustand in dem Gebiet wird durch Mittelung über die vorhandenen Partikel ausgewertet und dann je nach Bedarf neue Partikel eingesetzt oder vorhandene Partikel entfernt, um den gewünschten Zustand zu erreichen. Möglich ist dabei die Mittelung über das gesamte Einsatzgebiet oder über jedes einzelne Element im Gebiet. Als weitere Option können alle vorhandenen Partikel im Einsatzgebiet gelöscht und durch neue Partikel mit dem gewünschten Zustand ersetzt werden.

Position Die Position der Partikel wird ebenfalls speziesabhängig im dreidimensionalen Raum vorgegeben. Dazu können geometrische Formen vorgegeben werden, in denen die Anzahl der zu emittierenden Partikel wahlweise per Zufall oder mit einer vorgegebenen Positionierung verteilt werden. Bei der Zufallsverteilung werden entsprechend der Form der Geometrie ein (z.B. im Fall einer Linie) bis drei (z.B. im Fall eines Kuboids) Zufallszahlen $R \in [0, 1]$ bestimmt und mittels Koordinatentransformation auf die Geometrie abgebildet, was zu einer Zufallsverteilung mit konstanten Wahrscheinlichkeiten über die Geometrie führt. Anwendungsfälle sind beispielsweise das Füllen des Rechengitters mit einem Hintergrundgas oder eine homogene Anströmung in einen Einströmrand. Eine nicht zufällige Positionierung innerhalb der Geometrie ist im Normalfall nur für Test- und Verifikationsfälle sinnvoll, bei denen die Ausgangsposition weniger Partikel exakt bekannt sein muss. Die wichtigsten, aktuell implementierten Geometrien sind Punkte, Linien, Kreise, Scheiben, zylindrische und Rechtecksprismen, mit denen sich die meisten Emissionsfälle abdecken lassen. Die entsprechenden Routinen sind vollkommen modular aufgebaut, so dass sie problemlos auf weitere Geometrien oder Verteilungen erweitert werden können.

Geschwindigkeit Die Bestimmung des initialen Geschwindigkeitsbetrags und der -richtung der Partikel erfolgt analog zur Position über die Spezieszugehörigkeit. Die gebräuchlichste Geschwindigkeitsverteilungsfunktion ist die ungerichtete Maxwell-Boltzmann-Verteilung bei einer vom Anwender vorgegebenen Temperatur, die durch Aufprägen einer Gaußverteilung in alle drei Raumrichtungen gebildet wird [20]. Zusätzlich können gerichtete Geschwindigkeiten aufgeprägt werden und Geschwindigkeitsrichtungen an die vorgegebenen Geometrien angepasst werden, z.B. tangential oder radial zu einem Kreis. Generell gilt auch hier, dass der modulare Aufbau die einfache Erweiterung mit zusätzlichen Geschwindigkeitsverteilungen ermöglicht.

Masse und Ladung Da Ruhemasse und Ladung der Partikel einer Spezies konstant sind, wird hier lediglich die Spezieszugehörigkeit gespeichert und die der Spezies entsprechenden Werte bei Bedarf abgerufen. Auch der Makropartikelfaktor, der die Anzahl der realen Teilchen pro Simulationpartikel repräsentiert, wird speziesabhängig gespeichert und mit Masse und Ladung multipliziert.

Sonstige Parameter Bei der Verwendung von DSMC werden zusätzliche Parameter wie z.B. die inneren Energien von Molekülen benötigt, welche z.B. in Form von Vibrations- und Rotationstemperaturen speziesabhängig festgelegt und den einzelnen zu emittierenden Partikeln zugewiesen werden.

3.8. Lokalisierung und Randbehandlung der Partikel

Die Partikel bewegen sich gemäß den vorigen Abschnitten vollkommen frei im dreidimensionalen Raum. Für die Bewegung an sich ist daher die Information, in welchem Gitterelement sich ein Partikel befindet, irrelevant. Für die Kopplung mit den elektromagnetischen Feldern muss diese Information jedoch zu jedem Zeitpunkt bekannt sein. Zum einen werden die Ladungs- und Stromdichten auf die Gitterknoten deponiert, zum anderen werden die Feldgrößen, die für die Berechnung der Lorentzkräfte verwendet werden, der gitterabhängigen DG-Lösung entnommen. Beim DSMC-Verfahren werden im Allgemeinen die Kollisionen zwischen den Partikeln innerhalb eines Elements simuliert und makroskopische Größen aus einer Auswertung aller Partikel in einem Element gewonnen, wofür jeweils ebenfalls das Element bekannt sein muss, in dem sich ein Partikel befindet. Die Lokalisierung und Verfolgung der Partikel kann dabei einen großen Anteil an der gesamten Rechenzeit darstellen, weshalb eine möglichst effiziente und schnelle Methode entwickelt und implementiert wurde, welche die Partikel auch bei ungewöhnlich geformten Elementen und Abständen im Bereich der Rechengenauigkeit zuverlässig lokalisiert und verfolgt. Als Lokalisierung wird dabei im Folgenden die initiale Zuordnung eines Partikels zu einem Gitterelement bezeichnet, während die Verfolgung sich auf die Zuordnung nach der Bewegung eines Partikels und auf die Identifizierung der durchflogenen Seiten bezieht. Die in diesem Kapitel erläuterten Methoden basieren zum Teil auf den

von Assous et al. [2] beschriebenen mathematischen Zusammenhängen zwischen der räumlichen Beziehung eines Punktes zu einem Tetraeder und den jeweils zwischen Punkt und Tetraederflächen aufgespannten Volumen, sowie auf der in [18] vorgestellten zweidimensionalen Methode zur Identifizierung von durchflogenen Kanten am Rand eines Rechengebiets durch die Betrachtung der jeweils vom Partikelgeschwindigkeitsvektor und den Vektoren vom Partikel zu den Elementknoten aufgespannten Volumen.

3.8.1. Lokalisierung

Die N_K Knoten einer Elementseite (s. Abb. 3.9) sind dann im mathematisch negativen Drehsinn (im allgemeinen als „Uhrzeigersinn“ bezeichnet) angeordnet, wenn gilt

$$(\vec{r}_{1,i} \times \vec{r}_{1,i+1}) \cdot \vec{n} > 0, \quad \text{für alle } i = 2, N_K - 1, \quad (3.49)$$

wobei $\vec{r}_{1,i}$ und $\vec{r}_{1,i+1}$ die Vektoren von Punkt 1 zu Punkt i bzw. Punkt $i + 1$ und \vec{n} der nach außen gerichtete Normalenvektor der Seite sind. Für die weiteren Betrachtungen zur Lokalisierung, Verfolgung und Randbehandlung der Partikel gilt nun Folgendes:

- Die Knoten einer Seite seien, vom Inneren des Elements aus betrachtet, im mathematisch negativen Drehsinn nummeriert. Sollte dies nicht der Fall sein, kann die Nummerierung mittels Gleichung (3.49) angepasst werden. Bei einer Anordnung im positiven Drehsinn gelten die Betrachtungen entsprechend mit umgekehrtem Vorzeichen.
- Die Berechnungen beruhen auf der Aufteilung der Seitenflächen der Elemente in Dreiecke.

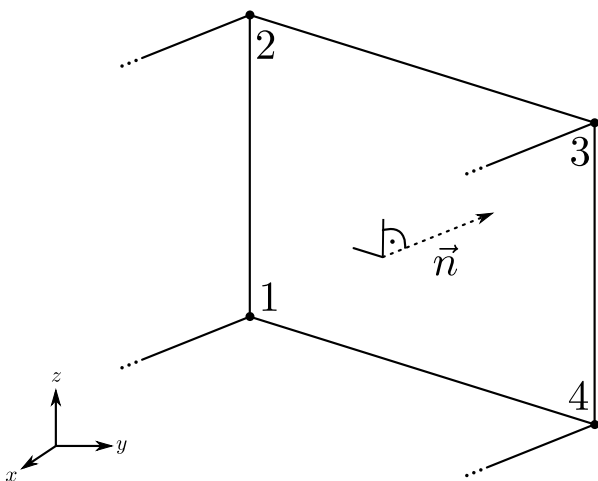


Abbildung 3.9.: Anordnung der Knoten einer Elementseite im mathematisch negativen Drehsinn.

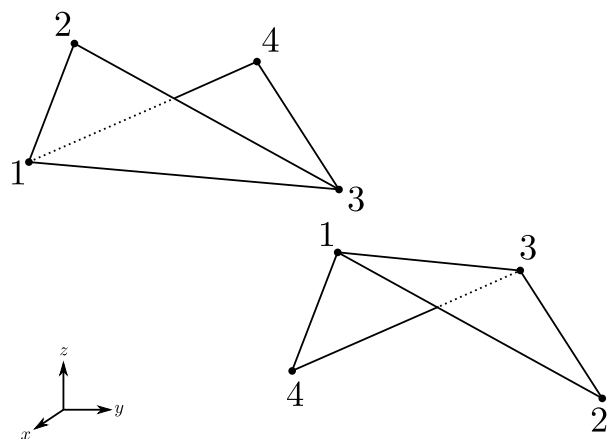


Abbildung 3.10.: Beide möglichen Einteilungen einer durch vier Knoten definierten Fläche in zwei Dreiecke.

Daher können die vorgestellten Methoden für beliebige, ungekrümmte, konvexe Elemente angewendet werden. Da das DG-SEM Verfahren Hexaedergitter voraussetzt, werden insbesondere diese hier beispielhaft betrachtet.

- Die Fläche einer Hexaederseite wird durch die vier Eckknoten der Seite definiert. Diese liegen nicht zwangsläufig in einer Ebene, daher wird die Seite in zwei Dreiecke eingeteilt, die durch die Kante zwischen den Knoten 1 und 3 geteilt werden (s. Abb. 3.10). Um zu gewährleisten, dass die Seitenfläche von beiden angrenzenden Elementen aus betrachtet identisch definiert ist, soll außerdem gelten, dass die Punkte 1 und 3 bei beiden angrenzenden Elementen identisch sind. Die Punkte 2 und 4 sind dann logischerweise vertauscht, siehe Abb. 3.11.

Um zu berechnen, auf welcher Seite einer beliebigen, durch drei Punkte definierten, Ebene sich ein Punkt $P(x, y, z)$ im Raum befindet, wird ein Volumen

$$V_P = \det \mathbf{P} = \det \begin{pmatrix} r_{P1,x} & r_{P2,x} & r_{P3,x} \\ r_{P1,y} & r_{P2,y} & r_{P3,y} \\ r_{P1,z} & r_{P2,z} & r_{P3,z} \end{pmatrix} = \langle \vec{r}_{P1}, \vec{r}_{P2}, \vec{r}_{P3} \rangle = (\vec{r}_{P1} \times \vec{r}_{P2}) \cdot \vec{r}_{P3} \quad (3.50)$$

aufgespannt (s. Abb. 3.12), wobei $\vec{r}_{P1,2,3}$ die Vektoren vom Punkt P zu den drei Dreieckspunkten sind. Dieses Volumen ist positiv, sofern die drei Vektoren ein Rechtssystem bilden, was genau dann der Fall ist, wenn sich der Punkt P „vor der Seite“ befindet, also auf der Seite der Ebene, von der aus betrachtet die Dreieckspunkte im negativen Drehsinn angeordnet sind. Liegt der Punkt exakt auf der Ebene, ist das Volumen Null. Mit dieser Beziehung kann nun bestimmt werden, ob sich ein Punkt P innerhalb eines beliebigen Hexaederelements befindet. Dabei muss zwischen konvexen (nach außen gewölbten) und konkaven (nach innen gewölbten) Seitenflächen unterschieden werden. Eine Seite ist dann konkav, wenn Knoten 4 hinter der von den anderen Knoten aufgespannten Ebene liegt, also in Gleichung (3.50) für den Punkt P der Knoten 4 eingesetzt wird und die resultierende Determinante $\det \mathbf{P} < 0$ ist. Da sich diese Information während einer Rechnung nicht ändert, kann sie initial bestimmt und gespeichert werden.

Abbildung 3.13 zeigt alle möglichen Positionen des Punktes P bezüglich konkaven und konvexen Seitenflächen. Aus Gleichung (3.50) werden die Determinanten $\det(\mathbf{P}_{D_1})$ für das Dreieck 1-2-3 und $\det(\mathbf{P}_{D_2})$ für das Dreieck 1-3-4 berechnet und es gilt:

- Konvexe Seite: P liegt vor oder auf der Seite, wenn $\det(\mathbf{P}_{D_1}) \geq 0$ und $\det(\mathbf{P}_{D_2}) \geq 0$.
- Konkave Seite: P liegt hinter der Seite, wenn $\det(\mathbf{P}_{D_1}) < 0$ und $\det(\mathbf{P}_{D_2}) < 0$.

Es ist sofort offensichtlich, dass der Punkt P sich nur dann innerhalb eines betrachteten Elements befindet, wenn er sich für keine Seitenfläche des Elements hinter der Seite befindet. Durch Betrachtung der Determinanten $\det(\mathbf{P}_{D_1})$ und $\det(\mathbf{P}_{D_2})$ sowie der Zusatzinformation, ob es sich jeweils um eine

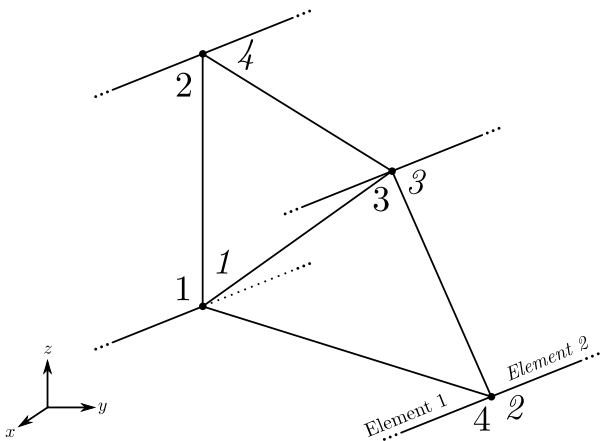


Abbildung 3.11.: Lokale Knotenbezeichnungen bei angrenzenden Elementen unter Berücksichtigung des Drehsinns und der definierten Kante zwischen Punkten 1 und 3.

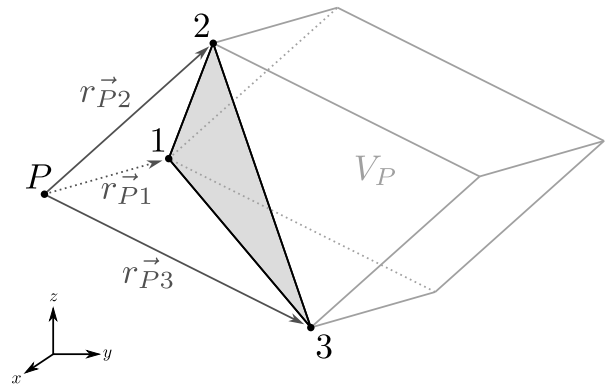


Abbildung 3.12.: Von den drei Vektoren von Punkt P zu den Knoten eines Dreiecks aufgespanntes Volumen.

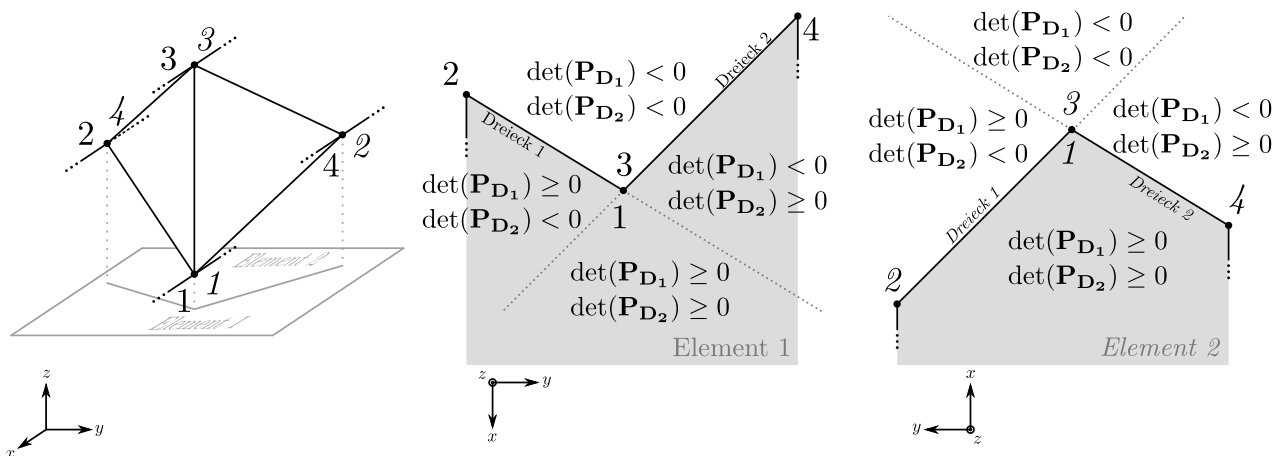


Abbildung 3.13.: Seitenfläche mit zwei angrenzenden Elementen (links). Projizierte Darstellung der Fläche für Element 1 (Mitte) und Element 2 (rechts). Die Dreiecke der Seite teilen den Raum in je vier Bereiche. Je nach Bereich, in dem sich ein Punkt P befindet, ergeben sich unterschiedliche Vorzeichen der beiden Determinanten $\det(\mathbf{P}_{D_1})$ und $\det(\mathbf{P}_{D_2})$.

konkave oder konvexe Seite handelt, kann also bestimmt werden, ob ein Punkt, also ein Partikel, sich innerhalb des Elements befindet. Bei Tetraederelementen müsste jeweils nur eine Determinante pro Seite betrachtet werden, bei Elementen mit mehr als 4 Knoten pro Seite kann analog eine Aufteilung in mehr als zwei Dreiecke vorgenommen werden und nach dem gleichen Prinzip verfahren werden. Ein Partikel, das sich exakt auf einer Seite befindet, wird als im Element befindlich angenommen. Theoretisch ist es mit dieser Methode möglich, die Partikel zu lokalisieren, indem die Berechnung für alle Partikel N_{Part} für jeweils alle Elemente N_{Elem} durchgeführt wird. Dies erfordert jedoch einen sehr hohen Rechenaufwand, da für jedes Partikel potentiell alle Elemente durchsucht werden müssen, also $N_{Part} \cdot N_{Elem}$ Überprüfungen durchgeführt werden müssen. Eine Verbesserung kann erzielt

werden, indem ein kartesisches virtuelles Hintergrundgitter über das gesamte Rechengebiet gelegt wird. Das Hintergrundgitter ist strukturiert, d.h. die einzelnen Zellen sind durch einen Index in x-,y- und z-Richtung definiert, beginnend mit der Zelle (0,0,0) im Ursprung des Koordinatensystem. Die Lokalisierung eines Punktes P in diesem Hintergrundgitter ist sehr einfach und schnell durch

$$k_d = \text{int} \left(P_d \cdot \frac{1}{\Delta L_d} \right) \quad \text{mit} \quad d = x, y, z \quad (3.51)$$

gegeben, wobei k_d die ganzzahligen Hintergrundzellennummern in x-,y- und z-Richtung und ΔL_d die Zelllänge des Hintergrundgitters in der entsprechenden Richtung sind. In einem initialen Schritt wird nun berechnet, welche Elemente sich in welchen Hintergrundgitterzellen befinden, indem alle Knoten jedes Elements bezüglich des Hintergrundgitters lokalisiert werden. Allen Zellen, in denen sich Knoten des Elements befinden, sowie allen dazwischenliegenden Zellen, werden die jeweiligen Elemente zugeordnet und die Zuordnung gespeichert. Während der Rechnung müssen dann nach der Lokalisierung des Partikels im Hintergrundgitter nur noch die der entsprechenden Hintergrundgitterzelle zugeordneten Elemente durchsucht werden, was den Rechenaufwand auf maximal $N_{Part} \cdot N_{ElemProHGGZelle}$ reduziert.

3.8.2. Verfolgung

Nach der initialen Lokalisierung des Partikels beim Einsetzen in das Rechengebiet wird dieses in jedem Zeitschritt abhängig von Geschwindigkeit und angreifenden Kräften oder Kollisionen bewegt. Nach der Bewegung ist zunächst unbekannt, in welchem Element sich das Partikel befindet, so dass es erneut auf dem Rechengitter lokalisiert werden muss. Die einfachste Variante wäre dabei, das im vorigen Abschnitt erläuterte Verfahren erneut anzuwenden, was jedoch aus zwei Gründen nicht sinnvoll ist: Zum einen ist diese Methode aufwändiger als nötig. Die Information, in welchem Element das Partikel im vorigen Zeitschritt war, ist vorhanden und kann verwendet werden, um die Lokalisierung zielgerichteter und damit schneller durchzuführen. Zum anderen würde mit dieser Methode nur berechnet, in welchem Element sich das Partikel nun befindet, nicht aber welchen Weg es dorthin zurückgelegt hat. Insbesondere bei einer Bewegung in der Nähe einer Elementecke kann nicht mehr einfach nachvollzogen werden, durch welche Seiten sich das Partikel bewegt hat. Dies bedeutet, dass unter Umständen Hindernisse wie z.B. je nach Simulationsfall Elektroden oder Flugkörper durchfliegen werden können, wie in Abbildung 3.14 anschaulich zu sehen ist.

Ein sinnvollerer Ansatz ist es daher, das Partikel auf dem Weg durch das Rechengebiet zu verfolgen und dabei direkt eventuell an den durchflogenen Elementseiten auftretende Randbedingungen zu berücksichtigen. Je nach Partikelgeschwindigkeit und Zeitschrittweite ist die Wahrscheinlichkeit groß, dass das Partikel sich immer noch im selben Element befindet wie im letzten Zeitschritt. Dies wird

zuerst überprüft, indem die im vorigen Abschnitt erläuterte Methode auf dieses Element angewandt wird. Sollte das Partikel nicht mehr in diesem Element zu finden sein, wird berechnet, durch welche Seite des Elements sich das Partikel bewegt hat. Die Bewegung des Partikels innerhalb des Zeitschritts erfolgt dabei mit konstanter Geschwindigkeit, d.h. auf einer geraden Flugbahn. Nachdem die Seite identifiziert wurde, wird als nächstes das an die Seite angrenzende Nachbarelement überprüft. Sollte das Partikel hier auch nicht aufzufinden sein, wird in diesem Element wieder berechnet, durch welche Seite das Partikel geflogen ist. Diese Prozedur wird solange wiederholt, bis das Partikel gefunden ist oder das Rechengebiet verlassen hat. Die Seiten müssen, wie bereits erwähnt, in Dreiecke unterteilt werden, so dass im Endeffekt untersucht wird, durch welches Dreieck das Partikel geflogen ist. Bei der Überprüfung des Elements des vorigen Zeitschritts werden bereits die Determinanten für jedes Dreieck jeder Seite in Gleichung (3.50) berechnet. Die Anzahl der zu überprüfenden Seiten kann also reduziert werden, da das Partikel sich logischerweise nur durch eines der Dreiecke bewegt haben kann, bei denen die Determinante negativ ist, d.h. das Partikel sich vom Element aus betrachtet hinter dem Dreieck befindet. Da dies jedoch bei mehreren Dreiecken der Fall sein kann, müssen diese genauer untersucht werden:

Die Flugbahn zwischen alter und neuer Partikelposition, also der Geschwindigkeitsvektor \vec{v} , schneidet dann das beliebige Dreieck 1-2-3 im Raum, wenn gilt:

$$\det \begin{pmatrix} v_x & r_{i,x} & r_{j,x} \\ v_y & r_{i,y} & r_{j,y} \\ v_z & r_{i,z} & r_{j,z} \end{pmatrix} = (\vec{v} \times \vec{r}_i) \cdot \vec{r}_j \geq 0, \text{ für } i = 1, 2, 3 \text{ und } j = 2, 3, 1 \quad (3.52)$$

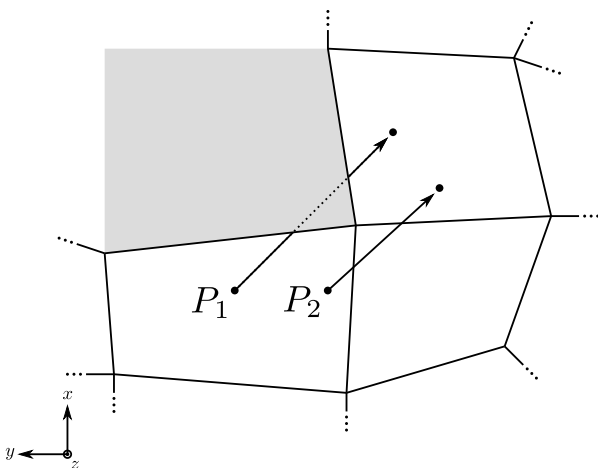


Abbildung 3.14.: Ohne exakte Verfolgung der Flugbahn würden beide Partikel P_1 und P_2 nach ihrer Bewegung im gleichen Element lokalisiert, obwohl P_1 das Rechengebiet verlässt (grauer Bereich). Schematische Schnittdarstellung.

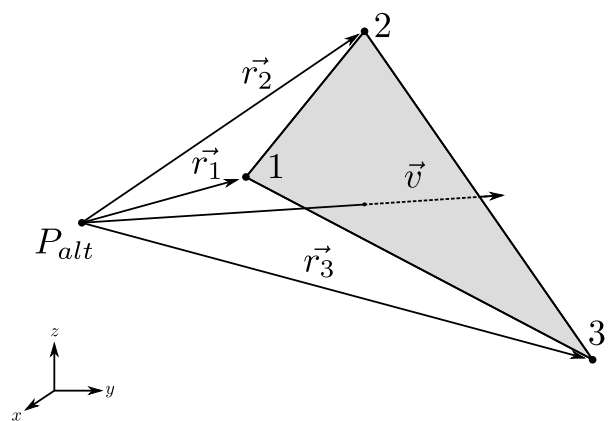


Abbildung 3.15.: Schnitt des Geschwindigkeitsvektors \vec{v} mit einem beliebigen Dreieck.

wobei \vec{r}_i und \vec{r}_j die Vektoren zwischen der Partikelposition im letzten Zeitschritt P_{alt} und den Knoten i bzw. j des Dreiecks sind. Wichtig ist hier wieder die Anordnung der Knoten 1 bis 3 im mathematisch negativen Drehsinn. Anschaulich bedeutet dies, dass der Geschwindigkeitsvektor zusammen mit den Vektoren zu den Knoten ein Rechtssystem bildet und damit analog zu Gleichung (3.50) im „Inneren“ der Kante durch die Dreiecksebene stößt (s. Abb. 3.15). Ist dies bei allen drei Kanten der Fall, schneidet der Vektor das Dreieck.

Um zu überprüfen, ob das Partikel eine Elementseite durchflogen hat, muss bei Hexaedern zusätzlich wieder zwischen konvexen und konkaven Seiten unterschieden werden. Liegt eine konvexe Seite vor, hat das Partikel die Seite durchflogen, wenn eines der beiden Dreiecke durchflogen wurde. Der konkave Fall ist dagegen komplexer. Da, wie in Abbildung 3.16 dargestellt, der Vektor \vec{v} mehrere Seiten schneiden kann, muss in diesem Fall überprüft werden, welche der beiden Seiten zuerst geschnitten wird. Mit Gleichung (3.50) wurde bereits das Volumen berechnet, das von den Vektoren zwischen aktueller Partikelposition und den Knoten des Dreiecks aufgespannt wurde. Daher ist es sinnvoll, diese Information weiter zu verwenden. Wird zusätzlich für die hier relevanten Dreiecke das entsprechende Volumen für die Partikelposition des letzten Zeitschritts berechnet, kann bestimmt werden, welche Seite zuerst vom Geschwindigkeitsvektor geschnitten wird. Abbildung 3.17 zeigt die Partikelpositionen vor und nach der Bewegung sowie ein relevantes Dreieck in einer

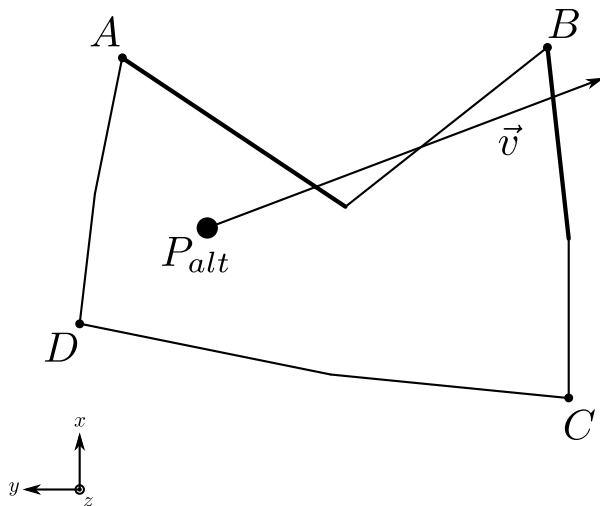


Abbildung 3.16.: Schematische Schnittdarstellung eines Elements. Da die Seite AB durch die Unterteilung in zwei Dreiecke konvex ist, kann der Geschwindigkeitsvektor \vec{v} des Partikels sowohl ein Dreieck der Seite AB als auch ein Dreieck der Seite BC schneiden.

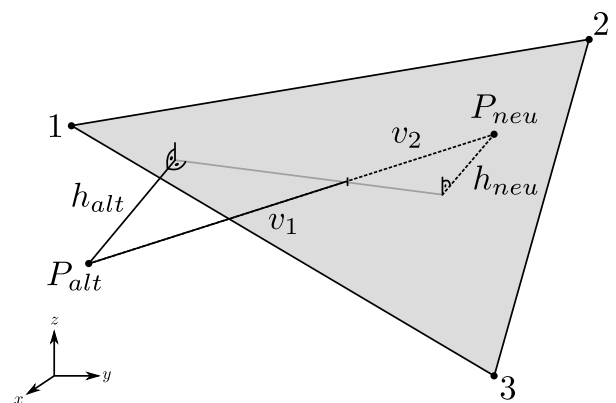


Abbildung 3.17.: Berechnung des jeweiligen Abstandes von letzter und aktueller Partikelposition P_{alt} und P_{neu} zur durchflogenen Seite.

Schnittdarstellung. Es ist aufgrund der kongruenten Dreiecke leicht ersichtlich, dass

$$\frac{v_1}{v_2} = \frac{h_{alt}}{h_{neu}}, \quad (3.53)$$

wobei v_1 und v_2 respektive die Abstände entlang der Flugbahn zwischen der Seite und der alten Partikelposition P_{alt} und der neuen Position P_{neu} sind. h_{alt} und h_{neu} sind die entsprechenden senkrechten Abstände zur Seite. Für das Volumen des Tetraeders zwischen jeweiliger Partikelposition und Seite gilt bekanntermaßen

$$V_{tetra} = \frac{1}{3}G \cdot h = \frac{1}{6}V_P, \quad (3.54)$$

mit dem betrachteten Dreieck als Grundfläche G und dem Spatvolumen V_P aus Gleichung (3.50). Einsetzen in Gleichung (3.53) ergibt

$$\frac{v_1}{v_2} = \frac{V_{P_{alt}}}{V_{P_{neu}}}, \quad (3.55)$$

d.h. das Verhältnis der beiden Volumen ergibt direkt das Verhältnis der Abstände auf der Flugbahn. Je kleiner dieses Verhältnis ist, desto näher liegt also die Partikelposition des vorigen Zeitschritts an dem betrachteten Dreieck. Eine Berechnung des Verhältnisses für alle geschnittenen Dreiecke zeigt damit, welche Seite zuerst durchflogen wird. Diese Seite muss dann abgespeichert werden, da das Partikel unter Umständen nach Durchquerung eines oder mehrerer Nachbarelemente wieder zurück in dieses Element kommt und verhindert werden muss, dass wieder dieselbe Seite ausgewählt wird, was zu einer Endlosschleife führen würde. Ein Ablaufschema der gesamten Randbehandlung für jeweils ein Partikel ist in Abbildung 3.18 dargestellt.

3.8.3. Randbehandlung

Ein großer Vorteil der im vorigen Abschnitt beschriebenen Methode der Partikelverfolgung ist, dass direkt beim Überqueren jeder einzelnen Seite überprüft werden kann, ob für diese Seite Randbedingungen für Partikel definiert sind. Ist dies der Fall, kann die entsprechende Behandlung der Partikel sofort durchgeführt werden, bevor im Nachbarelement weitergesucht wird. Es gibt dabei eine Vielzahl von möglichen Randbedingungen, die je nach Material des Randes oder Partikelspezies unterschiedlich ausfallen. Folgende häufig verwendete Randbedingungen für Partikel wurden implementiert. Diese lassen sich aber durch den modularen Aufbau des Verfahrens beliebig erweitern. Ränder können dabei auch im Inneren des Rechengebiets auftreten, z.B. bei der Umströmung eines Körpers.

Offener Rand Der häufigste und zugleich einfachste Rand ist der offene Rand, bei dem Partikel aus dem Rechengebiet ausströmen. Beim Überqueren des offenen Randes wird das Partikel einfach

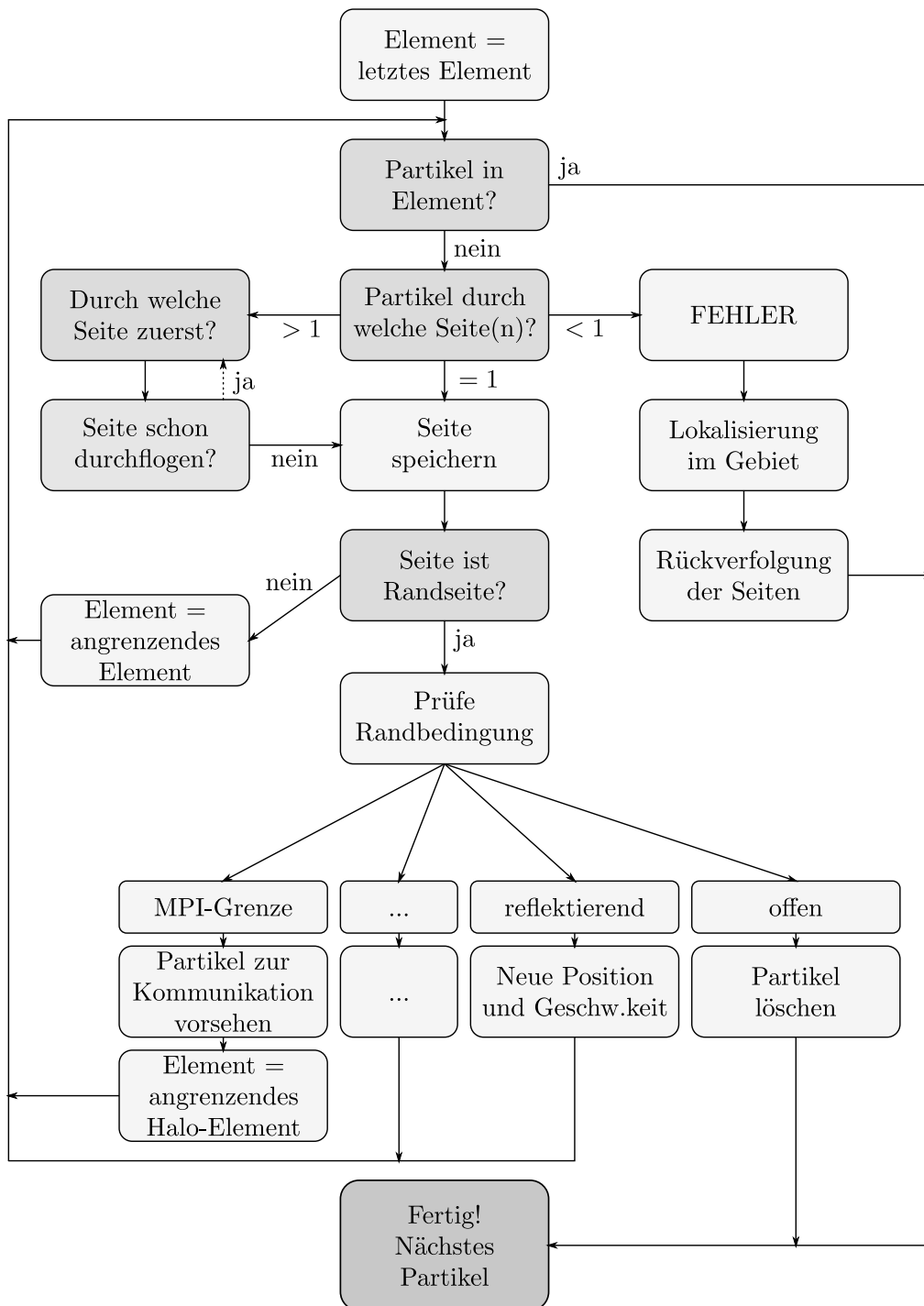


Abbildung 3.18.: Ablaufschema der Partikelverfolgung und -randbehandlung.

gelöscht und die entsprechende Position im Speicher des Rechners kann im nächsten Zeitschritt von einem neu in das Gebiet eingesetzten Partikel überschrieben werden. Da mit dem Partikel auch instantan die zugehörige Ladung verschwindet, ist darauf zu achten, dass bei einer Ausströmbedingung der offene Rand weit genug vom zu betrachtenden Phänomen entfernt ist, so dass der daraus resultierende Fehler nicht zum Tragen kommt.

Reflektierender Rand Beim perfekt reflektierenden Rand wird das Partikel elastisch, also mit unveränderter Energie und damit unverändertem Geschwindigkeitsbetrag, an der Randoberfläche reflektiert. Dabei ist der Eintrittswinkel gleich dem Austrittswinkel. Die Berechnung der Partikelposition und -geschwindigkeit nach der Reflektion kann dabei über die Spiegelung der alten und der aktuellen (noch unreflektierten) Partikelposition an der durchflogenen Seite erfolgen: Die Position P^* eines an einem Dreieck gespiegelten Punktes P berechnet sich mit

$$P^* = P + 2s \cdot \vec{n}, \quad (3.56)$$

wobei \vec{n} der von P nach P^* zeigende Normaleneinheitsvektor der Seitenfläche und s der senkrechte Abstand von P zur Seitenfläche sind. Sollte der Normaleneinheitsvektor nicht bekannt sein, kann er durch das normierte Kreuzprodukt zweier Seitenkanten berechnet werden. Es sei \vec{b} der Vektor von einem der Dreiecksknoten zum ungespiegelten Punkt P und \vec{a} ein Vektor unbekannter Länge von demselben Dreiecksknoten in Richtung des Schnittpunktes zwischen dem Dreieck und der Strecke $\overline{PP^*}$ (s. Abb 3.19), dann gilt

$$\vec{a} = \vec{n} \times (\vec{b} \times \vec{n}) = \vec{b}(\vec{n}\vec{n}) - \vec{n}(\vec{b}\vec{n}) = \vec{b} - \vec{n}(\vec{b}\vec{n}). \quad (3.57)$$

Außerdem ist

$$\sin(\alpha) = \frac{s}{|\vec{b}|} \text{ und } |\vec{a} \times \vec{b}| = |\vec{a}| |\vec{b}| \sin(\alpha), \quad (3.58)$$

mit dem von \vec{a} und \vec{b} eingeschlossenen Winkel α . Daraus ergibt sich für den Abstand s

$$s = \frac{|\vec{a} \times \vec{b}|}{|\vec{a}|}. \quad (3.59)$$

Eingesetzt in Gleichung (3.56) kann damit der gespiegelte Punkt P^* berechnet werden. Durch Spiegelung der noch unreflektierten Partikelposition ergibt sich dann direkt die neue Partikelposition. Der neue Geschwindigkeitsvektor berechnet sich aus der Richtung von gespiegelter alter zu gespiegelter neuer Partikelposition (s. Abb. 3.20). Im Falle einer diffusen Reflektion werden die Partikel nach dem Auftreffen auf die Wand zufällig in den Halbraum gestreut, wobei bei inelastischer Reflektion zusätzlich Energie mit der Wand ausgetauscht und die Geschwindigkeit entsprechend verringert oder erhöht wird [47].

Elektroden Elektroden stellen eine Mischung aus reflektierendem und offenem Rand dar, je nach Ladung des Partikels und der Elektrode. Trifft beispielsweise ein Elektron auf eine Anode, wird dieses entsprechend dem offenen Rand gelöscht. Trifft ein Ion auf eine Kathode, wird es reflektiert und neutralisiert, d.h. aus dem Ion wird ein Atom bzw. Molekül.

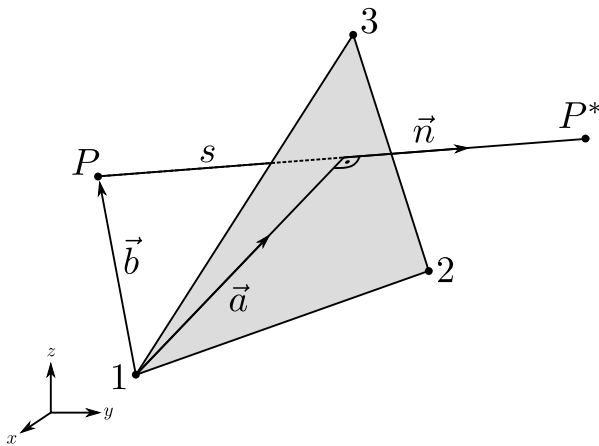


Abbildung 3.19.: Spiegelung eines Punktes P an der durch das Dreieck 1-2-3 aufgespannten Ebene.

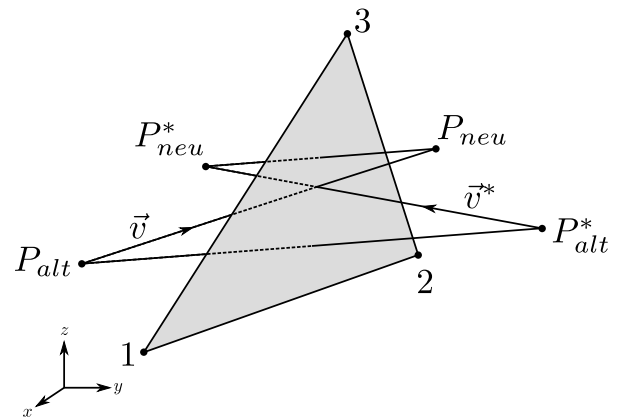


Abbildung 3.20.: Spiegelung des Geschwindigkeitsvektors \vec{v} durch Spiegelung der alten und aktuellen Partikelposition P_{alt} und P_{neu} .

Periodische Ränder Zu Beginn der Rechnung werden Verschiebungsvektoren der periodischen Ränder definiert, so dass ein Partikel, das auf einen periodischen Rand trifft, mit diesem Verschiebungsvektor verschoben wird. Generell beträgt die Zahl der möglichen und zu prüfenden Verschiebungen $3^{N_{vv}} - 1$ bei N_{vv} verwendeten Verschiebungsvektoren.

3.8.4. Parallelisierung: Lokalisierung und Verfolgung

Die Parallelisierung des Gesamtverfahrens wird, wie bereits erwähnt, durch eine Gebietszerlegung realisiert. Dadurch muss sowohl beim Einbringen der Partikel als auch beim Übertritt der Gebietsgrenzen Kommunikation zwischen den Prozessen stattfinden, um die Partikel korrekt zu bewegen.

Lokalisierung Die Lokalisierung, also die Zuordnung eines Partikels zu einem Element ohne vorige Information, findet bei der Emission von Partikeln ins Rechengebiet statt. Dies kann, je nach Simulation, nur einmal zu Beginn der Rechnung geschehen (z.B. bei einer Expansion eines ablatierten Plasmas in ein Vakuum) oder es müssen in jedem Zeitschritt neue Partikel eingesetzt werden (z.B. bei einem Triebwerk). Da jeder Prozess nur die Informationen seines eigenen Rechengebiets besitzt, ergibt sich bei einer Emission über mehrere Gebiete das Problem, dass weder die Anzahl noch die Verteilung der zu emittierenden Partikel in den einzelnen Gebieten bekannt ist. Aktuell sind hierfür zwei grundsätzliche Varianten möglich: Bei der ersten Variante, die für niedrige Partikelzahlen geeignet ist, berechnet ein Prozess die benötigten Parameter aller einzusetzenden Partikel und kommuniziert diese an alle anderen Prozesse. Bei der zweiten Variante berechnet jeder Prozess einen Anteil der einzusetzenden Partikel und kommuniziert dann die Partikel an alle anderen Prozesse, wodurch für große Partikelzahlen der Rechenaufwand und die Kommunikation pro Prozess minimiert

werden. Es wird automatisch das erste Verfahren bei weniger als 10 eingesetzten Partikeln pro Prozess verwendet. In beiden Fällen werden nach Empfang aller Partikel durch alle Prozesse diese von den einzelnen Prozessen, wie in Abschnitt 3.8.1 beschrieben, lokalisiert und nur diejenigen Partikel weiterverwendet, die im jeweiligen Rechengebiet liegen. Andere potentielle Partikelparameter wie Geschwindigkeit oder innere Energien werden anschließend lokal in den einzelnen Prozessen festgelegt, da diese auf Verteilungsfunktionen basieren und unabhängig von den Partikeln in anderen Prozessen sind. Generell sind beide Methoden durch den hohen Kommunikationsaufwand vor allem für Simulationen, bei denen jeden Zeitschritt neue Partikel eingesetzt werden, eine hohe Belastung hinsichtlich des Rechenaufwands und sollten mittelfristig durch eine verteilte Methode ohne Kommunikation ersetzt werden, bei der initial die in den Gebieten der einzelnen Prozesse befindlichen Anteile am Einsatzgebiet bestimmt werden und jeder Prozess dann ohne Kommunikation eine entsprechende Zahl an Partikeln einsetzen kann.

Verfolgung und Randbehandlung Sobald ein Partikel das Rechengebiet eines Prozesses verläßt, muss identifiziert werden, in welches angrenzende Gebiet und in welches dortige Element es eintritt. Diese Information kann bei der Gebietszerlegung direkt für die Randseiten des jeweiligen Gebiets gespeichert werden. Ein Partikel kann also bei Verlassen des Gebiets an den angrenzenden Prozess kommuniziert und dort weiterbewegt werden. Da allerdings unter Umständen in diesem angrenzenden Prozess sofort eine weitere Gebietsgrenze durchflogen werden kann, muss das Partikel in diesem Fall nochmals an einen dritten Prozess kommuniziert werden. Dies kann sich noch mehrmals wiederholen, bis das Partikel endgültig lokalisiert ist (s. Abb. 3.21). Da alle nicht beteiligten Prozesse auf das Ende dieser Lokalisierung warten müssen, um mit dem nächsten Schritt, der Deposition der Ladungen, beginnen zu können, ist diese Methode sehr ineffizient. Gemeinsam mit J. Neudorfer [55], M. Pfeiffer [65] und A. Stock [72] wurde daher eine effizientere Methode entwickelt und implementiert. Dabei wird um jedes Rechengebiet ein sogenanntes „Halo“-Gebiet gelegt, in dem die Elemente der Nachbarprozesse bis zu einem Abstand r , welchen ein Partikel maximal in einem Zeitschritt Δt durchqueren kann, als Kopie beinhaltet sind (s. Abb. 3.22). Der Abstand berechnet sich dabei durch

$$r = v_{max} \cdot \Delta t, \quad (3.60)$$

wobei v_{max} die maximale Geschwindigkeit eines Partikels ist. Theoretisch ist die maximale Geschwindigkeit nahe der Lichtgeschwindigkeit, so dass $v_{max} = c$ gewählt werden kann. Dies ist bei PIC-Simulationen, bei denen die Maxwellgleichungen zeitgenau gelöst werden und die Lichtgeschwindigkeit aufgelöst wird, ein sinnvoller Wert. Wird der Zeitschritt jedoch angehoben, z.B. bei reinen DSMC-Simulationen oder wenn aufgrund elektrostatischer Betrachtungen die Zeitschrittweite von der Partikelgeschwindigkeit und nicht von der Wellenausbreitungsgeschwindigkeit bestimmt wird (s. Kapitel 3.5.4), wird r mit $v_{max} = c$, wie aus Gleichung (3.60) sofort ersichtlich, so groß,

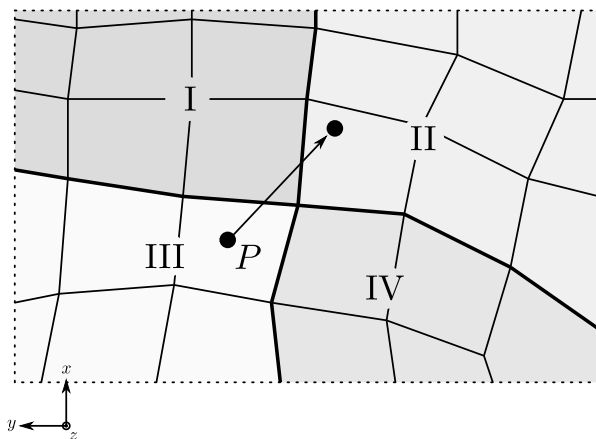


Abbildung 3.21.: Ineffiziente Verfolgung eines Partikels P durch mehrere Gebietsgrenzen: Prozess III übergibt an I, I anschließend an II.

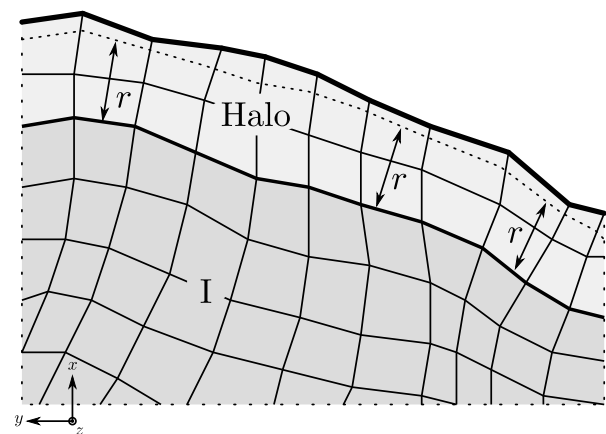


Abbildung 3.22.: Haloregion eines Prozesses bei maximaler von einem Partikel innerhalb eines Zeitschritt zurückgelegter Strecke r .

dass im Endeffekt das gesamte Rechengebiet als Halogebiet definiert würde. In diesem Fall muss tatsächlich die maximale Partikelgeschwindigkeit v_{max} verwendet werden. Da diese im Verlauf der Rechnung variieren kann, muss sie zu Beginn gut abgeschätzt werden oder das Halogebiet muss in regelmäßigen Abständen der maximalen Geschwindigkeit angepasst werden. Letzteres wurde bisher nicht implementiert, da normalerweise eine Abschätzung möglich ist und die Neuerstellung des Halogebiets einen großen Rechenaufwand bedeutet.

Da sich ein Partikel nicht weiter vom lokalen Rechengebiet entfernen kann als das Halogebiet groß ist, wird auf diese Weise sichergestellt, dass nur eine einzige Kommunikation stattfinden muss. Sämtliche Randbehandlungen und Gebietsüberschreitungen finden im Halogebiet des Ursprungsprozesses statt, lediglich am Ende der Partikelverfolgung muss das Partikel an den Prozess gesendet werden, in dessen Gebiet es sich nach der Bewegung befindet. Bei periodischen Rändern wird das Halogebiet entsprechend ebenfalls periodisch für die Nachbarprozesse erweitert und das Partikel wie im seriellen Fall beim Überschreiten der periodischen Ränder mittels der Verschiebungsvektoren neu platziert.

3.9. Deposition

Die Quellterme der PHM-Maxwellgleichungen (Gl. (3.13)-(3.16)) sind die Ladungsdichte ρ und die Stromdichte \vec{j} . Diese werden aus der Verteilung der im Rechengebiet befindlichen Partikel bestimmt. Da die Lösung der Maxwellgleichungen auf dem Rechengitter erfolgt, die Partikel jedoch frei im Raum bewegt werden, müssen die Ladungs- und Stromdichten der Partikel auf dem Gitter an den Gaußpunkten deponiert werden (s. Kapitel 3.2.2), welche zum besseren Verständnis in Abbildung 3.23 beispielhaft für einen Element in Würfelform dargestellt sind. Um eine Glättung der

Ladungsverteilung zu erreichen, werden die Partikel dabei häufig nicht als Punktladungen, sondern als Ladungswolken betrachtet, da ein simuliertes Partikel, wie bereits erläutert, eine große Anzahl realer Partikel repräsentiert. Mehrere Methoden zur Deposition der Ladungen werden im Folgenden vorgestellt und in Kapitel 4.4 näher hinsichtlich ihrer Vor- und Nachteile sowie der Anwendungsfelder untersucht und bewertet.

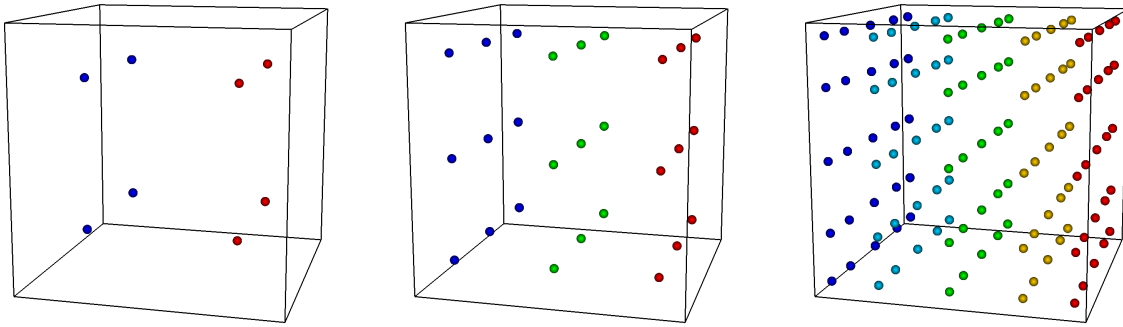


Abbildung 3.23.: Position der Gaußpunkte in einem Element (hier ein Einheitswürfel) bei erster Ordnung (links, $2 \times 2 \times 2 = 8$ Punkte), zweiter Ordnung (mitte, 27 Punkte) und vierter Ordnung (rechts, 125 Punkte). Die Farben dienen nur der besseren Visualisierung.

3.9.1. Elementmittelwertmethode

Eine gängige Depositionsmethode ist die Verwendung von Elementmittelwerten [6, 31]. Hierbei werden die Ladungs- und Stromdichten in einem Element mit dem Volumen V_E berechnet durch Aufsummieren der Ladungen aller $N_{P,E}$ im Element befindlichen Partikel gemäß

$$\rho = \frac{1}{V_E} \sum_{i=1}^{N_{P,E}} Q_i \quad (3.61)$$

$$\vec{j} = \frac{1}{V_E} \sum_{i=1}^{N_{P,E}} Q_i \cdot \vec{v}_i. \quad (3.62)$$

Die so berechnete Ladungsdichte wird als konstanter Wert auf die Gaußpunkte des gesamten Elements deponiert (s. Abb. 3.24), unabhängig von der Ordnung des Maxwelllöser und damit der Anzahl der Gaußpunkte im Element, entspricht also einer Deposition nullter Ordnung. Der große Vorteil dieser Methode ist der geringe Rechenaufwand, da lediglich die Ladungen und Ströme der Partikel aufsummiert werden müssen. Bei Verwendung des Maxwelllöser mit hoher Ordnung, bei dem die Auflösung durch eine größere Anzahl von Gaußpunkten und nicht der Elemente erhöht wird, gehen allerdings die Informationen über Dichteunterschiede innerhalb des Elements verloren. Zusätzlich ergeben sich an den Elementgrenzen Sprünge bzw. hohe Dichtegradienten durch die unterschiedlichen

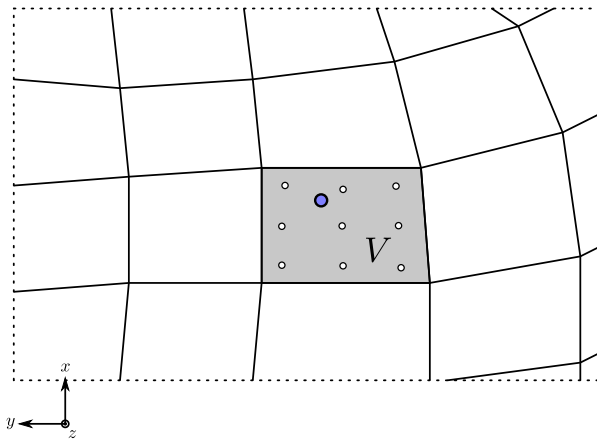


Abbildung 3.24.: Verteilung der Ladungs- und Stromdichte eines Simulationspartikels (blau) auf die Gaußpunkte eines Elements mittels Elementmittelwertmethode.

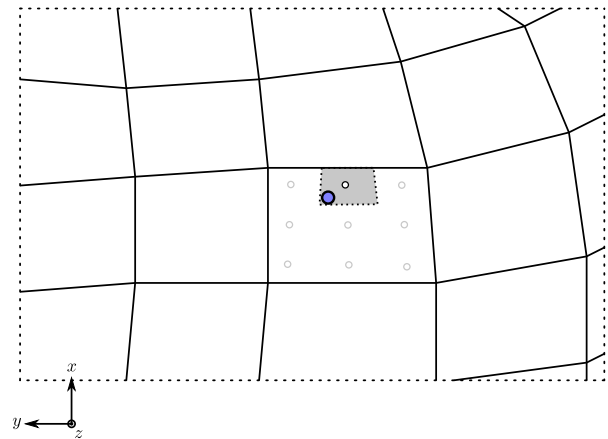


Abbildung 3.25.: Schema der Deposition einer Ladung auf den nächstgelegenen Gaußpunkt.

Dichtewerte in benachbarten Elementen. Ein weiterer Nachteil sind die durch die Elementmittelwertmethode entstehenden Sprünge in den Ladungs- und Stromdichten beim Übertritt von Partikeln von einer in die andere Zelle. Diese Sprünge können bei entsprechend hohen Partikelladungen zu starken Oszillationen in den entstehenden Feldern führen.

3.9.2. Direkte Deposition auf den nächsten Gaußpunkt

Die direkte Deposition auf den nächstgelegenen Gaußpunkt eines Elements (Abbildung 3.25) ermöglicht eine der Ordnung des DG-Verfahrens entsprechende Auflösung der Quellterme innerhalb eines Elements. Hierfür werden die Partikelkoordinaten innerhalb ihres Elements in den in Kapitel 3.2.2 erwähnten $[-1,1]$ Raum transformiert. Da die Gaußpunkte in diesem abgebildeten System bekannte und in alle Richtungen identische Koordinaten besitzen, können die Partikel ohne großen Rechenaufwand, d.h. ohne Abstandsberechnung zu allen Gaußpunkten, dem Gaußpunkt zugeordnet werden, der dem Partikel am nächsten ist. Die Division durch das den Gaußpunkt umschließende Teilvolumen des Elements ergibt direkt die Ladungs- bzw. Stromdichte, die am jeweiligen Gaußpunkt als Quelle in den Maxwelllöser eingebracht wird. Der Vorteil dieser Methode ist die sehr schnelle Deposition, insbesondere da bei der Interpolation der Felder auf die Partikelpositionen die Abbildung auf den $[-1,1]$ -Würfel ohnehin durchgeführt werden muss und damit hierfür kein zusätzlicher Rechenaufwand nötig ist. Von Nachteil ist die lokale Begrenzung der Simulationspartikel, die damit nicht mehr über mehrere Elemente verteilt sind, was zu hohen Dichtegradienten und damit einhergehenden starken Feldern innerhalb eines Elements führt, die die Stabilität der Lösung beeinträchtigen, was in Kapitel 4.4 dargestellt wird.

3.9.3. Formfunktionsmethode

Um die Nachteile der Elementmittelwert- und Nächster-Gaußpunkt-Methoden auszugleichen, werden polynomiale Formfunktionen verwendet, um die Ladungs- und Stromdichten der Partikel über ein sphärisches Gebiet zu verteilen (s. Abbildung 3.26). Dabei werden die einzelnen Simulationspar-

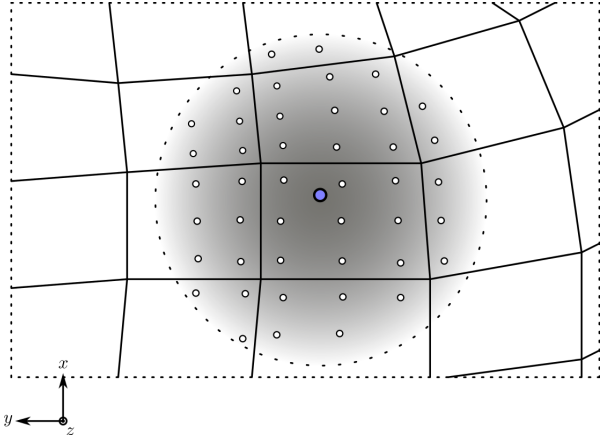


Abbildung 3.26.: Verteilung der Ladungs- und Stromdichte eines Simulationpartikels (blau) mittels Formfunktion.

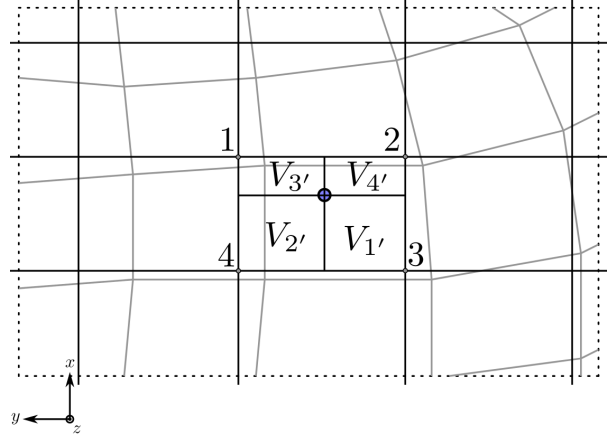


Abbildung 3.27.: Schema der volumengewichteten Deposition der Ladung eines Partikels auf die Knoten der umschließenden Hintergrundgitterzelle.

tikel quasi als Partikelwolken mit einer definierten Verteilung der Ladungen innerhalb der Wolke betrachtet, d.h es wird eine stetige Funktion von ρ und \vec{j} über das Kugelvolumen definiert. Jacobs und Hesthaven [35] untersuchten zweidimensionale Formfunktionen und fanden eine optimale Form hinsichtlich Rechenaufwand und Genauigkeit, die von A. Stock [72] auf die dreidimensionale Form

$$S(r_p) = \frac{1}{2B(1.5, \alpha + 1)\pi R_S^3} \left[1 - \left(\frac{r_p}{R_S} \right)^2 \right]^\alpha, |r_p| = [0, R_S] \quad (3.63)$$

erweitert wurde. Dabei ist R_S der Radius der Partikelwolke, r_p der Abstand der Partikelposition zum Punkt, an dem die Dichten deponiert werden sollen, B die Betafunktion und α der Polynomexponent. Die Formfunktion S stellt dabei die normalisierte Dichte dar, die dann mit der Ladung des Partikels multipliziert wird, um die Ladungsdichte im Abstand r_p zu erhalten. Weitere Multiplikation mit der Partikelgeschwindigkeit \vec{v}_i ergibt analog zu Gleichung (3.62) die Stromdichte. Je nach Wahl von α ist die Verteilung innerhalb der Wolke mehr oder weniger stark zentriert, wie Abbildung 3.28 zeigt. Der Radius R_S kann theoretisch beliebig gewählt werden (Abbildung 3.29) und wird in Kapitel 4.4 in Bezug auf die Ladungserhaltung und -verteilung sowie den Rechenaufwand untersucht.

Ein großer Nachteil der Formfunktionsmethode ist allerdings der hohe Rechenaufwand, da für jedes Partikel die Abstände zu allen Gaußpunkten berechnet werden müssen, um zu bestimmen, welche

Gaußpunkte sich innerhalb des Radius R_S befinden. Der Rechenaufwand wird etwas reduziert, indem das zur Partikellokalisierung verwendete Hintergrundgitter (s. Kapitel 3.8.1) auch für die Formfunktionen verwendet wird. So müssen nur die Gaußpunkte derjenigen Elemente überprüft werden, die sich in denjenigen Hintergrundzellen befinden, die ganz oder teilweise innerhalb des Kugelvolumens liegen, also eine Art einhüllenden Quader bilden. Dennoch ist der Rechenaufwand der Formfunktionsmethode beträchtlich höher als der der anderen Methoden, Details hierzu können Kapitel 4.4.2 entnommen werden.

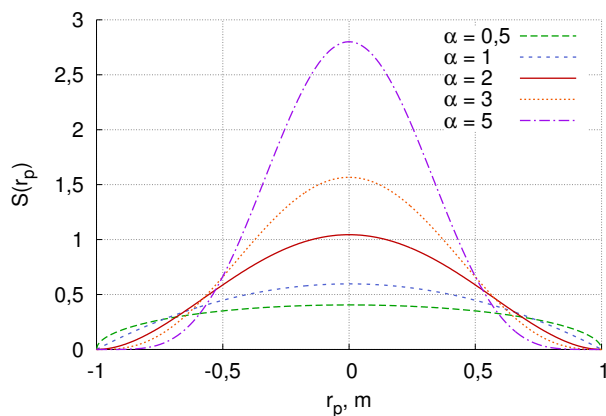


Abbildung 3.28.: Schnittliniendarstellung der kugelsymmetrischen Formfunktion mit Einheitsradius für verschiedene Polynomexponenten α .

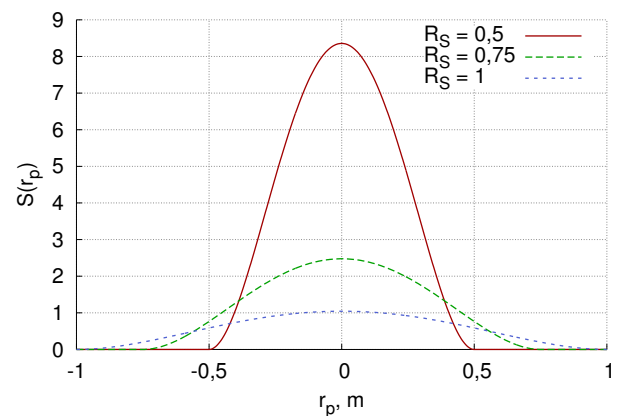


Abbildung 3.29.: Schnittliniendarstellung der kugelsymmetrischen Formfunktion mit Polynomexponenten $\alpha = 2$ für verschiedene Radien R_S .

3.9.4. Volumengewichtungsmethode

Die Verwendung einer Volumengewichtungsmethode ist eine der gebräuchlichsten Methoden zur Deposition [6] und entspricht einer Deposition erster Ordnung. Im Gegensatz zur üblichen Volumengewichtungsmethode, welche die Ladungen direkt auf Gitterknoten verteilt und daher für die verwendeten Hexaedergitter und Gaußpunkte nicht anwendbar ist, erfolgt die Deposition hier über ein kartesisches Hintergrundgitter, das über das Rechengebiet gelegt wird (nicht zu verwechseln mit dem für die schnelle Lokalisierung verwendeten Hintergrundgitter). Zunächst werden die Ladungen Q_i und Ströme $Q_i \cdot \vec{v}_i$ aller in einer Hintergrundgitterzelle (HGZ) befindlichen Partikel $N_{P,HGZ}$ auf die $n = 8$ Knoten der Hintergrundgitterzelle verteilt, gewichtet mit dem von Partikel

3. Modellierung und numerische Methoden

und gegenüberliegenden Knoten aufgespannten Volumen $V_{n'}$ (Abb. 3.27):

$$Q_n = \frac{1}{V_{HGZ}} \sum_{i=1}^{N_{P,HGZ}} Q_i V_{n'} \quad (3.64)$$

$$\vec{I}_n = \frac{1}{V_{HGZ}} \sum_{i=1}^{N_{P,HGZ}} Q_i \vec{v}_i V_{n'}, \quad (3.65)$$

mit den Ladungen Q_n und Strömen I_n auf den acht Knoten. Da das Hintergrundgitter kartesisch ist, sind die Volumina der Zellen alle gleich groß, so dass die Ladungs- und Stromdichte auf jedem Knoten des Hintergrundgitters anschließend einfach durch

$$\rho_n = \frac{Q_n}{V_{HGZ}} \quad \text{und} \quad \vec{j}_n = \frac{I_n}{V_{HGZ}} \quad (3.66)$$

bestimmt werden kann. Die Quellterme für die einzelnen Gaußpunkte werden im letzten Schritt mittels einer erneuten Volumengewichtung mit den jeweils zwischen Gaußpunkt und den acht Hintergrundgitterknoten um den Gaußpunkt aufgespannten Volumen interpoliert, so dass für jeden Gaußpunkt gilt

$$\rho = \frac{1}{V_{HGZ}} \sum_{n=1}^8 \rho_n V_{n'} \quad (3.67)$$

$$\vec{j} = \frac{1}{V_{HGZ}} \sum_{n=1}^8 \vec{j}_n V_{n'}. \quad (3.68)$$

Da bei der Verteilung der Ladung auf die Hintergrundgitterknoten die jeweils direkt angrenzenden Knoten berücksichtigt werden und die anschließende Interpolation die Ladungsdichte auf alle Gaußpunkte in den jeweils an diese Knoten angrenzenden Hintergrundgitterzellen deponiert, ergibt sich eine Deposition der Ladung eines Simulationspartikels über ein Volumen von $3 \times 3 \times 3$ Hintergrundgitterzellen. Ähnlich der Formfunktion wird die Ladung also über ein größeres Gebiet verteilt, mit einer höheren Dichte in der Mitte des Gebiets. Mit der Volumengewichtung ergibt sich allerdings eine lediglich lineare Verteilung der Ladung, so dass zwar Dichteunterschiede innerhalb einzelner Elemente berücksichtigt werden, aber mit einer niedrigeren Genauigkeit als bei der Formfunktion. Die große Stärke der Volumengewichtung liegt im geringen Rechenaufwand, der aufgrund der relativ einfach zu bestimmenden Zuordnung der Partikel zum kartesischen Gitter entsteht. Da die Gaußpunkte während einer Rechnung nicht verändert werden, müssen die Volumengewichte für die Interpolation vom Hintergrundgitter zu den Gaußpunkten nur einmal initial berechnet und gespeichert werden. Die Wahl des Knotenabstands des Hintergrundgitters bestimmt, wie beim Radius der Formfunktion, wie sehr die Ladungen verschmiert bzw. wie fein Dichteunterschiede aufgelöst werden und wird ebenfalls in Kapitel 4.4 hinsichtlich Ladungserhaltung, -verteilung und Rechenaufwand untersucht. Das Hintergrundgitter muss über den Rand des Rechengebiets hinausragen, um die Verteilung auf

$3 \times 3 \times 3$ Zellen auch für Partikel am Rand zu ermöglichen. Wie aus den Gleichungen leicht ersichtlich ist, werden dabei die Ladungen der am Rand befindlichen Partikel nicht vollständig im Rechengebiet deponiert, d.h. die (virtuelle) Ladungswolke des Partikels befindet sich quasi teilweise außerhalb des Gebiets und wird abgeschnitten. Bei einem offenen Rand ist dies durchaus erwünscht, da hierdurch ein allmähliches Aus- oder Einströmen der Ladungswolke approximiert wird. Bei einem reflektierenden Rand muss dieses Verhalten je nach Anwendungsfall unter Umständen durch entsprechende Anpassung bzw. Vergrößerung des Gitters berücksichtigt werden, um Fehler durch zu geringe Ladungen zu vermeiden. Dieser Effekt gilt allerdings genauso für die Formfunktion sowie für die im nächsten Abschnitt beschriebene B-Splines-Methode.

3.9.5. Basis-Splines-Methode

Eine Erweiterung der Volumengewichtungsmethode auf eine Deposition höherer Ordnung ist die Basis-Splines-Methode. Ein sogenannter Spline ist eine aus einzelnen Polynomen mit dem Polynomgrad p stückweise zusammengesetzte Funktion $S(x)$. Die Polynome und ihre bis zu $(p - 1)$ -fachen Ableitungen an den Übergängen sind dabei stetig, so dass eine glatte Funktion k -ten Grades entsteht. Basis-Splines (B-Splines) bilden dabei die Basisfunktionen des Raums der stückweisen Polynome, so dass sich Splines als Linearkombination von B-Splines $B(x)$ durch

$$S(x) = \sum_i \alpha_i B_i(x) \quad (3.69)$$

darstellen lassen. Durch geeignete Wahl dieser Basis ergeben sich B-Splines, die jeweils nur auf $p + 1$ Teilstücken ungleich Null sind und deren Summe an jeder Stelle x immer den Wert 1 ergibt [61]. Durch die beiden genannten Eigenschaften lassen sich die B-Splines genauso wie die Volumengewichtung für die Deposition der Partikel verwenden, wobei hier kubische Splines (Abbildung 3.30 rechts) implementiert wurden. Zunächst werden die Ladungen und Ströme der Partikel mittels einer Gewichtung auf die Hintergrundgitterknoten verteilt. Dabei stellen die Knoten die Stützstellen bzw. Teilstückbegrenzungen der B-Splines dar. Die Gewichtung ergibt sich aus der Auswertung aller B-Splines an der Partikelposition. Diese Auswertung erfolgt rekursiv mittels des De Boor Algorithmus [9, 61] und ergibt in jede der drei Raumrichtungen die Gewichte $w_{j-1, \dots, j+2}$ mit $\sum w = 1$ für eine Partikelposition im Intervall $[j, j+1[$, siehe Abbildung 3.30 (rechts). Die Ladung aller Partikel wird also gewichtet auf die jeweils $4 \times 4 \times 4 = 64$ Hintergrundgitterknoten um die Partikel verteilt. Nach der Verteilung aller Ladungen können wieder die Ladungs- und Stromdichten an den Hintergrundgitterknoten mittels Gleichung (3.66) bestimmt werden. Die anschließende Interpolation auf die Gaußpunkte folgt dem gleichen Schema, d.h. die Gewichte der einzelnen Hintergrundgitterknoten für jeden Gaußpunkt werden berechnet und mit den entsprechenden Dichten multipliziert. Dies entspricht einer Auswertung der aus den B-Splines und den Dichtewerten an den Knoten zusammengesetzten

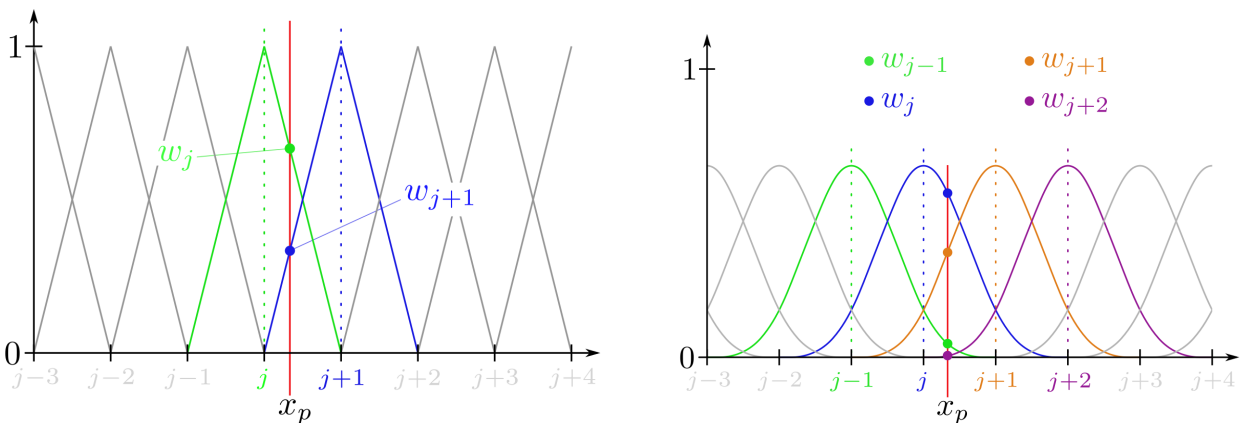


Abbildung 3.30.: Gewichte w der äquidistanten Hintergrundgitterknoten $j - 1$ bis $j + 2$ für eine Partikelposition x_p im Intervall $[j, j + 1[$ bei Gewichtung durch lineare (links) und kubische (rechts) B-Splines.

Splinefunktion S an der Position der Gaußpunkte und damit einer Interpolation durch ein Polynom dritten Grades. Verwendet man Splines ersten Grades, also lineare B-Splines, ergibt sich exakt die im vorigen Abschnitt beschriebene Volumengewichtung (Abbildung 3.30, links). Die Verwendung kubischer B-Splines erfordert durch die höhere Ordnung, die damit einhergehende rekursive Berechnung der Gewichte, sowie durch die mehr als doppelte Anzahl von Stützstellen einen höheren Rechenaufwand als die Volumengewichtungsmethode. Im Gegenzug wird die Genauigkeit erhöht, und damit werden Dichteunterschiede innerhalb eines Elements besser abgebildet. Wie bei der Volumengewichtungsmethode wird der Rechenaufwand reduziert, indem die Gewichte für die Gaußpunkte initial berechnet und gespeichert werden. Eine Untersuchung zur Wahl der Hintergrundgittergröße findet sich in Kapitel 4.4.

3.9.6. Parallelisierung: Deposition

Für die Deposition ist die Parallelisierung nur dann von Belang, wenn die Ladungs- und Stromdichten der Partikel über mehrere Elemente und damit potentiell über Gebietsgrenzen hinweg als Quellterme für den DG-Löser zur Verfügung stehen müssen. Dies ist bei der Elementmittelwertmethode und der Deposition auf den nächsten Gaußpunkt nicht der Fall, da hier die Ladungen der Partikel nur innerhalb desjenigen Elements deponiert werden, in dem die jeweiligen Partikel sich gerade aufhalten. Durch die Gebietszerlegung „besitzt“ damit automatisch jeder MPI-Prozess alle nötigen Partikel und es müssen keine Daten mit anderen Prozessen ausgetauscht werden.

Bei Verwendung der Formfunktion müssen die Ladungen aller Partikel kommuniziert werden, die so nahe an einer Gebietsgrenze liegen, dass der Radius der Formfunktion in das benachbarte Gebiet ragt. Die hierfür notwendige Parallelisierung wurde bereits von Stock [72] ausführlich beschrieben,

so dass hier nur das Funktionsprinzip dargestellt werden soll: Im Rahmen der Partikelkommunikation zwischen Nachbarprozessen, also bei Übertritten von Partikeln in ein anderes Gebiet, werden hier zusätzlich alle Partikel mitgesendet, die sich nahe genug an der Gebietsgrenze befinden. Der empfangende Prozess deponiert die Ladung dieser Partikel und löscht sie anschließend lokal wieder.

Bei Verwendung der beiden Hintergrundgittermethoden kann die benötigte Kommunikation verringert werden, indem nicht die Partikel selbst, sondern nur die auf den Hintergrundgitterknoten deponierten Ladungs- und Stromdichten ausgetauscht und aufsummiert werden: In einem Initialisierungsschritt bestimmt zunächst jeder Prozess den für ihn relevanten Hintergrundgitterausschnitt, basierend auf dem Knotenabstand und dem ihm zugeteilten Ausschnitt des Rechengitters. Dabei muss das Hintergrundgitter das Rechengebiet vollständig umschließen und in jeder Richtung zusätzliche Knoten entsprechend des Polynomgrads der verwendeten Splines - also $p = 1$ bei Volumengewichtung und $p = 3$ bei kubischen B-Splines - besitzen, wie in Abbildung 3.31 dargestellt ist, um die Ladung auch von an der Gebietsgrenze befindlichen Partikeln vollständig zu deponieren. Die minimale und maximale Knotennummer k des Hintergrundgitters ergibt sich dann für die drei Raumrichtungen jeweils aus

$$k_{min} = \text{INT} \left(x_{min}/\Delta L - \frac{p-1}{2} \right) \quad \text{und} \quad k_{max} = \text{INT} \left(x_{max}/\Delta L + \frac{p+1}{2} \right), \quad (3.70)$$

mit den minimalen und maximalen Koordinaten x_{min} und x_{max} der Rechengitterknoten, dem Hintergrundgitterknotenabstand ΔL und dem Polynomgrad p der verwendeten Splines. Die so ermittelten 6 Randknotennummern jedes Prozesses werden global an alle Prozesse kommuniziert und jeder Prozess berechnet für jeden anderen Prozess P , ob Überlappungen des Hintergrundgitters auftreten. Dies geschieht durch Bestimmung von

$$A = \max(k_{min}, k_{min,P}), \quad B = \min(k_{max}, k_{max,P}) \quad (3.71)$$

in den drei Raumrichtungen. Sofern $A \leq B$ gilt, existiert eine Überlappungszone, die vom Knoten A bis zum Knoten B reicht (Abbildung 3.32). Wird zusätzlich noch ein möglicher periodischer Rand berücksichtigt, können zwischen zwei Prozessen mehrere Überlappungszonen existieren. Diese Zonen bzw. deren Randknoten werden abgespeichert. Die Kommunikation während der Rechnung erfolgt dann in zwei Schritten. In einem ersten Schritt wird nach der lokalen Deposition ein logisches Feld von der Größe der jeweiligen Überlappungszone zwischen den Prozessen ausgetauscht, in dem mittels eines wahr/falsch-Werts hinterlegt wird, ob auf dem entsprechenden Knoten Ladungen deponiert wurden und dementsprechend versandt bzw. empfangen werden müssen. Im zweiten Schritt wird die Ladungsinformation auf den Knoten entsprechend der Anzahl an wahr-Werten im zuvor ausgetauschten Feld übertragen. Die empfangenen Ladungs- und Stromdichten werden zu den lokal deponierten Werten addiert, so dass die anschließende Interpolation der Werte auf die Gaußpunkte des

Rechengitters wieder vollständig lokal durchgeführt werden kann und keine weitere Kommunikation notwendig ist.

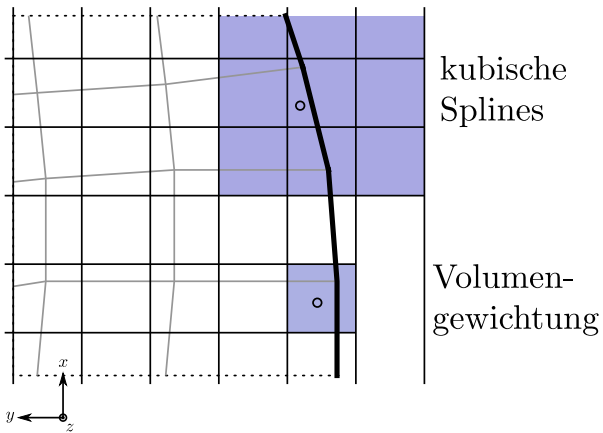


Abbildung 3.31.: Benötigte Mindestgröße des Hintergrundgitters über das Rechengitter hinaus bei der Verwendung kubischer Splines (oben) bzw. Volumengewichtung (unten)

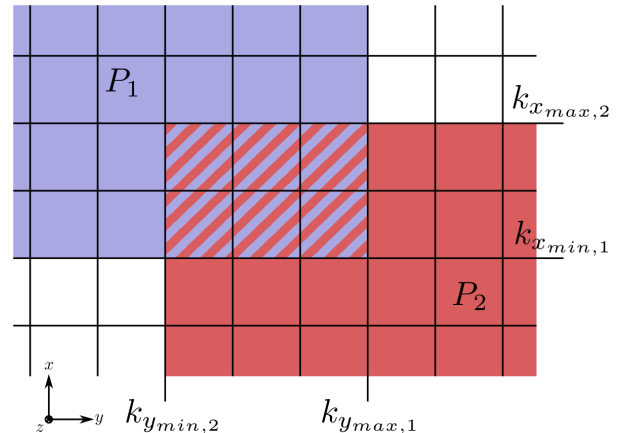


Abbildung 3.32.: Schematische Darstellung der Überlappungszone zweier Prozesse P_1 und P_2 und ihrer Hintergrundgittergebiete.

3.10. Interpolation

Nach der Berechnung der elektromagnetischen Felder durch den Maxwelllöser liegen diese implizit in Form von Polynomen innerhalb der einzelnen Gitterelemente im $[-1,1]$ -Raum vor. Der Grad der Polynome ist durch die verwendete Ordnung des DG-Verfahrens gegeben, und auf den Gaußpunkten liegen die entsprechenden Stützwerte. Die Bestimmung der für den Lorentzlöser nötigen Werte der elektrischen und magnetischen Felder an den Partikelpositionen erfolgt damit sinnvollerweise direkt mittels der Auswertung der DG-Polynome an den jeweiligen Partikelpositionen. Dabei werden die Partikelpositionen in den $[-1,1]$ -Raum transformiert, sofern dies nicht schon in der Deposition (s. Kapitel 3.9) geschehen ist. Für die Interpolation sind jeweils nur die Informationen desjenigen Elements relevant, in dem sich das Partikel gerade aufhält, daher ist eine besondere Behandlung im Falle einer parallelen Rechnung mit Gebietszerlegung nicht erforderlich.

4. Verifizierung und Untersuchung

Die Verifizierung der einzelnen Komponenten des PIC-Verfahrens dient dazu, ihre jeweilige Funktionstüchtigkeit zu überprüfen. Dazu werden in der Regel zum einen Testfälle verwendet, bei denen jeweils möglichst wenige andere Teile des Verfahrens verwendet werden, um konkrete Aussagen zu den untersuchten Teilaspekten treffen zu können, und zum anderen Testfälle, die alle Teile des Verfahrens verwenden, um das korrekte Zusammenwirken der Einzelteile zu verifizieren. Die Verifizierung erfolgt dabei im Allgemeinen durch Vergleiche mit bekannten analytischen oder durch andere Simulationsverfahren oder Experimente gewonnenen Lösungen. Zusätzlich werden insbesondere die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Komponenten einer Untersuchung hinsichtlich Rechengeschwindigkeit und Verhalten bei unterschiedlichen Anwendungs- und Testfällen unterzogen und die Anwendbarkeit des Gesamtverfahrens anhand der Simulation einer Ionenoptik gezeigt. In Kapitel 4.1 wird der neue DG-SEM Maxwelllöser für Fälle ohne und mit Partikeln als Quellen untersucht, gefolgt von der Überprüfung der Partikelbewegung, also des Lorentzlösers, in Kapitel 4.2. In Kapitel 4.3 wird der Rechenaufwand der Partikelverfolgung für verschiedene Hintergrundgittergrößen ermittelt. Eine umfassende Untersuchung und Verifizierung der Depositionsmethoden befindet sich in Kapitel 4.4, mit besonderem Augenmerk auf Ladungserhaltung und -verteilung, Rechenaufwand und Eignung für verschiedene Anwendungsfälle. Kapitel 4.5 beinhaltet eine Untersuchung der Skalierbarkeit der Parallelisierung und des Rechenaufwands der einzelnen Komponenten des Verfahrens. Erste Ergebnisse einer Anwendungssimulation für ein Ionentriebwerk zur Demonstration der Anwendbarkeit des Verfahrens werden in Kapitel 4.6 vorgestellt.

4.1. Maxwelllöser

Die Verifizierung des reinen Maxwelllösers ohne Quellen, also die Ausbreitung der elektromagnetischen Felder im Rechengebiet, erfolgt durch Berechnung der Feldausbreitung einer Dipol-schwingung [17] im Vakuum. Hierbei schwingt eine Ladung in einem Leiter und erzeugt dabei eine charakteristische Abstrahlung elektromagnetischer Wellen. Ein typisches Anwendungsgebiet ist die Abstrahlung einer Stabantenne. Die Simulation erfolgt in einem kubischen Rechengebiet mit $21 \text{ m} \times 21 \text{ m} \times 21 \text{ m}$ Ausdehnung mit offenen Rändern. Der verwendete Polynomgrad des DG-Lösers

4. Verifizierung und Untersuchung

ist $N = 8$ und das Rechengebiet wird durch $21 \times 21 \times 21$ Elemente, also in jeder Richtung durch $21 \cdot (N+1) = 189$ Gaußpunkte diskretisiert. Die schwingende Ladung Q wird im mittig liegenden Element homogen zeitabhängig als Stromdichtequelle in z -Richtung

$$j_z(t) = -\frac{Qd}{\epsilon_0} \omega \cos(\omega t) \quad (4.1)$$

aufgeprägt. Die hierbei verwendeten Werte charakterisieren die Schwingung und Abstrahlung und wurden wie folgt gewählt: Eine Ladung $Q = 1$ C schwinde mit einer Schwingungsamplitude $d = 1$ m und der Frequenz $\omega = 2\pi \cdot 10^8$ Hz. Abbildung 4.1 zeigt das elektrische Feld nach $t = 50$ ns. Die primäre Abstrahlung des Feldes in x - und y -Richtung ist dabei deutlich zu erkennen. Zur genauere

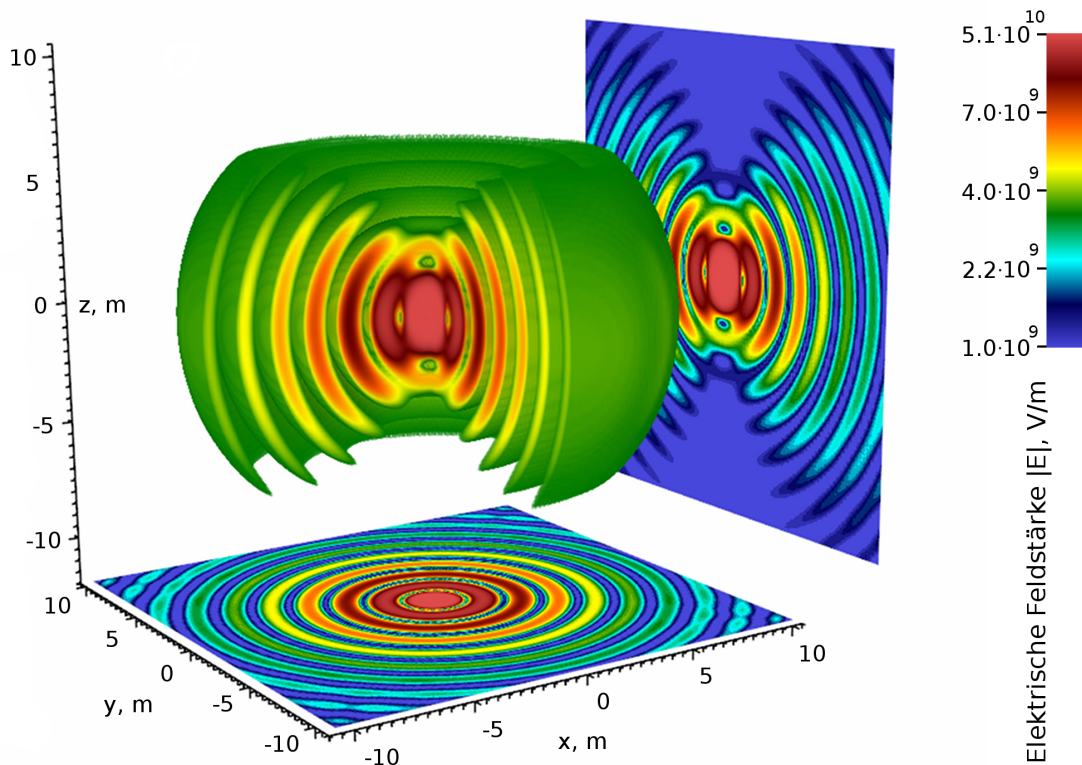


Abbildung 4.1.: Schnittdarstellung der elektrischen Feldstärke der Abstrahlung einer Dipolschwingung nach $t = 50$ ns. Projektion der Schnitte durch die $(x = 0)$ -Ebene und die $(z = 0)$ -Ebene auf die rechte und untere Wand.

ren Untersuchung werden die Felder entlang der x -Achse mit der analytischen Lösung für eine Dipolschwingung verglichen. Diese beträgt für einen punktförmigen Dipol in Polarkoordinaten [33]

$$E_r = \frac{2Qd \cos(\varphi)}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r^3} \sin(\omega t - \omega \frac{r}{c}) + \frac{\omega}{cr^2} \cos(\omega t - \omega \frac{r}{c}) \right) \quad (4.2)$$

$$E_\varphi = \frac{Qd\sin(\varphi)}{4\pi\epsilon_0} \left(\left(\frac{1}{r^3} - \frac{\omega^2}{rc^2} \right) \sin\left(\omega t - \omega \frac{r}{c}\right) + \frac{\omega}{cr^2} \cos\left(\omega t - \omega \frac{r}{c}\right) \right) \quad (4.3)$$

und

$$B_\vartheta = \frac{\mu_0 Q d \omega \sin(\varphi)}{4\pi} \left(-\frac{\omega}{cr} \sin\left(\omega t - \omega \frac{r}{c}\right) + \frac{1}{r^2} \cos\left(\omega t - \omega \frac{r}{c}\right) \right), \quad (4.4)$$

mit $E_\vartheta = B_r = B_\varphi = 0$. Entlang der x-Achse gilt $r = x$, $\varphi = 90^\circ$, $\vartheta = 0^\circ$ und damit $E_z = -E_\varphi$ und $B_y = B_\vartheta$, alle anderen Feldkomponenten sind gleich Null. Da der Dipol nicht punktförmig ist, sondern der Strom homogen im mittigen Element verteilt vorliegt, wird die analytische Lösung durch Superposition der Felder von $100 \times 100 \times 100$ im Element verteilten Punktdipolen angenähert. Abbildung 4.2 zeigt die Magnetfeldkomponente B_y im Vergleich zwischen analytischer Lösung und Simulationsergebnis, während in Abbildung 4.3 die entsprechenden relativen und absoluten Fehler zwischen den Lösungen aufgetragen sind. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung mit nur geringen Abweichungen. Zu beachten ist bei der Betrachtung des Fehlers zum einen, dass der relative Fehler nahe den Nulldurchgängen aufgrund der dort vorkommenden sehr kleinen Werte sehr empfindlich reagiert, was zu den in der Abbildung sichtbaren Spitzen im relativen Fehler führt. Zum anderen ergeben sich bei den Nulldurchgängen durch die starken Gradienten bereits bei geringen Phasenabweichungen sichtbare Fehler. Beide Phänomene liegen in der Fehlerberechnung begründet. Zusätzlich ergeben sich aufgrund der nicht exakten Übereinstimmung zwischen der Ladungsverteilung auf den Gaußpunkten und der analytischen Ladungsverteilung insbesondere im zentralen Element erwartungsgemäß stärkere Abweichungen zwischen analytischer und simulierter Lösung, die jedoch außerhalb des zentralen Elements schnell verschwinden. Analog zum magnetischen Feld

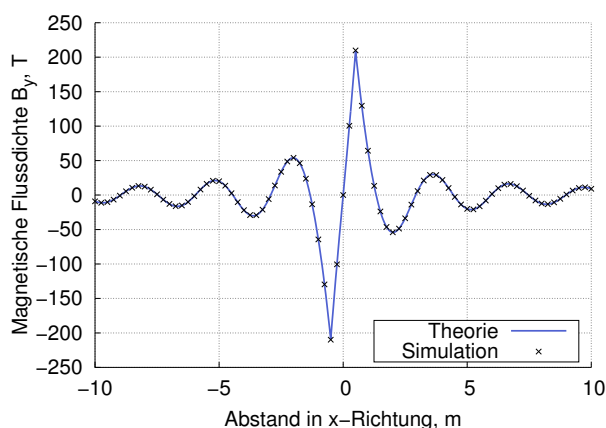


Abbildung 4.2.: Magnetische Flussdichte B_y einer Dipolschwingung nach $t = 50 \text{ ns}$ in x-Richtung. Vergleich zwischen theoretischer und numerisch berechneter Lösung.

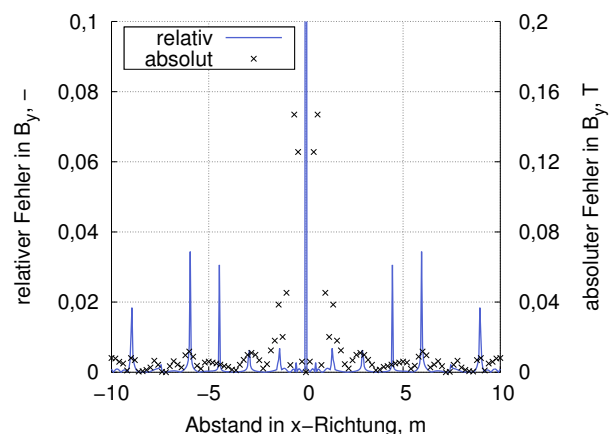


Abbildung 4.3.: Relativer und absoluter Fehler der magnetischen Flussdichte B_y einer Dipolschwingung nach $t = 50 \text{ ns}$ in x-Richtung.

4. Verifizierung und Untersuchung

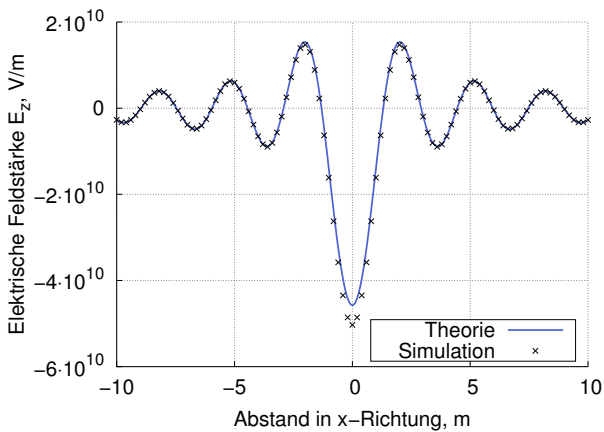


Abbildung 4.4.: Elektrische Feldstärke E_z einer Dipolschwingung nach $t = 50$ ns in x -Richtung. Vergleich zwischen theoretischer und numerisch berechneter Lösung.

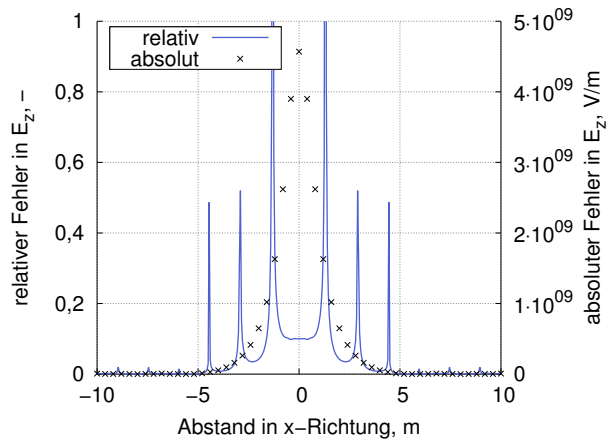


Abbildung 4.5.: Relativer und absoluter Fehler der elektrischen Feldstärke E_z einer Dipolschwingung nach $t = 50$ ns in x -Richtung.

sind in Abbildung 4.4 und 4.5 die elektrische Feldkomponente E_z und die dazugehörigen Fehler (in x -Richtung) dargestellt. Der Fehler ist hier insbesondere in großer Nähe zum Dipol durch die nicht exakte Übereinstimmung zwischen analytischer und numerischer Ladungsverteilung signifikant höher als bei der magnetischen Flussdichte, insgesamt ergibt sich jedoch auch hier in größerer Entfernung zur Ladung eine gute Übereinstimmung zwischen theoretischer und berechneter Lösung.

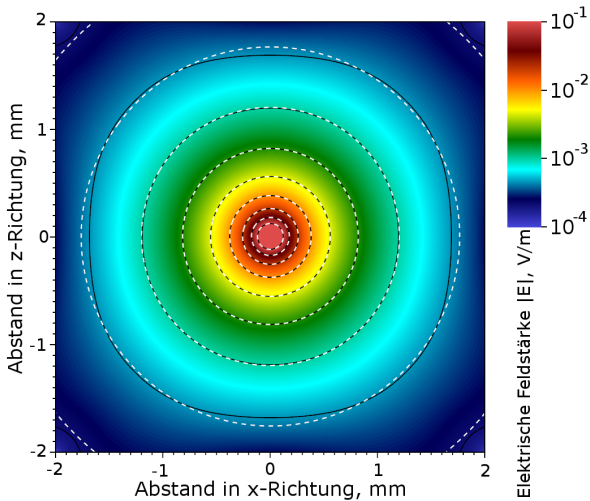


Abbildung 4.6.: Betrag des elektrischen Feldes einer kubischen Ladungsdichteverteilung in der Mitte des Gebiets. Schnittdarstellung senkrecht zur z -Achse bei $z = 0$. Die schwarzen und die weiß gepunkteten Linien sind Konturlinien der Simulation und der analytischen Lösung.

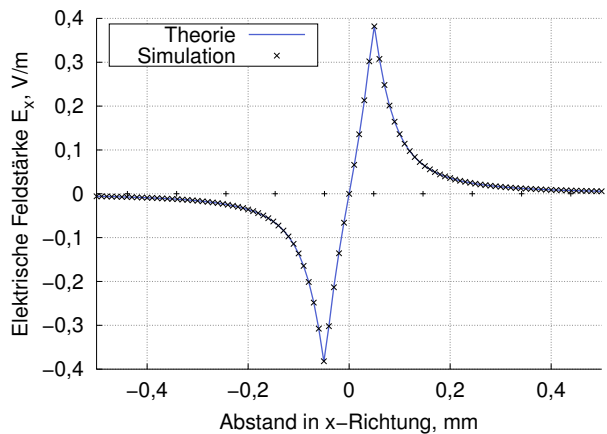


Abbildung 4.7.: Elektrisches Feld in x -Richtung E_x entlang der x -Achse durch eine im mittleren Element homogen verteilte Ladung. Vergleich zwischen theoretischer und simulierter Lösung. Die Kreuze auf der x -Achse stellen die Elementgrenzen dar.

Zur grundlegenden Verifizierung des Maxwelllöser unter Verwendung von Partikeln als Quellen wird ein einzelnes Partikel in ein Rechengebiet eingebracht und die resultierenden elektrischen und magnetischen Felder mit der analytischen Lösung verglichen. Zur Erzeugung eines elektrischen Feldes wird ein Partikel ohne Anfangsgeschwindigkeit in einem Würfel mit den Abmessungen $4\text{ mm} \times 4\text{ mm} \times 4\text{ mm}$ platziert. Das Rechengitter besteht aus $41 \times 41 \times 41 \approx 69000$ Elementen mit offenen Rändern. Die Berechnung der Feldausbreitung erfolgt mittels des DG-SEM Verfahrens vierter Ordnung, also insgesamt mit ca. 8,6 Millionen Gaußpunkten, bei einer Zeitschrittweite von ca. $5 \cdot 10^{-14}$ s. Das Partikel besitzt die Ladung eines Elektrons $Q = q_e$ und wird zu Beginn der Rechnung in die Mitte des Gebiets gesetzt. Die Ladung des Partikels wird mittels der Elementmittelwertmethode (siehe Kapitel 3.9.1) als homogene Ladungsdichte in das mittlere Element deponiert. Nach Erreichen des stationären Zustands wird das elektrische Feld ausgewertet.

Abbildung 4.6 zeigt den Betrag des entstehenden Feldes in der x-y-Ebene an der Partikelposition. Zur genaueren Untersuchung wird exemplarisch das elektrische Feld in x-Richtung entlang den drei Koordinatenachsen ausgewertet und mit der analytischen Lösung verglichen. Die analytische Lösung an einem Punkt an der Position \vec{r} ergibt sich gemäß der klassischen Elektrostatik [17] aus der Integration einer im Volumen V existierenden Ladungsdichteverteilung $\rho(\vec{R})$ zu

$$\vec{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_V \rho(\vec{R}) \frac{\vec{r} - \vec{R}}{|\vec{r} - \vec{R}|^3} dV, \quad (4.5)$$

was durch eine Superposition von homogen verteilten Punktladungen angenähert werden kann. Das gesamte elektrische Feld dieser Punktladungen ist dann, unter Verwendung von $50 \times 50 \times 50 = 125000$ Punktladungen,

$$\vec{E} = \sum_{i=1}^{125000} \frac{Q_i}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r} - \vec{r}_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^3}, \quad (4.6)$$

mit der jeweiligen Position \vec{r}_i der Punktladung $Q_i = Q/125000$. In Abbildung 4.7 ist der Vergleich zwischen numerisch simuliertem und analytisch berechnetem elektrischen Feld in x-Richtung, E_x , entlang der x-Achse dargestellt. Wie zu erwarten, geht der Feldverlauf in größerer Entfernung von der Ladungsverteilung in den einer Punktladung über, während innerhalb der homogenen Ladungsverteilung ein nahezu linearer Verlauf entsteht. Generell stimmt die numerische Lösung sehr gut mit der analytischen Lösung überein, was auch die Untersuchung der relativen und absoluten Fehler zwischen analytischer und numerischer Lösung, die in Abbildung 4.8 dargestellt sind, zeigt. Erkennbar ist hier und in Abbildung 4.6 auch deutlich der Einfluss des offenen bzw. absorbierenden Rands, der zu einer Abflachung des kugelförmigen elektrischen Feldes in unmittelbarer Randnähe führt. Entlang der y-Achse und der z-Achse gilt durch die symmetrische Ladungsverteilung gemäß Gleichungen (4.5) und (4.6) $E_x(y = 0, z = 0) = 0$. Das Feld entlang dieser Achsen ist in Abbildung 4.9 dargestellt. Es

4. Verifizierung und Untersuchung

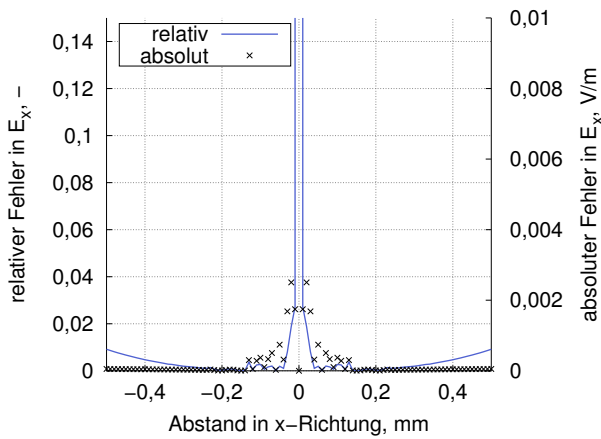


Abbildung 4.8.: Absoluter und relativer Fehler des elektrischen Feldes in Abbildung 4.7

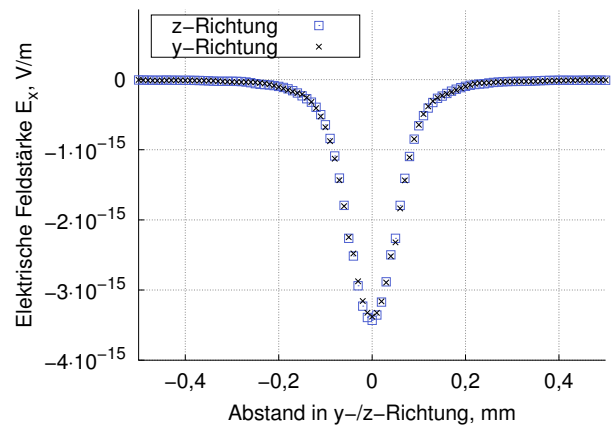


Abbildung 4.9.: Simuliertes elektrisches Feld in x -Richtung E_x einer kubischen Ladungsdichteverteilung entlang der y - und z -Achse. Für die theoretische Lösung gilt $E_x(y, z = 0) = 0$.

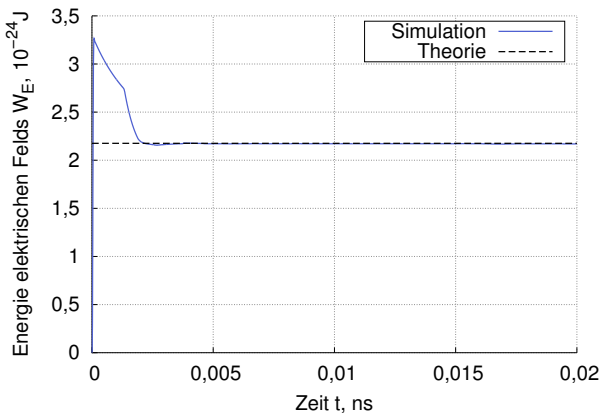


Abbildung 4.10.: Zeitlicher Verlauf der elektrischen Energie im Rechengebiet nach dem Einbringen einer kubischen Ladungsdichteverteilung in die Mitte des Gebiets.

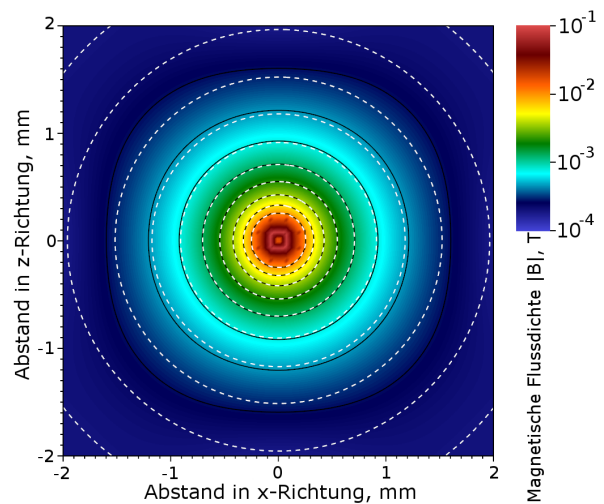


Abbildung 4.11.: Betrag der magnetischen Flussdichte einer kubischen Stromdichteverteilung in der Mitte des Gebiets. Schnittdarstellung senkrecht zur z -Achse bei $z = 0$. Die schwarzen und die weiß gepunkteten Linien sind Konturlinien der Simulation und der analytischen Lösung.

liegt 14 Größenordnungen unter der Feldstärke entlang der x -Achse und ist damit im Rahmen der Rechengenauigkeit vernachlässigbar klein. Zusätzlich zur Feldstärke wird die Feldenergie betrachtet. Die Energie des elektrischen Feldes berechnet sich allgemein aus der Integration der Energiedichte über das betrachtete Volumen, in diesem Fall das gesamte Rechengebiet. Unter Berücksichtigung der Diskretisierung des Gebiets in Elemente mit einer ordnungsabhängigen Zahl von Gaußpunkten gilt

im Vakuum [23]

$$W_{el} = \int_V \frac{1}{2} \epsilon_0 |\vec{E}|^2 dV = \sum_n \frac{1}{2} \epsilon_0 |\vec{E}_n|^2 \cdot V_n, \quad (4.7)$$

wobei n die einzelnen Gaußpunkte und E_n und V_n das an den Punkten bestehende elektrische Feld und das den Punkten zugeordnete Volumen darstellen. In Abbildung 4.10 ist der zeitliche Verlauf der Energie nach dem Einbringen der Ladungsdichte in die Simulation zusammen mit der theoretischen Lösung auf Basis der oben berechneten analytischen Lösung für das elektrische Feld dargestellt. Nach der anfänglichen „Einschwingphase“, die durch das instantane Einbringen des Partikels bedingt ist, entspricht die im Rechengbiet befindliche Energie der theoretisch errechneten und bleibt stabil.

Analog zum elektrischen Feld wird durch ein bewegtes geladenes Partikel ein magnetisches Feld erzeugt. Ein Simulationspartikel mit der Ladung von 10^9 Einheitsladungen und einer Geschwindigkeit $\vec{v} = (0, 10^7, 0)^T$ m/s wird in der Mitte eines $2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$ großen Rechengbiets mit $27 \times 27 \times 27$ Elementen platziert. Abbildung 4.11 zeigt das berechnete magnetische Feld dieses Partikels. Das theoretische entstehende magnetische Feld der Stromdichteverteilung $\vec{j}(\vec{R})$ lässt sich unter Verwendung des Biot-Savart-Gesetzes [17] an jedem Punkt \vec{r} analytisch berechnen durch

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \vec{j}(\vec{R}) \times \frac{\vec{r} - \vec{R}}{|\vec{r} - \vec{R}|^3} dV. \quad (4.8)$$

Auch diese Berechnung kann wieder durch eine Superposition von bewegten Punktladungen angenähert werden und ergibt sich dann mit $\vec{j} = \rho \vec{v}$ aus

$$\vec{B} = \sum_{i=1}^{125000} \frac{Q_i \vec{v} \mu_0}{4\pi} \frac{\vec{r} - \vec{r}_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^3}. \quad (4.9)$$

Zum Vergleich der analytischen mit der simulierten Lösung wird das magnetische Feld in z-Richtung B_z entlang der drei Koordinatenachsen ausgewertet. Abbildung 4.12 zeigt das Magnetfeld entlang der x-Achse (links) sowie den relativen und absoluten Fehler der numerischen Berechnung zur analytischen Lösung (rechts). Auch hier zeigt sich prinzipiell eine sehr gute Übereinstimmung, wobei hier noch deutlicher der in Kapitel 3.2.3 erläuterte Einfluss des offenen Rands zu erkennen ist. Abbildung 4.13 zeigt den Verlauf des berechneten Feldes entlang der y- und z-Achsen, welches im Rahmen der Rechengenauigkeit wieder nahezu Null ist und damit die analytische Lösung sehr gut wiedergibt. Analog zur elektrischen Feldenergie lässt sich hier eine magnetische Feldenergie

$$W_{mag} = \int_V \frac{1}{2} \mu_0 |\vec{B}|^2 dV = \sum_n \frac{1}{2} \mu_0 |\vec{B}_n|^2 \cdot V_n, \quad (4.10)$$

berechnen [23] und mit der entsprechenden Energie der analytischen Lösung vergleichen. Abbil-

4. Verifizierung und Untersuchung

Abbildung 4.14 zeigt den zeitlichen Verlauf der Energie. Durch das aufgrund der Randbedingung zum Rand des Rechengebiets hin zu hohe Magnetfeld ist die Gesamtenergie ebenfalls etwas zu hoch, liegt aber im richtigen Bereich und ist stabil. Die im Vergleich zu Abbildung 4.10 längere Einschwingdauer erklärt sich aus den unterschiedlichen Rechengittern und dem damit verbundenen unterschiedlich schnellen Transport der initialen, beim Einsetzen des Partikels entstehenden, Störung aus dem Rechengebiet.

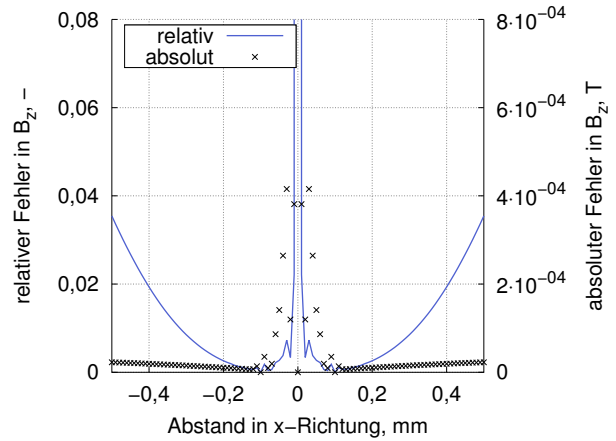
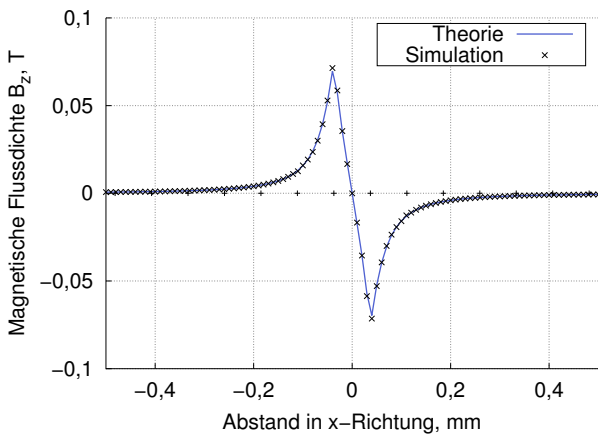


Abbildung 4.12.: Magnetische Flussdichte in z-Richtung B_z entlang der x-Achse durch eine im mittleren Element homogen verteilte Ladung mit einer Geschwindigkeit $v_y = 10^7$ m/s. Vergleich zwischen theoretischer und simulierter Lösung (links) und absoluter und relativer Fehler des Magnetfeldes (rechts).

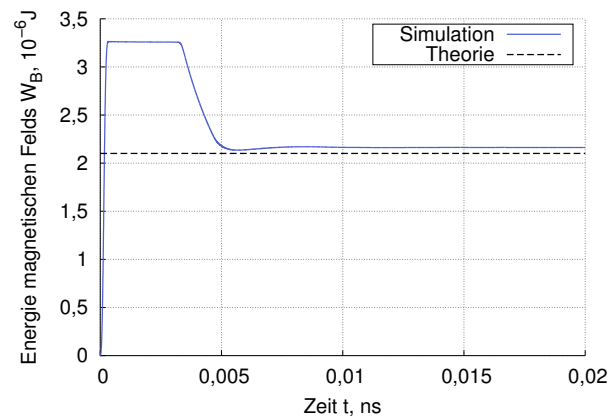
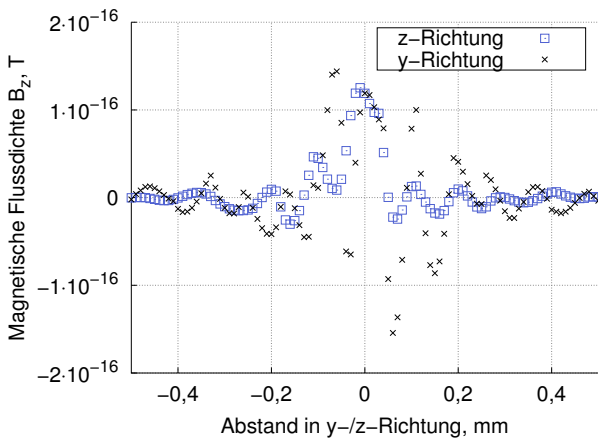


Abbildung 4.13.: Simulierte magnetische Flussdichte in z-Richtung B_z einer kubischen Stromdichteverteilung entlang der y- und z-Achse. Für die theoretische Lösung gilt hier $B_z = 0$.

Abbildung 4.14.: Zeitlicher Verlauf der magnetischen Energie im Rechengebiet nach dem Einbringen einer kubischen Ladungsdichteverteilung in die Mitte des Gebiets.

4.2. Lorentzlöser

Die Verifizierung der Partikelbewegung aufgrund der elektromagnetischen Felder, also des Lorentzlösers und der Integration der Bewegungsgleichung, erfolgt durch die Betrachtung von Position und Geschwindigkeit bewegter Partikel und den Vergleich mit analytischen Lösungen. Ein geladenes Partikel in konstantem Magnetfeld erfährt abhängig von der Geschwindigkeit eine Kraft senkrecht zur Bewegungsrichtung. Steht die Geschwindigkeit immer senkrecht zum Magnetfeld, ist die entstehende Flugbahn eine Kreisbahn, deren Eigenschaften durch Einsetzen der Lorentzkraft als Zentripetalkraft gemäß

$$F = qvB = \frac{\gamma mv^2}{r} \quad (4.11)$$

bestimmt werden können, wobei r den Radius der Kreisbahn und v die Geschwindigkeit senkrecht zu \vec{B} darstellen. Für die Verifizierung wird ein Elektron mit der Einheitsladung q_e gewählt, das mit der Anfangsgeschwindigkeit $\vec{v} = (6,2 \cdot 10^6, 0, 0)^T$ m/s in ein konstantes Magnetfeld $\vec{B} = (0, -0,035, 0)^T$ T eingebracht wird. Die entstehende Kreisbahn hat gemäß Gleichung (4.11) den Radius $r = 1,00738$ mm. Die Zeitschrittweite ist aufgrund des konstanten externen Magnetfeldes nicht durch das Stabilitätskriterium für den Löser der Maxwellgleichungen beschränkt und wird so variiert, dass auf einer Kreisbahn jeweils zwischen 10 und 1000 Schritte durchgeführt werden. Die resultierende Bahn ist in Abbildung 4.15 dargestellt und zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit der theoretischen Bahn. Zur genaueren Untersuchung ist in Abbildung 4.17 der relative Fehler des Geschwindigkeitsbetrags, der theoretisch konstant bleiben sollte, bei verschiedenen Zeitschrittweiten über die Dauer von 1000 Gyrationen aufgetragen. Bereits bei 30 Schritten pro Kreisbewegung liegt der Fehler unter 1 % und nimmt mit kleineren Zeitschritten entsprechend der RK4-Zeitintegration signifikant ab.

Analog zur Kreisbewegung eines geladenen Partikels im Magnetfeld wird die Bewegung eines Partikels im elektrischen Feld verifiziert. In diesem Fall wird kein homogenes externes Feld angelegt, sondern die Umkreisung einer positiven Punktladung durch ein Elektron simuliert. Die Lorentzkraft entspricht wieder der Zentripetalkraft

$$F = q|\vec{E}| = \frac{\gamma mv^2}{r}. \quad (4.12)$$

Die Geschwindigkeit des umkreisenden Elektrons beträgt $\vec{v} = (6,2 \cdot 10^6, 0, 0)^T$ m/s. Der Radius der Kreisbahn soll 1 mm betragen. Das elektrische Feld einer Punktladung ist [23]

$$\vec{E} = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|^3}, \quad (4.13)$$

4. Verifizierung und Untersuchung

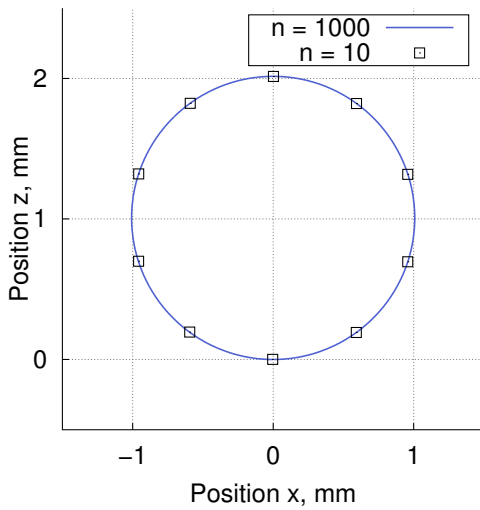


Abbildung 4.15.: Flugbahn eines geladenen Teilchens mit der Einheitsladung q in einem Magnetfeld $\vec{B} = (0, -0,035, 0)^T$ T mit der Anfangsgeschwindigkeit $\vec{v} = (6,2 \cdot 10^6, 0, 0)^T$ m/s im Ursprung bei einer Diskretisierung der Kreisbewegung mit 10 bzw. 1000 Zeitschritten.

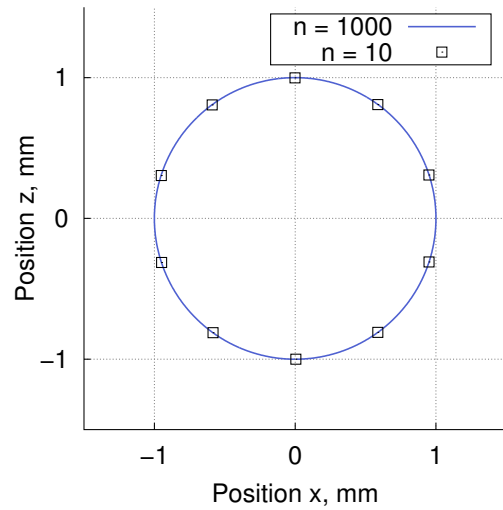


Abbildung 4.16.: Flugbahn eines geladenen Teilchens mit der Einheitsladung q mit der Anfangsgeschwindigkeit $\vec{v} = (6,2 \cdot 10^6, 0, 0)^T$ m/s um ein im Ursprung befindliches positiv geladenes Teilchen bei einer Diskretisierung der Kreisbewegung mit 10 bzw. 1000 Zeitschritten.

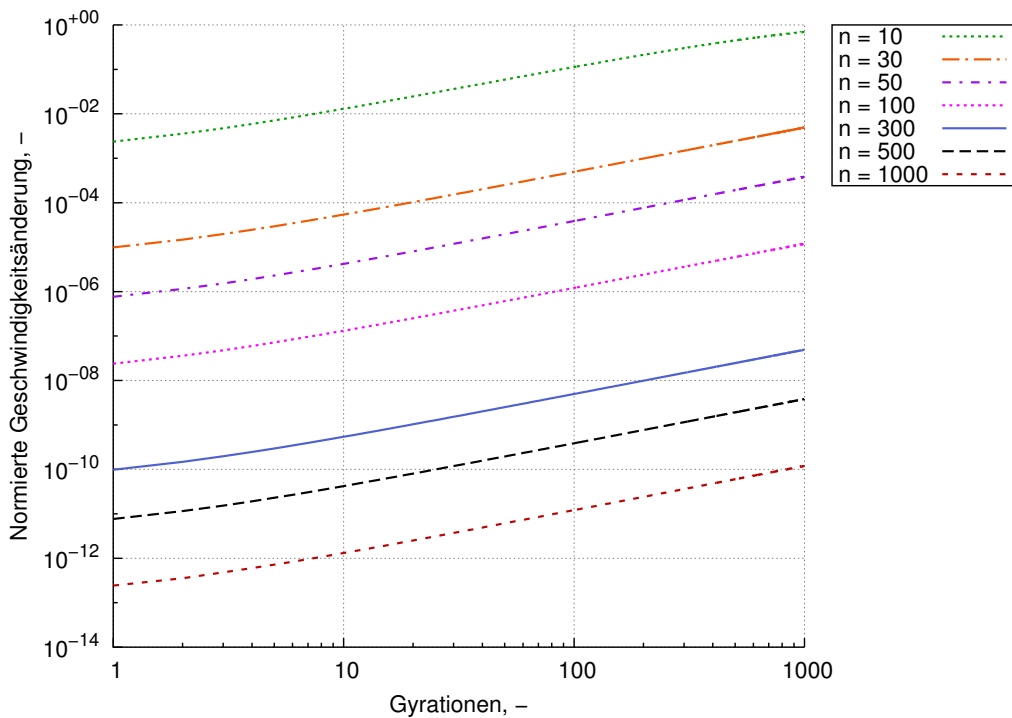


Abbildung 4.17.: Relativer Fehler der Geschwindigkeit $\frac{|v-v_0|}{v_0}$ eines in einem Magnetfeld gyrierenden Elektrons über die Anzahl der Gyrationen für verschiedene Zeitschritte n pro Gyration.

d.h. es ergibt sich für den gewünschten Radius eine umkreiste Ladung von $Q = 2,4323 \cdot 10^{-11}$ C bei einer Gyrationdauer von $\Delta T = 2\pi r/v = 1,01$ ns. Abbildungen 4.16 und 4.18 zeigen wieder

die Flugbahn und den relativen Fehler der Geschwindigkeit. Es ergibt sich das gleiche, sehr gute Bild wie bei der Kreisbewegung im Magnetfeld, wobei der relative Fehler sich weniger einheitlich darstellt, was darauf zurückzuführen ist, dass im Gegensatz zur Bahn im vollständig homogenen Magnetfeld hier eine inhärent instabile Bahn vorliegt, da das elektrische Feld des umkreisten Partikels mit größerem Abstand schwächer wird und damit schon kleine Abweichungen von der Kreisbahn einen sich selbst verstärkenden Effekt hervorrufen. Dies führt beispielsweise dazu, dass das Partikel beim größten untersuchten Zeitschritt nach etwa 600 Gyrationen die Kreisbahn und kurze Zeit später das Rechengebiet verlässt.

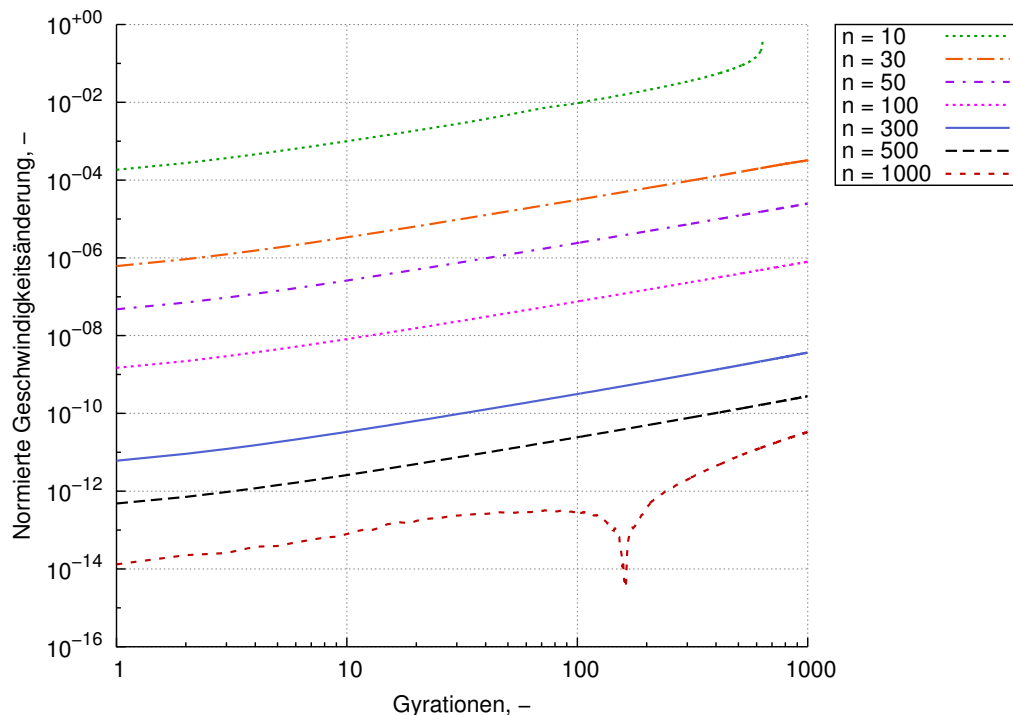


Abbildung 4.18.: Relativer Fehler der Geschwindigkeit $\frac{|v-v_0|}{v_0}$ eines um ein positiv geladenes Partikel kreisenden Elektrons über die Anzahl der Gyrationen für verschiedene Zeitschritte n pro Gyration.

4.3. Partikellokalisierung und -verfolgung

Die Partikellokalisierung und -verfolgung wird de facto durch alle Ergebnisse mit Beteiligung von Partikeln verifiziert, die in dieser Arbeit sowie allen anderen Veröffentlichungen unter Verwendung des gemeinschaftlich entwickelten Programms gezeigt werden, wie beispielsweise [55–58, 71–74]. Durch die verwendeten Methoden und Algorithmen wird ein Partikel entweder korrekt lokalisiert und verfolgt, oder das Programm bricht mit einer Fehlermeldung ab, wenn ein Partikel verloren geht, also nicht mehr dem Gitter zugeordnet werden kann. Von Interesse ist hier der benötigte Rechenaufwand,

4. Verifizierung und Untersuchung

da die Lokalisierung und Verfolgung je nach Anwendungsfall einen großen Teil des Gesamtverfahrens ausmachen kann. In diesem Kapitel wird zunächst der Rechenaufwand der reinen Lokalisierung, wie

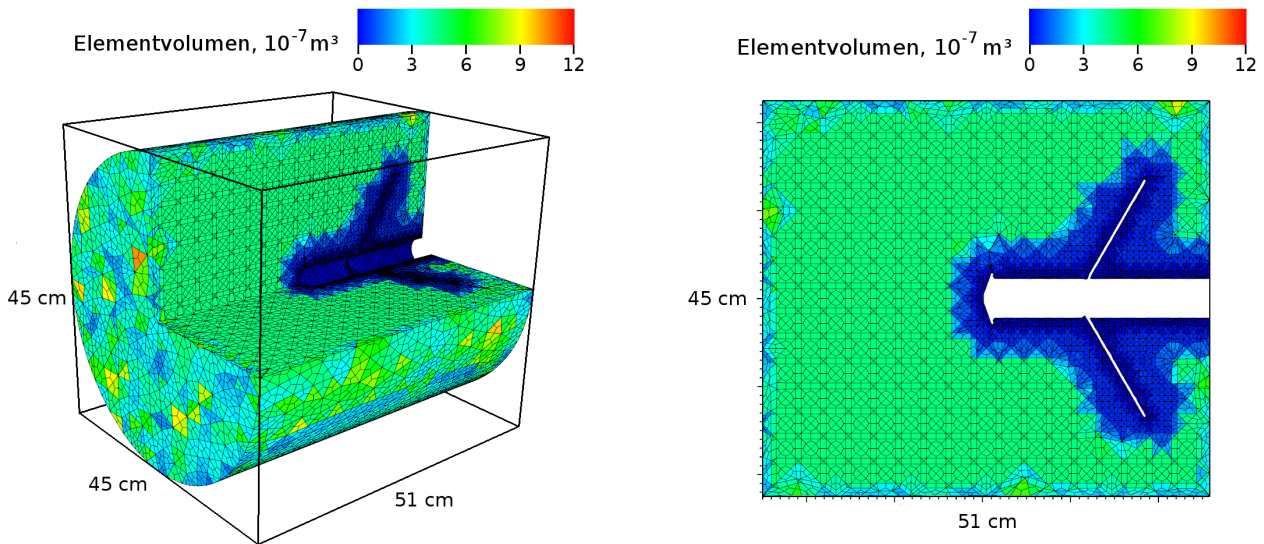


Abbildung 4.19.: Gitter für die Untersuchung des Rechenaufwands der Lokalisierung mit verschiedenen Hintergrundgittern in 3D (links) und als Schnitt (rechts). Einfärbung der Elemente entsprechend ihres Volumens.

sie beim Einbringen der Partikel auftritt, untersucht. Dies ist insbesondere relevant, wenn während der Simulation kontinuierlich neue Partikel in das Simulationsgebiet emittiert werden, zum Beispiel bei einem Einströmrand. Als repräsentativer Testfall dient dazu ein Rechengitter, das zur Simulation eines Wiedereintrittskörpers im Maßstab 1:10 von P. Nizenkov [60] im Rahmen seiner Arbeit mit dem Programmcode erstellt wurde (Abbildung 4.19). Durch die relativ komplexe Geometrie des Flugkörpers, insbesondere der abgerundeten Form und der schmalen Bremsflächen, ergibt sich für das Gitter ein breites Spektrum an Elementgrößen, welches in Abbildung 4.20 dargestellt ist. Im verwendeten Rechengebiet befinden sich 336268 Elemente und es werden 100000 Partikel eingesetzt. Die Rechenzeit der Lokalisierung wird mittels der FORTRAN-intrinsischen `CPU_TIME()`-Routine ausgegeben, wobei ausschließlich die Lokalisierung während der Simulation (also nicht die Initialisierung) berücksichtigt wird. Die Rechnungen wurden auf einem AMD Opteron 6344 Prozessor durchgeführt. In Abbildung 4.21 sind die gemessenen Zeiten für verschiedene Hintergrundgittergrößen dargestellt, aufgetragen über die durchschnittliche Anzahl der Elemente pro Hintergrundgitterzelle. Die genauen Daten können Tabelle 4.1 entnommen werden. Es ist klar erkennbar, dass der Rechenaufwand bei einer Verfeinerung des Hintergrundgitters immer weiter abnimmt, wobei hin zu sehr kleinen Hintergrundgitterzellen eine Sättigung zu beobachten ist, die dadurch zustande kommt, dass nicht weniger als ein einzelnes Element pro Hintergrundgitterzelle zugeordnet werden kann, so dass eine weitere Verfeinerung in den entsprechenden Gebieten keine weiteren Vorteile bringt und die durchschnittliche Anzahl von Elementen pro Hintergrundgitterzelle nur noch langsam sinkt. Bezüglich der reinen

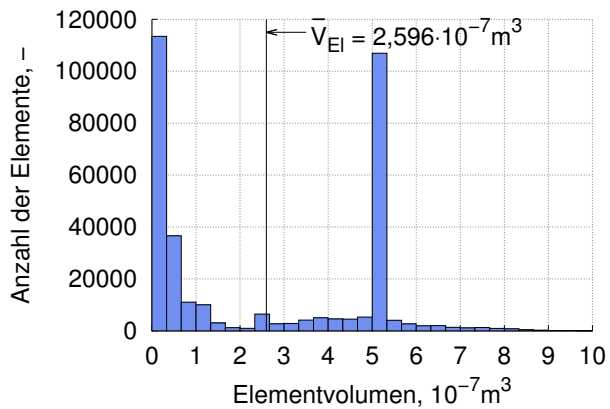


Abbildung 4.20.: Histogramm der Volumina der Gitterelemente in Abb. 4.19 und Durchschnittselementvolumen.

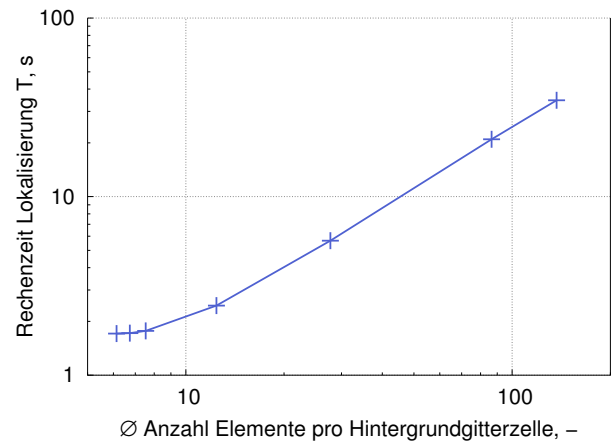


Abbildung 4.21.: Rechenzeiten für die Partikelemission bei verschiedenen Hintergrundgittergrößen bzw. Elementen pro Hintergrundgitterzelle

ΔL	N_{HGG}	N_{Elem}/HGG	ΔT
0,0015	150843265	6,13	1,71 s
0,002	70350455	6,74	1,72 s
0,0025	40438438	7,54	1,77 s
0,005	8475988	12,41	2,45 s
0,01	2450611	27,73	5,67 s
0,02	1048881	86,46	20,95 s
0,025	862013	136,87	34,63 s

Tabelle 4.1.: Rechenzeiten ΔT für die Partikelemission bei verschiedenen Hintergrundgitterknotenabständen ΔL sowie die Anzahl der Elemente N_{HGG} in den Hintergrundgitterzellen und die durchschnittliche Anzahl der Rechengitterelemente pro Hintergrundgitterzelle N_{Elem}/HGG .

Rechenzeit ist also das Hintergrundgitter so fein wie möglich zu wählen, allerdings ist dabei zu beachten, dass mit einer Verfeinerung des Gitters sowohl die initiale Zuordnung der Elemente zu den Hintergrundgitterzellen einen höheren Rechenaufwand erfordert als auch der Speicheraufwand stark ansteigt, da diese initiale Zuordnung für jede Hintergrundgitterzelle gespeichert werden muss.

Die Rechenzeit für die Partikelverfolgung bereits im Gebiet befindlicher Partikel ist unabhängig von der Größe der Hintergrundgitterzellen und wird daher allgemein in Kapitel 4.5 im Zusammenhang mit den Rechenzeiten der anderen Komponenten des Verfahrens untersucht.

4.4. Deposition

In Kapitel 3.9 wurden fünf verschiedene Depositionsmethoden für die Interpolation der Ladungen der Simulationspartikel auf das Rechengitter eingeführt, die im Folgenden verifiziert und hinsichtlich Ladungserhaltung, Rechenzeit und Diskretisierung untersucht werden, um die Charakteristika der Methoden aufzuzeigen und einen Anhaltspunkt für die jeweils geeignete Wahl bei verschiedenen Simulationsszenarien zu bieten.

4.4.1. Ladungserhaltung und -verteilung

Ladungserhaltung in der Deposition ist dann gegeben, wenn die Ladung der Simulationspartikel vor der Deposition der Ladung entspricht, die danach auf dem Rechengitter vorliegt und dort dann als Quellterm für die Maxwellgleichungen dient. Die Stromdichte ergibt sich direkt aus der Ladungsdichte und der Partikelgeschwindigkeit, so dass diese nicht separat betrachtet werden muss. Für den Vergleich zwischen der Ladung der Partikel und der Ladung auf dem Rechengitter wird letztere aus der deponierten Ladungsdichte mit

$$Q_{depo} = \sum_{i=1}^{N_G} \rho_i V_i \quad (4.14)$$

berechnet, wobei N_G die Anzahl aller Gaußpunkte in allen Elementen, V das dem jeweiligen Gaußpunkt zugeordnete Teilvolumen des Elements und ρ die im Gaußpunkt deponierte Ladungsdichte sind. Für die Verifizierung wird repräsentativ das in Abb. 4.22 dargestellte Rechengitter verwendet, das in einem $12 \times 12 \times 12 \text{ cm}^3$ großen Würfel 65600 zusammenhängende Elemente unterschiedlicher Volumen beinhaltet und für Simulationen im Bereich IEC (*Inertial Electrostatic Confinement*, Elektrostatischer Trägheitseinschluss) verwendet [26] wurde. Das Gitter wurde ausgewählt, da es keine im Rechenggebiet befindlichen Ränder besitzt und im Gegensatz zu einem rein kartesischen Gitter Elemente verschiedener Volumen und Formen beinhaltet. 125 Partikel werden jeweils einzeln zufällig im Rechenggebiet platziert und ein mittlerer Fehler aus

$$ERR = \frac{1}{125} \sum_{p=1}^{125} \left(\frac{|Q_{depo} - Q_{part}|}{Q_{part}} \right)_p \quad (4.15)$$

gebildet. Die Elementmittelwertmethode und die Nächster-Gaußpunkt-Methode, bei denen die Ladungen dem Element bzw. dem Gaußpunkt direkt zugeordnet werden und die Ladungsdichte aus der Division mit dem entsprechenden Volumen berechnet wird, erhalten die Ladung per Definition perfekt und weisen lediglich Abweichungen im Bereich der Rechengenauigkeit ($< 10^{-14}$) auf. Der Fehler in der Ladungserhaltung unter Verwendung der Formfunktionsmethode ist in Abb. 4.23 für

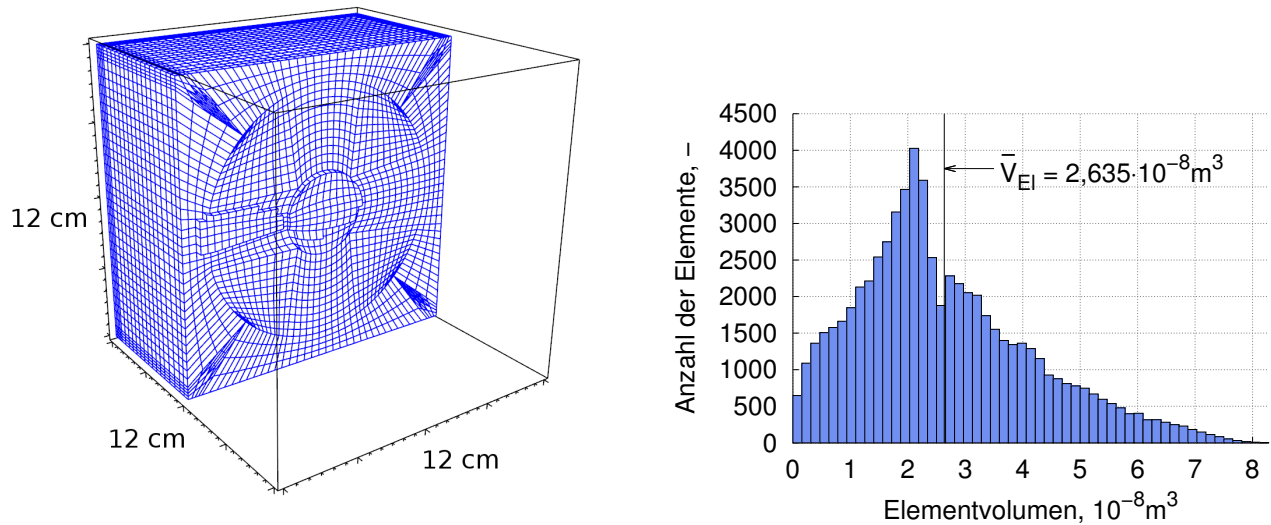


Abbildung 4.22.: Rechengitter zur Überprüfung der Ladungserhaltung der verschiedenen Depositionsmethoden. Links als Schnittdarstellung, rechts ein Histogramm der Elementvolumen mit eingezeichnetem Durchschnittsvolumen.

verschiedene Polynomgrade N , die die Anzahl der Gaußpunkte pro Element bestimmen, über den frei wählbaren Radius der Formfunktion aufgetragen. Der Radius ist dabei auf die Kantenlänge des durchschnittlichen Elementvolumens (s. Abb. 4.22 rechts) bezogen, d.h. ein Wert von $R = 1$ entspricht einem Radius von der Länge eines durchschnittlichen Elements. Entsprechend des Fehlers der Formfunktionsmethode ist in Abb. 4.24 der Fehler für die Verwendung von B-Splines und in Abb. 4.25 für die Volumengewichtung aufgetragen, wobei hier analog zum Radius bei der Formfunktionsmethode die Kantenlänge des kartesischen Hintergrundgitters ΔL_{HGG} auf die Kantenlänge des mittleren Elementvolumens bezogen wird. Abbildung 4.26 zeigt den direkten Vergleich zwischen den Methoden für $N = 4$ über der charakteristischen Länge ΔL_{ch} , also dem Radius bei der Formfunktion und der Hintergrundgitterkantenlänge bei den anderen beiden Methoden. Für alle drei Methoden zeigt sich eine Reduktion des Fehlers mit zunehmendem Polynomgrad, resultierend aus dem entsprechenden Anstieg der Gaußpunkte, auf denen die Ladung deponiert wird. Durch die höhere Anzahl an Gaußpunkten ergibt sich eine bessere räumliche Diskretisierung und damit eine bessere Abbildung der Ladungsverteilung auf die Gaußpunkte. Ein weiterer sichtbarer Effekt ist die Abnahme des Fehlers mit der Erhöhung des Volumens, in das die Ladung deponiert wird, ausgedrückt im Fall der Formfunktion durch den Radius und im Fall der anderen beiden Methoden durch die Größe der Hintergrundgitterzellen. Auch hier wird durch Vergrößerung des Depositionsvolumens die Ladung auf mehr Gaußpunkte deponiert und die Ladungsverteilung besser abgebildet. Generell zeigt sich, dass der Fehler in der Ladungserhaltung für die neue B-Splines-Methode mehrere Größenordnungen geringer ist als bei der bisher verwendeten Formfunktionsmethode und auch der Fehler der Volumengewichtungsmethode zumindest im Bereich der Formfunktionsmethode liegt. Zu

4. Verifizierung und Untersuchung

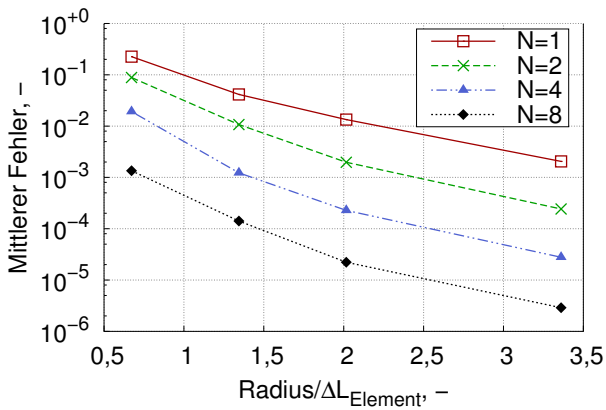


Abbildung 4.23.: Mittlerer Fehler der Ladungserhaltung für die Deposition per Formfunktion.

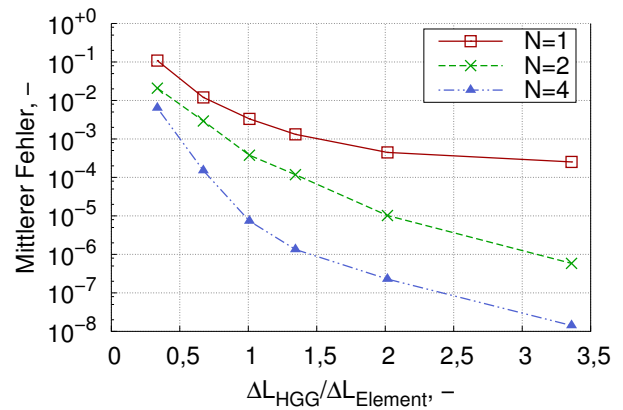


Abbildung 4.24.: Mittlerer Fehler der Ladungserhaltung für die Deposition per B-Splines.

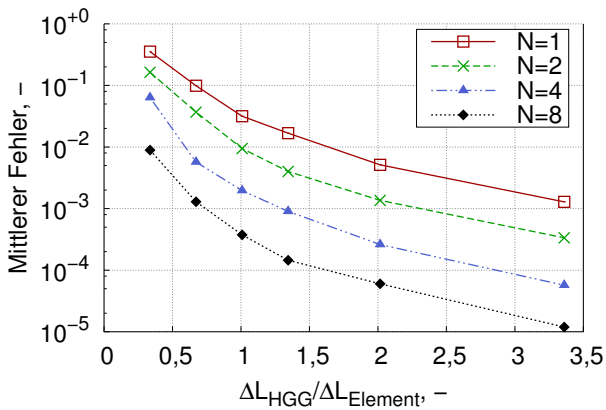


Abbildung 4.25.: Mittlerer Fehler der Ladungserhaltung für die Deposition per Volumengewichtung.

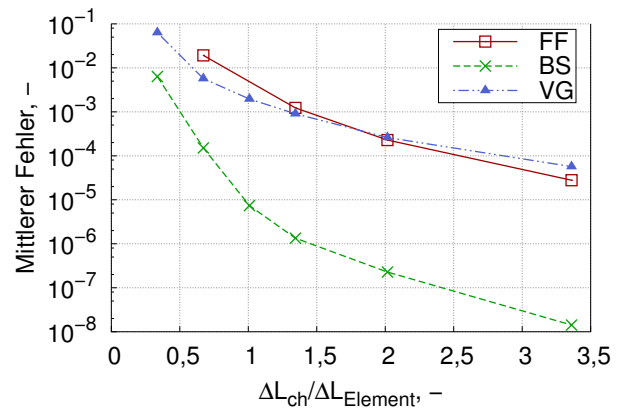


Abbildung 4.26.: Mittlerer Fehler der Ladungserhaltung für Polynomgrad $N = 4$ für verschiedene Depositionsmethoden.

beachten ist hierbei allerdings, dass die Ladung bei gleicher charakteristischer Länge für die Volumengewichtung über den 1,5-fachen und für die B-Splines den 3,5-fachen Radius der Formfunktion verteilt wird (s. Kapitel 3.9). Zusammengefasst sind alle drei Depositionsmethoden ladungserhaltend, allerdings können bei niedrigem Polynomgrad und kleinen Depositionsvolumen signifikante Fehler auftreten. Eine optional aktivierbare Routine wurde im Programmcode implementiert, so dass für jede Simulation bei Bedarf der Fehler der Ladungserhaltung überprüft werden kann.

Zusätzlich zur Erhaltung der Ladung spielt auch die Art der räumlichen Verteilung der Ladung eine Rolle bei der Auswahl einer für eine gegebene Simulation geeigneten Depositionsmethode. Zur Veranschaulichung wird die Ladungsdichteverteilung auf einem kartesischen Rechengitter betrachtet. Jeweils 10000 positiv und 10000 negativ geladene Simulationsteilchen mit der Ladung $\pm 0,05$ C werden zufällig in ein würfelförmiges Gebiet mit $10 \times 10 \times 10$ Elementen gesetzt. Der verwendete Polynomgrad des Feldlösers ist $N = 4$, d.h. in jedem Element befinden sich 125 Gaußpunkte.

Abbildungen 4.27 bis 4.32 zeigen die Verteilung der Ladungsdichte für verschiedene Depositionsmethoden und -parameter, wobei die Partikelpositionen und die Schnittebene bei allen Abbildungen identisch sind. Wie bei Betrachtung der Verteilung und der unterschiedlichen Skalen der dargestellten Ladungsdichten sofort ersichtlich ist, führen die verschiedenen Depositionsmethoden zu höchst unterschiedlichen Dichteverteilungen. Im Fall der Elementmittelwertmethode (Abb. 4.27), bei der

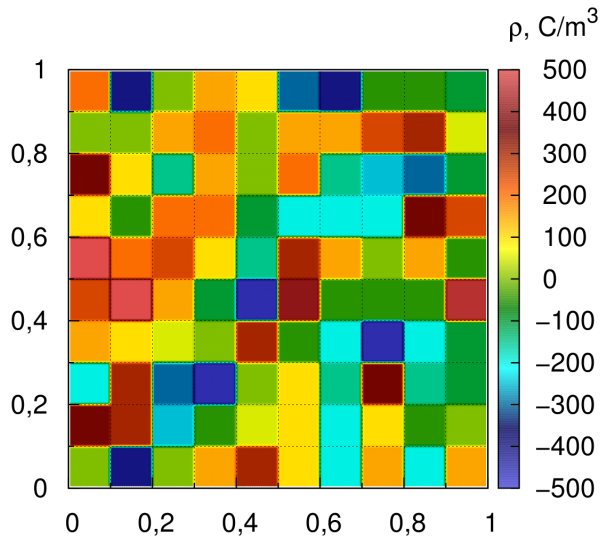


Abbildung 4.27.: Ladungsdichteverteilung der Elementmittelwertmethode.

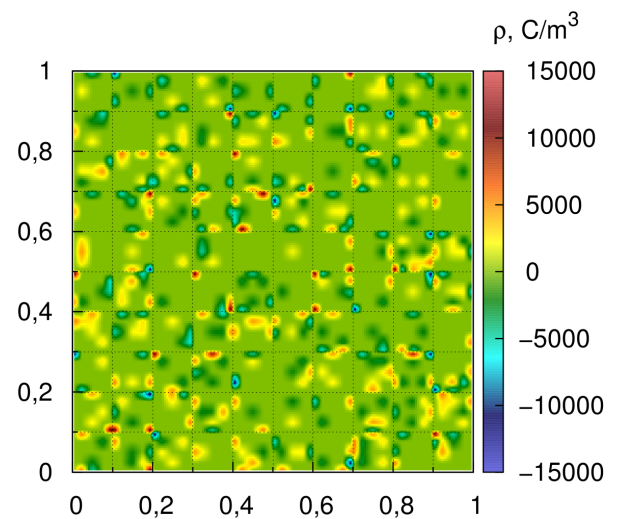


Abbildung 4.28.: Ladungsdichteverteilung der Nächster-Gaußpunkt-Methode.

die Ordnung des Feldlösers für die Ladungsverteilung unerheblich ist, ergeben sich Sprünge an den Elementgrenzen, die zum einen zu starken Gradienten in der Ladungsdichte und damit zu hohen, potentiell unrealistischen elektromagnetischen Feldern führen. Zum anderen werden die Ladungen von Partikeln, die sich von einem Element in ein anderes bewegen, instantan dem neuen Element zugeordnet, so dass auch zeitliche Sprünge der Dichten auftreten, was sich in Oszillationen der elektromagnetischen Felder auswirkt. In Kombination führen diese Effekte zu Energieerhaltungsproblemen, die in Kapitel 4.4.4 näher untersucht werden. Im Fall der Nächster-Gaußpunkt-Methode (Abb. 4.28) ergeben sich starke Dichtespitzen und es läßt sich keine räumliche Verteilung mehr erkennen. Räumliche und zeitliche Sprünge treten noch stärker auf als bei der Elementmittelwertmethode, da über ein bedeutend kleineres Volumen gemittelt wird. Die anderen drei Depositionsmethoden erlauben hier durch das „Verschmieren“ der Ladung über ein Volumen sowohl glatte Übergänge der Partikel zwischen den Elementen als auch eine glattere Dichteverteilung ohne Sprünge an Elementgrenzen oder zwischen Gaußpunkten. Für die Stärke der Glättung sind hier die gewählten Parameter der Deposition ausschlaggebend.

Bei der Formfunktion führen ein kleinerer Radius und ein hoher Exponent α (Abb. 4.29) zu einer stärkeren Ladungskonzentration an der Partikelposition und damit zu einer höheren Auflösung bei verminderter Glättung. Umgekehrt ergibt sich bei größerem Radius und niedrigerem Exponenten

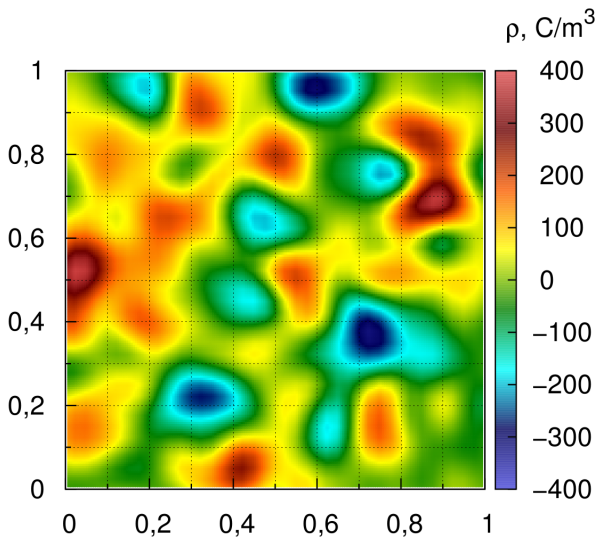


Abbildung 4.29.: Ladungsdichteverteilung der Formfunktionsmethode mit $r = 0,2$ und $\alpha = 8$

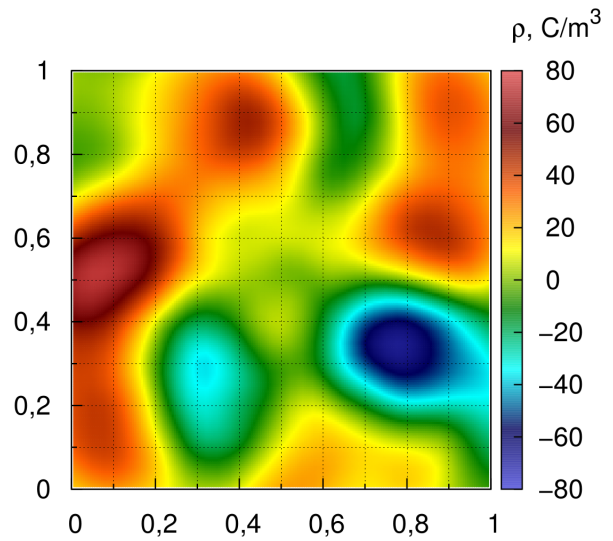


Abbildung 4.30.: Ladungsdichteverteilung der Formfunktionsmethode mit $r = 0,3$ und $\alpha = 2$

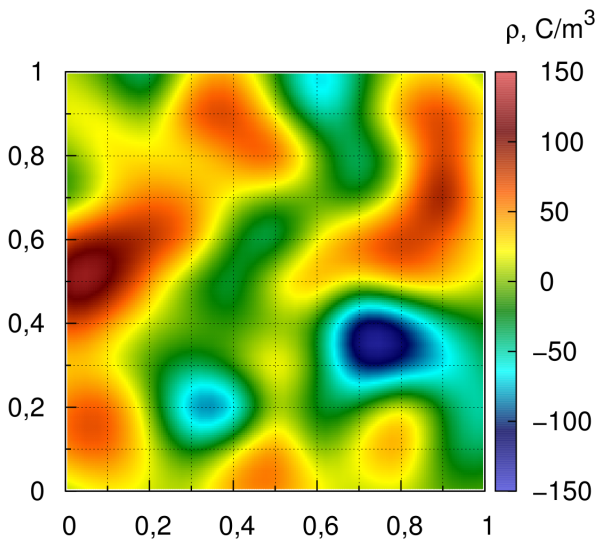


Abbildung 4.31.: Ladungsdichteverteilung der B-Splines-Methode mit $\Delta L = 0,1$

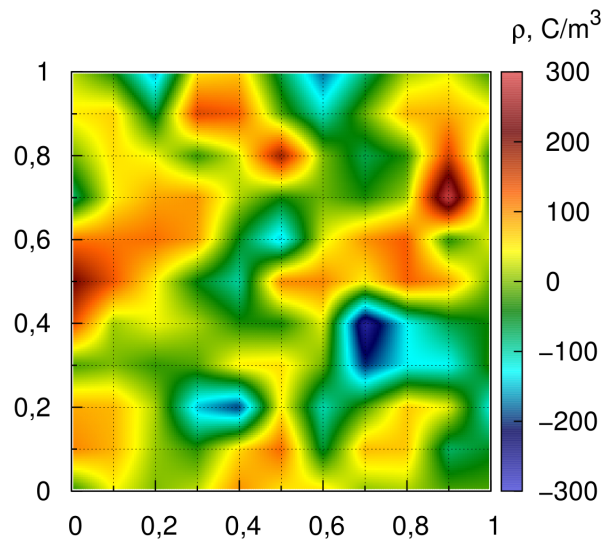


Abbildung 4.32.: Ladungsdichteverteilung der Volumengewichtungsmethode mit $\Delta L = 0,1$

(Abb. 4.30) eine stärkere Verschmierung und damit Glättung der Ladungsdichte. Beide Varianten zeigen grob die gleiche Verteilung und sind frei von Sprüngen. Durch Wahl eines großen Formfunktionsradius und eines kleinen Exponenten liegt die Verteilung näher an einem homogenen, quasineutralen Plasma, während durch kleine Radien und hohe Exponenten Dichteunterschiede im Plasma feiner aufgelöst werden.

Entsprechend dem Radius der Formfunktion bestimmt die Größe des Hintergrundgitters die Glättung der Dichte bei der B-Splines-Methode (Abb. 4.31) und der Volumengewichtungsmethode (Abb. 4.32), wobei sich bei letzterer aufgrund der lediglich linearen Interpolation bei gleicher Hintergrundgittergröße

tergröße ein weniger glattes Gesamtbild ergibt. In Anhang B sind weitere Abbildungen für eine geringere Simulationspartikelanzahl zu finden, anhand derer der Einfluss der Partikeldiskretisierung auf die Ladungsverteilung zu sehen ist.

Insgesamt ist anhand der Ladungsdichteverteilungen zu erkennen, dass die Elementmittelwertmethode und die Nächster-Gaußpunkt-Methode nur eingeschränkt verwendbar sind. Eine glattere Verteilung läßt sich hier nur mit sehr hohen Partikel- und Elementzahlen erreichen, die durch eine homogenere Verteilung die Sprünge zwischen Elementen bzw. Gaußpunkten minimieren. Durch den geringen Rechenaufwand der Elementmittelwertmethode lohnt sich der Einsatz allerdings bei sehr großen Simulationen, bei denen durch die hohen Partikel- und Elementzahlen die Sprünge schwächer ausfallen und eine Rechnung mit einer der anderen Methoden unter Umständen zu hohe Rechenkosten verursachen würde. Die anderen drei Methoden ermöglichen eine glatte Ladungsverteilung entsprechen der Ordnung der verwendeten Verteilungsmethoden, wobei die Formfunktionsmethode hier durch die Anpassungsmöglichkeiten von Radius und Exponent die flexibelste Methode darstellt.

4.4.2. Rechenzeitaufwand

Ein wichtiges Kriterium zur Anwendbarkeit und Grund für die Entwicklung und Implementierung der verschiedenen Depositionsmethoden ist der erforderliche Rechenaufwand, der einen hohen Anteil an der Gesamtrechenzeit ausmachen kann (s. auch Kapitel 4.5). Zur Untersuchung werden 10^6 Partikel zufällig in das in Abbildung 4.33 dargestellte und in Kapitel 4.6 zur Simulation einer Strömung durch ein Ionentriebwerksgitter verwendete Rechengitter gesetzt. Der Rechenaufwand für die Deposition bei verschiedenen Methoden und Parametern wird auf einem AMD Opteron 6344 Prozessor gemessen und über mehrere Messungen gemittelt. Abbildung 4.34 zeigt die Rechenzeit für die

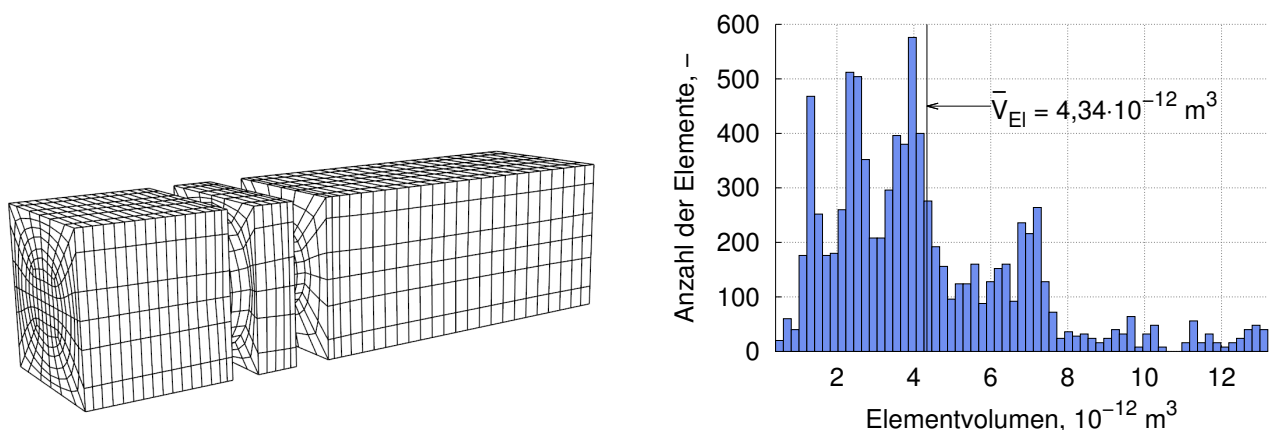


Abbildung 4.33.: Gitter zur Ermittlung des Rechenaufwands der Depositionsmethoden (links) und Histogramm der Elementvolumen mit Durchschnittselementvolumen (rechts). Die Volumen der einzelnen Gitterelemente sind in Abbildung 4.54 dargestellt.

4. Verifizierung und Untersuchung

Elementmittelwertmethode und die Nächster-Gaußpunkt-Methode in Abhängigkeit vom verwendeten Polynomgrad N . Der Anstieg der Rechenzeit ergibt sich daraus, dass sich bei höherem Polynomgrad mehr Gaußpunkte in den Elementen befinden, auf die der berechnete Ladungsdichtewert gespeichert wird. Da bei der Nächster-Gaußpunkt-Methode die Dichte immer nur auf einen Gaußpunkt geschrieben wird, ergibt sich hier nur ein geringer Anstieg. Dieser resultiert daraus, dass die Zuordnung der Partikel zu ihrem nächsten Gaußpunkt durch die nicht äquidistante Anordnung der Gaußpunkte mit steigender Anzahl aufwändiger wird. Die Rechenzeit für die Formfunktionsmethode hängt wie die

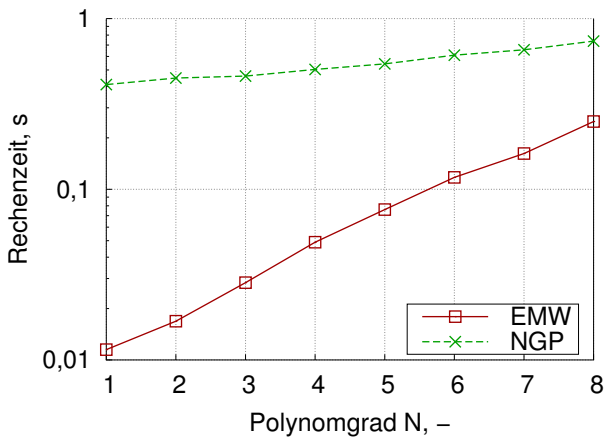


Abbildung 4.34.: Rechenzeit der Elementmittelwertmethode (EMW) und der Nächster-Gaußpunkt-Methode (NGP)

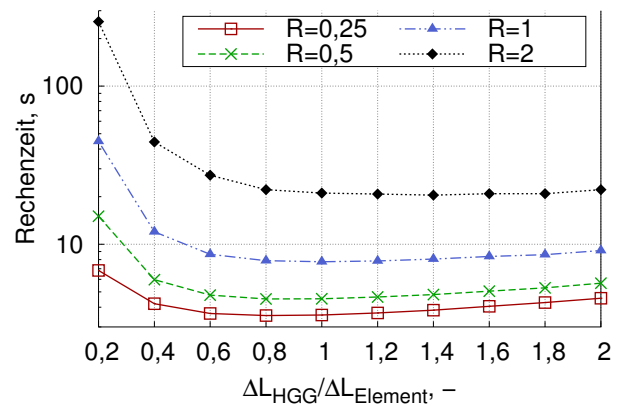


Abbildung 4.35.: Rechenzeit der Formfunktionsmethode für Polynomgrad $N=1$

Ladungserhaltung sowohl vom Polynomgrad als auch vom Radius ab, was beides direkten Einfluss auf die Anzahl an Gaußpunkten hat, auf die die Ladung deponiert wird. Zusätzlich ergibt sich für die Rechenzeit noch eine Abhängigkeit von der Größe des Hintergrundgitters, welches verwendet wird, um die Gaußpunkte innerhalb des Radius zu finden. Abbildungen 4.35 und 4.36 stellen die Rechenzeit für die Deposition mittels Formfunktionsmethode für verschiedene Polynomgrade und Radien in Abhängigkeit der Hintergrundgittergröße dar. Da das Hintergrundgitter keinen Einfluss auf den Wert der deponierten Ladung hat, sollte hier immer dasjenige mit dem geringsten Rechenaufwand verwendet werden, wobei berücksichtigt werden muss, dass der Speicherbedarf mit einer Verfeinerung des Hintergrundgitters ansteigt. Das Minimum des Rechenaufwands verschiebt sich mit höherer Ordnung hin zu feineren Hintergrundgittern. Diesem Vorteil steht jedoch der höhere Speicherbedarf entgegen, so dass generell eine Hintergrundgitterkantenlänge von etwa einem halben Durchschnittselement ein guter Kompromiss für alle Polynomgrade und Radien darstellt. Der höhere Rechenaufwand für höhere Polynomgrade und Radien ergibt sich zwangsläufig aus der größeren Zahl von Gaußpunkten, für die jeweils die Abstände zu jedem einzelnen Partikel berechnet werden müssen.

Abbildungen 4.37 und 4.38 zeigen analog die Rechenzeiten der B-Splines- und der Volumenge-

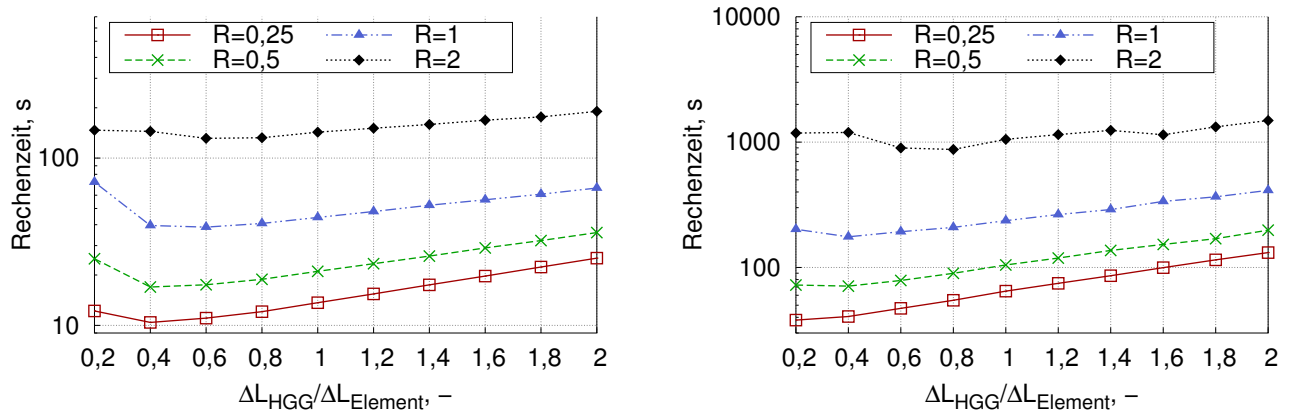


Abbildung 4.36.: Rechenzeit der Formfunktionsmethode für Polynomgrad $N=4$ (links) und $N=8$ (rechts).

wichtungsmethoden für verschiedene Polynomgrade bei verschiedenen Hintergrundgittergrößen. Auch hier spiegelt sich die höhere Anzahl von Gaußpunkten bei höheren Polynomgraden direkt in einem erhöhten Rechenaufwand wider, wobei die Unterschiede geringer ausfallen. Der Aufwand für den ersten Schritt dieser Depositionsmethoden, die Verteilung der Ladungen der Partikel auf das Hintergrundgitter, ist unabhängig von der Anzahl der Gaußpunkte. Nur der zweite Schritt, die Interpolation vom Hintergrundgitter auf die Gaußpunkte, wird durch deren gestiegene Anzahl aufwändiger. Dies spiegelt sich in einer Zunahme der Rechenzeit bei höherem Polynomgrad und einer nahezu unveränderten Rechenzeit bei größeren Hintergrundgitterzellen wider. Von der Größe der Hintergrundgitterzellen ist der Aufwand für den ersten Schritt aufgrund der einfachen Zuordnung von Partikeln zum kartesischen Hintergrundgitter ebenfalls nahezu unabhängig. Lediglich für sehr feine Hintergrundgitter steigt der Aufwand durch die hohe Zahl der Hintergrundgitterzellen stark an. Für den zweiten Schritt ergibt sich keine Abhängigkeit von der Hintergrundgitterzellengröße, da immer jeweils von der gleichen Zahl von Hintergrundgitterpunkten auf einen Gaußpunkt interpoliert wird.

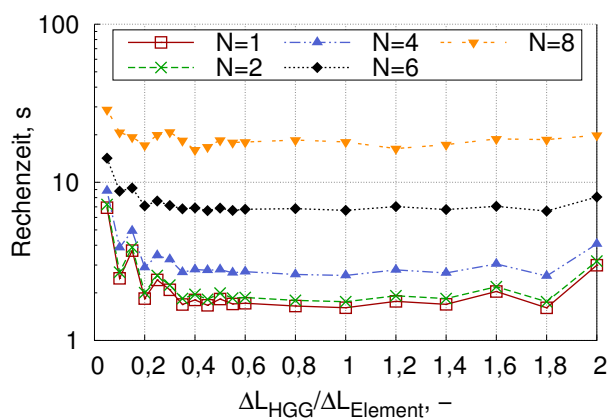


Abbildung 4.37.: Rechenzeit der B-Splines-Methode.

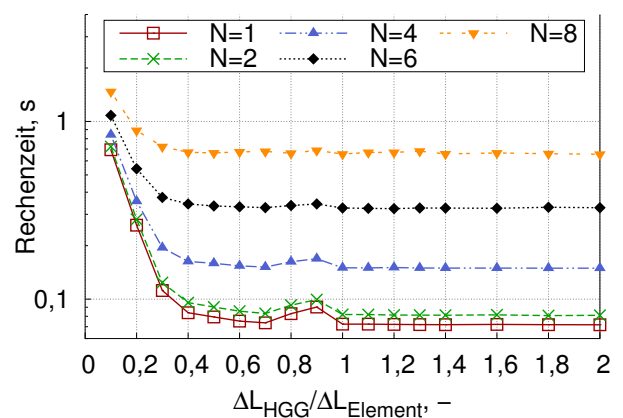


Abbildung 4.38.: Rechenzeit der Volumengewichtungsmethode.

4. Verifizierung und Untersuchung

Das Hauptinteresse liegt bei der Betrachtung der Rechenzeit allerdings im Vergleich der verschiedenen Methoden. Abbildung 4.39 (links) zeigt beispielhaft bei einem ungefähr gleich großen Ladungsverteilungsgebiet die Rechenzeiten der fünf Methoden in Abhängigkeit vom Polynomgrad. Zur deutlicheren Veranschaulichung ist in Abbildung 4.39 (rechts) die Zeit für den Polynomgrad $N = 4$ zu sehen. Der Anstieg der Rechenzeit mit der Ordnung ist bei der Nächster-Gaußpunkt-Methode geringer als bei den anderen Methoden. Generell lässt sich aber feststellen, dass der Rechenaufwand der Formfunktionsmethode eine Größenordnung über der der B-Splines-Methode und sogar mehrere Größenordnungen über dem der anderen drei Methoden liegt. Die Ursache für den hohen

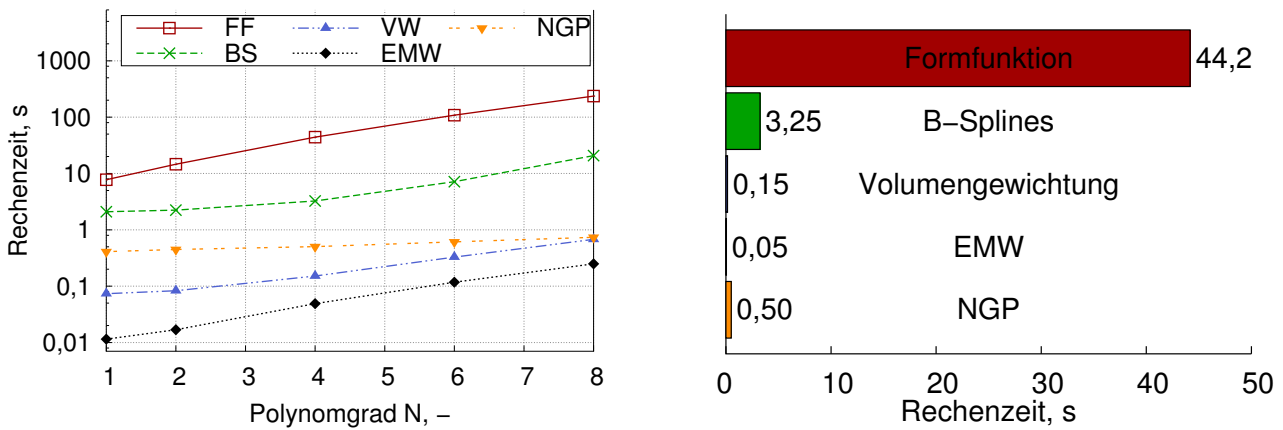


Abbildung 4.39.: Vergleich der Rechenzeit aller Depositionsmethoden für $\Delta L_{ch}/\Delta L_{Element} = 1$ (links) und Veranschaulichung für den Polynomgrad $N=4$ (rechts).

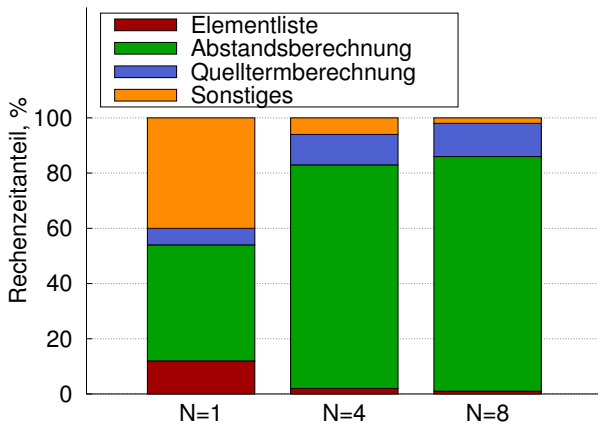


Abbildung 4.40.: Rechenzeitverteilung der Formfunktionsmethode.

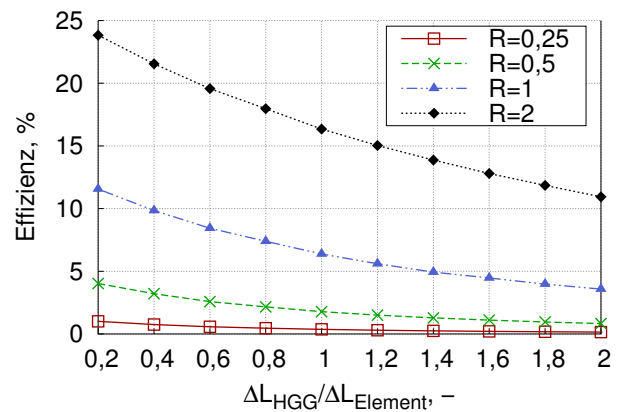


Abbildung 4.41.: Effizienz der Gaußpunktwahl für $N = 4$. Quotient aus Anzahl der im Radius der Formfunktion befindlichen zu allen überprüften Gaußpunkten.

Rechenaufwand der Formfunktion lässt sich durch ein Profiling der Depositionsroutine, d.h. der Messung, in welchen Zeilen des Programmcodes die meiste Rechenzeit verwendet wird, zeigen. Abbildung 4.40 schlüsselt die Rechenzeitanteile der drei Hauptkomponenten der Formfunktionsmethode

für verschiedene Polynomgrade auf: Erstens die Abfrage der Elemente, die sich potentiell im Radius der Formfunktion befinden, unter Verwendung des Hintergrundgitters. Zweitens die Berechnung der Abstände zwischen Partikel und Gaußpunkten potentieller Elemente, um zu bestimmen, welche Gaußpunkte tatsächlich im Radius liegen. Drittens die Berechnung der Quellterme, also der Ladungsdichte, für alle Gaußpunkte, die tatsächlich innerhalb des Radius liegen. Wie leicht zu erkennen ist, liegt der Hauptrechenaufwand bei der Abstandsberechnung, insbesondere bei hohen Ordnungen. Abbildung 4.41 zeigt die dazugehörige Effizienz der Abstandsberechnung für den Polynomgrad $N = 4$. Als Effizienz ist hier das Verhältnis zwischen den Gaußpunkten, die tatsächlich innerhalb des Formfunktionsradius liegen, und allen Gaußpunkten, für die der Abstand berechnet wurde, definiert. Letztere ergeben sich aus der Größe und Lage der Hintergrundgitterzellen. Je nach Radius und Hintergrundgittergröße liegt die Effizienz hier nur zwischen knapp über 0 % und 24 %. Diese Ineffizienz ist, neben der generell aufwändigen Abstands- und Quelltermberechnung, der Hauptgrund für das schlechte Abschneiden der Formfunktionsmethode. Es gibt prinzipiell zwei Möglichkeiten, die Ineffizienz zu verringern: Das initiale Berechnen und Abspeichern aller Elemente, die innerhalb des Formfunktionsradius eines Elements liegen; und das Abspeichern aller Gaußpunkte, die sich innerhalb des Radius um jede Hintergrundgitterzelle befinden, wobei die Hintergrundgitterzellen dann eine sehr feine Auflösung benötigen würden. Beide Methoden sind allerdings zur Zeit nicht praktisch anwendbar, da sie einen massiven zusätzlichen Speicherbedarf zur Folge hätten. Die in diesem Abschnitt erhaltenen Rechenzeiten sind im Allgemeinen vom verwendeten Rechengitter und der Partikelzahl abhängig, die generellen Aussagen sind jedoch allgemeingültig. Zum Vergleich findet sich in Anhang A eine entsprechende Rechnung mit einem kartesischen Rechengitter, die die hier gezeigten Ergebnisse widerspiegelt.

4.4.3. Plasmawelle

Die Simulation einer Plasmawelle dient als Verifikationsfall für PIC-Verfahren [6, 31, 34] und wurde für die Formfunktion bereits von A. Stock [72] für das DG-FEM-Verfahren durchgeführt. Analog sollen hier das DG-SEM Verfahren und die anderen Depositionsmethoden verifiziert werden. Für diesen Testfall wird eine Anzahl von Elektronen äquidistant in einem periodischen Rechenggebiet verteilt und mit einer ortsabhängigen Anfangsauslenkung versehen. Zusätzlich werden äquidistant Protonen im Gitter verteilt, um insgesamt Ladungsneutralität zu erreichen. Aufgrund der Auslenkung sollen die Elektronen mit der Plasmafrequenz schwingen, welche untersucht und mit der theoretischen Plasmafrequenz verglichen werden kann. Die Maße des gewählten Rechengebiets betragen $6\text{ m} \times 0,8\text{ m} \times 0,8\text{ m}$ mit $60 \times 8 \times 8$ Elementen und dem Polynomgrad $N = 2$. 2×3840 Simulationsteilchen repräsentieren jeweils $3,84 \cdot 10^{13}$ Protonen und Elektronen, die äquidistant ins Rechenggebiet gesetzt werden. Die Elektronen erfahren eine zusätzliche Auslenkung Δx_e von der äquidistanten

4. Verifizierung und Untersuchung

Position x_e in x-Richtung

$$\Delta x_e = A \cdot \sin(kx_e), \quad (4.16)$$

mit der Amplitude $A = 0,01$ m und der Wellenzahl $k = 4\pi/6$ m, die so gewählt wurde, dass innerhalb des Gebiets zwei Perioden der Welle abgebildet sind. Die Plasmafrequenz der Elektronen $\omega_{p,e}$ berechnet sich aus

$$\omega_{p,e} = \sqrt{\frac{n_e q_e^2}{m_e \epsilon_0}} \quad (4.17)$$

mit der (realen) Partikeldichte $n_e = N_e/V = 10^{13} \text{ m}^{-3}$, der Einheitsladung q_e und der Masse eines (realen) Elektrons m_e . Die erwartete Plasmafrequenz beträgt hier also $\omega_{p,e} = 1,784 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$ mit der dazugehörigen Periode $T_{p,e} = 2\pi/\omega_{p,e} = 35,22 \text{ ns}$. Zur Untersuchung der Schwingung wird der zeitliche Verlauf der relativistischen kinetischen Energie aller Partikel N_p

$$E_{kin} = \sum_{i=1}^{N_p} c_0^2 m_i (\gamma_i - 1) \quad (4.18)$$

und der Energie der elektromagnetischen Felder im Rechengebiet gemäß Gleichungen (4.7) und (4.10) als potentielle Energie E_{pot} betrachtet. Abbildung 4.42 zeigt exemplarisch die Energien unter Ver-

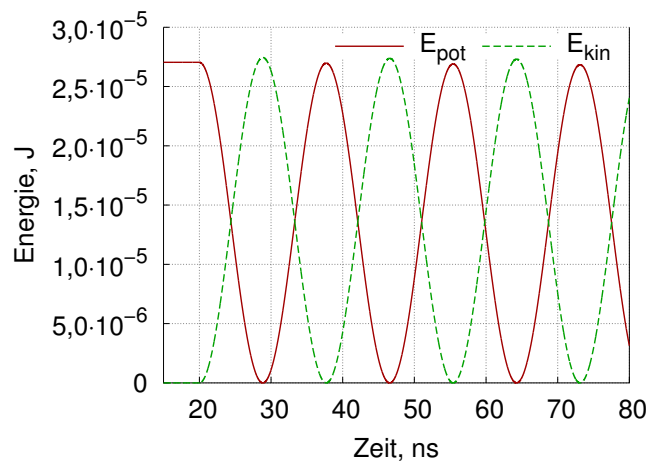


Abbildung 4.42.: Zeitlicher Verlauf der kinetischen und potentiellen Energie der Plasmaschwingung.

wendung der Formfunktion. Die ersten 20 ns werden die Partikel festgehalten, um sicherzugehen, dass sich nach dem initialen Einsetzen der Partikel die elektromagnetischen Felder vollständig ausbilden können, bevor die Schwingung beginnt. Die Plasmafrequenz bzw. die dazugehörige Periode ergibt sich aus der Länge zweier Perioden in der Energieschwingung, was anschaulich leicht dadurch zu erklären ist, dass für eine vollständige Schwingungsperiode eines Elektrons zweimal die minimale kinetische Energie im Umkehrpunkt und zweimal die maximale kinetische Energie im

	Form- funktion	B-Splines	Volumen- gewichtung
Periode T , ns	35,41	35,47	35,31
Plasmafrequenz ω_e , MHz	177,4	177,1	177,9
Abweichung, %	-0,55	-0,70	-0,25
$E_{pot,max,Start}$, mJ	270,4	270,3	275,3
$\Delta E_{pot,max}$ pro Periode, %	-0,49	+0,0017	+0,257
$E_{kin,max,Start}$, mJ	264,3	274,1	276,8
$\Delta E_{kin,max}$ pro Periode, %	-0,49	+0,0014	+0,258

Tabelle 4.2.: Vergleich von Periode, Plasmafrequenz und Energieerhaltung der drei relevanten Depositionsmethoden für eine Plasmawelle.

Schwerpunkt der Schwingung erreicht wird. Für die Elementmittelwertmethode kann sich hier keine Schwingung bilden, da durch die gemittelte Verteilung innerhalb der Elemente die Auslenkung der Elektronen nicht in der Ladungsdichteverteilung widerspiegelt wird. Das Gleiche gilt für die Nächster-Gaußpunkt-Methode durch die Mittelung innerhalb der Gaußpunktvolumen. Tabelle 4.2 zeigt für die anderen drei Methoden die Periode, die Plasmafrequenz und die Abweichung von der oben berechneten erwarteten Frequenz. Sowohl der Radius der Formfunktion als auch die Größe des Hintergrundgitters für die B-Splines- und die Volumengewichtungsmethode betragen 0,1 m, entsprechen also der Größe eines Elements. Alle drei Methoden bilden die Schwingung mit einer Abweichung von unter 1 % ab. Zusätzlich ist die Änderung der maximalen potentiellen und kinetischen Energie im Rechengebiet über eine Periode angegeben, um die langfristige Stabilität der Plasmawelle zu beurteilen. Auch hier ergeben sich Abweichungen von unter 1 %, mit jeweils gleichen Abweichungen für die potentielle und kinetische Energie, die Plasmawelle ist also mit allen drei Methoden stabil, wobei die Volumengewichtungsmethode eine geringe Energiezunahme und die Formfunktionsmethode eine geringe Energieabnahme zur Folge hat.

4.4.4. Energieerhaltung

Zur Untersuchung der Energieerhaltung werden zwei Testfälle herangezogen. Im ersten Fall wird ein würfelförmiges Gebiet mit 5 cm Kantenlänge und periodischen Rändern in $25 \times 25 \times 25$ Elemente mit dem Polynomgrad $N = 2$ des DG-Verfahrens unterteilt. In das Gebiet werden initial zufällig 125000 Elektronen mit einer Dichte von $n_e = 10^{15} \text{ m}^{-3}$ und einer Temperatur von $T_e = 840000 \text{ K} = 72,4 \text{ eV}$ gesetzt. Die Debyelänge ergibt sich dann gemäß Gleichung (2.4) zu $\lambda_D = 2 \text{ mm}$, was der Kantenlänge eines Elements entspricht. Die betrachtete Simulationszeit beträgt 10 ns. Abbildung 4.43 zeigt links den Verlauf der Gesamtenergie, also der Summe aus kinetischer Energie aller Partikel und elektrischer und magnetischer Energie im Feld, für die verschiedenen Depositionsmethoden. Rechts ist der Verlauf für den gleichen Testfall mit $10 \times 10 \times 10$ Elementen, also unteraufgelöster Debyelänge, dargestellt.

4. Verifizierung und Untersuchung

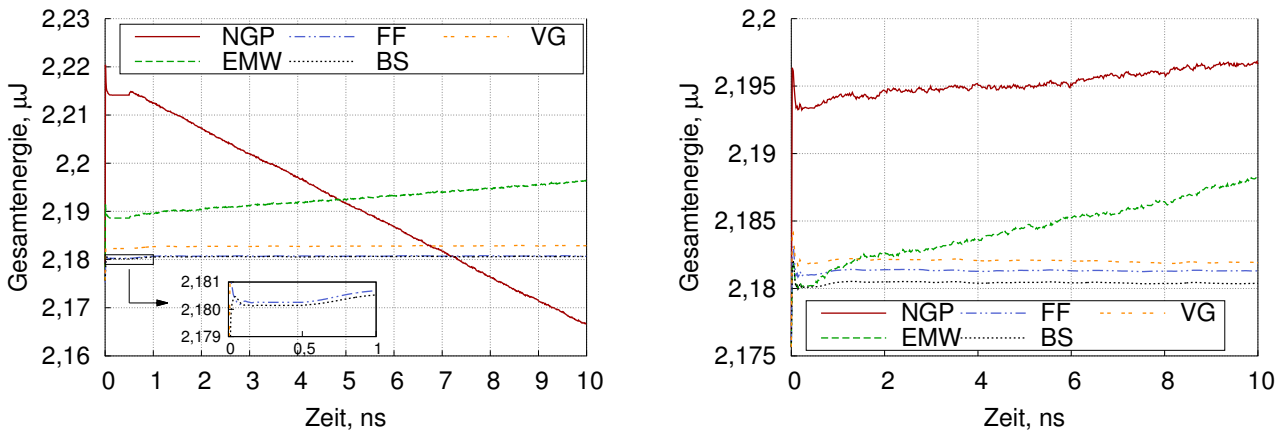


Abbildung 4.43.: Energieverlauf für Testfall 1 für $25 \times 25 \times 25$ Elemente (links) und $10 \times 10 \times 10$ Elemente (rechts) für verschiedene Depositionsmethoden. NGP: Nächster-Gaußpunkt, FF: Formfunktion, VG: Volumengewichtung, EMW: Elementmittelwert, BS: B-Splines.

Auch wenn die Partikel initial in allen Fällen identisch verteilt sind, ist für die verschiedenen Methoden nicht das gleiche Energieniveau zu erwarten, da die Verteilung der Ladung auf dem Gitter unterschiedlich ist. Die Depositionsmethoden höherer Ordnung, also Formfunktions-, B-Splines- und Volumengewichtungsmethode zeigen eine sehr gute Energieerhaltung. Die Elementmittelwertmethode zeigt einen minimal geringeren Energieanstieg bei der schlechter aufgelösten Simulation. Für die Nächster-Gaußpunkt-Methode ergibt sich ein uneinheitliches Bild mit einem Energieabfall für den gut und einem -anstieg für den schlecht aufgelösten Fall.

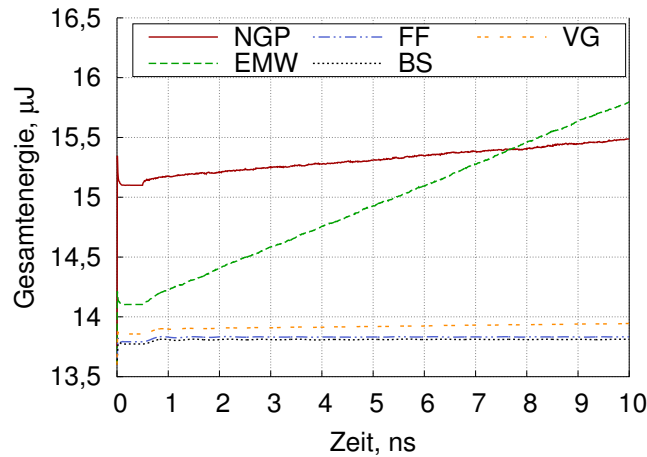


Abbildung 4.44.: Energieverlauf für Testfall 1 für $25 \times 25 \times 25$ Elemente mit einer um den Faktor 6,25 erhöhten Dichte.

Eine andere Möglichkeit, den Fall in gleichem Maße schlechter aufzulösen wie durch die Reduktion der Elemente, ist eine Erhöhung der Dichte. Abbildung 4.44 stellt den Verlauf für diese Simulation dar. Wieder ergibt sich für die Verfahren höherer Ordnung eine gute Energieerhaltung, allerdings ist

für die Volumengewichtungsmethode, die innerhalb dieser Methoden die niedrigste Ordnung besitzt, bereits ein leichter Anstieg der Energie zu erkennen. Die Elementmittelwertmethode zeigt hier ein signifikant schlechteres Verhalten als im Testfall mit der aufgelösten Debyelänge.

Zur weiteren Untersuchung wird ein zweiter Testfall aus [34] verwendet, bei dem eine bedeutend höhere Dichte von $n_e = 10^{27} \text{ m}^{-3}$ bei $T_e = 90 \text{ eV}$ in einem Gebiet von nur $1 \mu\text{m}$ Kantenlänge simuliert wird. Auch hier ist bei einer Aufteilung in $25 \times 25 \times 25$ Elemente die Debyelänge aufgelöst. Abbildung 4.45 zeigt den Energieverlauf für diesen zweiten Testfall und für den gleichen Testfall mit

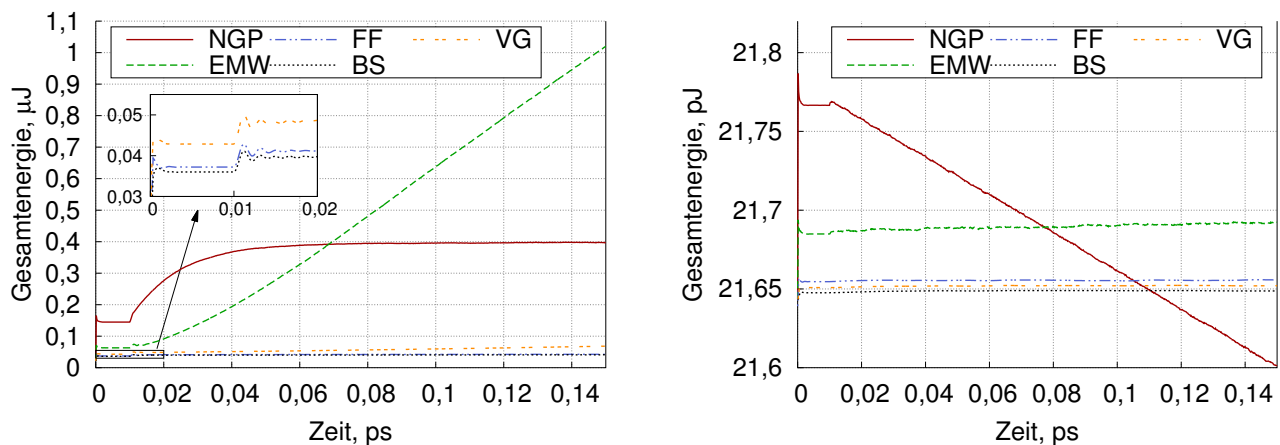


Abbildung 4.45.: Energieverlauf für Testfall 2 für $25 \times 25 \times 25$ Elemente und $n_e = 10^{27} \text{ m}^{-3}$ (links) bzw. $n_e = 10^{24} \text{ m}^{-3}$ (rechts).

einer geringeren Dichte von $n_e = 10^{24} \text{ m}^{-3}$, also einer Überauflösung der Debyelänge. In diesem Fall ergibt sich für die Elementmittelwertmethode ein stärkerer Energieanstieg bei der höheren Dichte, also der größeren Auflösung, während die drei Methoden höherer Ordnung energieerhaltend sind und die Nächster-Gaußpunkt-Methode ein erratisches Verhalten aufweist, das allerdings hier nicht näher betrachtet wird, da die vorherigen Untersuchungen, insbesondere der Ladungsverteilung, bereits zeigen, dass die Nächster-Gaußpunkt-Methode für die Simulation von Anwendungen in der Regel nicht geeignet ist.

Da die Energieerhaltung der Elementmittelwertmethode ein uneinheitliches Bild zeigt, wird diese hier näher untersucht. Abbildung 4.46 stellt den Energieverlauf für verschiedene Elementzahlen für den zweiten Testfall dar. Offensichtlich wird die Gesamtenergie bei feinerem Gitter grundsätzlich schlechter erhalten, unabhängig von der Auflösung der Debyelänge, die hier bei 25 Elementen je Richtung erreicht ist. Genauso wird die Energieerhaltung schlechter, wenn die Anzahl der Simulationsteilchen bei gleichbleibender Dichte verringert wird, also der Makropartikelfaktor erhöht wird (Abb. 4.47). Beides deutet darauf hin, dass die Ursache in der Diskretisierung der Partikel bzw. der Ladungen auf dem Gitter liegt. Je feiner die Gitterauflösung und je weniger Simulationsteilchen in einem Element liegen, desto größer ist der Sprung der Ladungsdichte zwischen zwei benachbarten Elementen und desto größer ist der zeitlich auftretende Sprung der Dichteverteilung beim Übertritt

4. Verifizierung und Untersuchung

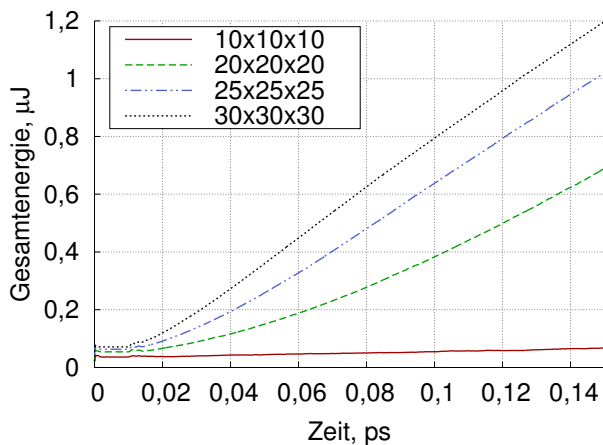


Abbildung 4.46.: Energieverlauf der Elementmittelwertmethode für Testfall 2 mit unterschiedlichen Elementzahlen.

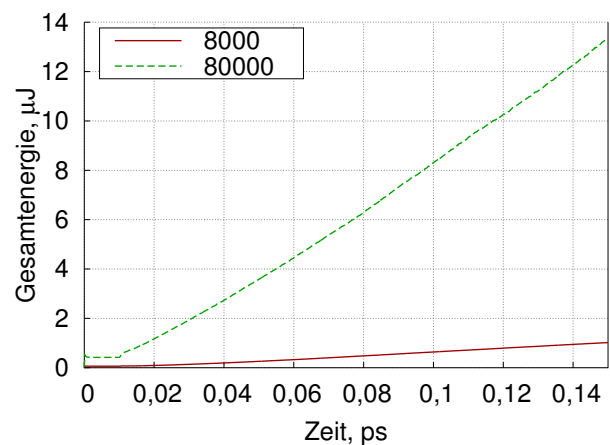


Abbildung 4.47.: Energieverlauf der Elementmittelwertmethode für Testfall 2 mit 8000 und 80000 realen Elektronen pro Simulationspartikel.

eines Partikels von einem Element in das Nachbarelement. Wie schon in Kapitel 4.4.1 ausgeführt, führen diese Sprünge zu unrealistisch starken Dichtegradienten und damit starken Feldern sowie zu Oszillationen in der Feldlösung.

4.4.5. Weitere Untersuchungen und Fazit

Im Rahmen dieser Arbeit wurden weitere Untersuchungen und Testfälle zu den Depositionsmethoden durchgeführt, die in [71] veröffentlicht wurden und daher hier nur in Kürze zusammengefasst werden sollen. Eine Weibel-Instabilität [79], bei der durch eine initiale anisotrope Elektronengeschwindigkeitsverteilung in einem homogenen Plasma instabile elektromagnetische Wellen erzeugt werden, wurde mit der Elementmittelwert-, der Volumengewichtung- und der B-Splines-Methode simuliert. Die Ergebnisse zeigen generell eine bessere Energieerhaltung und -umwandlung für die Methoden mit Hintergrundgitter als für die Elementmittelwertmethode. Für sehr feine Hintergrundgitter, also wenigen Partikeln pro Zelle, verschlechtert sich die Energieerhaltung, und bei weniger als 5 Partikeln pro Zelle wird die Simulation mit der Volumengewichtungsmethode instabil, während die B-Splines-Methode auch in diesem Bereich noch stabile Ergebnisse zeigt. Die Simulation mit der B-Splines-Methode wurde mit einer Simulation auf einem höher aufgelösten Rechengitter unter Verwendung der Elementmittelwertmethode verglichen. Die B-Splines-Methode erzielt ähnliche Resultate, benötigt dabei, da durch die Deposition höherer Ordnung ein größeres Gitter verwendet werden kann, aber nur 1,5 % der Rechenzeit der Elementmittelwertmethode. Zusätzlich wurde in [71] der Anwendungsfall eines Gyrotronresonators [32] mit den drei Methoden simuliert. Auch hier zeigt sich eine Verbesserung der Ergebnisse mit den Depositionsmethoden höherer Ordnung, wobei Gyro-

tronsimulationen unter Verwendung der Formfunktion, beispielsweise in [72, 74], die Ausbildung der elektromagnetischen Wellen noch besser beschreiben.

Die Ergebnisse der Untersuchung der Depositionsmethoden erlauben die Einordnung der Methoden hinsichtlich Anwendbarkeit sowie die Gegenüberstellung der bisher in diesem Code standardmäßig verwendeten Elementmittelwert- und Formfunktionsmethoden mit den neu implementierten Volumengewichtungs-, B-Splines- und Nächster-Gaußpunkt-Methoden.

Die Elementmittelwertmethode eignet sich insbesondere für aufwändige Simulationen niedriger Ordnung mit hohen Partikel- und Elementzahlen, bei denen keine Wellen- oder Plasmaphänomene im Bereich der Elementgrößen aufgelöst werden müssen, wie beispielsweise Triebwerksplasmaströmungen oder Anströmungen bei atmosphärischen Eintrittssimulationen in großen Höhen. Die bei der Elementmittelwertmethode auftretenden räumlichen und zeitlichen Sprünge der Ladungsverteilung sind hier durch die hohe Anzahl an Partikeln und Elementen weniger signifikant und die hohe Geschwindigkeit der Methode erlaubt die Simulation hoher Partikelzahlen über viele Zeitschritte.

Umgekehrt wird die Formfunktionsmethode sinnvollerweise für Simulationen hoher Ordnung mit geringeren Partikel- und Elementzahlen verwendet, bei denen die Auflösung von Phänomenen im Bereich der Elementgröße relevant ist und bei denen durch geringere Partikelzahlen die Anwendung der aufwändigen Formfunktionen überhaupt möglich ist, zum Beispiel für die angesprochene Simulation von Mikrowellengeneratoren (Gyrotrons) [55, 72].

Die Nächster-Gaußpunkt-Methode hat sich insgesamt als eher ungeeignet erwiesen, da hier die Nachteile der starken Gradienten der Elementmittelwertmethode durch das kleinere Depositionsvolumen noch verschärft werden und der Rechenaufwand über dem der Elementmittelwertmethode liegt. Generell lässt sich hier also keine Verbesserung gegenüber der Elementmittelwertmethode feststellen.

Als Methode für Simulationen niedriger Ordnung eignet sich die Volumengewichtungsfunktion als Alternative zur Elementmittelwertmethode. Während der Rechenaufwand nur geringfügig höher ist, erlaubt die Volumengewichtungsfunktion eine Ladungsverteilung höherer Ordnung ohne räumlich oder zeitlich auftretende Sprünge, so dass hier bereits Phänomene innerhalb der Elemente, wie zum Beispiel die untersuchte Plasmawelle, berücksichtigt werden, ohne das Rechengitter extrem verfeinern zu müssen.

Für Simulationen hoher Ordnung ist die B-Splines-Methode als Alternative zur Formfunktion zu sehen. Die Ladung wird hier stärker verschmiert und erreicht insbesondere bei sehr hohen Ordnungen und sehr hoher Auflösung der Ladungsverteilung nicht die Genauigkeit der Formfunktion, im Gegenzug ist der Rechenaufwand allerdings erheblich geringer. Insbesondere für Anwendungsfälle, für die nicht die hohe Ordnung der Formfunktionsmethode benötigt wird, die Elementmittelwertmethode aber die Partikelverteilungen nur ungenügend oder nur bei sehr feinen Gitterauflösungen widerspie-

gelt, reduziert die B-Splines-Methode den Rechenaufwand erheblich und erlaubt eine ausreichend gute Ladungsverteilung.

4.5. Profiling und parallele Skalierbarkeit

Von Interesse für die Anwendung und die Anwendbarkeit der entwickelten und implementierten Methoden ist nicht nur ihre Funktion sondern auch der erforderliche Rechenaufwand sowie die Skalierbarkeit für Höchstleistungsrechner mit einer Vielzahl von Prozessoren. Im Folgenden werden diese Punkte an repräsentativen Testfällen untersucht.

4.5.1. Profiling

Beim Profiling wird untersucht, welchen Anteil an der Gesamtrechenzeit die einzelnen Teile des Programmcodes haben, ähnlich wie für die Deposition mittels Formfunktionsmethode in Kapitel 4.4.2. Generell lässt sich das Verfahren dabei in vier Hauptanteile unterteilen: Die Deposition der Ladungen von den Partikelpositionen auf die Gaußpunkte des Gitters, die Feldberechnung mittels des DG-Verfahrens, die Interpolation der Felder vom Gitter auf die Partikelposition und die Bewegung, Lokalisierung und Randbehandlung der Partikel selbst, im Folgenden kurz als Partikelverfolgung bezeichnet. Die Anteile an der Gesamtrechenzeit hängen dabei vom Simulationsfall, insbesondere von der Anzahl an Partikeln und Gitterelementen ab.

Es werden daher drei Fälle betrachtet, bei denen das in Abbildung 4.33 dargestellte Rechengebiet verwendet wird. Im ersten Fall wird das Gebiet in 8856 Elemente mit einem Polynomgrad $N = 4$ unterteilt, was 1,107 Millionen Gaußpunkten entspricht, und es werden zufallsverteilt 10^5 Partikel deponiert. Im zweiten Fall wird im gleichen Gitter die Zahl der Partikel auf 10^6 erhöht und im dritten Fall die Zahl der Elemente auf 70848 (=8,856 Millionen Gaußpunkte) bei 10^5 Partikeln erhöht. Die auf einem AMD Opteron 6344 Prozessor gemessene Rechenzeit wird auf einen Runge-Kutta-Schritt, also einen Durchlauf aller Teile des Verfahrens ohne Initialisierung oder Ausgabe, normiert. Auch wenn sich die Rechenzeiten für verschiedene Anwendungsfälle durch unterschiedliche Partikel- und Elementzahlen sowie durch die unterschiedlichen Zeitintegrationsmethoden stark von den hier untersuchten Fällen unterscheiden können, kann durch die hier verwendete Normierung eine Abschätzung für alle potentiell auftretenden Fälle vorgenommen werden, indem die Zeiten der entsprechenden Programmteile auf den jeweils aktuellen Fall skaliert werden. Für den Radius der Formfunktion und des entsprechenden Ladungsverteilungsvolumens der B-Splines- und Volumengewichtungsmethode wurde wieder die Kantenlänge eines durchschnittlichen Elements verwendet.

Abbildung 4.48 zeigt die Rechenzeit für den ersten Fall für die verschiedenen Depositionsmethoden

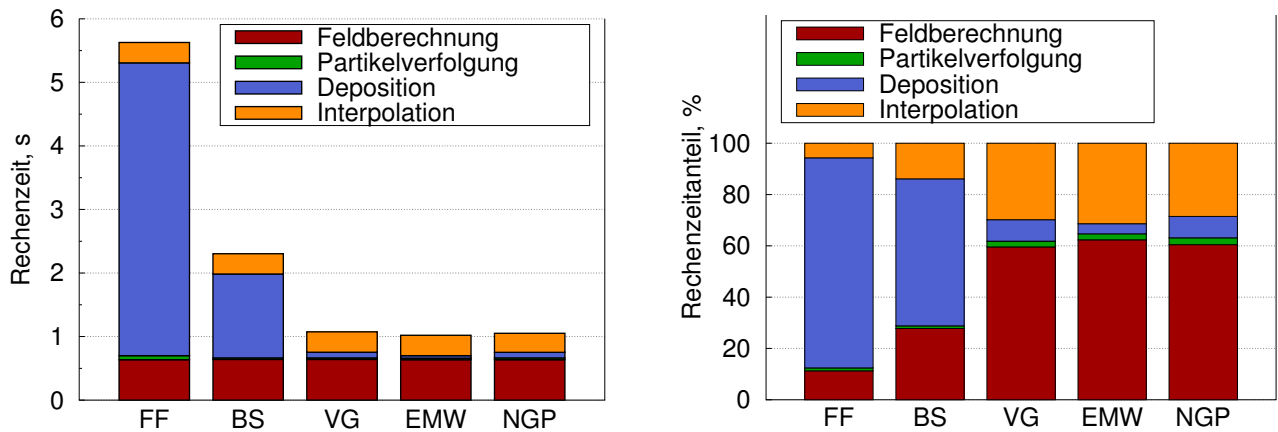


Abbildung 4.48.: Absolute (links) und prozentuale (rechts) Rechenzeit eines Runge-Kutta-Schritts bei 10^5 Partikeln und $1,107 \cdot 10^6$ Gaußpunkten für die unterschiedlichen Depositionsmethoden (FF: Formfunktion, BS: B-Spline, VG: Volumengewichtung, EMW: Elementmittelwert, NGP: Nächster Gaußpunkt)

absolut und als prozentualen Anteil an der Gesamtrechenzeit. Während bei der Formfunktions- und der B-Splines-Methode die Deposition den Hauptanteil der Rechenzeit ausmacht, ist für die anderen drei Methoden hauptsächlich die Feldberechnung und die Interpolation für die Rechenzeit ausschlaggebend. Der zweite Fall (10^6 Partikel) ist in Abbildung 4.49 dargestellt. Durch die hohe

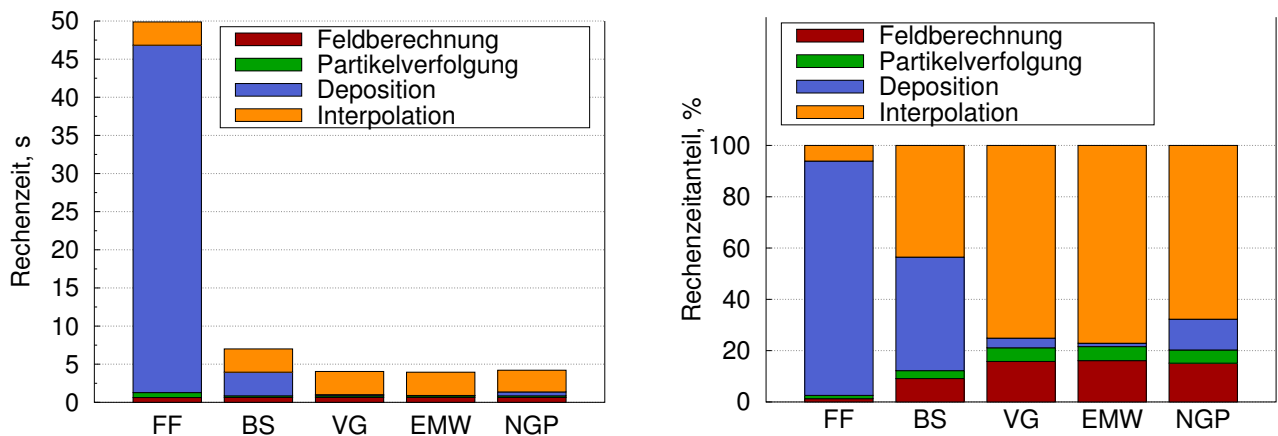


Abbildung 4.49.: Absolute (links) und prozentuale (rechts) Rechenzeit eines Runge-Kutta-Schritts bei 10^6 Partikeln und $1,107 \cdot 10^6$ Gaußpunkten für die unterschiedlichen Depositionsmethoden (FF: Formfunktion, BS: B-Spline, VG: Volumengewichtung, EMW: Elementmittelwert, NGP: Nächster Gaußpunkt)

Partikelzahl rückt der Anteil der Feldberechnung in den Hintergrund und die Deposition wird für die Formfunktionsmethode noch bestimmender, während für die anderen Methoden die Rechenzeit für die Interpolation den Hauptanteil ausmacht. Im dritten Fall (70848 Elemente, Abbildung 4.50) ergibt sich wie zu erwarten das umgekehrte Bild; die Feldberechnung dominiert für die schnellen Depositionsmethoden, wobei für die Formfunktions- und B-Splines-Methoden allerdings immer noch

4. Verifizierung und Untersuchung

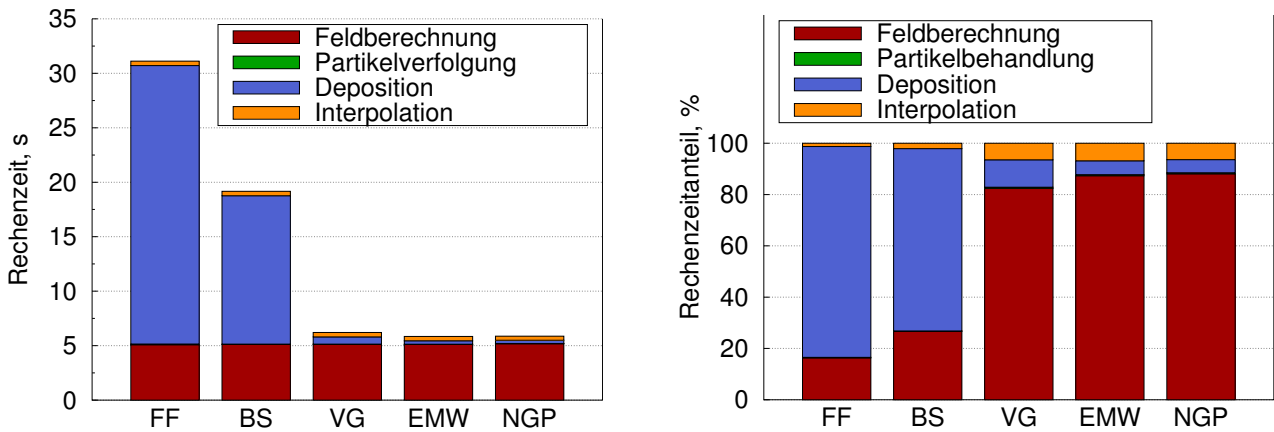


Abbildung 4.50.: Absolute (links) und prozentuale (rechts) Rechenzeit eines Runge-Kutta-Schritts bei 10^5 Partikeln und $8,856 \cdot 10^6$ Gaußpunkten für die unterschiedlichen Depositionsmethoden (FF: Formfunktion, BS: B-Spline, VG: Volumengewichtung, EMW: Elementmittelwert, NGP: Nächster Gaußpunkt)

die Deposition ausschlaggebend ist. Zusammengefasst ist die Formfunktionsmethode, wie bereits untersucht, für die meisten Anwendungsfälle für 80 %-90 % der Rechenzeit verantwortlich, so dass eine Verbesserung der Methode auch auf die Gesamtrechenzeit einen erheblichen Einfluss hätte.

Die Partikellokalisierung, -verfolgung und -randbehandlung spielt in keinem der hier untersuchten Fälle eine signifikante Rolle, allerdings kann beispielsweise bei einer Strömungsrechnung, bei der eine Vielzahl an Partikel jeden Zeitschritt neu eingesetzt und dann initial lokalisiert werden müssen, der Anteil an der Rechenzeit ansteigen. Generell ergibt sich mit Ausnahme der Formfunktionsmethode ein ausgeglichenes Bild, wobei je nach Verhältnis von Partikeln und Elementen bzw. Gaußpunkten die Interpolation oder die Feldberechnung überwiegen, die respektive jeweils nur von der Anzahl an Partikeln oder an Elementen abhängig sind. Zusätzlich zur Partikel- oder Elementzahl spielt auch die Zeitintegrationsmethode eine Rolle für die Verhältnisse der Rechenzeiten der einzelnen Programmteile. Die hier angegebenen Daten entsprechen einem Runge-Kutta-Schritt, so dass z.B. bei Verwendung der Euler-Zeitintegration (Kapitel 3.5.2), bei der 5 Feldberechnungsschritte auf nur einen Partikelschritt kommen, das Verhältnis der Rechenkosten entsprechend hin zur Feldberechnung verschoben wird. Noch stärker kommt dies bei Verwendung der Subcyclingmethode (Kapitel 3.5.4) zum Tragen, da hier auf einen Partikelschritt in der Regel mehrere Hundert bis Tausend Feldberechnungsschritte kommen.

4.5.2. Parallele Skalierbarkeit

Die parallele Skalierbarkeit gibt an, wie sich die benötigte Rechenzeit unter der Verwendung multipler Prozessoren verhält. Hierbei gibt es zwei unterschiedliche Betrachtungsweisen. Die sogenannte

„starke“ Skalierbarkeit betrachtet die Entwicklung der Rechenzeit bei einer Erhöhung der Zahl der Prozessoren ohne eine Veränderung der Simulationsrechnung. Mit höherer Prozessoranzahl sinkt also die Rechenlast pro Prozessor und damit die Gesamtrechenzeit, idealerweise proportional zur Anzahl der Prozessoren. Da im Rahmen dieser Arbeit vor allem die Skalierbarkeit der Partikellokalisierung und -bewegung sowie der Depositionsmethoden interessant sind, wird eine zufällige quasi-homogene Verteilung von 10 Millionen Partikeln in einem würfelförmigen Gebiet mit 125000 Elementen, also 8 Millionen Gaußpunkten bei $N = 3$ verwendet. Die Effekte inhomogen verteilter Partikel sowie des kontinuierlichen Einsetzens neuer Partikel werden hier also nicht berücksichtigt, wurden aber bereits in [55] untersucht. Alle Rechnungen wurden auf der CRAY XE6 des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart mit 32 Prozessen pro Knoten durchgeführt, die Skalierungsfaktoren daher auf 32 Prozesse normiert. Abbildung 4.51 zeigt den Skalierungsfaktor für diesen Fall, also die Reduktion der Rechen-

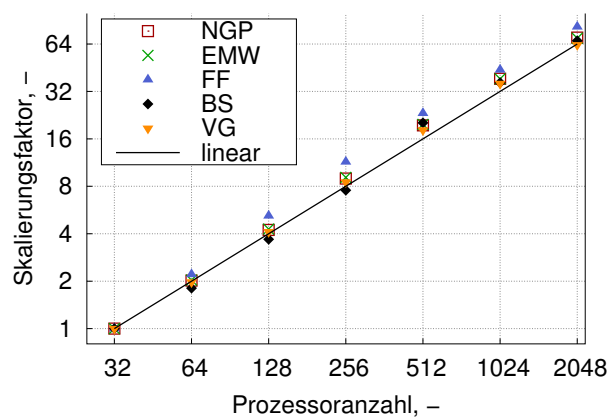


Abbildung 4.51.: Skalierungsfaktor für die starke Skalierbarkeit

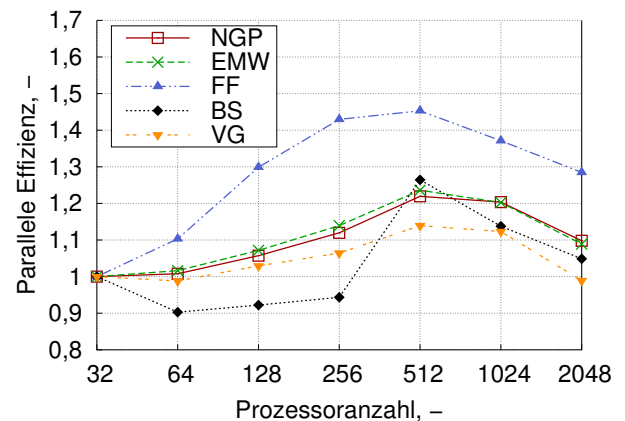


Abbildung 4.52.: Parallele Effizienz für die starke Skalierbarkeit

zeit über die Anzahl der Prozessoren, normiert auf die Rechenzeit mit 32 Prozessoren t_{32} bzw. einem Knoten der CRAY XE6. Abbildung 4.52 stellt die dazugehörige parallele Effizienz dar, die aus der Anzahl der Prozessoren N_{proc} und der Rechenzeit t mit

$$PE = \frac{32t_{32}}{N_{proc}t} \quad (4.19)$$

berechnet wird und angibt, wie stark die Rechenzeit von der linearen Skalierbarkeit ($PE = 1$) abweicht. Generell ist die Skalierbarkeit sehr gut und liegt im oder teilweise sogar über dem linearen Bereich. Eine parallele Effizienz über 1 entsteht dabei normalerweise durch spezifische hardwareseitige Effekte, wie beispielsweise die bessere Ausnutzung des Prozessor-Pufferspeichers bei kleineren Rechenproblemen pro Prozess. Die Formfunktionsmethode skaliert am besten, was darin begründet liegt, dass die Rechenzeit an sich bedeutend höher ist, so dass der mit steigender Prozessorzahl steigende Kommunikationsaufwand hier am geringsten ins Gewicht fällt. Die B-Splines- und die Volumengewichtungsmethode skalieren erwartungsgemäß am schlechtesten, da hier die Werte der

Hintergrundgitterzellen zwischen benachbarten Prozessen ausgetauscht werden müssen. Über die Ursache für den genauen Verlauf der parallelen Effizienz lassen sich allerdings keine Aussagen machen, da die Werte von einer Vielzahl von Faktoren abhängen, wie zum Beispiel dem verwendeten Gitter, der Gebietszerlegung, dem Hintergrundgitter und dem Zusammenspiel dieser Faktoren.

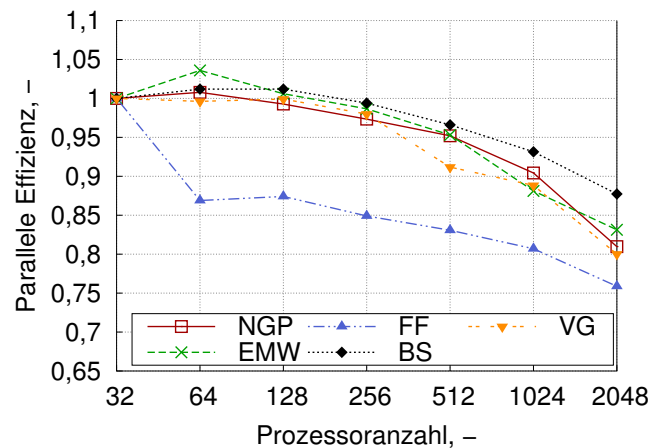


Abbildung 4.53.: Parallele Effizienz für die schwache Skalierbarkeit

Die zweite Betrachtungsweise ist die sogenannte „schwache“ Skalierbarkeit. Hier wird der Simulationsfall mit der Anzahl der Prozessoren skaliert, so dass jeder Prozess theoretisch immer die gleiche Rechenlast besitzt, und die gleiche Rechenzeit für beliebige Prozessorzahlen benötigt wird. Der hierfür verwendete Testfall besteht aus 1728 Elementen (110592 Gaußpunkten) und 138240 Partikeln (80 je Element) für den kleinsten Fall mit 32 Prozessoren. Entsprechend der Anzahl der Prozessoren wird sowohl die Anzahl der Elemente als auch der Partikel skaliert. Abbildung 4.53 zeigt die parallele Effizienz für bis zu 2048 Prozessoren. Sie nimmt für steigende Prozessorzahlen nach einem kurzen Anstieg immer weiter ab, liegt aber bei 2048 Prozessoren immer noch bei guten ca. 76 %-88 %. Insgesamt ergibt sich für die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten und implementierten Parallelisierungsmethoden eine gute Skalierbarkeit, so dass sie uneingeschränkt mit hohen Prozessorzahlen verwendet werden können.

4.6. Anwendungsfall Ionenoptik

Das hier entwickelte Verfahren wurde bereits für verschiedene Anwendungsfälle eingesetzt, vor allem für die Simulation von Gyrotrons, also Hochleistungsmikrowellengeneratoren [71, 74]. Es soll in dieser Arbeit auf die Anwendbarkeit für die Simulation der Ionenoptik innerhalb eines Ionentriebwerks für Raumfahrtanwendungen untersucht werden. Derartige Triebwerke erzeugen Schub durch Rückstoßkräfte, die bei einer elektrostatischen Beschleunigung von Ionen in das Vakuum entstehen. Dazu wird in einer Kammer ein Treibstoff mit möglichst hoher molekularer Masse und niedriger Ionisationsenergie, üblicherweise Xenon, ionisiert. Am Ausgang der Kammer befinden sich Lochgitter, an denen unterschiedliche Spannungen anliegen. Die Ionen werden aufgrund der elektrischen Felder durch die Löcher des Gitters aus der Kammer heraus extrahiert und beschleunigt, während in gleichem Maße dem Plasma Elektronen über die Gitter und die Kammerwände entzogen werden. Dem Ionenstrahl werden diese Elektronen außerhalb des Triebwerks mit Hilfe eines Neutralisators wieder zugeführt, um die Ladungsneutralität wiederherzustellen. Für Details zur Funktionsweise, den verschiedenen Ionisationsmechanismen und Gitterkonfigurationen sei auf entsprechende Fachliteratur verwiesen [3, 36].

Von Interesse ist bei einem Ionentriebwerk generell die Durchströmung des Lochgitters und die dabei entstehende Strömungsform mit dem Ziel einer möglichst hohen Durchlässigkeit oder Transparenz für die Ionen. Des Weiteren ist die Entstehung von Ladungsaustauschionen von Belang, welche mit hoher Geschwindigkeit auf die Gitter treffen und eine Erosion verursachen können, die zu einem Versagen der Bündelungseigenschaften der Gitter führen kann. In einem ersten Schritt soll hier nur die Strömung selbst abgebildet werden. Durch Kopplung mit dem DSMC-Verfahren ist mittelfristig auch die Simulation der Ladungsaustauschionen möglich. Das hier betrachtete Triebwerk besitzt zwei Gitter, ein Abschirmgitter und ein Beschleunigungsgitter. Es basiert auf den Daten des NSTAR-Ionentriebwerks der NASA, das ca. 15000 kreisförmige Löcher in einer hexagonalen Anordnung auf den Gittern besitzt [37, 78], wobei hier zur Reduktion des nötigen Rechenaufwands und zur Vereinfachung der Rechengitter eine rechteckige Anordnung der Löcher simuliert wird. Da die Simulation aller Löcher vom Rechen- und Speicheraufwand nicht möglich und im Hinblick auf die Ionenoptik auch nicht nötig ist, wird die Durchströmung eines einzelnen Lochs der beiden Ionentriebwerksgitter simuliert. Die Effekte der im realen Triebwerk an das simulierte Loch angrenzenden Löcher werden durch periodische Ränder berücksichtigt.

Abbildung 4.54 zeigt beispielhaft ein Rechengebiet für die Simulation. Die Strömungsrichtung von links nach rechts sei als x -Richtung definiert, mit $x = 0$ am linken Rand. In Abbildung 4.55 ist ebenfalls beispielhaft ein Simulationsergebnis dargestellt, um die dreidimensionale Strömung zu veranschaulichen; die Ergebnisse der Simulationen werden im Weiteren zur besseren Lesbarkeit als zweidimensionale Schnitte abgebildet.

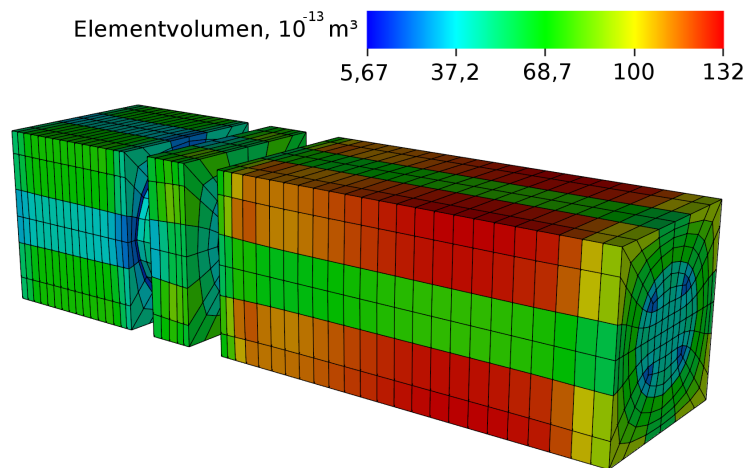


Abbildung 4.54.: Rechengebiet für die Lochdurchströmung mit 8856 Elementen und 566784 Gaußpunkten bei Polynomgrad $N = 3$.

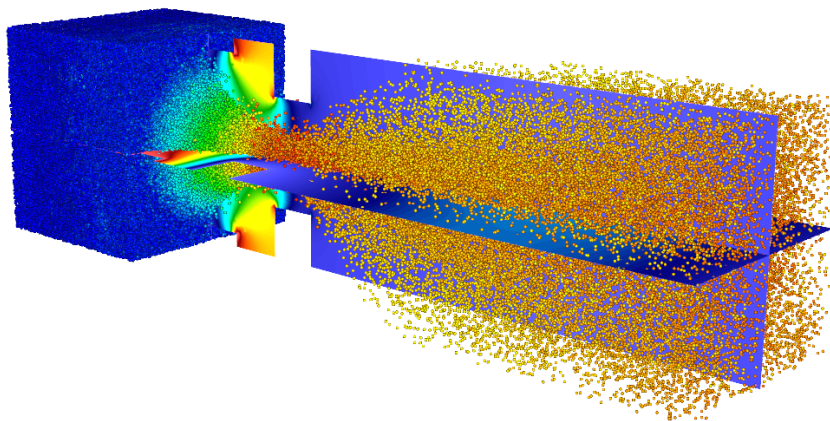


Abbildung 4.55.: Veranschaulichung der Strömung. Die Farbe der Partikel entspricht der Geschwindigkeit, in den Schnittebenen sind Potential (horizontal) und elektrisches Feld (vertikal) abgebildet. Details zu den abgebildeten Werten können den folgenden Abbildungen entnommen werden.

Die Geometrie des Strömungsgebiets entspricht einem Loch des NSTAR-Iontriebwerks inklusive eines Gebiets vor dem Abschirmgitter, in dem die Partikel entsprechend der Plasmazusammensetzung in der Ionisationskammer eingesetzt werden, sowie eines Gebiets hinter dem Beschleunigungsgitter, in dem sich Ionenstrahl ausbreitet. Wie bereits erwähnt, wird zur Vereinfachung eine rechteckige Anordnung der Löcher auf den Gittern anstelle der hexagonalen Anordnung des NSTAR-Triebwerks simuliert. Der Abstand zwischen benachbarten Lochmittelpunkten wird dabei identisch zum Abstand bei der hexagonalen Anordnung gewählt und entspricht hierdurch den Abmessungen des Rechengebiets in y - und z -Richtung. Die geometrischen Daten können [78] entnommen werden und sind in Abbildung 4.56 schematisch dargestellt.

Die Wände in y- und z-Richtung sind periodisch für Partikel und Felder. Der Abstand zwischen den Gittern in x-Richtung beträgt 0,58 mm. Das vordere Abschirmgitter besitzt eine Dicke von 0,38 mm, der Lochdurchmesser ist hier 1,91 mm. Das Beschleunigungsgitter ist 0,51 mm dick mit einem Lochdurchmesser von 1,14 mm. Der Lochabstand in y- und z-Richtung und damit auch die Ausdehnung des Rechengebiets in y- und z-Richtung beträgt 2,21 mm.

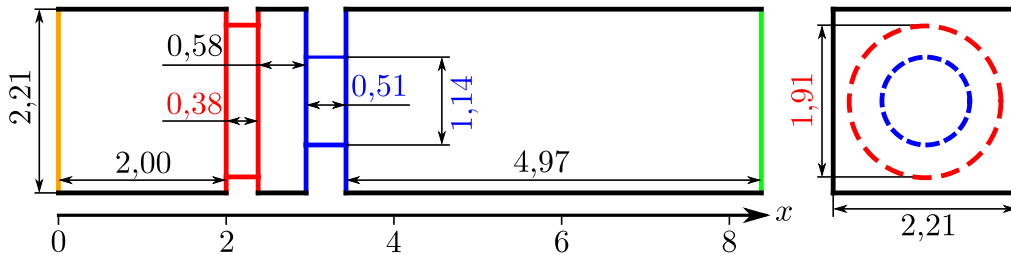


Abbildung 4.56.: Schematische Darstellung der Geometrie des Simulationsgebiets für die Simulation der Ionenoptik in einer Seiten- (links) und Frontalansicht (rechts). Alle Angaben in mm. Orange: Offener Rand (1074 V), Grün: Offener Rand, Rot: Abschirmgitter (1074 V), Blau: Beschleunigungsgitter (-180 V), Schwarz: Periodischer Rand.

Der linke Rand des Gebiets, der zur Ionisationskammer zeigt, befindet sich in einem Abstand von 2 mm vom Abschirmgitter, der Ausströmrand ca. 5 mm hinter dem Beschleunigungsgitter. Beide Ränder sind sowohl für die Partikel als auch für die Felder offene bzw. absorbierende Ränder. Partikel, die auf eines der Gitter treffen, werden absorbiert (Elektronen) oder rekombinieren zu Neutralteilchen und sind für die Simulation nicht mehr relevant (Ionen), so dass hier ein für Partikel offener, für Felder leitender, Rand angenommen werden kann.

Die Plasmadichte in der Ionisationskammer vor dem Abschirmgitter wird mit $n_0 = 2 \cdot 10^{17} \text{ m}^{-3}$ und die Elektronentemperatur mit $T_{e0} = 5 \text{ eV}$ angegeben [37, 78]. Die dazugehörige Debyelänge beträgt $\lambda_D = 3,7 \cdot 10^{-2} \text{ mm}$. Am Abschirmgitter und am Einströmrand liegt jeweils ein Potential von 1074 V und am Beschleunigungsgitter eines von -180 V an. Das nur aufgrund der angelegten Potentiale entstehende elektrische Feld und der Potentialverlauf innerhalb des Rechengebiets sind in Abbildung 4.57 dargestellt. Der Linseneffekt, der die Ionen durch die beiden Löcher bündeln soll, ist dabei gut zu erkennen.

Im Folgenden wird zunächst die Plasmaströmung nur aufgrund des angelegten Potentials und anschließend unter Berücksichtigung der Eigenfelder der Partikel untersucht.

Dazu wird in einem ersten Schritt die Bewegung der Ionen ohne Berücksichtigung der durch sie erzeugten Eigenfelder bis zum Erreichen eines stationären Zustands nach ca. $t = 2 \mu\text{s}$ simuliert. Die Ionen werden dazu kontinuierlich mit einer maxwellverteilten Geschwindigkeit einer Temperatur von $T = 500 \text{ K}$ und einer geringen zusätzlichen, gerichteten Anfangsgeschwindigkeit von $v_{x,0} = 100 \text{ m/s}$

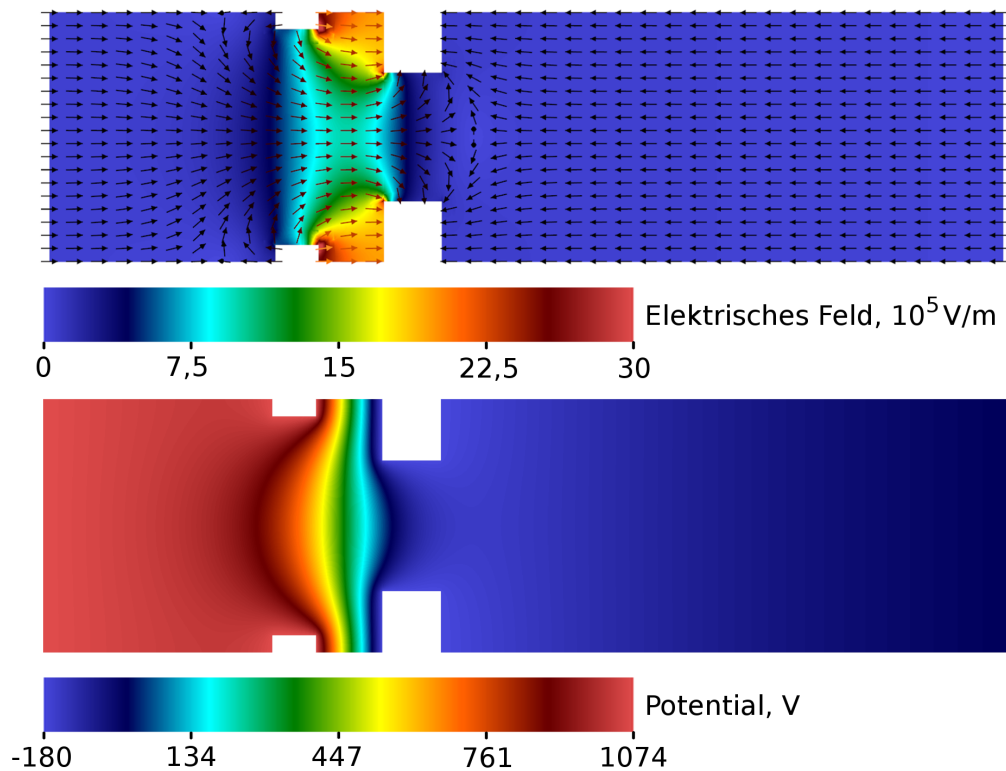


Abbildung 4.57.: *Initiales elektrisches Feld (oben, Betrag und Vektorfeld) und Potential (unten) im Strömungsgebiet aufgrund der angelegten Potentiale. Schnittdarstellung in der x-y-Ebene in der Mitte des Simulationsgebiets.*

direkt am linken Rand in die erste Elementreihe eingesetzt. Da in diesem Fall keine Beeinflussung der Ionen untereinander stattfindet, wird die Zahl der in jedem Schritt einzusetzenden Ionen so gewählt, dass ein Strom durch das Lochgitter von ca. 1,5 A im gesamten Triebwerk und damit $I_L = 1,5 \text{ A}/15000 = 0,1 \text{ mA}$ pro Loch entsteht. Der Strom berechnet sich dabei aus der im Mittel durch das Beschleunigungsgitter fliegenden Partikelzahl ΔN_B und der Zeitschrittweite Δt gemäß

$$I_L = q_I \frac{\Delta N_B}{\Delta t}, \quad (4.20)$$

wobei die q_I die Ladung eines Simulationpartikels ist. Der Makropartikelfaktor kann in diesem Fall beliebig gesetzt werden, da die Eigenfelder nicht berücksichtigt werden. Um genügend Partikel für die Mittelung von Dichten und Geschwindigkeiten innerhalb der einzelnen Elemente für die Auswertung und Visualisierung der Ergebnisse zu erhalten, wird ein Makropartikelfaktor von 3000 gewählt, so dass im stationären Zustand etwa $2 \cdot 10^5$ Partikel im Rechengebiet befindlich sind. Die Zeitschrittweite wird so gewählt, dass die Bewegung der Ionen gut aufgelöst wird und beträgt $\Delta t = 0,1 \text{ ns}$.

Abbildung 4.58 zeigt die resultierenden, über 1000 Zeitschritte gemittelten Ergebnisse für die Ionen-
teilchendichte (oben) und die Partikelgeschwindigkeiten in Flugrichtung (unten) in einer Schnitt-

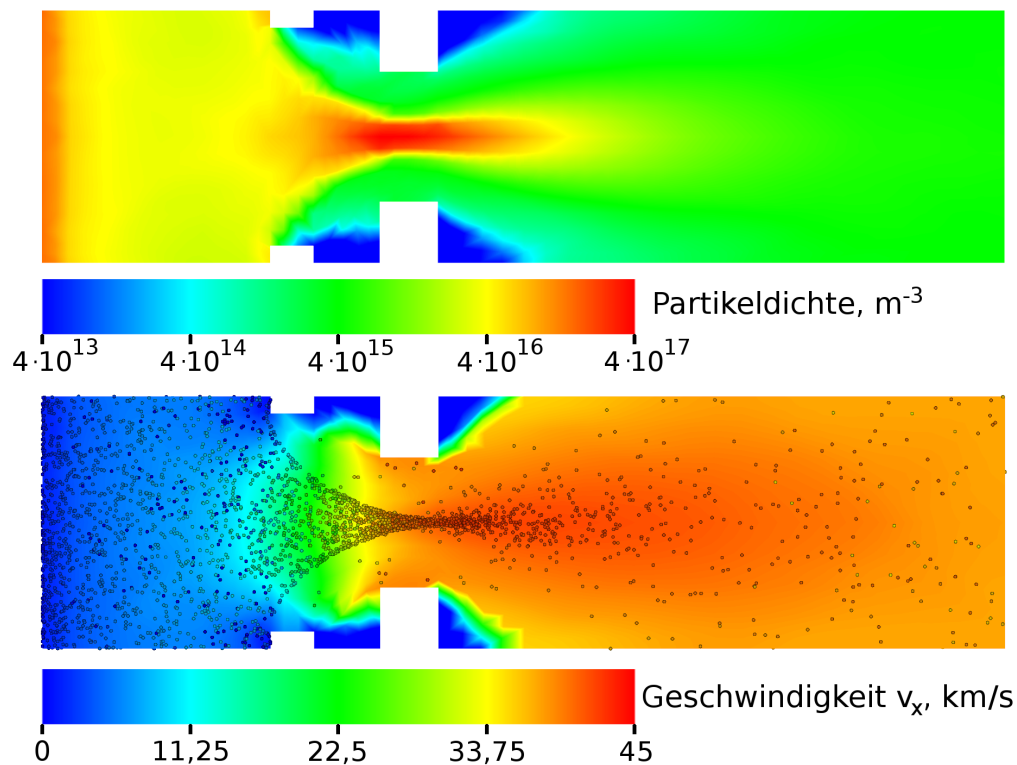


Abbildung 4.58.: Schnittdarstellung der jeweils elementweise gemittelten Ionenteilchendichte (oben) und Partikelgeschwindigkeit in x -Richtung mit den Ionen in der x - y -Ebene (unten). Simulation ohne Eigenfelder der Partikel.

darstellung. Die Ionen werden durch das Loch und die anliegenden Spannungen gebündelt und bilden hinter dem Beschleunigungsgitter den austretenden Ionenstrahl. Die Austrittsgeschwindigkeit von etwa 40 km/s liegt im erwarteten Bereich des NSTAR-Triebwerks [37]. Die Transparenz des Gitters ist definiert als der Anteil der Ionen, die das Gitter passieren, im Verhältnis zur Summe aus passierenden und auftreffenden Ionen. Sie liegt in der vorliegenden Simulation bei 86% und damit ebenfalls im Bereich des für NSTAR angegebenen Werts von 83% bei voller Leistung [37].

In einem zweiten Schritt sollen die Eigenfelder der Partikel berücksichtigt werden. Zu diesem Zweck müssen zusätzlich zu den Ionen auch Elektronen in das Gebiet eingesetzt werden. Da die Zeitschrittweite für eine voll zeitaufgelöste Simulation mit der LSERK4-Zeitintegrationsmethode und einem Polynomgrad $N = 3$ des DG-Verfahrens aufgrund der kleinen Abmessungen des Rechengebiets und der erforderlichen Auflösung der mit Lichtgeschwindigkeit expandierenden elektromagnetischen Felder bei etwa einer Picosekunde liegt, und damit pro Mikrosekunde simulierter Zeit etwa 100 Millionen Zeitschritte erforderlich wären, muss hier eine Vereinfachung eingeführt werden, um die Simulation innerhalb annehmbarer Zeiten rechnen zu können. Da das Plasma in der Ionisationskammer als quasineutral angesehen werden kann, kann dort beispielsweise die Elektronengeschwindigkeit auf die mittlere Ionengeschwindigkeit eines Elements gedrückt werden [11]. Da die Linsenoptik

jedoch eine Trennung der Ladungen bewirkt, wird hier stattdessen der Ansatz gewählt, die Elektronenmassen wie in [41] zu erhöhen, im vorliegenden Fall auf die Masse der Xenonionen. Dadurch ist die Geschwindigkeit aller Partikel im Vergleich zur Feldausbreitungsgeschwindigkeit niedrig genug, dass die in Kapitel 3.5.4 beschriebene Subcycling-Methode angewandt werden kann. Der Partikelzeitschritt wird auf $\Delta t = 10^{-10}$ s festgelegt und löst damit die Plasmafrequenz (siehe Kapitel 2.1) mit über 800 Schritten pro Schwingung ausreichend genau auf. Die Anzahl der Feldlöserschritte pro Partikelzeitschritt beträgt 2223. Für eine Mikrosekunde müssen also nur 10000 Partikel- und 22 Millionen Feldberechnungsschritte ausgeführt werden, was für die hier gezeigte Simulation zu einer Rechenzeit von etwa 0,1 bis 0,2 Millionen Rechenstunden (auf AMD Interlagos Prozessoren mit 2,3 GHz der CRAY XE6 des HLRS) führt. Da die Deposition nur einmal pro Partikelzeitschritt durchgeführt werden muss, kann hier die Formfunktionsmethode ohne signifikante Erhöhung der Gesamtrechendauer eingesetzt werden. Der gewählte Formfunktionsradius ist dabei 0,2 mm, entspricht also etwa der Kantenlänge eines durchschnittlichen Elements im Einsetzgebiet. Die Partikel werden über eine Dichterandbedingung eingesetzt, d.h. in einem vorgegebenen Einsetzgebiet werden jeden Zeitschritt so viele Elektronen und Ionen quasineutral eingesetzt, dass jeweils in den Elementen die vorgegebene mittlere Dichte von $2 \cdot 10^{17} \text{ m}^{-3}$ nicht unterschritten wird. Das Einsetzgebiet erstreckt sich von $x = 0,5$ mm bis $x = 1$ mm und erzeugt damit die Plasmadichte der Ionisationskammer in einem Teil des Gebiets vor dem Abschirmgitter, wobei durch statistische Schwankungen beim Einsetzen der Partikel und der Partikelbewegung lokal auch höhere oder niedrigere Dichten auftreten können. Im Rechengbiet befinden sich zum Simulationsende im stationären Zustand etwa 2,6 Millionen Partikel mit einem Makropartikelfaktor von 1000.

Die resultierenden Teilchendichten und Geschwindigkeiten nach ca. $t = 2,5 \mu\text{s}$ sind in Abbildung 4.59 dargestellt. Vor dem Abschirmgitter bildet sich die für Ionenoptiken charakteristische gebogene Plasmaschicht. Die Austrittsgeschwindigkeit ist nahezu unverändert zur Simulation ohne Eigenfelder, wird also wie erwartet in erster Linie vom elektrischen Feld zwischen den Gittern bestimmt. Ein deutlicher Unterschied zur Simulation ohne Eigenfelder zeigt sich allerdings in der Bündelung der Ionen aufgrund der Ionenoptik, sichtbar im Vergleich der Partikeldichte und der Form des sich bildenden Partikelstrahls. Diese ist hier aufgrund der gegenseitigen Abstoßung der Ionen innerhalb des Beschleunigungsgitters geringer und es bildet sich nach dem Beschleunigungsgitter ein eindeutig erkennbarer Strahl. Die Transparenz der Lochgitter beträgt 84 % und liegt damit wieder im Bereich des NSTAR-Triebwerks. Der Strom beträgt 0,074 mA pro Loch, also insgesamt 1,11 A für alle 15000 Löcher. Bei einer weiteren, hier nicht dargestellten Simulation wurde das Gebiet vor dem Abschirmgitter zur Reduzierung des Rechenaufwands auf eine Länge von 1,11 mm verkleinert. Bei einem Einsetzgebiet von $x = 0,2$ mm bis $x = 0,9$ mm konnte sich die halbrunde Plasmaschicht der Ionenoptik nicht vollständig ausbilden und es ergab sich eine unrealistische Transparenz von 99 % bei einem Strom von 0,08 mA, was zeigt, dass eine weitere Reduktion des Rechenaufwands durch eine entsprechende Verkürzung des Rechengbiets an dieser Stelle nicht möglich ist.

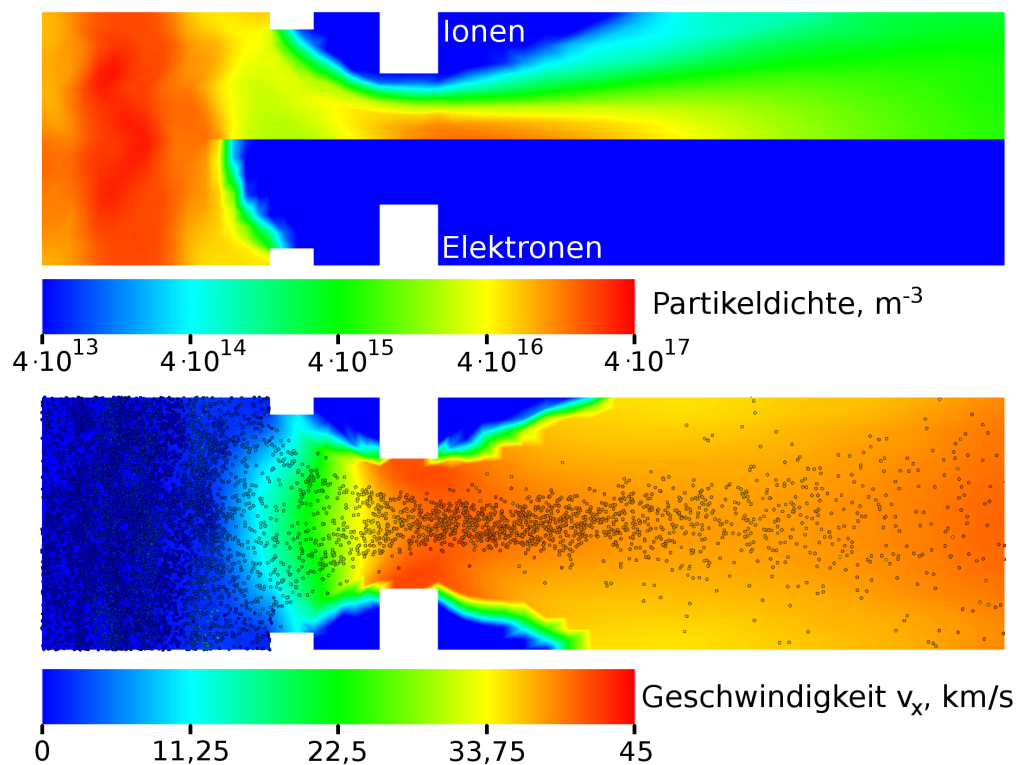


Abbildung 4.59.: Schnittdarstellung der jeweils elementweise gemittelten Teilchendichten (oben) und Ionengeschwindigkeit in x -Richtung mit Ausschnitt der Ionen in der x - y -Ebene (unten). Simulation mit Eigenfeldern der Partikel.

Die hier vorgestellten Simulationsergebnisse zeigen, dass unter Verwendung des PIC-Verfahrens die grundlegenden Phänomene der Lochgitterströmung abgebildet werden. Die Austrittsgeschwindigkeit und dementsprechend die Beschleunigung durch das elektrische Feld zwischen den Gittern, liegt im Bereich des zum Vorbild genommenen NSTAR-Triebwerks. Ebenso ergibt sich durch die angelegten Potentiale eine Bündelung des Strahls, die zu einer realistischen Transparenz der Lochgitter führt. Der extrahierte Strom durch die Gitter liegt ebenfalls in der Größenordnung der beim Betrieb von NSTAR verwendeten Ströme, wobei zu beachten ist, dass sowohl der Strom als auch die Transparenz zusätzlich von der Anordnung der Löcher auf dem Gitter abhängt und damit der direkte Vergleich der konkreten Werte hier nicht vorgenommen werden kann.

Es ist offensichtlich, dass die Wahl des Einsatzgebiets und die dort herrschenden Plasmabedingungen einen signifikanten Einfluss auf das Simulationsergebnis haben, so dass hier der Hauptansatzpunkt für die zukünftige Programmweiterentwicklung hinsichtlich dieser spezifischen Ionenoptiksimulation zu sehen ist. Das Gebiet vor dem Abschirmgitter wurde bei der hier gezeigten Simulation unter Berücksichtigung der Rechenzeiten so groß wie möglich gewählt; der Vergleich mit der Simulation mit dem kleineren Gebiet zeigt jedoch, dass bei einer Rechnung mit einem weiter vergrößerten Rechen- und Einsatzgebiet vor dem Abschirmgitter unter Umständen andere Ergebnisse zu erwarten sind. Eine

genauere Untersuchung des Einflusses der Einsetzbedingung und des offenen Rands ist hier erforderlich, bevor diese Einsetzmethode für Auslegungssimulationen von Ionentriebwerksgittern eingesetzt werden kann. Unter Berücksichtigung dieser unbekannt Einflüsse sowie der Vereinfachungen hinsichtlich Elektronenmasse und Anordnung der Löcher auf den Gittern des Triebwerks können die hier vorgestellten Simulationsergebnisse dennoch als Bestätigung der Funktion des PIC-Verfahrens und als erster Schritt in Richtung einer Auslegungssimulation für Ionenoptiken angesehen werden. Optimal wäre in diesem Zusammenhang die Betrachtung der gesamten Ionisationskammer mit dem gekoppelten PIC-DSMC-Verfahren inklusive der Simulation des Ionisierungsprozesses selbst durch DSMC; dies ist jedoch aufgrund der Zeit- und Größenskalen und den damit verbundenen Rechenzeiten noch nicht praktikabel. Insgesamt ergeben sich trotz der verschiedenen Vereinfachungen für die Simulationen vielversprechende Ergebnisse, welche die allgemeine Funktion des Verfahrens bestätigen und die Notwendigkeit weiterer Entwicklungen und Untersuchungen insbesondere im Bereich der Einsetz- und Randbedingungen für Plasmaanwendungen aufzeigen.

5. Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Teile eines PIC-Verfahrens zur Simulation verdünnter Plasmaströmungen entwickelt, verifiziert und untersucht. Das PIC-Verfahren ist dabei Teil eines der wenigen existierenden gekoppelten PIC-DSMC-Verfahren und des weltweit einzigen gekoppelten Verfahrens, das die DG-SEM Methode zur expliziten Berechnung der elektromagnetischen Felder hoher Ordnung unter Berücksichtigung der vollständigen Maxwellgleichungen einsetzt [50].

Die DG-FEM Methode [55, 72] sowie die neuere DG-SEM Methode wurden kurz vorgestellt und ihre Anwendung auf die Feldberechnung erläutert. Die verwendeten Zeitintegrationsverfahren wurden dargelegt und ein neues Verfahren wurde entwickelt, das die unterschiedlichen Zeitskalen der Feldausbreitung und der Partikelbewegung nutzt, um den Rechenaufwand durch eine geringere Anzahl von Berechnungen der Partikelbewegung zu reduzieren. Aus der Beschleunigung und der Geschwindigkeit der Partikel wird dabei eine maximale Partikelzeitschrittweite bestimmt.

Des Weiteren wurde eine Methode zur Lokalisierung von Partikeln in den Gitterelementen vorgestellt, wobei nicht planare Seitenflächen von Hexaedern durch Aufteilung der Seitenflächen in Dreiecke berücksichtigt werden. Hierbei wurde ein kartesisches Hintergrundgitter zur schnelleren Lokalisierung eingeführt, durch das der Rechenaufwand der Lokalisierung signifikant verringert werden konnte, indem nur die Elemente innerhalb der Hintergrundgitterzelle betrachtet werden, in der sich ein Partikel aufhält. Darüber hinaus wurde eine Partikelverfolgung entwickelt und optimiert, um zum einen die Lokalisierung bereits im Rechengebiet befindlicher Partikel zu beschleunigen und um zum anderen die Behandlung der Partikel an den Rändern des Rechengebiets zu ermöglichen, wofür exakt bekannt sein muss, durch welche Seitenflächen die Partikel sich bewegen. Ausgehend vom ursprünglichen Aufenthaltsort eines Partikels berechnet die Partikelverfolgung, sofern das Partikel sich nicht mehr im entsprechenden Element befindet, die Seite, durch die sich das Partikel aufgrund des Geschwindigkeitsvektors bewegt und sucht im angrenzenden Element nach dem Partikel. Dabei wird wieder die Besonderheit der nicht planaren Hexaedergitter berücksichtigt, aufgrund derer eine Seite mehrmals durchflogen werden kann oder mehrere Seiten durchflogen werden können. Zur Behandlung dieses Phänomens wurde eine Methode entwickelt und vorgestellt, die es erlaubt, auch bei komplexen Flugbahnen mit multiplen Reflektionen und ungünstig geformten Elementen das Partikel zuverlässig und effizient zu verfolgen. Bei der Verfolgung wird direkt beim Durchflug einer

Seite geprüft, ob diese eine Randseite ist, und gegebenenfalls die entsprechende Randbehandlung durchgeführt, so dass Randseiten für Partikel immer korrekt erkannt werden. Insgesamt ist die entwickelte Methode zur Partikelverfolgung sehr schnell und ordnet die Partikel zuverlässig den Gitterelementen zu. Der Rechenanteil am Gesamtverfahren beträgt dabei in der Regel weniger als 20 %-30 %, wobei diese Zahl sehr stark vom Anwendungsfall und dem Verhältnis von Partikelzahl zu Elementanzahl sowie den verwendeten Depositions- und Zeitintegrationsmethoden abhängt.

Für die Interpolation bzw. Deposition der Ladungen von den Partikeln auf die Gaußpunkte des Rechengitters, wo die Ladungs- und Stromdichten die Quellterme der Feldberechnung darstellen, wurden zusätzlich zur häufig verwendeten Elementmittelwertmethode und der Formfunktionsmethode neue Methoden entwickelt. Zum einen ist dies die Nächster-Gaußpunkt-Methode, die entsprechend ihrem Namen die Ladungen direkt auf den nächstgelegenen Gaußpunkt verteilt und damit eine sehr niedrige räumliche Ordnung in der Verteilung repräsentiert. Zum anderen wurden Methoden entwickelt, die ein kartesisches Hintergrundgitter verwenden, um die Ladungen der Partikel mittels einer Volumengewichtung- oder B-Splines-Methode auf selbiges zu verteilen und dann von dort auf die Gaußpunkte zu interpolieren, was die Verwendung dieser Methoden für unstrukturierte Gitter ermöglicht. Die genannten Depositionsmethoden wurden eingehend untersucht, um die jeweiligen Einschränkungen und Vorteile herauszustellen. Von besonderem Interesse waren hier die Genauigkeit der Ladungserhaltung, die Fähigkeit, physikalische Effekte hochauflösend zu repräsentieren und der Rechenaufwand der einzelnen Methoden. Es zeigte sich, dass die Elementmittelwert- und die Nächster-Gaußpunkt-Methode aufgrund ihrer niedrigen Ordnung nicht für Anwendungsfälle geeignet sind, in denen Dichtegradienten in Gitterelementen aufgelöst werden müssen und dass die Energie aufgrund der in den Dichteverteilungen auftretenden Sprünge nicht immer erhalten wird. Die neue Volumengewichtungsmethode zeigte sich hier als gute Alternative, da sie in der Lage ist, bei nur geringfügig höherem Rechenaufwand physikalische Phänomene wie die Plasmawelle korrekt abzubilden, welche die Berücksichtigung von Ladungsverteilung auch innerhalb von Elementen erfordert. Für die Ladungsverteilungen hoher Ordnung zeigte sich, dass die B-Splines-Methode aufgrund des mindestens eine Größenordnung geringeren Rechenaufwands in vielen Fällen eine geeignete Alternative zur häufig verwendeten Formfunktionsmethode darstellt, insbesondere in Fällen, in denen die Elementmittelwert- und Volumengewichtungsmethoden die physikalischen Verhältnisse zu ungenau repräsentieren.

Das gesamte PIC-Verfahren wurde erfolgreich durch verschiedene Anwendungen und Testfälle verifiziert, wobei hier nicht nur die Partikelbehandlung, sondern auch die bisher nicht verifizierte Feldberechnung mit der neuen DG-SEM Methode überprüft wurde. Anhand von ersten Simulationen der Durchströmung des Lochgitters eines Ionentriebwerks wurde gezeigt, dass das Verfahren für die Simulation von Raumfahrtantrieben anwendbar ist, jedoch für entsprechende Simulationen genauere Informationen und Modellierungen der Plasmazustände für Anfangs- und Randbedingungen

erforderlich sind. Die Methoden und Techniken zur Parallelisierung der in dieser Arbeit implementierten Verfahren wurden vorgestellt und die Skalierbarkeit der Parallelisierung auf bis zu 2048 Prozessoren wurde erfolgreich überprüft. Für die Abschätzung des Rechenaufwands zukünftiger Anwendungen wurde der anteilige Rechenaufwand der einzelnen Teile des Verfahrens untersucht und für verschiedene Partikel- und Elementzahlen sowie verschiedene Depositionsmethoden angegeben.

Für die zukünftige Anwendung des gesamten Verfahrens bietet sich, als Resultat der vorliegenden, aber auch der aktuell laufenden und abgeschlossenen, an der Entwicklung des gekoppelten Verfahrens beteiligten Arbeiten [55, 64, 68, 72], ein weites Feld an Simulationsmöglichkeiten. Von Interesse sind hier beispielsweise das Konzept eines magnetosphärischen Plasmaantriebs, der durch Interaktion eines mehrere Kilometer großen Magnetfelds mit dem Solarwind Schub erzeugt. Für dessen Untersuchung sind sowohl die vollständigen Maxwellgleichungen als auch die Ionisations- und Rekombinationsmodellierung des DSMC-Verfahrens relevant. Ähnliche Anforderungen gelten für die Simulation der Umströmung von Satelliten oder Asteroiden durch den Solarwind, auch hier ist das gekoppelte Verfahren zur akkuraten Beschreibung der physikalischen Effekte erforderlich. Weitere aktuelle Themengebiete sind die Simulation von Laserablationen, bei denen sowohl elektromagnetische Wellen als auch chemische Reaktionen und Kollisionen relevant sind, und die Simulation von Plasmaeinschlüssen als Antriebskonzept oder für Kernfusionsreaktoren. Die Betrachtung von Neutralisatoren für Ionentriebwerke und deren Interaktion im Falle mehrerer aktiver Triebwerke, sowie deren Einfluss auf den Satelliten selbst, ist ebenfalls ein Anwendungsgebiet, das ein PIC-DSMC-Verfahren erfordert.

Durch Erweiterung der Verfahrens mit einem Erosionsmodell und gekoppelter Rechnung mit DSMC ist die genauere Simulation der Erosion des Lochgitters von Ionentriebwerken aufgrund von Ladungsaustauschionen möglich, für die sonst meist stark vereinfachte Ionentrajektorien- oder Poissonlöser verwendet werden. Ein weiterer Anwendungsfall sind die gepulsten Plasmatriebwerke, die durch ihre kurzen Pulsdauern im Mikrosekundenbereich, das instationäre Verhalten und den starken Einfluss von Kollisionen und Feldern nur durch ein voll elektromagnetisches PIC-DSMC-Verfahren untersucht werden können. Erste Untersuchungen hierzu wurden bereits durchgeführt [57], allerdings zeigte sich, dass hier noch Weiterentwicklungen insbesondere im Bereich der Randbedingungen, wie zum Beispiel Elektronenemissionen an der Kathode, initiale Ablation des Treibstoffs und Simulation des gesamten Stromkreislaufs außerhalb des Rechengebiets, erforderlich sind.

Basierend auf den Ergebnissen dieser Arbeit ist einer der nächsten sinnvollen Schritte in der Weiterentwicklung des Verfahrens die Erweiterung der Partikelrandbedingungen, insbesondere der Partikelemission, für eine physikalisch korrektere Repräsentation von Plasmaeinströmrändern. Zur Simulation von für die Felder offenen Rändern muss eine Alternative zur bisher eingesetzten Silver-Müller Randbedingung entwickelt werden, die für alle Arten von elektromagnetischen Feldern diese am Rand zuverlässig absorbiert. Für spezifische Anwendungen sind vor allem spezifischen Randbedingungen,

wie die oben erwähnte Ablation oder Emission, relevant und müssen entsprechend entwickelt und implementiert werden. Eine große Herausforderung ist zusätzlich noch der hohe Rechenaufwand durch die sehr großen Partikel- und Elementzahlen bei gleichzeitig kleinen Zeitschrittweiten, der es momentan noch nicht erlaubt, große Antriebssysteme zu simulieren. Mögliche Ansätze für eine Reduktion des Rechenaufwands, vor allem für Simulationen mit stark unterschiedlichen Zeitskalen in der Partikelbewegung und der Felddausbreitung, sind die Verwendung von impliziten Lösern zu Feldberechnung und die Entkopplung der Zeitintegration von Partikeln und Feldern, wie dies schon in dieser Arbeit durch die Subcycling-Methode eingeführt wurde.

Summary

In the scope of this work, parts of a PIC method for the simulation of rarefied plasma flows have been developed, verified and investigated. This PIC method is part of one of the few existing coupled PIC-DSMC codes and the only coupled code to employ the high order DG-SEM method to explicitly solve the full Maxwell equation system [50]. The DG-FEM method [55, 72] as well as the newer DG-SEM method have been presented and their application to computing electromagnetic fields has been detailed.

The employed time integration methods have been discussed and a new method has been developed that uses the different time scales of the field expansion and the particle motion to reduce computational costs by minimizing the frequency of particle movement calculations. A maximum particle time step is derived from the acceleration and velocity of the particles. Additionally, a method to localize the particles within grid elements while considering non planar element sides of hexahedrons by splitting the sides into triangles has been developed. For faster localization, a Cartesian background mesh has been introduced, which leads to a significant reduction in computational cost by only searching for the particle in elements assigned to the background mesh cell in which it currently resides. Furthermore, a particle tracking method has been developed and optimized in order to localize particles already within the computational domain, i.e. after they have moved, and in order to enable particle boundary treatment at the domain's boundaries. Therefore, it is necessary to be able to track particle motion through all element sides. Based on the last known position of a particle, the particle is tracked by checking the particle's last known grid element, computing the side, through which the particle has moved due to its velocity vector and checking the corresponding neighboring element. Due to the non planar hexahedron grids, a particle can possibly move through more than one side or multiple times through the same side. Methods to treat both of these cases have been developed, leading to a tracking method that enables reliable and efficient tracking for complex flight paths with multiple reflections and highly irregularly shaped elements. During the tracking, each time an element side is passed through by a particle, it is checked whether this side is a boundary side and the

particle is treated according to the corresponding boundary condition, reliably ensuring enforcement of boundary conditions on particles. The computational cost for the tracking in most cases amounts to less than 20 % to 30 % of the total costs, although the actual percentages are strongly dependent on simulation parameters such as the ratio of particle number to element number and the deposition and time integration methods that are employed.

For the interpolation, or deposition, of the particle charges onto the Gauß points of the computational grid, where the charge and current densities are the source terms for the field computation, new methods in addition to the commonly used cell mean value and shape function methods have been developed. Among these, the nearest Gauß point method deposits, as its name implies, the particle charge directly onto the closest Gauß point. This leads to a distribution of very low order. The other developed methods use a Cartesian background mesh to distribute particle charges via a volume weighting or a B-splines method onto this mesh and from there to the Gauß points, allowing the use of these methods for unstructured computational grids. All deposition methods have been investigated thoroughly and their respective limits and advantages have been discussed. Of interest in this respect are the accuracy of the charge conservation, the ability of the methods to represent physical effects with high resolution and their computational cost. It has been shown that the cell mean value method and the nearest Gauß point method are unsuited for simulations in which density gradients within grid elements have to be resolved, due to the low order distribution of these methods. In addition, the energy in the system is not always conserved due to discontinuities in the charge distribution, again caused by the low order distribution. The new volume weighting method has been shown to be a viable alternative in these cases, since it is able to correctly represent physical phenomena for which the charge distribution within elements has to be considered, such as a plasma wave, with only a marginal increase in computational cost. For high order charge distributions, the B-splines method has been shown to be a viable alternative to the shape function method for many applications due to the at least one magnitude lower computational cost, especially in cases where the cell mean value and nearest Gauß point methods represent the physical circumstances too imprecisely.

The complete PIC code has been verified successfully through different applications and test cases. Not only the particle treatment has been verified but also the new DG-SEM based field solver, which has not been verified previously. Using preliminary simulations of the plasma flow through the acceleration grids of an ion thruster, the code has been shown to be applicable to the simulation of electric space propulsion. The simulations have also highlighted, however, that for these kinds of simulations more information on the plasma states for initial and boundary conditions and their modeling are necessary. The methods and techniques used in parallelizing the code implemented within this work have been presented and the scalability for up to 2048 processors has been tested. In order to enable an estimation of computational costs for future simulations, the relative and absolute computational cost for the different parts of the code have been investigated for different particle and

element numbers as well as the different deposition methods.

As result of this work as well as of the other works detailing the development of the coupled PIC-DSMC code [55, 64, 68, 72], a wide spectrum of future simulation applications is possible. Of interest is for example the concept of a magnetospheric plasma thruster, which generates thrust by interaction of the solar wind with a generated kilometer-wide magnetic field. For this application, both the complete set of Maxwell's equations and the ionization and recombination modeling of the DSMC part of the code are relevant. Similar demands exist for the simulation of the plasma flow around satellites or asteroids, for these the coupled code is necessary as well in order to accurately simulate the relevant physical effects. Other current topics of interest are the simulation of laser ablation, for which electromagnetic waves as well as chemical reactions are of importance, and the simulation of plasma containment for fusion reactors or as a propulsion concept. The simulation of neutralizers for ion thrusters and their interaction in the case of multiple active thrusters as well as their influence on the satellite itself is another application which benefits from the use of a coupled PIC-DSMC method. Expanding the code with erosion modeling in combination with DSMC allows a more precise simulation of the grid erosion of an ion thruster, which usually is simulated using simplified ion trajectory or Poisson solvers, only. Another application is the simulation of pulsed plasma thrusters, which operate with short pulses durations in the range of microseconds. Due to the highly unsteady flow and the significant effect of collisions and electromagnetic fields, a PIC-DSMC code solving the complete set of Maxwell's equations is necessary to consider all relevant effects. Preliminary investigations using the coupled code have been performed [57]. It has been shown, though, that further development of the code regarding boundary conditions such as electron emissions from the cathode, the initial ablation of the solid fuel and simulation of the electric circuitry beyond the computational domain, is necessary.

Based on the results of this work, one of the next steps in the future development of the code is the extension of particle boundary conditions, especially of the particle emission, in order to more accurately represent inflow boundaries. To simulate open boundaries for the field solver, an alternative to the Silver-Müller boundary condition has to be developed that reliably absorbs static as well as dynamic electromagnetic fields at the domain boundary. For specific applications, boundary conditions specifically tailored to these applications, such as the previously mentioned ablation or particle emission, have to be developed and implemented. An additional challenge is the high computational cost due to very large particle and element numbers and the small time steps, which currently makes simulations of large propulsion systems infeasible. Possible approaches for a reduction of the computational cost, especially for simulations with strongly diverging time scales of particle and field movement are the use of implicit field solvers and the further decoupling of the time integration of particles and fields, first steps of which have been introduced in this work via the subcycling method.

Literaturverzeichnis

- [1] Aluru, S. und Sevilgen, F. E.: Parallel domain decomposition and load balancing using space-filling curves, in *Fourth International Conference on High-Performance Computing*, Dezember 1997, Seiten 230–235.
- [2] Assous, F., Degond, P. und Segre, J.: A particle-tracking method for 3D electromagnetic PIC codes on unstructured meshes, *Computer Physics Communications*, Bd. 72, Nr. 2–3, 1992, Seiten 105–114.
- [3] Auweter-Kurtz, M.: *Lichtbogenantriebe für Weltraumaufgaben*, B. G. Teubner, Stuttgart, 1992.
- [4] Auweter-Kurtz, M., Fertig, M., Petkow, D., Stindl, T., Quandt, M., Munz, C.-D., Adamis, P., Resch, M., Roller, S., D’Andrea, D. und Schneider, R.: Development of a hybrid PIC/DSMC Code, in *IEPC-2005-71, Proceedings of the 29th International Electric Propulsion Conference, Princeton, USA*, 2005.
- [5] Bird, G.A.: *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Clarendon Press, Oxford, 1994.
- [6] Birdsall, C. K.: Particle-in-Cell Charged-Particle Simulations, plus Monte Carlo Collisions with neutral Atoms, PIC-MCC, *IEEE Transaction on Plasma Science*, Bd. 19, 1991, Seiten 65–85.
- [7] Birdsall, C. K. und Langdon, A. B.: *Plasma Physics via Computer Simulation*, Adam Hilger, Bristol, Philadelphia, New York, 1991.
- [8] Blazek, J.: *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications*, Elsevier, San Diego, 2005.
- [9] de Boor, C.: *A Practical Guide to Splines, Applied Mathematical Sciences, Vol. 27*, Springer, New York, Heidelberg, Berlin, 1978.
- [10] Boris, J. P.: Relativistic Plasma Simulations – Optimization of a Hybrid Code, in *Proceedings of the 4th Conference on Numerical Simulation of Plasmas*, NRL Washington, Washington DC, 1970, Seiten 3–67.
- [11] Boyd, I. D.: Monte Carlo simulation of nonequilibrium flow in a low-power hydrogen arcjet, *Physics of Fluids (1994-present)*, Bd. 9, Nr. 10, Oktober 1997, Seiten 3086–3095.
- [12] Butcher, J. C.: *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations: Runge-Kutta and General Linear Methods*, Wiley-Interscience, New York, 1987.

- [13] Campos Pinto, M., Jund, S., Salmon, S. und Sonnendrücker, E.: Charge conserving FEM-PIC schemes on general grids, *Interner Bericht des Institut de Recherche Mathématique Avancée de Strasbourg*, 2009, URL <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00311429>.
- [14] Cap, F.: *Lehrbuch der Plasmaphysik und Magnetohydrodynamik*, Springer Verlag, Wien, New York, 1994.
- [15] Carpenter, M. H. und Kennedy, C. A.: Fourth-order 2N-storage Runge-Kutta schemes, *Techn. Ber.*, Langley Research Center, 1994.
- [16] Courant, R., Friedrichs, K. und Lewy, H.: Über die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik, *Mathematische Annalen*, Bd. 100, Nr. 1, 1928, Seiten 32–74.
- [17] Demtröder, W.: *Experimentalphysik 2, Elektrizität und Optik*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2007.
- [18] Fedoruk, M., Munz, C.-D., Omnes, P. und Schneider, R.: A Maxwell-Lorentz solver for self-consistent particle-field simulations on unstructured grids, *Forschungszentrum Karlsruhe – Technik und Umwelt, FZKA 6115*, 1998.
- [19] Forshaw, J. und Smith, G.: *Dynamics and Relativity*, John Wiley & Sons Verlag, 2009.
- [20] Frohn, A.: *Einführung in die Kinetische Gastheorie*, AULA-Verlag GmbH, Wiesbaden, 1988.
- [21] Gassner, G.: *Discontinuous Galerkin Methods for the Unsteady Compressible Navier-Stokes Equations*, Dissertation, Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik und Geodäsie, Universität Stuttgart, 2009.
- [22] Gassner, G. und Kopriva, D. A.: A Comparison of the Dispersion and Dissipation Errors of Gauss and Gauss–Lobatto Discontinuous Galerkin Spectral Element Methods, *SIAM Journal on Scientific Computing*, Bd. 33, Nr. 5, 2011, Seiten 2560–2579.
- [23] Greiner, W.: *Klassische Elektrodynamik*, Bd. 3, Harri Deutsch, Frankfurt, Fünfte Aufl., 1991.
- [24] Harlacher, D. F., Klimach, H., Roller, S., Siebert, C. und Wolf, F.: Dynamic Load Balancing for Unstructured Meshes on Space-Filling Curves, in *Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops & PhD Forum (IPDPSW), 2012 IEEE 26th International*, 2012, Seite 1661–1669.
- [25] Harlacher, D. F., Roller, S., Hindenlang, F., Munz, C.-D., Kraus, T., Fischer, M., Geurts, K., Meinke, M., Klühspies, T., Metsch, V. und Benkert, K.: Highly Efficient and Scalable Software for the Simulation of Turbulent Flows in Complex Geometries, in *High Performance Computing in Science and Engineering '11*, Springer Berlin Heidelberg, Januar 2012, Seiten 289–307.
- [26] Herdrich, G., Syring, C., Pfeiffer, M. und Petkow, D.: Kinetic modeling of the jet extraction mechanism in spherical IEC devices, IEP-2013-416, 33rd International Electric Propulsion Conference, Washington D.C., USA, 2013.

- [27] Hesthaven, J. S. und Warburton, T.: *Nodal Discontinuous Galerkin Methods*, Springer, New York, 2008.
- [28] Hilbert, D.: Ueber die stetige Abbildung einer Linie auf ein Flächenstück, *Mathematische Annalen*, Bd. 38, 1891, Seiten 459–460.
- [29] Hindenlang, F.: *Mesh Curving Techniques and High Order Simulations on Unstructured Meshes of Complex Geometries*, Dissertation, Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik und Geodäsie, Universität Stuttgart, 2014.
- [30] Hindenlang, F., Gassner, G., Altmann, C., Beck, A., Staudenmaier, M. und Munz, C.-D.: Explicit discontinuous Galerkin methods for unsteady problems, *Computers & Fluids*, Bd. 61, 2012, Seiten 86–93.
- [31] Hockney, R. und Eastwood, J.: *Computer Simulation using Particles*, McGraw-Hill, New York, 1988.
- [32] Illy, S.: *Untersuchungen von Strahlinstabilitäten in der Kompressionszone von Gyrotron-Oszillatoren mit Hilfe der kinetischen Theorie und zeitabhängiger Particle-in-Cell-Simulationen*, Dissertation, Universität Karlsruhe und Forschungszentrum Karlsruhe (FZKA 6037), 1997.
- [33] Jackson, J. D.: *Classical Electrodynamics*, Wiley, New York, 1999.
- [34] Jacobs, G. B. und Hesthaven, J. S.: High-order nodal discontinuous Galerkin particle-in-cell method on unstructured grids, *J. Comput. Phys.*, Bd. 214, 2006, Seiten 96 – 121.
- [35] Jacobs, G.B. und Hesthaven, J.S.: Implicit-explicit time integration of a high-order particle-in-cell method with hyperbolic divergence cleaning, *Computer Physics Communications*, Bd. 180, 2009, Seiten 1760 – 1767.
- [36] Jahn, R.G.: *Physics of Electric Propulsion*, McGraw-Hill, New York, 1968.
- [37] John R. Brophy: NASA’s Deep Space 1 ion engine (plenary), *Review of Scientific Instruments*, Bd. 73, Nr. 2, Februar 2002, Seiten 1071–1078.
- [38] Karniadakis, G. E. und Sherwin, S. J.: *Spectral/hp Element Methods for Computational Fluid Dynamics*, Oxford University Press, Oxford, 2005.
- [39] Karypis, G. und Kumar, V.: A Coarse-Grain Parallel Formulation of Multilevel k -way Graph-Partitioning Algorithm, in *8th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing*, Minneapolis, Minnesota, USA, März 14–17 1997.
- [40] Koch, M.: Implementierung von konstanten Druckbedingungen und numerische Untersuchung eines Teststandes für Sauerstoffsensoren mit dem PIC-DSMC Code FLEXI, Bachelorarbeit, Institut für Raumfahrtssysteme, Universität Stuttgart, 2013.
- [41] Komurasaki, K., Yokota, S., Yasui, S. und Arakawa, Y.: Particle Simulation of Plasma Dynamics Inside an Anode-Layer Hall Thruster, in *40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion*

- Conference and Exhibit*, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2004.
- [42] Kopriva, D. A.: *Implementing Spectral Methods for Partial Differential Equations: Algorithms for Scientists and Engineers*, Springer, 2009.
- [43] Langdon, A. B.: Effects of the spatial grid in simulation plasmas, *Journal of Computational Physics*, Bd. 6, Nr. 2, 1970, Seiten 247–267.
- [44] Laux, M.: *Direkte Simulation verdünnter, reagierender Strömungen*, Dissertation, Institut für Raumfahrtsysteme, Universität Stuttgart, Germany, 1996.
- [45] Linhart, J. G.: *Plasma Physics*, North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1961.
- [46] Merziger, G. und Wirth, T.: *Repetitorium der Höheren Mathematik*, Binomi Verlag, Springe, 2006.
- [47] Mirza, A.: *Persöhnliche Mitteilungen*, Institut für Raumfahrtsysteme, Universität Stuttgart, 2013.
- [48] Morse, R. L. und Nielson, C. W.: Numerical Simulation of Warm Two-Beam Plasma, *Physics of Fluids*, Bd. 12, 1969, Seiten 2418–2425.
- [49] Morton, G. M.: *A Computer Oriented Geodetic Data Base and a New Technique in File Sequencing*, International Business Machines Company, 1966.
- [50] Munz, C.-D., Auweter-Kurtz, M., Fasoulas, S., Mirza, A., Ortwein, P., Pfeiffer, M. und Stindl, T.: Coupled Particle-In-Cell and Direct Simulation Monte Carlo method for simulating reactive plasma flows, *Comptes Rendus Mécanique*, Bd. 342, Nr. 10–11, 2014, Seiten 662 – 670.
- [51] Munz, C.-D., Omnes, P. und Schneider, R.: A three-dimensional finite-volume solver for the Maxwell equations with divergence cleaning on unstructured meshes, *Computer Physics Communications*, Bd. 130, 2000, Seiten 83 – 117.
- [52] Munz, C.-D., Omnes, P., Schneider, R., Sonnendrücker, E. und Voß, U.: Divergence Correction Techniques for Maxwell Solvers Based on a Hyperbolic Model, *Journal of Computational Physics*, Bd. 161, Nr. 2, Juli 2000, Seiten 484–511.
- [53] Munz, C. D., Schneider, R. und Voss, U.: A Finite-Volume Method for the Maxwell Equations in the Time Domain, *SIAM Journal on Scientific Computing*, Bd. 22, Nr. 2, 2000, Seiten 449–475.
- [54] Müller, C.: *Foundations of the mathematical theory of electromagnetic waves*, Springer-Verlag, 1969.
- [55] Neudorfer, J.: *Numerical Methods and Computational Strategies for Particle-In-Cell Simulations of Large Scale Engineering Applications*, Dissertation, Fakultät für Maschinenwesen, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Germany, 2012.
- [56] Neudorfer, J., Munz, C.-D., Stindl, T., Fertig, M., Roller, S., Schneider, R. und Auweter-Kurtz, M.: Particle In Cell Simulation Using a Discontinuous Galerkin Method, IEPC-2009-237, 31st

- International Electric Propulsion Conference, Ann Arbor, Michigan, USA, 2009.
- [57] Neudorfer, J., Stindl, T., Schneider, R., Roller, S., Munz, C.-D. und Auweter-Kurtz, M.: Three-dimensional Particle-In-Cell Simulation of a Pulsed Plasma Thruster: Modeling and Challenges, IEPC-2011-116, 32nd International Electric Propulsion Conference, Wiesbaden, Germany, September 2011.
- [58] Neudorfer, J., Stindl, T., Stock, A., Schneider, R., Petkow, D., Roller, S., Munz, C.-D. und Auweter-Kurtz, M.: *Three-Dimensional Simulation of Rarefied Plasma Flows Using a High Order Particle in Cell Method*, High Performance Computing in Science and Engineering '10, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011, Seiten 593–604.
- [59] Neudorfer, J., Stock, A., Stindl, T., Schneider, R., Roller, S., Munz, C.-D. und Auweter-Kurtz, M.: Efficient Parallelization of a Three-Dimensional High-Order Particle-in-Cell Method Applied to Gyrotron Resonator Simulations, High Performance Computing in Science and Engineering '12, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013, Seiten 583–569.
- [60] Nizenkov, P.: *Drag Calculation of Flaps in Rarefied Wake Flows with a DSMC Method*, Studienarbeit, IAG, Universität Stuttgart, 2013.
- [61] Oevel, W.: *Einführung in die Numerische Mathematik*, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, Berlin, Oxford, 1996.
- [62] OpenFOAM Foundation: *OpenFOAM User Guide*, Zweite Aufl., 2013.
- [63] Ortwein, P.: Persönliche Mitteilung, Institut für Aerodynamik und Gasdynamik, Universität Stuttgart, 2014.
- [64] Petkow, D.: *Modellierung von Teilchenkollisionen zur Berechnung hochverdünnter Plasmaströmungen*, Dissertation, Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik und Geodäsie, Universität Stuttgart, Germany, 2011.
- [65] Pfeiffer, M.: Persönliche Mitteilungen, Institut für Raumfahrtsysteme, Universität Stuttgart, 2013.
- [66] Pfeiffer, M., Mirza, A. und Fasoulas, S.: A grid-independent particle pairing strategy for DSMC, *Journal of Computational Physics*, Bd. 246, 2013, Seiten 28 – 36.
- [67] Program Development Corporation: *GridPro v5.5 User's Guide and Reference Manual*, 2012.
- [68] Quandt, M.: *High Order Particle Transport for PIC Simulations of Plasma Flows*, Dissertation, Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik und Geodäsie, Universität Stuttgart, Germany, 2010.
- [69] Stindl, T., Fertig, M. und Auweter-Kurtz, M.: Investigation of Coupled Electrodynamic Tether / Electrostatic Propulsion Systems Using a Particle Approach, AIAA-2006-4651, Proceedings of the 42nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, Sacramento, USA, 2006.

- [70] Stindl, T., Fertig, M. und Auweter-Kurtz, M.: Numerical Investigation of Coupled Electrodynamic Tether / Electrostatic Propulsion Systems, IEPC-2007-107, Proceedings of the 30th International Electric Propulsion Conference, Florence, Italy, 2007.
- [71] Stindl, T., Neudorfer, J., Stock, A., Auweter-Kurtz, M., Munz, C.-D., Roller, S. und Schneider, R.: Comparison of coupling techniques in a high-order discontinuous Galerkin-based particle-in-cell solver, *Journal of Physics D: Applied Physics*, Bd. 44, Nr. 19:194004, Mai 2011.
- [72] Stock, A.: *A High-order Particle-in-Cell Method for Low Density Plasma Flow and the Simulation of Gyrotron Resonator Devices*, Dissertation, Fakultät Luft- und Raumfahrttechnik und Geodäsie, Universität Stuttgart, 2013.
- [73] Stock, A., Neudorfer, J., Schneider, R., Altmann, C. und Munz, C.-D.: Investigation of the Purely Hyperbolic Maxwell System for Divergence Cleaning in Discontinuous Galerkin Based Particle-in-Cell Methods, in *IV International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering, Kos, Griechenland, Juni 20-22, 2011*, Seite 355–366.
- [74] Stock, A., Neudorfer, J., Steinbusch, B., Stindl, T., Schneider, R., Roller, S., Munz, C.-D. und Auweter-Kurtz, M.: Three-Dimensional Gyrotron Simulation Using a High-Order Particle-In-Cell Method, *High Performance Computing in Science and Engineering '11*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2012, Seiten 637–649.
- [75] Taube, A., Dumbser, M., Munz, C.-D. und Schneider, R.: A High Order Discontinuous Galerkin Method with Local Time Stepping for the Maxwell Equations, *International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields*, Bd. 22, Nr. 1, 2009, Seiten 77–103.
- [76] Tipler, P.: *Physik*, Springer Spektrum, Heidelberg, 2009.
- [77] Toro, E. F.: *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*, Springer, Berlin – Heidelberg, 1997.
- [78] Wang, J., Polk, J. E., Brophy, J. R. und Katz, I.: Three-Dimensional Particle Simulations of NSTAR Ion Optics, in *27th International Electric Propulsion Conference, Pasadena, CA, 2001*.
- [79] Weibel, E.S.: Spontaneously Growing Transverse Waves in Plasma due to an Anisotropic Velocity Distribution, *Phys. Rev. Lett.*, Bd. 2, 1959, Seiten 83 – 84.
- [80] Williamson, J. H.: Low-storage Runge-Kutta schemes, *Journal of Computational Physics*, Bd. 35, Nr. 1, 1980, Seiten 48–56.
- [81] Yee, K. S.: Numerical Solution of initial boundary value Problems involving Maxwell's equation in isotropic Media, *IEEE Trans. Antennas and Propagation*, Bd. AP-14, 1966, Seiten 302–307.

A. Anhang zum Rechenaufwand der Deposition

Analog zu Kapitel 4.4.2 wird der Rechenaufwand der Depositionsmethoden, hier allerdings für ein kartesisches Rechengitter mit $11 \times 11 \times 11$ Elementen mit einer Kantenlänge von je 1 mm, verglichen. Während sich generell ein ähnliches Bild wie beim ungleichmäßigen Gitter ergibt, fällt auf, dass bei dem hier gewählten Vergleich in Bezug auf die anderen Methoden durch die Fomfunktionsmethode offenbar weniger Rechenaufwand entsteht als in Kapitel 4.4.2 (Abb. A.1). Zur Untersuchung der Ursache werden die in den Abbildungen A.2 und A.3 dargestellten Rechenzeiten der Formfunktion in Abhängigkeit des gewählten Hintergrundgitters betrachtet. Im Vergleich mit Kapitel 4.4.2 ergibt sich hier ein generell ungleichmäßigeres Bild, was darauf zurückzuführen ist, dass bei der Verwendung von kartesischen Hintergrundgittern und kartesischen Rechengittern Überlappungsmuster entstehen, die sich sowohl positiv als auch negativ auf die Anzahl der Abstandsberechnungen zu den Gaußpunkten auswirken können. So ist beispielsweise bei direkt aufeinanderliegenden Hintergrund- und Rechengittern, also bei $\Delta L_{HGG} / \Delta L_{Element} = 1$ oder $= 2$, die Anzahl der zu überprüfenden Elemente und damit Gaußpunkte pro Hintergrundgitter minimal. Dadurch ergibt sich auch für die Rechenzeit der Formfunktionsmethode eine signifikante Reduktion, die entsprechend auch in Abbildung A.1 zu sehen ist. Generell bestätigen die hier dargestellten Rechenzeiten trotz der Wechselwirkungen zwischen kartesischem Hintergrundgitter und kartesischem Rechengitter die bereits in Kapitel 4.4.2 aufgezeigten Rechenzeitverhältnisse zwischen den einzelnen Methoden.

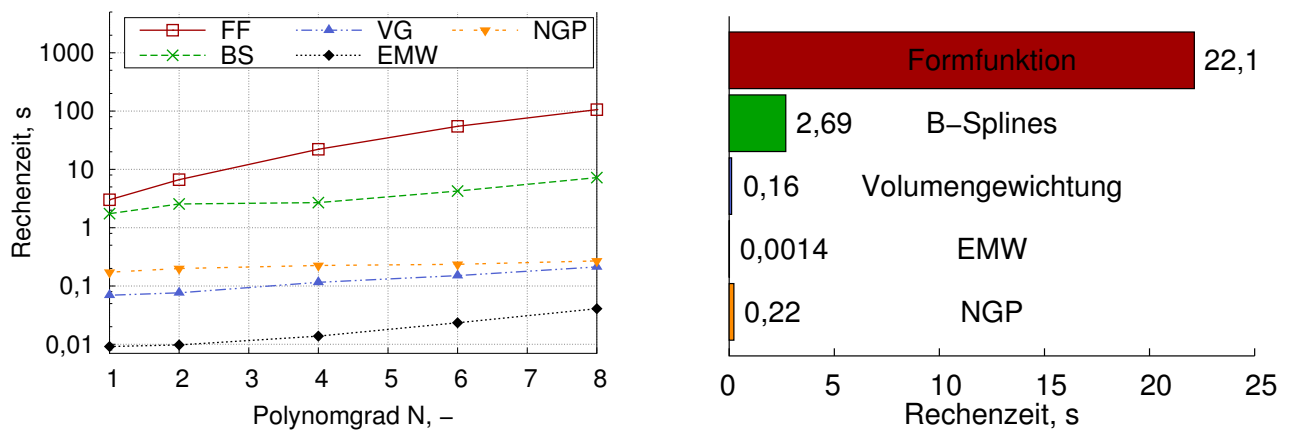


Abbildung A.1.: Vergleich der Rechenzeiten aller Depositionsmethoden für $\Delta L_{ch} / \Delta L_{Element} = 1$ (links) und Veranschaulichung für $N=4$ (rechts) für ein kartesisches Rechengitter.

A. Anhang zum Rechenaufwand der Deposition

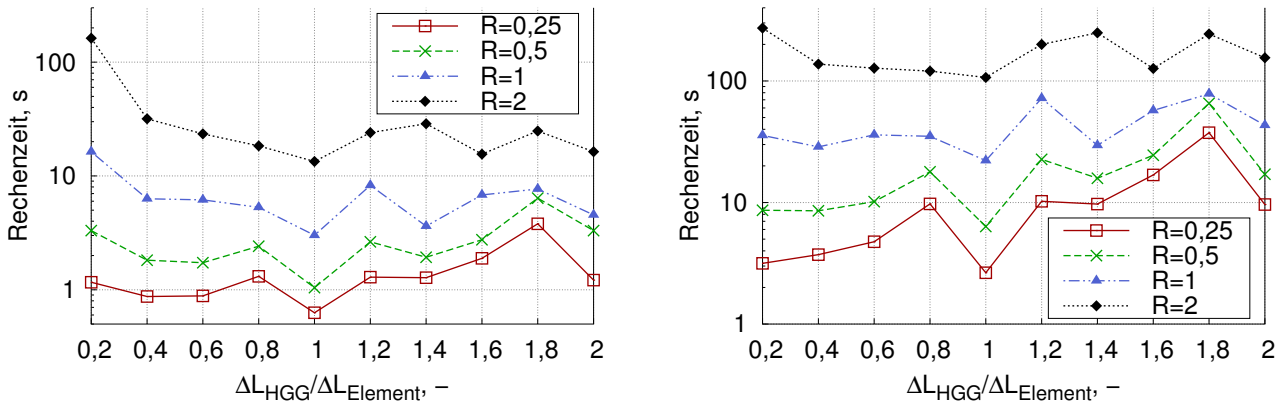


Abbildung A.2.: Rechenzeiten der Formfunktionsmethode für Polynomgrad $N=1$ (links) und $N=4$ (rechts) für verschiedene Radien R .

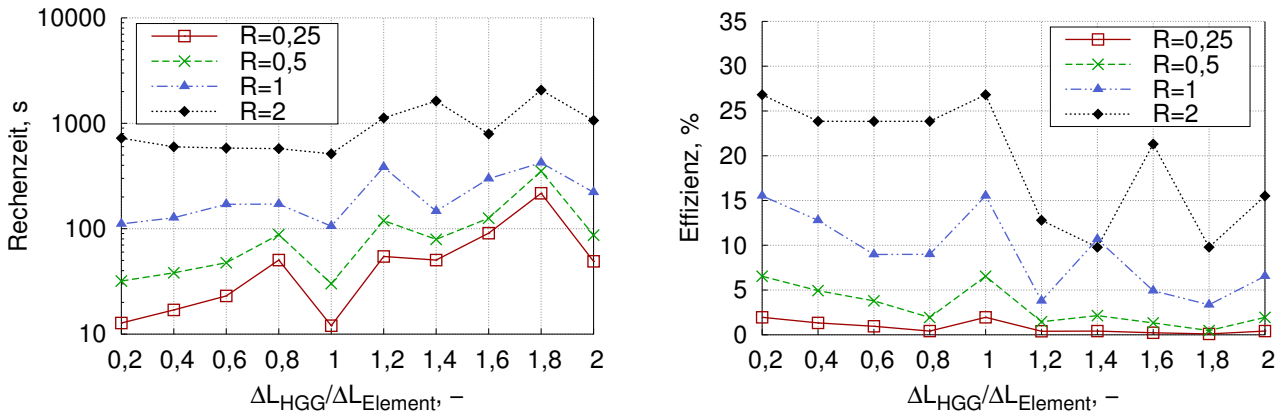


Abbildung A.3.: Rechenzeiten der Formfunktionsmethode für Polynomgrad $N=8$ (links) und Effizienz der Gaußpunktwahl als Quotient der Anzahl der im Radius der Formfunktion befindlichen zu allen überprüften Gaußpunkten (rechts).

B. Anhang zur Ladungsverteilung der Deposition

In Ergänzung zu Kapitel 4.4.1 sind in diesem Anhang zum Vergleich die Verteilungen der Ladungsdichten für um den Faktor 20 geringere Simulationspartikelzahlen bei unveränderter Realteilchendichte dargestellt, um den Einfluss der Partikeldiskretisierung auf die Ladungsverteilung zu verdeutlichen. Abbildungen B.1 bis B.6 zeigen die entsprechende Ladungsdichte für je 500 Elektronen und Ionen mit der Ladung ± 1 C. Es zeigen sich für eine kleinere Anzahl an Simulationspartikeln durchgängig höhere Dichtegradienten und eine inhomogenere Verteilung der Ladungen im Plasma.

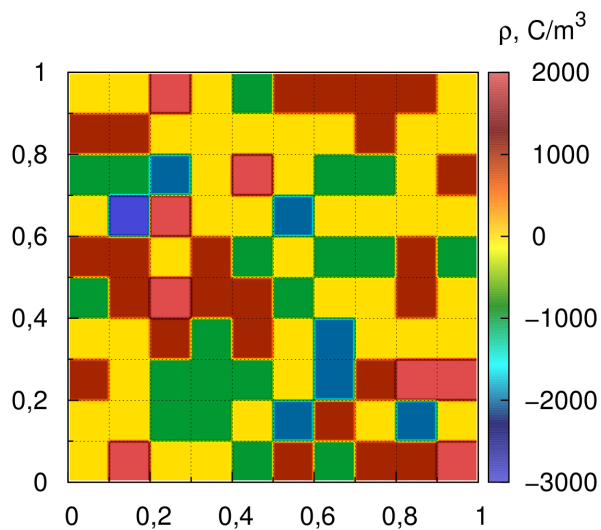


Abbildung B.1.: *Ladungsdichteverteilung der Elementmittelwertmethode für Polynomgrad $N = 4$ und 2×500 Partikel.*

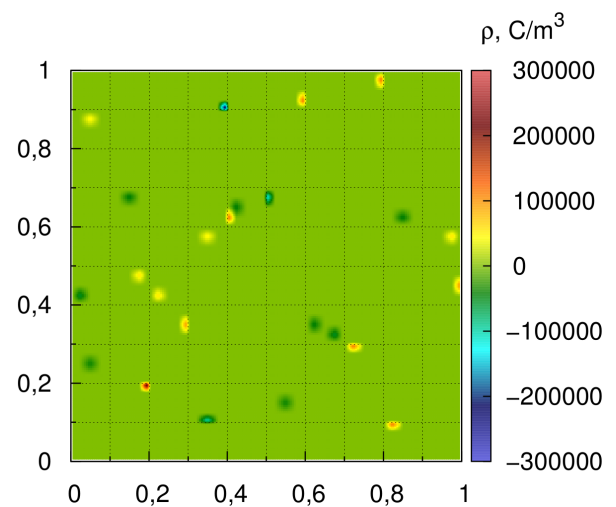


Abbildung B.2.: *Ladungsdichteverteilung der Nächster-Gaußpunkt-Methode für Polynomgrad $N = 4$ und 2×500 Partikel.*

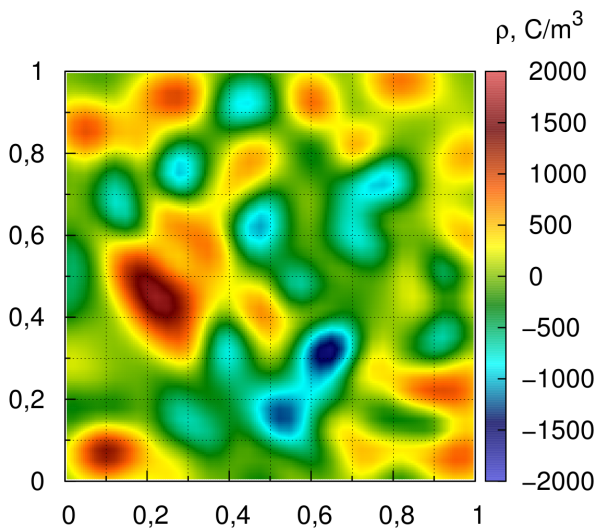


Abbildung B.3.: Ladungsdichteverteilung der Formfunktionsmethode mit $r = 0,2$ und $\alpha = 8$ für Polynomgrad $N = 4$ und 2×500 Partikel.

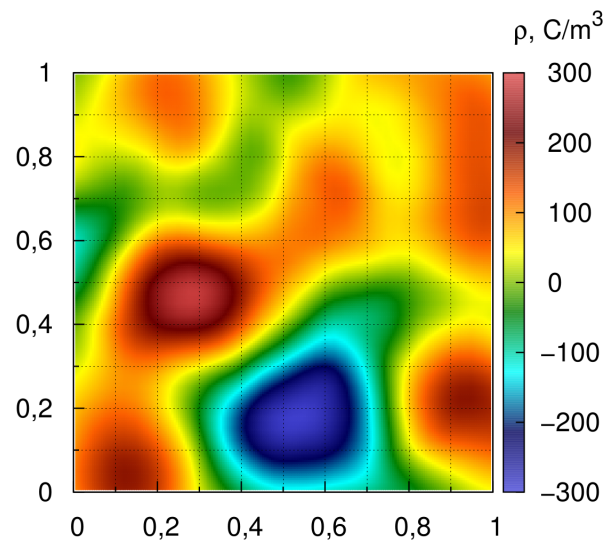


Abbildung B.4.: Ladungsdichteverteilung der Formfunktionsmethode mit $r = 0,3$ und $\alpha = 2$ für Polynomgrad $N = 4$ und 2×500 Partikel.

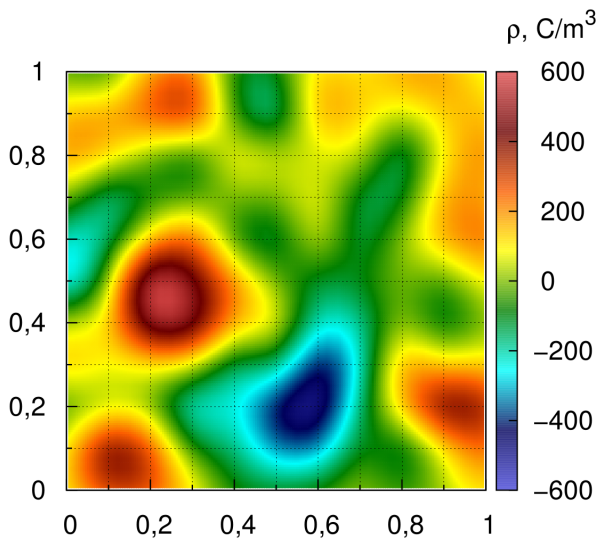


Abbildung B.5.: Ladungsdichteverteilung der B-Splines-Methode mit $\Delta L_{BGM} = 0,1$ für Polynomgrad $N = 4$ und 2×500 Partikel.

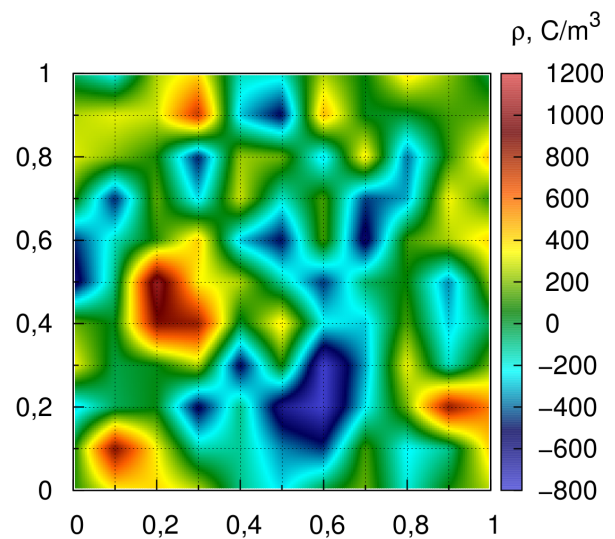


Abbildung B.6.: Ladungsdichteverteilung der Volumengewichtungsmethode mit $\Delta L_{BGM} = 0,1$ für Polynomgrad $N = 4$ und 2×500 Partikel.