

Применение научной визуализации в моделировании низкотемпературной газоразрядной плазмы

В.П. Будак¹, И.И. Железнов²

Национальный исследовательский университет «МЭИ»

¹ ORCID: 0000-0003-4750-0160, budakvp@gmail.com

² ORCID: 0009-0004-8875-2991, zheleznov96y@gmail.com

Аннотация

В данной статье обсуждается важность развития программно-аппаратных комплексов для визуализации данных и улучшения способов их представления при моделировании явления низкотемпературной газоразрядной плазмы и связанных с ней физических процессов. В частности, рассматриваются проблемы, связанные с созданием специализированной распределенной среды для решения задач моделирования газового разряда. Использование компьютерной графики для визуализации позволили наглядно анализировать полученные данные и вносить необходимые коррективы в процесс моделирования в режиме взаимодействия с данными. В работе представлены результаты визуализации модели ртутно-аргоновой плазмы в коаксиальном СВЧ разряде. Применение локальных сечений расчетной области для визуализации позволило выявить внутреннюю структуру и особенности распределения электрического поля и концентрации электронов в разрядной трубке. Полученные данные послужили основой для создания экспериментального образца коаксиального газоразрядного источника оптического излучения.

Ключевые слова: Визуализация данных, моделирование низкотемпературной плазмы, газоразрядная плазма.

1. Введение

Технологии визуализации наиболее часто применяются в задачах численного моделирования сложных, многокомпонентных моделей, когда требуются терафлопные производительности вычислительных ресурсов. Из-за высокой сложности исследуемых объектов построение расчетных сеток может представлять значительные трудности. Определение оптимальных размеров и структуры расчетных сеток, необходимых для достижения приемлемой точности, подразумевает необходимость изменения параметров модели. Этот процесс становится итеративным и интерактивным, поскольку результаты визуализации помогают анализировать и корректировать параметры сетки. Для достижения желаемых результатов при анализе исходных данных методом научной визуализации требуется многократно выполнять алгоритм расчета и визуализации, внося изменения в значения различных параметров и проводя визуальную оценку промежуточных результатов в режиме реального времени.

Особую роль визуализация результатов моделирования приобретает в исследовании низкотемпературной плазмы. В последние годы наблюдается бурный рост работ, посвященных самосогласованному моделированию сложных газоразрядных плазменных систем, в частности [1-3]. Это связано с двумя причинами. Во-первых, это накопление надежных баз данных о различных константах, используемых при моделировании (сечения различных процессов, коэффициенты переноса и реакций и т. д.). Во-вторых, это увеличение мощности вычислительных ресурсов, используемых для расчетов, что позволяет, как усложнить решаемые задачи и приблизить их к описанию экспериментов, так и получить результаты за короткое время. Более того,

если ранее решались одномерные и двумерные задачи, то теперь, с появлением мощных вычислительных ресурсов, актуальным становится развитие трехмерных моделей.

Процесс визуализации данных при моделировании излучения низкотемпературной газоразрядной плазмы представляет собой задачу, предполагающую учет уникальных характеристик данного состояния материи и требующую тщательного регулирования визуального отображения полученных результатов. В отличие от аналогичных задач, связанных с более высокими температурами плазменных состояний, такими как плазма в солнечной короне или в установках типа токамак, где тепловое движение частиц играет более существенную роль, низкотемпературная газоразрядная плазма обладает более выраженной химической активностью и взаимодействием с нейтральными атомами и молекулами.

Следовательно, для успешной визуализации данных данного процесса требуется использование специализированных методов, способных учитывать уникальные характеристики низкотемпературной плазмы и передавать информацию о молекулярных и химических взаимодействиях, которые играют значимую роль в этом контексте:

1. *Колориметрия и контурные диаграммы*: такой подход опирается на использование разнообразных цветов и цветовых шкал для демонстрации параметров плазмы. Таким образом можно визуализировать, например, интенсивность излучения или плотность частиц. Применение контурных диаграмм позволяет выделить линии, обозначающие постоянные значения параметров, что способствует обнаружению структур и закономерностей.

2. *Изолинии и изосеры*: в этом методе используются изолинии – кривые, соединяющие точки с одинаковыми значениями параметров. Изосеры, в свою очередь, представляют заштрихованные области между изолиниями, которые окрашиваются в зависимости от уровня параметра. Данный метод позволяет выявлять градиенты и изменения в параметрах плазмы.

3. *Объемная визуализация (3D визуализация)*: для более глубокого понимания структуры плазмы используется объемная визуализация. Она предоставляет возможность наблюдать структуры в трехмерном пространстве и взаимодействовать с ними.

4. *Анимация и временная визуализация*: в случае, если моделирование плазмы охватывает временную динамику, анимации становятся информативными. Такой подход позволяет следить за изменением параметров плазмы во времени и выявлять динамические процессы.

Однако, при использовании вышеперечисленных методов исследователи сталкиваются с рядом сложностей и ограничений:

- *Сложность моделирования*: газоразрядная плазма представляет собой сложную систему с множеством взаимодействующих частиц, энергетических процессов и химических реакций. моделирование такой плазмы требует учета всех этих факторов, что является трудоемкой задачей. Необходимость учесть множество переходов и взаимодействий между компонентами плазмы усложняет моделирование и требует значительных вычислительных ресурсов.

- *Ограничения баз данных*: для моделирования излучения необходимы базы данных о спектрах излучения различных элементов и молекул в плазме. Однако некоторые данные могут быть неполными или недоступными для определенных элементов или условий плазмы, что снижает точность моделирования.

- *Учет трехмерной геометрии*: низкотемпературная плазма часто имеет сложную трехмерную геометрию, такую как разрядные камеры или электроды. Учет такой геометрии в моделировании и визуализации может быть сложной задачей и требует использования соответствующих алгоритмов трехмерной компьютерной графики.

➤ Ограничения вычислительных ресурсов: моделирование и визуализация процессов излучения в газоразрядной плазме требуют значительных вычислительных мощностей. Расчеты могут быть времязатратными, особенно при использовании высокоразрешенных трехмерных моделей и сложных алгоритмов трассировки лучей. Ограниченные ресурсы могут сказаться на точности моделирования и времени получения результатов.

➤ Валидация моделей: для обеспечения точности моделей необходима их валидация. Это может быть сложной задачей, так как экспериментальные данные могут быть ограниченными или недоступными. Важно проводить проверку адекватности моделей и сравнивать результаты с имеющимися экспериментальными данными.

Учитывая все указанные аспекты, специфика визуализации данных при моделировании излучения низкотемпературной газоразрядной плазмы требует разработки специализированных методов и инструментов, способных учитывать уникальные характеристики данного типа плазмы. Эти методы и инструменты обеспечивают исследователям возможность проводить полноценный анализ и взаимодействие с полученными вычислительными результатами. Принимая во внимание постоянное развитие компьютерных технологий и совершенствование физических моделей, вышеупомянутые трудности могут быть преодолены, что в конечном итоге позволяет получать более точные и реалистичные визуализации плазменных процессов [4, 5].

2. Параметры модели

В качестве объекта исследования, рассмотрим пример визуализации коаксиального ртутно-аргонового разряда, возбужденного СВЧ электромагнитным полем магнетрона [6].

Ввиду того, что в изученных условиях и геометрии разрядной системы длина релаксации энергии электронов значительно превышает радиус разрядной трубки, для описания разряда используется самосогласованная модель в приближении условия локального термодинамического равновесия (ЛТДР). Это условие применимо в области давлений ртути порядка 0,05 Торр, аргона ~ 0,1–0,7 Торр и радиуса разрядной трубки 1–3 см.

Так, при цилиндрической геометрии разрядной трубки граничные условия для уравнения баланса образования и разрушения заряженных частиц записываются следующим образом [7]:

$$\nabla n_e|_{r=0} = 0, \quad -D_a \nabla n_e|_{r=R} = n_e(R) V_i = n_e(R) \sqrt{\frac{kT_e}{M_i}}. \quad (1)$$

Здесь R – радиус трубки, k – постоянная Больцмана, D_a – коэффициент амбиполярной диффузии, $V_i = \sqrt{kT_e / M_i}$ – скорость ионного звука, M_i – масса иона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов $0.5kT_e / e$, e – элементарный заряд.

В этом случае локальная связь параметров электронной компоненты с СВЧ полем отсутствует, и заменяется уравнением баланса для плотности потока энергии электронов.

Концентрацию электронов в разряде будем аппроксимировать при помощи функции Бесселя нулевого порядка:

$$n_e(r) = n_{e0} J_0(\alpha r / R), \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad (2)$$

где α – коэффициент, учитывающий отличие концентрации электронов вблизи стенок от нуля, определяемый из граничного условия:

$$-\frac{\mu_i k T_e}{e} \frac{\partial}{\partial r} J_0(\alpha r / R) \Big|_{r=R} = J_0(\alpha) \sqrt{\frac{k T_e}{M_i}}, \quad (3)$$

где μ_i и M_i – подвижность и масса иона ртути.

Подвижности ионов ртути в ртути и в аргоне не сложно определить, согласно [8]:

$$\mu_i^{Hg} = 0.24 \times 10^{-4} \left[\frac{1.0132 \times 10^5 T}{500 p_{Hg}} \right], \quad (4)$$

$$\mu_i^{Ar} = 1.84 \times 10^{-4} \left[\frac{1.0132 \times 10^5 T}{300 p_{Hg}} \right]. \quad (5)$$

Здесь p_{Hg} и p_{Ar} – давления в Торрах, T – температура газа в Кельвинах. Тогда итоговая подвижность ионов ртути в смеси ртути с аргонem определится, как:

$$\mu_i = \left(\frac{1}{\mu_i^{Hg}} + \frac{1}{\mu_i^{Ar}} \right)^{-1}, \quad (6)$$

Предположим, что распределение концентрации электронов по радиусу стационарно. Это легко доказать, сравнив время релаксации концентрации электронов $\tau_{амб}$, обусловленное амбиполярной диффузией, с периодом колебаний питающего напряжения. При этом должно выполняться условие:

$$\frac{1}{2\pi f \tau_{амб}} \ll 1 \quad (7)$$

где f – частота колебаний питающего напряжения, а $\tau_{амб}$ можно вычислить [9], воспользовавшись следующим соотношением:

$$\tau_{амб} = R^2 (2.405^2 D_a)^{-1}. \quad (8)$$

В таком случае критерий стационарности:

$$\gamma = \frac{2.405^2 D_a}{2\pi f R^2} \ll 1 \quad (9)$$

Определим коэффициент диффузии атомов ртути D . Так, для ртутно-аргоновой смеси [10]:

$$D = 1.858 \times 10^{-7} T^{3/2} \frac{\sqrt{(M_{Hg} + M_{Ar}) / M_{Hg} M_{Ar}}}{\sigma^2 \Omega \cdot (p_{Hg} + p_{Ar}) / 101325}, \frac{m^2}{s}. \quad (10)$$

где $M_{Hg} = 200.59$; $M_{Ar} = 39.948$; $\sigma = 3.2555$ Å – характерное расстояние взаимодействия ртути и аргона, Ω – интеграл столкновений для диффузии.

В свою очередь, подвижность электронов можно определить, воспользовавшись понятием о функции распределения энергии электронов:

$$\mu_e = -\frac{2e}{3m_e} \int_0^\infty \frac{U^{3/2}}{v_m + j\omega} \frac{\partial}{\partial U} \left[\frac{f(U)}{\sqrt{U}} \right] dU, \quad (11)$$

где $v_m = v n_{Hg} Q_{m,Hg}(v) + v n_{Ar} Q_{m,Ar}(v)$ – транспортная частота упругого рассеяния электронов на атомах ртути и аргона, $f(U)$ – нормированная на единицу функция распределения энергии электронов (ФРЭЭ):

$$\int_0^\infty f_e(U) dU = 1. \quad (12)$$

Относительная диэлектрическая проницаемость дисперсионной среды рассчитывалась по модели Друде [11]. В этой модели частота столкновений v_m ,

плазменная частота электронов ω_{pe} и поле пробоя E_c являются тремя ключевыми параметрами. Плазменная частота электрона ω_{pe} определялась с помощью уравнения:

$$\omega_{pe} = \sqrt{\frac{n_e e^2}{\varepsilon_0 m_e}}, \quad (13)$$

здесь m_e — масса электрона

При этом частота столкновений ν_m электронов с нейтральными атомами:

$$\nu_m = \frac{\sqrt{8kT_e/\pi m_e}}{\lambda_e}, \quad (14)$$

где T_e — температура электронов, λ_e — длина свободного пробега между нейтральными атомами и электронами.

Напряженность электрического поля пробоя E_c выражалась уравнением:

$$E_c = \frac{kT\omega}{ps\Lambda\sqrt{\frac{m_e \nu_i}{3e}}}, \quad (15)$$

где ν_i — потенциал ионизации нейтральной частицы, ω — круговая частота микроволн), s — сечение упругого столкновения, T — температура рабочей ртутно-аргоновой смеси, Λ — характерная длина диффузии электронов в цилиндре размерами:

$$\Lambda = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\pi}{l}\right)^2 + \left(\frac{2,405}{R}\right)^2}}, \quad (16)$$

где l — длина трубки, R — внутренний диаметр цилиндра.

Теперь необходимо провести оценку взаимодействия излучения с компонентами плазмы. Для этого представим перенос излучения в двухуровневой системе. Пусть n_1 , n_2 — концентрации атомов на 1 и 2 уровнях. Кинетическое уравнение сформулируем для концентрации частиц на втором уровне:

$$n_2(\mathbf{r}, t) = \int f_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3 p. \quad (17)$$

Тогда, с учетом вышеизложенного, определяющая система уравнений будет представлять ничто иное:

$$\begin{cases} \frac{\partial n_2}{\partial t} = A_{21}n_2 - w_{21}n_2 + w_{12}n_1 + \frac{1}{4\pi} \int \oint L_\nu(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{l}}) [B_{12}n_1 - B_{21}n_2] P(\nu) d\hat{\mathbf{l}} d\nu, \\ (\hat{\mathbf{l}}, \nabla) L_\nu(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{l}}) = -\varepsilon_\nu(\mathbf{r}) + \kappa_\nu(\mathbf{r}) L_\nu(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{l}}), \end{cases} \quad (18)$$

где $P(\nu)$ — функция контура спектральной линии излучения, A_{21} , B_{12} и B_{21} — коэффициенты Эйнштейна, $\varepsilon_\nu(\mathbf{r})$ и $\kappa_\nu(\mathbf{r})$ — коэффициенты излучения и поглощения соответственно. Используя уравнения состояния идеального газа (законы Больцмана и Саха), мы можем рассчитать состав плазмы разряда.

Несложно доказать, что интегральное выражение системы уравнений (18) представляет собой:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4\pi} \int \oint L_\nu(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{l}}) [B_{12}n_1 - B_{21}n_2] P(\nu) d\hat{\mathbf{l}} d\nu = \\ & = \frac{B_{12}n_1 - B_{21}n_2}{4\pi} \int \oint L_\nu(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{l}}) [B_{12}n_1 - B_{21}n_2] P(\nu) d\hat{\mathbf{l}} d\nu = \frac{B_{12}n_1 - B_{21}n_2}{4\pi} \int E_0(\mathbf{r}, \nu) P(\nu) d\nu, \end{aligned}$$

где $E_0(\mathbf{r}, \nu)$ — пространственная облученность, которая вычисляется:

$$E_0(\mathbf{r}, \nu) = \oint L_\nu(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{l}}) d\hat{\mathbf{l}} = \oint \int_0^{\frac{\pi}{2}} \varepsilon_\nu(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{l}}) \exp(-\kappa_\nu t) \frac{t^2}{t^2} dt d\hat{\mathbf{l}} = \quad (19)$$

$$= \int_V \varepsilon_\nu(\mathbf{r}') \frac{\exp(-\kappa_\nu |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} d^3 r'$$

Определим вспомогательную функцию – оператор переноса излучения:

$$K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \frac{1}{4\pi} \int \kappa_\nu(\mathbf{r}') P(\nu) \frac{\exp(-\kappa_\nu |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} d\nu. \quad (20)$$

Тогда с учетом всех подстановок, получим результирующее уравнение, характеризующее перенос возбуждения в низкотемпературной газоразрядной плазме:

$$\frac{\partial n_2}{\partial t} = A_{21}n_2 - w_{21}n_2 + w_{12}n_1 + \int_V A_{21}n_2(\mathbf{r}') K(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d^3 r'. \quad (21)$$

Для эффективного решения этой задачи требуется использовать специальные базы данных, содержащие информацию о спектрах излучения различных элементов и частиц [12].

2.1. Программное обеспечение, используемое в работе

Существует несколько видов программных инструментов для моделирования и визуализации низкотемпературной газоразрядной плазмы. В таблице 1 представлены их основные особенности.

Таблица 1 – Сравнение программных инструментов

Инструмент	Преимущества	Ограничения и недостатки
ANSYS Plasma Simulation	Обеспечивает высокую точность моделирования, позволяя анализировать разнообразные параметры плазмы	Требует значительную вычислительную мощность, особенно для сложных моделей
CST Studio Suite	Предоставляет средства для визуализации и анализа электромагнитных и плазменных явлений	Изначальная специализация на электромагнитном моделировании ограничивает анализ явлений излучения
PlasmaLab	Эффективен для узконаправленных задач в области плазмы	Не является универсальным и может оказаться ограниченным в возможностях для моделирования других физических процессов
OpenFOAM	Открытое программное обеспечение с гибкими возможностями для моделирования течений и теплопередачи	Требует дополнительной адаптации и конфигурирования для моделирования плазмы
COMSOL Multiphysics	Обладает многозадачностью и гибкостью: позволяет интегрировать различные физические явления в единой модели, предоставляет широкий выбор разнообразных физических моделей	Потребуется некоторое время для освоения из-за богатства функциональности и сложности

На основании проведенного анализа (табл.1) рекомендуется отдать предпочтение COMSOL Multiphysics [13].

Важно отметить, что данный программный комплекс использует метод конечных элементов (Finite Element Method, FEM) для решения системы уравнений (1-13). Этот метод основан на декомпозиции сложных областей или систем на более простые подобласти, обладающие уникальными геометрическими и математическими характеристиками. Другими словами, задача разбивается на конечное число подзадач, которые затем решаются численным методом. Такой подход обеспечивает возможность получения более детальных и точных результатов для сложных систем, учитывая различные физические взаимодействия. Основной интерфейс программы предоставляет графическую среду, в которой пользователь может создавать геометрию модели, задавать граничные условия, материальные свойства и другие параметры.

Выделим основные шаги, которые можно предпринять при моделировании в COMSOL:

1. Создание геометрии: инструменты COMSOL позволяют создавать сложные трехмерные геометрии с помощью интуитивного пользовательского интерфейса или импорта моделей из других CAD-программ.

2. Определение физических свойств материалов, используемых в модели.

3. Введение граничных условий для различных поверхностей модели

4. Задание основной системы уравнений.

5. Решение модели: как уже отмечалось, COMSOL Plasma Module использует численные методы для решения системы уравнений, описывающих физические процессы модели.

6. Анализ результатов: после завершения расчета необходимо проанализировать результаты моделирования. Для этого мы использовали различные режимы программы:

- Режим "Cross-Section Plot Parameters" позволил исследовать параметры модели путем создания поперечных сечений трехмерного объекта.

- Режим "Domain Plot Parameters" использовался для изучения переменных на границе области раздела объектов. Режим "Arrow Plot" - для визуализации векторного СВЧ-поля.

- Режим "Slice" - для отображения параметров задачи в выбранной плоскости с использованием цветовой шкалы.

Эти шаги представляют оптимальный процесс моделирования, который может быть легко адаптирован в зависимости от введения дополнительных граничных условий или параметров.

По вышеописанному алгоритму на рисунке 1 показана реализация пространственного моделирования коаксиальной цилиндрической трубки, имитирующей ртутно-аргоновой разряд.

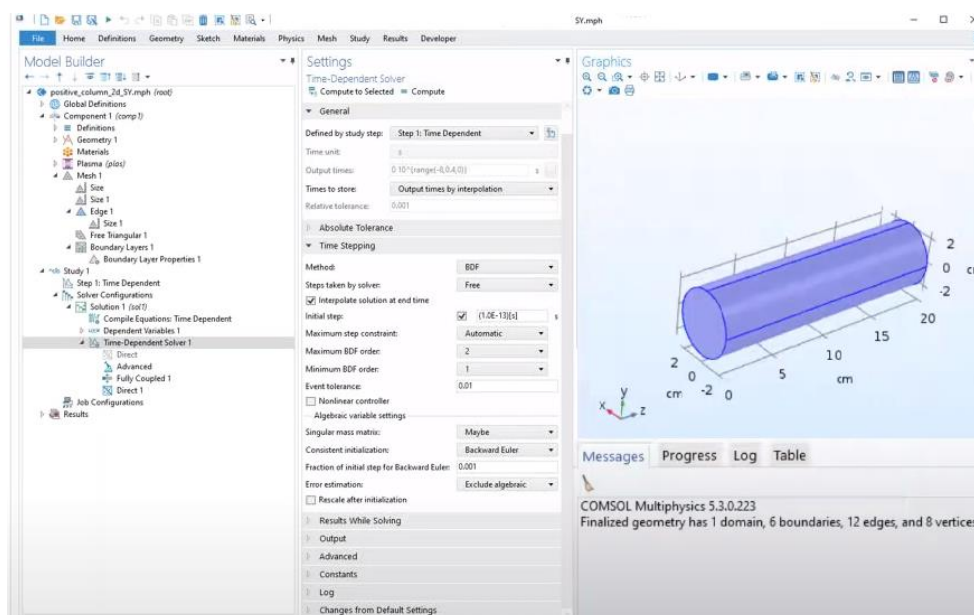


Рис. 1. Пример моделирования цилиндрического излучателя в COMSOL Multiphysics

COMSOL Multiphysics предоставляет возможность визуализации сетки в графическом окне, позволяя пользователям добавлять, удалять, изменять размеры и формы узлов и элементов, а также регулировать плотность сетки в необходимых областях. Это позволяет пошагово увеличивать количество точек сетки в областях, где наблюдаются наибольшие изменения напряженности электрического поля. Использование последовательных итераций для увеличения точности сетки в областях с высокими изменениями напряженности электрического поля является эффективной стратегией для достижения более точных результатов и удовлетворения критериев точности в этих областях.

Для проведения вычислений внедрен кластерный узел с 10 CPU-ядрами и 32 ГБ оперативной памяти. Поскольку загрузка вычислительных ядер CPU составляет около 100% на протяжении всего времени вычислений, а использование оперативной памяти остается низким (не превышает 30%), это указывает на то, что CPU выполняют основную часть вычислений. В данной конфигурации использование графических ускорителей (GPU) не требуется и не оказывает существенного влияния на производительность расчетов и визуализации.

Однако, если в будущем возникнет необходимость в обработке задач, которые могут быть эффективно распараллелены с использованием графических ускорителей, то рассмотрение добавления GPU в текущую конфигурацию стоит рассмотреть. GPU могут быть полезными при выполнении определенных видов вычислительных задач, таких как глубокое обучение нейронных сетей или научные расчеты, где множество параллельных вычислений может быть эффективно выполнено с использованием CUDA и аналогичных графических библиотек.

3. Результаты моделирования и их обсуждение

В результате проведенных расчетов получены данные 3D визуализации численного моделирования СВЧ разряда в ртутно-аргоновой низкотемпературной плазме.

На рисунках 2 и 3 представлены радиальные и пространственные распределения концентраций возбужденных атомов ртути. Радиальное распределение резонансных атомов отображает их концентрацию в зависимости от радиуса и вертикальной координаты плоскости. Пространственное распределение концентрации показывает распределение концентрации во всем объеме модели.

Оба распределения получены с помощью режима Slice в программе COMSOL Multiphysics, который позволил визуализировать выбранные срезы или плоскости внутри модели для более детального анализа данных.

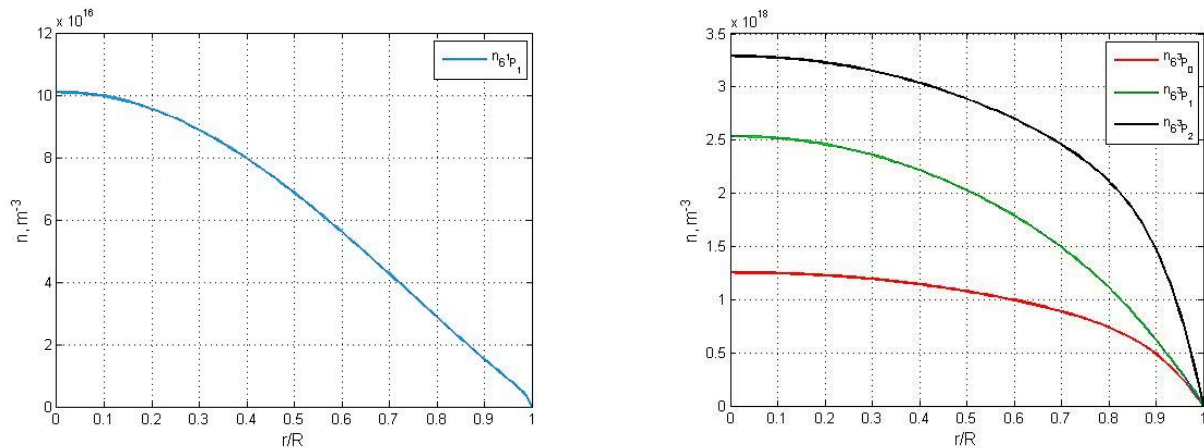


Рис. 2. Радиальные распределения концентраций возбужденных атомов ртути.

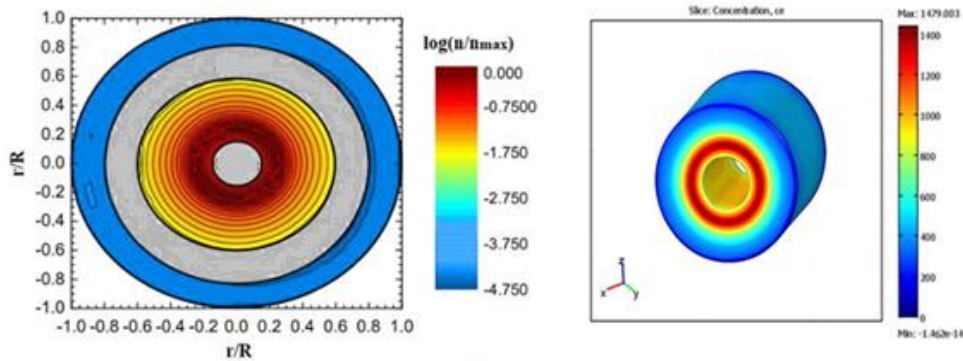


Рис. 3. Пространственное распределение концентрации в центральной плоскости $z = L/2$

На рисунке 2 можно наблюдать процессы, связанные с фотонами, попадающими в область за отражающим препятствием в результате процессов перепоглощения. Применение локальных сечений внутри исследуемого объекта позволило раскрывать его внутреннюю структуру и особенности параметров в трехмерной визуализации. Локальные сечения здесь представляли собой плоскости, которые пересекают объект в определенных точках, что способствовало более детальному изучению внутренних компонентов объекта. Результат визуализации концентрации электронов в разряде представлен на рисунке 3, где $c_e = n_e/n_c$. Здесь n_e – концентрация электронов, $n_c = 7 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ – максимальная концентрация.

Для того, чтобы более наглядно проиллюстрировать влияние неоднородности поглощающих атомов (здесь - нейтральных) на распределение излучающих (в данном случае - резонансных), проведем анализ функций Грина, которые позволяют найти решение уравнения переноса в виде:

$$n(\mathbf{r}) = \int_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') W(\mathbf{r}') d^3 r'. \quad (22)$$

Зависимости для однородной и неоднородной плазмы, полученные с помощью MATLAB представлены на рисунке 4.

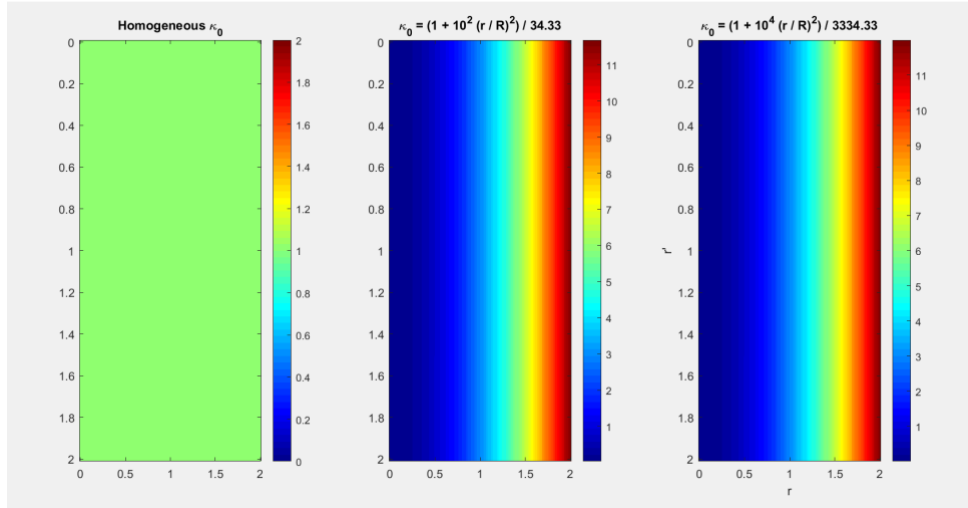


Рис. 4. Функции Грина оператора переноса излучения для однородного (1) и неоднородного поглощения при $\kappa_0(r) = 10^2 (r/R)^2 / 33.34$ (2), и $\kappa_0(r) = 10^4 (r/R)^2 / 3334.33$ (3).

В частности, легко доказать, что в оптически однородной плазме, в которой функция контура спектральной линии $P(\nu)$ не зависит от координаты, выполняется условие симметрии $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G(\mathbf{r}', \mathbf{r})$.

Эти функции позволяют более подробно исследовать спектральные характеристики излучения и его распределение в пространстве.

Теперь проведем оценку изменения температуры газа вдоль сечения разряда. Для этого мы рассмотрим уравнение теплопроводности в стационарном режиме, учитывая, что на процесс нагрева атомов газа и установление радиального профиля температуры T оказывают значительное воздействие упругие столкновения с атомами аргона и ртути:

$$-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r K_T(T) \frac{d}{dr} T = W_{\text{ynp}, \text{Hg}} + W_{\text{ynp}, \text{Ar}}, \quad (23)$$

где $K_T(T)$ – коэффициент теплопроводности смеси газов, $W_{\text{ynp}, \text{Hg}} + W_{\text{ynp}, \text{Ar}}$ – мощность, передаваемая атомам аргона и ртути электронами в единице объема плазмы. Граничные условия для (23) записываются следующим образом:

$$\left. \frac{dT}{dr} \right|_{r=0} = 0, \quad T(R) = T_{\text{стенки}}, \quad (24)$$

а $W_{\text{ynp}, \text{Hg}}$ и $W_{\text{ynp}, \text{Ar}}$ рассчитываются как:

$$W_{\text{ynp}, \text{Hg}} = n_e(r) \frac{p_{\text{Hg}}}{kT} \frac{2m_e}{M_z} \int_0^\infty \frac{m_e v^2}{2} v q_{\text{Hg}}(v) f_e(v) dv, \quad (25)$$

$$W_{\text{ynp}, \text{Ar}} = n_e(r) \frac{p_{\text{Ar}}}{kT} \frac{2m_e}{M_z} \int_0^\infty \frac{m_e v^2}{2} v q_{\text{Ar}}(v) f_e(v) dv. \quad (26)$$

Так как процесс формирования радиального распределения температуры газа обусловлен упругими столкновениями электронов с атомами ртути и аргона, то в качестве функции распределения электронов по скоростям (ФРЭС) $f_e(v)$ можно взять максвелловскую функцию:

$$f_e(v) = 4 \sqrt{\frac{m_e}{2\pi kT_e}} \frac{m_e v^2}{2kT_e} \exp \left[-\frac{m_e v^2}{2kT_e} \right]. \quad (27)$$

В качестве $n_e(r)$ здесь удобно принять распределение Бесселя с нулем на стенке колбы: $n_e(r) = n_{e0} J_0(2.405r/R)$.

На рисунке 5 изображены рассчитанные распределения температуры газа для трех давлений (0.1, 0.5 и 1 Торр).

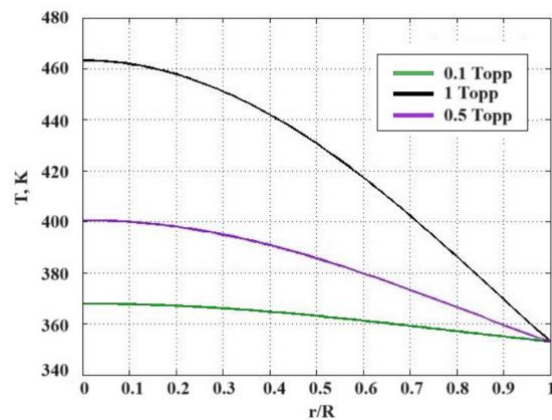


Рис. 5. Радиальные распределения температуры в ртутно-аргоновом разряде

Для определения распределения электрического поля в разряде на практике чаще всего прибегают к различным экспериментальным методам, таким как микроволновая спектроскопия [14] или использование электростатических зондов [15]. Однако эти методы требуют дорогостоящего оборудования и высокоточных измерительных приборов. Удалось решить данную проблему путем совместного использования программы Comsol Multiphysics и специального алгоритма, разработанного на Matlab.

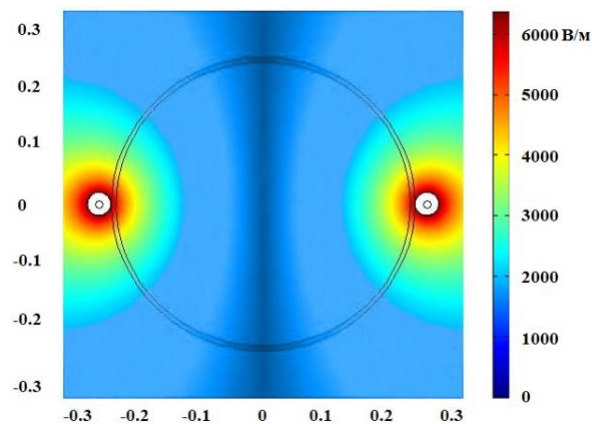


Рис. 6. Пространственное распределение модуля напряженности электрического поля.

Из рисунка 6 видно, что напряженность электрического поля достигает максимума у стенок трубки и затем быстро уменьшается по мере распространения через сечение плазмы. Одновременно максимум объемной плотности мощности наблюдается несколько ближе к центру трубки из-за низкой концентрации электронов у стенок. При изменении частоты столкновений в плазме из-за изменения диэлектрической проницаемости наблюдаются лишь небольшие изменения в распределении электрического поля. Электрическое поле периодически колеблется вдоль осевого направления, но в радиальном направлении оно остается близким к равномерному распределению. Это важно для анализа поведения параметра S_{11} при разных частотах плазмы. S_{11} представляет собой коэффициент отражения СВЧ-волны от входа устройства и определяется как отношение комплексной амплитуды отраженной волны к комплексной амплитуде падающей волны (см. рисунок 7).

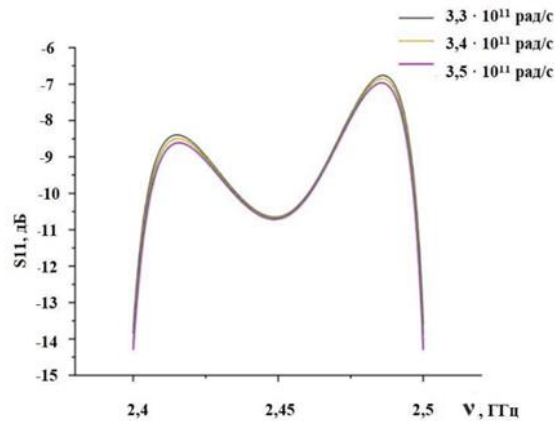


Рис. 7. Распределение S11 на разных плазменных частотах

Если коэффициент отражения (S_{11}) находится ниже -10 (дБ), как показано на рисунке 7, это свидетельствует о низком уровне отраженной мощности, что является показателем эффективности. Когда отраженная мощность остается стабильно низкой и практически не меняется при изменении частоты плазмы, это указывает на то, что рассматриваемая структура адаптирована для работы с различными источниками излучения. Таким образом, удержание низкого значения S_{11} независимо от частоты плазмы является важным условием для эффективной работы данного устройства.

На рисунке 8 представлена зависимость коэффициента отражения S_{11} от параметра $W_{щ}$, который обозначает ширину всех щелей резонатора, при работе на частоте 2,45 ГГц. При различных значениях ширины щели микроволновая система достигает резонанса на рабочей частоте, и соответственно S_{11} увеличивается с ростом значения $W_{щ}$. Когда $W_{щ}$ равна 17 мм, S_{11} превышает -10 дБ, что указывает на то, что приемлемые значения S_{11} достигаются только при ширине пазов от 9 до 16 мм. Эти щели способствуют связыванию микроволновой энергии, так как они ограничивают ток разряда и осуществляют перенос микроволновой энергии источника вдоль всех щелей. Геометрическое расположение щели также влияет на величину выходной энергии оптического излучения. Исходя из вышеизложенного, оптимальное значение параметра $W_{щ}$ было принято 16 мм. В этом случае S_{11} составляет $-10,13$ дБ, и показатель поглощения достигал 92%.

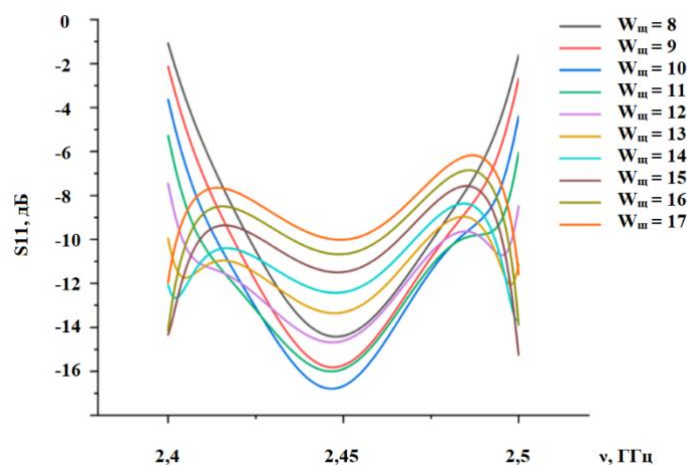


Рис. 8. Сравнение значений S_{11} при изменении параметра $W_{щ}$.

В результате визуализация полученных данных моделирования позволила коррективы в конструкции рассмотренного в работе источника оптического излучения, что привело к повышению КПД системы на 8% по сравнению с [16]. Чертеж разработанной модели излучателя представлен на рисунке 9.

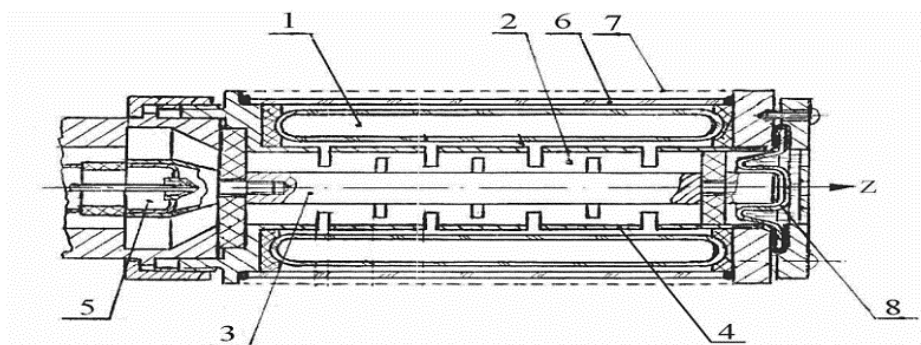


Рис. 9. Чертеж безэлектродного СВЧ источника оптического излучения. 1 – цилиндрический источник оптического излучения; 2 – коаксиальный тракт; 3 – центральный проводник тракта; 4 – наружный проводник тракта с поперечными СВЧ-излучающими щелями; 5 – выходное устройство магнетрона; 6 – СВЧ-прозрачный чехол; 7 – съемный СВЧ-экран; 8 – заглушка.

Согласно рисунку 9, цилиндрический резонатор имеет кварцевую трубку длиной 200 мм, с внутренним диаметром 8 мм и внешним диаметром 12 мм. Внутри трубки находится аргон при давлении $p_{\text{Ar}} = 0,75$ Торр, и ртуть $p_{\text{Hg}} \approx 0,05$ Торр. Резонатор включает в себя кварцевую трубку, которая пронизывает его ось симметрии. Следует отметить, что внешняя часть этой трубки, выходящая за пределы резонатора, имеет такую же длину. Вокруг верхних и нижних металлических пластин резонатора расположен цилиндр большего диаметра, который охватывает кварцевую трубку.

Источник ТЕМ-волны представлен магнетроном с рабочей частотой 2,45 ГГц и расположен сверху волновода таким образом, что его нижнее сечение находится на верхней пластине цилиндрического резонатора. Кроме того, центральный электрод коаксиала вводится в резонансную полость, а его торец находится посередине между верхней и нижней пластинами резонатора. Кварцевый стержень для подстройки находится в горизонтальной плоскости и вводится в резонатор через боковую стенку.

Таким образом, основные параметры разработанного источника представлены в таблице 2.

Таблица 2 – Параметры источника, использованные при моделировании

Параметр	Физическое значение	Значение
$W_{\text{щ}}$	Ширина всех прорезей	16 мм
Φ	Центральный угол всех металлических пазов	315°
D	Наружный диаметр внутреннего проводника коаксиального излучателя	8 мм
d	Внутренний диаметр внешнего проводника коаксиального излучателя	12 мм
L	Общая длина коаксиального излучателя	200 мм
l_1	Расстояние от центра первой прорези до поверхности короткого замыкания	15 мм

l_2	Расстояние между соседними металлическими центрами с прорезями	18 мм
p_{Ar}	Рабочее давление аргона	0,75 Торр
p_{Hg}	Рабочее давление ртути	0,05 Торр
$P_{вх}$	Входная мощность	687 Вт
ν	Частота микроволн	2,45 ГГц

Фотография источника в рабочем состоянии представлена на рисунке 10.



Рис.10. Фотография газоразрядного источника оптического излучения в рабочем состоянии

4. Заключение

Таким образом, развитие программно-аппаратных комплексов, направленных на визуализацию данных и улучшение представления информации в контексте моделирования низкотемпературной газоразрядной плазмы и связанных с ней физических процессов, остается весьма важным и актуальным аспектом данной области исследований. Программные решения и специализированные инструменты, предназначенные для данного направления, играют ключевую роль в содействии пониманию и совершенствованию различных аспектов газоразрядных явлений.

Рассмотрение проблем создания специализированных распределенных сред для моделирования газового разряда открывает перспективы для более точных и надежных численных расчетов. Это, в свою очередь, может иметь практическое применение в разработке новых технологий, таких как газоразрядные источники оптического излучения.

Использование компьютерной графики для визуализации данных дает исследователям возможность более глубоко погрузиться в процесс моделирования и анализа результатов. Это позволяет выявлять не только общие закономерности, но и детали внутренней структуры и распределения параметров в разрядной среде.

Результаты визуализации модели ртутно-аргоновой плазмы в коаксиальном СВЧ разряде, представленные в данной работе, являются значимым вкладом в понимание данного физического явления. Локальные сечения расчетной области позволили более подробно исследовать внутренние аспекты плазмы, что может быть полезным при разработке новых устройств и источников оптического излучения. На основании проведенного в работе моделирования разработана конструкция коаксиального газоразрядного источника оптического излучения.

Список литературы

1. Гаджиев М.Х., Эмиров Р.М., Муслимов А.Э., Исмаилов М.Г., Каневский В.М. Формирование сверхтвердых покрытий в процессе обработки низкотемпературной

плазмой азота в открытой атмосфере пленок титана / Письма в Журнал технической физики. – 2021. – Т. 47, № 9. – С. 44-47.

2. Ермолаева С.А., Петров О.Ф., Миллер Г.Г., Шагинян И.А., Народицкий Б.С., Сысолятина Е.В., Мухачев А.Я., Morfill G.E., Фортон В.Е., Григорьев А.И., Гинцбург А.Л. Перспективы использования низкотемпературной газовой плазмы как антимикробного агента / Вестник Российской академии медицинских наук. – 2011. – № 10. – С. 15-21.

3. Лазукин А.В., Ермаков А.М., Афанасьева В.А. Разработка генератора низкотемпературной газовой плазмы для медицинского применения и перспектива его использования как эффективного стерилизатора и активатора ранозаживления в полевых и стационарных условиях в медицинской службе армии РФ / Известия Института инженерной физики. – 2021. – № 3(61). – С. 91-93.

4. Масленников О.П., Мильман И.Е., Сафиуллин А.Э., Бондарев А.Е., Низаметдинов Ш.У., Пилюгин В.В. Разработка системы интерактивного визуального анализа многомерных данных / Научная визуализация. 2014. №4. С. 30-49.

5. Бондарев А.Е., Галактионов В.А. Анализ многомерных данных в задачах многопараметрической оптимизации с применением методов визуализации / Научная визуализация. Т.4, № 2, С.1-13, 2012

6. Железнов И.И., Попов О.А. Исследование излучательных и спектральных характеристик источников УФ-излучения на основе коаксиальных СВЧ-разрядов в парах ртути низкого давления // Вестник МЭИ. 2023. № 2. С. 137-143.

7. Калязин Ю.Ф., Кокинов А.М., Мальков М.А.. Математическая модель расчета характеристик ртутно-газового разряда низкого давления // «Светотехника», 2003, №2, С. 2-5.

8. Радциг А.А., Смирнов Б.М. Параметры атомов и атомных ионов, справочник // М.: Энергоатомиздат, 1986.

9. Рохлин Г.Н. Разрядные источники света // М. Энергоатомиздат. 1991. 720с.

10. Р. Рид, Дж. Праусниц, Т. Шервуд. Свойства газов и жидкостей // Л.: Химия, 1982, 592с.

11. Маймистов А.И., Ляшко Е.И. Модифицированная модель Друде-Лоренца, позволяющая учесть топологические характеристики среды // Оптика и спектроскопия. 2019. Т. 127. № 11. С. 804-810.

12. Лебедев Ю.А., Юсупова Е.В. Влияние постоянного поля на приповерхностную плазму сильно неоднородного СВЧ разряда. Физика плазмы. 2012. Т. 38. № 8. С. 677-693.

13. COMSOL 3.5a <http://www.comsol.com>

14. Moustafaev, J. Project Scope Management: A Practical Guide to Requirements for Engineering, Product, Construction, IT and Enterprise Projects (1st ed.). Auerbach Publications. (2014). <https://doi.org/10.1201/b17797>

15. Демидов В.И., Колоколов Н.Б., Кудрявцев А.А. Зондовые методы исследования низкотемпературной плазмы. М. Энергоатомиздат. 1996.

16. Zheleznov I. I., Popov O. A. Electrodeless source of UV radiation based on low pressure microwave mercury discharge // Light & Engineering. 2023. Vol. 31, No. 3. P. 36-42.

Application of Scientific Visualization in Low-Temperature Gas Discharge Plasma Modeling

V.P. Budak¹, I.I. Zheleznov²

National Research University "Moscow Power Engineering Institute"

¹ ORCID: 0000-0003-4750-0160, budakvp@gmail.com

² ORCID: 0009-0004-8875-2991, zheleznov96y@gmail.com

Abstract

This article discusses the importance of developing software and hardware complexes for data visualization and improving methods of presenting them in the modeling of low-temperature gas discharge plasma phenomena and related physical processes. In particular, issues related to creating a specialized distributed environment for solving gas discharge modeling tasks are considered. The use of computer graphics for visualization has allowed for a visual analysis of the obtained data and making necessary adjustments to the modeling process interactively with the data. The paper presents the results of visualizing a model of mercury-argon plasma in a coaxial microwave discharge. The application of local cross-sections of the computational domain for visualization has revealed the internal structure and peculiarities of the distribution of the electric field and electron concentration in the discharge tube. The obtained data served as the basis for creating an experimental prototype of a coaxial gas discharge optical radiation source.

Keywords: Data Visualization, Low-Temperature Plasma Modeling, Gas Discharge Plasma.

References

1. Gadzhiev M.H., Emirov R.M., Muslimov A.E., Ismailov M.G., Kanevsky V.M. Formation of superhard coatings during treatment of titanium films with low-temperature nitrogen plasma in an open atmosphere / Letters to the Journal of Technical Physics. – 2021. – Vol. 47, No. 9. – pp. 44-47.
2. Ermolaeva S.A., Petrov O.F., Miller G.G., Shaginyan I.A., Naroditsky B.S., Sysolyatina E.V., Mukhachev A.Ya., Morfill G.E., Fortov V.E., Grigoriev A.I., Ginzburg A.L. Prospects the use of low-temperature gas plasma as an antimicrobial agent / Bulletin of the Russian Academy of Medical Sciences. – 2011. – No. 10. – pp. 15-21.
3. Lazukin A.V., Ermakov A.M., Afanasyeva V.A. Development of a low-temperature gas plasma generator for medical use and the prospect of its use as an effective sterilizer and activator of wound healing in field and stationary conditions in the medical service of the Russian Army / Izvestiya Institute of Engineering Physics. – 2021. – № 3(61). – Pp. 91-93.
4. Maslennikov O.P., Milman I.E., Safiullin A.E., Bondarev A.E., Nizametdinov Sh.U., Pilyugin V.V. Development of a system of interactive visual analysis of multidimensional data / Scientific visualization. 2014. No. 4. pp. 30-49.
5. Bondarev A.E., Galaktionov V.A. Analysis of multidimensional data in multiparametric optimization problems using visualization methods / Scientific Visualization. Vol.4, No. 2, pp.1-13, 2012
6. Zheleznov I.I., Popov O.A. Investigation of the radiative and spectral characteristics of UV radiation sources based on coaxial microwave discharges in low-pressure mercury vapor // Vestnik of the MPEI. 2023. No. 2. pp. 137-143.

7. Kalyazin Yu.F., Kokinov A.M., Malkov M.A.. Mathematical model for calculating the characteristics of a low-pressure mercury-gas discharge // "Lighting Engineering", 2003, No. 2, pp. 2-5.
8. Radzig A.A., Smirnov B.M. Parameters of atoms and atomic ions, handbook // Moscow: Energoatomizdat, 1986.
9. Rokhlin G.N. Discharge light sources // M. Energoatomizdat. 1991. 720c.
10. R. Reed, J. Prausnitz, T. Sherwood. Properties of gases and liquids // L.: Khimiya, 1982, 592s.
11. Maimistov A.I., Lyashko E.I. Modified Drude-Lorentz model, allowing to take into account the topological characteristics of the medium // Optics and spectroscopy. 2019. Vol. 127. No. 11. pp. 804-810.
12. Lebedev Yu.A., Yusupova E.V. The effect of a constant field on the near-surface plasma of a highly inhomogeneous microwave discharge. Plasma physics. 2012. Vol. 38. No. 8. pp. 677-693.
13. COMSOL 3.5a <http://www.comsol.com>
14. Moustafaev, J. Project Scope Management: A Practical Guide to Requirements for Engineering, Product, Construction, IT and Enterprise Projects (1st ed.). Auerbach Publications. (2014). <https://doi.org/10.1201/b17797>
15. Demidov V.I., Kolokolov N.B., Kudryavtsev A.A. Probe methods of low-temperature plasma research. M. Energoatomizdat. 1996.
16. Zheleznov I. I., Popov O. A. Electrodeless source of UV radiation based on low pressure microwave mercury discharge // Light & Engineering. 2023. Vol. 31, No. 3. P. 36-42.