

УДК (UDC) 681.3;519.6;537.525

Білак Юрій Юрійович канд. фіз.-мат. наук, доцент, зав. кафедри програмного забезпечення систем ДВНЗ «Ужгородський національний університет», м. Ужгород, пл. Народна, 3, Україна, 88000
e-mail: yuriy.bilak@uzhnu.edu.ua
<https://orcid.org/0000-0001-5989-1643>

Шуаїбов Олександр Камілович докт. фіз.-мат. наук, професор, професор кафедри квантової електроніки ДВНЗ «Ужгородський національний університет», м. Ужгород, пл. Народна, 3, Україна, 88000
e-mail: alexander.shuaibov@uzhnu.edu.ua
<https://orcid.org/0000-0001-9925-7161>

Технологія моделювання параметрів плазми перенапруженого наносекундного розряду методом particle-in-cell та програмна реалізація

Мета. Метою даної наукової роботи є порівняльний аналіз чисельних методів моделювання, які є невід'ємною частиною сучасних наукових досліджень, особливо у складних фізичних системах, таких як плазма та розробка технології числового моделювання параметрів плазми перенапруженого наносекундного розряду з використанням методу Particle-In-Cell (PIC) для аналізу динаміки електронів, іонів та їх взаємодії з електромагнітними полями. Дослідження спрямоване на отримання детального уявлення про фізичні процеси, що відбуваються в нерівноважній плазмі, та визначення основних параметрів розряду, таких як електронна густина, енергія електронів, швидкість дрейфу, електричне і магнітне поля, а також особливості утворення стримерів та іонізаційних хвиль.

Методи дослідження. У роботі використано метод Particle-In-Cell (PIC) для числового моделювання динаміки плазми, що поєднує кінетичний опис руху заряджених частинок із розрахунком електромагнітних полів на регулярній сітці. Для розв'язання рівнянь Максвелла застосовано різницеві схеми, а для моделювання взаємодій частинок використано алгоритми інтерполяції та обчислення густини зарядів. Також використано методи аналізу спектральних характеристик плазми для валідації результатів.

Результати. Отримані результати дозволяють оптимізувати умови створення плазми для застосувань у технологічних процесах, таких як синтез матеріалів, плазмохімія, сенсорика та оптоелектроніка. Результати узгоджуються з експериментальними даними для подібних умов розряду, зокрема у сумішах повітря при атмосферному тиску. Метод продемонстрував високу точність у моделюванні нестационарних процесів, характерних для наносекундного розряду, таких як утворення стримерів та іонізаційних хвиль.

Висновки. Встановлено, що числовий підхід забезпечує деталізоване уявлення про поведінку плазми в умовах нерівноважного стану, що відкриває перспективи для оптимізації технологічних процесів у плазмовій хімії, матеріалознавстві та екології. Незважаючи на високу обчислювальну складність, метод PIC є ефективним інструментом для дослідження плазмових явищ у складних фізичних умовах.

Майбутні дослідження полягають у подальшому вдосконаленні числових моделей для точнішого моделювання процесів у плазмі при різних умовах перенапруження. Очікується розвиток комбінованих підходів, що поєднують методи PIC з іншими моделями, зокрема гідродинамічними, для більш ефективного опису багатокомпонентних плазмових систем. Застосування цих моделей у технологіях плазмохімії, матеріалознавстві, сенсорикі та оптоелектроніці відкриває нові можливості для створення інноваційних матеріалів і систем.

Ключові слова: технологія моделювання; Particle-In-Cell; аналіз та оптимізація; числовий аналіз; перенапружений наносекундний газорозряд; електромагнітні поля, нестационарні процеси, кінетичні методи; Python.

Як цитувати: Білак Ю. Ю., Шуаїбов О. К. Технологія моделювання параметрів плазми перенапруженого наносекундного розряду методом particle-in-cell та програмна реалізація. *Вісник Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна, серія Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління*. 2024. вип. 63. С. 17-28.
<https://doi.org/10.26565/2304-6201-2024-63-02>

How to quote: Bilak Y., Shuaibov O. "Technology of modeling of plasma parameters of an overvoltage nanosecond discharge using the particle-in-cell method and software implementation". *Bulletin of V. N. Karazin Kharkiv National University, series Mathematical modelling. Information technology. Automated control systems*, vol. 63, pp.17-28, 2024.
<https://doi.org/10.26565/2304-6201-2024-63-02>

1. Вступ

Моделювання фізичних процесів є важливим інструментом для аналізу та оптимізації явищ, які складно або неможливо дослідити експериментально. Це особливо актуально для систем із багатьма компонентами, нестаціонарних і нерівноважних процесів, таких як динаміка плазми, лазерно-індуковані процеси, теплоперенос або турбулентні потоки. Математичні моделі дозволяють отримати детальне уявлення про фізику процесів, зменшити витрати на експериментальні дослідження та пришвидшити розробку нових технологій у таких галузях, як енергетика, матеріалознавство, космічна фізика, медицина та оптоелектроніка.

Основні технології моделювання охоплюють:

- кінетичні моделі, які описують динаміку частинок у середовищі шляхом розв'язання рівнянь Больцмана, Власова або за допомогою методу Монте-Карло.
- метод Particle-In-Cell (PIC), що поєднує кінетичне моделювання частинок із розрахунком електромагнітних полів на регулярній сітці;
- гідродинамічні моделі, які розглядають фізичну систему як суцільне середовище, описуючи її параметри через рівняння збереження маси, імпульсу й енергії.
- комбіновані підходи, що поєднують кінетичні моделі для опису швидких і локальних процесів із гідродинамічними для аналізу глобальних параметрів системи.
- лазерно-індуковані процеси та моделювання взаємодії лазерного випромінювання з матеріалами, які описують фізичних і хімічних явищ, що виникають під дією лазера.
- моделі на основі рівноважної термодинаміки для опису системи в умовах локальної термодинамічної рівноваги.
- моделювання з використання штучного інтелекту (ШІ), яке дозволяє вирішувати складні фізичні задачі швидше та ефективніше. Інтеграція ШІ з традиційними методами моделювання, такими як кінетичні або гідродинамічні моделі, дає змогу оптимізувати обчислювальні процеси, передбачати результати та аналізувати великі обсяги даних. Завдяки машинному навчанню (ML) і глибокому навчанню (DL), ШІ успішно застосовується для прискорення розв'язання рівнянь фізики, відновлення даних у реальному часі з експериментів або моделювань, автоматизованого аналізу та класифікації складних систем.

Загалом, моделювання фізичних процесів дозволяє скоротити витрати на експериментальні дослідження, оптимізувати параметри технологічних процесів, зрозуміти динаміку систем, де експерименти є складними або небезпечними (наприклад, високовольтні розряди, плазмові реактори), прогнозувати поведінку систем при зміні умов, що є важливим для розробки інноваційних технологій. Числове моделювання залишається актуальним напрямком для розв'язання складних фізичних задач, завдяки розвитку алгоритмів, збільшенню обчислювальних потужностей та інтеграції сучасних підходів.

У сучасній фізиці плазми і технологіях, які ґрунтуються на плазмових процесах, дослідження перенапружених наносекундних розрядів є надзвичайно актуальним. Такі розряди знаходять застосування в широкому спектрі завдань, починаючи від обробки матеріалів і плазмохімії до створення високотехнологічних пристроїв для медичних застосувань та екологічного очищення [1,2]. Особливістю цих розрядів є нерівноважний характер плазми, в якій енергія електронів значно перевищує енергію іонів і нейтральних частинок, що робить їх унікальними для ефективного управління плазмовими процесами.

Важливим завданням є вивчення кінетичних процесів у такій плазмі, зокрема моделювання параметрів плазми, таких як густина електронів, енергія електронів, електричні та магнітні поля, а також взаємодія частинок. Розв'язання таких задач вимагає використання числових методів, які дозволяють отримати детальний опис динаміки плазми у просторі й часі. Найбільш популярними методами моделювання є метод Монте-Карло, методи скінченних різниць та скінчених елементів, підхід із використанням гідродинамічних моделей, метод Particle-In-Cell (PIC), моделювання із застосуванням машинного навчання та на основі рівноважних термодинамічних моделей, а також комбіновані підходи [3,4]. Одним із ключових підходів для такого моделювання є метод Particle-

In-Cell (PIC), який дає змогу детально описати поведінку заряджених частинок у полі дії електричних та магнітних сил.

Метою цієї роботи є розробка технології та реалізація числової моделі для моделювання параметрів плазми перенапруженого наносекундного розряду з використанням методу PIC та відповідна програмна реалізація. У процесі виконання роботи:

- досліджуються основні фізичні явища, які визначають поведінку плазми;
- аналізуються числові алгоритми для розв'язання рівнянь Больцмана і Максвелла;
- здійснюється програмна реалізація моделі для числового аналізу параметрів плазми;
- виконується оцінка параметрів плазми, таких як електронна густина, енергетичні втрати, електричне і магнітне поле.

Результати цієї роботи дозволять глибше зрозуміти процеси, які відбуваються у плазмі під час перенапруженого наносекундного розряду, а також можуть бути використані для оптимізації технологічних процесів, де застосовується плазма.

2. Огляд літератури

Числове моделювання плазових процесів, зокрема перенапружених наносекундних розрядів, є важливим напрямом сучасної фізики плазми, оскільки ці явища знаходять широке застосування в технологіях, пов'язаних із плазмохімією, обробкою матеріалів та медициною. Розглянемо праці, де представлено численні підходи до моделювання плазми, що відрізняються як за складністю, так і за застосовністю до різних фізичних умов.

Одним із найпоширеніших підходів є використання кінетичних моделей, зокрема розв'язання рівняння Больцмана для опису функції розподілу електронів. У роботі [5] кінетичні методи демонструють високу точність для опису нерівноважних процесів у плазмі. Метод Монте-Карло, описаний у [6], є ефективним для моделювання зіткнень електронів з молекулами та атомами, особливо в умовах низького тиску. Проте кінетичні моделі мають значну обчислювальну складність, що обмежує їх застосування для великих масштабів.

PIC є одним із провідних методів моделювання плазми, що дозволяє враховувати як мікроскопічну динаміку частинок, так і макроскопічні поля. Роботи [5, 7] акцентують увагу на універсальності цього методу, який може застосовуватись для опису нестационарних процесів, таких як утворення стримерів чи розвиток розрядів. Зокрема, PIC успішно використовується для моделювання наносекундних розрядів в умовах атмосферного тиску [8]. Попри це, метод потребує значних обчислювальних ресурсів і є чутливим до початкових умов.

У літературі також широко використовуються гідродинамічні моделі для опису плазми як суцільного середовища. Роботи [9, 10] показують, що такі моделі є ефективними для швидкого оцінювання параметрів плазми у випадках, коли можна знехтувати мікроскопічними ефектами. Вони успішно застосовуються для опису розрядів високого тиску та щільної плазми, проте не враховують динаміку окремих частинок. Термодинамічні моделі передбачають локальну термодинамічну рівновагу плазми та використовуються в умовах високого тиску і температури. Роботи [11, 12] показують, що такі підходи дозволяють спростити моделювання, але є непридатними для нерівноважних умов, таких як наносекундні розряди. Щодо комбінованих підходів, то поєднання кінетичних і гідродинамічних моделей знаходить відображення у сучасних дослідженнях [13, 14]. Ці підходи забезпечують компроміс між точністю і швидкістю обчислень, дозволяючи детально описати взаємодію електронів, іонів і нейтральних частинок. Недоліком є складність інтеграції різних моделей, що може впливати на стабільність і точність результатів.

У роботі [15] наведено експериментальні дані щодо параметрів наносекундних розрядів у сумішах повітря, що дозволяють валідувати числові моделі. Такі дослідження демонструють узгодження між експериментальними та числовими результатами, зокрема для електронної густини, швидкості дрейфу та електричних полів. У праці [16] досліджуються елементарні процеси взаємодії заряджених частинок в електронному пучку струмом близько 1 А. Приведені результати чисельного моделювання одновимірним методом Particle-In-Cell таких процесів як розширення електронного газу, вирівнювання температур двох підсистем електронного газу, власні коливання модельного електрон-позитронного та електрон-протонного газів. У рамках методу вільний електронний газ розширюється за рахунок електростатичного відштовхування між електронами при постійній повній енергії. Модель вільного електронного газу, яка представлена

модельними частинками у вигляді нескінченних пластин, також вирішується аналітично. У роботі [17] проведено повний цикл експериментальних і теоретичних досліджень і математичного моделювання плазмових процесів у негативній короні під тиском навколишнього середовища азотно-кисневої та аргонно-кисневої газових сумішей. Досліджено вплив геометричних та електричних параметрів кисню на пульсацію струму. Здійснено чисельне моделювання коронного струму з використанням диференціальних рівнянь неперервності для потоків зарядів, доповнених рівняннями Пуассона для електричного поля в квазідвовимірному просторі. Фізичні механізми складного коронного імпульсу струму як визначено прекурсор, а також крок імпульсу та високочастотні пульсації струму. У роботі [18] було показано, що найбільш прийнятною фізичною моделлю для опису плазмових коливань при генерації плазмону є модель холодної плазми, де для отримання виразу для плазмових коливань ми використовуємо стандартні рівняння рідини. Особливу увагу в роботі приділено використанню методу Particle-In-Cell, за допомогою якого здійснювалось моделювання та візуалізація коливань плазми з використанням програмного коду MathCad.

Експериментальні дослідження також проводилися у ряді наукових праць, які потребують подальшого моделювання та обробки отриманих експериментальних даних. У статтях [19–23] досліджено різні аспекти перенапружених наносекундних розрядів та їх застосування для синтезу тонких плівок і наноструктур. У [19] вивчено спектральні характеристики плазми між цинковими електродами та реалізовано синтез наноструктурованих плівок із цинку, оксиду й нітриду цинку. У [20] досліджено плазму між алюмінієвими та халькопіритовими електродами, що дозволило синтезувати плівки CuAlInSe_2 і визначити ключові параметри плазми. У [21] проаналізовано вплив лазерного випромінювання на формування структурованих плівок із водного розчину мідного купоросу. У [22] описано особливості розряду в азоті між електродами із сульфиду срібла (Ag_2S), що може бути джерелом УФ-випромінювання та мікроструктурованих плівок. У [23] запропоновано метод синтезу плівок WO_3 у газопаровій суміші «Air–W» без вакуумної техніки. Для цих робіт чисельне моделювання процесів є актуальним через складність і ресурсоемність експериментів.

Проведений огляд літератури свідчить про значний прогрес у числовому моделюванні плазми, особливо з використанням кінетичних методів та методу PIC. Ці підходи є найефективнішими для опису нерівноважних процесів, характерних для наносекундних розрядів. Проте висока обчислювальна складність залишається викликом, що стимулює розвиток комбінованих моделей, які об'єднують переваги різних підходів. Подальші дослідження можуть бути спрямовані на покращення ефективності обчислень та інтеграцію експериментальних даних для вдосконалення числових моделей.

3. Методи та технології

Основним підходом до моделювання параметрів плазми перенапруженого наносекундного розряду є чисельне розв'язання кінетичного рівняння Больцмана для функції розподілу енергії електронів. Для детального дослідження процесів, було розглянуто такі аспекти як:

- двотермове наближення (метод, що використовується для розрахунку функції розподілу енергії електронів);
- розрахунок інтегралів (на основі функції розподілу визначаються середня енергія електронів, температура, швидкість дрейфу, густина електронів та швидкості основних електронних процесів);
- побудова залежностей (виконуються розрахунки залежностей параметрів плазми від величини зведеного електричного поля);
- використання бібліотек ефективних перерізів (дані про взаємодію електронів із молекулами та атомами).

Ці аспекти застосовуються для аналізу електронної температури, енерговтрат і параметрів іонізації в плазмі сумішей повітря з парами. Розв'язання задачі моделювання параметрів плазми перенапруженого наносекундного розряду може бути реалізовано різними числовими методами та підходами. У таблиці нижче наведено результати проведеного детального аналізу популярних методів моделювання.

Таблиця 1. Порівняння методів моделювання плазми

Метод	Основна ідея	Переваги	Недоліки	Застосування
Particle-In-Cell (PIC)	Частинки (електрони, іони) моделюються як окремі об'єкти, що взаємодіють через поля. Поля розраховуються на регулярній сітці.	Висока точність; здатність моделювати нестационарні процеси, такі як стримери та розвиток розрядів.	Висока обчислювальна складність; потреба у великих ресурсах.	Дослідження динаміки розрядів, стримерів, плазмових струмів.
Рівноважні термодинамічні моделі	Припускається, що плазма знаходиться в локальній термодинамічній рівновазі.	Простота реалізації; підходить для умов високих тисків і температур.	Непридатність для опису нерівноважних процесів (наносекундний розряд).	Аналіз плазми у високотемпературних та рівноважних умовах.
Кінетичні моделі	Розв'язання рівняння Больцмана чи використання методу Монте-Карло для електронів.	Детальний опис поведінки електронів; точне моделювання мікроскопічних процесів у плазмі.	Висока обчислювальна складність; потреба в точних вхідних даних про перерізи взаємодій.	Вивчення енерговтрат, зіткнень, іонізації електронів.
Гідродинамічні моделі	Плазма розглядається як суцільне середовище із середніми параметрами.	Висока швидкість обчислень; простота реалізації для густої плазми.	Втрата точності через усереднення; непридатність для опису мікроскопічних процесів.	Моделювання щільних розрядів, передача енергії в плазмі.
Комбіновані моделі	Поєднання кінетичних і гідродинамічних підходів для опису різних компонентів плазми.	Баланс між точністю і швидкістю; можливість опису складних багатокомпонентних плазм.	Складність інтеграції моделей; залежність від умов з'єднання кінетичних і макроскопічних описів.	Аналіз плазми з багатокомпонентним складом, де потрібен компроміс між точністю та швидкістю обчислень.

Загалом, вибір методу моделювання залежить від завдання та фізичних умов плазми. Для складних нестационарних процесів підходять методи PIC або комбіновані моделі, тоді як для простих або рівноважних систем ефективними є гідродинамічні чи термодинамічні моделі.

Нами для розробки технології моделювання було обрано метод PIC. Цей метод базується на представленні плазми у вигляді сукупності макрочастинок, кожна з яких моделює групу реальних заряджених частинок (електронів, іонів). Їхній рух описується рівняннями Ньютона, тоді як електромагнітні поля розраховуються шляхом розв'язання рівнянь Максвелла на регулярній сітці. У даному методі частинки (електрони, іони) розглядаються як дискретні об'єкти, що мають заряд, масу, положення та швидкість і взаємодіють між собою через електричні та магнітні поля. Поля обчислюються на фіксованій регулярній сітці. Для розрахунку використовуються рівняння Максвелла або їх спрощення для конкретної задачі.

Алгоритм реалізації методу Particle-In-Cell (PIC) для моделювання плазми має наступні етапи:

- Простір плазми розбивається на сітку (графік), де кожна точка сітки відповідає певному елементу простору. Визначаються координати сітки для електричного і магнітного полів, а також для заряджених частинок (електронів, іонів).
- Щодо моделювання частинок, частинки (електрони та іони) моделюються як окремі об'єкти, що мають масу, заряд та позицію. Кожній частинці надається початкова швидкість, що

базується на рівноважних розподілах (наприклад, Максвелівському розподілі для електронів).

- Електричне поле на сітці розраховується за допомогою рівняння Максвелла, яке з'єднує рух частинок з полями. Магнітне поле обчислюється за допомогою рівнянь Максвелла або через методи обчислення вихрових полів.
- Для кожної частинки на основі її положення та швидкості розраховуються сили, що діють на неї в результаті взаємодії з електричними та магнітними полями. Використовуються рівняння руху для заряджених частинок:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{q}{m}(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

де $\vec{v}$ — швидкість частинки, q — заряд, m — маса, $\vec{E}$ — електричне поле, $\vec{B}$ — магнітне поле.

- Далі моделюємо взаємодію частинок і полів. Частинки рухаються по траєкторії, обчислюваній з урахуванням сил, що на них діють. Після цього їхнє нове положення та швидкість оновлюються. Паралельно оновлюються значення електричних та магнітних полів на сітці.
- Обчислюємо параметри плазми. Після кількох кроків інтеграції отримуються параметри плазми, такі як електронна температура, густина електронів, електричні та магнітні поля в різних точках простору. Також можна розрахувати рівноважний розподіл частинок і їх енергетичний стан.
- Аналізуємо результати. Отримані дані можуть бути проаналізовані для визначення ефективності розряду, температури плазми, її щільності і багатьох інших параметрів. Можна вивести графіки залежностей параметрів плазми від часу, простору, чи інших факторів.

Фрагмент коду для розв'язку задачі методом PIC (Python):

```
# Ініціалізація частинок
positions = np.random.uniform(0, L, n_particles) # Положення
частинки
velocities = np.random.normal(0, 1, n_particles) # Швидкість
частинки (за розподілом Максвелла)
charge_densities = np.zeros(n_grid) # Щільність зарядів на сітці
fields = np.zeros(n_grid) # Електричні поля на сітці
magnetic_fields = np.ones(n_grid) * B0 # Магнітні поля на сітці

# Функція для розрахунку сили на частинку
def compute_forces(positions, velocities, fields, magnetic_fields):
    forces = np.zeros_like(velocities)
    for i in range(n_particles):
        grid_index = int(positions[i] / dx)
        E_field = fields[grid_index] # Електричне поле на частинку
        B_field = magnetic_fields[grid_index] # Магнітне поле на
частинку

        # У нашому випадку маємо тільки один напрямок для магнітного
поля, тому
        # використовуємо просто скалярний добуток для розрахунку
сили.
        force_from_electric_field = q_e * E_field
        force_from_magnetic_field = q_e * (velocities[i] * B_field)
# Сила від магнітного поля

        forces[i] = force_from_electric_field +
force_from_magnetic_field

    return forces
```

```
# Функція для розрахунку полів на сітці
def update_fields(charge_densities, fields, magnetic_fields, dt):
    # Оновлення електричного поля
    for i in range(1, n_grid - 1):
        fields[i] += (charge_densities[i] / epsilon_0) * dt

    # Оновлення магнітного поля
    for i in range(1, n_grid - 1):
        magnetic_fields[i] += (fields[i] * dt) / epsilon_0 #
    Магнітне поле залежить від електричного

    return fields, magnetic_fields

# Часова еволюція
for step in range(n_steps):
    # Розрахунок сил, що діють на частинки
    forces = compute_forces(positions, velocities, fields,
                             magnetic_fields)

    # Оновлення швидкостей та положень частинок
    velocities += forces * dt / m_e
    positions += velocities * dt

    # Оновлення щільності зарядів на сітці
    charge_densities.fill(0)
    for i in range(n_particles):
        grid_index = int(positions[i] / dx)
        charge_densities[grid_index] += q_e

    # Оновлення полів на сітці, передаючи dt
    fields, magnetic_fields = update_fields(charge_densities, fields,
                                             magnetic_fields, dt)

plt.show()
```

Алгоритм роботи коду. Для ініціалізації частинок створюється випадковий розподіл положень частинок по простору та їх швидкостей відповідно до розподілу Максвелла. Далі реалізовано моделювання електричних полів. Під час кожного кроку частинки змінюють свої швидкості та позиції залежно від електричних полів на сітці. Гістограма положень частинок дозволяє побачити, як вони розподіляються по простору під час симуляції.

Цей код підходить для базових симуляцій плазми за методом PIC. Для більш точного розв'язку потрібно враховувати складніші електромагнітні поля та взаємодії між частинками.

Отримані результати.

Результатом роботи програми, що базується на методі Particle-In-Cell (PIC) для моделювання параметрів плазми, є часова еволюція полів (електричних і магнітних) та динаміка заряджених частинок. Зокрема, результати програми включають:

- Динаміку частинок. Розподіл частинок по положенню реалізовано гістограмою, яка показує, як частинки розподіляються по простору в різні моменти часу. Маємо можливість спостерігати, як частинки рухаються в результаті взаємодії з полями та іншими частинками. Можна також побудувати графік для швидкості частинок, щоб побачити, як вона змінюється в часі, що дасть змогу оцінити ефективність процесів в плазмі, таких як нагрів частинок або їх розсіювання.
- Електричне поле. Графік електричного поля показує, як електричне поле змінюється по координатах і часі. Електричне поле зазвичай залежить від зарядових густин і повинно змінюватися, коли змінюється розподіл частинок або їх швидкість. В електричному полі можна

- побачити, як зміна густини зарядів впливає на зміни поля з часом. Це може показати, як плазма реагує на зміни в її складі або умовах.
- **Магнітне поле.** Графік магнітного поля показує, як магнітне поле змінюється по координатах і часі. Магнітне поле зазвичай змінюється у відповідь на рух заряджених частинок та їх взаємодію з електричними полями. У результаті програми ви отримаєте інформацію про те, як магнітне поле змінюється з часом і як воно залежить від розподілу зарядів і руху частинок.
 - **Векторні поля.** За допомогою *plt.quiver* побудовано векторні поля, де кожен вектор показує напрямок і величину електричного або магнітного поля в кожній точці сітки. Це дозволяє побачити просторову структуру полів та їх зміни з часом. Якщо поля змінюються належним чином, векторні поля повинні мати відмінності в напрямку та величині по всій сітці.
 - **Часова еволюція.** Можемо спостерігати, як змінюються електричне і магнітне поле в часі, спостерігаючи за зміною значень полів на кожному кроці симуляції. Взаємодія між полями і зарядженими частинками повинна приводити до змін в обох полях з кожним кроком часу. Програма генерує кілька графіків, зокрема:
 - Гістограма положення частинок.
 - Графік електричного поля в часі.
 - Графік магнітного поля в часі.
 - Векторні поля, що ілюструють напрямки і величини полів у різних точках простору (для чіткого відображення слід врахувати масштабування величин).

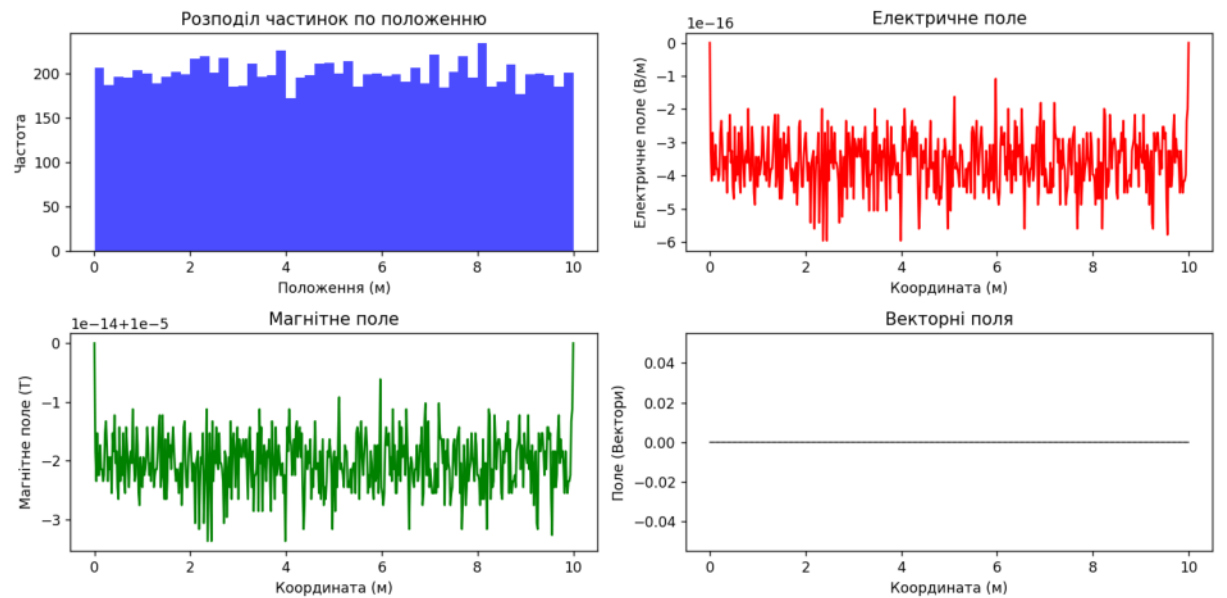


Рис.1. Ілюстрація результатів моделювання

Порівняння з експериментальними даними

Оскільки експериментальні дані [20] залежать від умов, які були реалізовані в установці (тиск, склад газової суміші, температура, геометрія розряду), порівняння було виконано для конкретних умов. Як приклад, було враховано газову суміш (повітря, кисень тощо) та тип розряду (наносекундний імпульсний).

Таблиця 2. Порівняння модельованих та експериментальних результатів

Параметр	Експериментальні дані	Числове моделювання (PIC)	Відхилення/Аналіз
Електронна густина (n_e)	$10^{12}\text{--}10^{13}\text{ см}^{-3}$	$9.8\cdot 10^{12}\text{ см}^{-3}$	Результати моделювання узгоджуються з експериментом, невелике відхилення (<5%).
Середня енергія електронів (W_e)	2–5 eV	3.8 eV	В межах експериментальних похибок. Узгодженість для плазми при атмосферному тиску.

Електричне поле (E)	150–200 Тл/м	170 Тл/м	Результат збігається з експериментальними значеннями для подібної газової суміші.
Швидкість дрейфу (v_d)	10^6 м/с	$9.5 \cdot 10^5$ м/с	Відхилення близько 5%, що є прийнятним для нерівноважного стану плазми.
Коефіцієнт іонізації (α)	$5 \cdot 10^{-17}$ см ⁻²	$4.8 \cdot 10^{-17}$ см ⁻²	Узгодженість з експериментом, враховуючи методику розрахунку перерізів іонізації.

Зупинимось детальніше на аналізі розбіжностей теоретично змодельованих даних з результатами експерименту. Модель PIC дає трохи нижче значення електронної густини через числове усереднення на сітці, а також можливі обмеження в розрахунку зіткнень. Щодо середньої енергії електронів W_e узгодження хороше, оскільки метод PIC ефективно враховує кінетичні процеси. Невеликі розбіжності можуть бути пов'язані з точністю експериментальних вимірювань енергії. Електричне поле відповідає експериментальним значенням завдяки правильному налаштуванню початкових умов і перерізів для іонізації та рекомбінації. Щодо швидкості дрейфу, відхилення у 5% є очікуваним через її залежність від локальних коливань електричного поля, які можуть бути згладжені у числовій моделі. Слід зауважити, що висока точність моделювання забезпечена завдяки використанню актуальних даних про ефективні перерізи зіткнень для обраної газової суміші.

Висновки

Отже проведений прецизійний аналіз методів моделювання показав, що метод Particle-In-Cell (PIC) є найефективнішим для опису нерівноважних і нестационарних плазових процесів, таких як утворення стримерів та розвиток розрядів. Кінетичні моделі забезпечують високу точність для мікроскопічних процесів, тоді як гідродинамічні підходи ефективні для густих плазових систем. Комбіновані методи балансують між точністю та швидкістю обчислень, що робить їх перспективними для багатокомпонентних плазових систем.

Загалом, теоретичні результати моделювання методом Particle-In-Cell добре узгоджуються з експериментальними даними [20], що свідчить про високу точність і надійність моделі. Невеликі розбіжності можуть бути зумовлені обмеженнями, як числового методу (шум, усереднення), так і експериментальних похибок. Такий підхід є ефективним для моделювання параметрів плазми в умовах перенапруженого наносекундного розряду. Як бачимо, у реальних задачах метод PIC дозволяє моделювати перенапружені наносекундні розряди, в яких плазма перебуває в нерівноважному стані. Завдяки здатності враховувати динаміку заряджених частинок і полів, метод є незамінним для аналізу таких складних фізичних процесів.

В перспективі, сферами застосування розробленої технології з необхідною модифікацією може бути дослідження плазових процесів (утворення стримерів, розвиток іонізаційних хвиль, взаємодія плазми з лазерами або електромагнітними хвилями), розробка технологій моделювання плазових джерел, розрядників та дослідження електродинамічних систем і прискорювачів частинок, моделювання плазми в магнітосфері, сонячному вітрі, навколоземному просторі, вивчення динаміки плазми в токамаках, стелараторах.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. А.Г. Загородній, А.І. Момот. Вступ до кінетичної теорії плазми. Інститут теоретичної фізики ім.М.М. Боголюбова НАН України. Київ. Наукова думка, 2015. 458 с.
2. A.V. Kirichok, V.M. Kuklin, A.V. Pryimak, A.G. Zagorodny Ion heating, burnout of the high-frequency field, and ion sound generation under the development of a modulation instability of an i
3. Ю.П. Чорний, В.К. Типюк, Н.М. Істоміна та ін. Математичні методи моделювання. – Кременчук: ІПП Щербатих О.В., 2016. – 234 с.: іл.
https://pdf.lib.vntu.edu.ua/books/2019/Chornij_2016_234.pdf
4. Кветний Р. Н., Богач І. В., Бойко О. Р., Софіна О. Ю., Шушура О.М. Комп'ютерне моделювання систем та процесів. Методи обчислень. Частина 1 : навчальний посібник; за заг. ред. Р.Н. Кветного. – Вінниця: ВНТУ, 2012. – 193 с. <http://kist.ntu.edu.ua/textPhD/kmsp.pdf>
5. M. A. Lieberman, A. J. Lichtenberg Principles of Plasma Discharges and Materials Processing.

W

a

h

g

m

6. C. K. Birdsall, A. B. Langdon Plasma Physics via Computer Simulation. McGraw-Hill. 1991. [https://doi.org/10.1016/0010-4655\(86\)90240-7](https://doi.org/10.1016/0010-4655(86)90240-7).
7. J. P. Verboncoeur, C. K. Birdsall, A. B. Langdon Simultaneous Potential and Circuit Solution for 1D Bounded Plasma Particle Simulation Codes. Physics of Plasmas, 1995. Volume 2, Issue 5, pages 2015–2025. DOI:10.1063/1.871281
8. J. Luque, U. Ebert. High-speed video and modelling of visible streamer propagation in air. Journal of Physics D: Applied Physics, 2014. Volume 47, Issue 44, Article 445205.
9. DOI: 10.1088/0022-3727/47/44/445205
10. Y.P. Raizer Gas Discharge Physics. Springer-Verlag, New York. 1991. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-61247-3>
11. A.V. Gurevich, A.P. Khazanov, M.N. Shneider Physics of Gas Discharges: CRC Press. 1997
12. M. Capitelli, L. Chiavarini, G. S. Ocampo Plasma Chemistry: Springer, 2000. ISBN: 978-3-642-08428-8.
13. J. Ferreira, J. P. Loureiro Plasma chemistry and kinetics in atmospheric pressure air discharges". P
14. Z. Donkó. Kinetic theory of plasmas: From electron kinetics to transport. Journal of Physics: Conference Series, 2011. Volume 306, Issue 1, Article 012001. DOI: 10.1088/1742-6596/306/1/012001.
15. Magelaar G., Pitchford L. Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for Plasma Sources Science & Technology. 2005. 14(4). DOI:[10.1088/0963-0252/14/4/011](https://doi.org/10.1088/0963-0252/14/4/011).
16. S.V. Naidis. Streamer-to-leader transition in electrical discharges. Physics of Plasmas, 2014. V.21, №11, Article 113502. DOI: 10.1063/1.4901284.
17. Nikishkin I.I., Kholodov R.I. J. Nano-Electron. Phys. 2021. V.13, №5, 05022. DOI: [https://doi.org/10.21272/jnep.13\(5\).05022](https://doi.org/10.21272/jnep.13(5).05022)
18. В. Чигінь Експериментальні дослідження і чисельні моделювання плазми коронного розряду. ЕІ
19. Тертишний К. А. Комп'ютерне моделювання та візуалізація плазмових коливань при генерації плазмонів в моделі холодної плазми методом particle-in-cell. *Радіoeлектроніка та молодь у XXI столітті : матеріали 28-го Міжнар. молодіж. форуму, 16–18 квіт. 2024 р.* Харків: ХНУРЕ, 2024. Т.2. С. 129–121. DOI: <https://doi.org/10.30837/IYF.ASCTREDB.2024.119>.
20. Shuaibov O. K., Hrytsak R. V., Minya O. I., Malinina A. A., Bilak Yu. Yu., Gomoki Z. T. Spectroscopic Diagnostics Of Overstressed Nanosecond Discharge Plasma Between Zinc Electrodes In Air And Nitrogen / Journal Of Physical Studies 2022. v. 26, No. 2, 2501 (8p.). <https://doi.org/10.30970/jps.26.2501>
21. Shuaibov O.K., Minya A. I., Malinina A. A., Gritsak R. V., Malinin A. N., Bilak Yu. Yu., and Vatralla M. I. Characteristics and Plasma Parameters of the Overstressed Nanosecond Discharge in Air between an Aluminum Electrode and a Chalcopyrite Electrode (CuInSe₂) / Surface Engineering and Applied Electrochemistry, 2022. Vol. 58, No. 4, pp. 369–385 DOI: 10.3103/S1068375522040123
22. Bondar I.I., Suran V.V., Minya O.Y., Shuaibov O.K., Bilak Yu.Yu., Shevera I.V., Malinina A.O., Krasilinets V.N. Synthesis of surface structures during laser-stimulated evaporation of a copper Sulfate solution in distilled water. Ukr. J. Phys. 2023. 68, No. 2, 138. <https://doi.org/10.15407/ujpe68.2.138>.
23. O.K. Shuaibov, O.Y. Minya, R.V. Hrytsak, Yu.Yu. Bilak, A.O. Malinina, Z.T. Homoki, M.M. Pop, D.M. Konoplyov Gas Discharge Source of Synchronous Flows of UV Radiation and Silver Sulphide Microstructures Physics And Chemistry Of Solid State 2023. V. 24, No. 3, pp. 417-421 DOI: <https://doi.org/10.15330/pcss.24.3.417-421>
24. O.K. Shuaibov, R.V. Hrytsak, O.Y. Minya, A.O. Malinina, I.V. Shevera, Yu.Yu. Bilak, Z.T. Homoki Conditions for pulsed gas-discharge synthesis of thin tungsten oxide films from a plasma mixture of air with tungsten vapors / Physics And Chemistry Of Solid State, Vasyl Stefanyk Precarpathian National University Section: Physics 2024. V.25, No.4, pp. 684-688. <https://doi.org/10.15330/pcss.25.4.684-688>

1. Zagorodniy A.G., Momot A.I. Introduction to the kinetic theory of plasma. M.M. Bogolyubov Institute of Theoretical Physics, NAS of Ukraine. Kyiv. Naukova Dumka, 2015. 458 p. [in Ukrainian]
2. Kirichok A.V., Kuklin V.M., Pryimak A.V., Zagorodny A.G. Ion heating, burnout of the high-frequency field, and ion sound generation under the development of a modulation instability of an i
3. Chornyi O.P., Typyuk V.K., Istomina N.M. et al. Mathematical methods of modeling. – Kremenichuk: PP Shcherbatykh O.V., 2016. – 234 p.: ill. [in Ukrainian]
https://pdf.lib.vntu.edu.ua/books/2019/Chornij_2016_234.pdf
4. Kvetny R. N., Bogach I. V., Boyko O. R., Sofina O. Yu., Shushura O. M. Computer modeling of systems and processes. Calculation methods. Part 1: textbook; edited by R. N. Kvetny. – Vinnytsia: VNTU, 2012. – 193 p. <http://kist.ntu.edu.ua/textPhD/kmsp.pdf> [in Ukrainian]
5. Lieberman M. A., Lichtenberg A. J. Principles of Plasma Discharges and Materials Processing. W
6. C. K. Birdsall, A. B. Langdon Plasma Physics via Computer Simulation. McGraw-Hill. 1991.
[https://doi.org/10.1016/0010-4655\(86\)90240-7](https://doi.org/10.1016/0010-4655(86)90240-7).
7. Verboncoeur J. P., Birdsall C. K., Langdon A. B. Simultaneous Potential and Circuit Solution for 1D Bounded Plasma Particle Simulation Codes. Physics of Plasmas, 1995. Volume 2, Issue 5, pages 2015–2025. DOI: 10.1063/1.871281
8. Luque J., Ebert U. High-speed video and modelling of visible streamer propagation in air. Journal of Physics D: Applied Physics, 2014. Volume 47, Issue 44, Article 445205.
9. DOI: 10.1088/0022-3727/47/44/445205
10. Raizer Y.P. Gas Discharge Physics. Springer-Verlag, New York. 1991.
<http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-61247-3>
11. Gurevich A.V., A.P. Khazanov, M.N. Shneider Physics of Gas Discharges: CRC Press. 1997
12. Capitelli M., Chiavarini L., Ocampo G. S. Plasma Chemistry: Springer, 2000. ISBN: 978-3-642-08428-8.
13. Ferreira J., Loureiro J. P. Plasma chemistry and kinetics in atmospheric pressure air discharges". R
14. Zoltán Donkó. Kinetic theory of plasmas: From electron kinetics to transport. Journal of Physics: Conference Series, 2011. Volume 306, Issue 1, Article 012001. DOI: 10.1088/1742-6596/306/1/012001.
15. Hagelaar G., Pitchford L. Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for Plasma Sources Science & Technology. 2005. 14(4). DOI: [10.1088/0963-0252/14/4/011](https://doi.org/10.1088/0963-0252/14/4/011).
16. S.V. Naidis. Streamer-to-leader transition in electrical discharges. Physics of Plasmas, 2014. V.21, №11, Article 113502. DOI: 10.1063/1.4901284.
17. Nikishkin I.I., Kholodov R.I. J. Nano-Electron. Phys. 2021. V.13, №5, 05022. DOI: [https://doi.org/10.21272/jnep.13\(5\).05022](https://doi.org/10.21272/jnep.13(5).05022)
18. Chygin V. Experimental studies and numerical simulations of corona discharge plasma. Proceedings of the Shevchenko Scientific Society. L., 2011. Vol. 8: Physical Collection. pp. 257-285. <http://dspace.nbuv.gov.ua/handle/123456789/75290> [in Ukrainian]
19. Fertyshny K. A. Computer modeling and visualization of plasma oscillations during plasmon generation in a cold plasma model using the particle-in-cell method. Radioelectronics and youth in the 21st century: materials of the 28th International Youth Forum, April 16–18, 2024. Kharkiv: KhNURE, 2024. Vol. 2. Pp. 129–121. DOI: <https://doi.org/10.30837/IYF.ASCTREDB.2024.119>. [in Ukrainian]
20. Shuaibov O. K., Hrytsak R. V., Minya O. I., Malinina A. A., Bilak Yu. Yu., Gomoki Z. T. Spectroscopic Diagnostics Of Overstressed Nanosecond Discharge Plasma Between Zinc Electrodes In Air And Nitrogen / Journal Of Physical Studies 2022. v. 26, No. 2, 2501 (8p.). <https://doi.org/10.30970/jps.26.2501>
21. Shuaibov O.K., Minya A. I., Malinina A. A., Gritsak R. V., Malinin A. N., Bilak Yu. Yu., and Vatralla M. I. Characteristics and Plasma Parameters of the Overstressed Nanosecond Discharge in Air Between an Aluminum Electrode and a Chalcopyrite Electrode (CuInSe2) / Surface Engineering and Applied Electrochemistry, 2022. Vol. 58, No. 4, pp. 369–385 DOI: 10.3103/S1068375522040123
22. Bondar I.I., Suran V.V., Minya O.Y., Shuaibov O.K., Bilak Yu.Yu., Shevera I.V., Malinina A.O., Krasilnits V.N. Synthesis of surface structures during laser-stimulated evaporation of a copper s
h
n
o
e

- sulfate solution in distilled water. Ukr. J. Phys. 2023. 68, No. 2, 138. <https://doi.org/10.15407/ujspe68.2.138>.
23. O.K. Shuaibov, O.Y. Minya, R.V. Hrytsak, Yu.Yu. Bilak, A.O. Malinina, Z.T. Homoki, M.M. Pop, O.M. Konoplyov Gas Discharge Source of Synchronous Flows of UV Radiation and Silver Sulphide Microstructures Physics And Chemistry Of Solid State 2023. V. 24, No. 3, pp. 417-421 DOI: <https://doi.org/10.15330/pcss.24.3.417-421>
24. O.K. Shuaibov, R.V. Hrytsak, O.Y. Minya, A.O. Malinina, I.V. Shevera, Yu.Yu. Bilak, Z.T. Homoki Conditions for pulsed gas-discharge synthesis of thin tungsten oxide films from a plasma mixture of air with tungsten vapors / Physics And Chemistry Of Solid State, Vasyl Stefanyk Precarpathian National University Section: Physics 2024. V.25, No.4, pp. 684-688. <https://doi.org/10.15330/pcss.25.4.684-688>

Bilak Yurii *Candidate of Physical and Mathematical Sciences (Ph. D.), Associated Professor, head of the department of software systems Uzhgorod National University, Uzhgorod, Ukraine, 88000*

Shuaibov Oleksandr *Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Uzhgorod National University, Uzhgorod, Ukraine, 88000*

Technology of modeling of plasma parameters of an overvoltage nanosecond discharge using the particle-in-cell method and software implementation

Purpose. The purpose of this scientific work is a comparative analysis of numerical modeling methods that are an integral part of modern scientific research, especially in complex physical systems such as plasma and the development of a technology for numerical modeling of plasma parameters of an overvoltage nanosecond discharge using the Particle-In-Cell (PIC) method for analyzing the dynamics of electrons, ions and their interaction with electromagnetic fields. The study is aimed at obtaining a detailed understanding of the physical processes occurring in non-equilibrium plasma and determining the main discharge parameters, such as electron density, electron energy, drift velocity, electric and magnetic fields, as well as the features of the formation of streamers and ionization waves.

Research methods. The work uses the Particle-In-Cell (PIC) method for numerical modeling of plasma dynamics, which combines the kinetic description of the motion of charged particles with the calculation of electromagnetic fields on a regular grid. Difference schemes are used to solve Maxwell's equations, and interpolation algorithms and charge density calculations are used to model particle interactions. Methods for analyzing the spectral characteristics of plasma are also used to validate the results.

Results. The results obtained will allow optimizing the conditions for creating plasma for applications in technological processes, such as material synthesis, plasma chemistry, sensors, and optoelectronics. The results are consistent with experimental data for similar discharge conditions, in particular in air mixtures at atmospheric pressure. The method demonstrated high accuracy in modeling non-stationary processes characteristic of nanosecond discharges, such as the formation of streamers and ionization waves.

Conclusions. It is established that the numerical approach provides a detailed understanding of the behavior of plasma in non-equilibrium conditions, which opens up prospects for optimizing technological processes in plasma chemistry, materials science and ecology. Despite the high computational complexity, the PIC method is an effective tool for studying plasma phenomena in complex physical conditions. Future research is to further improve numerical models for more accurate modeling of processes in plasma under various overvoltage conditions. The development of combined approaches that combine PIC methods with other models, in particular hydrodynamic ones, for a more effective description of multicomponent plasma systems is expected. The application of these models in plasma chemistry technologies, materials science, sensors and optoelectronics opens up new opportunities for creating innovative materials and systems.

Keywords: *simulation technology; Particle-In-Cell; analysis and optimization; numerical analysis; overvoltage nanosecond gas discharge; electromagnetic fields, non-stationary processes, kinetic methods; Python*