

АЛГОРИТМ ВЫЧИСЛЕНИЯ ТОКА И ФОРМА ЯДРА ЧАСТИЦЫ В МЕТОДЕ ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ

В. А. Вшивков, Е. А. Генрих

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.688

В работе рассматривается вопрос зависимости точности численного решения методом частиц в ячейках от формы модельных частиц и алгоритма расчета токов на примере решения задачи взаимодействия электронного пучка с плазмой. Реализовано несколько алгоритмов вычисления токов и несколько разных форм ядра модельных частиц.

Ключевые слова: уравнение Власова, уравнения Максвелла, метод частиц-в-ячейках, FDTD-схема, сетка Yee.

Введение

Метод частиц в ячейках, зарекомендовавший себя как удобный и простой инструмент для моделирования сложных нелинейных процессов, широко применяется при решении задач физики плазмы. Но численные шумы, являющиеся неотъемлемой частью метода частиц, способны приводить к развитию нефизических неустойчивостей, подавляющих физические процессы. Один из возможных путей решения данной проблемы — увеличение количества частиц. С развитием параллельных компьютерных технологий этот вариант становится более доступным. Но остается ряд задач, проблему шумов в которых сложно решить одним лишь увеличением вычислительных мощностей. Сюда относится в том числе и задача плазменно-пучкового взаимодействия в кинетической постановке, представляющая интерес для широкого круга приложений. Второй путь решения проблемы шумов — использование ядер частиц повышенной гладкости, схем более высокого порядка точности, использование методов адаптивного изменения количества и масс частиц и т. д. Это усложняет алгоритм, лишает метод частиц ряда его преимуществ и не всегда дает ощутимый результат. Поэтому актуальным является вопрос выбора оптимальных численных алгоритмов при решении конкретной задачи.

1 Основные уравнения

Бесстолкновительная высокотемпературная плазма описывается кинетическим уравнением Власова для функции распределения частиц и системой уравнений Максвелла для полей [1]:

$$\frac{\partial f_{i,e}}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_{i,e}}{\partial \mathbf{r}} + q_{i,e}(\mathbf{E} + [\mathbf{v}, \mathbf{B}]) \frac{\partial f_{i,e}}{\partial \mathbf{v}} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \text{rot } \mathbf{B} - \mathbf{j}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\text{rot } \mathbf{E}, \quad (3)$$

$$\text{div } \mathbf{E} = \rho, \quad (4)$$

$$\text{div } \mathbf{B} = 0. \quad (5)$$

Индексами i и e помечены величины, относящиеся к ионам и электронам; $q_e = -1$, $q_i = m_e/m_i$; $f_{i,e}(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ — функция распределения частиц; $m_{i,e}$, $\mathbf{p}_{i,e}$, $\mathbf{r}_{i,e}$ — масса, импульс, положение иона или электрона; \mathbf{E} , \mathbf{B} — напряженности электрического и магнитного полей. Для перехода к безразмерному виду в качестве единиц использовались следующие базовые величины: скорость света $c = 3 \cdot 10^{10}$ см/с; масса электрона $m_e = 9,1 \cdot 10^{-28}$ г; плотность плазмы $n_0 = 10^{14}$ см $^{-3}$ время $t = \omega_{pe}^{-1}$, где плазменная электронная частота $\omega_{pe} = 5,6 \cdot 10^{11}$ с $^{-1}$.

2 Используемые численные методы

Для решения системы уравнений (1)–(5) используем классическую схему метода частиц в ячейках для уравнения Власова в сочетании с FDTD-схемой решения уравнений Максвелла на сетке Yee [3]–[4]. Плазма представляется набором модельных частиц, которые имеют конечные размеры. Форма частицы задается функцией ядра $R(x)$. Наиболее часто используют модельные частицы в виде сплайнов. Сплайн 1-го порядка или линейная интерполяция дает частицу формы PIC

$$R(x) = \begin{cases} \frac{1}{h} \left(1 - \frac{|x|}{h}\right), & |x| \leq h, \\ 0, & |x| > h. \end{cases} \quad (6)$$

При использовании такой функции ядра частица раздает свои характеристики, такие как масса и заряд, в два соседних узла. Сплайн второго порядка — параболическое ядро частицы (Parab). Здесь задействовано уже три узла сетки. Также возможно использовать и другие симметричные (а в некоторых случаях и несимметричные) функции с конечным носителем. В общем виде в трехмерном случае симметричные ядра представляются в виде $R(x, y, z) = R(x)R(y)R(z)$.

Траектории движения частиц являются характеристиками уравнения Власова

$$\frac{d\mathbf{p}_{i,e}}{dt} = q_{i,e}(\mathbf{E} + [\mathbf{v}, \mathbf{B}]), \quad \frac{d\mathbf{r}_{i,e}}{dt} = \mathbf{v}_{i,e}, \quad \mathbf{p}_{i,e} = \frac{\mathbf{v}_{i,e}}{\sqrt{1 - \mathbf{v}_{i,e}^2}}.$$

Для решения данной системы используется схема с перешагиванием

$$\frac{\mathbf{p}_\alpha^{m+1/2} - \mathbf{p}_\alpha^{m-1/2}}{\tau} = q_{i,e} \left(\mathbf{E}^m + \left[\frac{\mathbf{v}_\alpha^{m+1/2} + \mathbf{v}_\alpha^{m-1/2}}{2}, \mathbf{B}^m \right] \right),$$

$$\frac{\mathbf{r}_\alpha^{m+1} - \mathbf{r}_\alpha^m}{\tau} = \mathbf{v}_\alpha^{m+1/2}.$$

Здесь α — номер частицы.

Компоненты электрического и магнитного полей сдвинуты друг относительно друга на полшага и в трехмерной постановке задаются в следующих узлах

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^{m+1/2} &= (B_{i+1/2,j,l}^1, B_{i,j+1/2,l}^2, B_{i,j,l+1/2}^3)^{m+1/2}, \\ \mathbf{E}^m &= (E_{i,j+1/2,l+1/2}^1, E_{i+1/2,j,l+1/2}^2, E_{i+1/2,j+1/2,l}^3)^m, \\ \mathbf{j}^{m+1/2} &= (j_{i,j+1/2,l+1/2}^1, j_{i+1/2,j,l+1/2}^2, j_{i+1/2,j+1/2,l}^3)^{m+1/2}, \\ \rho^m &= \rho_{i+1/2,j+1/2,l+1/2}^m. \end{aligned}$$

Плотность заряда вычисляется по положениям частиц $\mathbf{r}_\alpha = (x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha)$

$$\rho_{i+1/2,j+1/2,l+1/2}^m = \sum_{\alpha} q_{\alpha} R(x_{i+1/2} - x_{\alpha}) R(y_{j+1/2} - y_{\alpha}) R(z_{l+1/2} - z_{\alpha}). \quad (7)$$

Разностные операторы rot_h и div_h на такой сетке имеют следующий вид (в индексах опустим $1/2$)

$$\begin{aligned}\text{rot}_h \mathbf{H} &= \left(\frac{H_{i,j,l}^3 - H_{i,j-1,l}^3}{h_y} - \frac{H_{i,j,l}^2 - H_{i,j,l-1}^2}{h_z}, \frac{H_{i,j,l}^1 - H_{i,j,l-1}^1}{h_z} - \frac{H_{i,j,l}^3 - H_{i-1,j,l}^3}{h_x}, \right. \\ &\quad \left. \frac{H_{i,j,l}^2 - H_{i-1,j,l}^2}{h_x} - \frac{H_{i,j,l}^1 - H_{i,j-1,l}^1}{h_y} \right), \\ \text{div}_h \mathbf{H} &= \frac{H_{i+1,j,l}^1 - H_{i,j-1,l}^1}{h_x} + \frac{H_{i,j+1,l}^2 - H_{i,j,l}^2}{h_y} + \frac{H_{i,j,l+1}^3 - H_{i,j,l}^3}{h_z}.\end{aligned}$$

FDTD-схема для уравнений Максвелла на сетке Yee имеет следующий вид

$$\begin{aligned}\frac{\mathbf{B}^{m+1/2} - \mathbf{B}^{m-1/2}}{\tau} &= -\text{rot}_h \mathbf{E}^m, \\ \frac{\mathbf{E}^{m+1} - \mathbf{E}^m}{\tau} &= \text{rot}_h \mathbf{B}^{m+1/2} - \mathbf{j}^{m+1/2}.\end{aligned}\tag{8}$$

Эта схема имеет порядок аппроксимации $O(\tau^2 + h^2)$.

3 Алгоритмы вычисления тока

В описанной схеме численно решаются только два уравнения из полной системы уравнений Максвелла. Известно, что если в начальный момент времени $\text{div}_h \mathbf{B}^0 = 0$, а токи вычисляются таким образом, что выполнено уравнение неразрывности

$$\frac{\rho^{m+1} - \rho^m}{\tau} + \text{div}_h \mathbf{j}^{m+1/2} = 0,\tag{9}$$

то разностные аналоги уравнений (4) и (5) выполняются в описанной схеме автоматически. Для того, чтобы удовлетворить этим условиям, необходимо либо токи вычислять согласованно, либо следить за накапливающейся ошибкой и вносить корректировки. Методы с корректировками в данной работе не рассматриваются. Рассмотрим наиболее часто используемые методы вычисления тока.

- Первым исторически возник самый простой в реализации алгоритм вычисления тока — **суммирование**. Здесь $\mathbf{j}_i^m = \sum_{\alpha} q_{\alpha} R(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{\alpha})$, i — номер узла сетки, α — номер частицы. Он не является согласованным, уравнение неразрывности не выполняется автоматически.

Следующие алгоритмы основаны на идее вычисления тока по плотности из уравнения неразрывности.

- **Схема Виласенора — Бунемана** [5] — траектория частицы за шаг по времени считается прямой линией, которая разбивается границами ячеек. Считаются вклады в ток от каждого отрезка траектории. Алгоритм сложный, содержит операторы “if”, рассматривать его не будем.
- **Схема Зигзаг** [6]–[7] — траектория частицы разбивается на части границами ячейки. Считается, что траектория частицы — ломаная линия, проходящая из начального положения частицы в конечном через узлы сетки. В литературе выписаны явным образом формулы для вычисления компонент тока в двумерной и трехмерной постановке для частицы с формой ядра РС. Недостаток метода — при желании использовать другую форму частицы, необходимо выводить формулы для нового ядра.
- **Схема Есиркепова** [8] — в двумерной постановке частица как бы разбивается на две части, которые двигаются по x и y каждая. Т.к. каждая частица двигается только по одному направлению, вклад в ток считать легко. Основное преимущество этого метода заключается в том, что его легко адаптировать для ядер модельных частиц произвольной формы. Недостаток — по времени он более затратен, чем схема зигзаг, где формулы выписаны явным образом.

Схема Есиркепова с модельной частицей в форме РС дает тот же результат, что и Схема зигзаг с РС-ядром. Поэтому в тестовых расчетах Схема зигзаг не представлена отдельно. Проводится сравнение Схемы Изигрепова с РС-ядром, параболическим ядром и суммирование с РС и параболическим ядрами.

4 Результаты расчетов

В качестве теста рассматривается развитие плазменно-пучковой неустойчивости в трехмерной постановке. Расчетная область $x \in [0, L]$, $y, z \in [0, L_\perp]$. В начальный момент времени область заполнена водородной плазмой и электронами пучка. Частицы распределены по области равномерно, начальная средняя скорость пучка направлена по x и равна $v_0 = 0.2$. Задаются n_b — плотности пучка, $n_e = 1 - n_b$ — плотность электронов плазмы, температура пучка T_b и электронов плазмы T_e ; температура ионов нулевая $T_i = 0$. Начальное распределение частиц по скоростям максвелловское с плотностью распределения

$$f(v) = \frac{1}{\Delta v \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(v - v_0)^2}{2\Delta v^2}\right).$$

Δv — разброс частиц по скоростям ($T_b = \Delta v^2$), v_0 — средняя скорость пучка. Средняя скорость ионов и электронов фона нулевая. Граничные условия по всем направлениям для всех функций периодические.

В расчетах моделируется развитие одной отдельно взятой неустойчивой моды в гидродинамическом режиме развития неустойчивости ($(k\Delta v \ll \gamma)$). Длина области в направлении x выбрана равной одной длине рассматриваемой плазменной волны, $L_y = L_z = L_\perp = 4h_x$. В область большого инкремента попадает только основная мода с $k_x = 2\pi/L$, $k_y = k_z = 0$. Эта волна и характеризующий ее инкремент γ и воспроизводятся в расчетах.

Физические параметры модели: отношение плотности пучка к плотности плазмы $n_b/n_0 = 2 \cdot 10^{-3}$, разброс электронов пучка по скоростям $\Delta v/v_0 = 0.035$, длина области $L = 1.2566$. При заданных параметрах величина аналитического значения инкремента на линейной стадии развития неустойчивости $\gamma = 0.0722$ [9]. Параметры численной модели: сетка по пространству $50 \times 4 \times 4$, шаг по времени $\tau = 0.01$. lp число частиц в одной ячейке.

Обозначим sum_PIC и sum_Parab — Схема суммирования с соответствующими ядрами, j_PIC и j_Parab — Схема Есиркепова с соответствующими ядрами. Как показали расчеты при использовании Схемы суммирования (с числом модельных частиц $lp = 4 \dots 40$) величина ошибки выполнения уравнения неразрывности в норме \mathbf{L}_2 за все время расчета имеет порядок $\left\| \frac{\rho^{m+1} - \rho^m}{\tau} + \text{div}_h \mathbf{j}^{m+1/2} \right\|_2 \sim 10^{15}$, в норме $\mathbf{L}_{max} \sim 10^{12}$, что в наших расчетах считается машинным нулем. Таким образом уровень ошибки как для схем с «выполнением уравнения неразрывности», так и для суммирования — на уровне счетной погрешности.

На рис. 1 показан темп роста энергии электрического поля и значение инкремента γ для $lp = 40$. Нас интересует только линейная стадия развития неустойчивости и значение максимума численного инкремента на ней. Численный инкремент получен по энергии электрического поля (W). На линейной стадии она нарастает по экспоненте, $W \propto e^{2\gamma t}$. Соответственно численный инкремент неустойчивости $\gamma = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \ln(W)$. На рисунке пунктирной линией показано аналитическое значение инкремента на линейной стадии развития неустойчивости. Видно, что счетный инкремент вначале не совпадает с аналитическим. Это связано с эффектом саморазогрева модельной плазмы. Далее счетный инкремент достигает величины близкой к аналитическому значению. После неустойчивость выходит из линейного режима, наступает стадия насыщения неустойчивости и инкремент, соответственно, уже не совпадает с инкрементом линейной стадии. Как было показано ранее в [10], уровень саморазогрева уменьшается с увеличением числа частиц и линейный инкремент все больше сходится к аналитическому. Там же освещены вопросы сходимости и достаточного количества частиц.

Из рисунка видно, что Схема суммирования с PIC-ядром дает значение инкремента схожее со Схемой Есиркепова с более сложным параболическим ядром. При этом график, полученный по Схеме суммирования более гладкий. Хуже всего показала себя схема Есиркепова с PIC-ядром. Использование более гладких ядер для каждого из методов позволяет получать лучший результат. Таким образом можно заключить, что использование более сложного метода вычисления тока не дает преимуществ. Для получения большей точности в нашей задаче достаточно использовать для вычисления тока суммирование с более гладким ядром.

Заключение

Сравнение результатов, полученных с использованием Схемы суммирования и Схемы Есиркепова (с PIC и параболическим ядром) показало, что Схема суммирования с ядром низшего порядка дает такой же результат, как и Схема Есиркепова с ядром более высокого порядка. При этом Схема суммирования проста

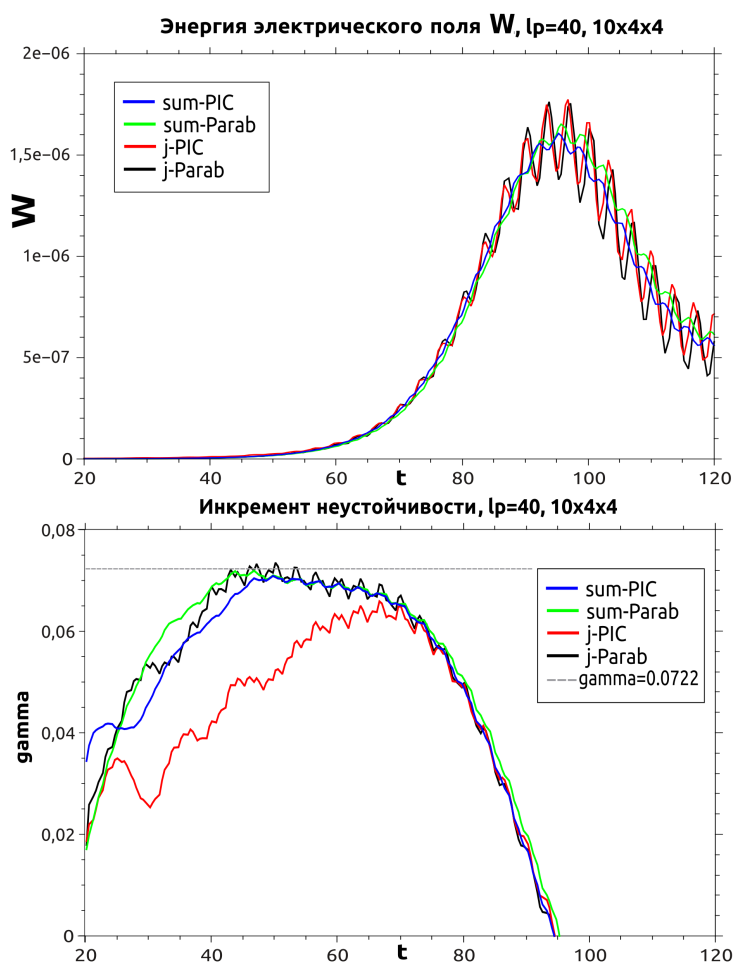


Рис. 1: Энергия электрического поля и инкремент пучковой неустойчивости в зависимости от времени. Сетка $50 \times 4 \times 4$, $lp=40$.

в реализации, легко адаптируется под любую форму ядра частицы, экономит время вычислений, и на нашей задаче она с хорошей точностью удовлетворяет уравнению неразрывности. Таким образом нет необходимости усложнять алгоритм вычисления тока, достаточно использовать более простой метод и контролировать ошибку вычисления уравнения неразрывности.

Список литературы

- [1] Кролл Н., Трайвелпис А. Основы физики плазмы. М.: Мир. 1975.
- [2] Григорьев Ю.Н., Вшивков В.А. Численные методы "частицы-в-ячейках". Новосибирск, Наука. 2000.
- [3] Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир. 1987.
- [4] Kane Yee Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. IEEE Transactions on Antennas and Propagation. 1966. V. 14. iss. 3. P. 302–307.
- [5] J.Villasenor, O.Buneman Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solver. // Computer Physics Communications 69 (1992) 306–316
- [6] Вшивков В.А., Вшивков К.В., Дудникова Г.И. Алгоритмы решения задачи взаимодействия лазерного импульса с плазмой // Вычислительные технологии. 2001. Т. 6, № 2. С. 47–63.

- [7] Umeda T., Omura Y., Tominaga T., Matsumoto H. A new charge conservation method in electromagnetic particle-in-cell simulations. // Computer Physics Communications. 2003. V. 156. P. 73–85.
- [8] Esirkepov T.Zh. Exact charge conservation scheme for Particle-in-Cell simulations with an arbitrary form-factor. // Computer Physics Communications. 2001. V. 135. Iss. 2. P. 144–153.
- [9] Лотов К.В., Тимофеев И.В. Переходный режим одномерной двухпотоковой неустойчивости // Вестник НГУ. Серия: Физика. 2008. Т. 3, вып. 1. С. 62–65.
- [10] Lotov K.V., Timofeev I.V., Mesyats E.A., Snytnikov A.V., Vshivkov V.A. Note on quantitatively correct simulations of the kinetic beam-plasma instability // Physics of Plasmas, AIP Publishing LLC 22, 024502. 2015.

*Вшивков Виталий Андреевич — д.ф.-м.н., зав. лабораторией Института
вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: vsh@ssd.sscs.ru;*

*Генрих Екатерина Александровна — к.ф.-м.н., научный сотрудник Института вычислительной
математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: mesyats@gmail.com.*

Дата поступления — 31 мая 2017 г.