ЧИСЛЕННАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ПОЛЕВОГО ОПИСАНИЯ В ДИСКРЕТНОЙ ДАРВИНСКОЙ МОДЕЛИ С НЕЯВНОЙ СХЕМОЙ РАСЧЕТА ДИНАМИКИ ЧАСТИЦ

© *Л.В. Бородачёв*

Физический факультет МГУ, Москва, Россия.
e-mail: boroda@afrodita.phys.msu.su

В настоящей работе предложен подход к построению устойчивой процедуры численного решения дарвинских уравнений самосогласованного поля в дискретной плазменной модели с неявной аппроксимацией уравнений движения частиц.

FIELD NUMERICAL INTERPRETATION IN THE DISCRETE DARWIN MODEL WITH IMPLICIT SCHEME CALCULATION OF PARTICLE DYNAMICS

L.V. Borodachev

This paper proposes an approach to constructing the stable procedure for numerical solving of Darwin self-consistent field equations in the discrete plasma model with an implicit approximation of particle motion equations.

1. Введение

Как известно, одним из наиболее эффективных при изучении неравновесных состояний разреженной плазмы является самосогласованный подход, учитывающий взаимное влияние движения заряженных частиц и полей, порождаемых ими [1].

Математически он представляется системой кинетических уравнений Власова, детально описывающих эволюцию каждой из компонент плазмы, и уравнений Максвелла, наиболее полно описывающих динамику внутренних электромагнитных полей [2].

Вместе с тем широкий круг явлений плазмофизики, определяемых коллективными взаимодействиями частиц, носит нерелятивистский и безызлучательный характер, что позволяет при их теоретическом исследовании перейти к упрощенному полевому описанию, исключающему из рассмотрения свободные электромагнитные волны.

В этом смысле одним из наиболее интересных представляется дарвинский (магнитоиндукционный) формализм [3]. Его привлекательность (и некоторая необычность) состоит в том, что, являясь по сути «незапаздывающим» приближением электромагнитных полей плазмы, он описывает ряд не свойственных «мгновенным» системам индукционных эффектов, связанных с законом Фарадея.

Однако в силу принципиальной нелинейности решение самосогласованной модели, даже редуцированной, возможно лишь на базе численных методов [4], в частности, метода макрочастиц как одного из наиболее информативных и гибких [5].

Любопытно, что, будучи беднее по возможностям максвелловского формализма, дарвинский труднее поддается численному анализу в рамках самосогласованного подхода (что объясняет сравнительно немногочисленные публикации по безызлучательному моделированию плазмы (работы [6]–[10] представляются автору наиболее значимыми)). Эта, на первый взгляд, парадоксальная ситуация во многом обусловлена развитием в счетной области сильной паразитной неустойчивости при любой явной разностной аппроксимации динамических уравнений поля. В настоящее время указанная проблема корректной численной интерпретации дарвинского приближения принципиально решена с помощью, так называемой, эллиптической переформулировки исходного полевого описания (в работе [7] она изложена, по-видимому, наилучшим образом).

Следует, однако, подчеркнуть, что численно эта методика успешно реализована лишь при молчаливом условии применения в дискретном алгоритме традиционной явной схемы («с перешагиванием») интегрирования уравнений движения частиц (смотри, например, ту же публикацию [7]). Использование же неявных схем интегрирования (в частности, оптимизированной схемы из работы [11]) вносит, как будет показано ниже, определенную специфику в решение проблемы актуальной численной устойчивости безызлучательных моделей. Причем как на пути упомянутой эллиптической редакции полевого описания, так и на пути естественной в этом случае неявной разностной аппроксимации исходных уравнений поля.

2. Система уравнений

Дарвинское приближение полей формально можно получить из полного электромагнитного описания, доставляемого хорошо известной системой уравнений Максвелла, выполнив следующие операции.

Во-первых, применить к электрическому полю и току, фигурирующим в максвелловских уравнениях, известную теорему (см., например, [12]) о разложении произвольной векторной величины $\boldsymbol{a}$ на продольную (потенциальную) и поперечную (вихревую) составляющие, определяемые условиями:

$$\nabla \times \boldsymbol{a}_l = 0, \qquad \nabla \boldsymbol{a}_t = 0, \qquad \boldsymbol{a}_l + \boldsymbol{a}_t = \boldsymbol{a}.$$

Во-вторых, отбросить в законе Ампера поперечную составляющую тока смещения $\frac{1}{4\pi}\,\partial \boldsymbol{E}_t/\partial t$.

Тогда систему уравнений дарвинского приближения электромагнитных полей можно записать следующим образом:

$$\nabla \boldsymbol{E} = 4\pi\rho, \qquad \nabla \boldsymbol{E}_t = 0, \tag{1}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}, \qquad \nabla \times \boldsymbol{E}_l = 0, \tag{2}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{B} = \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j} + \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{E}_l}{\partial t}, \qquad \nabla \boldsymbol{B} = 0, \tag{3}$$

где в случае конечной совокупности частиц плотности заряда и тока, играющие роль источников самосогласованных полей, имеют выражения:

$$\rho(\boldsymbol{r}, t) = \sum_j q_j \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_j(t)), \qquad \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) = \sum_j q_j \boldsymbol{v}_j \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_j(t)) \tag{4}$$

и тождественно удовлетворяют за счет сохранившегося в системе продольного тока смещения уравнению непрерывности заряда:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \boldsymbol{j}_l = 0. \tag{5}$$

Кинетические уравнения Власова при этом, как известно, можно заместить уравнениями движения заряженных частиц под действием силы Лоренца:

$$\frac{d\boldsymbol{r}_j}{dt} = \boldsymbol{v}_j, \qquad \frac{d\boldsymbol{v}_j}{dt} = \frac{q_j}{m_j}\left(\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\,(\boldsymbol{v}_j \times \boldsymbol{B})\right). \tag{6}$$

Здесь и ниже m_j, q_j, v_j, соответственно, масса, заряд и скорость частицы с индексом j.

Легко видеть, что фактически от точного полевого описания магнитоиндукционное отличается лишь опущенной производной по времени от поперечного электрического поля. Однако эта, казалось бы незначительная, редукция максвелловской системы уравнений приводит к весьма существенным для корректной численной интерпретации последствиям: оставаясь формально гиперболическими, дарвинские уравнения отвечают полям с мгновенным дальнодействием, т.е. адекватны системам без запаздывания. (Подробное доказательство этого неочевидного на первый взгляд утверждения можно найти в работах [7, 13]).

3. Особенности дискретизации

Первые реальные опыты использования дарвинских алгоритмов показали их абсолютную неустойчивость при любой явной по времени разностной аппроксимации уравнений поля. Внешне неустойчивость проявлялась в виде быстро нарастающего паразитного самовозбуждения системы, обусловленного мгновенной взаимоиндукцией поперечных электрических полей и токов в расчетной области, что сопровождалось резким рассогласованием численного и аналитического решений.

Теоретически тот же результат можно получить, применив традиционную методику исследования устойчивости разностных схем на основе анализа собственных чисел матрицы послойного временного перехода [14]. В работе [7] этот подход продемонстрирован на конструктивном примере течения заряженной жидкости.

Однако проще воспользоваться критерием устойчивости Куранта [15], который в нашем случае имеет вид

$$v_f \leqslant v_h = \frac{h}{\tau}.$$

Здесь v_f — скорость распространения электромагнитных возмущений; h, τ — величины сеточных шагов, определяемые характерными пространственно-временными масштабами рассматриваемого процесса. Очевидно, что в условиях мгновенного дальнодействия сил ($v_f = \infty$) требуемое отношение не может быть удовлетворено ни при каких сколь-нибудь разумных значениях h, τ. Иными словами, передача достоверной информации через пространственную ячейку с конечной скоростью по сути не возможна в системах без запаздывания.

Таким образом, численная неустойчивость явных дарвинских алгоритмов носит принципиальный характер и ее исключение связано с адекватной численной интерпретацией безызлучательного приближения. Здесь можно выделить два основных подхода.

Первый, как наиболее естественный, состоит в формальном использовании неявной разностной аппроксимации уравнений поля, фактически снимающем условие Куранта, так же, как это делается в полных электромагнитных моделях. Этот подход, однако, представляется малопривлекательным по следующим соображениям. С одной стороны, структура исходной дарвинской системы полевых уравнений подобна максвелловской. Таким образом, неявные магнитоиндукционные алгоритмы должны наследовать всю сложность и неэкономичность неявных электромагнитных схем, предполагающих использование сквозного итерационного процесса либо по всем динамическим уравнениям модели, либо по ее полевой части [16, 17]. С другой стороны, эффективность решения проблемы устойчивости в дарвинском случае не столь очевидна как в максвелловском. Действительно, в контексте вышеприведенного анализа устойчивости неявность схемы интегрирования адекватна бесконечной скорости распространения сеточной информации, что обеспечивает безусловную численную устойчивость при моделировании систем с конечной скоростью взаимодействий. В случае же мгновенного дальнодействия сил, соответсвующего безызлучательному описанию полей, мы получаем своеобразную неопределенность в соотношении сеточной скорости и скорости распространения электромагнитных возмущений, каждая из которых полагается бесконечной. Сходимость итерационного процесса в этих условиях требует отдельного изучения, однако уместно предположить, что она будет хуже, нежели в случае с запаздыванием взаимодействий.

Второй подход к построению устойчивых дарвинских алгоритмов представляется физически более привлекательным. Он состоит в редакции исходного полевого описания, сводящей последнее к эллиптическому виду, отвечающему характеру безызлучательного приближения. Ниже предлагается (достаточно схематично в силу естественных ограничений объема публикации) численная реализации этой идеи в условиях неявной разностной аппроксимации уравнений движения частиц [11].

4. Эллиптическая переформулировка

Вернемся к полученной системе полевых уравнений и перепишем уравнения (2) и (3), имеющие временные производные, отдельно для продольных и поперечных составляющих:

$$\nabla \times \boldsymbol{E}_t = -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}, \tag{7}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{B} = \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}_t, \tag{8}$$

$$4\pi \boldsymbol{j}_l + \frac{\partial \boldsymbol{E}_l}{\partial t} = 0. \tag{9}$$

Уравнение (8) является уже эллиптическим, поэтому в контексте рассматриваемой проблемы устойчивости нас будут интересовать уравнения (7) и (9). Последнее является следствием уравнения непрерывности заряда (5) и носит поверочный характер (его невязка, определяющая корректность магнитоиндукционного кода, должна равняться нулю). При этом численное решение уравнения (9) не требует прямого использования разностной производной для нахождения $\boldsymbol{E}_l$, уже известного из решения уравнений (1), и предполагает лишь необходимую для тождественного удовлетворения корректировку значений поля (или плотности тока). В большинстве алгоритмов, использующих схему "с перешагиванием"(или ее модификации) при численном интегрировании уравнений движения частиц, указанная корректировка носит чисто технический характер и не вызывает проблем, поскольку текущие значения полей и токов разнесены во времени. Ситуация резко меняется при использовании для численного расчета динамики частиц неявной схемы, определяющей фазовые координаты, а стало быть и величины $\boldsymbol{j}$ и $\boldsymbol{E}$, на одном временном слое. Теперь разностное представление $\partial \boldsymbol{E}_l/\partial t$ потребует экстраполяции текущих значений продольного электрического поля, провоцирующей неустойчивость того же типа, что и прямое численное интегрирование уравнения (7).

Таким образом, в этом случае проблема дискретного безызлучательного формализма состоит в корректной разностной аппроксимации не только уравнения (7), являющегося общим местом дарвинских алгоритмов, но и дополнительно уравнения (9). В рамках метода макрочастиц она может быть решена следующим образом.

Возьмем ротор от обеих частей уравнения (7) и воспользуемся известным преобразованием двойного векторного произведения:

$$\nabla\left(\nabla \boldsymbol{E}_t\right) - \Delta \boldsymbol{E}_t = -\frac{1}{c}\nabla \times \left(\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}\right).$$

Продифференцировав далее по времени первое из уравнений (3), подставим его в полученное. Тогда с учетом указанного выше разложения Гельмгольца будем иметь:

$$\Delta \boldsymbol{E}_t = \frac{4\pi}{c^2}\frac{\partial \boldsymbol{j}}{\partial t} + \frac{1}{c}\frac{\partial^2 \boldsymbol{E}_l}{\partial t^2}. \tag{10}$$

Отметим, что разностное представление уравнения (10) потребует численной экстраполяции текущих значений $\boldsymbol{j}$ и $\boldsymbol{E}_l$, и, как следствие, развитие уже известной неустойчивости.

Можно, однако, попытаться избежать указанной экстраполяции, выразив члены в правой части уравнения с помощью величин, заданных в тот же момент времени, что и искомое поле $\boldsymbol{E}_t$.

Для этого распишем частную производную по времени от плотности тока (4), опираясь на уравнение движения заряда в электромагнитном поле (воспользуемся для наглядности простейшей модификацией метода макрочастиц [5]):

$$\frac{\partial \boldsymbol{j}}{\partial t} = \frac{d\boldsymbol{j}}{dt} - (\boldsymbol{v}\nabla)\,\boldsymbol{j} = \sum_j q_j \left\{ \frac{d\boldsymbol{v}_j}{dt}\,\delta\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j\right) - \boldsymbol{v}_j\left(\boldsymbol{v}_j\nabla\right)\delta\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j\right)\right\} =$$

$$= \sum_j \frac{q_j^2}{m_j}\boldsymbol{E}\left(\boldsymbol{r}_j\right)\delta\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j\right) + \sum_j \frac{q_j^2}{cm_j}\left(\boldsymbol{v}_j \times \boldsymbol{B}\left(\boldsymbol{r}_j\right)\right)\delta\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j\right) - \tag{11}$$

$$- \sum_j q_j \boldsymbol{v}_j\left(\boldsymbol{v}_j\nabla\right)\delta\left(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j\right).$$

Заметим, что первый и второй члены справа представляют собой свертки электрического и магнитного полей соответственно с плотностями заряда и тока, а третий имеет смысл дивергенции тензора переноса тока.

Далее, представим в разностном виде $\partial^2\boldsymbol{E}_l/\partial t^2$ для момента времени t^n, считая удовлетворенным численный аналог уравнения (9). Воспользовавшись центральными разностями [14] получим:

$$\frac{\boldsymbol{E}_l^{n+1} - \boldsymbol{E}_l^{n-1}}{2\tau} = -4\pi \boldsymbol{j}_l^n,$$

$$\frac{\boldsymbol{E}_l^{n+1} - 2\boldsymbol{E}_l^{n} + \boldsymbol{E}_l^{n-1}}{\tau^2} = -\frac{2}{\tau}\left(4\pi \boldsymbol{j}_l^n + \frac{\boldsymbol{E}_l^{n} - \boldsymbol{E}_l^{n-1}}{\tau}\right), \tag{12}$$

где $\boldsymbol{j}_l$ определяется решением стандартной краевой задачи (см. Приложение).

Обозначив $(\boldsymbol{E}_l^{n} - \boldsymbol{E}_l^{n-1})/\tau = \mathrm{D}^-\boldsymbol{E}_l^n/\mathrm{D}\tau$, подставим выражения (11) и (12) в уравнение (10). Имея в виду замечание о физическом смысле членов выражения (11), окончательно получим в текущий (t^n) момент времени:

$$\Delta \boldsymbol{E}_t^n - \frac{4\pi}{c^2}\sum_\alpha \rho_\alpha^n \boldsymbol{E}_t^n = \frac{4\pi}{c^2}\left\{\sum_\alpha \frac{q_\alpha}{m_\alpha}\boldsymbol{E}_l^n + \sum_\alpha \frac{q_\alpha}{cm_\alpha}\left(\boldsymbol{j}_\alpha^n \times \boldsymbol{B}^n\right) - \right.$$

$$\left. - \sum_\alpha (\boldsymbol{v}_\alpha\nabla)\boldsymbol{j}_\alpha^n - \frac{2}{\tau}\left[\boldsymbol{j}_l^n + \frac{1}{4\pi}\frac{\mathrm{D}^-\boldsymbol{E}_l^n}{\mathrm{D}\tau}\right]\right\}. \tag{13}$$

Здесь правая часть имеет смысл источника поперечного электрического поля, поэтому в компактном виде полученное уравнение можно записать так:

$$\left[\Delta - \eta^n\left(\boldsymbol{r}\right)\right]\boldsymbol{E}_t^n\left(\boldsymbol{r}\right) = -\frac{4\pi}{c^2}\boldsymbol{G}^n\left(\boldsymbol{r}\right),$$

где, расшифровка символов $\eta^n\left(\boldsymbol{r}\right)$ и $\boldsymbol{G}^n\left(\boldsymbol{r}\right)$ очевидна. Его формальное решение допускает использование прямых методов, однако экономически это оправдано лишь в одномерной пространственной геометрии ($\boldsymbol{E}_l = \mathrm{E}_x$), где оно сводится к решению системы обычных скалярных уравнений [18].

Альтернативой алгебраического решения уравнения (13) в многомерном случае является организация итерационного процесса. Представим его в форме, удобной для физической интерпретации. Для этого запишем текущее значение плотности макрочастиц сорта

α ($\alpha = i, e$ — рассмотрим для простоты двухкомпонентную ионно-электронную плазму) в виде:

$$n_\alpha(\boldsymbol{r}) = n_0 + \delta n_\alpha(\boldsymbol{r}),$$

где δn — флуктуация плотности частиц около среднего значения, (напомним, что по условию квазинейтральности $n_{0i} = n_{0e} = n_0$). Вводя ленгмюровскую частоту ω_{pe} [2], перепишем уравнение (13) следующим образом:

$$\left[\Delta - \frac{\omega_{pe}^2}{c^2}\left(1 + \frac{m_e}{m_i}\right)\right]\boldsymbol{E}_t^{(\nu+1)n}(\boldsymbol{r}) = -\frac{4\pi}{c^2}\left[\boldsymbol{G}^n(\boldsymbol{r}) - \mu^n(\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{E}_t^{\nu n}\right]. \tag{14}$$

Здесь $\mu(\boldsymbol{r}) = \sum\limits_\alpha \left(q_\alpha^2/n_\alpha\right)\delta n_\alpha(\boldsymbol{r})$, ν — номер итерации, уточняющей значение $\boldsymbol{E}_t^n$. Отметим, что правая часть, имеющая сложную структуру, носит нелинейный характер и учитывает взаимозависящие флуктуации поперечных электрических полей и токов.

Физический смысл проведенной редакции полевого описания усматривается из сравнения полученного уравнения и уравнения для экранированного (дебаевского) потенциала [2]:

$$\left[\Delta - \frac{\omega_{pe}^2}{v_T^2}\left(1 + \frac{m_e}{m_i}\right)\right]\varphi = -4\pi\rho_s, \tag{15}$$

где ρ_s — нелинейный источник, обусловленный колебаниями плотности заряда около среднего значения. Тогда по аналогии с уравнением (15) полученное выше уравнение (14) описывает эффективную в масштабах скин-слоя $c\,\omega_e^{-1}$ экранировку $\boldsymbol{E}_t$, токами, обратными по отношению к порождающим магнитное поле и связанное с ним поперечное электрическое. Иными словами, предложенный подход исключает паразитную взаимоиндукцию полей и токов, определяющую актуальную численную неустойчивость традиционного дарвинского формализма.

5. Приложение

Коротко опишем формальную процедуру разложения в конечной области пространства произвольной векторной величины $\boldsymbol{a}$ на продольную (потенциальную) и поперечную (вихревую) составляющие, определяемые условиями:

$$\nabla \times \boldsymbol{a}_l = 0, \qquad \nabla \boldsymbol{a}_t = 0, \qquad \boldsymbol{a}_l + \boldsymbol{a}_t = \boldsymbol{a}.$$

Она основывается на том, что, будучи роторно–свободной, продольная составляющая может быть представлена в виде $\boldsymbol{a}_l = \nabla\psi$, где скалярный потенциал ψ является решением следующей задачи Неймана [12]

$$\begin{cases} \nabla^2\psi = \nabla \cdot \boldsymbol{a}\,, \\ \left.\dfrac{\partial\psi}{\partial\boldsymbol{n}}\right|_\gamma = \left.(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{a}\,)\right|_\gamma \end{cases}$$

($\boldsymbol{n}$ — внешняя нормаль к границе области γ).

Таким образом, при заданном граничном значении нормальной компоненты векторной величины $\boldsymbol{a}$, продольная составляющая однозначно определяется выражением $\boldsymbol{a}_l = \nabla\psi$, а поперечная составляющая — равенством $\boldsymbol{a}_t = \boldsymbol{a} - \boldsymbol{a}_l$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Власов А.А.* Теория многих частиц. – М.-Л.: ГИТТЛ, 1950, 348 с.
2. *Франк-Каменецкий Д.А.* Лекции по физике плазмы. – М.: Атомиздат, 1968, 286 с.
3. *Darwin C.G.* The Dynamical Motion of Particles. Phil. Mag., 1920, v.39, p.537.
4. Вычислительные методы в физике плазмы. Под ред. Б. Олдера, С. Фернбаха, М. Ротенберга. – М.: Мир, 1974, 514с.
5. *Хокни Р., Иствуд Дж.* Численное моделирование методом частиц. – М.: Мир, 1987, 640с.
6. *Buznardo-Neto J., Pritchett P.L., Lin A.T., Dawson J.M.* A Self-Consistent Magnetostatic Particle Code for Numerical Simulation of Plasmas. J. Comput. Phys., 1977, v.23, p.300.
7. *Нильсон К., Льюис Г.* Модели укрупненных частиц в безызлучательном пределе. В кн.: Управляемый термоядерный синтез. – М.: Мир, 1980, с.395.
8. *Hewett D.W.* Elumination of Electromagnetic Radiation in Plasma Simulation: the Darwin or Magnetoinductive Approximation. Space Sc. Rev., 1985, v.42, p.29.
9. *Weitzner H., Lawson W. S.* Boundary conditions for the Darvin model. Phys. Fluids, B., 1989, v.1, p.1953.
10. *DiPeso G., Hewett D.W., Simonson G.F.* Extension of the stremlined Darwin Model to Quasineutral Plasmas. J. Comp. Phys., 1994, v.111, p.237.
11. *Бородачёв Л.В.* Неявная аппроксимация уравнений движения дарвинской модели плазмы. ЖВМиМФ, 1991, т.30, с.934.
12. *Ладыженская О.А.* Математические вопросы динамики вязкой несжимаемой жидкости. – М.: Наука, 1970, 504с.
13. *Бородачёв Л.В.* Дарвинское описание самосогласованных электромагнитных полей плазмы и особенности его дискретной интерпретации. (Препр. физ. фак. МГУ: № 19/2000). – М., 2000, 14с.
14. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. – М.: Наука, 1977, 656с.
15. *Рихтмайер Р.Д.* Разностные методы решения краевых задач. – М.: ИЛ, 1960, 262с.
16. *Brackbill J.U., Forslund D.W.* An Implicit Method for Electromagnetic Plasma Simulation in Two-Dimensions. J. Comput. Phys., 1982, v.46, p.271.
17. *Hewett D.W., Langdon A.B.* Electromagnetic Direct Implicit Plasma Simulation. J. Comput. Phys., 1987, v.72, p.121.
18. *Бородачёв Л.В.* К проблеме математического моделирования безизлучательной плазмы. Вестн. МГУ. Сер. 3, 1993, т.34, № 3. с. 87.

Поступила в редакцию 03.12.2004.