

Л. В. БОРОДАЧЕВ

(Москва)

НЕЯВНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ ДАРВИНСКОЙ МОДЕЛИ ПЛАЗМЫ

Рассматривается построение неявной схемы интегрирования уравнений движения зарядов дискретной модели безызлучательной власовской плазмы. Анализируются свойства и физическая корректность схемы, обсуждаются вопросы разработки экономичного алгоритма ее решения.

Введение

Среди множества нелинейных задач плазмофизики, являющихся традиционной областью применения численного моделирования, можно выделить большой круг проблем, по характеру безызлучательных и нерелятивистских, обусловленных коллективными взаимодействиями. Как известно, явления данного класса могут быть достоверно описаны в рамках низкочастотного приближения полей самосогласованной плазмы, одним из наиболее ярких примеров которого служит дарвинский (магнитоиндукционный) формализм [1], [2].

Внешне полевое представление Дарвина отличается от максвелловского лишь опущенной поперечной компонентой тока смещения. Но по сути оно отражает мгновенное дальноедействие на расстоянии и уже не учитывает излучения зарядов.

Указанная особенность имеет существенное значение для численных приложений модели, поскольку в этом случае снимается жесткое условие устойчивости Куранта — Леви $k\tau \leq 2$ (см. [3]), свойственное явным полностью электромагнитным алгоритмам и связанное с распространением световых волн (быстрыми движениями) в системе.

Важно отметить и тот факт, что дарвинский лагранжиан, являясь первой релятивистской поправкой к точному электромагнитному, включает помимо электро- и магнитоэстатических эффектов магнитоиндукционные. Их сохранение обогащает безызлучательное приближение на фоне традиционных приближений стационарных полей и предполагает возможность разнообразных гибридных описаний плазмы на его основе.

Уже эта краткая характеристика модели объясняет большой интерес к ее дискретной реализации и, как следствие, появление целого ряда магнитоиндукционных кодов, разных по возможностям и целям [4]—[10]. Отличаясь пространственной геометрией, фазовой размерностью, используемым формализмом, техникой решения уравнений поля и т. п., подавляющее большинство практически используемых дарвинских алгоритмов все же сохраняют ограничение временного шага $\omega_{pe}\tau \leq 2$, связанное с явным разностным представлением остающихся тепловых (медленных) движений частиц. Очевидно, что механическое следование критерию устойчивости может приводить к излишнему дроблению временной шкалы (например, в задачах с характерными частотами много меньше плазменной электронной) и в итоге к неоправданно большим вычислительным потерям, снижающим прикладную ценность безызлучательного моделирования.

Вместе с тем сравнительно низкочастотный характер приближения позволяет разработать эффективную, абсолютно устойчивую процедуру расчета фазовых траекторий частиц на базе неявных разностных схем, а характерные пространственно-временные масштабы власовской плазмы допускают разумное разрешение альтернативы «стоимость — качество» на уровне аппроксимаций второго порядка [11].

Круг вопросов, затрагиваемых в данной публикации, в основном касается построения экономичной неявной схемы интегрирования уравнений движения зарядов, анализа ее свойств и физической достоверности, разработки и оптимизации процедуры решения.

§ 1. Аппроксимация динамических уравнений

В соответствии с традиционной методикой частица – сетка [12] численного решения власовской модели плазмы, уравнения движения макрочастиц можно записать в виде

$$(1.1a) \quad d\mathbf{V}_j/dt = \mathbf{F}_j/m_j, \quad d\mathbf{r}_j/dt = \mathbf{V}_j, \quad j=1, 2, \dots, N_p,$$

$$(1.1b) \quad \mathbf{F}_j = \mathbf{F}(\mathbf{r}_j) = q_j \int \left[\mathbf{E}(\mathbf{r}') + \frac{1}{c}(\mathbf{V}_j \times \mathbf{B}(\mathbf{r}')) \right] R(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) d\mathbf{r}'$$

(далее, без потери точности, макрочастицы считаем точечными).

Используем для разностной аппроксимации полученной системы уравнений невыпуклую симметричную схему, имеющую в терминах последней перехода $t^1 = t^0 + \tau$ вид (здесь и ниже индекс j для удобства опущен)

$$(1.2a) \quad \frac{1}{\tau}(\mathbf{V}^1 - \mathbf{V}^0) = \frac{q}{2m} \left\{ (\mathbf{E}^0 + \mathbf{E}^1) + \frac{(\mathbf{V}^0 + \mathbf{V}^1) \times (\mathbf{B}^0 + \mathbf{B}^1)}{2c} \right\},$$

$$(1.2b) \quad \tau^{-1}(\mathbf{r}^1 - \mathbf{r}^0) = (\mathbf{V}^0 + \mathbf{V}^1)/2.$$

Разложением в ряды Тейлора сеточных функций и конечных разностей в τ -окрестности t^0 и переходом к пределу при $\tau \rightarrow 0$ легко показать, что предложенная схема имеет второй порядок, согласована с исходной системой (1.1) и абсолютно устойчива [11].

Подробнее рассмотрим вопросы физической корректности разностной схемы (1.2), представляющие в перспективе ее практического использования особый интерес, а именно: покажем ее обратимость во времени, адекватность описания движения заряда в электромагнитных полях (ускорение в электрическом, вращение в магнитном, дрейф в скрещенных) и сохранение энергии, по крайней мере со своим порядком точности.

Первое свойство, очевидно, удовлетворяется схемой в силу симметрии (естественно, в предположении об обратимости процедуры вычисления полей). Причем эволюционная модель в этом случае априори гарантирована от численного роста энтропии, вообще говоря, возможного при использовании необратимых алгоритмов [5], [12].

Для анализа других свойств можно без потери общности рассмотреть модельную задачу о движении частицы со скоростью $\mathbf{V} = (v_x, v_y, 0)$ в скрещенных электрическом $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$ и магнитном $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$ полях. Воспользуемся комплексными переменными $\hat{\mathbf{V}} = V_x + iV_y$, $\hat{\mathbf{r}} = x + iy$ и введем локальную циклотронную частоту $\omega_c = (qB)/(mc)$. Тогда уравнения движения заряда в плоскости $W = (x, y)$ будут иметь вид

$$\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \hat{\mathbf{V}}, \quad \frac{d\hat{\mathbf{V}}}{dt} = \frac{q}{m} \hat{\mathbf{E}} - i\hat{\mathbf{V}}\omega_c$$

или в разностной форме

$$(1.3a) \quad \hat{\mathbf{r}}^1 - \hat{\mathbf{r}}^0 = \tau(\hat{\mathbf{V}}^1 + \hat{\mathbf{V}}^0)/2,$$

$$(1.3b) \quad \hat{\mathbf{V}}^1 - \hat{\mathbf{V}}^0 = \varphi - i\beta(\hat{\mathbf{V}}^0 - \hat{\mathbf{V}}^1),$$

$$(1.3в) \quad \varphi = \frac{q\tau}{2m}(\hat{\mathbf{E}}^0 + \hat{\mathbf{E}}^1), \quad \beta = \frac{\tau}{4}(\omega_c^0 + \omega_c^1) = \frac{\beta^0 + \beta^1}{2}.$$

Разрешив (1.3б) относительно $\hat{\mathbf{V}}^1$, получим

$$(1.4) \quad \hat{\mathbf{V}}^1 = \frac{1 - i\beta}{1 + \beta^2} \varphi + \frac{1 - \beta^2 - 2i\beta}{1 + \beta^2} \hat{\mathbf{V}}^0.$$

Исследуем найденные выражения.

Прежде всего, (1.4) при $\tau \gg \omega_c^{-1}$ переходит в уравнение:

$$\hat{\mathbf{V}}^1 \approx -i\varphi/\beta - \hat{\mathbf{V}}^0,$$

а (1.3а) преобразуется к виду

$$(1.5) \quad \tau^{-1}(\hat{\mathbf{r}}^1 - \hat{\mathbf{r}}^0) = (\hat{\mathbf{V}}^0 - i\varphi/\beta - \hat{\mathbf{V}}^0)/2 = -i\hat{\mathbf{E}}^{1/2}/\hat{\mathbf{B}}^{1/2}.$$

Анализ (1.5) показывает, что, в полном согласии с решением исходной дифференциальной системы уравнений в приближении ведущего центра, макрозаряд испытывает локальный электрический дрейф [12].

Далее, в случае $E=0$ ($\varphi=0$) движение частицы, как следует из (1.3б), представляет собой ларморовское вращение, причем β имеет смысл угла поворота за время $\tau/2$. Оценим изменение кинетической энергии заряда. Для этого, воспользовавшись (1.4), сравним квадраты его скоростей в моменты t^0, t^1 :

$$(\hat{\mathbf{V}}^1)^2 = \hat{\mathbf{V}}^1 \cdot \hat{\mathbf{V}}^1* = \hat{\mathbf{V}}^0 \cdot \hat{\mathbf{V}}^0* = (\hat{\mathbf{V}}^0)^2.$$

Легко видеть, что схема точно сохраняет кинетическую энергию заряда, движущегося в магнитном поле.

Наконец, при $B=0$ ($\beta=0$) из (1.3б) имеем линейное равномерно ускоренное (замедленное) движение частицы под действием электрической составляющей силы Лоренца. Оценим приращение кинетической энергии заряда за шаг τ . В соответствии с системой (1.3) получим

$$\frac{m}{2} [(\hat{\mathbf{V}}^1)^2 - (\hat{\mathbf{V}}^0)^2] = (\hat{\mathbf{r}}^1 - \hat{\mathbf{r}}^0) q \frac{\hat{\mathbf{E}}^0 + \hat{\mathbf{E}}^1}{2}.$$

Здесь правая часть — взятая с минусом изменение потенциальной энергии частицы за тот же промежуток времени, имеющее вид разностной аппроксимации второго порядка для $\int q\mathbf{E}d\mathbf{r}$. Учитывая точность интегрирования самих динамических уравнений, можно говорить об ошибке сохранения полной энергии частицы в потенциальном поле $O(\tau^2)$.

Таким образом, в рамках своей точности рассматриваемая схема правильно описывает движение заряда в электромагнитном поле.

§ 2. Оптимизация разностной схемы

Несмотря на общую привлекательность предложенной аппроксимации уравнений движения зарядов, полученная схема имеет существенный с практических позиций недостаток — она неэкономична. Как известно, общепринятый подход к численному решению неявной дискретной модели самосогласованной плазмы (в границах временного шага $t^1 = t^0 + \tau$) состоит в организации итерационного процесса [12], в нашем случае имеющего вид

$$(2.1a) \quad \mathbf{V}^{1(v+1)} = \frac{q\tau}{2m} \left[(\mathbf{E}^0 + \mathbf{E}^{1v}) + \frac{(\mathbf{V}^0 + \mathbf{V}^{1v}) \times (\mathbf{B}^0 + \mathbf{B}^{1v})}{2c} \right] + \mathbf{V}^0,$$

$$(2.1б) \quad \mathbf{r}^{1(v+1)} = \mathbf{r}^0 + \frac{\tau}{2} (\mathbf{V}^0 + \mathbf{V}^{1(v+1)}).$$

Очевидно, что при этом резко повышается значимость вопросов рационального распределения памяти, частоты информационных обменов с внешним носителем, экономичности реализуемых разностных выражений — т. е. вопросов, традиционно связываемых в дискретном моделировании с понятием «стоимости» расчета.

В этом аспекте отметим два существенных момента рассматриваемого алгоритма: во-первых, определенную «вычислительную громоздкость» разностного выражения для магнитной составляющей силы Лоренца в (1.2а) и, во-вторых, некоторую сложность построения «хорошего» (в рамках заданной точности) начального приближения итерационного процесса.

Экстраполяция второго порядка по фазовым координатам предполагает сохранение как t^0 -результатов, так и t^{-1} -результатов, что ведет к резкому увеличению требуемой памяти, внешних обменов и вычислительных затрат на стартовом этапе каждого цикла. Использование же только t^0 -результатов дает экстраполяцию первого порядка, что с необходимостью увеличивает общее количество итераций на каждом временном слое и, естественно, «цену» расчета.

Вместе с тем сравнительно низкочастотный и нерелятивистский характер дарвинского приближения позволяет не только эффективно решить указанные проблемы, но и значительно оптимизировать весь численный алгоритм.

Прежде всего схема (1.2) упрощается, если в первом из уравнений использовать вместо почленного центрирования величин \mathbf{V} и \mathbf{B} прямое центрирование магнитной составляющей силы Лоренца:

$$(2.2) \quad (\mathbf{V}^1 - \mathbf{V}^0) = \frac{\tau q}{2m} \left\{ (\mathbf{E}^0 + \mathbf{E}^1) + \frac{1}{c} [(\mathbf{V}^0 \times \mathbf{B}^0) + (\mathbf{V}^1 \times \mathbf{B}^1)] \right\}.$$

Указанное преобразование правомочно, поскольку не понижает порядка схемы. Действительно, представив текущие значения скорости частицы и магнитного поля в виде $\mathbf{V}^1 = \mathbf{V}^0 + \delta \mathbf{V}$, $\mathbf{B}^1 = \mathbf{B}^0 + \delta \mathbf{B}$, где $(\delta V, \delta B)$ – величины порядка малости τ , нетрудно показать, что ошибка, вносимая данной заменой, меньше $|\delta V \delta B| = O(\tau^2)$.

Теперь разрешим (2.2) относительно \mathbf{V}^1 . Воспользовавшись (1.3в), имеем

$$\mathbf{V}^1 - \mathbf{V}^1 \times \boldsymbol{\beta}^1 = \frac{\tau q}{2m} \mathbf{E}^1 + \frac{\tau q}{2m} \left(\mathbf{E}^0 + \frac{\mathbf{V}^0 \times \mathbf{B}^0}{c} \right) + \mathbf{V}^0 \equiv \mathbf{Q}^1,$$

где \mathbf{Q}^1 включает как константы известные величины \mathbf{E}^0 , \mathbf{V}^0 , \mathbf{B}^0 .

Далее, если ввести экстраполяцию текущих значений электромагнитных полей по формуле

$$(2.3) \quad \tilde{\chi} = 2\chi^0 - \chi^{-1} + O(\tau^2),$$

то полученное уравнение можно записать в виде, удобном для реализации стартового этапа итерационного процесса:

$$\mathbf{V}^1 - \mathbf{V}^1 \times \tilde{\boldsymbol{\beta}} = \tilde{\mathbf{Q}}.$$

Здесь величины $\tilde{\boldsymbol{\beta}}$, $\tilde{\mathbf{Q}}$ уже выражены в терминах «старых» переменных.

В силу (2.3), дополнительная ошибка, возникающая при определении «новой» скорости, $O(\tau^2)$, а новой координаты $O(\tau^3)$, что оставляет полученную схему интегрирования уравнений движения заряда в пределах заданного (второго) порядка точности.

Отметим два принципиальных момента проведенной оптимизации:

1) существенно упростилось выражение для определения новой скорости за счет отбрасывания членов вида $(\mathbf{V}^1 \times \mathbf{B}^0)$ и $(\mathbf{V}^0 \times \mathbf{B}^1)$ в (1.2а).

2) в силу явного разрешения (2.2) относительно \mathbf{V}^1 , формирование стартового состояния текущего итерационного цикла ограничивается лишь вычислением исходных электромагнитных полей и не требует начального приближения фазовых координат частиц.

§ 3. Процедура решения

После оптимизации схема численного интегрирования фазовых траекторий частиц имеет в терминах послышного перехода $t^1 = t^0 + \tau$ вид

$$(3.1a) \quad \mathbf{V}^{1(v+1)} - \mathbf{V}^{1(v+1)} \times \boldsymbol{\beta}^{1v} = \mathbf{Q}^{1v},$$

$$(3.1б) \quad \mathbf{r}^{1(v+1)} = \mathbf{r}^0 + \frac{\tau}{2} (\mathbf{V}^0 + \mathbf{V}^{1(v+1)}).$$

Ее решение заключается в следующем.

Подставляя старые (v) значения полей в (3.1а), определяем новые ($v+1$) скорости и далее с помощью (3.1б) – координаты. Легко видеть, что при поскоординатной записи (3.1) распадаются на системы скалярных уравнений, решение которых допускает эффективное применение прямых методов [3], [11]. Решая далее дарвинскую систему полевых уравнений, находим ($v+1$)-поле. Подсчет ошибки сохранения полной энергии завершает проход тела цикла.

Стартовое состояние процедуры ($v=0$) задается экстраполяцией хранящихся на сетке (в оперативной памяти) старых (t^0 , t^{-1}) значений электромагнитных полей в соответствии с выражением (2.3). При этом определение первоначальных величин

\mathfrak{F}^v, Q^v (и, в частности, их взвешивание) осуществляется по известным (t^0) значениям фазовых координат частиц.

Окончание вычислений обусловливается достижением заданной точности, оцениваемой в какой-либо из сеточных норм, например в L_2 :

$$\varepsilon^{v+1} = |(W^{v+1} - W^v)/W^v|,$$

$$W = \sum_j V_j^{2+} + \sum_i (E_i^2 + B_i^2), \quad j=1, 2, \dots, N_p, \quad i=1, 2, \dots, I_c.$$

Методические расчеты на базе полуторамерного (три скорости, одна координата) безызлучательного кода позволяют утверждать, что в практически важных случаях умеренно неоднородной плазмы ($\delta n(x, t) \sim n_0/2$) при требуемой погрешности сохранения энергии $\approx 0.1\%$ процесс обладает сходимостью $O(1)$ даже в случаях значительных (несколько ω_{pe}^{-1}) временных шагов. При этом скорость сходимости в определенной степени зависит от количества и формы используемых макрочастиц и повышается с увеличением их числа и гладкости форм-фактора модели $R(x-x_j)$.

Важно подчеркнуть, что в однопроходном режиме неявная оптимизированная схема имеет близкие характеристики с обычно применяемой в магнитоиндукционных алгоритмах явной методикой «с перешагиванием»: точность (определяемую вторым порядком разностной аппроксимации исходных дифференциальных уравнений), эффективность (без учета процедуры экстраполяции полей), консервативность (ошибка полной энергии при $\tau = \omega_{pe}^{-1}$ в том и другом случае составляет $\sim 0.1\%$ на временном интервале $\sim 100 \omega_{pe}^{-1}$; импульс и масса сохраняются точно), — с той, однако, существенной разницей, что рассматриваемый метод абсолютно устойчив. При этом многопроходный режим решения модели радикально, как показывают численные эксперименты, улучшает ее консервативные свойства.

Отметим также преимущества оптимизированного алгоритма (3.1) в сравнении с традиционным (2.1) с позиций их компьютерной реализации.

Прежде всего, за счет редукции разностной схемы существенно снизилось общее число алгебраических (а значит, и машинных) операций, требуемых для вычисления новой (V^{v+1}) скорости. При этом получен дополнительный выигрыш за счет изъятия процедуры расчета исходных фазовых координат частиц при формировании стартового состояния итерационного процесса на каждом временном слое.

Далее, в силу явного разрешения (3.1а) относительно V^{v+1} , резко уменьшились требуемые объемы памяти (как внешней, так и, весьма существенно, оперативной), поскольку теперь не нужно сохранение старых значений скоростей (V^{-1} на старте и V^{iv} в теле цикла).

Наконец, вдвое сократилось число внешних информационных обменов на каждом итерационном проходе и полностью исключены четыре дополнительных обмена, необходимых при реализации «хорошего» стартового состояния и обусловленных экстраполяцией скоростей частиц.

Нетрудно видеть, что в условиях обычного для метода макрочастиц дефицита машинных ресурсов полученный алгоритм значительно эффективнее традиционного неявного и по экономичности сопоставим с общепринятым («с перешагиванием») явным [12].

Список литературы

1. Darwin C. C. Dynamical motions of charged particles // *Philos. Mag.* 1920. V. 39. P. 537–551.
2. Hewett D. W. Elimination of electromagnetic radiation in plasma simulation: the Darwin or magnetoinductive approximation // *Space Sci. Rev.* 1985. V. 42. P. 29–40.
3. Рихтмайер Р. Д. Разностные методы решения краевых задач. М.: Изд-во иностр. лит., 1960.
4. Haber I., Wagner C. E., Boris J. P., Dawson J. M. A self-consistent electromagnetic particle code // *Proc. 4-th Conf. Numer. Simulat. of Plasmas.* Washington, 1970. P. 467–495.
5. Нильсон К., Льюис Г. Модели укрупненных частиц в безызлучательном пределе // *Управляемый термоядерный синтез.* М.: Мир, 1980. С. 395–418.
6. Buznardo-Neto J., Pritchett P. L., Lin A. T., Dawson J. M. A self-consistent magne-

- tostatic particle code for numerical simulation of plasmas // J. Comput. Phys. 1977. V. 23. P. 300–312.
7. *Okuda H., Lee W. W., Cheng C. Z.* Electrostatic and magnetostatic particle simulation models in three dimensions // Comput. Phys. Commun. 1979. V. 17. P. 233–238.
 8. *Бородачев Л. В., Сигов Ю. С.* Численные эксперименты по параметрическому возбуждению магнитоактивной плазмы: Препринт № 65. М.: ИПМатем. АН СССР, 1979.
 9. *Lee W. W., Okuda H.* A simulation model for studying low-frequency microinstabilities // J. Comput. Phys. 1978. V. 26. P. 139–152.
 10. *Winske D.* Hybrid simulation codes with application to shocks and upstream with // Space Sci. Rev. 1985. V. 42. P. 53–66.
 11. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1977.
 12. *Hockney R. W., Estwood J. W.* Computer simulation using particles N. Y.: McGraw-Hill, 1981.

Поступила в редакцию 18.09.90
