

计算物理学 (A) 第三次大作业 第 1 题

截止日期：6 月 24 日

1 一维粒子模拟

粒子模拟是自洽地求解带电粒子与电磁场相互作用的一种数值方法。以一维粒子模拟为例，将长度为 L_x 的模拟空间均匀地划分成 N_x 个网格 (x_1, x_2, \dots, x_{N_x})，空间中的电场被定义在离散的网格点上（这里我们忽略磁场），如 E_j 代表 j 格点处的电场 $E(x_j)$ 。假设在整个模拟空间中分布了 N 个粒子，与电场不同，粒子被定义在连续空间中，第 i 个粒子的位置坐标 r_i 可以取任意浮点值。完整的粒子模拟程序大体分为以下 4 步：

1. 将网格点上的电场值分配到连续空间的粒子位置上
2. 粒子在电场作用在下推进运动
3. 运动电荷造成密度的重新分布，将连续空间中的密度分布反馈到网格点上
4. 用泊松方程更新网格点上的电场值

其中第 1 步和第 3 步涉及到网格量和粒子量的转换，需要定义粒子相对于每个网格点的权重。假设第 i 个粒子的空间位置 r_i 位于格点 x_j 和 x_{j+1} 之间，则该粒子对于每个网格点的权重分配可以简单地设为

$$w = \begin{cases} w_j = \frac{x_{j+1} - r_i}{\Delta x}, & \text{对第 } j \text{ 个格点} \\ w_{j+1} = \frac{r_i - x_j}{\Delta x}, & \text{对第 } j+1 \text{ 个格点} \\ 0, & \text{对其他格点} \end{cases} \quad (1)$$

第 i 个粒子感受到的电场即为

$$E_i = \frac{x_{j+1} - r_i}{\Delta x} E_j + \frac{r_i - x_j}{\Delta x} E_{j+1} \quad (2)$$

采用蛙跳算法来推进粒子的运动，首先在初始时刻，由电场得到 i 粒子所受的 Lorentz 力 $F_i = qE_i$ (q 为粒子的电荷)，然后将动量推进半个时间步长 $\Delta/2$

$$p_i = p_i + \frac{\Delta t}{2} \times F_i \quad (3)$$

得到更新后的速度

$$v_i = p_i/(\gamma m), \quad \gamma = \sqrt{1 + \left(\frac{p_i}{mc}\right)^2} \quad (4)$$

再将位置推进一个时间步长

$$r_i = r_i + \Delta t \times v_i \quad (5)$$

此时空间的电荷密度已经改变，进入到了算法的第 3 步，将所有粒子对 j 格点的权重求和即可得到 j 格点的粒子数

$$N_j = \sum_{i=1}^N w_i = \sum_{r_i \in (x_j, x_{j+1})} \frac{x_{j+1} - r_i}{\Delta x} + \sum_{r_i \in (x_{j-1}, x_j)} \frac{r_i - x_{j-1}}{\Delta x} \quad (6)$$

实际上我们不可能模拟真实情况下数量级为 $\sim 10^{23}$ 那么多的电子，所以粒子模拟的粒子被称为“宏粒子”，每个宏粒子是一定数量的真实粒子的集合，由于 Lorentz 方程只依赖于电子的荷质比，所以宏粒子的运动与集合内每个单粒子的运动相同。假设模拟盒的长度为 L_x ，真实粒子的平均密度设为 n_0 ，则真实粒子数为 $L_x n_0$ ，每个宏粒子包含 $L_x n_0 / N$ 个真实粒子，于是第 j 个格点的真实密度为

$$n_j = \frac{N_j \times L_x n_0 / N}{\Delta x} \quad (7)$$

其中 $\Delta x = L_x / N_x$ 为每个网格的大小。

我们考虑这样的情形，所研究的物质处在完全电离的状态（等离子体态），电子和离子可以自由运动。因为离子的质量比电子的质量大得多，其运动的时间尺度也会比电子运动的时间尺度要大得多。考虑电子的动力学演化时，可以将离子看成是一个静止的均匀的正电荷背景。我们将模拟盒中的 N 个粒子全部设为电子，其真实密度为 n_0 ，由于电荷守恒，离子提供了一个均匀的正电荷背景，电荷密度为 $n_0 e$ ，其中 e 为一个电子的电量。因而每个网格点的净电荷密度为 $(n_j - n_0)e$ ，柏松方程为

$$\frac{d^2 \phi(x_j)}{dx^2} \simeq \frac{\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1}}{(\Delta x)^2} = n - n_0 \quad (8)$$

这里所有变量都做了无量纲化处理。上式亦可写成矩阵形式

$$\frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & & \cdots & 1 \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ \vdots & & & \ddots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ 1 & & & & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_{N_x-1} \\ \phi_{N_x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ \vdots \\ n_{N_x-1} \\ n_{N_x} \end{bmatrix} - n_0 \quad (9)$$

通过求解线性方程组可以得到网格上的电势。电场是电势的梯度

$$E(x_j) = -\frac{d\phi(x_j)}{dx} \simeq \frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} \quad (10)$$

可以直接用矩阵乘法求出，形式为

$$\begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \\ \vdots \\ E_{N_x-1} \\ E_{N_x} \end{bmatrix} = -\frac{1}{2\Delta x} \begin{bmatrix} 0 & -1 & & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & 1 & 0 & 1 & \\ \vdots & & & \ddots & \\ & & & 1 & 0 & 1 \\ 1 & & & & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_{N_x-1} \\ \phi_{N_x} \end{bmatrix} \quad (11)$$

回到式 (2) 计算粒子处的场强，用更新完的电场继续推动粒子前进一个时间步长

$$p_i = p_i + \Delta t \times F_i \quad (12)$$

进行如上所述的循环，便完成了一个简单的一维粒子模拟程序（这里忽略了磁场、离子运动与碰撞效应）。**注意：式 (3) 只在一开始使用，目的是让动量和位置岔开 $\Delta t/2$ ，之后每次更新都是一整时间步长。**

用这个程序可以模拟等离子体中的一些效应，一个著名的效应是“双流不稳定性”，当两团等离子体相撞时，电子的相空间会形成空穴结构 [1]。请按照上述算法，写一个一维粒子模拟程序，并用其来模拟等离子体中的双流不稳定性。模拟可设置如下：

- 电子：一共设置 40000 个宏粒子，真实密度为 $n_0 = 10^{20} \text{m}^{-3}$ ，空间均匀分布（用均匀分布的随机数赋给每个宏粒子一个坐标），速度按 Maxwell 分布（用正态分布的随机数赋予动量），温度为 $T = 10^8 \text{K}$ 。

其中一半的电子有一个向左的漂移动量, 大小为 $3\sqrt{2mk_bT}$, 另一半电子拥有相同大小的向右的漂移动量。

- 模拟盒: 模拟盒长度为 $150\lambda_D$, 其中 $\lambda_D = \sqrt{\epsilon_0 k_b T / n_0 e^2} \approx 6.9 \times 10^{-5} \text{m}$. 分成 400 个网格。

画出电子在相空间 (横坐标为 x , 纵坐标为 p_x) 的分布随时间的演化。

参考文献

- [1] HL Berk, CE Nielsen, and KV Roberts. Phase space hydrodynamics of equivalent nonlinear systems: Experimental and computational observations. *The Physics of Fluids*, 13(4):980–995, 1970.